

**Numerische Lösungen der zeitabhängigen
Schrödinger-Gleichung
mit interaktiver Visualisierung**

Markus Unkel

Bachelorarbeit in Physik
angefertigt im Helmholtz-Institut für Strahlen- und Kernphysik

vorgelegt der
Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät
der
Rheinischen Friedrich-Wilhelms-Universität
Bonn

Februar 2016

Ich versichere, dass ich diese Arbeit selbstständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt sowie die Zitate kenntlich gemacht habe.

Bonn,

Datum

.....

Unterschrift

1. Gutachter: PD. Dr. Bernard Metsch
2. Gutachter: Prof. Dr. Carsten Urbach

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Definitionen und Anforderungen	3
2.1	Raumzeitgitter	3
2.2	Randbedingungen	3
2.3	Bedingung an Lösungsverfahren	4
2.3.1	Unitarität	4
2.3.2	Energieerhaltung	4
2.3.3	Fehler	4
3	Crank - Nicolson - Verfahren	5
3.1	Ansatz	5
3.2	Stabilitätsanforderungen	7
3.2.1	Unitarität	7
3.2.2	Energieerhaltung	8
3.2.3	Ungenauigkeit	8
3.2.4	Konvergenz	8
3.3	Berechnung	8
4	Split - Operator - Verfahren	11
4.1	Ansatz	11
4.1.1	Zassenhaus - Formel	11
4.1.2	Zeitentwicklungsoperatoren	12
4.2	Stabilitätsanforderungen	13
4.2.1	Unitarität	13
4.2.2	Energieerhaltung	13
4.2.3	Ungenauigkeit	14
4.2.4	Konvergenz	15
4.3	Berechnung	16
5	Vergleich	19
5.1	Vergleichsgrößen	19
5.2	Freies Wellenpaket	20
5.3	Kohärenter Zustand des harmonischen Oszillators	22
6	Interaktive Visualisierung	25
6.1	Simulationstool	25

6.2	Beispielkonfigurationen	27
6.2.1	Kohärenter Zustand	27
6.2.2	Quasistationärer Zustand	28
7	Schlussbemerkung	31
	Literatur	33
A	Mathematische Ergänzungen	35
A.1	Inverse einer Operatorsumme	35
A.2	Thomas - Algorithmus	35
A.2.1	Ansatz	36
A.3	Exponentialoperatoren	36
A.3.1	Inverses Element	36
A.4	Fourier-Transformation	37
A.4.1	Differentiationsregel	37
A.4.2	Nyquist - Shannon - Abtasttheorem	38
A.4.3	Schnelle Fourier-Transformation	39
	Abbildungsverzeichnis	43
	Tabellenverzeichnis	45

Einleitung

Die Lösung der zeitabhängigen Schrödinger - Gleichung stellt eine essentielle Anforderung dar, um in der nichtrelativistischen Quantenmechanik Phänomene und Verhaltensweisen von Systemen studieren zu können. Bei dieser Gleichung handelt es sich um eine parabolische partielle Differentialgleichung mit N Raumkoordinaten und einer Zeitvariablen. In der folgenden Arbeit wird ein Teilchen mit der Wellenfunktion $\psi(x, t)$ und der Masse m im zeitunabhängigen Potential $V(x)$ betrachtet. Dabei wird $N = 1$ gesetzt, sodass räumlich eindimensionale quantenmechanische Probleme behandelt werden. Demnach erhält die Schrödinger - Gleichung die Form

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}(x, t) = \hat{H}\psi(x, t) \stackrel{(N=1)}{=} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}(x, t) + V(x)\psi(x, t) . \quad (1.1)$$

Diese wird mit einer Anfangsbedingung für $\psi(x, t)$ zur Zeit t_0 für alle Zeiten t eindeutig gelöst.

Aufgrund der Tatsache, dass in der Fülle quantenmechanischer Probleme einige analytisch nicht vollständig gelöst werden können, werden numerische Lösungsverfahren benötigt. Zwei bekannte und in der Arbeit nachfolgend behandelte Methoden sind das Crank-Nicolson- und das Split-Operator-Verfahren.

Das Crank-Nicolson-Verfahren verwendet bei gegebener Raumzeitdiskretisierung die Finite-Differenzen-Methode, welche zu einem linearen Gleichungssystem mit einer Tridiagonal-Matrix führt. Das Gleichungssystem kann mithilfe des Thomas-Algorithmus effizient gelöst werden, wobei dann lediglich Probleme mit periodischen oder festen Randbedingungen im Ort behandelt werden können.

Beim Split-Operator-Verfahren wird der Zeitentwicklungsoperator $\hat{U}(t, t_0) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t - t_0)\right)$ in mehrere Exponentialoperatoren zerlegt. Die Wirkung des Operators \hat{U} auf ψ kann bspw. nach Aufspaltung in den kinetischen und potentiellen Anteil mithilfe der Fast-Fourier-Transformation berechnet werden. Hierbei können aufgrund der verwendeten Fourier-Transformation nur Probleme mit periodischen Randbedingungen gelöst werden.

Beide numerischen Lösungsverfahren werden mit analytisch gelösten Problemen in der Genauigkeit der Berechnung verglichen und gegenübergestellt, um die theoretischen Überlegungen zur numerischen Genauigkeit einzelner Verfahren zu verifizieren.

Damit ein visuelles Verständnis dieser Arbeit erhalten werden kann, ist auf www.quantum-simulation.de eine Internetseite mit einer Live-Simulation entstanden. Sie soll dazu dienen, das Verhalten von

Gaußschen Wellenpaketen in beliebig einstellbaren Potentialen beobachten zu können. Weiterhin soll die Internetseite für Physikstudierende einen visuellen Einstieg in die Quantenmechanik bieten.

Definitionen und Anforderungen

2.1 Raumzeitgitter

Zur numerischen Behandlung wird die Raumzeit diskretisiert. Die diskretisierten Orte $x_j \in \mathbb{R}$ liegen im endlichen Gebiet X , wobei

$$x_j = x_1 + (j - 1) \cdot \Delta x \quad (2.1)$$

mit $j \in \{1, \dots, J\}$ und $\Delta x > 0$ gilt.

Die Zeit $t_n \in \mathbb{R}$ mit $n \in \mathbb{Z}$ sei rekursiv mit

$$t_{n+1} = t_n + \Delta t \quad (2.2)$$

definiert, wobei $\Delta t > 0$ gilt.

Für die Wellenfunktion im Ortsraum ψ gelte folgende diskretisierte Form

$$\psi_n^j := \psi(x_j, t_n) \ . \quad (2.3)$$

Für die Wellenfunktion im Wellenzahlraum ϕ gelte ebenfalls

$$\phi_n^i := \phi(k_i, t_n) \ . \quad (2.4)$$

Dabei wird die Wellenzahl k_i äquivalent zu x_j mit $\Delta k > 0$ gewählt.

2.2 Randbedingungen

Es sei die Randbedingung als *periodisch* bezeichnet, falls

$$\psi_n^j = \psi_n^{j-J} \quad (2.5)$$

und als *fest* bezeichnet, sofern

$$\psi_n^0 = \psi_n^{J+1} = 0 \ . \quad (2.6)$$

2.3 Bedingung an Lösungsverfahren

Die betrachteten numerischen Lösungsverfahren sollten aus physikalisch sinnvoller Sicht den Erwartungswert der Gesamtenergie erhalten und die Unitarität des Zeitentwicklungsoperators für jeden Zeitpunkt t_n gewährleisten. Der Fehler E nach Gleichung (2.12) muss gegenüber der analytischen Lösung asymptotisch eine obere Grenze besitzen.

2.3.1 Unitarität

Die Unitarität des Zeitentwicklungsoperators \hat{U} ist genau dann gegeben, wenn

$$\langle \psi_{n+1} | \psi_{n+1} \rangle = \langle \psi_n | \hat{U}^\dagger \hat{U} | \psi_n \rangle = \text{const} \quad (2.7)$$

gilt. Daher muss für den Zeitentwicklungsoperator der jeweiligen Methode die Gleichung

$$\hat{U}^\dagger \hat{U} = 1 \quad (2.8)$$

erfüllt sein. Dabei entspricht im Raumzeitgitter die linke Seite der Bedingung (2.7)

$$\langle \psi_{n+1} | \psi_{n+1} \rangle = \int_{x \in X} dx \langle \psi_{n+1} | x \rangle \langle x | \psi_{n+1} \rangle = \int_{x \in X} dx \psi_{n+1}^*(x) \cdot \psi_{n+1}(x) \approx \Delta x \sum_{j=1}^J \psi_{n+1}^{*j} \psi_{n+1}^j \quad (2.9)$$

Die Wahrscheinlichkeit, ein Teilchen im gesamten Gebiet zu finden, sollte demnach für alle Zeiten t_n konstant sein.

2.3.2 Energieerhaltung

Eine weitere Anforderung an das Lösungsverfahren ist die Erhaltung des Gesamtenergieerwartungswertes, daher muss

$$\langle \psi_{n+1} | \hat{H} | \psi_{n+1} \rangle = \langle \psi_n | \hat{U}^\dagger \hat{H} \hat{U} | \psi_n \rangle = \text{const} \quad (2.10)$$

für jeden Zeitpunkt t_n gegeben sein. Verkürzt ausgedrückt muss demnach die jeweilige Methode die Relation

$$\hat{U}^\dagger \hat{H} \hat{U} = \hat{H} \quad (2.11)$$

erfüllen.

2.3.3 Fehler

Der Fehler E des jeweiligen Verfahrens soll gegenüber der analytischen Lösung eine asymptotisch obere Grenze haben und sei über die Norm $\| \cdot \|$ des Hilbertraums definiert [Sar09]

$$\begin{aligned} E &:= \left\| \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \Delta t\right) - \hat{U} \right\| \\ &:= \left\| \left(\exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \Delta t\right) - \hat{U} \right) \psi \right\| \\ &\stackrel{!}{=} O((\Delta t)^p) \end{aligned} \quad (2.12)$$

mit $p \in \mathbb{N}$. Der Zeitentwicklungsoperator \hat{U} soll zudem bei infinitesimal dicht gewählter Raumzeitdiskretisierung gegen $\exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \Delta t\right)$ konvergieren.

Crank - Nicolson - Verfahren

Das numerische Verfahren des Mathematikers John Crank und der Mathematikerin Phyllis Nicolson [Pan06] bezieht sich auf die Finite-Differenzen-Methode, bildet den Mittelwert des expliziten und impliziten Euler-Verfahrens und erhält im Gegensatz zu den jeweiligen Euler-Verfahren die Normierung. Zusätzlich erfüllt das Verfahren den Anspruch der Erhaltung des Erwartungswertes der Gesamtenergie. Es sei weiterhin erwähnt, dass das betrachtete Potential zeitunabhängig ist.

3.1 Ansatz

Sei folgende partielle Differentialgleichung mit den auf ganz \mathbb{C}^2 stetigen Funktionen u und F

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x, t) = F\left(\left\{\frac{\partial^i u}{\partial x^i}\right\}_{i \in \mathbb{N}}, x, t\right) \quad (3.1)$$

definiert, so ergibt sich bei gegebener Diskretisierung $u_n^j := u(x_j, t_n)$ und $F_n^j := F\left(\left\{\frac{\partial^i u}{\partial x^i}\right\}, x_j, t_n\right)$ das implizite/explicite Euler-Verfahren [Pre+07]

$$\frac{u_{n+1}^j - u_n^j}{\Delta t} = F_{n+1/n}^j . \quad (3.2)$$

Demnach entspricht die Crank-Nicolson-Methode [Pre+07] dem Mittelwert beider Euler-Verfahren

$$\frac{u_{n+1}^j - u_n^j}{\Delta t} = \frac{1}{2} \left(F_n^j + F_{n+1}^j \right) . \quad (3.3)$$

Nun enthält die Gleichung (3.1) die Form der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung (1.1)

$$u(x, t) = i\hbar \cdot \psi(x, t) \quad \text{und} \quad F(x, t) = \hat{H}\psi(x, t) \quad (3.4)$$

bzw. in diskretisierter Form

$$u_n^j = i\hbar \cdot \psi_n^j \quad \text{und} \quad F_n^j = \left(\hat{H}\psi \right)_n^j . \quad (3.5)$$

Der Ausdruck $(\hat{H}\psi)_n^j$ beinhaltet nach Gleichung (1.1) eine örtliche zweifache Ableitung, welche innerhalb der Finite-Differenzen-Methode [Ves98] die Form

$$\left(\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)_n^j \approx \frac{\psi_n^{j+1} - \psi_n^j}{\Delta x} \Rightarrow \left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\right)_n^j \approx \frac{\left(\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)_n^j - \left(\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)_n^{j-1}}{\Delta x} \approx \frac{\psi_n^{j+1} - 2\psi_n^j + \psi_n^{j-1}}{(\Delta x)^2} \quad (3.6)$$

erhält, wobei hier jeweils das explizite bzw. implizite Euler-Verfahren verwendet wird. Mit den diskretisierten zeitunabhängigen Potentialwerten $V^j := V(x_j)$ ergibt sich

$$(\hat{H}\psi)_n^j \approx -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\psi_n^{j+1} - 2\psi_n^j + \psi_n^{j-1}}{(\Delta x)^2} \right) + V^j \psi_n^j . \quad (3.7)$$

Nach Einsetzen der Gleichung (3.5) in (3.3) folgt die Crank-Nicolson-Form der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung mit

$$i\hbar \left(\frac{\psi_{n+1}^j - \psi_n^j}{\Delta t} \right) = \frac{1}{2} \left[\underbrace{\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\psi_n^{j+1} - 2\psi_n^j + \psi_n^{j-1}}{(\Delta x)^2} \right) + V^j \psi_n^j \right\}}_{=(\hat{H}\psi)_n^j} + \underbrace{\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\psi_{n+1}^{j+1} - 2\psi_{n+1}^j + \psi_{n+1}^{j-1}}{(\Delta x)^2} \right) + V^j \psi_{n+1}^j \right\}}_{=(\hat{H}\psi)_{n+1}^j} \right] . \quad (3.8)$$

Die Gleichung wird so umgestellt, dass auf der linken Seite Terme zugehörig zu t_{n+1} und rechts zu t_n sind [KR98]

$$\begin{aligned} & \psi_{n+1}^{j+1} + \overbrace{\left[i \frac{4m}{\hbar} \frac{(\Delta x)^2}{\Delta t} - 2 - \frac{2m}{\hbar^2} (\Delta x)^2 V^j \right]}{=: b^j} \psi_{n+1}^j + \psi_{n+1}^{j-1} \\ = & -\psi_n^{j+1} + \left[i \frac{4m}{\hbar} \frac{(\Delta x)^2}{\Delta t} + 2 + \frac{2m}{\hbar^2} (\Delta x)^2 V^j \right] \psi_n^j - \psi_n^{j-1} =: \Omega_n^j . \end{aligned} \quad (3.9)$$

Wenn $\psi_{n+1} \in \mathbb{C}^J$ als Vektor mit den Komponenten ψ_{n+1}^j aufgefasst wird (äquivalent für Ω_n), entspricht die Gleichung (3.9), über alle j ausgeführt, einem Gleichungssystem mit der tridiagonalen Matrix T

$$T\psi_{n+1} = \Omega_n . \quad (3.10)$$

Somit können bei bekanntem ψ_n zur Zeit t_n die zeitlich nachfolgenden Wellenfunktionen ψ_{n+m} mit $m \in \mathbb{N}$ berechnet werden. Dabei besteht T aus konstanten Neben- und j -abhängigen Hauptdiagonalelementen der Form

$$T = \begin{bmatrix} b^1 & c & & a' \\ a & b^2 & c & \\ & a & b^3 & \ddots \\ & & \ddots & \ddots & c \\ c' & & & a & b^J \end{bmatrix} \quad (3.11)$$

mit

$$a = c = 1, b^j = i \frac{4m (\Delta x)^2}{\hbar \Delta t} - 2 - \frac{2m}{\hbar^2} (\Delta x)^2 V^j . \quad (3.12)$$

Im Falle einer periodischen Randbedingung (2.5) gilt $a' = c' = 1$, sowie bei fester Randbedingung (2.6) $a' = c' = 0$.

3.2 Stabilitätsanforderungen

Zur Überprüfung der im Abschnitt 2 geforderten Bedingungen der Unitarität (2.8) und Energieerhaltung (2.11) wird zunächst der Zeitentwicklungsoperator \hat{U} der Crank-Nicolson-Methode ermittelt, indem Gleichung (3.5) in (3.3) eingesetzt wird

$$\frac{i\hbar}{\Delta t} (\psi_{n+1}^j - \psi_n^j) = \frac{1}{2} \left[(\hat{H}\psi)_n^j + (\hat{H}\psi)_{n+1}^j \right] \quad (3.13)$$

und nach ψ_{n+1}^j bzw. ψ_n^j umgestellt wird

$$\psi_{n+1}^j = \underbrace{\left[1 + \frac{i \Delta t}{\hbar} \frac{\hat{H}}{2} \right]^{-1} \left[1 - \frac{i \Delta t}{\hbar} \frac{\hat{H}}{2} \right]}_{= \hat{q}^{-1} \hat{r} = \hat{U} \text{ (Zeitentwicklungsoperator)}} \psi_n^j . \quad (3.14)$$

Dabei gilt

$$[\hat{q}, \hat{r}] = [\hat{H}, \hat{r}] = [\hat{H}, \hat{q}] = 0 , \quad (3.15)$$

sowie aufgrund des hermiteschen Hamiltonoperators

$$\hat{q}^\dagger = \hat{r} . \quad (3.16)$$

3.2.1 Unitarität

Es wird gezeigt, dass der Zeitentwicklungsoperator \hat{U} die Bedingung (2.8) mit $\hat{U}^\dagger \hat{U} = 1$ erfüllt

$$\begin{aligned} \hat{U}^\dagger \hat{U} &= \left\{ \hat{q}^{-1} \hat{r} \right\}^\dagger \hat{q}^{-1} \hat{r} \\ &= \hat{r}^\dagger \hat{q}^{-1\dagger} \hat{q}^{-1} \hat{r} \stackrel{(\hat{q}^{-1\dagger} = \hat{q}^{\dagger-1})}{=} \hat{r}^\dagger \hat{q}^{\dagger-1} \hat{q}^{-1} \hat{r} \stackrel{(3.16)}{=} \hat{q} \hat{r}^{-1} \hat{q}^{-1} \hat{r} \stackrel{=1}{=} \hat{q} \hat{r}^{-1} \underbrace{\left(\hat{q} \hat{q}^{-1} \right)}_{=1} \stackrel{(3.15)}{=} \hat{q} \hat{r}^{-1} \underbrace{\left(\hat{q}^{-1} \hat{q} \right)}_{=1} \hat{r} \hat{q}^{-1} = 1 . \end{aligned} \quad (3.17)$$

Somit ist die Unitarität des Zeitentwicklungsoperators \hat{U} gewährleistet.

3.2.2 Energieerhaltung

Nach der Bedingung (2.11) muss die Relation $\hat{U}^\dagger \hat{H} \hat{U} = \hat{H}$ gelten, um den Gesamtenergieerwartungswert zu erhalten. Der Zeitentwicklungsoperator \hat{U} erfüllt dieses Kriterium:

$$\begin{aligned} \hat{U}^\dagger \hat{H} \hat{U} &= \{\hat{q}^{-1} \hat{r}\}^\dagger \hat{H} \hat{q}^{-1} \hat{r} \\ &\stackrel{(3.17)}{=} \hat{q} \hat{r}^{-1} \hat{H} \hat{q}^{-1} \hat{r} \underbrace{\hat{q} \hat{q}^{-1}}_{=1} \stackrel{(3.15)}{=} \hat{q} \hat{r}^{-1} \hat{H} \underbrace{(\hat{q}^{-1} \hat{q})}_{=1} \hat{r} \hat{q}^{-1} \stackrel{(3.15)}{=} \hat{q} \underbrace{(\hat{r}^{-1} \hat{r})}_{=1} \hat{H} \hat{q}^{-1} \stackrel{(3.15)}{=} \hat{H} \underbrace{(\hat{q} \hat{q}^{-1})}_{=1} = \hat{H} . \end{aligned} \quad (3.18)$$

3.2.3 Ungenauigkeit

Der Fehler E des Crank-Nicolson-Verfahrens wird nach der Gleichung (2.12) berechnet und wächst asymptotisch mit $(\Delta t)^3$

$$\begin{aligned} E &= \left\| \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \Delta t\right) - \hat{U} \right\| \\ &= \left\| \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \Delta t\right) - \left[1 + \frac{i}{\hbar} \frac{\Delta t}{2} \hat{H}\right]^{-1} \left[1 - \frac{i}{\hbar} \frac{\Delta t}{2} \hat{H}\right] \right\| \\ &\stackrel{(0 = [\hat{H}, \hat{H}])}{=} \left\| \exp\left(\frac{i}{\hbar} \hat{H} \frac{\Delta t}{2}\right)^{-1} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \frac{\Delta t}{2}\right) - \left[1 + \frac{i}{\hbar} \frac{\Delta t}{2} \hat{H}\right]^{-1} \left[1 - \frac{i}{\hbar} \frac{\Delta t}{2} \hat{H}\right] \right\| \\ &\stackrel{(A.1)}{=} \left\| \left(\left[1 + \frac{i}{\hbar} \frac{\Delta t}{2} \hat{H}\right]^{-1} + \mathcal{O}((\Delta t)^2)\right) \left(\left[1 - \frac{i}{\hbar} \frac{\Delta t}{2} \hat{H}\right] + \mathcal{O}((\Delta t)^2)\right) - \left[1 + \frac{i}{\hbar} \frac{\Delta t}{2} \hat{H}\right]^{-1} \left[1 - \frac{i}{\hbar} \frac{\Delta t}{2} \hat{H}\right] \right\| \\ &\stackrel{(A.1)}{=} \left\| \left(\left[1 + \frac{i}{\hbar} \frac{\Delta t}{2} \hat{H}\right]^{-1} \left[1 - \frac{i}{\hbar} \frac{\Delta t}{2} \hat{H}\right] + \mathcal{O}((\Delta t)^3)\right) - \left[1 + \frac{i}{\hbar} \frac{\Delta t}{2} \hat{H}\right]^{-1} \left[1 - \frac{i}{\hbar} \frac{\Delta t}{2} \hat{H}\right] \right\| \\ &= \mathcal{O}((\Delta t)^3) . \end{aligned} \quad (3.19)$$

3.2.4 Konvergenz

Da das Crank-Nicolson-Verfahren auf der Grundlage der Finite-Differenzen-Methode beruht, erfüllt das Verfahren die Konvergenzbedingung bei infinitesimal dicht gewählter Raumzeitdiskretisierung.

3.3 Berechnung

Wie schon im Abschnitt 3.1 vorbereitet, gilt es nun, das lineare Gleichungssystem (3.10) mit der tridiagonalen Matrix T (3.11) und Ω_n^j aus der Gl. (3.9) zu lösen

$$\begin{bmatrix} b^1 & c & & & a' \\ a & b^2 & c & & \\ & a & b^3 & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & c \\ c' & & & a & b^J \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi^1 \\ \psi^2 \\ \psi^3 \\ \vdots \\ \psi^J \end{bmatrix}_{n+1} = \begin{bmatrix} \Omega^1 \\ \Omega^2 \\ \Omega^3 \\ \vdots \\ \Omega^J \end{bmatrix}_n . \quad (3.20)$$

Bei periodischer Randbedingung nach Gl. (2.5) gilt $a' = c' = 1$, sowie $a' = c' = 0$ bei fester Randbedingung nach Gl. (2.6). Sofern die Randbedingung fest ist, kann die Gleichung (3.20) mit dem

Thomas - Algorithmus A.2 gelöst werden. Bei periodischer Randbedingung muss die Matrix T verkleinert werden [Kar]. Die Verkleinerung sieht vor, die letzte Gleichung des Systems zunächst nicht zu beachten, sodass das Gleichungssystem mit der verkleinerten Matrix T_c folgende Form erhält

$$\underbrace{\begin{bmatrix} b^1 & c & & & \\ a & b^2 & c & & \\ & a & b^3 & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & c \\ & & & a & b^{J-1} \end{bmatrix}}_{=T_c} \begin{bmatrix} \psi^1 \\ \psi^2 \\ \psi^3 \\ \vdots \\ \psi^{J-1} \end{bmatrix}_{n+1} = \begin{bmatrix} \Omega^1 \\ \Omega^2 \\ \Omega^3 \\ \vdots \\ \Omega^{J-1} \end{bmatrix}_n - \underbrace{\begin{bmatrix} a \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ c \end{bmatrix}}_{=\omega} \psi_{n+1}^J . \quad (3.21)$$

Die letzte Gleichung lautet:

$$c\psi_{n+1}^1 + a\psi_{n+1}^{J-1} + b^J\psi_{n+1}^J = \Omega_n^J . \quad (3.22)$$

Ansatz. Für $1 \leq j < J$ wird die Lösung von ψ_{n+1}^j als Summe beider Vektoren $\chi_{(1)}, \chi_{(2)} \in \mathbb{C}^{J-1}$ geschrieben

$$\psi_{n+1}^j = \chi_{(1)}^j + \chi_{(2)}^j \psi_{n+1}^J . \quad (3.23)$$

Eingesetzt in das Gleichungssystem (3.21) ergibt sich mit $\Omega_{n_c}^j = \Omega_n^j$

$$\begin{aligned} T_c (\chi_{(1)} + \chi_{(2)} \psi_{n+1}^J) &= \Omega_{n_c} - \omega \psi_{n+1}^J \\ \Leftrightarrow T_c \chi_{(1)} &= \Omega_{n_c} - [T_c \chi_{(2)} + \omega] \psi_{n+1}^J . \end{aligned} \quad (3.24)$$

Gelöst wird dieses System mit der Lösung des folgenden Gleichungssystems

$$\begin{aligned} T_c \chi_{(1)} &= \Omega_{n_c} \\ T_c \chi_{(2)} &= -\omega . \end{aligned} \quad (3.25)$$

Die Vektoren $\chi_{(1)}$ und $\chi_{(2)}$ können hierbei mit dem Thomas - Algorithmus A.2 berechnet werden. Zur Bestimmung von ψ_{n+1}^J wird die Gleichung (3.23) in (3.22) mit $a = c = 1$ eingesetzt

$$\begin{aligned} &(\chi_{(1)}^1 + \chi_{(2)}^1 \psi_{n+1}^J) + (\chi_{(1)}^{J-1} + \chi_{(2)}^{J-1} \psi_{n+1}^J) + b^J \psi_{n+1}^J = \Omega_n^J \\ \Leftrightarrow &\psi_{n+1}^J (\chi_{(2)}^1 + \chi_{(2)}^{J-1} + b^J) = \Omega_n^J - \chi_{(1)}^1 - \chi_{(1)}^{J-1} \\ \Leftrightarrow &\psi_{n+1}^J = \frac{\Omega_n^J - \chi_{(1)}^1 - \chi_{(1)}^{J-1}}{\chi_{(2)}^1 + \chi_{(2)}^{J-1} + b^J} . \end{aligned}$$

Nun können die restlichen Elemente ψ_{n+1}^j mithilfe der Relation (3.23) bestimmt werden.

Split - Operator - Verfahren

Die Split - Operator - Methode sieht vor, den Zeitentwicklungsoperator \hat{U} in kinetische und potentielle Exponentialoperatoren zu zerlegen, sodass die Wirkung von \hat{U} auf ψ_n mithilfe der Fourier-Transformation berechnet werden kann. Die Zerlegung des Exponentialoperators geschieht mithilfe der Zassenhaus - Formel [CMN12]. Das Verfahren gewährleistet die Unitarität, jedoch erhält es hingegen zum Crank - Nicolson - Verfahren den Erwartungswert der Gesamtenergie bei beliebiger Wahl des Potentials nicht.

4.1 Ansatz

Die allgemeine Lösung der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung (1.1) wird durch den Zeitentwicklungsoperator \hat{U} im Raumzeitgitter folgendermaßen beschrieben

$$\begin{aligned}\psi_{n+1} &= \underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\Delta t}}_{=\hat{U}}\psi_n \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar}\left(-\frac{\hbar^2\hat{k}^2}{2m}+\hat{V}\right)\Delta t}\psi_n \\ &= e^{(\hat{T}_U+\hat{V}_U)\Delta t}\psi_n\end{aligned}\tag{4.1}$$

mit

$$\hat{T}_U := \frac{i\hbar}{2m}\hat{k}^2, \quad \hat{V}_U := -\frac{i}{\hbar}\hat{V},\tag{4.2}$$

wobei \hat{k} dem Wellenzahloperator entspricht.

4.1.1 Zassenhaus - Formel

Eine bewährte Methode, den Zeitentwicklungsoperator aus der Gleichung (4.1) aufzuspalten, ist die des deutschen Mathematikers Hans Julius Zassenhaus [CMN12]. Die Zassenhaus - Formel sieht vor, einen Exponentialoperator mit zwei summierenden Operatoren \hat{X} und \hat{Y} (hierbei auf den gleichen Hilbertraum wirkend und multipliziert mit $\lambda \in \mathbb{R}$) als ein unendliches Produkt umzuschreiben

$$e^{\lambda(\hat{X}+\hat{Y})} = e^{\lambda\hat{X}}e^{\lambda\hat{Y}}\prod_{j=2}^{\infty}e^{\lambda^j\hat{C}_j}.\tag{4.3}$$

Die Operatoren \hat{C}_j können dabei folgendermaßen berechnet werden.

Sei $N \in \mathbb{N} \setminus \{0\}$

$$f_N(\lambda) := \prod_{j=N+1}^{\infty} e^{\lambda^j \hat{C}_j} \quad (4.4)$$

dann gilt

$$\left. \frac{\partial^{N+1} f_N}{\partial \lambda^{N+1}}(\lambda) \right|_{\lambda=0} = (N+1)! \hat{C}_{N+1} . \quad (4.5)$$

Ebenfalls gilt für $f_N(\lambda)$ nach der Gleichung (4.3) durch das Herüberziehen A.3 der rechtseitigen Elemente mit λ^j ($0 < j < N+1$) auf die linke Seite

$$f_N(\lambda) = \left(\prod_{j=0}^{N-2} e^{\lambda^{N-j} \hat{C}_{N-j}} \right) e^{-\lambda \hat{Y}} e^{-\lambda \hat{X}} e^{\lambda(\hat{X}+\hat{Y})} . \quad (4.6)$$

Demnach können die Operatoren \hat{C}_j nach folgender Vorschrift durch das Einsetzen von Gl. (4.6) in (4.5) rekursiv berechnet werden

$$\hat{C}_{N+1} = \frac{1}{(N+1)!} \left[\frac{\partial^{N+1}}{\partial \lambda^{N+1}} \left(\prod_{j=0}^{N-2} e^{\lambda^{N-j} \hat{C}_{N-j}} \right) e^{-\lambda \hat{Y}} e^{-\lambda \hat{X}} e^{\lambda(\hat{X}+\hat{Y})} \right]_{\lambda=0} . \quad (4.7)$$

Für die ersten zwei weiteren Glieder des Produkts (4.3) ergibt sich

$$\begin{aligned} \hat{C}_2 &= \frac{1}{2!} \left[\frac{\partial^2}{\partial \lambda^2} e^{-\lambda \hat{Y}} e^{-\lambda \hat{X}} e^{\lambda(\hat{X}+\hat{Y})} \right]_{\lambda=0} = -\frac{1}{2} [\hat{X}, \hat{Y}] \\ \hat{C}_3 &= \frac{1}{3!} \left[\frac{\partial^3}{\partial \lambda^3} e^{-\lambda^2 \hat{C}_2} e^{-\lambda \hat{Y}} e^{-\lambda \hat{X}} e^{\lambda(\hat{X}+\hat{Y})} \right]_{\lambda=0} = \frac{1}{6} (2[\hat{Y}, [\hat{X}, \hat{Y}]] + [\hat{X}, [\hat{X}, \hat{Y}]]) \end{aligned} \quad (4.8)$$

4.1.2 Zeitentwicklungsoperatoren

Auf Grundlage der Zassenhaus - Formel (4.3) werden nachfolgend zwei verschiedene Zeitentwicklungsoperatoren betrachtet [Sar09]

$$\begin{aligned} \hat{U} &\stackrel{(4.1)}{=} e^{\hat{T}_U \Delta t + \hat{V}_U \Delta t} \approx e^{\hat{T}_U \Delta t} e^{\hat{V}_U \Delta t} = \hat{U}_1 \\ &= e^{\frac{\hat{V}_U}{2} \Delta t + \hat{T}_U \Delta t + \frac{\hat{V}_U}{2} \Delta t} \approx e^{\frac{\hat{V}_U}{2} \Delta t} e^{\hat{T}_U \Delta t} e^{\frac{\hat{V}_U}{2} \Delta t} = \hat{U}_2 \end{aligned} \quad (4.9)$$

Dabei wurde bei \hat{U}_2 zweimal die Zassenhaus - Formel angewendet.

Im Sinne der allgemeinen Lösung der Schrödinger-Gleichung (4.1) kann die Wirkung von $\hat{U}_{1/2}$ mithilfe der Fourier-Transformation \mathcal{F} berechnet werden

$$\begin{aligned} \psi_{n+1} &= \mathcal{F}^{-1} \left(\mathcal{F} \left(\hat{U}_1 \psi_n \right) \right) \\ &\stackrel{(4.9)}{=} \mathcal{F}^{-1} \left(\mathcal{F} \left(e^{\hat{T}_U \Delta t} e^{\hat{V}_U \Delta t} \psi_n \right) \right) \\ &\stackrel{A.4.1}{=} \mathcal{F}^{-1} \left(e^{-\hat{T}_U \Delta t} \mathcal{F} \left(e^{\hat{V}_U \Delta t} \psi_n \right) \right) \\ &\stackrel{(4.2)}{=} \mathcal{F}^{-1} \left(e^{-\frac{i\hbar}{2m} \hat{k}^2 \Delta t} \mathcal{F} \left(e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{V} \Delta t} \psi_n \right) \right) \end{aligned} \quad (4.10)$$

bzw.

$$\begin{aligned}\psi_{n+1} &= \mathcal{F}^{-1} \left(\mathcal{F} \left(\hat{U}_2 \psi_n \right) \right) \\ &= e^{-i \frac{\hat{V}}{2\hbar} \Delta t} \mathcal{F}^{-1} \left(e^{-\frac{\hbar}{2m} k^2 \Delta t} \mathcal{F} \left(e^{-i \frac{\hat{V}}{2\hbar} \Delta t} \psi_n \right) \right) .\end{aligned}\quad (4.11)$$

4.2 Stabilitätsanforderungen

Im Folgenden wird gezeigt, dass das Split - Operator - Verfahren mit den Zeitentwicklungsoperatoren $\hat{U}_{1/2}$ die Forderung der Unitarität erfüllt, jedoch nicht den Erwartungswert der Gesamtenergie erhält.

4.2.1 Unitarität

Die Unitaritätsbedingung (2.8) wird von den Operatoren \hat{U}_1 und \hat{U}_2 erfüllt

$$\hat{U}_1^\dagger \hat{U}_1 = \left(e^{\hat{T}_U \Delta t} e^{\hat{V}_U \Delta t} \right)^\dagger e^{\hat{T}_U \Delta t} e^{\hat{V}_U \Delta t} = e^{-\hat{V}_U \Delta t} e^{-\hat{T}_U \Delta t} e^{\hat{T}_U \Delta t} e^{\hat{V}_U \Delta t} = 1 , \quad (4.12)$$

$$\hat{U}_2^\dagger \hat{U}_2 = \left(e^{\frac{\hat{V}_U}{2} \Delta t} e^{\hat{T}_U \Delta t} e^{\frac{\hat{V}_U}{2} \Delta t} \right)^\dagger e^{\frac{\hat{V}_U}{2} \Delta t} e^{\hat{T}_U \Delta t} e^{\frac{\hat{V}_U}{2} \Delta t} = e^{-\frac{\hat{V}_U}{2} \Delta t} e^{-\hat{T}_U \Delta t} e^{-\frac{\hat{V}_U}{2} \Delta t} e^{\frac{\hat{V}_U}{2} \Delta t} e^{\hat{T}_U \Delta t} e^{\frac{\hat{V}_U}{2} \Delta t} = 1 . \quad (4.13)$$

4.2.2 Energieerhaltung

Der Gesamtenergieerwartungswert, wie in Gleichung (2.11) gefordert, ist beim Split - Operator - Verfahren nicht erhalten

$$\begin{aligned}\hat{U}_1^\dagger \hat{H} \hat{U}_1 &= \left(e^{\hat{T}_U \Delta t} e^{\hat{V}_U \Delta t} \right)^\dagger \hat{H} e^{\hat{T}_U \Delta t} e^{\hat{V}_U \Delta t} \\ &= e^{-\hat{V}_U \Delta t} e^{-\hat{T}_U \Delta t} \hat{H} e^{\hat{T}_U \Delta t} e^{\hat{V}_U \Delta t} \\ &= \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{j!k!l!m!} (-\hat{V}_U)^j (-\hat{T}_U)^k \hat{H} (\hat{T}_U)^l (\hat{V}_U)^m (\Delta t)^{j+k+l+m} \\ &= \hat{H} + \left(-\hat{V}_U \hat{H} - \hat{T}_U \hat{H} + \hat{H} \hat{T}_U + \hat{H} \hat{V}_U \right) \Delta t + \mathcal{O}((\Delta t)^2) \\ &= \hat{H} + \left[\hat{H}, \hat{T}_U + \hat{V}_U \right] \Delta t + \mathcal{O}((\Delta t)^2) \\ &= \hat{H} - \frac{i}{\hbar} \left[\hat{H}, \hat{H} \right] \Delta t + \mathcal{O}((\Delta t)^2) \\ &= \hat{H} + \mathcal{O}((\Delta t)^2) ,\end{aligned}\quad (4.14)$$

$$\begin{aligned}
 & \hat{U}_2^\dagger \hat{H} \hat{U}_2 \\
 &= \left(e^{\frac{\hat{V}_U}{2} \Delta t} e^{\hat{T}_U \Delta t} e^{\frac{\hat{V}_U}{2} \Delta t} \right)^\dagger \hat{H} e^{\frac{\hat{V}_U}{2} \Delta t} e^{\hat{T}_U \Delta t} e^{\frac{\hat{V}_U}{2} \Delta t} \\
 &= e^{-\frac{\hat{V}_U}{2} \Delta t} e^{-\hat{T}_U \Delta t} e^{-\frac{\hat{V}_U}{2} \Delta t} \hat{H} e^{\frac{\hat{V}_U}{2} \Delta t} e^{\hat{T}_U \Delta t} e^{\frac{\hat{V}_U}{2} \Delta t} \\
 &= \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{p=0}^{\infty} \frac{1}{j!k!l!m!n!p!} \left(-\frac{\hat{V}_U}{2}\right)^j (-\hat{T}_U)^k \left(-\frac{\hat{V}_U}{2}\right)^l \hat{H} \left(\frac{\hat{V}_U}{2}\right)^m (\hat{T}_U)^n \left(\frac{\hat{V}_U}{2}\right)^p (\Delta t)^{j+k+l+m+n+p} \\
 &= \hat{H} + \left(-\frac{\hat{V}_U}{2} \hat{H} - \hat{T}_U \hat{H} - \frac{\hat{V}_U}{2} \hat{H} + \hat{H} \frac{\hat{V}_U}{2} + \hat{H} \hat{T}_U + \hat{H} \frac{\hat{V}_U}{2}\right) \Delta t + \mathcal{O}((\Delta t)^2) \\
 &= \hat{H} + [\hat{H}, \hat{V}_U + \hat{T}_U] \Delta t + \mathcal{O}((\Delta t)^2) \\
 &= \hat{H} - \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{H}] \Delta t + \mathcal{O}((\Delta t)^2) \\
 &= \hat{H} + \mathcal{O}((\Delta t)^2) .
 \end{aligned} \tag{4.15}$$

4.2.3 Ungenauigkeit

Der Zeitentwicklungsoperator mit dem geringsten Fehler im Sinne der Gleichung (2.12) ist \hat{U}_2 mit einem asymptotischen Wachstum von $\mathcal{O}((\Delta t)^3)$, hingegen \hat{U}_1 mit $\mathcal{O}((\Delta t)^2)$, sodass für den späteren Vergleich angenommen wird, dass die Berechnungen mit \hat{U}_2 genauere Ergebnisse liefern

$$\begin{aligned}
 E_1 &= \left\| e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \Delta t} - \hat{U}_1 \right\| \\
 &= \left\| e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \Delta t} - \left(e^{\hat{T}_U \Delta t} e^{\hat{V}_U \Delta t} \right) \right\| \\
 &= \left\| \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{j!} \left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \Delta t\right)^j - \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{k!l!} (\hat{T}_U)^k (\hat{V}_U)^l (\Delta t)^{k+l} \right\| \\
 &= \left\| (1 - 1) + \underbrace{\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} - \frac{i\hbar}{2m} \hat{k}^2 + \frac{i}{\hbar} \hat{V}\right)}_{= -\frac{i}{\hbar} (\hat{H} - \hat{H}) = 0} \Delta t + \mathcal{O}((\Delta t)^2) \right\| \\
 &= \mathcal{O}((\Delta t)^2) ,
 \end{aligned} \tag{4.16}$$

$$\begin{aligned}
 & E_2 \\
 &= \left\| e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \Delta t} - \hat{U}_2 \right\| \\
 &= \left\| e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \Delta t} - \left(e^{\frac{\hat{V}_U}{2} \Delta t} e^{\hat{T}_U \Delta t} e^{\frac{\hat{V}_U}{2} \Delta t} \right) \right\| \\
 &= \left\| \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{j!} \left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \Delta t \right)^j - \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{k!l!m!} \left(\frac{\hat{V}_U}{2} \right)^k (\hat{T}_U)^l \left(\frac{\hat{V}_U}{2} \right)^m (\Delta t)^{k+l+m} \right\| \\
 &= \left\| (1-1) + \left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} - \frac{\hat{V}_U}{2} - \hat{T}_U - \frac{\hat{V}_U}{2} \right) \Delta t \right. \\
 &\quad + \left(\underbrace{-\frac{\hat{H}^2}{2! \hbar^2}}_{=-\frac{1}{2\hbar^2} \left(\frac{\hbar}{i} (\hat{T}_U + \hat{V}_U) \right)^2} - \frac{1}{2!} \left\{ \frac{\hat{V}_U^2}{4} + \hat{T}_U^2 + \frac{\hat{V}_U^2}{4} \right\} - \frac{1}{1!1!} \left\{ \frac{\hat{V}_U}{2} \hat{T}_U + \frac{\hat{V}_U^2}{4} + \hat{T}_U \frac{\hat{V}_U}{2} \right\} \right) ((\Delta t)^2) + \mathcal{O}((\Delta t)^3) \left. \right\| \\
 &= \left\| 0 + \underbrace{\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} - \frac{i\hbar}{2m} \hat{k}^2 + \frac{i}{\hbar} \hat{V} \right)}_{=-\frac{i}{\hbar} (\hat{H} - \hat{H})=0} \Delta t + \frac{1}{2} (\hat{T}_U^2 + \hat{V}_U^2 + \hat{T}_U \hat{V}_U + \hat{V}_U \hat{T}_U) ((\Delta t)^2) \right. \\
 &\quad \left. - \frac{1}{2} (\hat{T}_U^2 + \hat{V}_U^2 + \hat{T}_U \hat{V}_U + \hat{V}_U \hat{T}_U) ((\Delta t)^2) + \mathcal{O}((\Delta t)^3) \right\| \\
 &= \mathcal{O}((\Delta t)^3) .
 \end{aligned} \tag{4.17}$$

4.2.4 Konvergenz

Um zu zeigen, dass der Zeitentwicklungsoperator \hat{U}_1 und somit auch \hat{U}_2 für $\Delta t \rightarrow 0$ gegen \hat{U} konvergiert, wird die Lie-Trotter Produktformel bewiesen.

Zu zeigen. Seien \hat{A} und \hat{B} Operatoren, die auf denselben Hilbertraum wirken, so gilt

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^N e^{\frac{\hat{A}}{N}} e^{\frac{\hat{B}}{N}} = e^{\hat{A} + \hat{B}} . \tag{4.18}$$

Beweis. Mithilfe der Zassenhaus - Formel (4.3) und der Abschätzung (4.16) folgt mit $\lambda \in \mathbb{R}$

$$e^{\lambda \hat{A}} e^{\lambda \hat{B}} = e^{\lambda(\hat{A} + \hat{B})} + \mathcal{O}(\lambda^2) .$$

Daraus folgt bei zweifacher Hintereinander-Ausführung des Ausdrucks

$$(e^{\lambda \hat{A}} e^{\lambda \hat{B}})^2 = (e^{\lambda(\hat{A} + \hat{B})} + \mathcal{O}(\lambda^2))^2 = e^{2\lambda(\hat{A} + \hat{B})} + \mathcal{O}(\lambda^2)$$

und somit bei N-facher Ausführung folgende Relation

$$\prod_{n=1}^N e^{\lambda \hat{A}} e^{\lambda \hat{B}} = e^{N\lambda(\hat{A} + \hat{B})} + \mathcal{O}(\lambda^2) .$$

Sei nun $\lambda = \frac{1}{N}$, so folgt

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^N e^{\frac{\hat{A}}{N}} e^{\frac{\hat{B}}{N}} = e^{\hat{A} + \hat{B}} .$$

□

Wenn nun die Operatoren \hat{A} und \hat{B} den Operatoren \hat{T}_U und \hat{V}_U entsprechen, sowie die Wahl der Zeitschritte auf $\Delta t = \frac{1}{N}$ gesetzt wird, ist die Konvergenz der numerischen an die analytische Lösung bewiesen. Die Konvergenz von \hat{U}_2 ist ebenfalls bewiesen, da \hat{U}_2 der zweifachen Hintereinanderausführung der Zassenhaus - Formel entspricht.

4.3 Berechnung

Um die Ansätze (4.10) und (4.11) berechnen zu können, wird der Übergang der kontinuierlichen zur diskreten (inversen) Fourier-Transformation erläutert [Van].

Die kontinuierliche Form der Fourier-Transformation A.4

$$\phi(k, t) = \mathcal{F}(\psi)(k, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} dx \psi(x, t) e^{-ik \cdot x} \quad (4.19)$$

geht in folgende diskretisierte Form über

$$\phi_n^l \approx \frac{\Delta x}{\sqrt{2\pi}} \sum_{j=1}^J \psi_n^j e^{-ik_1 x_j} . \quad (4.20)$$

Sei nun die Diskretisierung des hierbei begrenzten k-Raums durch das Nyquist - Shannon - Abtasttheorem A.4.2 festgelegt mit

$$k_1 := -\frac{\pi}{\Delta x} , \quad \Delta k := \frac{2\pi}{J\Delta x} . \quad (4.21)$$

Es folgt durch Einsetzen

$$\begin{aligned} \phi_n^l &\approx \frac{\Delta x}{\sqrt{2\pi}} \sum_{j=1}^J \psi_n^j e^{-i[k_1 + \Delta k(l-1)][x_1 + \Delta x(j-1)]} \\ &= \frac{\Delta x}{\sqrt{2\pi}} \sum_{j=1}^J \psi_n^j e^{-ik_1 x_j} e^{-i\Delta k(l-1)x_1} e^{-i\Delta k(l-1)\Delta x(j-1)} \\ &\stackrel{(4.21)}{=} \frac{\Delta x}{\sqrt{2\pi}} \sum_{j=1}^J \psi_n^j e^{-ik_1 x_j} e^{-i\Delta k(l-1)x_1} e^{-2\pi i \frac{(l-1)(j-1)}{J}} \\ \Leftrightarrow \left[\frac{\sqrt{2\pi}}{\Delta x} \phi_n^l e^{i\Delta k(l-1)x_1} \right] &\approx \sum_{j=1}^J \left[\psi_n^j e^{-ik_1 x_j} \right] e^{-2\pi i \frac{(l-1)(j-1)}{J}} . \end{aligned} \quad (4.22)$$

Äquivalent wird die diskrete Form der inversen Fourier-Transformation A.4 beschrieben

$$\begin{aligned} \psi_n^j &\approx \frac{\Delta k}{\sqrt{2\pi}} \sum_{l=1}^J \phi_n^l e^{ik_1 x_j} \\ &\stackrel{(4.21)}{=} \frac{\sqrt{2\pi}}{J\Delta x} \sum_{l=1}^J \phi_n^l e^{i[k_1 + \Delta k(l-1)][x_1 + \Delta x(j-1)]} \\ &= \frac{\sqrt{2\pi}}{J\Delta x} \sum_{l=1}^J \phi_n^l e^{ik_1 x_j} e^{i\Delta k(l-1)x_1} e^{i\Delta k\Delta x(l-1)(j-1)} \\ &\stackrel{(4.21)}{=} \frac{\sqrt{2\pi}}{J\Delta x} \sum_{l=1}^J \phi_n^l e^{ik_1 x_j} e^{i\Delta k(l-1)x_1} e^{2\pi i \frac{(l-1)(j-1)}{J}} \\ \Leftrightarrow \left[\psi_n^j e^{-ik_1 x_j} \right] &\approx \frac{1}{J} \sum_{l=1}^J \left[\frac{\sqrt{2\pi}}{\Delta x} \phi_n^l e^{i\Delta k(l-1)x_1} \right] e^{2\pi i \frac{(l-1)(j-1)}{J}} . \end{aligned} \quad (4.23)$$

Zusammengefasst entsprechen die Gleichungen (4.22) und (4.23) der Form der diskreten Fourier-Transformation, wobei in eckigen Klammern die dazugehörige Modifikation der Wellenfunktionen ψ und ϕ steht

$$\begin{aligned} \text{Fourier-Transformation} &\rightarrow \left[\frac{\sqrt{2\pi}}{\Delta x} \phi_n^l e^{i\Delta k(l-1)x_1} \right] = \sum_{j=1}^J \left[\psi_n^j e^{-ik_1 x_j} \right] e^{-2\pi i \frac{(l-1)(j-1)}{J}} \\ \text{inverse Fourier-Transformation} &\rightarrow \left[\psi_n^j e^{-ik_1 x_j} \right] = \frac{1}{J} \sum_{l=1}^J \left[\frac{\sqrt{2\pi}}{\Delta x} \phi_n^l e^{i\Delta k(l-1)x_1} \right] e^{2\pi i \frac{(l-1)(j-1)}{J}} . \end{aligned} \quad (4.24)$$

Mit den modifizierten Wellenfunktionen $\psi_n^j = \psi_n^j e^{-ik_1 x_j}$ und $\phi_n^l = \frac{\sqrt{2\pi}}{\Delta x} \phi_n^l e^{i\Delta k(l-1)x_1}$ ergibt sich mit $j-1 \rightarrow j$ und $l-1 \rightarrow l$ eine klarere Form der diskreten (inversen) Fourier-Transformation

$$\begin{aligned} \phi_n^l &= \sum_{j=0}^{J-1} \psi_n^j e^{-2\pi i \frac{lj}{J}} \\ \psi_n^j &= \frac{1}{J} \sum_{l=0}^{J-1} \phi_n^l e^{2\pi i \frac{lj}{J}} . \end{aligned} \quad (4.25)$$

Die Transformationen aus Gl. (4.25) können effizient mit der schnellen Fourier-Transformation A.4.3 berechnet werden.

Vergleich

Es werden nachfolgend die theoretisch eingeführten Verfahren numerisch in den Größen des Fehlers E nach Gl. (2.12) und des Erwartungswertes der Gesamtenergie bzw. des Ortes miteinander verglichen. Seien nun Crank-Nicolson mit CN und Split-Operator mit SO abgekürzt.

Nach den Überlegungen aus den Kapiteln 3 und 4 sollen die jeweiligen Berechnungen folgende Eigenschaften aufweisen (siehe Abbildung 5.1).

Method	Fehler E	$\Delta \langle \hat{H} \rangle$
CN	$\mathcal{O}((\Delta t)^3)$	$const$
SO	$\mathcal{O}((\Delta t)^3)$	$\mathcal{O}((\Delta t)^2)$

Tabelle 5.1: Aus den theoretischen Überlegungen abgeleitete Eigenschaften des CN- bzw. SO-Verfahrens für den Fehler E nach Gl. (2.12) und $\Delta \langle \hat{H} \rangle$ nach Gl. (5.4).

Die Berechnungen werden mithilfe von JavaScript im Browser Firefox (Ubuntu) Version 43.0 durchgeführt (siehe Kapitel 6).

Zur Auswertung wird unter periodischen Randbedingungen die Propagation eines Gaußschen Wellenpaketes ohne äußeres Potential und eines gausförmigen kohärenten Zustands im harmonischen Oszillator betrachtet.

5.1 Vergleichsgrößen

Der Fehler E nach Gl. (2.12) zum Zeitpunkt t_n als Maß der Erhaltung der Unitarität des Zeitentwicklungsoperators wird mit der Relation

$$E_n \stackrel{(2.12)}{=} \left\| \left(\exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \Delta t\right) - \hat{U} \right) \psi \right\| = \sqrt{\Delta x \sum_{j=1}^J \left| (\psi_n^j)_{\text{theo}} - (\psi_n^j)_{\text{CN/SO}} \right|^2} \quad (5.1)$$

berechnet, wobei $(\psi_n^j)_{\text{theo}}$ der analytischen Lösung der Propagation der Wellenfunktion entspricht. Der Erwartungswert der Gesamtenergie ist für die CN-Methode über die diskretisierte Form des Hamilton-

Operators (3.7) gegeben

$$\langle \hat{H}_{\text{CN}} \rangle_n = \frac{\sum_{j=1}^J \psi_n^{*j} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\psi_n^{j+1} - 2\psi_n^j + \psi_n^{j-1}}{(\Delta x)^2} \right) + V^j \psi_n^j \right)}{\sum_{j=1}^J |\psi_n^j|^2} . \quad (5.2)$$

Für die SO-Methode wird der kinetische Anteil des Gesamtenergie-Erwartungswertes im Wellenzahlraum und der potentielle Anteil im Ortsraum berechnet

$$\langle \hat{H}_{\text{SO}} \rangle_n = \frac{\sum_{j=1}^J \frac{\hbar^2 k_j^2}{2m} |\phi_n^j|^2}{\sum_{j=1}^J |\phi_n^j|^2} + \frac{\sum_{j=1}^J V^j |\psi_n^j|^2}{\sum_{j=1}^J |\psi_n^j|^2} . \quad (5.3)$$

Die Vergleichsgröße $\Delta \langle \hat{H} \rangle$ wird über die Differenz zwischen dem numerischen und theoretischen Erwartungswert der Gesamtenergie definiert

$$\Delta \langle \hat{H} \rangle = \langle \hat{H} \rangle_{\text{num}} - \langle \hat{H} \rangle_{\text{theo}} . \quad (5.4)$$

Weiterhin wird die Differenz des Erwartungswertes des Ortes gegenüber der analytischen Lösung betrachtet

$$\langle x \rangle_{\text{num}} - \langle x \rangle_{\text{theo}} = \frac{\sum_{j=1}^J x_j |\psi_n^j|^2}{\sum_{j=1}^J |\psi_n^j|^2} - \langle x \rangle_{\text{theo}} . \quad (5.5)$$

5.2 Freies Wellenpaket

Es wird ein freies Gaußsches Wellenpaket im Potential $V(x) = 0$ simuliert, sodass die Wellenfunktion mit dem normierten Anfangszustand

$$\psi(x, t)|_{t=0} = \frac{1}{\sqrt{\sigma_0} \sqrt{\pi}} \exp(ik_0 x) \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma_0^2}\right) , \quad (5.6)$$

wobei $\Delta^2 = \sigma_0^2 + i\frac{\hbar}{m}t$ gilt, mit der Varianz σ_0^2 , lokalisiert um den Ort x_0 und der Wellenzahl k_0 wie folgt propagiert

$$\psi(x, t) = \frac{\sqrt{\sigma_0}}{\Delta \pi^{1/4}} \exp\left(ik_0 \left(x - \frac{\hbar}{2m}k_0 t\right)\right) \exp\left(-\frac{\left(x - x_0 - \frac{\hbar}{m}k_0 t\right)^2}{2\sigma_0^2 + i\frac{\hbar}{m}t}\right) . \quad (5.7)$$

Mit der dazugehörigen Wahrscheinlichkeitsdichte

$$|\psi(x, t)|^2 = \frac{\sigma_0}{|\Delta|^2 \sqrt{\pi}} \exp\left(-\left(\frac{\sigma_0}{|\Delta|}\right)^4 \frac{\left(x - x_0 - \frac{\hbar}{m}k_0 t\right)^2}{\sigma_0^2}\right) \quad (5.8)$$

ergibt sich für den Erwartungswert des Ortes die zum Gaußschen Wellenpaket korrespondierende klassische Bewegung

$$\langle x \rangle = x_0 + \underbrace{\frac{\hbar}{m} k_0}_{= \frac{p_0}{m} = v_0} t, \quad (5.9)$$

sowie für die mit der Zeit wachsende Ortsunschärfe

$$\sigma = \sigma_0 \sqrt{1 + \frac{\hbar^2}{m^2 \sigma_0^4} t^2}. \quad (5.10)$$

Für die Simulation des freien Gaußschen Wellenpaketes (siehe Abbildung 5.1) werden folgende Einstellungen vorgenommen. Der Definitionsbereich des Ortes wird mit $x \in [-500, \dots, +500]$ in der Einheit $[x] = 0,1 \text{ nm}$ gewählt. Die Anzahl an Stützstellen J wird auf $2^{16} = 65536$ gesetzt. Der Anfangszustand des Wellenpakets wird konfiguriert mit einem Erwartungswert der kin. Energie von 10 eV , einer Masse eines Elektrons mit $m = 5,68563006021504 \cdot 10^{-12} \text{ eVs}^2/\text{m}^2$ und einer Ortsunschärfe von $\sigma_0 = 10$ in der Einheit $[\sigma_0] = 0,1 \text{ nm}$, lokalisiert um $x_0 = -400$. Das Potential wird für alle x_j gleich Null gesetzt.



Abbildung 5.1: Wahrscheinlichkeitsdichte für das konfigurierte freie Gaußsche Wellenpaket zum Zeitpunkt $t = 0 \text{ fs}$ (links) und $t = 9,71 \text{ fs}$ (rechts).

Bei der Wahl der Zeitdiskretisierung von $\Delta t = 10^{-3} \text{ fs}$ werden die genannten Fehlergrößen über einen Zeitraum von 10 fs notiert. In der linken Abbildung 5.2 wird der Fehler E beider Verfahren gegenübergestellt. Dabei stellt sich das CN-Verfahren als das präzisere Verfahren heraus. Dies liegt prinzipiell daran, dass neben der Wahl des Zeitintervalls beim CN-Verfahren eine dichte Raumdiskretisierung bessere Ergebnisse liefert. Hingegen muss beim SO-Verfahren zusätzlich der Definitionsbereich des Ortes breit gewählt werden, um eine dichte Wellenzahldiskretisierung zu erhalten und somit die Berechnungen im k -Raum genauer durchführen zu können. In der rechten Abbildung 5.2 zeigen die Ergebnisse des Ortserwartungswertes, dass sich beide Fehlerkurven nahezu linear verhalten und das SO-Verfahren wieder die größeren Fehler liefert. Die Abbildungen 5.3 stellen für die jeweilige Methode den Erwartungswert der Gesamtenergie dar. Dabei ist ersichtlich, dass das CN-Verfahren, wie zu erwarten, einen zeitlich konstanten Wert (bei Vernachlässigung der Maschinengenauigkeit) wiedergibt. Beim SO-Verfahren entstehen mit der Zeit kleinere Abweichungen, die wiederum die theoretischen Überlegungen zur Ungenauigkeit der Erhaltung des Erwartungswertes der Gesamtenergie untermauern. Dass das SO-Verfahren hierbei grundsätzlich vom Anfangswert 10 eV abweicht, liegt an der Wahl der Breite des örtlichen Definitionsbereiches. Je größer dieser gewählt wird, desto dichter wird der Definitionsbereich im k -Raum, desto

genauer werden die damit verbundenen Berechnungen in der Gleichung (5.3).

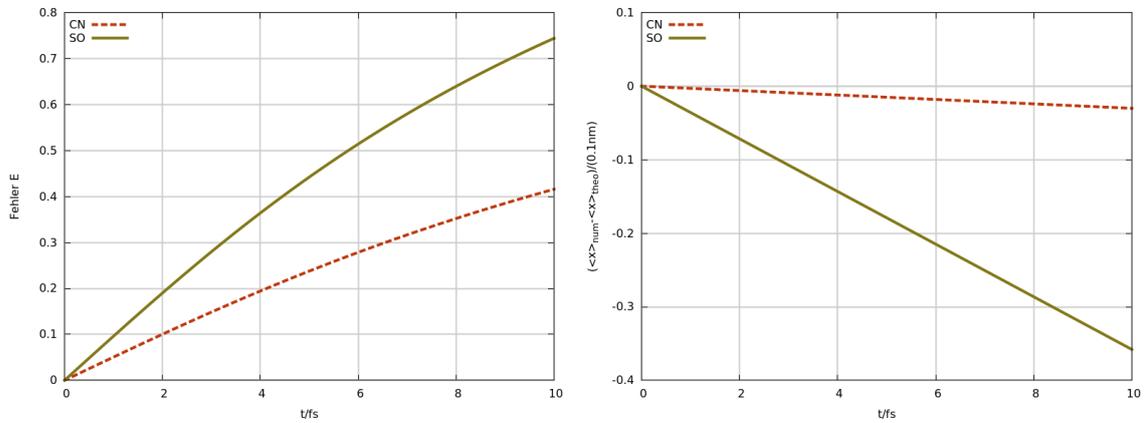


Abbildung 5.2: Fehler E nach Gl. (5.1) (links) und Fehler des Ortserwartungswertes nach Gl. (5.5) (rechts) des CN- und SO-Verfahrens für ein freies Gaußsches Wellenpaket.

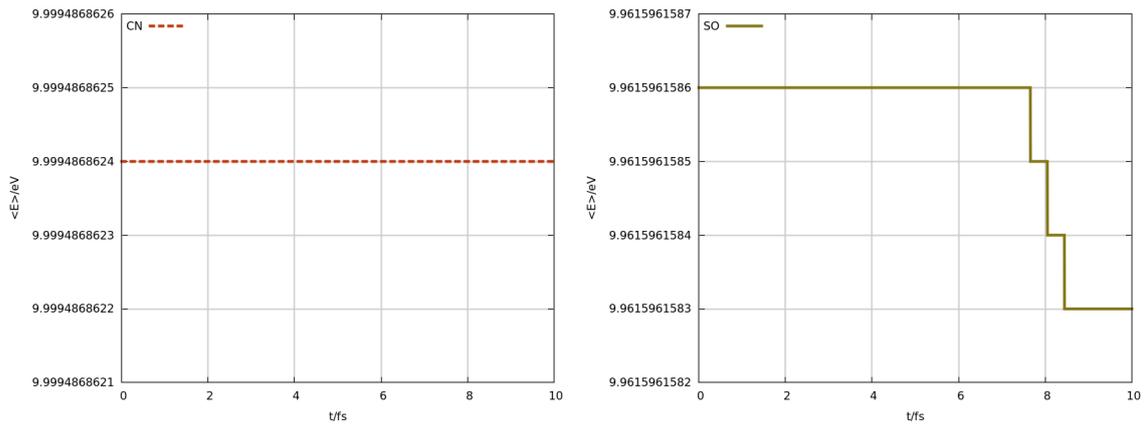


Abbildung 5.3: Erwartungswert der Gesamtenergie nach Gl. (5.3) beim CN- (links) und SO-Verfahren (rechts) für ein freies Gaußsches Wellenpaket.

5.3 Kohärenter Zustand des harmonischen Oszillators

In der zweiten Simulation wird ein gaussförmiger kohärenter Zustand des harmonischen Oszillators mit dem Potential $V(x) = \frac{m\omega^2}{2}x^2$ betrachtet [Sch05]. Der kohärente Zustand χ_α bewegt sich im Ortserwartungswert analog zur klassischen Bewegung des harmonischen Oszillators und wird als Eigenzustand des Vernichtungsoperators \hat{a} des harmonischen Oszillators mit dem komplexen Eigenwert α konstruiert

$$\hat{a}\chi_\alpha = \alpha\chi_\alpha \quad . \quad (5.11)$$

Dabei wird χ_α als Reihenentwicklung der stationären Eigenzustände ψ_n gebildet und erhält mit $\alpha = |\alpha|e^{i\delta}$ und $\sigma = \sqrt{\frac{\hbar}{\omega m}}$ folgende Form

$$\chi_\alpha(x, t) = \frac{1}{\sqrt{\sigma} \sqrt{\pi}} \exp \left\{ -i \left[\frac{\omega t}{2} - \frac{|\alpha|^2}{2} \sin(2(\omega t - \delta)) + \frac{\sqrt{2}|\alpha|x}{\sigma} \sin(\omega t - \delta) \right] - \frac{1}{2\sigma^2} \left[x - \sigma \sqrt{2}|\alpha| \cos(\omega t - \delta) \right]^2 \right\} . \quad (5.12)$$

Die dazugehörige konstant breite gaußförmige Wahrscheinlichkeitsdichte

$$|\chi_\alpha(x, t)|^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi}\sigma} \exp \left\{ -\frac{\left(x - \sigma \sqrt{2}|\alpha| \cos(\omega t - \delta) \right)^2}{\sigma^2} \right\} \quad (5.13)$$

liefert direkt den Erwartungswert für den Ort mit

$$\langle x \rangle = \sqrt{2}\sigma|\alpha| \cos(\omega t - \delta) . \quad (5.14)$$

Für die Simulation (siehe Abbildung 5.4) werden folgende Anfangsbedingungen gewählt. Sei $|\alpha| = 10$. Sei weiterhin $\delta = \frac{\pi}{2}$, sodass für $t = 0$ die Wahrscheinlichkeitsdichte einem Gaußschen Wellenpaket, lokalisiert um $x_0 = 0$, entspricht. Bei einer Masse eines Elektrons mit $m = 5,68563006021504 \cdot 10^{-12} \text{ eVs}^2/\text{m}^2$ und $\omega = 0,1$ in der Einheit $[\omega] = \frac{\sqrt{eV}[m]}{[x]}$ ergibt sich $k_0 = \sqrt{2}\frac{|\alpha|}{\sigma}$. Der Definitionsbereich des Ortes ist mit $x \in [-300, \dots, +300]$ in der Einheit $[x] = 0,1 \text{ nm}$ festgelegt und die Zeit mit $\Delta t = 10^{-3} \text{ fs}$ diskretisiert. Die Anzahl an Stützstellen J wird auf $2^{16} = 65536$ gesetzt. In der linken Abbildung 5.5 wächst der Fehler

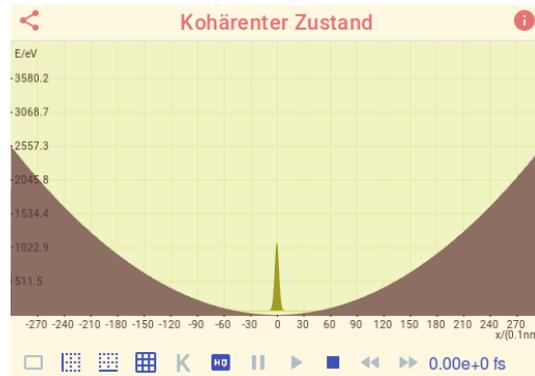


Abbildung 5.4: Wahrscheinlichkeitsdichte für den konfigurierten kohärenten Zustand des harmonischen Oszillators nach Gl. (5.12) zum Zeitpunkt $t = 0 \text{ fs}$.

des CN-Verfahrens stetig, wohingegen der Fehler des SO-Verfahrens zu oszillieren scheint. Daher wird in der rechten Abbildung ein Zeitraum über 50 fs simuliert. Dabei scheint die Oszillation periodisch in den Amplituden abwechselnd zu steigen bzw. zu fallen. Im Vergleich zur Simulation des freien Gaußschen Wellenpaketes stellt sich das SO-Verfahren hierbei als das Präzisere heraus. In Abbildung 5.6 wächst der Fehler des Ortserwartungswertes bei beiden Verfahren oszillierend, wobei hier das CN-Verfahren wieder ungenauere Ergebnisse liefert. In der rechten Abbildung 5.7 oszilliert der Erwartungswert der Gesamtenergie $T/2$ -periodisch ($T = \frac{2\pi}{\omega} \approx 6,28 \text{ fs}$). In der linken Abbildung bleibt für das CN-Verfahren der Erwartungswert (bei Vernachlässigung der Maschinengenauigkeit) wie zu erwarten konstant.

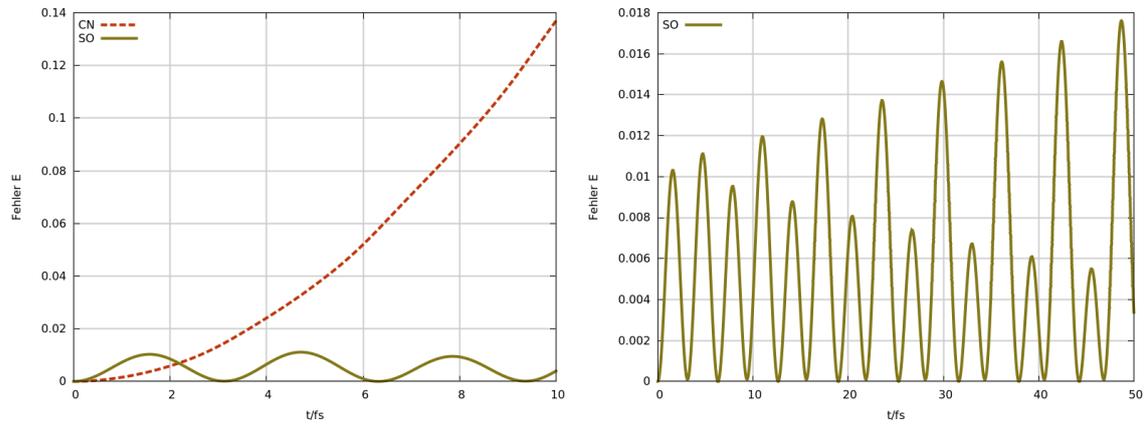


Abbildung 5.5: Fehler E nach Gl. (5.1) des CN- und SO-Verfahrens für einen kohärenten Zustand des harmonischen Oszillators. Links für beide Verfahren und rechts für das SO-Verfahren über einen längeren Zeitraum.

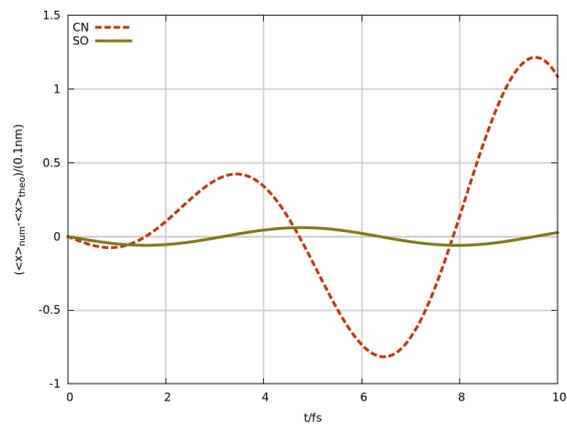


Abbildung 5.6: Fehler des Ortserwartungswertes nach Gl. (5.5) des CN- und SO-Verfahrens für einen kohärenten Zustand des harmonischen Oszillators.

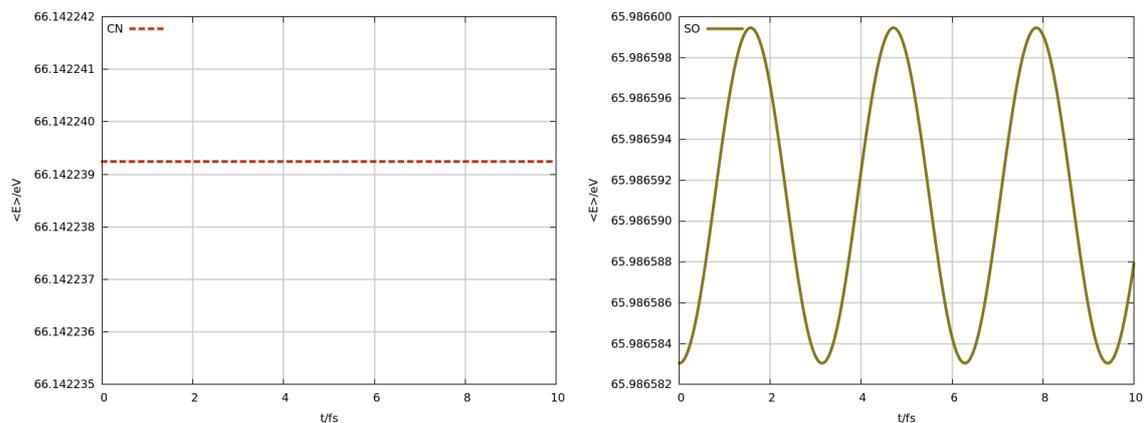


Abbildung 5.7: Erwartungswert der Gesamtenergie nach Gl. (5.3) beim CN- (links) und SO-Verfahren (rechts) für einen kohärenten Zustand des harmonischen Oszillators.

Interaktive Visualisierung

Um neben den theoretischen Überlegungen und vereinzelt numerischen Vergleichen ein visuelles Gesamtbild bzw. Verständnis beliebiger eindimensionaler nichtrelativistischer quantenmechanischer Probleme erhalten zu können, ist das webbasierte browserseitige Simulationsprogramm QUANTUM entstanden (siehe www.quantum-simulation.de). Der kommentierte Code (HTML, CSS, JavaScript) ist in der beigelegten CD, sowie auf <https://github.com/maunke/Quantum> einzusehen.

QUANTUM besteht aus einem Simulationstool mit dazugehörigen Erläuterungen zu vordefinierten Simulationen und einer generellen Einleitung in das Gebiet Quantenmechanik, welche von der Internetseite <http://www.itkp.uni-bonn.de/~metsch/pdm/pdmquant.html> (Stand 02.02.2016) übernommen wurde. Die Simulation verwendet zur Berechnung das Split-Operator-Verfahren als Standardeinstellung. Die Internetseite zu QUANTUM ist in einem responsiven Design gestaltet und wird daher für das jeweilige Endgerät (Desktop, Smartphone, Tablet, Laptop) optimiert dargestellt. Zur Darstellung der Animationen wird der 2D JavaScript Renderer Pixi.js unter MIT Lizenz verwendet. Weitere im Programm einbezogene lizenzierte Werke von Dritten sind JavaScript Framework jQuery (MIT Lizenz), MathJax (Apache Lizenz 2.0), jQuery.scrollTo (MIT Lizenz) und jquery.nicescroll, Version 3.6.6 (MIT Lizenz).

6.1 Simulationstool

Das Simulationstool von QUANTUM erhält bei maximaler Optionenwahl folgende Maske (siehe Abbildung 6.1).¹ Im Simulationsfenster gibt es in der unteren Leiste folgende Kontrolloptionen (von links nach rechts):

- Theater-Modus: die Größe des Simulationsfensters kann variiert werden
- y- bzw. x-Achse ein/aus, x-y-Gitter ein/aus
- Wahrscheinlichkeitsdichte im k-Raum (Wellenzahlraum) darstellen
- Prinzipielle Wahl der Anzahl an Stützstellen: 8192 (HQ), 2048 (LQ)
- Pause, Play, Stop, Halbieren bzw. Verdoppeln des Zeitintervalls, Zeitanzeige

In der oberen Leiste können die individuell konfigurierten Simulationen über einen Link geteilt und über den Info-Icon Informationen über die Legende, Einstellungen und Berechnungen eingeholt werden.

¹ Die in den Abbildungen verwendeten Icons gehören zu Material Design Lite und sind lizenziert unter Apache Lizenz 2.0.

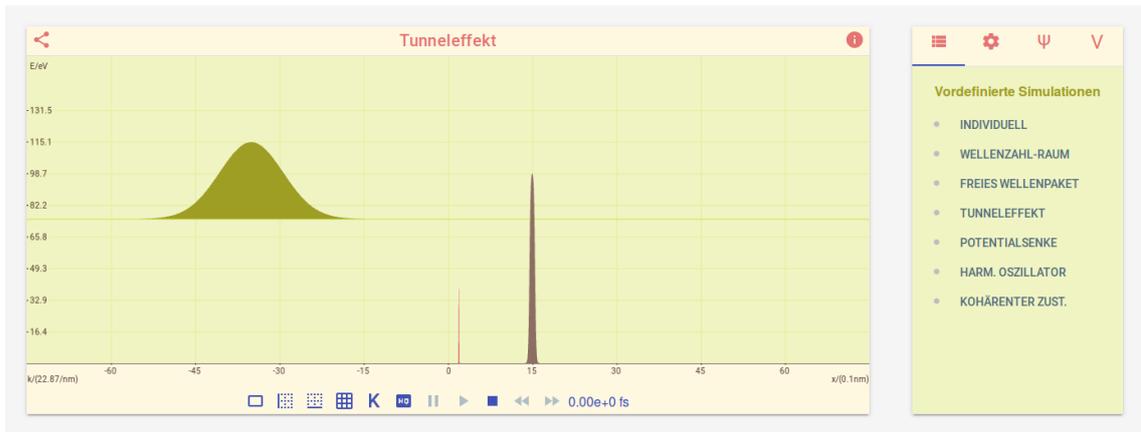


Abbildung 6.1: Ausschnitt Simulationstool QUANTUM (siehe www.quantum-simulation.de)

Mittig wird die Animation der quantenmechanischen Simulation dargestellt. Dunkelgrün markiert ist die Verteilung des Betragsquadrates der Wellenfunktionen im Ortsraum mit dem Anfangserwartungswert der kinetischen Energie als y-Offset in Einheiten von eV. Diese y-Skala gilt auch für das braun dargestellte Potential. Für die rot eingefärbte Verteilung der Betragsquadrate der Wellenfunktionen im Wellenzahlraum ist die x-Achse als k-Achse in den sich links unten befindenden Einheiten abzulesen. Das rechte Konfigurationsfenster enthält als erste Option die Liste an auszuwählenden vordefinierten Simulationen.

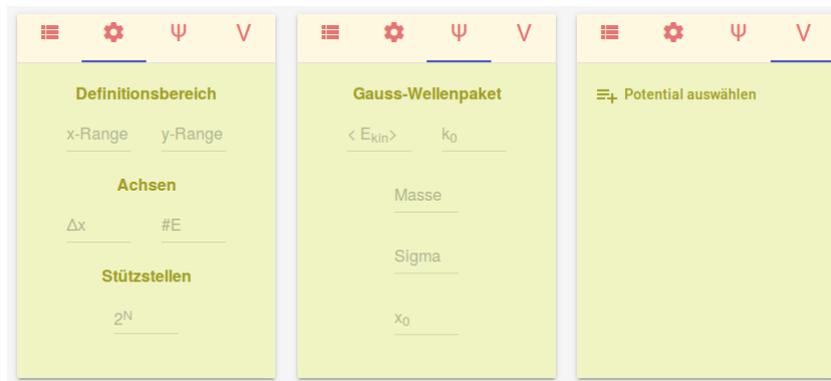


Abbildung 6.2: Optionsfenster Simulationstool QUANTUM (siehe www.quantum-simulation.de)

Es gibt drei weitere Optionsfenster (siehe Abbildung 6.2):

1. *Einstellungen.* Der Definitionsbereich für den Ort und der dargestellte y-Bereich kann festgelegt werden. Die Wahl des x- und y-Achsenabschnittes kann definiert und die Anzahl an Stützstellen 2^N vorgegeben werden.
2. *Wellenpaket.* Der Anfangszustand des Gaußschen Wellenpaketes wird festgelegt durch die Wahl des Erwartungswertes der kin. Energie bzw. k_0 , sowie durch die Masse m , Standardabweichung σ und die Lokalisierung um x_0 .
3. *Potentiale.* Es können beliebig viele sich zu einem Gesamtpotential addierende Potentiale definiert werden. Dabei wird als Potentialtyp zwischen gauss-, rechteck- und oszillatorförmig, sowie einer eigenen individuellen funktionalen Eingabe gewählt.

6.2 Beispielkonfigurationen

6.2.1 Kohärenter Zustand

Nachfolgend wird erläutert, wie ein kohärenter Zustand des harm. Oszillators konfiguriert werden kann. Dazu wird die Simulation „Individuell“ ausgewählt, da diese noch kein Potential enthält. Im Optionsfenster *Einstellungen* wird der Definitionsbereich für x auf 150 und y -Range auf 0 (Default-Einstellung, erstellt automatisch optimale Ansicht) gesetzt. Weiterhin wird $\Delta x = 15$ und die Anzahl an Stützstellen auf $2^{13} = 8192$ eingestellt. Mithilfe der in Abschnitt 5.3 dargestellten Wellenfunktionsgleichung (5.12) und $\sigma = \sqrt{\frac{\hbar}{\omega m}}$ erhält das Gaußsche Wellenpaket die Form

$$\psi(x, t)|_{t=0} = \frac{1}{\sqrt{\sigma} \sqrt{\pi}} \exp\left\{i \underbrace{\frac{\sqrt{2}|\alpha|}{\sigma}}_{=k_0} x\right\} \exp\left\{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}\right\}. \quad (6.1)$$

Sei $|\alpha| = 10$, $x_0 = 0$ und $\omega = 0,5$ mit $[w] = \sqrt{eV[m]/[x]}$ gewählt und $m = 1$ mit $[m] = 5,68563006021504 \cdot 10^{-12} \text{eVs}^2/\text{m}^2$, so muss bei $[\sigma] = [x]$ die Abweichung $\sigma = 1,521628312222495$ und $k_0 = \frac{\sqrt{2}|\alpha|}{\sigma} = 9,294080236371855$ mit $[k_0] = 1/[x]$ gesetzt werden. Nun wird ein Potential des Typs Oszillator mit $x_0 = 0$ und $\omega = 0,5$ hinzugefügt.

Die simulierte Propagation des Wellenpaketes sieht für $t \approx 0, T/4, T/2, 3/4T$ folgendermaßen aus (siehe Abbildung 6.3). Wie zu erwarten, ändert sich als kohärenter Zustand des harm. Oszillators die Breite der Wahrscheinlichkeitsdichte im Orts- bzw. Wellenzahlraum im Laufe der Zeit nicht. Bei einer Wahl nichtkohärenter Zustände im harm. Oszillator würde die Breite des Gaußschen Wellenpaketes mit der Zeit um die Anfangsbreite σ oszillieren.

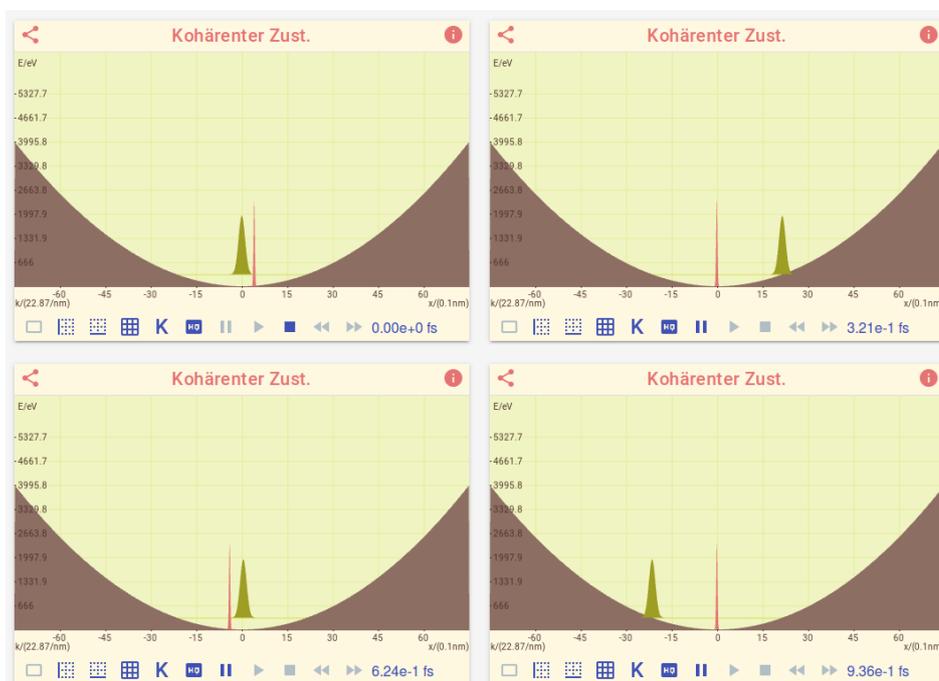


Abbildung 6.3: Kohärenter Zustand nach Gl. (5.12) im Orts- (Dunkelgrün) und Wellenzahlraum (Rot) für verschiedene Zeiten $t \approx 0, T/4, T/2, 3/4T$.

6.2.2 Quasistationärer Zustand

Als zweites Beispiel werden Resonanzen zwischen zwei Potentialbarrieren angeregt, indem im Anfangszustand des Wellenpaketes gezielte Erwartungswerte der kinetischen Energie gewählt werden. Mithilfe von QUANTUM (siehe www.quantum-simulation.de) werden im Optionsfenster *Potentiale* an den Orten $x_L = 5$ und $x_R = 10$ jeweils ein Rechteckpotential mit einer Energie von 100 eV, $\alpha = 0,1$ und einer Breite von 0,5 hinzugefügt. Das Wellenpaket wird mit einer Elektronenmasse und einer Breite von $\sigma = 10$ um $x_0 = -30$ konfiguriert.

Die Propagation des Wellenpaketes im Gesamtpotential, bestehend aus zwei Potentialbarrieren, ist für den Anfangszustand und späteren Verlauf als quasistationärer Zustand in Abbildung 6.4 dargestellt.

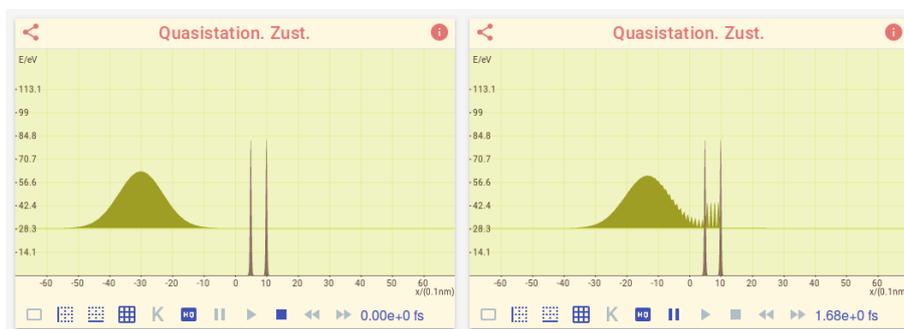


Abbildung 6.4: Propagation eines Wellenpaketes (Anfangszustand siehe links) im Gesamtpotential, bestehend aus zwei Potentialbarrieren, mit resultierendem quasistationären Zustand (rechts) zwischen beiden Barrieren.

Der Maximalwert der jeweils rechteckähnlichen Potentiale liegt bei 84,8 eV. Um möglichst alle Anfangszustände des Wellenpaketes für einen langlebigen quasistationären Zustand zwischen beiden Potentialbarrieren herauszufinden, durchläuft ein Programm den Erwartungsbereich der kinetischen Energie des Wellenpaketes zwischen 0,02 eV und 80 eV mit einer Schrittweite von 0,025 eV. Gemessen wird bei jedem Schritt die Lebensdauer des quasistationären Zustands. Hier ist dieser definiert als der Zeitraum, in welchem das Integral der Wahrscheinlichkeitsdichte der Wellenfunktion zwischen beiden Potentialbarrieren

$$\int_{x_L}^{x_R} dx |\psi(x, t)|^2 \quad (6.2)$$

nach Erreichen des Höchstwertes um relativ maximal 0,005 von diesem Wert abweicht. Das Ergebnis des beschriebenen Durchlaufs ist in Abbildung 6.5 dargestellt.

Die Wahrscheinlichkeitsdichten der ausgewählten quasistationären Zustände R1 bis R7 (siehe Abbildung 6.5) sind in Abbildung 6.6 mit der jeweiligen Knotenanzahl und Lebensdauer nebeneinandergestellt. Dabei wird zur Betrachtung der jeweiligen Zustände der Ortsbereich zwischen beiden Potentialbarrieren gezeigt.

Mithilfe der Ergebnisse aus den Abbildungen 6.5 und 6.6 wird ersichtlich, dass es eine begrenzte Anzahl an langlebigen quasistationären Zuständen für die eingestellte Konfiguration gibt und mit jeder höheren Resonanz ein weiterer Knoten für die Wahrscheinlichkeitsdichte des Zustands hinzukommt. Weiterhin verkürzt sich die Lebensdauer der quasistationären Zustände bei höherer Anregung der Resonanzen. Interessanterweise kann eine Analogie zwischen dem Aufbau zum quasistationären Zustand und einem Teilchen im unendlich hohen Potentialtopf anhand der Knotenanzahl und den Eigenenergien gefunden

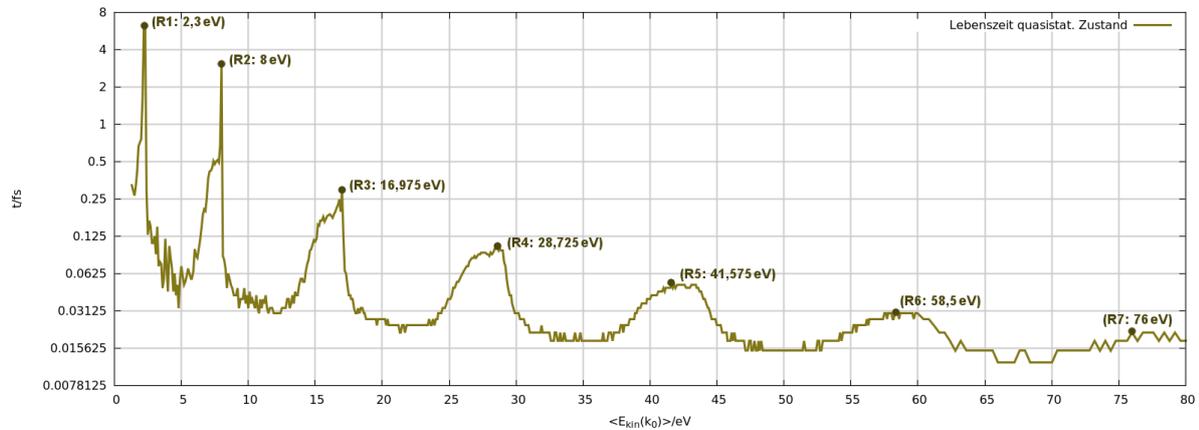


Abbildung 6.5: Lebensdauer t des quasistationären Zustands für verschiedene Anfangserwartungswerte der kinetischen Energie des Wellenpaketes. Als R1-R7 sind die Peaks der langlebigen quasistationären Zustände bezeichnet. Unterhalb von $E_{kin} = 1,275 \text{ eV}$ konnte das Wellenpaket die linke Potentialbarriere nicht überwinden, sodass in diesem Bereich keine Lebensdauern berechnet werden können.

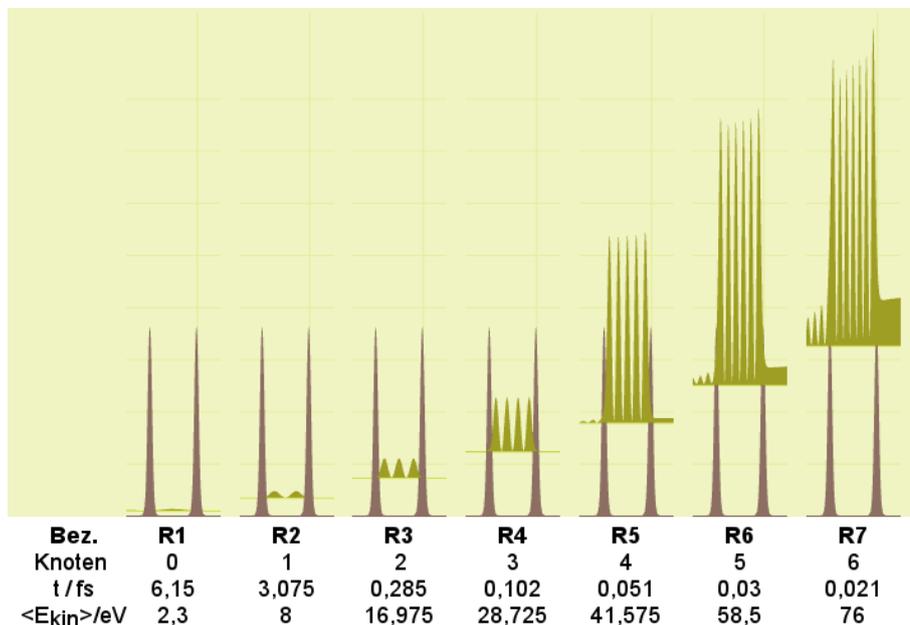


Abbildung 6.6: Für den Ortsbereich zwischen beiden Potentialbarrieren sind die Wahrscheinlichkeitsdichten der quasistationären Zustände R1-R7 (siehe Abbildung 6.5) mit der dazugehörigen Knotenanzahl, Lebensdauer t und dem Anfangserwartungswert der kinetischen Energie des Wellenpaketes dargestellt.

werden. Die Energien der Eigenzustände ψ_n eines Teilchens im Potential $V(x)$ mit

$$V(x) = \begin{cases} 0, & -a \leq x \leq a \\ \infty, & \text{sonst} \end{cases} \quad (6.3)$$

und der halben Potentialbreite a sind über folgende Relation gegeben [Sch05]

$$E_n^{[e]} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m a^2} \left[n + \frac{1}{2} \right]^2. \quad (6.4)$$

Dabei steht e bzw. o für die gerade bzw. ungerade Symmetrie des Zustandes. Sei nun $a = \frac{x_R - x_L}{2} = 0,25$ nm und m gleich einer Elektronenmasse, so ergibt sich für die Gegenüberstellung der Eigenenergien eines Teilchens im Kasten und den Anfangserwartungswerten der kinetischen Energie für die quasistationären Zustände R1-R7 aus Abbildung 6.6 folgende Vergleichstabelle (siehe Tabelle 6.1). Die Tabelle zeigt eine Korrelation zwischen den Energien der Teilchen im Kasten und der quasistationären Zustände.

Quasistat. Zustand		Potentialtopf		Knoten
Bez.	$\langle E_{\text{kin}} \rangle / \text{eV}$	Bez.	E / eV	Anzahl
R1	2,3	E_0^e	1,5	0
R2	8	E_1^o	6	1
R3	17	E_1^e	13,5	2
R4	28,7	E_2^o	24,1	3
R5	41,6	E_2^e	37,6	4
R6	58,5	E_3^o	54,1	5
R7	76	E_3^e	73,7	6

Tabelle 6.1: Die Anfangserwartungswerte der kinetischen Energie der quasistationären Zustände R1-R7 (siehe Abbildung 6.5) werden mit den Eigenenergien eines Teilchens im unendlich hohen Potentialtopf anhand der Knotenanzahl miteinander verglichen.

Schlussbemerkung

Die Eigenschaften der im Rahmen dieser Arbeit behandelten Methoden (Crank-Nicolson- und Split-Operator-Verfahren) zur numerischen Lösung der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung mit zeitunabhängigen Potentialen sind in Tabelle 7.1 für die Vergleichsgrößen Fehler E nach Gl. (5.1) und Fehler des Erwartungswertes der Gesamtenergie des Wellenpaketes nach Gl. (5.4) anhand der durchgeführten Simulationen (siehe Kapitel 5) aufgelistet.

Methode	Freies Wellenpaket		Kohärenter Zustand	
	CN	SO	CN	SO
$\Delta \langle \hat{H} \rangle$	<i>const</i>	<i>const</i>	<i>const</i>	oszillierend
Fehler E	$O(\sqrt{t})$	$O(\sqrt{t})$	$O(t)$	wachsend oszillierend

Tabelle 7.1: Auflistung der Vergleichsgrößen $\Delta \langle \hat{H} \rangle$ nach Gl. (5.4) und Fehler E nach Gl. (5.1) anhand berechneter Simulationen (siehe Kapitel 5) eines freien Wellenpaketes und kohärenten Zustandes des harmonischen Oszillators für das Crank-Nicolson-Verfahren (CN) und das Split-Operator-Verfahren (SO).

Neben den theoretischen Überlegungen zur Genauigkeit der oben genannten Vergleichsgrößen kann mithilfe der praktischen Simulationen aus Kapitel 5 nicht festgestellt werden, welches Verfahren tendenziell bei beliebigen Potentialen das Genauere ist. So könnte als Erweiterung dieser Arbeit eine Analyse über die Abhängigkeit der Genauigkeit beider Verfahren gegenüber der Konfigurationswahl des Potentials bzw. des Wellenpaketes durchgeführt werden. Es lässt sich jedoch aussagen, dass das Crank-Nicolson-Verfahren bei hinreichend klein gewählter Raumzeitdiskretisierung als Folge der in dessen Grundgleichung verwendeten Finite-Differenzen-Methode allgemein bessere Ergebnisse als das von der zusätzlichen Wellenzahlraumdiskretisierung abhängige Split-Operator-Verfahren liefert.

Die browserseitige Simulationsumgebung QUANTUM (erreichbar unter www.quantum-simulation.de) ist in der Lage, selbst einstellbare Gaußsche Wellenpakete in beliebig konfigurierbaren Potentialen zu simulieren. Dies ermöglicht dem Benutzer dieses Programms, uneingeschränkt eindimensionale nichtrelativistische quantenmechanische Probleme mit einem Gaußschen Wellenpaket beobachten zu können. Zusätzlich gibt es vordefinierte Simulationen zum Tunneleffekt, Harmonischen Oszillator und dem bekannten Lennard-Jones-Potential. Der kommentierte Programmcode zu QUANTUM kann in der beigelegten CD, sowie auf <https://github.com/maunke/Quantum> eingesehen werden.

Literatur

- [Sar09] S. Sarwari, *Numerical investigations of the long time evolution of the Schrödinger equation*, URL-Zugriff: 19.12.2015, Diplomarbeit: Ludwig-Maximilians-Universität München, 2009, URL: <http://www.mathematik.uni-muenchen.de/~lerdos/Stud/sarwari.pdf> (siehe S. 4, 12).
- [Pan06] T. Pang, *An introduction to Computational Physics*, 2. Aufl., Cambridge University Press, 2006 (siehe S. 5).
- [Pre+07] W. H. Press u. a., *Numerical Recipes*, 3. Aufl., Cambridge University Press, 2007 (siehe S. 5, 39).
- [Ves98] F. J. Vesely, *Computational Physics*, 2. Aufl., Kluwer Academic / Plenum Publishers, 1998 (siehe S. 6).
- [KR98] W. Kinzel und G. Reents, *Physics by Computer*, Springer, 1998 (siehe S. 6).
- [Kar] G. Karniadakis, *Thomas Algorithm for Periodic Tridiagonal Systems*, URL-Zugriff: 19.12.2015, URL: <http://www.cfm.brown.edu/people/gk/chap6/node14.html> (siehe S. 9).
- [CMN12] F. Casas, A. Murua und M. Nadinic, *Efficient computation of the Zassenhaus formula* (2012) 14, URL-Zugriff: 19.12.2015, arXiv: 1204.0389v2 (siehe S. 11).
- [Van] J. Vanderplas, *Quantum Python: Animating the Schrodinger Equation*, URL-Zugriff: 19.12.2015, URL: <https://jakevdp.github.io/blog/2012/09/05/quantum-python> (siehe S. 16).
- [Sch05] F. Schwabl, *Quantenmechanik*, 6. Aufl., Springer, 2005 (siehe S. 22, 30).
- [Mil81] K. S. Miller, *On the Inverse of the Sum of Matrices*, Mathematics Magazine, 1981 (siehe S. 35).
- [SHA] C. E. SHANNON, *Communication in the Presence of Noise*, URL-Zugriff: 19.12.2015, URL: <http://web.stanford.edu/class/ee104/shannonpaper.pdf> (siehe S. 38).
- [Lin] Y.-T. Lin, *Fast Fourier Transform (FFT)*, URL-Zugriff: 19.12.2015, URL: <http://www.cmlab.csie.ntu.edu.tw/cml/dsp/training/coding/transform/fft.html> (siehe S. 39, 41).

Mathematische Ergänzungen

A.1 Inverse einer Operatorsumme

Seien \hat{A} und \hat{B} Operatoren, die auf denselben Hilbertraum wirken, wobei die Summe $\hat{A} + \hat{B}$ und \hat{A} invertierbar sind.

Zu zeigen.

$$(\hat{A} + \hat{B})^{-1} = \hat{A}^{-1} - \hat{A}^{-1}\hat{B}(\hat{A} + \hat{B})^{-1} . \quad (\text{A.1})$$

Beweis. [Mil81]

$$\begin{aligned} & (\hat{A} + \hat{B})^{-1} = \hat{A}^{-1} + \hat{X} \\ \Leftrightarrow & (\hat{A}^{-1} + \hat{X})(\hat{A} + \hat{B}) = 1 \\ \Leftrightarrow & \hat{X}(\hat{A} + \hat{B}) = -\hat{A}^{-1}\hat{B} \\ \Leftrightarrow & \hat{X} = -\hat{A}^{-1}\hat{B}(\hat{A} + \hat{B})^{-1} . \end{aligned}$$

□

A.2 Thomas - Algorithmus

Sei $T \in \mathbb{C}^{J \times J}$ eine tridiagonale Matrix

$$T = \begin{bmatrix} b^1 & c & & & \\ a & b^2 & c & & \\ & a & b^3 & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & c \\ & & & a & b^J \end{bmatrix} \quad (\text{A.2})$$

in dem linearen Gleichungssystem

$$Tx = y \quad (\text{A.3})$$

mit den Vektoren $x, y, b \in \mathbb{C}^J$ und den Variablen $a, c \in \mathbb{C}$.

A.2.1 Ansatz

Sei x^j rekursiv mit den Hilfsvektoren $g, h \in \mathbb{C}^J$ definiert

$$x^{j+1} = g^j x^j + h^j . \quad (\text{A.4})$$

So ergibt sich eingesetzt für die jeweiligen Gleichungen des Systems

$$\begin{aligned} \text{1. Gleichung: } x^1 &= \frac{y^1 - c \cdot h^1}{b^1 + c \cdot g^1} \\ \text{j. Gleichung: } x^j &= \underbrace{\frac{-a}{b^j + c \cdot g^j}}_{= g^{j-1}} x^{j-1} + \underbrace{\frac{y^j - c \cdot h^j}{b^j + c \cdot g^j}}_{= h^{j-1}} \\ \text{J. Gleichung: } x^J &= \underbrace{-\frac{a}{b^J}}_{= g^{J-1}} x^{J-1} + \underbrace{\frac{y^J}{b^J}}_{= h^{J-1}} . \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

Für die Hilfsvektoren ergibt sich folgende Rekursionsvorschrift

$$\begin{aligned} g^{j-1} &= \frac{-a}{b^j + c \cdot g^j} , & h^{j-1} &= \frac{y^j - c \cdot h^j}{b^j + c \cdot g^j} , \\ g^{J-1} &= -\frac{a}{b^J} , & h^{J-1} &= \frac{y^J}{b^J} . \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

Der Vektor x kann nun ebenfalls rekursiv berechnet werden

$$\begin{aligned} j = 1: \quad x^1 &= \frac{y^1 - c \cdot h^1}{b^1 + c \cdot g^1} , \\ 1 \leq j \leq J - 1: \quad x^{j+1} &= g^j x^j + h^j . \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

Der Thomas - Algorithmus löst dementsprechend das Gleichungssystem vom Typ (A.3) nach $O(J)$ Schritten.

A.3 Exponentialoperatoren

Seien \hat{A} und \hat{B} Operatoren, die auf denselben Hilbertraum wirken, so ergeben sich folgende nützliche Rechenregeln.

A.3.1 Inverses Element

Zu zeigen.

$$e^{\hat{A}} e^{-\hat{A}} = 1 . \quad (\text{A.8})$$

Beweis.

$$\begin{aligned}
 & e^{\hat{A}} e^{-\hat{A}} \\
 &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{n!k!} \hat{A}^n \hat{A}^k \\
 \text{(Cauchy-Produkt)} \quad &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{k=0}^n \frac{1}{n!(n-k)!} \hat{A}^n \hat{A}^{n-k} \\
 &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{k=0}^n \frac{n!}{n!(n-k)!} \hat{A}^n \hat{A}^{n-k} \\
 \text{(Binomische Formel mit } [\hat{A}, \hat{A}] = 0) \quad &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (\hat{A} - \hat{A})^n \\
 &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (\hat{0})^n \\
 &= 1 .
 \end{aligned}$$

□

A.4 Fourier-Transformation

Sei ψ eine quadratintegrale Funktion mit $\psi \in L^2(\mathbb{R})$, so ist die dazugehörige Fourier-Transformation definiert durch

$$\mathcal{F}(\psi)(k, t) := \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} dx \psi(x, t) e^{-ik \cdot x} , \tag{A.9}$$

sowie die inverse Fourier-Transformation durch

$$\mathcal{F}^{-1}(\psi)(x, t) := \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} dx \psi(k, t) e^{+ix \cdot k} . \tag{A.10}$$

A.4.1 Differentiationsregel

Es ergibt sich folgende nützliche Eigenschaft der Fourier-Transformation bei der Fouriertransformierten differenzierter Funktionen.

Zu zeigen.

$$\mathcal{F}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi\right)(k, t) = -k^2 \mathcal{F}(\psi)(k, t) . \tag{A.11}$$

Beweis.

$$\begin{aligned}
 \mathcal{F}\left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}\right)(k, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} dx \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}(x, t) e^{-ik \cdot x} \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\underbrace{\left[\frac{\partial \psi}{\partial x}(x, t) e^{-ik \cdot x} \right]_{-\infty}^{\infty}}_{=0, \text{ da } \frac{\partial \psi}{\partial x}(x, t)|_{x=\pm\infty}=0} + ik \int_{\mathbb{R}} dx \frac{\partial \psi}{\partial x}(x, t) e^{-ik \cdot x} \right) \\
 &= \frac{ik}{\sqrt{2\pi}} \left(\underbrace{\left[\psi(x, t) e^{-ik \cdot x} \right]_{-\infty}^{\infty}}_{=0, \text{ da } \psi(x, t)|_{x=\pm\infty}=0} + ik \int_{\mathbb{R}} dx \psi(x, t) e^{-ik \cdot x} \right) \\
 &= -k^2 \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} dx \psi(x, t) e^{-ik \cdot x} \\
 &= -k^2 \mathcal{F}(\psi)(k, t) .
 \end{aligned}$$

□

Daraus folgt direkt

$$\mathcal{F}\left(e^{\frac{\partial^2}{\partial x^2}} \psi\right)(k, t) = e^{-k^2} \mathcal{F}(\psi)(k, t) . \quad (\text{A.12})$$

A.4.2 Nyquist - Shannon - Abtasttheorem

Behauptung. [SHA] Sei bei der Funktion $f(t)$ die höchste Frequenz W . Dann ist mit der Abtastung $\Delta t = \frac{1}{2W}$ die Fourier-Transformation exakt.

Beweis. [SHA] Die Annahme, dass die höchste Frequenz der Funktion $f(t)$ durch W gegeben ist, schränkt die Grenzen der (inversen) Fourier-Transformation folgendermaßen ein

$$\begin{aligned}
 f(t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} d\omega \mathcal{F}(f)(\omega) e^{i\omega t} \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-2\pi W}^{+2\pi W} d\omega \mathcal{F}(f)(\omega) e^{i\omega t} .
 \end{aligned}$$

Sei die Zeit wie folgt durch $n \in \mathbb{Z}$ diskretisiert

$$t = n \cdot \Delta t = \frac{n}{2W} .$$

Eingesetzt in die inverse Fourier-Transformation liefert dies

$$f\left(\frac{n}{2W}\right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-2\pi W}^{+2\pi W} d\omega \mathcal{F}(f)(\omega) e^{i\omega \frac{n}{2W}} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-2\pi W}^{+2\pi W} d\omega \mathcal{F}(f)(\omega) e^{2\pi i \frac{\omega n}{4\pi W}} .$$

Diese Gleichung entspricht wiederum dem n -ten Koeffizienten der Fourier-Reihenentwicklung der Fouriertransformierten $\mathcal{F}(f)(\omega)$, sodass die (inverse) Fourier-Transformation exakt ist. □

In Fall der Wellenfunktion ψ mit der dazugehörigen Diskretisierung ergibt sich mit $k \in [-k_{max}, k_{max}]$

$$\begin{aligned}\Delta x &= \frac{1}{2 \frac{k_{max}}{2\pi}} = \frac{\pi}{k_{max}} \\ \Leftrightarrow k_{max} &= \frac{\pi}{\Delta x} \\ \Rightarrow \Delta k &= \frac{2\pi}{J\Delta x} .\end{aligned}\tag{A.13}$$

A.4.3 Schnelle Fourier-Transformation

Es wird die diskrete Fourier-Transformation (4.25) für $0 \leq k \leq J - 1$ betrachtet

$$\phi^k = \sum_{j=0}^{J-1} \psi^j e^{-2\pi i \frac{kj}{J}} .\tag{A.14}$$

Der Ausdruck für ϕ_n^k kann im Sinne von Cooley und Tukey [Pre+07] in einen ungeraden und geraden Anteil unter der Festlegung von $J = 2^N$ zerlegt werden

$$\begin{aligned}\phi^k &= \sum_{j=0}^{J-1} \psi^j e^{-2\pi i \frac{kj}{J}} \\ &= \sum_{j=0}^{\frac{J}{2}-1} \psi^{2j} e^{-2\pi i \frac{k(2j)}{J}} + \sum_{j=0}^{\frac{J}{2}-1} \psi^{2j+1} e^{-2\pi i \frac{k(2j+1)}{J}} \\ &= \sum_{j=0}^{\frac{J}{2}-1} \psi^{2j} e^{-2\pi i \frac{kj}{\frac{J}{2}}} + e^{-2\pi i \frac{k}{J}} \sum_{j=0}^{\frac{J}{2}-1} \psi^{2j+1} e^{-2\pi i \frac{kj}{\frac{J}{2}}} \\ &= \phi_e^k + W_J^k \phi_o^k .\end{aligned}\tag{A.15}$$

Es wird dazu der Faktor W_J eingeführt mit $W_J^k := e^{-2\pi i \frac{k}{J}}$. Dabei markieren e und o den geraden bzw. ungeraden Anteil der Zerlegung. Die Zerlegungen ϕ_e^k und ϕ_o^k sind $\frac{J}{2}$ -periodisch, sowie der Faktor W_J^k $\frac{J}{2}$ -antisymmetrisch und J -periodisch

$$W_J^{k+\frac{J}{2}} = -W_J^k ,\tag{A.16}$$

$$W_J^{k+J} = W_J^k ,\tag{A.17}$$

$$\phi_{e/o}^{k+\frac{J}{2}} = \phi_{e/o}^k .\tag{A.18}$$

Mithilfe dieser Eigenschaften gilt daher für $0 \leq k \leq \frac{J}{2} - 1$ [Lin]

$$\begin{aligned}\phi^k &= \phi_e^k + W_J^k \phi_o^k , \\ \phi^{k+\frac{J}{2}} &= \phi_e^k - W_J^k \phi_o^k .\end{aligned}\tag{A.19}$$

Die Anteile ϕ_e^k und ϕ_o^k können wiederum in einen geraden und ungeraden Anteil äquivalent zu (A.15) in die halbierte Länge $\frac{J}{2}$ zerlegt werden. Bei ϕ_e^k werden nach dieser Zerlegung nur die vorhin geraden Elemente ψ^{2j} einbezogen, sowie bei ϕ_o^k die ungeraden Anteile. Nach dieser weiteren Zerlegung, äquivalent

zur Gleichung (A.19), ergibt sich für $0 \leq k \leq \frac{J}{4} - 1$

$$\begin{aligned}
 \phi_e^k &= \phi_{ee}^k + W_J^k \phi_{eo}^k, \\
 \phi_e^{k+\frac{J}{2}} &= \phi_{ee}^k - W_J^k \phi_{eo}^k, \\
 \phi_o^k &= \phi_{oe}^k + W_J^k \phi_{oo}^k, \\
 \phi_o^{k+\frac{J}{2}} &= \phi_{oe}^k - W_J^k \phi_{oo}^k.
 \end{aligned} \tag{A.20}$$

Die Zerlegung (A.15) kann N -mal durchgeführt werden, bis $\frac{J}{2^N} = 1$ gilt. Bei $(N - 1)$ -facher gerader Zerlegung kann folgende Zuordnung gefunden werden

$$\begin{aligned}
 \underbrace{\phi_{ee\dots ee}^k}_{(N-1)\text{-fach}} &= \sum_{j=0}^{\frac{J}{2}-1} \psi^{2j} e^{-2\pi i \frac{kj}{\frac{J}{2}}} + e^{-2\pi i \frac{k}{J}} \sum_{j=0}^{\frac{J}{2}-1} \psi^{2j+1} e^{-2\pi i \frac{kj}{\frac{J}{2}}} \\
 &= \psi^0 + e^{-2\pi i \frac{k}{J}} \psi^1 \\
 \Rightarrow \phi_{(ee\dots ee)e}^k &= \psi^0, \quad \phi_{(ee\dots ee)o}^k = \psi^1.
 \end{aligned} \tag{A.21}$$

Behauptung. Für die genaue Zuordnung beliebiger gerader und ungerader N -facher Zerlegung muss $e = 0$ und $o = 1$ gesetzt werden, sodass die Binärzahl $n = eooe\dots oe$ die Zuordnung zum Element mit umgekehrter Zuordnung $\phi_{eo\dots eooe}^k = \psi^n$ liefert.

Beweis. Die Behauptung wird induktiv bewiesen. Sei $N = 1$, so gilt die Aussage offensichtlich. Sei $N = J$ und es gelte die Behauptung. So folgt für $N + 1$ durch das Anhängen von e oder o der Zweig des geraden oder ungeraden Elementes. Gerade dieser Vorgang entspricht der betrachteten Zerlegung. \square

Von der beschriebenen Zuordnung aus können nun mithilfe des Schmetterlingsgraphen (A.20) die einzelnen Zerlegungsebenen und schließlich die gesamte Fourier-Transformation berechnet werden. Ein visuelles Verständnis der schnellen Fourier-Transformation liefert die Abbildung A.1. Insgesamt werden über $\log_2 J$ Ebenen jeweils J Additionen und $\frac{J}{2}$ Multiplikationen durchgeführt, sodass sich für die schnelle Fourier-Transformation eine Komplexität von $O(J \log_2 J)$ ergibt. Die Anzahl an Berechnungen zur umgekehrten Binärzahlen-Reihenfolge wird dabei nicht mit einbezogen, da diese Zuordnung einmalig vorberechnet und innerhalb des Programms als Lookup-Tabelle verwendet werden kann.

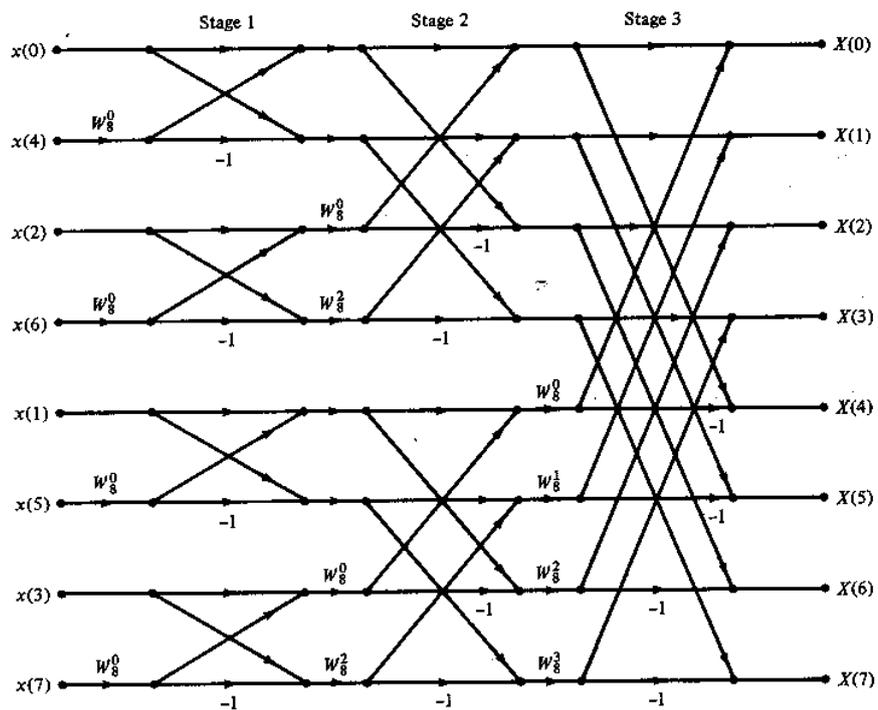


Abbildung A.1: Vorgang der schnellen Fourier-Transformation für $J = 2^3$ Elemente bzw. 3 Ebenen [Lin]. Der Knotenpunkt am Ende eines Pfades stellt eine Addition bzw. eine Zahl neben einem Weg eine Multiplikation dar. Links sind die Elemente im Sinne der umgekehrten Binärzahlen-Reihenfolge angeordnet. Von dort aus werden die Elemente ohne Allokation mithilfe des Schmetterlingsgraphen (A.20) verbunden bzw. verrechnet, bis die oberste Ebene erreicht und die Transformation beendet ist.

Abbildungsverzeichnis

5.1	Wahrscheinlichkeitsdichte für das konfigurierte freie Gaußsche Wellenpaket zum Zeitpunkt $t = 0$ fs (links) und $t = 9,71$ fs (rechts).	21
5.2	Fehler E nach Gl. (5.1) (links) und Fehler des Ortserwartungswertes nach Gl. (5.5) (rechts) des CN- und SO-Verfahrens für ein freies Gaußsches Wellenpaket.	22
5.3	Erwartungswert der Gesamtenergie nach Gl. (5.3) beim CN- (links) und SO-Verfahren (rechts) für ein freies Gaußsches Wellenpaket.	22
5.4	Wahrscheinlichkeitsdichte für den konfigurierten kohärenten Zustand des harmonischen Oszillators nach Gl. (5.12) zum Zeitpunkt $t = 0$ fs.	23
5.5	Fehler E nach Gl. (5.1) des CN- und SO-Verfahrens für einen kohärenten Zustand des harmonischen Oszillators. Links für beide Verfahren und rechts für das SO-Verfahren über einen längeren Zeitraum.	24
5.6	Fehler des Ortserwartungswertes nach Gl. (5.5) des CN- und SO-Verfahrens für einen kohärenten Zustand des harmonischen Oszillators.	24
5.7	Erwartungswert der Gesamtenergie nach Gl. (5.3) beim CN- (links) und SO-Verfahren (rechts) für einen kohärenten Zustand des harmonischen Oszillators.	24
6.1	Ausschnitt Simulationstool QUANTUM (siehe www.quantum-simulation.de)	26
6.2	Optionsfenster Simulationstool QUANTUM (siehe www.quantum-simulation.de)	26
6.3	Kohärenter Zustand nach Gl. (5.12) im Orts- (Dunkelgrün) und Wellenzahlraum (Rot) für verschiedene Zeiten $t \approx 0, T/4, T/2, 3/4T$	27
6.4	Propagation eines Wellenpaketes (Anfangszustand siehe links) im Gesamtpotential, bestehend aus zwei Potentialbarrieren, mit resultierendem quasistationären Zustand (rechts) zwischen beiden Barrieren.	28
6.5	Lebensdauer t des quasistationären Zustands für verschiedene Anfangserwartungswerte der kinetischen Energie des Wellenpaketes. Als R1-R7 sind die Peaks der langlebigen quasistationären Zustände bezeichnet. Unterhalb von $E_{kin} = 1,275$ eV konnte das Wellenpaket die linke Potentialbarriere nicht überwinden, sodass in diesem Bereich keine Lebensdauern berechnet werden können.	29
6.6	Für den Ortsbereich zwischen beiden Potentialbarrieren sind die Wahrscheinlichkeitsdichten der quasistationären Zustände R1-R7 (siehe Abbildung 6.5) mit der dazugehörigen Knotenanzahl, Lebensdauer t und dem Anfangserwartungswert der kinetischen Energie des Wellenpaketes dargestellt.	29

A.1 Vorgang der schnellen Fourier-Transformation für $J = 2^3$ Elemente bzw. 3 Ebenen [Lin].
Der Knotenpunkt am Ende eines Pfades stellt eine Addition bzw. eine Zahl neben
einem Weg eine Multiplikation dar. Links sind die Elemente im Sinne der umgekehrten
Binärzahlen-Reihenfolge angeordnet. Von dort aus werden die Elemente ohne Allokation
mithilfe des Schmetterlingsgraphen (A.20) verbunden bzw. verrechnet, bis die oberste
Ebene erreicht und die Transformation beendet ist. 41

Tabellenverzeichnis

5.1	Aus den theoretischen Überlegungen abgeleitete Eigenschaften des CN- bzw. SO-Verfahrens für den Fehler E nach Gl. (2.12) und $\Delta \langle \hat{H} \rangle$ nach Gl. (5.4).	19
6.1	Die Anfangserwartungswerte der kinetischen Energie der quasistationären Zustände R1-R7 (siehe Abbildung 6.5) werden mit den Eigenenergien eines Teilchens im unendlich hohen Potentialtopf anhand der Knotenanzahl miteinander verglichen.	30
7.1	Auflistung der Vergleichsgrößen $\Delta \langle \hat{H} \rangle$ nach Gl. (5.4) und Fehler E nach Gl. (5.1) anhand berechneter Simulationen (siehe Kapitel 5) eines freien Wellenpaketes und kohärenten Zustandes des harmonischen Oszillators für das Crank-Nicolson-Verfahren (CN) und das Split-Operator-Verfahren (SO).	31