

Autokorrelationsfunktion und Spektrum
von Einelektronensystemen im Laserfeld

von
Ingmar Sturmann

Diplomarbeit in Physik

vorgelegt der
Fakultät für Mathematik, Informatik und Naturwissenschaften
der Rheinisch-Westfälischen Technischen Hochschule Aachen

im Februar 2004

angefertigt am
Institut für Theoretische Physik A
Lehr- und Forschungsgebiet Laserphysik
Prof. Dr. H.-J. Kull

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	3
1.1	Ziel dieser Arbeit	3
1.2	Vorgehensweise	4
1.2.1	Testsystem Kastenpotential	4
1.2.2	Soft-core Coloumb-Potential	4
2	Theorie	5
2.1	Schrödingergleichung in atomaren Einheiten	5
2.2	Geschwindigkeitseichung	5
2.3	Kramers-Henneberger	6
2.3.1	Translation	6
2.3.2	Energie-Reskalierung	7
2.3.3	Translation	7
2.4	Schrödingergleichung in Zylinderkoordinaten	7
3	Zeitabhängige Schrödingergleichung	9
3.1	Diskretisierung der Schrödingergleichung	9
3.2	Crank-Nicholson-Propagator	9
3.3	ADI (alternating-direction implicit method)	10
3.4	Randbedingungen	10
3.4.1	Räumlich beschränkte Wellenfunktion	11
3.4.1.1	Absorber	11
3.4.2	Explizite Randbedingung	11
3.4.2.1	Veränderung der Matrixwerte	11
3.4.2.2	Randbedingung in mehreren Dimensionen	12
3.4.3	Beispiel	12
4	Spektrum	15
4.1	Übliches Vorgehen	15

4.2	Autokorellationsfunktion	15
5	Fourier-Transformation über einen endlichen Zeitraum	17
5.1	Leckage-Effekte	17
5.1.1	Hann-Fenster	18
6	Implementierung	19
6.1	Initialisierung	19
6.2	Haupt-Iteration	19
6.2.1	Autokorrelation	19
6.3	Wiederholung	20
6.4	Spektrum	20
7	Potentialtopf	21
7.1	Parameter	21
7.2	Wellenfunktion	22
7.3	Spektrum bei Verwendung der Autokorrelationsfunktion	24
7.4	Auslöschungseffekte	25
7.5	In zwei Dimensionen	28
7.6	Zusammenfassung	30
8	Coloumb soft-core	31
8.1	Parameter	31
8.2	Feldfreier Fall	32
8.3	Mit einem zeit-abhängigen äußeren Feld	34
9	Zusammenfassung und Ausblick	41
9.1	Variation des Verfahrens	42
9.2	Fourier-Transformation der ortsabhängigen Wellenfunktion	42
9.3	Abhängigkeit von der Anfangsverteilung	43
9.4	Analytische Näherungsmethoden	44
	Literaturverzeichnis	47

Kapitel 1

Einleitung

Heutzutage können moderne Laser-Systeme sehr große Feldstärken erzeugen. Eines der Phänomene, welches bei großen Feldstärken auftritt und Gegenstand der aktuellen Forschung ist, sind Multi-Photonen-Prozesse.

Von besonderem Interesse ist dabei eine Untersuchung mit numerischen Methoden, da eine analytische Behandlung häufig nur näherungsweise möglich ist. Im folgenden sollen dazu einige Verfahrensmöglichkeiten zur Simulation dieser Systeme untersucht werden.

1.1 Ziel dieser Arbeit

Diese Arbeit befaßt sich primär mit der numerischen Berechnung von Spektren von Hamilton-Operatoren. Grundvoraussetzung dazu ist die numerische Simulation der Zeitentwicklung von Wellenfunktionen. Hierzu wird die Schrödingergleichung im Rahmen einer in zweiter Ordnung exakten Veränderung umgeschrieben. Diese Veränderung erlaubt es, die Zeitentwicklung mit Hilfe der Multiplikation von vier Operatoren, R^\pm und Z^\pm , die durch Tridiagonal-Matrizen repräsentiert werden, zu beschreiben (ADI-Algorithmus).

Aus der so berechneten Wellenfunktion soll sodann das Spektrum berechnet werden. Der häufigste Weg dabei ist, den Wert der Wellenfunktion an einem festen Ort \vec{x}_0 bezüglich der Zeit zu fouriertransformieren. Es wird demonstriert werden, daß diese Vorgehensweise zu Problemen führt.

Eine weitere Möglichkeit das Spektrum zu erhalten, ist über die Fourier-Transformation der Autokorrelationsfunktion $\langle \Psi(T) | \Psi(t) \rangle$. Diese Methode bringt theoretisch eine Reihe von Vorteilen mit sich.

Die beiden obigen Wege beruhen auf einer Fourier-Transformation in der Zeit. Ein dritter Weg besteht in der Fourier-Transformation im Orts-Raum. Dazu wird die Fourier-Transformierte $\Psi(\vec{k})$ der Wellenfunktion $\Psi(\vec{x})$, die sich am Ende des ADI-Algorithmus ergibt, berechnet.¹

¹Aus Zeitgründen ist dieser Weg im Rahmen der Arbeit nicht weiter verfolgt worden, allerdings findet sich im letzten Kapitel eine kurze Beschreibung.

1.2 Vorgehensweise

1.2.1 Testsystem Kastenpotential

Zur Einführung wird ein sehr simples Modell, das Kastenpotential, benutzt. Eigenfunktionen und Eigenwerte des Hamilton-Operators sind dabei wohlbekannt. Die Eigenfunktionen sind einfach ebene Wellen. Ihre Wellenvektoren müssen dabei die Nebenbedingung erfüllen, daß die halbe Wellenlänge ein Vielfaches der Kastenlänge sein muß.

Auf diese Weise ist es möglich, Anfangsbedingungen für die Simulation vorzugeben, die Eigenfunktionen des Systems entsprechen, und so exakt simuliert werden können. Durch Vergleich der simulierten Ergebnisse der Zeitentwicklung der Wellenfunktion und des später daraus berechneten Energie-Spektrums ist so eine erste Verifikation der benutzten Algorithmen möglich.

1.2.2 Soft-core Coloumb-Potential

In einem zweiten Schritt wird dann ein komplizierteres Modellsystem betrachtet, die Photoionisation starker Felder. Die Beschreibung erfolgt hier nicht-relativistisch im Rahmen der Dipol-Näherung.

Es wird dazu eine ein-dimensionale TDSE-Berechnung der Wechselwirkung in Ein-Elektronen-Atomen, hier am Beispiel des Wasserstoffs, durchgeführt. Das Potential wird dabei als Coulomb-soft-core betrachtet, d.h. die Berechnung, in Zylinderkoordinaten, erfolgt in z-Richtung (z ist die freie Variable) in einem festen Abstand $\varepsilon_\rho = 0.1$ in ρ -Richtung vom Potential.

Diese vereinfachte Vorgehensweise reicht bereits um Multi-Photonen-Effekte und die hierbei auftretende Plateau-Bildung zu zeigen.

Kapitel 2

Theorie

2.1 Schrödingergleichung in atomaren Einheiten

Ausgangspunkt ist die zeitabhängige Schrödingergleichung, welche auch als TDSE (Time Dependent Schrödinger Equation) bezeichnet wird. Im folgenden werden atomare Einheiten verwendet ($\hbar = e = m_e = 1$). Dies ist zweckmäßig, weil die einzelnen Terme auf diese Weise dimensionslos werden. Dazu macht man folgende Ersetzungen:

$$t \rightarrow \frac{\hbar^3}{mq^4}t, \quad \vec{x} \rightarrow \frac{\hbar^2}{mq^2}\vec{x}, \quad V \rightarrow \frac{mq^4}{\hbar^2}V \quad (2.1)$$

Die Schrödingergleichung sieht dann folgendermaßen aus:

$$i\partial_t\Psi = \left[-\frac{\Delta}{2} + V(\vec{r}, t) \right] \Psi \quad (2.2)$$

Bei vorhandenem äußerem Feld (mit Frequenz ω)¹, aber ansonst zeitunabhängigem Potential, ergibt sich dann folgendes:

$$i\partial_t\Psi_\omega = H_\omega \Psi_\omega \quad (2.3)$$

$$H_\omega = -\frac{\Delta}{2} + V(\vec{r}) + xF_\omega(t) \quad (2.4)$$

2.2 Geschwindigkeitseichung

Es ist nun zweckmäßig eine Abfolge von Umeichungen durchzuführen.

Der erste Schritt ist eine Umeichung der elektromagnetischen Potentiale. Ausgangspunkt oben ist:

$$\varphi = F_\omega x \quad (2.5)$$

$$A_x = 0 \quad (2.6)$$

¹Das Feld kann sich auch aus einer Summe von Anteilen zu verschiedenen Frequenzen zusammensetzen, an der folgenden Herleitung wird dies nichts ändern. Es soll nur ein zeitlich konstanter Anteil ausgeschlossen sein, dieser sei bereits im Potential V berücksichtigt.

Wir machen hier nun die Ersetzungen:

$$\varphi \rightarrow \varphi - \partial_t \Lambda \quad (2.7)$$

$$A_x \rightarrow A_x + \partial_x \Lambda \quad (2.8)$$

Dabei sei:

$$\Lambda := xG_\omega(t) \quad (2.9)$$

$$G_\omega(t) := \int_0^t d\tau F_\omega(\tau) \quad (2.10)$$

d.h.

$$\varphi = 0 \quad (2.11)$$

$$A_x = G_\omega(t) \quad (2.12)$$

$$(2.13)$$

Sei nun ferner

$$P_{G_\omega} := \exp(iG_\omega x) \quad (2.14)$$

der Impulsverschiebungsoperator, also

$$P_{G_\omega} p P_{G_\omega}^\dagger = p - G_\omega \quad (2.15)$$

so erhalten wir als neue Schrödingergleichung $i\partial_t \Psi_1 = H_1 \Psi_1$ mit:

$$H_1 = \frac{(p - G_\omega)^2}{2} + V \quad (2.16)$$

$$\Psi_1 = P_{G_\omega} \Psi_\omega \quad (2.17)$$

2.3 Kramers-Henneberger

Mithilfe der Geschwindigkeitseichung haben wir soeben den zeitabhängigen Anteil des Potentials wegtransformiert, nur noch der zeitunabhängige Anteil V ist übrig. Man erkaufte sich dies jedoch mit einer komplizierteren Verschiebung des Impulses. Es ist nun möglich, dies durch eine weitere Transformation zu ändern und zu einer einfacher handhabbaren Darstellung zu gelangen. Die Transformation ins Kramers-Henneberger-Bezugssystem erfolgt in 2 Schritten.

2.3.1 Translation

Sei

$$T_{K_\omega} := \exp(-iK_\omega p) \quad (2.18)$$

$$K_\omega := \int_0^t d\tau G_\omega(\tau) \quad (2.19)$$

der Translationsoperator, d.h. es gilt

$$T_{K_\omega} x T_{K_\omega}^\dagger = x - K_\omega \quad (2.20)$$

Dies führt zur neuen Schrödinger-Gleichung $i\partial_t \Psi_2 = H_2 \Psi_2$ mit:

$$H_2 = -\frac{\Delta}{2} + \frac{G_\omega^2}{2} + V(x - K_\omega) \quad (2.21)$$

$$\Psi_2 = T_{K_\omega} \Psi_1 \quad (2.22)$$

Dies ist jedoch nur ein Zwischenschritt.

2.3.2 Energie-Reskalierung

Um nun ins Kramers-Henneberger-System zu gelangen, fehlt jetzt nur noch eine Reskalierung der Energie:

$$\Psi_3 := \exp\left(i \int_0^t d\tau \frac{G_\omega^2(\tau)}{2}\right) \Psi_2 \quad (2.23)$$

$$H_3 := -\frac{\Delta}{2} + V(x - K_\omega) \quad (2.24)$$

$$\Rightarrow i\partial_t \Psi_3 = H_3 \Psi_3 \quad (2.25)$$

Wie man leicht sieht, hat diese Darstellung für die numerische Simulation nicht zuletzt den Vorteil, daß die großen Beträge von $x F_\omega$ (für große x) hier nicht auftreten.

2.3.3 Translation

Es ist jetzt hier hilfreich noch eine weitere Translation durchzuführen, damit das System möglichst symmetrisch ist. Betrachten wir nämlich den Fall $F_\omega(t) = F_\omega \cos(\omega t)$ so ergibt sich:

$$H_3 := -\frac{\Delta}{2} + V(x - \varepsilon [1 - \cos(\omega t)]) \quad (2.26)$$

$$(2.27)$$

mit $\varepsilon := \frac{F_\omega}{\omega^2}$. Wir erhalten also eine zeitabhängige Verschiebung zwischen 0 und -2ε . Um eine symmetrische Situation zu erreichen, machen wir noch eine Translation T_ε um ε und erhalten:

$$\Psi_{KH} := T_\varepsilon \Psi_3 \quad (2.28)$$

$$H_{KH} := -\frac{\Delta}{2} + V(x + \varepsilon \cos(\omega t)) \quad (2.29)$$

2.4 Schrödinger-Gleichung in Zylinderkoordinaten

In Zylinderkoordinaten und bei Separation der φ -Abhängigkeit durch:

$$\Psi(\rho, z, \varphi) = \Psi_m(\rho, z) e^{im\varphi} \quad (2.30)$$

gelangt man zu:

$$i\partial_t\Psi_m = (H_\rho + H_z)\Psi_m \quad \text{mit:} \quad (2.31)$$

$$H_\rho = \frac{1}{2} \left(V_{eff} - \frac{1}{\rho} \partial_\rho \rho \partial_\rho \right) \quad (2.32)$$

$$H_z = \frac{1}{2} (V_{eff} - \partial_z^2) \quad (2.33)$$

$$V_{eff} = V + \frac{m^2}{2\rho^2} \quad (2.34)$$

Im folgenden werden nur axialsymmetrische Lösungen ($m = 0$) betrachtet und Ψ_0 wird wieder als Ψ bezeichnet. Für $\rho = 0$ ist nun noch eine Randbedingung zu erfüllen:

$$\rho \partial_\rho \Psi|_{\rho=0} = 0 \quad (2.35)$$

$$(2.36)$$

Kapitel 3

Zeitabhängige Schrödingergleichung

3.1 Diskretisierung der Schrödingergleichung

Legt man den Rand $\rho = 0$ in die Mitte zwischen zwei Gitterpunkte, so ist die Randbedingung Gl. 2.35 automatisch erfüllt. Die Wellenfunktion $\Psi_{kj} = \Psi(\rho_k, z_j)$ wird dann an den folgenden Gitterpunkten berechnet:

$$\rho_k = \left(k - \frac{1}{2}\right)\Delta\rho, \quad k = 1 \dots K \quad (3.1)$$

$$z_j = \left(j - \frac{J+1}{2}\right)\Delta z, \quad j = 1 \dots J \quad (3.2)$$

Für J wird i.A. ein gerader Wert gewählt, insbesondere um bei einem $\frac{1}{r}$ -Potential möglichst weit weg von der Singularität im Ursprung zu bleiben (der große Wert des Potentials dort würde sonst zu Problemen bei der numerischen Simulation führen).

Für die Ableitungen im Hamilton-Operator ergeben sich dann die folgenden Diskretisierungen:

$$\frac{1}{\rho}\partial_\rho\rho\partial_\rho\Psi|_k \rightarrow \frac{1}{\rho_k}\frac{1}{\Delta\rho^2}\left[\rho_{k+\frac{1}{2}}\Psi_{k+1} + \rho_{k-\frac{1}{2}}\Psi_{k-1} - 2\rho_k\Psi_k\right] \quad (3.3)$$

$$= \frac{1}{\Delta\rho^2}\left[\frac{k}{k-\frac{1}{2}}\Psi_{k+1} + \frac{k-1}{k-\frac{1}{2}}\Psi_{k-1} - 2\Psi_k\right] \quad (3.4)$$

$$\partial_z^2\Psi|_j \rightarrow \frac{1}{\Delta z^2}\left[\Psi_{j+1} + \Psi_{j-1} - 2\Psi_j\right] \quad (3.5)$$

3.2 Crank-Nicholson-Propagator

Um die Zeitentwicklung der Wellenfunktion zu berechnen geht man folgendermaßen vor:

$$i\partial_t\Psi = H\Psi \quad (3.6)$$

$$\Leftrightarrow \frac{i}{\Delta t}(\Psi^{n+1} - \Psi^n) = \frac{H^{n+1}\Psi^{n+1} + H^n\Psi^n}{2} \quad (3.7)$$

$$\Leftrightarrow \left(1 + \frac{i\Delta t H^{n+1}}{2}\right)\Psi^{n+1} = \left(1 - \frac{i\Delta t H^n}{2}\right)\Psi^n \quad (3.8)$$

Die verwendete implizite Methode ist unitär, von 2. Ordnung in Raum und Zeit und numerisch stabil (siehe [6] und [7]). Dabei bezeichnen Ψ^n und H^n den Wert von Wellenfunktion und Hamilton-Operator zum Zeitpunkt

$$t_n = n\Delta t, \quad n = 1 \dots N \quad (3.9)$$

3.3 ADI (alternating-direction implicit method)

Für mehrdimensionale Probleme kann das Crank-Nicholson-Verfahren mit Hilfe des ADI-Verfahrens vereinfacht werden. Dazu macht man die folgende Modifikation:

$$H = H_\rho + H_z \quad (3.10)$$

$$\left(1 + \frac{i\Delta t}{2} H_\rho^{n+1}\right) \left(1 + \frac{i\Delta t}{2} H_z^{n+1}\right) \Psi^{n+1} = \left(1 - \frac{i\Delta t}{2} H_\rho^n\right) \left(1 - \frac{i\Delta t}{2} H_z^n\right) \Psi^n \quad (3.11)$$

Dabei macht man einen Fehler F für den gilt:

$$F = -\frac{\Delta t^2}{4} (H_\rho^{n+1} H_z^{n+1} \Psi^{n+1} - H_\rho^n H_z^n \Psi^n) \quad (3.12)$$

$$= -\frac{\Delta t^3}{4} \mathfrak{D} (\partial_t H_\rho H_z \Psi)|_{t=t_{n+\frac{1}{2}}} \quad (3.13)$$

$\mathfrak{D}()$ bezeichnet dabei die Diskretisierung des Ausdrucks in Klammern. Der Fehler ist also von 3. Ordnung in Δt . Das ganze Verfahren bleibt damit von 2. Ordnung.

Da die Ableitungs-Operatoren der einzelnen Hamilton-Operatoren in Gl. 3.11 in der Form Gl. 3.5 und Gl. 3.4 offensichtlich tridiagonal sind, handelt es sich bei den einzelnen Termen $\left(1 + \frac{i\Delta t}{2} H_{\rho/z}^{n/n+1}\right)$ um Tridiagonalmatrizen.

Dies führt zu einer günstigeren Skalierung von Gl. 3.11 gegenüber Gl. 3.8. Die Rechenzeit für Gl. 3.11 wächst nämlich *nur* wie $J \cdot K$ (auf einem Gitter der Form von Gl. 3.2 und Gl. 3.1). Für die rechte Seite ist dies offensichtlich. Auf der linken Seite ist es nun bei Anwendung des Gauß-Algorithmus möglich, zuerst eine Nebendiagonale zu Null zu ersetzen und durch Rückwärtseinsetzen direkt den Lösungsvektor zu bestimmen (es ist also unnötig eine deutlich langsamere Matrix-Inversion durchzuführen). Dabei ist es zudem unnötig die ganze Matrix zu speichern, es reichen 3 Vektoren der Ordnung J (bzw. K), um die Werte der 3 Diagonalen zu speichern. Gl. 3.11 ist also auch sehr speicherplatzeffizient. Im folgenden werden die Vektoren der 3 nichtverschwindenden Diagonalen mit $a[]$ (untere Nebendiagonale, $b[]$ (Hauptdiagonale) und $c[]$ (obere Nebendiagonale) bezeichnet.

3.4 Randbedingungen

Um nun die Zeitentwicklung der Wellenfunktion berechnen zu können, ist die Behandlung der Ränder von großer Wichtigkeit. Egal mit wievielen Gitterpunkten in welcher Feinheit man auch rechnet, das Gitter ist letztlich immer endlich. Es gibt hier nun mehrere Möglichkeiten.

3.4.1 Räumlich beschränkte Wellenfunktion

In manchen Fällen kann es, je nach Problemstellung, möglich sein, das Gitter groß genug zu wählen, so daß die Wellenfunktion an den Rändern identisch Null ist (oder zumindest sehr stark gegen Null fällt). Hier ist die explizite Randbedingung $\Psi = 0$ anwendbar. Um Reflexionen von auslaufenden Wellenpaketen zu verhindern, kann man zusätzlich noch einen Absorber einführen:

3.4.1.1 Absorber

In Gl. 2.34 wird dazu folgende Ersetzung durchgeführt:

$$V_{eff} \rightarrow V_{eff} - iW \quad (3.14)$$

$$W = s\Theta(s) \quad (3.15)$$

$$s = a \left(\sqrt{z^2 + \rho^2} - b \right), \quad a, b > 0 \quad (3.16)$$

$$(3.17)$$

Dabei bezeichnet Θ die Sprungfunktion. Der imaginäre Potentialterm $-iW$ wirkt dabei, außerhalb einer Kugel mit Radius b , wie ein Absorber für auslaufende Wellenpakete. Dabei müssen der Parameter a und die zur Verfügung stehende *Laufstrecke* nach Erreichen des Radius b so angepaßt werden, daß die Reflexionen am Rand möglichst gering bleiben.

3.4.2 Explizite Randbedingung

Eine günstigere Situation kann sich ergeben, wenn man die Randbedingungen explizit kennt. Der Nachteil absorbierender Ränder (Gl. 3.4.1.1) ist die entsprechende Vergrößerung des Gitter, die vonnöten ist, damit die auslaufende Welle stark genug gedämpft wird. Dadurch verlängert sich die Rechenzeit entsprechend. Von Vorteil ist es daher, wenn man die Ränder *transparent* gestalten kann.

In den Tridiagonalmatrizen *fehlt* ja in der ersten (analog in der letzten) Zeile ein Wert, es wird aus den Werten Ψ_1^n und Ψ_2^n der Wert von Ψ_1^{n+1} berechnet. In einem gedachtem, größerem Gitter (und auch in der physikalischen Realität) spielt aber der Wert Ψ_0^n ebenfalls eine Rolle. Dieser Fehler läßt sich nun beheben, wenn man eine Bestimmungsgleichung kennt um Ψ_0^n aus den Werten der Wellenfunktion an den Gitterpunkten zu errechnen. Hierbei sind 2 Fälle zu unterscheiden.

3.4.2.1 Veränderung der Matrixwerte

Ist eine geeignete Bestimmungsgleichung bekannt, so kann man die Werte von $b[1]$ und $c[1]$, bzw $b[J]$ und $a[J]$, entsprechend anpassen, so daß die Randbedingung automatisch erfüllt ist.

Ein kurzes Beispiel, man betrachte eine einfallende Welle der Form:

$$\Psi = \exp(ikz - i\omega t) \quad (3.18)$$

$$\Rightarrow \Psi(z - \Delta z) = \exp(-ik\Delta z) \Psi(z) \quad (3.19)$$

$$\Leftrightarrow \Psi_0 = \exp(-ik\Delta z) \Psi_1 \quad (3.20)$$

$$\Rightarrow \Psi_0 = C\Psi_1, \quad C := \exp(-ik\Delta z) \quad (3.21)$$

in diesem Fall wird dann der Wert von $b[1]$ ersetzt durch $b[1] + Ca[0]$. Analoges gilt für die rechte Seite ($b[J] \rightarrow b[J] + \frac{1}{C}c[J+1]$).

3.4.2.2 Randbedingung in mehreren Dimensionen

Es ist von Vorteil Formel Gl. 3.11 in folgende äquivalente Darstellung zu transformieren ([8]):

$$Z^+ \Psi^{n+1} = R^- \Psi^* \quad (3.22)$$

$$R^+ \Psi^* = Z^- \Psi^- \quad (3.23)$$

Dabei ist

$$Z^\pm := \left(1 \pm \frac{i\Delta t}{2} H_z^{n+\frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}} \right) \quad (3.24)$$

$$R^\pm := \left(1 \pm \frac{i\Delta t}{2} H_\rho^{n+\frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}} \right) \quad (3.25)$$

Aus $[R^+, R^-] = 0^1$ folgt nun:

$$R^+ Z^+ \Psi^{n+1} = R^+ R^- \Psi^* = R^- R^+ \Psi^* = R^- Z^- \Psi^n \quad (3.26)$$

Um nun die Randbedingung für diesen Zwischenschritt bestimmen zu können, benötigt man die folgende Identität:

$$\Psi^* = \frac{1}{2} (R^+ + R^-) \Psi^* = \frac{1}{2} (Z^- \Psi^n + Z^+ \Psi^{n+1}) \quad (3.27)$$

Wenn nun eine (nicht zeitabhängige) Randbedingung für $\Psi^{n/n+1}$ bekannt ist (z.B. wie in Gl. 3.21), kennt man damit dann auch die richtige Randbedingung für Ψ^* .

3.4.3 Beispiel

Der folgende eindimensionale Fall demonstriert, was passiert, wenn die Ränder nicht richtig behandelt werden. Hierbei sei

$$V = -\frac{1}{\sqrt{z^2 + \epsilon^2}}, \quad \epsilon = 0.1 \quad (3.28)$$

auf einem Gitter mit 40000 Punkten ($\Delta z = 0.1$), simuliert über die Gesamtzeit $T = 500$ in 255 Zeitschritten². Der Anfangswert ist $\Psi = 1$. Es sollte also alles bei einer symmetrischen Verteilung bleiben.

Die Abbildungen 3.1 und 3.2 zeigen nun zwei verschiedene Simulationen. Für die linke Seite ist die Randbedingung jeweils entsprechend Gl. 3.21 berücksichtigt worden, für die rechte Seite wurde dies im zweiten Fall, Abbildung 3.2 *vergessen*. Man sieht deutlich die Reflexionen, die sich aus der mangelhaften Behandlung der Ränder ergeben können.

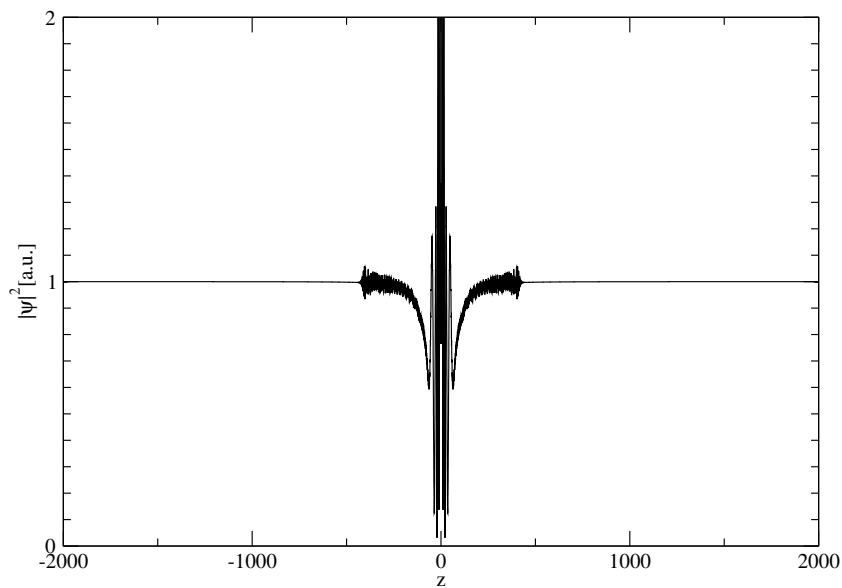


Abbildung 3.1: Verteilung mit richtiger Berücksichtigung der Randbedingung

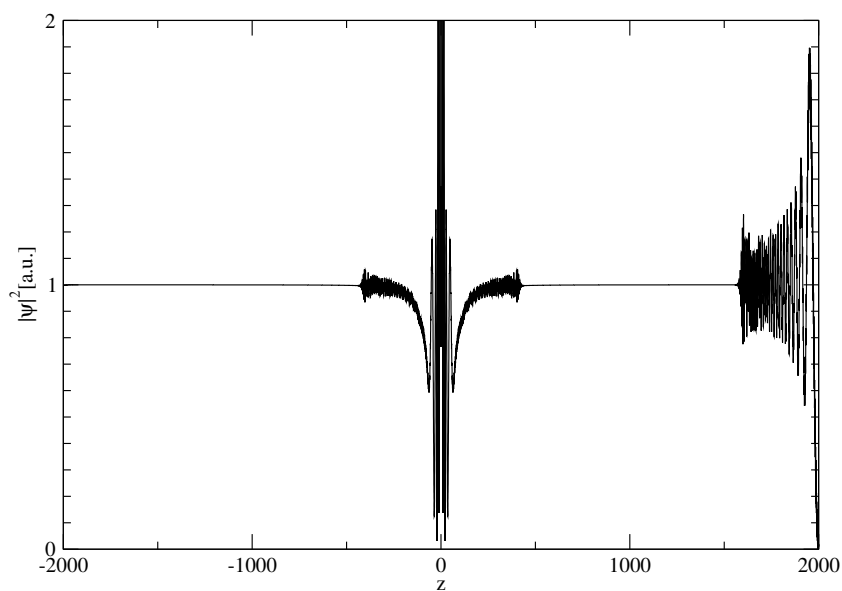


Abbildung 3.2: Verteilung ohne richtige Berücksichtigung der Randbedingung

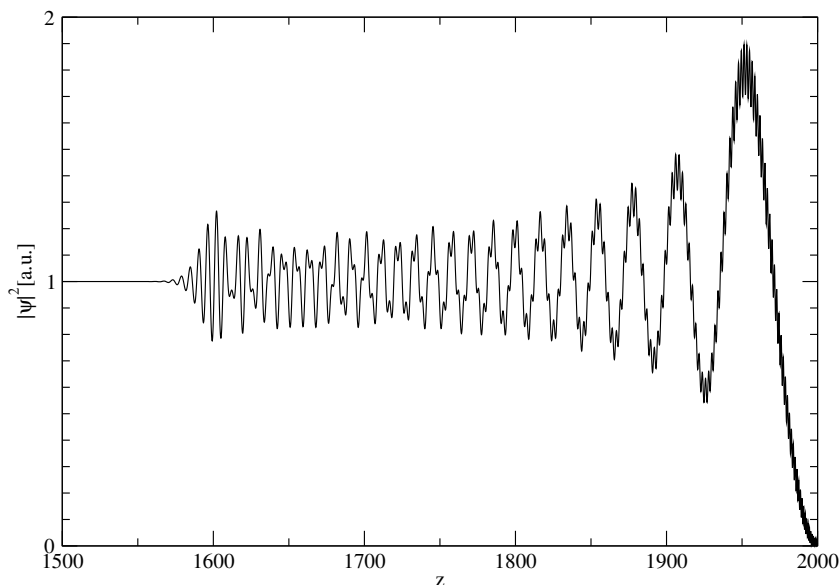


Abbildung 3.3: Verteilung ohne richtige Berücksichtigung der Randbedingung, vergrößert

Abbildung 3.3 zeigt eine Ausschnittsvergrößerung.

Desweiteren sollte man sich vor Augen führen, daß es im Allgemeinen mehrere Möglichkeiten gibt, eine Randbedingung zu berücksichtigen, die nicht immer gleich gut sind. Wenn wir das Beispiel aus 3.4.2.1 betrachten, so hätte man auch folgendermaßen vorgehen können:

$$\Psi = \exp(ikz - i\omega t) \quad (3.29)$$

$$\Rightarrow \partial_z \Psi = ik\Psi \quad (3.30)$$

$$\hookrightarrow \frac{\Psi_1 - \Psi_0}{\Delta z} = ik \frac{\Psi_1 + \Psi_0}{2} \quad (3.31)$$

$$\Rightarrow \Psi_0 = C\Psi_1, \quad C := \frac{1 - \frac{ik\Delta z}{2}}{1 + \frac{ik\Delta z}{2}} \quad (3.32)$$

Wie man leicht sieht, ist diese Lösung aber der vorherigen unterlegen.³

¹Da in unserem Fall die R^\pm zeitunabhängig sein werden, ansonsten wäre in Gl. 3.25 das $\pm \frac{1}{2}$ im Exponenten zu streichen, damit diese Vertauschungsregel gültig bleibt. Man wertet dann die Operatoren jeweils zwischen 2 Zeitschritten aus.

²Das entspricht einem sehr großem Wert für Δt , allerdings geht es hier nur darum den Effekt an den Rändern zu demonstrieren. Für sinnvolle Berechnungen müßte der Wert deutlich kleiner sein

³Sie stimmen nur bis auf die 2.Ordnung in $k\Delta z$ überein.

Kapitel 4

Spektrum

Um aus der Wellenfunktion das Energie-Spektrum zu erhalten, macht man gewöhnlich eine Fourier-Transformation für den Wert der Wellenfunktion an einem dafür ausgewähltem Ort.

Die Lösung von Gleichung 2.2 läßt sich für den Fall, daß der Hamilton-Operator zeitunabhängig ist, folgendermaßen ausdrücken:

$$\Psi(\vec{x}, t) = \sum_{j,k} a_{j,k} u_{j,k}(\vec{x}) e^{-iE_j t} \quad (4.1)$$

Dabei sind die $u_{j,k}(\vec{x})$ Lösungen der zeitunabhängigen Schrödingergleichung zur Energie E_j , der Index k berücksichtigt eine eventuelle Entartung.

4.1 Übliches Vorgehen

Macht man nun an einem einzelnen Ort \vec{x}_s eine Fourier-Transformation, so erhält man:

$$\mathcal{P}_1(E) = \sum_{j,k} a_{j,k} u_{j,k}(\vec{x}_s) \delta(E - E_j) \quad (4.2)$$

4.2 Autokorellationsfunktion

Eine weitere Möglichkeit ergibt sich über die Berechnung der Autokorrelationsfunktion $\langle \Psi(0) | \Psi(t) \rangle$:

$$\langle \Psi(0) | \Psi(t) \rangle = \int d\vec{x} \Psi^*(\vec{x}, 0) \Psi(\vec{x}, t) \quad (4.3)$$

$$= \sum_{jklm} a_{l,m}^* a_{j,k} e^{-iE_j t} \int d\vec{x} u_{l,m}^*(\vec{x}) u_{j,k}(\vec{x}) \quad (4.4)$$

$$= \sum_{jk} |a_{j,k}|^2 e^{-iE_j t} \quad (4.5)$$

Die Fouriertransformation ergibt hier:

$$\mathcal{P}_{auto}(E) = \sum_{jk} |a_{j,k}|^2 \delta(E - E_j) \quad (4.6)$$

Kapitel 5

Fourier-Transformation über einen endlichen Zeitraum

Die obigen Berechnungen sind erstmal nur theoretisch exakt für $T = \infty$, in der Realität stellt sich ein Problem. Bei numerischen Simulationen erhält man nur die Zeitentwicklung der Wellenfunktion $\Psi(\vec{x}, t)$ über einen endlichen Zeitraum der Länge T . Abgesehen von der Tatsache, daß sich nur im Limes für sehr große T eine δ -Funktion-artige Verteilung einstellen wird, erhält man als Ergebnis der Fourier-Transformation die Faltung der Fourier-Transformierten der Autokorrelationsfunktion (Wellenfunktion) und einer Fenster-Funktion. In diesem Falle einer Rechteckfunktion.

5.1 Leckage-Effekte

Anstatt die Fourier-Transformierte von $f(t)$ zu berechnen, berechnen wir die Fourier-Transformierte von:

$$f'(t) = f(t) w(t) \quad (5.1)$$

Dabei gilt zuerst einmal

$$w(t) = \begin{cases} 1 & \text{für } \begin{cases} 0 < t < T \\ \text{sonst} \end{cases} \\ 0 & \end{cases} \quad (5.2)$$

wenn wir die Wellenfunktion über einen Zeitraum T simulieren ($f(t)$ ist dabei entweder die Wellenfunktion $\Psi(t)$ oder die Autokorrelationsfunktion $\langle \Psi(0) | \Psi(t) \rangle$).

Für die Fourier-Transformierte F' von f' gilt dann:

$$F' = F * W \quad (5.3)$$

dabei sind F und W die Fourier-Transformierten von f und w , $*$ bezeichnet die Faltung der beiden Funktionen:

$$F * W(E) := \int_{-\infty}^{\infty} dE' F(E') W(E - E') \quad (5.4)$$

Für W gilt nun:

$$W \sim \frac{1}{E} \sin\left(\frac{E T}{2}\right) \quad \text{für } E \neq 0 \quad (5.5)$$

Und hier läßt sich sofort das Problem erkennen, W fällt verhältnismäßig langsam ab. Nahe beieinanderliegende Peaks verschmieren und sind dann nicht mehr unterscheidbar. Dies passiert wenn $f(t)$ nicht periodisch in T ist.

Einzig für Energien/Frequenzen die ein Vielfaches von $\frac{\pi}{T}$ sind, tritt dieser Leakage-Effekt nicht auf. Diese Frequenzen sind dabei genau die ω_k , die sich bei diskreter Fourier-Transformation ergeben. Es sei noch einmal betont, daß dies kein Effekt der Diskretisierung ist, sondern am endlichen Zeitfenster T liegt (siehe [13]).

5.1.1 Hann-Fenster

Es gibt jedoch eine Möglichkeit für eine bessere Frequenz-Auflösung zu sorgen. Dazu wird die Funktion $w(t)$, die oben noch eine einfache Rechteck-Funktion war, variiert. Das Problem ist, daß diese Rechteckfunktion zu schnell ansteigt/abfällt.

Welche spezielle Form man dabei wählt, ist zuerst einmal nebensächlich. Der wesentliche Punkt ist, daß die Funktion eine wesentlich längere Ansteig-/Fallzeit haben muß. Im Rahmen dieser Arbeit wurde der folgende Verlauf gewählt:

$$w_{Hann}(t) = \begin{cases} 1 - \cos\left(\frac{2\pi t}{T}\right) & \text{für } \begin{cases} 0 < t < T \\ \text{sonst} \end{cases} \end{cases} \quad (5.6)$$

Damit wird der Leakage-Effekt auf ca. 2 Bins bei der diskreten Fourier-Transformation beschränkt bleiben (siehe [10]).

Kapitel 6

Implementierung

Im folgenden wird kurz der Ablauf der Simulation geschildert. In Fällen, wo nur eine eindimensionale Berechnung stattfindet, sind alle Bezüge auf R^+ bzw. R^- zu streichen.

6.1 Initialisierung

Initialisierung der Operatoren¹ R_1^+, R_0^-, Z_1^+ und Z_0^- .
Vorgabe der Anfangsverteilung Ψ_0 .

6.2 Haupt-Iteration

Der folgende Ablauf wird insgesamt N-mal durchgeführt:

Berechnung von $\phi_1 := Z_n^- \Psi_n$.

Löse $\phi_1 = R_{n+1}^+ \Psi^*$.²

Berechne $\phi_2 := R_n^- \Psi^*$.

Löse $\phi_2 = Z_{n+1}^+ \Psi^{n+1}$.

Aktualisieren der Matrizen R^\pm und Z^\pm .

6.2.1 Autokorrelation

Es wird $\langle \Psi(T) | \Psi(t) \rangle$ berechnet und gespeichert.

Dazu muß natürlich Ψ_N bereits vorliegen, ist dies noch nicht der Fall, so entfällt dieser Teilschritt.

¹Bezüglich der unterschiedlichen Zeitindices siehe Gl. 3.24 und Gl. 3.25.

²Das Ψ^* ist dasselbe wie in 3.4.2.2.

6.3 Wiederholung

Nachdem 6.2 einmal durchlaufen wurde, ist Ψ_N bekannt. Diese Verteilung wird gespeichert. Ψ und die Operatoren R^\pm und Z^\pm werden mit den ursprünglichen Werten (Zeitpunkt $t = 0$) reinitialisiert. Sodann wird Abschnitt 6.2, diesmal inklusive 6.2.1, ein weiteres Mal durchlaufen. Dies ist notwendig, da es zuviel Speicherplatz erfordern würde, alle Zwischenschritte Ψ_n bereits im ersten Durchlauf abzuspeichern.

6.4 Spektrum

Da nun die Zeitentwicklung von $\langle \Psi(T) | \Psi(t) \rangle$ vorliegt, kann jetzt das Spektrum berechnet werden. Dazu wird $\langle \Psi(T) | \Psi(t) \rangle$ Fourier-transformiert (siehe 4.2). Es wurde, sofern nicht anders angegeben, jeweils ein Hann-Fenster benutzt (siehe 5.1.1).

Es zeigte sich, daß die Verwendung von $\Psi(T)$ anstatt von $\Psi(0)$ zur Berechnung des Spektrums günstiger war. Es ist dann wesentlich genauer. Man erkaufte sich dieses zwar mit einer Verdoppelung der benötigten Rechenzeit, aber würde man dies nicht tun, müßte man die Zeit T , über die die Berechnung läuft, erhöhen, um auf dieselbe Genauigkeit zu kommen.

Dabei kann es sogar, je nach zu untersuchender Problemstellung, vorkommen, daß man auch die Größe des Gitters erhöhen muß. Dies hängt davon ab, wie gut die Behandlung der Ränder ist. Hat man eine numerisch eher schlechte Randbedingung, kommt es dort zu Reflexionen, wenn ein auslaufendes Wellenpaket auf den Rand trifft.

Kapitel 7

Potentialtopf

Um nun unsere Vorgehensweise einem ersten Test zu unterziehen, untersuchen wir zuerst ein einfaches, eindimensionales Kastenpotential. D.h. es gilt:

$$V(z) = \begin{cases} 0 & \text{für } -\frac{L}{2} < z < \frac{L}{2} \\ \infty & \text{sonst} \end{cases} \quad (7.1)$$

Der Hamilton-Operator ist also:

$$H = -\frac{\partial_z^2}{2} + V(z) \quad (7.2)$$

Wir werden zum Einen zeigen, daß das mit Hilfe der Autokorrelationsfunktion errechnete Energie-Spektrum in sehr guter Übereinstimmung mit der Theorie ist. Zum anderen wird ein Vergleich mit dem Energie-Spektrum, welches wir durch Fourier-Transformation der Wellenfunktion an einem festen Gitterpunkt erhalten, zeigen, daß es letzterem deutlich überlegen ist.

In letzterem Fall werden wir demonstrieren, daß es möglich ist, einzelne Peaks im Spektrum verschwinden zu lassen und außerdem die Höhen der Peaks nicht die Genauigkeit haben, wie wir sie mit Hilfe der Autokorrelationsfunktion erreichen können.

7.1 Parameter

Wir betrachten ein Gitter der Länge L_2 . Für den Abstand Δz der Gitterpunkte und ihre Anzahl J gelte:

$$J = 40000 \quad (7.3)$$

$$\Delta z = 0.1 \quad (7.4)$$

$$\Rightarrow L_2 = 3999.9 \quad (7.5)$$

Zum Wert für L_2 ist zu sagen, daß die Wellenfunktion auf allen J Gitterpunkten einen Wert ungleich 0 annehmen können soll. Außerhalb des Potentialtopfes ist die Wellenfunktion 0. Deshalb

gilt für die Länge des Potentialtopfes (nicht des Gitters):

$$L = 4000.1 \quad (7.6)$$

Die Simulation laufe mit N Zeitschritten über einen Zeitraum T mit:

$$N = 1023 \quad (7.7)$$

$$T = 10^7 \quad (7.8)$$

$$\Rightarrow \Delta t = 9.78 \cdot 10^3 \quad (7.9)$$

Als Anfangsverteilung wurde gewählt:

$$\Psi(z) = \cos\left(\frac{3z\pi}{2L}\right) + \cos\left(\frac{7z\pi}{2L}\right) + \cos\left(\frac{11z\pi}{2L}\right) + \cos\left(\frac{15z\pi}{2L}\right) \quad (7.10)$$

7.2 Wellenfunktion

Abbildung 7.1 zeigt die Aufenthaltswahrscheinlichkeit für den Zeitpunkt $t = 0$.

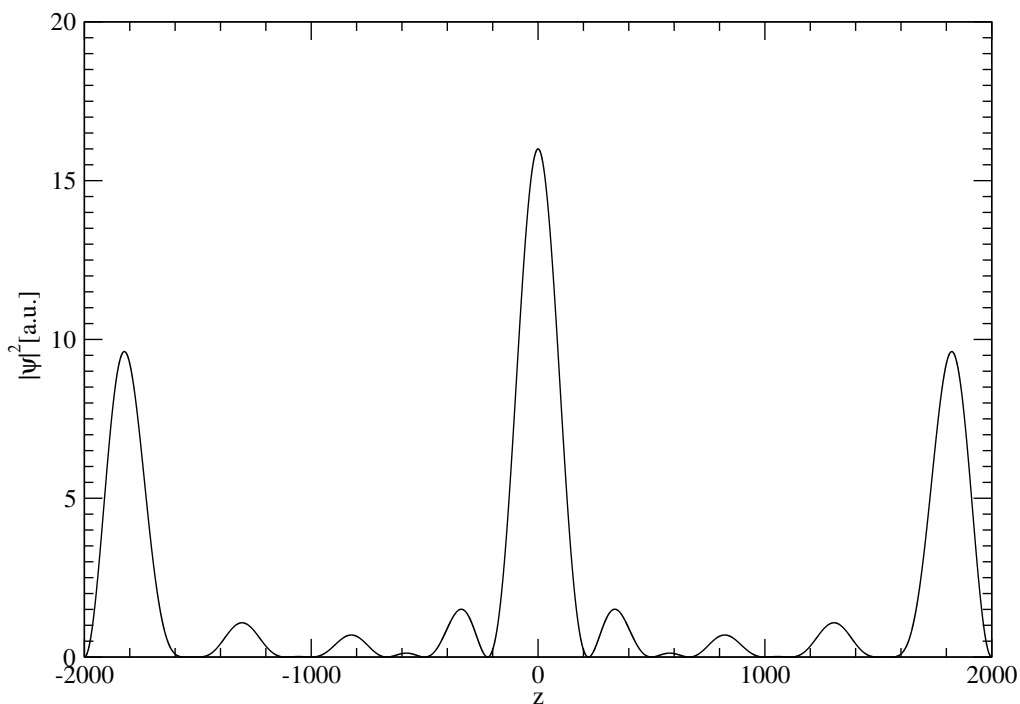


Abbildung 7.1: Ausgangsverteilung

Zum Vergleich hierzu zeigt Abbildung 7.2 die Aufenthaltswahrscheinlichkeit zum Zeitpunkt $t = T$. Man sieht, daß wir keine unerwünschten Effekte an den Rändern erhalten, die Aufenthaltswahrscheinlichkeit geht, so wie sie das auch tun soll, gegen 0.

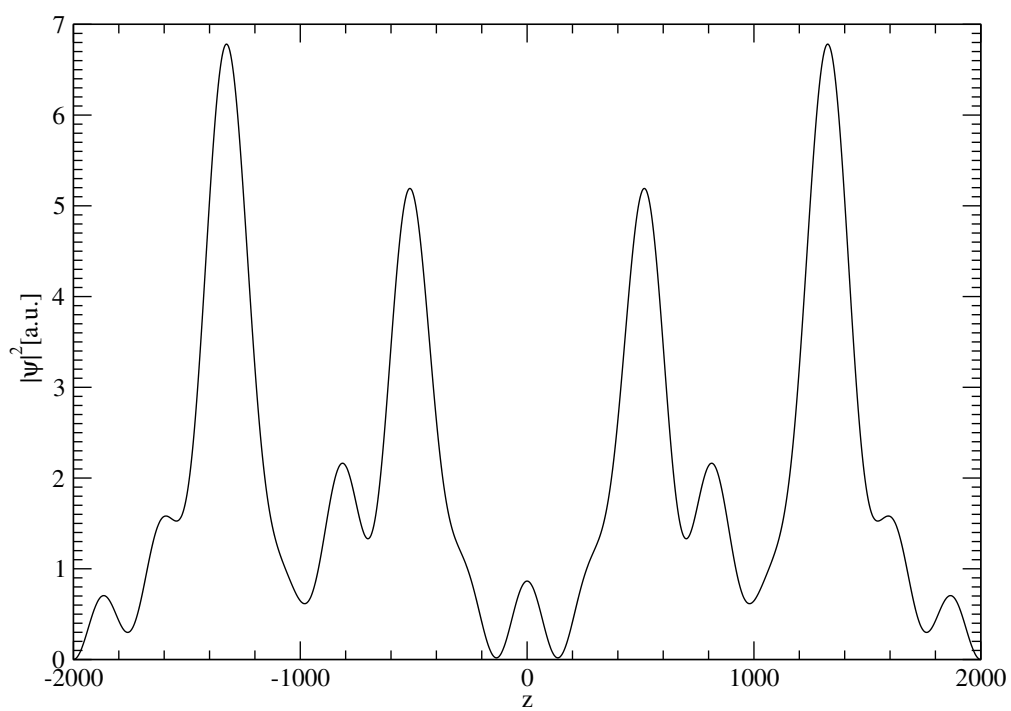


Abbildung 7.2: Aufenthaltswahrscheinlichkeit am Ende der Simulation

7.3 Spektrum bei Verwendung der Autokorrelationsfunktion

Abbildung 7.3 zeigt das Spektrum welches wir durch die Fourier-Transformation der Autokorrelationsfunktion erhalten. Alle Peaks haben eine sehr geringe Halbwertsbreite. Die ersten drei Peaks sind genau an den Stellen, wo sie nach der Theorie sein sollten.

Der letzte Peak sollte bei $6.94 \cdot 10^{-5}$ auftreten, ist aber etwas zu einer zu geringen Energie verschoben. Dieser Effekt war allgemein zu beobachten, Abbildung 7.3 gibt nur einen Ausschnitt des berechneten Energie-Spektrums wieder. Dieser Effekt trat immer auf, sobald ein Peak in die Nähe von einem Viertel der durch die FFT darstellbaren Maximalenergie kam.

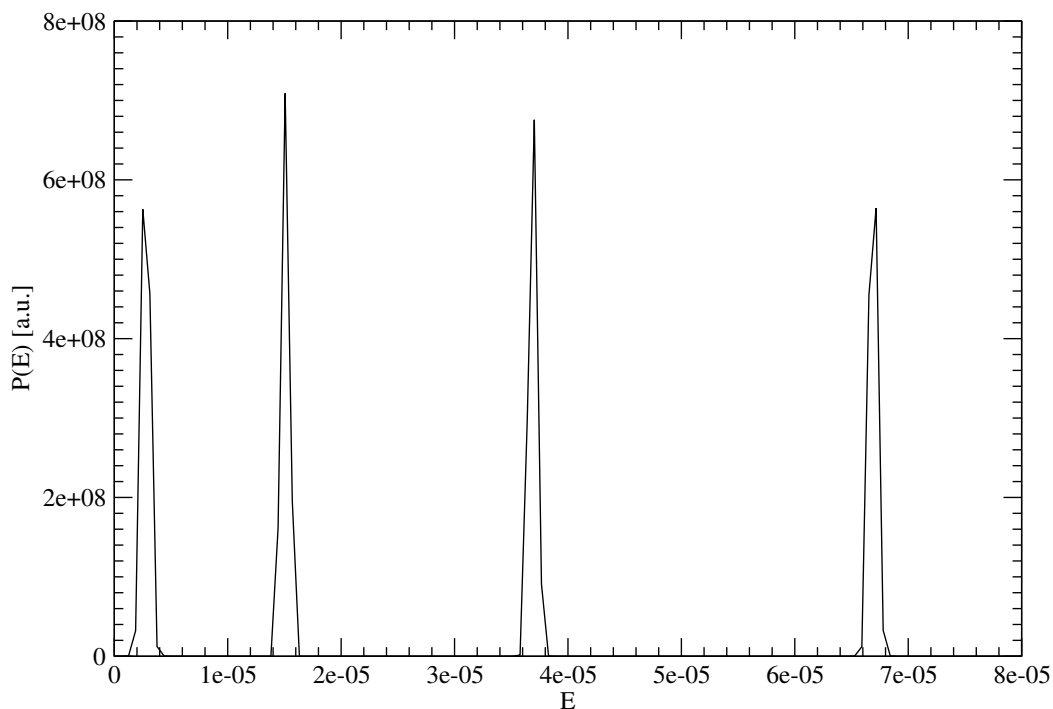


Abbildung 7.3: Energie-Spektrum

Es gibt dafür jedoch eine verhältnismäßig einfache Erklärung. Für die Maximalenergie E_{max} bei der diskreten Fourier-Transformation gilt:

$$E_{max} = 2\pi f_{max} \quad (7.11)$$

$$f_{max} := \frac{N}{2T} = \frac{1}{2\Delta t} \quad (7.12)$$

Die Eigenfunktionen des Kastenpotentials sind stehende Wellen mit Wellenvektoren

$$k_n = n \frac{\pi}{L} \quad (7.13)$$

$$(7.14)$$

ihre Energie ist

$$E_n = \frac{k_n^2}{2} = \frac{n^2 \pi^2}{2L^2} \quad (7.15)$$

$$\Rightarrow f_n = \frac{\pi n^2}{4L^2}. \quad (7.16)$$

Die Bedingung¹ $E_n \leq \frac{1}{4} E_{max}$ heißt nun nichts anderes, als daß gelten muß:

$$\frac{1}{4} \frac{1}{2\Delta t} \geq \frac{\pi n^2}{4L^2} = \frac{\pi n^2}{4J^2 \Delta z^2} \quad (7.17)$$

$$\Rightarrow \frac{\Delta z^2}{\Delta t} \geq \frac{2n^2 \pi}{J^2} \quad (7.18)$$

$$\Rightarrow \frac{\Delta t}{\Delta z^2} \leq \frac{J^2}{2n^2 \pi} \quad (7.19)$$

Wenn wir nun einen Blick auf Gl. 3.5 und Gl. 3.11 werfen, so erkennen wir, daß der Faktor $\frac{\Delta t}{\Delta z^2}$ eine wesentliche Rolle spielt. Wird dieser Faktor zu groß, so sinkt offensichtlich die Genauigkeit, mit der die Wellenfunktion berechnet, bzw. dann die Energie bestimmt werden kann.

Der vierte Peak in Abbildung 7.3 ist bei etwa 22% der Maximalenergie. Er hat daher noch eine relativ kleine Verschiebung. Für größere Frequenzen wird der Effekt stärker. Dabei ist zu bemerken, daß es trotzdem immer noch bei einzelnen Peaks bleibt. Diese werden auch nicht verschmiert.

Der Effekt ist auch unabhängig davon, ob man als Anfangswert nur eine einzelne Eigenfunktion vorgibt. Vier einzelne Berechnungen zu den vier Anteilen in Gl. 7.10 ergeben, wenn man die Spektren in einer Abbildung darstellt, dasselbe Bild wie Abbildung 7.3 (auf diese weitere Abbildung wurde daher verzichtet, sie sind ununterscheidbar).

Aus Gl. 7.19 läßt sich also schließen, daß wir bei allen Berechnungen jeweils zum Schluß noch einmal untersuchen sollten, ob nicht genau so eine Frequenzverschiebung aufgetreten ist (dazu muß die Rechnung mit einem kleineren Wert für Δt wiederholt werden). Das Spektrum kann trotzdem vom qualitativen Verlauf in hervorragender Übereinstimmung mit der Theorie sein.

Es ist ferner so, daß Gl. 7.19 übereinstimmt mit der Tatsache, daß $\frac{i\Delta t}{2} H_z \Psi$ (siehe Gl. 3.11) klein ist. Im Allgemeinen läßt sich jedoch nicht immer eine Abschätzung für diesen Term angeben, jedoch wenn man obige Überlegungen quasi rückwärts anstellt, so erkennt man, daß zumindest etwa das erste Viertel des errechneten Spektrums relativ unbeeinflusst ist.

7.4 Auslöschungseffekte

Relativ häufig wird die Energie über die Fourier-Transformation der Wellenfunktion, ausgewertet an einem festen Ort $z^{(k)}$ des Gitters², bestimmt. Dies wirft jedoch eine Reihe von Fragen,

¹Dies ist nur eine heuristisch ermittelte Bedingung, sie ergibt sich nicht exakt aus irgendwelchen Parametern. Sie ist als Abschätzung jedoch brauchbar.

² k soll hier keinen Gitterindex bezeichnen

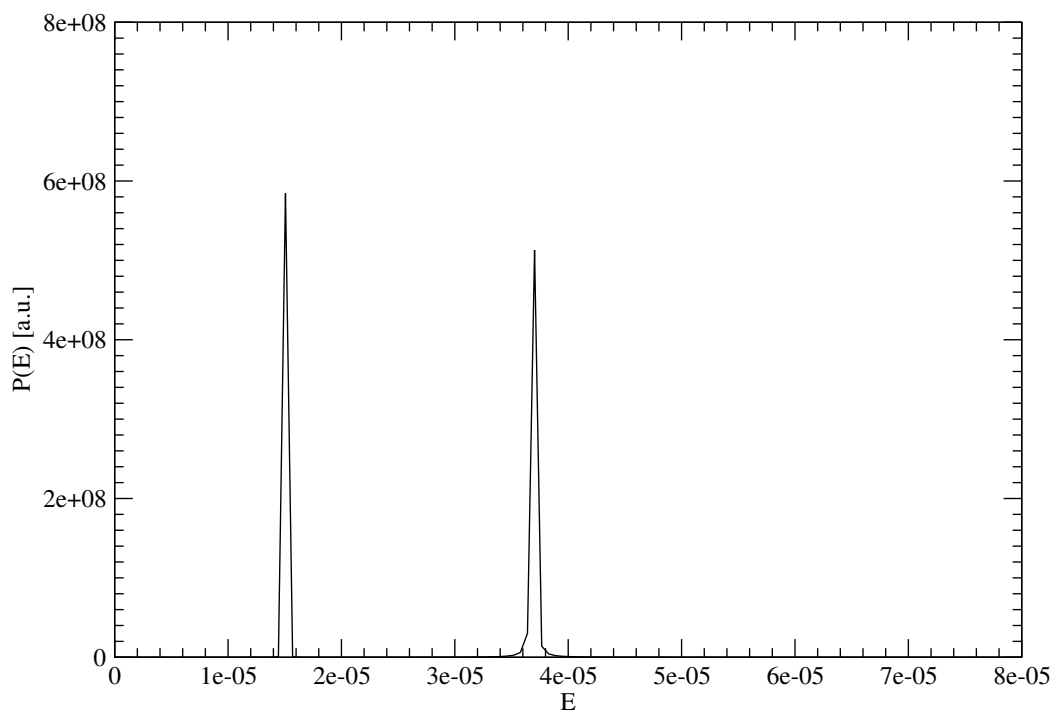


Abbildung 7.4: Energie-Spektrum bei FFT am Ort $z^{(1)}$

bzw. Problemen auf.

Zum einen stellt sich das Auswahlproblem, welcher Ort ist hier sinnvoll? Das Spektrum welches man erhält wird erwartungsgemäß verschieden ausfallen (siehe Gl. 4.2), jedoch ist das Spektrum des Gesamtsystems beide Male dasselbe, der Auswahlprozess ist nicht durch die Physik vorgegeben, es gibt keine kanonische Wahl.

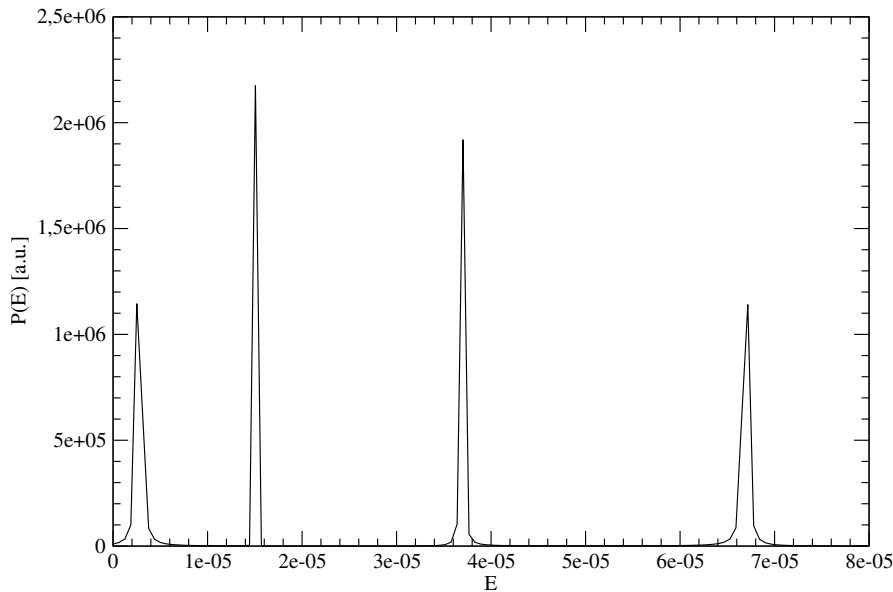


Abbildung 7.5: Energie-Spektrum bei FFT am Ort $z^{(2)}$

Abbildung 7.4 zeigt nun solch ein Spektrum für den Ort $z^{(1)} = 666.7$. Wie wir an Gl. 7.10 sehen, liegt dort eine Nullstelle für den ersten und vierten Summanden der Wellenfunktion. Das errechnete Spektrum zeigt auch tatsächlich nur 2 Peaks, diese liegen dafür an der richtigen Stelle. Die Halbwertsbreite ist auch unverändert.

$z^{(1)}$ ist offensichtlich ein pathologischer Punkt, schauen wir uns einen weiteren Ort an, $z^{(2)} = 1000$. Dies ist offensichtlich eine bessere Wahl, wir sehen alle vier Peaks, die relativen Höhen stimmen einigermaßen³.

Am dritten Punkt $z^{(3)} = 700$, Abbildung 7.6, sind der erste und vierte Peak um zwei Größenordnungen kleiner als die anderen, nur bei logarithmischem Maßstab kann man sie noch erkennen.

Es ist also nicht so, daß die Auslöschungseffekte nur auftreten, wenn man eine Nullstelle genau trifft. Hier ist um jede Nullstelle herum ein Bereich wo der zugehörige Peak stark gedrückt wird. Die kritischen Punkte/Bereiche sind also definitiv keine Nullmenge, es ist im Gegenteil durchaus wahrscheinlich, daß man sie trifft.

Je nachdem, wie das Spektrum aussieht, könnte es sogar sein, daß man Peaks wie den ersten im Spektrum 7.6 überhaupt nicht mehr sieht, weil er neben eng benachbarten und nicht unterdrückten Peaks eventuell untergeht.

³zur Größenordnung des Fehler, der hier immer vorliegt, siehe 7.6

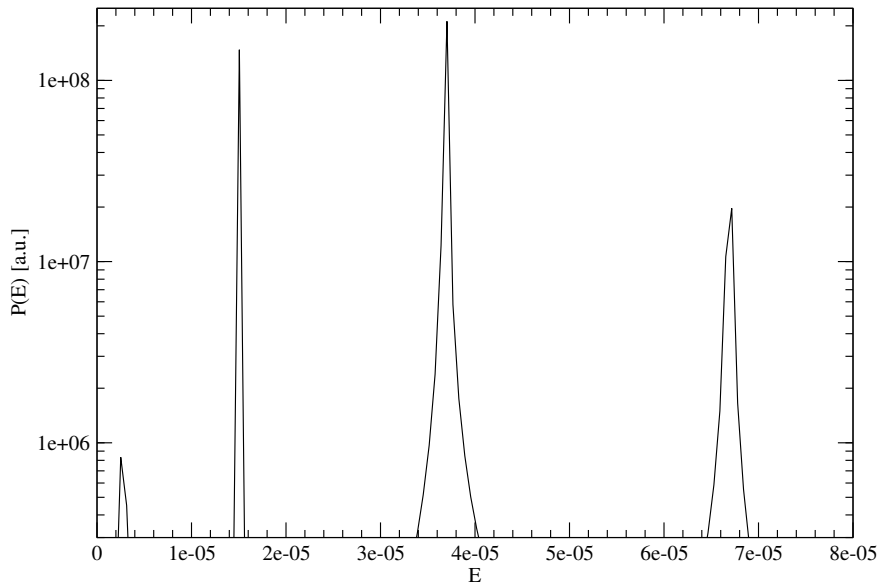


Abbildung 7.6: Energie-Spektrum bei FFT am Ort $z^{(3)}$

7.5 In zwei Dimensionen

Um zu überprüfen, daß die Methode auch bei zweidimensionalen Problemen zum Ziel führt, wurde ein zweidimensionaler Potentialtopf eingeführt. Das Potential lautet:

$$V(x, z) = \begin{cases} 0 & \text{für } \left\{ \begin{array}{l} -\frac{L}{2} < x < \frac{L}{2} \text{ und } -\frac{L}{2} < z < \frac{L}{2} \\ \text{sonst} \end{array} \right. \\ \infty & \end{cases} \quad (7.20)$$

Die sonstigen Parameter wurden gewählt wie in 7.1, zusätzlich sei $\Delta x := \Delta z$ (Also ein in x und z -Richtung symmetrisches Gitter.).

Bei der Berechnung wurde analog zu 3.4.2.2 vorgegangen, um unerwünschte Effekte an den Rändern zu vermeiden. Natürlich mit den entsprechend notwendigen Änderungen für R^\pm , da wir hier nicht in Zylinderkoordinaten rechnen.

Als Anfangsverteilung wurde folgendes gewählt:

$$\Psi(x, z) = \cos\left(\frac{3x\pi}{2L}\right) + \cos\left(\frac{7z\pi}{2L}\right) + \cos\left(\frac{11x\pi}{2L}\right) + \cos\left(\frac{15z\pi}{2L}\right) \quad (7.21)$$

Das Spektrum wurde mit Hilfe der Autokorrelationsfunktion erzeugt. Das Ergebnis zeigt Abbildung 7.7.

Da sowohl die Zeit-Entwicklung, als auch die Fourier-Transformation, eine lineare Operation ist, erwarten wir als Spektrum natürlich eine dem eindimensionalen Fall gleiche Verteilung. Dies ist auch tatsächlich der Fall.

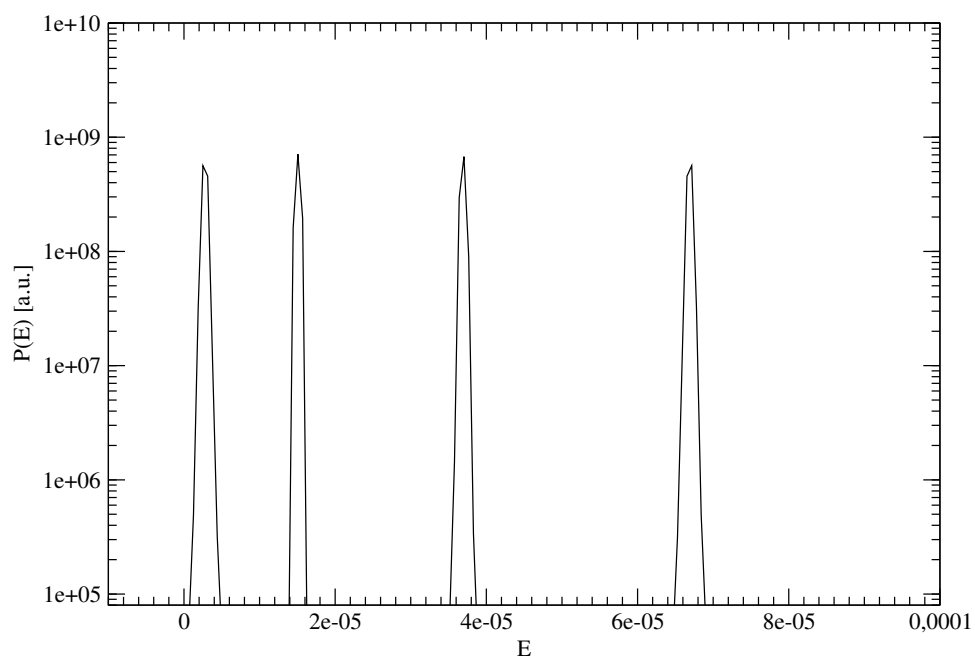


Abbildung 7.7: Energie-Spektrum bei einem 2D-Potentialtopf

7.6 Zusammenfassung

Wir sehen daß die Berechnung der Energie über die Autokorrelationsfunktion nicht nur den (unphysikalischen) Auswahlprozeß der Orte $z^{(k)}$ vermeidet, sondern auch die zuverlässigeren Ergebnisse liefert.

Die Eigenfunktionen des Kastenpotentials sind dabei noch relativ gutmütig (es sind nur Sinus- bzw. Cosinus-Funktionen), sie schwanken nur zwischen 0 und 1. Bei einem anderem Potentialverlauf würden die Terme $u_{j,k}$ in Gl. 4.2 über einen deutlich größeren Bereich schwanken. Die Eigenfunktionen könnten zudem räumlich viel stärker lokalisiert sein.

Abgesehen davon, daß diese Spektren völlig ungeeignet sind, die relative Stärke der Peaks beurteilen zu können, wäre das Ergebnis, daß man selbst, wenn man für eine ganze Reihe von Orten $z^{(k)}$ Spektren erzeugt, einzelne Peaks eventuell nie zu Gesicht bekommen wird.

Die relative Stärke der Peaks ließe sich im übrigen auch nicht bestimmen, wenn man Spektren für extrem viele Punkte $z^{(k)}$ erzeugt. Je mehr einzelne Spektren man betrachtet, mit desto größerer Sicherheit wird man irgendwann alle Peaks kennen. Es gibt jedoch keinen Auswahlmechanismus um aus den einzelnen Höhen die wahre Höhe zu berechnen⁴.

Die Höhe der Peaks beim Weg über die Autokorrelationsfunktion stimmt, außer für sehr kleine Energien⁵, relativ gut mit der Theorie überein. Der noch vorhandene Fehler liegt dabei an der Fourier-Transformation, nicht an der zu transformierenden Funktion⁶. Um die Genauigkeit zu verbessern, hätte man noch entsprechend [13] vorgehen können, dies ist hier unterblieben, um die Rechenzeit zu verringern. Ohne diese Verbesserung sind die Peakhöhen nur auf etwa eine halbe Größenordnung genau.

Um die Genauigkeit zu verbessern, hätte man, entsprechend [13], die Simulationszeit T in M Segmente unterteilen müssen, und für diese einzelnen Segmente die Fourier-Transformation durchgeführt. Zum Schluß hätte man aus diesen Teil-Spektren das richtige Spektrum in höherer Genauigkeit durch Mittelung erhalten. Die Varianz der Peakhöhen sinkt dabei um den Faktor $\frac{1}{M}$.

Zum Vergleich der beiden möglichen Vorgehensweisen war dies jedoch nicht notwendig, es läßt sich so bereits demonstrieren daß der Weg über die Autokorrelationsfunktion vorzuziehen ist. Im Übrigen liefert ein Vergleich von Abbildung 7.3 und Abbildung 7.5 den Beweis, daß natürliche beide Vorgehensweisen gleichermaßen von diesem Effekt betroffen sind.

⁴Man kann zum Beispiel nicht einfach das Maximum über alle Teilspektren nehmen

⁵sieht man sehr gut am ersten Peak

⁶Insbesondere tritt der Effekt auch bei den Ein-Punkt-Spektren auf.

Kapitel 8

Coloumb soft-core

Als nächstes betrachten wir die Photo-Ionisation starker Felder durch eine ein-dimensionale TDSE-Berechnung. Die nicht-relativistische Wechselwirkung in Ein-Elektronen-Atomen, hier Wasserstoff, wird in Zylinderkoordinaten beschrieben durch ein Potential

$$V = -\frac{1}{\sqrt{z^2 + rho^2}}. \quad (8.1)$$

Wir betrachten dieses Potential in einem festen radialen Abstand $\varepsilon_\rho := 0.1$ vom Ursprung.

Die Lösungen der stationären Schrödingergleichung

$$H\psi = E\psi, \quad H = -\frac{1}{2}\partial_z^2 + V. \quad (8.2)$$

lassen sich näherungsweise mit der WKB-Methode bestimmen. Die Energie $E = k_0^2/2$ ist dabei stets positiv. Für die WKB-Näherung gilt dann:

$$k^2 = k_0^2 - 2V(z) \quad (8.3)$$

wobei jeweils für $z \rightarrow \pm\infty$ noch eine Randbedingung zu erfüllen ist.

8.1 Parameter

In diesem Kapitel wird jedoch obige Näherungslösung weiter vereinfacht und eine ebene Welle als Anfangsverteilung angenommen:

$$\Psi(z) = e^{ikz} \quad (8.4)$$

Die Simulation erfolgt mit einem Gitter der Länge L . Für den Abstand Δz der Gitterpunkte und ihre Anzahl J gelte:

$$J = 40000 \quad (8.5)$$

$$\Delta z = 0.1 \quad (8.6)$$

$$\Rightarrow L = 3999.9 \quad (8.7)$$

Die Simulation laufe mit N Zeitschritten über einen Zeitraum T mit:

$$N = 16383 \quad (8.8)$$

$$T = 500 \quad (8.9)$$

$$\Rightarrow \Delta t = 0.031 \quad (8.10)$$

Für die Ränder wurde die Randbedingung Gl. 3.21 benutzt.

8.2 Feldfreier Fall

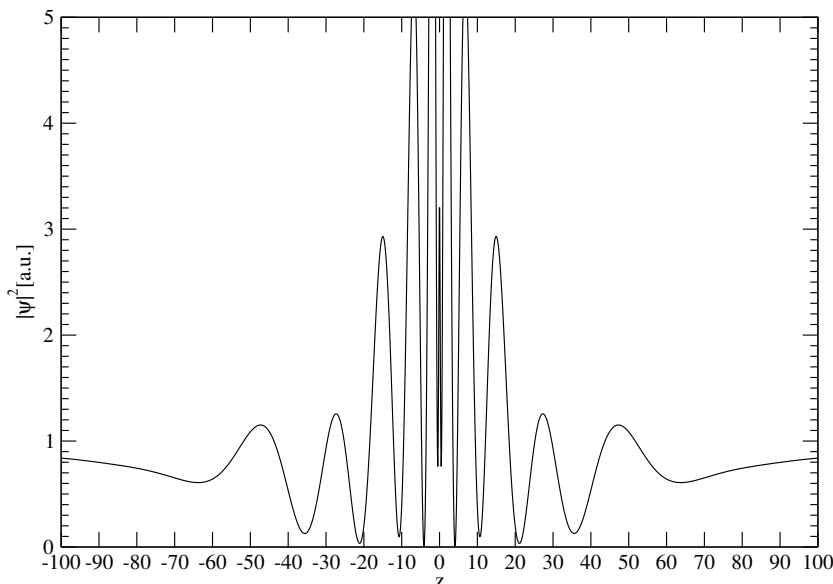
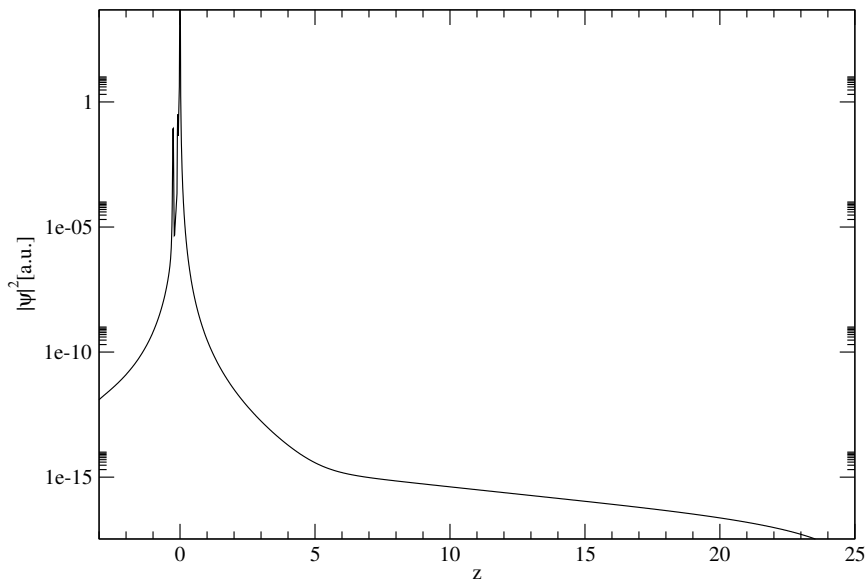
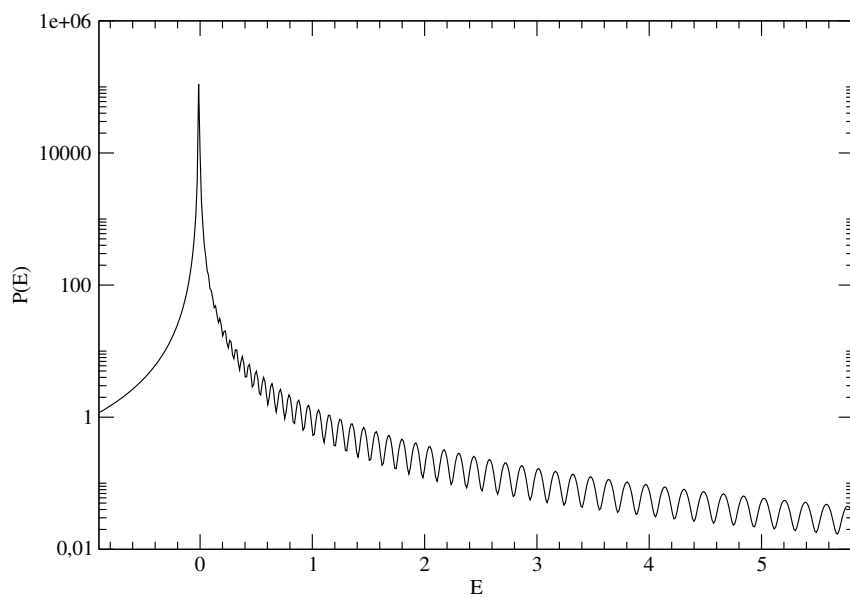


Abbildung 8.1: Ausschnittsvergrößerung für $k = 0$, $F_\omega = 0$

Abbildung 8.1 zeigt die Aufenthaltswahrscheinlichkeit, die sich am Ende der Simulation für $k = 0$ ergibt (man vergleiche dies mit Abbildung 3.1).

In Abbildung 8.2 ist das Spektrum dargestellt, was sich für diesen Fall bei Verwendung der Autokorrelationsfunktion ergibt. Man erkennt, daß der Peak ganz leicht aufspaltet. Dies ist ein Effekt, der sich im Wesentlichen aus dem Benutzen des Hann-Fensters ergibt.

Ohne Verwendung des Hann-Fensters tritt der Effekt nicht auf. Die gewählte Anfangsverteilung ist jedoch keine Eigenfunktion des Systems, die sich dadurch ergebende leichte Verbreiterung des Peaks führt mit dem Hann-Fenster dann zu 2 Peaks die etwa im Abstand der Breite des ursprünglichen auseinanderliegen. Ebensovienig tritt der Effekt bei Erstellung des Spektrums über die Fourier-Transformation an einem festen Punkt auf (unabhängig vom Hann-Fenster). Dafür ist das Ein-Punkt-Spektrum leicht gewellt (siehe Abbildung 8.3, man vergleiche insbesondere mit [8]), dies ist unabhängig von der Wahl des Ortes.

Abbildung 8.2: Energiespektrum für $k = 0$, mit Hilfe der AutokorrelationsfunktionAbbildung 8.3: Ein-Punkt-Energiespektrum für $k = 0$, bei $z = 1000$

8.3 Mit einem zeit-abhängigen äußeren Feld

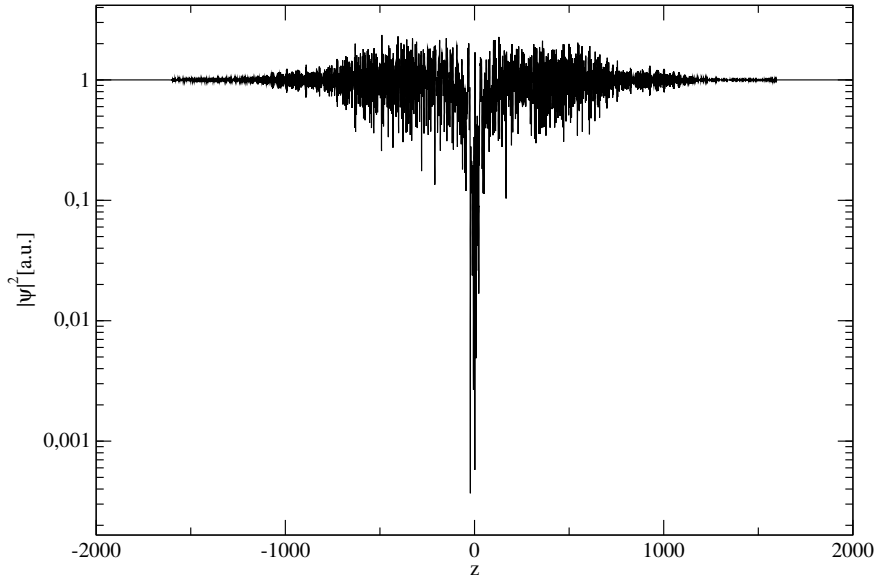


Abbildung 8.4: Aufenthaltswahrscheinlichkeit für $k = 0$, $\omega = 0.2$ und $F_\omega = 0.2$

Wenn wir die vorherige Konfiguration betrachten, diesmal jedoch mit einem zeitabhängigen äußeren Feld¹

$$F_\omega(t) = F_\omega \cos(\omega t) \quad (8.11)$$

und alles ins Kramers-Henneberger-System transformieren, so ergibt sich für den Hamilton-Operator:

$$H = -\frac{\Delta}{2} + V(z + \varepsilon \cos(\omega t)) \quad (8.12)$$

Das Spektrum bei Verwendung der Autokorrelationsfunktion, Abbildung 8.6, sieht auf den ersten Blick gut aus. Das Plateau ist gut zu erkennen und die einzelnen Photonennordnungen sind besser voneinander zu unterscheiden, als im Ein-Punkt-Energiespektrum, Abbildung 8.7. Das Plateau reicht bis etwa $E = 4$, entsprechend 20 Photonennordnungen (bei $\omega = 0.2$).

Abbildung 8.6 ist jedoch eine Vergrößerung, betrachtet man das gesamte Spektrum, so sieht man, daß sich da ein großes Problem stellt. Es sollte eigentlich nur Lösungen zu positiven Energien geben, insbesondere treten Peaks für negative Energie nicht in den Ein-Punkt-Spektren auf. Unabhängig vom Ort für den diese Spektren testweise erstellt wurden. Abbildung 8.8 zeigt einen größeren Ausschnitt des Spektrums.

Für Abbildung 8.9 ist nochmal für denselben Fall ein Spektrum mit Hilfe der Autokorrelationsfunktion erstellt worden, diesmal jedoch wurde jedoch kein Hann-Fenster verwendet. Hier

¹zum Beispiel das Feld eines Lasers

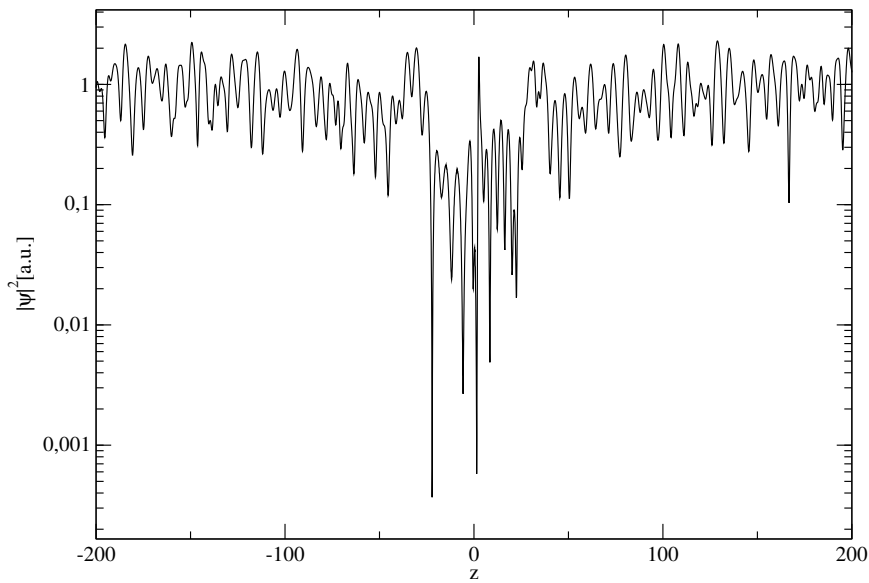


Abbildung 8.5: Aufenthaltswahrscheinlichkeit für $k = 0$, $\omega = 0.2$ und $F_\omega = 0.2$, vergrößert

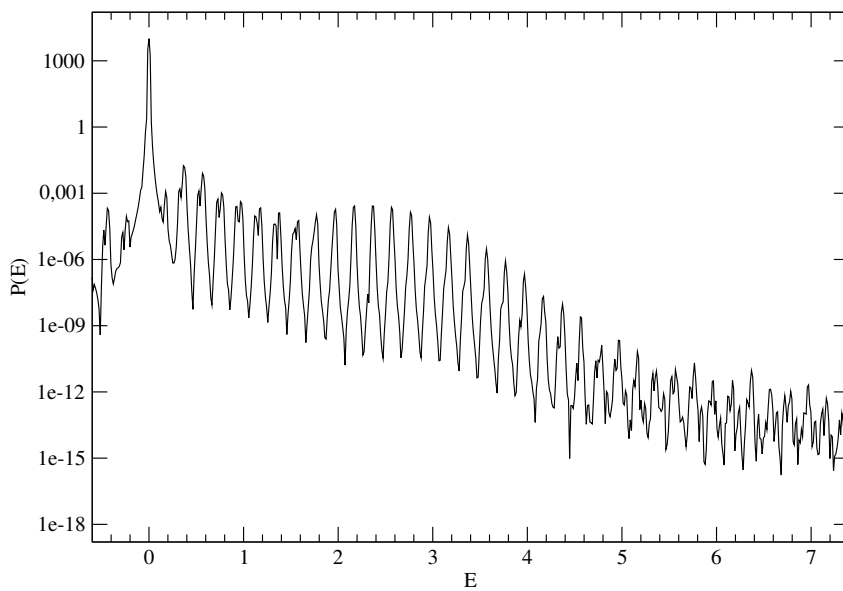


Abbildung 8.6: Energiespektrum für $k = 0$, $\omega = 0.2$ und $F_\omega = 0.2$, mit Autokorrelationsfunktion

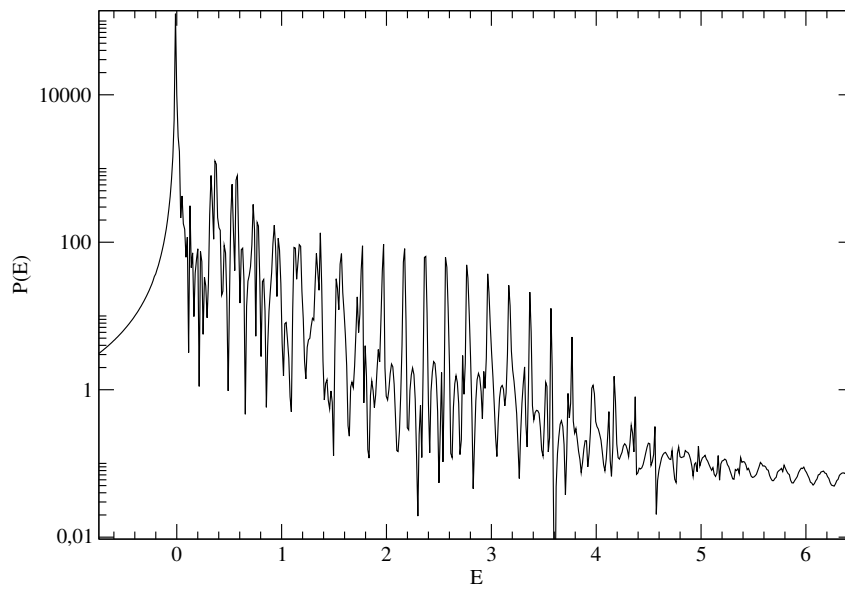


Abbildung 8.7: Ein-Punkt-Energiespektrum für $k = 0$, $\omega = 0.2$ und $F_\omega = 0.2$, bei $z = 1000$

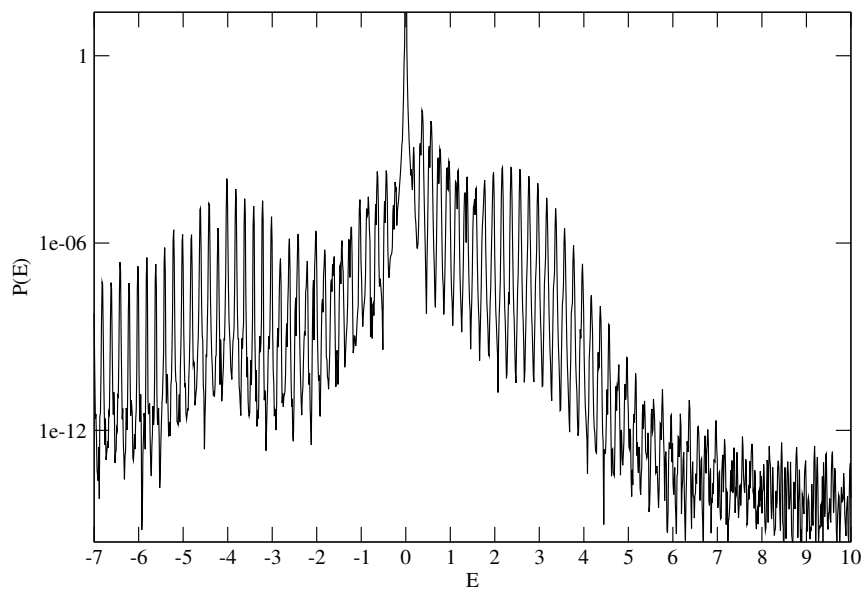


Abbildung 8.8: Energiespektrum für $k = 0$, $\omega = 0.2$ und $F_\omega = 0.2$, mit Autokorrelationsfunktion

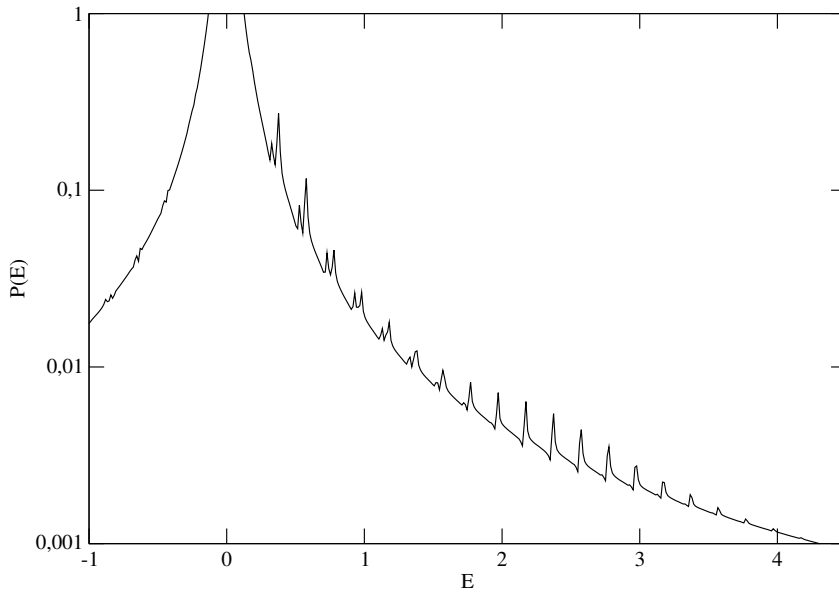


Abbildung 8.9: Autokorrelations-Energiespektrum für $k = 0$, $\omega = 0.2$ und $F_\omega = 0.2$, ohne Hann-Fenster

treten die unerwarteten Peaks für negative Energie nicht auf. Die Peaks für positive Energien sind an den erwarteten Orten (im Abstand der Photonen-Energie). Man sieht ferner, daß für $E > 3$ die Höhe der Peaks rasch abfällt. Insoweit stimmt das Spektrum also sowohl mit den Erwartungen, als auch dem Ein-Punkt-Spektrum überein.

Der Vorteil den die Autokorrelationsfunktion jedoch bieten sollte kommt hier nicht zum tragen, die Peakhöhen sind nur noch sehr klein. Läßt man für die Erzeugung der Ein-Punkt-Spektren das Hann-Fenster weg, so ergibt sich keine solche Reduzierung. Es scheint, als wäre der Weg über die Autokorrelationsfunktion hierfür anfälliger. Die Höhenunterschiede sind natürlich bei dem Autokorrelationsspektrum mit Hann-Fenster deutlich größer als beim Ein-Punkt-Spektrum, eventuell *verschmieren* die Peaks dadurch leichter ohne eine Fenster-Funktion und man sieht dann nur noch relativ kleine Höhen. Dieser Effekt scheint übrigens nicht besonders von der Form der Fensterfunktion abzuhängen. Dies wurde zwar nicht detailliert untersucht, aber ein kurzer Test mit einem linearen Anstieg/Abfall (Bartlett-Fenster, siehe [13]) statt dem \sin^2 -förmigen Verlauf des Hann-Fensters erbrachte keine Änderung.

Abbildung 8.10 zeigt das Autokorrelations-Spektrum für $\omega = 0.25$. Man erkennt, daß der Abstand der Photonen-Ordnungen gut wiedergegeben wird (die vorherigen Spektren waren also nicht *zufällig* richtig, es zeigt sich das richtige Skalierungsverhalten).

Abbildung 8.11 zeigt das Autokorrelations-Spektrum für $\omega = 0.2$ und $k = 1$, Abbildung 8.12 zeigt dies für $k = 2$. Man sieht, wie sich das Plateau verbreitert und das Hauptmaximum durch selbiges hindurchwandert.

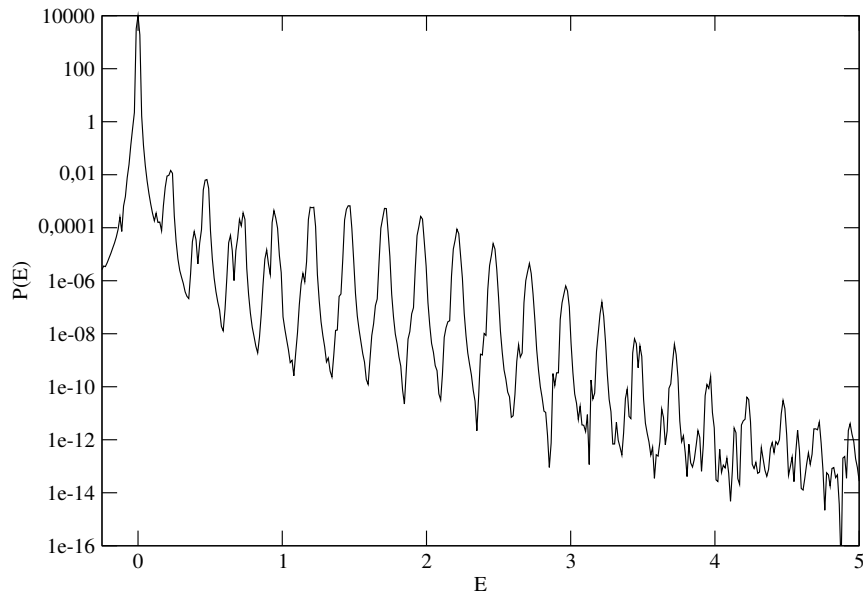


Abbildung 8.10: Energiespektrum für $k = 0$, $\omega = 0.25$ und $F_\omega = 0.2$

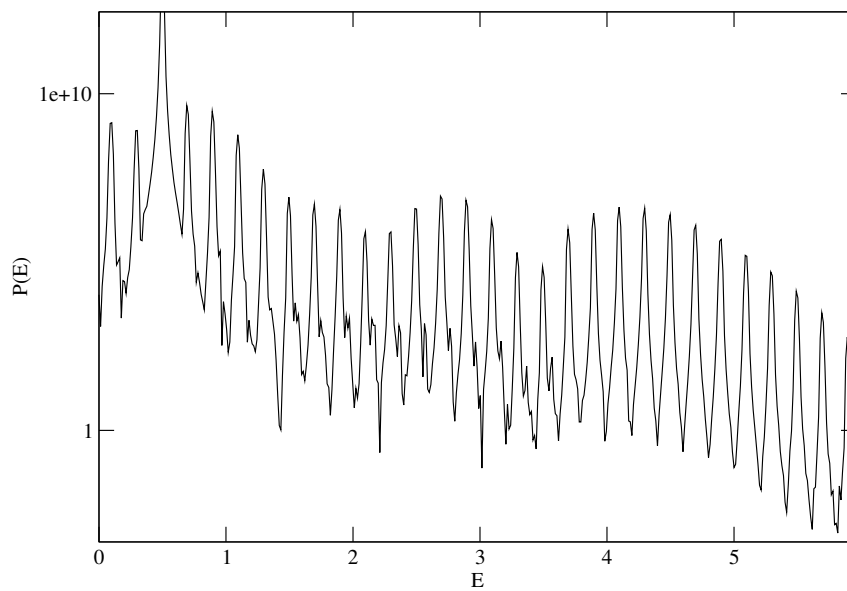


Abbildung 8.11: Energiespektrum für $k = 1$, $\omega = 0.2$ und $F_\omega = 0.2$

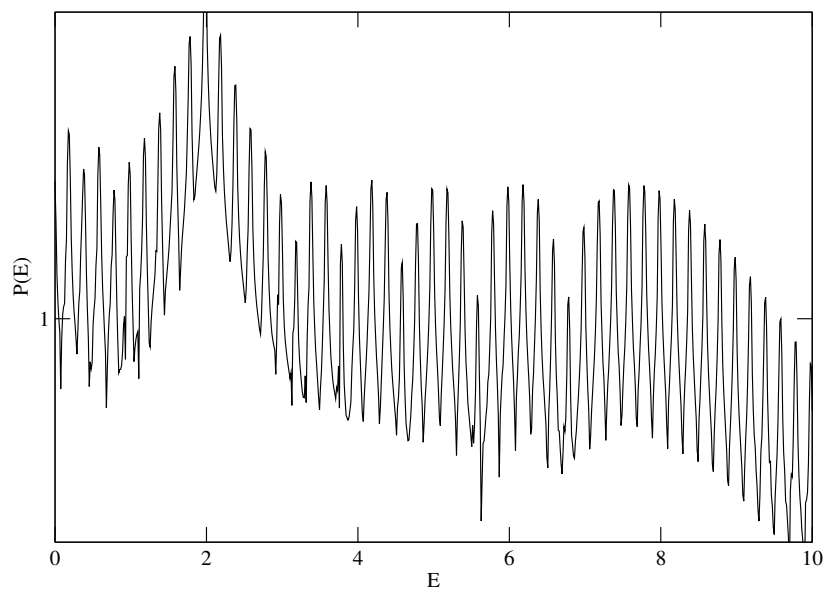


Abbildung 8.12: Energiespektrum für $k = 2$, $\omega = 0.2$ und $F_\omega = 0.2$

Kapitel 9

Zusammenfassung und Ausblick

Die Möglichkeit Energie-Spektren mit Hilfe der Autokorrelationsfunktion zu erzeugen, hat sich als vielversprechend erwiesen. Es ist jedoch zum jetzigen Zeitpunkt nicht so, daß man diesem Verfahren eine generelle Überlegenheit attestieren könnte.

Das erste Test-Modell, der Potentialtopf, zeigte die prinzipielle Anwendbarkeit des Verfahrens. Die Ergebnisse waren in guter Übereinstimmung mit den Erwartungen, das Verfahren war der Erzeugung von Ein-Punkt-Spektren deutlich überlegen. Sowohl im Hinblick auf den qualitativen Verlauf des Spektrums, also die sichtbaren/nicht-sichtbaren Peaks, als auch im Bezug auf die Höhe der Peaks. Eine Beeinflussung des Ergebnisses durch die Anwendung oder Nicht-Anwendung des Hann-Fensters ergab sich hierbei nicht. Die noch vorhandenen Abweichungen lassen sich höchstwahrscheinlich mit Hilfe von [13] erklären und beseitigen. Das Verfahren ist gut geeignet, um auch bei mehrdimensionalen Berechnungen Spektren zu erzeugen. Dies konnte ebenfalls am Beispiel des Potentialtopfes gezeigt werden.

Würde man im Gegensatz dazu versuchen, das Energie-Spektrum eines mehrdimensionalen Streu-Problems mit Hilfe von Ein-Punkt-Spektren zu bestimmen, so würde ein einzelner Punkt im allgemeinen nicht mehr ausreichen. Im eindimensionalen Fall *sieht* dieser Punkt alle gestreuten Wellen (ist z.B. beim Testfall des soft-core Coloumb-Potentials der Fall). Probleme treten nur dann auf, wenn sich der Punkt den man betrachtet an einem Knotenpunkt (oder zumindest sehr in der Nähe davon) befindet. In mehreren Dimensionen ist jedoch zu berücksichtigen, daß die Streuung im allgemeinen nicht isotrop erfolgen wird, die Winkelverteilung ist dann dadurch zu berücksichtigen, daß man entsprechend mehr Punkte benötigt. Dies kann je nach zu untersuchendem System schnell sehr aufwendig werden. Der Weg über die Autokorrelationsfunktion ist hier wesentlich eleganter, dieses Verfahren ist unabhängig von der Zahl der Dimensionen, es sind keine Änderungen notwendig.

Für den Testfall des soft-core Coulomb-Potentials zeigte sich allerdings ein Problem bei Verwendung einer Fenster-Funktion (Artefakte bei negativen Energien). Verzichtet man daher darauf, so wird der qualitative Verlauf zwar befriedigend wiedergegeben, jedoch sind die Peaks stark gedämpft. Eine weitere Untersuchung der Ursache dieses Verhaltens sollte in Zukunft angestellt werden. Die Frage dabei ist, ob dieser Effekt nur bei diesem Potential auftritt, oder relativ häufig für eine große Klasse von Systemen.

9.1 Variation des Verfahrens

In dieser Arbeit wurde versucht das Spektrum eines Systems mit Hilfe der Zeitenwicklung des Skalarproduktes $\langle P|\Psi(t)\rangle$, mit $|P\rangle = |\Psi(T)\rangle$, zu bestimmen. Man kann nun versuchen diese Vorgehensweise abzuwandeln, indem eine andere Funktion $|P\rangle$ gewählt wird. Der Fall des Ein-Punkt-Spektrums am Ort \vec{x}_s entspricht dabei $|P\rangle = |\vec{x}_s\rangle$ (räumliche Delta-Funktion am Ort \vec{x}_s).

Dies entspricht im k -Raum einem Gauß-Paket unendlicher Breite. Nimmt man jetzt ein Gauß-Paket endlicher Breite, entsprechend einer nicht so stark an einem Ort lokalisierten Funktion $|P\rangle$, so kann man eventuell zu einer deutlicher Verbesserung gelangen. Die Wahrscheinlichkeit daß Peaks verloren gehen wird deutlich gesenkt. Denn es ist natürlich deutlich wahrscheinlicher, daß ein einzelner Punkt in einem kritischen Bereich liegt, als daß das Gauß-Paket komplett von diesem eingeschlossen wird.

Diese Vorgehensweise erlaubt auch eine einfache Anwendung auf mehrdimensionale Probleme, da $|P\rangle$ nur entsprechend gewählt werden muß (z.B. konzentrisch um ein Streu-Zentrum).

9.2 Fourier-Transformation der ortsabhängigen Wellenfunktion

Beide in dieser Arbeit untersuchten Verfahren beruhen auf der Fouriertransformation einer Funktion $\langle P|\Psi(t)\rangle$ bzgl. der Zeit. Eine grundlegend andere Vorgehensweise ist, die Energie über eine Fouriertransformation der ortsabhängigen Wellenfunktion $\Psi(\vec{x})$ zu erhalten.

Benötigt wird dazu die ortsabhängige Wellenfunktion zum Zeitpunkt T , also am Ende der Simulation. Dieser Endzustand wird dann im k -Raum (also in der Impulsdarstellung) ausgewertet. Die Fouriertransformierte von Ψ ist dann:

$$\hat{\Psi}_k = \int_{x_1}^{x_2} dx \Psi(x) \exp(-ikx) \quad (9.1)$$

Hierbei kann man nun sogar einige interessante weitere Dinge untersuchen, indem die Integrationsgrenzen entsprechend angepaßt werden. Die Rechnung sei auf einem Gitter der Länge $2L$ ($-L \leq x \leq L$) erfolgt, dann sind die folgenden Fälle bei der Wahl der Integrationsgrenzen zu unterscheiden:

$$\begin{array}{lll} x_1 = -L & x_2 = +L & : \text{ gesamtes Spektrum} \\ x_1 = -L & x_2 = 0 & : \text{ Spektrum im linken Halbraum} \\ x_1 = 0 & x_2 = +L & : \text{ Spektrum im rechten Halbraum} \end{array}$$

Zudem wird das linksseitige Spektrum für negative k -Werte, das rechtsseitige für positive Werte benutzt. Dem linksseitigen Spektrum wird dann noch formal eine negative Energie zugewiesen, um alles in einem Diagramm darstellen zu können. Das Spektrum erhält man dann über:

$$P(E) = \frac{1}{|k|} \left| \hat{\Psi}_k \right|^2, \quad E = \pm \frac{1}{2} k^2 \quad \text{für } k \begin{matrix} > \\ < \end{matrix} 0. \quad (9.2)$$

Die Abbildungen 9.1, 9.2 und 9.3¹ zeigen solche Spektren für das soft-core Coulomb-Potential. Als Anfangswerte wurden hier jedoch nicht ebene Wellen, sondern Gaußsche Wellenpakete vorgegeben. Für das Feld gilt hier wieder $\omega = 0.2$ und $F_\omega = 0.2$. Die verschiedenen Abbildungen zeigen nun das Spektrum für verschiedene Eingangsimpulse k_0 . Die Berechnung der Endzustände erfolgte über 16 Laserperioden (entsprechend $T = 502$).

Man sieht, daß wenn der Eingangsimpuls groß genug ist, sich eine starke Asymmetrie zwischen den rechts- und linksseitigen Spektren einstellt. Das Hauptmaximum der transmittierten Teilchen beginnt das Plateau zu überdecken. Das Plateau der reflektierten Teilchen verbreitert sich dagegen.

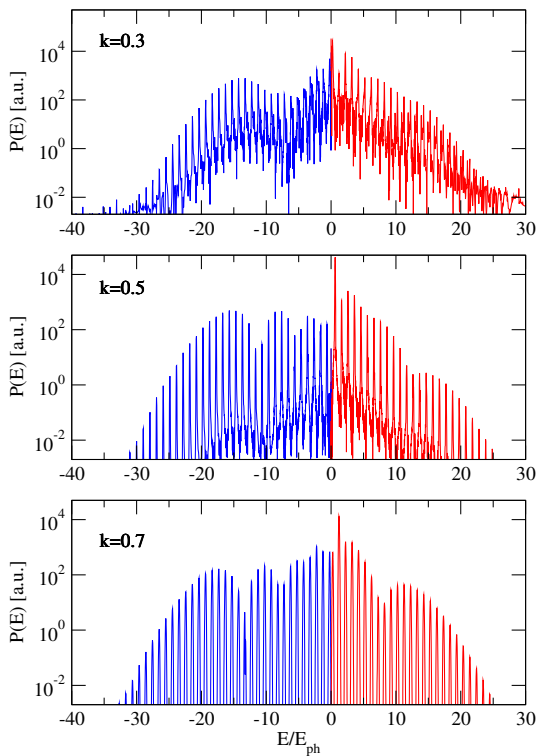


Abbildung 9.1: Links- und rechtsseitiges Energiespektrum für kleine Eingangsgeschwindigkeiten ($k_0 = 0.3, 0.5, 0.7$).

9.3 Abhängigkeit von der Anfangsverteilung

Für nachfolgende Arbeiten dürfte insbesondere die Untersuchung des soft-core Coulomb-Potentials mit anderen Anfangswerten von Interesse sein. Vor allem die sich dadurch ergebenden Änderungen im Spektrum.

Eine Möglichkeit besteht darin Gaußsche Wellenpakete zu benutzen. Diese haben neben der Tatsache, daß Randeffekte eine kleinere Rolle spielen, da die Wahrscheinlichkeitsdichte dort niedrig ist (und man so eventuell mit einem kleineren Gitter rechnen kann), den Vorteil, daß man die sich asymptotisch ergebenden Zustände gut trennen kann.

¹Diese Bilder wurden freundlicherweise von Prof. Kull zur Verfügung gestellt.

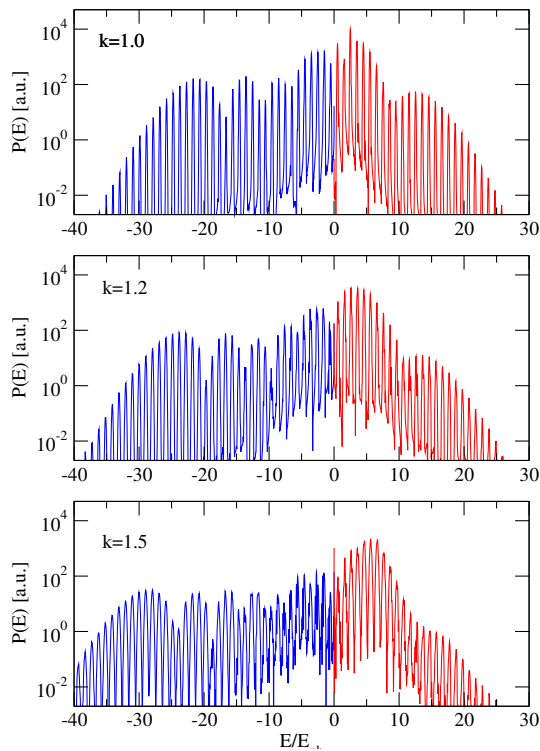


Abbildung 9.2: Links- und rechtsseitiges Energiespektrum für für mittlere Eingangsgeschwindigkeiten ($k_0 = 1.0, 1.2, 1.5$).

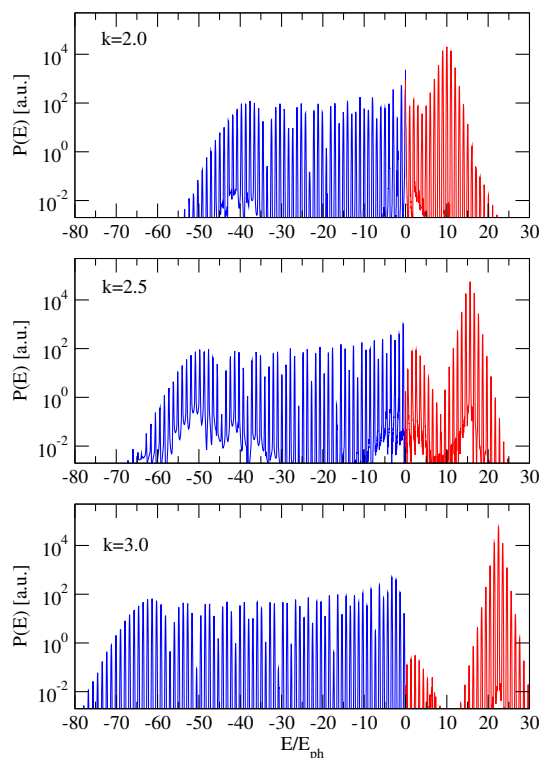


Abbildung 9.3: Links- und rechtsseitiges Energiespektrum für große Eingangsgeschwindigkeiten ($k_0 = 2.0, 2.5, 3.0$).

9.4 Analytische Näherungsmethoden

Weiterhin sollte ein Vergleich von Simulation und analytischen Näherungsmethoden durchgeführt werden

Hierzu läßt sich für den feldfreien Fall mit Hilfe der WKB-Methode eine Näherungslösung bestimmen, diese ist²:

$$\psi = \psi_0 + \psi_1 = \left(1 + \frac{1}{ik_0} \int_{-\infty}^x dx V\right) e^{ik_0 x} + \left(r - \frac{1}{ik_0} \int_{-\infty}^x dx V e^{2ik_0 x}\right) e^{-ik_0 x}. \quad (9.3)$$

Es läßt sich dann ein Hamilton-Operator H^+ finden, für den die WKB-Näherungslösung eine exakte Lösung darstellt. Die Differenz zum ursprünglichen Hamilton-Operator stellt ein Störpotential δV dar. Dieses wird dann in Störungsrechnung behandelt.

²Entnommen einer noch unveröffentlichten Arbeit von Prof. Kull.

Literaturverzeichnis

- [1] Koonin, S.E., Davies, K.T.R., Maruhn-Rezwani, V., et al., 1977, Phys. Rev. C., **15**, 1359.
- [2] Kulander, K.C., 1987, Phys. Rev. A, **35**, 445.
- [3] Pindzola, M.S., Bottrell, G.J., and Bottcher, C., 1990, J. Opt. Soc. Am. B, **7**, 659.
- [4] Boucke, K., Schmitz, H., and Kull, H.J., 1997, Phys. Rev. A, **56**, 763.
- [5] Kull, H.-J., Dimou, L., and Sanz, J.L., 1999, Laser Physics, **9**, 48.
- [6] Goldberg, A., Schey, H.M., and Schwartz, J.L., 1967, American Journal of Physics, **35**, 177-186.
- [7] Galbraith, I., Ching, Y.S., and Abraham, E., 1984, American Journal of Physics, **52**, 60-68.
- [8] Kull, H.-J., Görlinger, J., and Plagne, L., 2000, Laser Physics, **10**, 151-159.
- [9] Feit, M.D., Fleck, Jr., J.A., and Steiger, A., 1982, Journal of Computational Physics, **47**, 412-433.
- [10] Harris, F.J., 1978, Proceedings of the IEEE, **66**, 51-83.
- [11] Henneberger, W.C., 1968, Phys. Rev. Lett., **21**, 838.
- [12] H.-J. Kull, Computersimulation von Plasmen, Skriptum zur Vorlesung 2000/2001
- [13] Press, W.H., Teukolsky, S.A., Vetterling, W.T., Flannery, B.P., Numerical Recipes in C, 2nd ed., 549-557 (Cambridge University Press, New York 1997).
- [14] Baorui Yang, Schafer, K.J., Walker, B., et al., 1993, Phys. Rev. Lett., **71**, 3770.
- [15] Paulus, G.G., Nicklich, W., Huale Xu, et al., 1994, Phys. Rev. Lett., **72**, 2851.
- [16] Paulus, G.G., Zacher, F., Walther, H., et al., 1998, Phys. Rev. Lett., **80**, 484.
- [17] Paulus, G.G., Becker, W., Nicklich, W., 1994, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., **27**, L703.
- [18] Cormier, E. and Lambropoulos, P., 1997, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., **30**, 77.
- [19] Muller, H.G. and Kooiman, F.C., 1998, Phys. Rev. Lett., **81**, 1207.