

Bachelorarbeit

Ionisation und Streuung eines Elektrons an Ionen im intensiven Laserfeld

vorgelegt von Christopher Hinz

22. Juli 2010

Institut für
Theoretische Physik und Astrophysik
der Christian - Albrechts - Universität zu Kiel

Betreuer/1. Gutachter:

2. Gutachter:

Prof. Dr. Michael Bonitz

PD Dr. Alexei Filinov

Zusammenfassung

In den letzten Jahren wurden viele theoretische Untersuchungen zur Elektronenstreuung in Ionensystemen durchgeführt. Diese Arbeit erweitert die dabei erhaltenen Modelle auf Systeme aus Atomen und Ionen und kombiniert diese mit Laserpulsen im Attosekundenbereich, die in den letzten Jahren auch erstmals experimentell zugänglich geworden sind. Mittels dieser neuen Pulse ist es erstmals möglich zeitaufgelöste Messungen durchzuführen. Um die dabei auftretenden Prozesse zu untersuchen, wurde im Rahmen dieser Arbeit ein Programm zur numerischen Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung auf Basis des Crank - Nicolson - Verfahrens entwickelt. Die Vergleiche der numerischen Ergebnisse mit einigen klassischen Theorien zur Elektronenstreuung zeigen, dass sich ein Großteil der der auftretenden Prozesse sehr genau mittels klassischer Modelle vorhersagen lässt.

Abstract

Many theoretical studies about electron scattering have been performed in the recent years. This work extends the obtained models to systems of atoms and ions and combines these with laser pulses in the attosecond regime, which also became available in experiments in the recent years. With the aid of these new pulses the realization of time-resolved measurements became available for the first time. To examine the occurring processes, a program for the numerical solution of the time-dependent Schrödinger equation based on the Crank - Nicolson scheme is developed in the scope of this work. Comparisons between the numerical solutions and some classical theories about electron scattering reveal that the majority of the occurring processes can be predicted very accurate through classical models.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	3
2	Theoretische Beschreibung	4
2.1	Atome und Ionen im Laserfeld	4
2.1.1	Wechselwirkung zwischen Feld und Materie	5
2.1.2	Dipolapproximation	5
2.1.3	Eichtransformationen	6
2.2	Semiklassisches Modell für die Quiverbewegung im Feld	7
2.3	Klassische und quasiklassische Streutheorie	8
2.3.1	Klassische instantane Coulombstreuung	8
2.3.2	Klassische Resonanzbedingung	9
3	Numerische Methodik	11
3.1	Numerische Lösung der Schrödingergleichung	11
3.1.1	Das Raum - Zeit - Gitter	11
3.1.2	1D - Crank - Nicolson - Verfahren	12
3.1.3	Imaginary Time Propagation (ITP)	14
3.1.4	Berechnung der Erwartungswerte und Spektren	15
3.1.5	Implementierung in ISO/IEC C++	17
4	Numerische Ergebnisse	18
4.1	Konvergenz - Untersuchung des CN - Algorithmuses	18
4.1.1	Harmonischer Oszillator	18
4.1.2	Elektronenstreuung im $H - H^+$ - System	20
4.2	Pump-Probe-Simulation	21
4.2.1	Systemaufbau und Durchführung	21
4.2.2	Eigenzustände des regularisierten Coulombpotentials	21
4.2.3	Konvergenzuntersuchung für die Elektronenstreuung im $H - H^+$ - System	23
4.2.4	Vergleich der quantenmechanischen Ergebnisse mit klas- sischen Theorien	25
5	Zusammenfassung und Ausblick	32

1 Einleitung

Seit der Entwicklung des ersten Lasers durch Theodore Maiman im Jahr 1960 [1] hat sich der Laser zu einem unverzichtbaren Werkzeug in Wissenschaft und Technik entwickelt. Neue Laserquellen wie der Freie-Elektronen-Laser FLASH am DESY erreichen bisher unzugängliche Intensitätsbereiche und ermöglichen damit den Zugang zu vollkommen neuen Bereichen der Physik, insbesondere einen immer besseren Zugang zu Systemen auf atomaren und subatomaren Skalen. In den letzten Jahren wurden viele theoretische Untersuchungen an solchen Systemen vorgenommen. Ein wichtiger Prozess ist die Elektronenstreuung an Ionen und Atomen. In den bisherigen Arbeiten wurden vor allem Systeme aus Ionen betrachtet. So untersuchten H.-J. Kull et al. die Elektronenstreuung an einem 1D - Modellion im Rahmen der klassischen Theorie der instantanen Coulombstreuung [2] und führten einen Vergleich mit numerischen Lösungen der Schrödingergleichung durch, die die Vorhersagen des klassischen Modells bestätigten. Eine Verallgemeinerung auf ein 2D - Ionensystem wurde in [3] durchgeführt, mit dem Ergebnis, dass die klassische Theorie auch in diesem Fall bestätigt werden konnte. Einen weiteren wichtigen Beitrag lieferten H.-J. Kull et al in [4] mit der Verallgemeinerung des Systems auf zwei Ionen. Ein wichtiges Ergebnis dieser Untersuchung war die Erkenntnis, dass unter bestimmten, im Rahmen klassischer Theorien ableitbare, Bedingungen Resonanzeffekte bei der Elektronenstreuung in einem System aus zwei Ionen auftreten können. Dieses Phänomen wird unter anderem in dieser Arbeit untersucht. Insbesondere konnten diese Untersuchungen zeigen, dass die Struktur der Energiespektren des Elektrons sich mittels der klassischen Theorien erklären lässt. Das Ziel dieser Arbeit ist es nun diese Untersuchungen auf ein System aus Atomen und Ionen zu erweitern. Konkret beschäftigt sich diese Arbeit mit einem 1D - Modellsystem aus einem Wasserstoffatom und einem Wasserstoffion. Eine weitere Besonderheit dieser Untersuchung bildet die Verwendung eines Pump - Probe - Laserfeldes mit Pulsdauern im Attosekundenbereich, anstatt eines einfachen monochromatischen Feldes, wie es in den vorangegangenen Arbeiten verwendet wurde. Pump - Probe - Experimente sind in den letzten Jahren zu einem unverzichtbaren Werkzeug zur experimentellen Untersuchung und Kontrolle der Dynamik in atomaren und subatomaren Systemen geworden. Eine gute Übersicht über dieses Gebiet wird in [5] gegeben. Mit Hilfe der erstmals von Goulielmakis et al. erzeugten Attosekundenpulse [6], war es der Gruppe um M. Uiberacker sogar möglich den Prozess der Tunnelionisation zeitaufgelöst zu beobachten[7]. Im Gegensatz zu vorherigen Arbeiten, die monochromatische Infrarotfelder verwendeten, wird erstmals eine Kombination aus XUV- und IR - Pulsen benutzt um das System zu manipulieren. Mittels eines Pumpimpulses mit einer Pulsdauer im Attosekundenbereich, sollte es möglich sein das Atom zu ionisieren und so ein freies Elektron im System zu erzeugen. Dieses kann sich jetzt im System bewegen und sowohl an dem Ion, als auch an dem Atomrumpf, unter dem Einfluss des nachfolgenden Probepulses streuen. Eine interessante Frage, die sich dabei stellt, ist es, ob und wie die Dynamik des freien Elektrons von den Eigenschaften der Laserfeldes, z.B. von der Frequenz der Pulse und von dem Zeitabstand der Pulsmaxima, abhängt und ob eine gezielte Manipulation der Dynamik über das Laserfeld in diesem Fall möglich ist. Eine wichtige Rolle spielt auch hier der Vergleich mit den klassischen Modellen, die durch die vorherigen Untersuchungen an den Ionensystemen bereits bestätigt wurden. Aus

diesem Grund beschäftigt sich der Hauptteil dieser Arbeit mit dem Vergleich von quantenmechanischen Ergebnissen und den bereits erwähnten klassischen Streutheorien. Da die vollständige analytische Beschreibung des Systems nicht möglich ist, wurden die quantenmechanischen Ergebnisse numerisch mittels des Crank-Nicolson-Verfahrens simuliert. Sollte es eine Übereinstimmung der Simulationsergebnisse mit den Vorhersagen der klassischen Theorien geben, so könnte die vergleichsweise einfach zu berechnenden klassischen Modelle zur Vorhersage von Systemen mit einem solchen Aufbau herangezogen werden.

2 Theoretische Beschreibung

Dieses Kapitel dient der Einführung der für diese Arbeit wichtigen Größen und Theorien. Der erste Teil dieses Kapitels beschäftigt sich mit der quantenmechanischen Beschreibung eines geladenen Teilchens in einem elektromagnetischen Feld. Ausgehend von der exakten zeitabhängigen Schrödingergleichung (TDSE) im Feld werden verschiedene Approximationen und Transformationen eingeführt, die es erlauben das Problem so zu reduzieren, dass wir es analytisch oder numerisch behandeln können. Das dabei erhaltene Ergebnis bildet die Grundlage für die spätere numerische Behandlung der TDSE.

Im zweiten Teil werden verschiedene klassische und quasiklassische Theorien zur Beschreibung der Teilchenbewegung in elektromagnetischen Feldern und atomaren Systemen untersucht. Die Theorien beschreiben die in den untersuchten Systemen wichtigen Prozesse der Streuung und der Bewegung eines freien Teilchens im Laserfeld. Wie bereits erwähnt, dienen diese Theorien hauptsächlich dem Vergleich mit den numerischen Lösungen der TDSE. In dieser Arbeit werden, solange nicht anders festgelegt, atomare Einheiten ($\hbar = m = e = 1$) für alle Rechnungen verwendet.

2.1 Atome und Ionen im Laserfeld

Die Bewegung eines Elektrons wird in der Quantenmechanik durch die zeitabhängige Schrödingergleichung im elektromagnetischen Feld beschrieben. Ein Zugang zu dieser Beschreibung liefert der Übergang $\hat{p} \rightarrow \hat{p} + \frac{1}{c}\vec{A}$ vom Impuls zum kanonischen Impuls der Elektrodynamik. Es ist dabei zu beachten, dass die Beschreibung der elektrodynamischen Größen der klassischen Beschreibung nach Maxwell folgt. Es wird also keine Quantisierung des Feldes vorgenommen, wie sie Teil der Quantenelektrodynamik sind. Der folgende Abschnitt stützt sich bei den Herleitungen auf die bereits in [3] geleistete Arbeit und vollzieht diese nach.

2.1.1 Wechselwirkung zwischen Feld und Materie

Jedes elektromagnetisches Feld lässt sich eindeutig durch ein Vektorpotential $\vec{A}(\vec{r})$ und ein Skalarpotential $\Phi(\vec{r})$ beschrieben. Die zeitliche Entwicklung eines Elektrons im externen Potential $V(\vec{r})$, das mit einem solchen elektromagnetischem Feld wechselwirkt, wird in atomaren Einheiten ($\hbar = m = e = 1$) durch die zeitabhängige Schrödingergleichung (TDSE)

$$\begin{aligned} \hat{H}\Psi(\vec{r}, t) &= \frac{1}{2} \left(\hat{p} + \frac{1}{c} \vec{A}(\vec{r}, t) \right)^2 \Psi(\vec{r}, t) \\ &- \Phi(\vec{r}, t)\Psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r})\Psi(\vec{r}, t) = i \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) \end{aligned} \quad (1)$$

mit dem Impulsoperator $\hat{p} := -i\nabla$ beschrieben. Das externe Potential $V(\vec{r})$ könnte z.B. das Coulombpotential eines Ions oder Atoms sein. Unter der Voraussetzung, dass das elektromagnetische Feld quellenfrei ist ($\rho(\vec{r}, t) = 0$), können wir das skalare Potential verschwinden lassen, also $\Phi(\vec{r}, t) = 0$. Damit ist das EM - Feld nur noch über das Vektorpotential $\vec{A}(\vec{r}, t)$ mit dem System gekoppelt. Dann erhalten wir durch ausmultiplizieren der Klammern in Gleichung (1) den Hamiltonoperator

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{1}{2} \left(\hat{p} + \frac{1}{c} \vec{A}(\vec{r}, t) \right)^2 + V(\vec{r}) = \\ &\underbrace{\frac{\hat{p}^2}{2} + V(\vec{r})}_{\hat{H}_{\text{atom}}} + \underbrace{\frac{1}{2c} \vec{A}(\vec{r}, t) \hat{p} + \frac{1}{2c} \hat{p} \vec{A}(\vec{r}, t) + \frac{1}{2c^2} \vec{A}^2(\vec{r}, t)}_{\hat{H}_{\text{int}}} \end{aligned} \quad (2)$$

Dabei ist unbedingt zu beachten, dass \hat{p} und $\vec{A}(\vec{r}, t)$ i.A. nicht kommutieren ($[\hat{p}, \vec{A}(\vec{r}, t)] \neq 0$). Der zeitunabhängige Hamiltonoperator \hat{H}_{atom} in (2) beschreibt das atomare System, während \hat{H}_{int} die ,i.A. zeitabhängige, Wechselwirkung des Teilchens mit dem elektromagnetischem Feld beschreibt.

2.1.2 Dipolapproximation

Bis jetzt ist die quantenmechanische Beschreibung bis auf die klassische Behandlung des elektromagnetischen Feldes exakt. Da der Hamiltonoperators (2) die beiden Skalarprodukte $\hat{p}\vec{A}$ und $\vec{A}\hat{p}$ enthält ist sowohl eine analytische, als auch eine numerische, Behandlung kaum möglich. Dieses Problem lässt sich aber durch Benutzung der Dipolapproximation umgehen. In typischen Problemstellungen hat das Vektorpotential $\vec{A}(\vec{r}, t)$ die Form

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \vec{A}_0 \cos(\vec{k}\vec{r} - \omega t), \quad (3)$$

mit dem Wellenvektor \vec{k} . Wenn die Wechselwirkungsregion klein gegenüber der Wellenlänge $\lambda = \frac{2\pi}{k}$ des Vektorpotentials ist, also $k\vec{r} \ll 1$ lässt sich das Vektorpotential in eine Taylorreihe um $\vec{r}_0 \vec{k}_0$ entwickeln und wir erhalten die Approximation

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \underbrace{\vec{A}_0 \cos(\vec{k}_0 \vec{r}_0 - \omega t)}_{A^{\text{Dipol}}(\vec{r}_0, t)} - \underbrace{\vec{A}_0 \sin(\vec{k}_0 \vec{r}_0 - \omega t) (\vec{k}\vec{r} - \vec{k}_0 \vec{r}_0)}_{A^{\text{Quadrupol}}(\vec{r}, t)} + \dots \quad (4)$$

für das Vektorpotential. Es ist sofort ersichtlich, dass wir unter diesen Voraussetzungen alle Terme bis auf den Dipolterm vernachlässigen können. Der große Vorteil dieser Approximation ist, dass das Vektorpotential jetzt ortsunabhängig wird, also $[\hat{p}, \vec{A}] = 0$ gilt. Dadurch lässt sich der Wechselwirkungshamiltonian \hat{H}_{int} umschreiben in

$$\hat{H}_{\text{int}} = \frac{1}{c} \vec{A}(t) \hat{p} + \frac{1}{2c^2} \vec{A}^2(t). \quad (5)$$

Alle Ergebnisse, die auf der Dipolapproximation aufbauen, sind natürlich nur im Gültigkeitsbereich dieser Approximation anwendbar. Eine Diskussion des Gültigkeitsbereichs findet sich in [3].

2.1.3 Eichtransformationen

Um das Problem noch weiter zu vereinfachen, lassen sich unterschiedliche Eichungen benutzen. Wie aus der Elektrodynamik und der Quantenmechanik bekannt, ändern sich die messbaren Größen unter Eichtransformation nicht. Insbesondere sind dies die Felder der Elektrodynamik \vec{E} und \vec{B} , sowie die Wahrscheinlichkeitsdichte $|\Psi|^2$ der Quantenmechanik. Es existieren Eichtransformationen für die verschiedensten Probleme. Im Bereich der Feld - Materie - Wechselwirkung sind vor allem die Strahlungs - (auch Coulomb - oder transversale) Eichung und die Feld - (auch Längen oder longitudinale) Eichung interessant. Ganz allgemein ist eine Eichtransformation gegeben durch

$$\begin{aligned} \vec{A}'(\vec{r}, t) &= \vec{A}(\vec{r}, t) + \nabla \Lambda(\vec{r}, t) \\ \Phi'(\vec{r}, t) &= \Phi(\vec{r}, t) - \frac{1}{c} \frac{\partial \Lambda(\vec{r}, t)}{\partial t} \\ \Psi'(\vec{r}, t) &= \Psi(\vec{r}, t) \exp\left(\frac{ie\Lambda}{mc}\right). \end{aligned}$$

Die TDSE im gestrichenen System ist dann

$$\frac{1}{2} (\hat{p} + \frac{1}{c} \vec{A}'(\vec{r}, t))^2 \Psi'(\vec{r}, t) - \Phi'(\vec{r}, t) \Psi'(\vec{r}, t) + V(\vec{r}) \Psi'(\vec{r}, t) = i \frac{\partial}{\partial t} \Psi'(\vec{r}, t). \quad (6)$$

Im Folgenden ist vor allem die Wirkung der Eichtransformationen auf den Hamiltonian interessant.

Die Coulomb Eichung ist durch die Bedingungen

$$\text{div} \vec{A}'(\vec{r}, t) = 0, \Phi(\vec{r}, t) = 0 \quad (7)$$

für das Skalar- und Vektorpotential gegeben. Da bereits für die Herleitung der TDSE im Feld vorausgesetzt wurde, dass $\Phi(\vec{r}, t) = 0$ gilt, ist dies bereits erfüllt. Durch Ausnutzung der Bedingung für das Vektorpotential bei der Berechnung des Kommutators von Impuls und Vektorfeld ergibt sich

$$[\hat{p}, \vec{A}] = 0. \quad (8)$$

Diese beiden Größen kommutieren also in Coulomb Eichung und in Analogie zur Dipolapproximation lässt sich der Wechselwirkungshamiltonian umschreiben zu

$$\hat{H}_{\text{int}} = \frac{1}{c} \vec{A}(t) \hat{p} + \frac{1}{2c^2} \vec{A}^2(t) \quad (9)$$

Innerhalb der Coulombbeziehung ist dieses Ergebnis aber viel allgemeiner formuliert, da man hier keine Näherungen macht.

Eine weitere Idee, die letztendlich zur Längeneichung führt, ist es, das Vektorpotential in der TDSE zu eliminieren. Unter dieser Forderung ergeben sich die Potentiale im gestrichenen System nach (2.1.3) zu

$$0 = \vec{A}'(\vec{r}, t) = \vec{A}(\vec{r}, t) + \nabla\Lambda(\vec{r}, t) \quad (10)$$

und

$$\Phi'(\vec{r}, t) = 0 - \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \Lambda(\vec{r}, t) \quad (11)$$

Im folgenden soll ein homogenes Vektorpotential vorausgesetzt sein. Dies ist i.A. nicht erfüllt, lässt sich aber z.B. durch die Dipolapproximation erreichen. Aus Gleichung (10) ergibt sich folgende Lösung für $\Lambda(\vec{r}, t)$

$$\Lambda(\vec{r}, t) = - \int_{\vec{r}_0}^{\vec{r}} \vec{A}(\vec{r}, t) d\vec{r} = -\vec{A}(\vec{r}, t)\vec{r} \quad (12)$$

dabei wurde das Koordinatensystem so gewählt, dass $\vec{r}_0 = \vec{0}$ gilt. In die Definitionsgleichung des Skalarpotentials im gestrichenen System (10) eingesetzt, ergibt sich damit

$$\Phi' = -\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \Lambda = \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \vec{r} = -\vec{E}\vec{r}. \quad (13)$$

Setzt man dieses Ergebnis in die TDSE im gestrichenen System ein, erhält man

$$\frac{1}{2} \hat{p}^2 \Psi'(\vec{r}, t) + \underbrace{(\vec{E}(t)\vec{r} + V(\vec{r}, t))}_{:=\tilde{V}(\vec{r}, t)} \Psi'(\vec{r}, t) = i \frac{\partial}{\partial t} \Psi'(\vec{r}, t). \quad (14)$$

Die TDSE im Laserfeld hat also in Längeneichung die gleiche Struktur, wie die feldfreie TDSE. Es können also alle Methoden, die für die Behandlung der TDSE ohne Feld entwickelt wurden, auf das Problem eines Teilchens in einem entsprechend gearteten elektromagnetischen Feld angewendet werden. Die Längeneichung ermöglicht also einen Zugang zu weiteren analytischen und numerischen Lösungsmethoden. Aus diesem Grund wird die TDSE in Längeneichung (14) die Grundlage für die spätere numerische Behandlung des Problems liefern.

2.2 Semiklassisches Modell für die Quiverbewegung im Feld

Im semiklassischen Modell für die Quiverbewegung des freien Teilchens im Feld [5] wird nun angenommen, dass das Elektron zum Zeitpunkt t_0 durch Ionisation aus dem Atom ins Kontinuum befördert wird. Der Ionisationsvorgang ist dabei i.d.R. quantenmechanisch zu beschreiben. Der Impulserwartungswert des Teilchens sei zum Ionisationszeitpunkt als konstant angenommen, d.h. $k_0 = k(t_0) = \text{const.}$ Bei der nachfolgenden Beschleunigung des Teilchens im Feld wird es als frei angenommen. Die Interaktion mit dem Atomkern wird also vernachlässigt. Das Elektron befinde sich nach der Ionisation in einem elektrischen Feld der Form

$$E(t) = E_0 f(t) \cos(\omega t + \phi) \quad (15)$$

mit der Einhüllenden $f(t)$. Damit ergibt sich die klassische Bewegungsgleichung

$$\ddot{x} = -E(t). \quad (16)$$

Durch Integration erhält man den Impuls des Elektrons zum Zeitpunkt t

$$k(t) = k_0 + \frac{1}{c}A(t) - \frac{1}{c}A(t_0). \quad (17)$$

mit dem Vektorpotential des elektrischen Feldes $A(t) = -c \int^t E(\bar{t}) d\bar{t}$. Im Fall einer langsam variierenden Einhüllenden $f(t)$, d.h. $\frac{df}{dt} \ll \omega f$, lässt sich die Einhüllende bei der Integration durch partielle Integration herausziehen und man erhält das Vektorpotential

$$A(t) = -c \frac{E_0}{\omega} f(t) \sin(\omega t + \phi) = -cv_0 f(t) \sin(\omega t + \phi). \quad (18)$$

Die Größe $v_0 = \frac{E_0}{\omega}$ wird in diesem Zusammenhang als Quiveramplitude bezeichnet. In (17) eingesetzt ergibt sich dann

$$k(t) = k_0 + v_0 f(t_0) \sin(\Phi_0) - v_0 f(t) \sin(\omega t + \phi) \quad (19)$$

als Impuls des Teilchens im Feld zum Zeitpunkt t . $\Phi_0 = \omega t_0 + \phi$ bezeichnet hier die Phase des Laserfeldes zum Zeitpunkt der Ionisation. Gleichung (19) lässt sich jetzt so interpretieren, dass die ersten beiden Terme den Impuls eines Driftzentrums beschreiben, während der letzte Term die Quiverbewegung des Teilchens um dieses Driftzentrum beschreibt. Das Driftzentrum führt dabei eine von der Quiverbewegung unabhängige gleichförmig gleichmäßige Bewegung aus. Für die weitere Behandlung gelte für die Einhüllende $f(t > t_f) = 0$ für einen beliebigen, aber festen Zeitpunkt t_f . Unter dieser Bedingung geht (19) für alle $t > t_f$ über in den Endimpuls

$$k_f := k(t > t_f) = k_0 + v_0 f(t_0) \sin(\Phi_0) \quad (20)$$

des Teilchens nach der Beschleunigung durch das Laserfeld. Solange sich der Ionisationszeitpunkt t_0 im langsam variierenden Teil der Einhüllenden befindet, ist also eine sinoidale Abhängigkeit des Endimpulses vom Ionisationszeitpunkt zu erwarten.

2.3 Klassische und quasiklassische Streutheorie

Da sich ein Großteil dieser Arbeit mit Streueffekten beschäftigt soll dieses Kapitel einen Einblick in die Beschreibung von Streuprozessen unter dem Einfluss eines Laserfeldes im Rahmen klassischer und quasiklassischer Näherungen geben. Aufgrund dieser Basis sind dann Vergleiche der numerischen, quantenmechanischen Ergebnisse mit den klassischen Theorien möglich.

2.3.1 Klassische instantane Coulombstreuung

Eine Möglichkeit die Streuung von Teilchen an Ionen im Laserfeld zu beschreiben ist das klassische Modell der instantanen Stöße [2]. Um die Streuung als instantan betrachten zu können, muss die Wechselwirkungsdauer des Elektrons mit dem Ion wesentlich kürzer sein als die Periodendauer des Laserfeldes. In

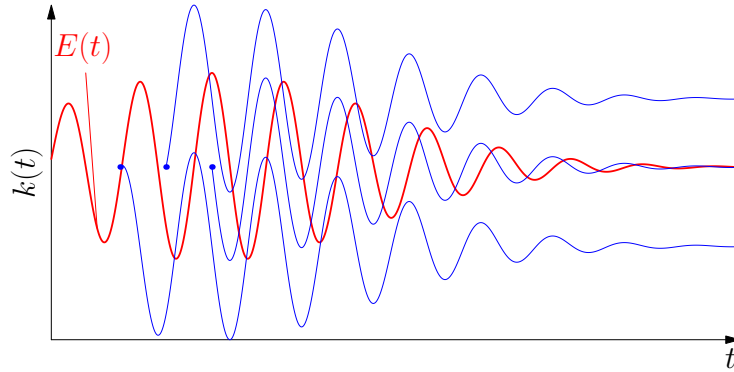


Abbildung 1: Teilchen werden zu unterschiedlichen Zeiten in Anwesenheit eines elektromagnetischen Feldes (rote Linie) erzeugt. Diese Zeitpunkte werden durch die blauen Punkte dargestellt. Die blauen Kurven geben den zeitlichen Verlauf der Geschwindigkeit der einzelnen Teilchen nach dem quasiklassischen Quivermodell an. Für große Zeiten verschwindet das Feld und die Geschwindigkeitskurven konvergieren gegen einen konstanten Wert. Dieser hängt sehr sensitiv vom Erzeugungszeitpunkt ab und es können innerhalb eines Laserzykluses vollkommen verschiedene Trajektorien beobachtet werden.

diesem Abschnitt wird wieder ein elektrisches Feld der Form (15) verwendet. Die Impulse vor und nach dem Stoß werden mit k_0 bzw. k bezeichnet. Mit der De Brogliewellenzahl für den Impulsübertrag $\kappa = |k - k_0|$ lässt sich die charakteristische Wechselwirkungslänge als $r = \frac{2\pi}{\kappa}$ schreiben. Der Impuls vor der Streuung sei im folgenden mit k_0 bezeichnet. Mit der Periodendauer des Laserfeldes $T = \frac{2\pi}{\omega}$ erhält man das Kriterium $\frac{r}{v_0} \ll T$. Diese lässt sich noch mit der Quiveramplitude $\xi = \frac{v_0}{\omega}$ umschreiben zu $\kappa\xi \gg 1$. v_0 ist die bereits im vorherigen Abschnitt 2.2 eingeführte Quiveramplitude. Unter dieser Voraussetzung lässt sich das Laserfeld während des Kollisionszeitraums als konstant annehmen. Aus der Impulserhaltungsgleichung erhält man eine Bestimmungsgleichung

$$k + p_\epsilon = -(k_0 + p_\epsilon) \quad (21)$$

für den Driftimpuls nach dem Stoß k . $k_0 > 0$ bezeichnet hier wieder den Driftimpuls vor der Kollision zum Zeitpunkt t_c und $p_\epsilon = -v_0 f(t_c) \sin(\Phi)$ den Quiverimpuls mit der Phase $\Phi = \omega t_c + \phi$. Der Driftimpuls nach dem Stoß lässt sich also schreiben als

$$k = -(k_0 + 2p_\epsilon). \quad (22)$$

Aus dieser Beziehung lässt sich sofort eine wichtige Eigenschaft ableiten. Der neue Driftimpuls schwankt zwischen den Werten

$$k_{\max}^{(1)} = -k_0 - 2v_0 f(t_c) \text{ und } k_{\min}^{(1)} = -k_0 + 2v_0 f(t_c) \quad (23)$$

für einen einzelnen Streuprozess. In einer klassischen Beschreibung ist der Endimpuls also durch die beiden Cutoffs (23) beschränkt.

2.3.2 Klassische Resonanzbedingung

Als weitere Konsequenz dieses Modells lässt sich eine Bedingung für den maximale Impulsübertrag zwischen Feld und Teilchen in einem System aus einem

1D-Modellatom und einem 1D-Modellion ableiten [4]. Im Fall dieser Arbeit wird ein 1D - Modellwasserstoffatom und ein 1D - Modellwasserstoffion verwendet. Ein solches System soll im Folgenden als $\text{H} - \text{H}^+$ - System bezeichnet werden. Die beiden zugehörigen Coulombpotentiale befinden sich in einem konstanten Abstand D zueinander. Das Teilchen habe einen Anfangsimpuls $k_0 > 0$. Nachdem es zum Zeitpunkt t_c mit maximalen Impulsübertrag am Ion (siehe Abb. 2) gestreut hat, hat es einen Impuls $k_1 = -k_0 - 2v_0f(t_c)$. Damit es beim zweiten Streuprozess zum Zeitpunkt t_{c2} den maximalen Impuls erhält, müssen die Bedingungen

$$\frac{\pi}{2} + 2\pi m = \omega t_{c2} + \phi; m = 0, 1, 2, \dots \quad (24)$$

bzw.

$$t_{c2} = \frac{\pi}{2\omega} + \frac{2\pi}{\omega} m - \frac{\phi}{\omega}; m = 0, 1, 2, \dots \quad (25)$$

für den Kollisionszeitpunkt t_{c2} erfüllt sein. In diesem Zeitraum legt das Teilchen gerade die Strecke

$$\left| k_{\text{max}}^{(1)} \right| (t_{c2} - t_c) = (k_0 + 2v_0f(t_{c2})) \left(\frac{\pi}{2\omega} + \frac{2\pi}{\omega} m - \frac{\phi}{\omega} - t_c \right); m = 0, 1, 2, \dots \quad (26)$$

zurück. Also muss für einen maximalen Energiegewinn gerade die Bedingung

$$D = (k_0 + 2v_0f(t_{c2})) \left(\frac{\pi}{2\omega} + \frac{2\pi}{\omega} m - \frac{\phi}{\omega} - t_c \right); m = 0, 1, 2, \dots \quad (27)$$

für ein beliebiges m erfüllt sein. Der maximale Impuls nach der zweiten Streuung

$$k_{\text{max}}^{(2)} = -(k_{\text{max}}^{(1)} - 2v_0f(t_{c2})) \quad (28)$$

ergibt sich iterativ nach Gleichung (23).

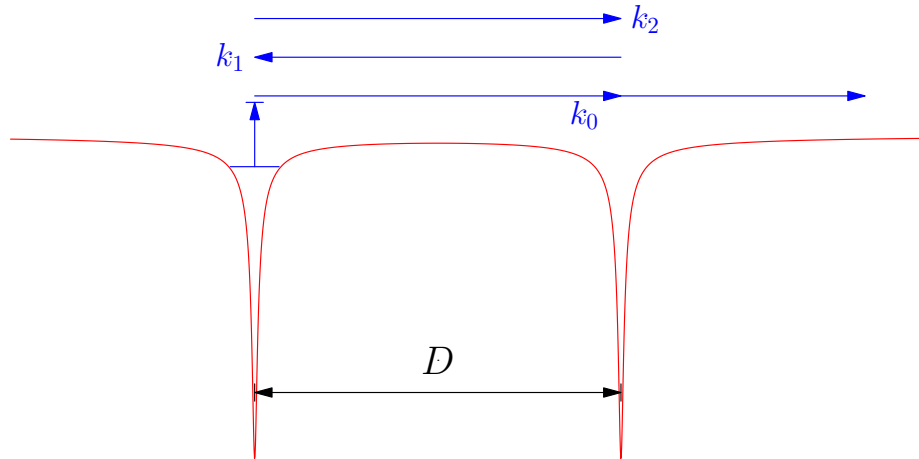


Abbildung 2: schematische Darstellung des $\text{H} - \text{H}^+$ - Systems. Ein Teilchen mit dem Anfangsimpuls k_0 wird an einem Ion zurück gestreut und erhält dabei einen Impuls k_1 . Beim zweiten Streuprozess nimmt es analog den Impuls k_2 an und verlässt dann das System ohne einen weiteren Streuprozess.

3 Numerische Methodik

Dieses Kapitel beschäftigt sich mit der numerischen Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung (TDSE). Dabei wird von der, im Theorieteil hergeleiteten, TDSE mit Dipolapproximation unter Längeneichung ausgegangen. Nachdem auf dieser Basis das Crank-Nicolson-Schema abgeleitet wurde, geht diese Kapitel noch auf die Konstruktion der stationären Zustände eines gegebenen Potentials ein und beschäftigt sich mit der Berechnung der quantenmechanischen Observablen und der Spektren. Eine wichtige Größe, die in diesem Rahmen motiviert wird, ist das Energiespektrum eines freien Teilchens. Auch hier stützt sich die Herleitung hauptsächlich auf [3].

3.1 Numerische Lösung der Schrödingergleichung

Ausgehend von der Ortsdarstellung der TDSE

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = \hat{H} \Psi(\vec{r}, t) \quad (29)$$

mit dem Hamiltonoperator in Ortsdarstellung

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}, t). \quad (30)$$

lässt sich jetzt ein numerisches Verfahren zur Propagation eines Anfangszustandes in der Zeit ableiten. $V(\vec{r}, t)$ bezeichnet hier das zeitabhängige Potential. Dieses kann auch ein elektromagnetisches Feld in Längen-Eichung enthalten (siehe Abschnitt 2.1.3 Gleichung (14)). In atomaren Einheiten lässt sich die Gleichung umschreiben in

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = -\frac{1}{2} \Delta \Psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t). \quad (31)$$

Um die Schrödingergleichung numerisch zu lösen existieren viele Ansätze. Da sich der Hauptteil dieser Arbeit mit Ionisations- und Streuprozessen beschäftigt, ist es am sinnvollsten die Schrödingergleichung in Ortsdarstellung zu betrachten. Die numerischen Methoden, die diese Darstellung am Besten abbilden, sind auf finiten Differenzen basierende Gittermethoden.

3.1.1 Das Raum - Zeit - Gitter

Um ein Problem numerisch behandeln zu können, muss dieses Problem aufgrund der endlichen Ressourcen diskretisiert werden. Im Fall von Gittermethoden geschieht dies durch Reduktion des reellen Raums auf eine endlichen Anzahl von Punkten, auf denen das Problem dargestellt wird. Diese bilden das Gitter. Im Fall der zeitabhängigen 1D - Schrödingergleichung im Ortsraum führt dies auf die Definition eines Gitters mit einer Zeit- und einer Raumdimension. Dies geschieht hier durch Wahl eines äquidistanten Zeitgitters mit N_t Gitterpunkten innerhalb eines Zeitintervalls $[t_0, t_{N_t-1}]$. Daraus ergibt sich ein Zeitschritt von $\Delta t := \frac{t_{N_t-1} - t_0}{N_t - 1}$. Die einzelnen Gitterpunkte werden im Folgenden mit $n = 0, 1, \dots, N_t - 1$ indiziert. Analog sind die N_x Gitterpunkte in der Ortskoordinate äquidistant über ein Raumintervall $[a, b]$ verteilt und es ergibt sich ein Ortschaftschritt von $\Delta x := \frac{b-a}{N_x - 1}$. Die Gitterpunkte der Ortskoordinate werden mit

$i = 0, 1, \dots, N_x - 1$ indiziert. Damit lassen sich Bezeichnungen für die physikalischen Größen auf dem Gitter einführen. Das dadurch definierte Gitter ist in Abbildung 3.1.1 schematisch dargestellt. $\Psi_i^n \triangleq \Psi(a + i\Delta x, t_0 + n\Delta t)$ bezeichne

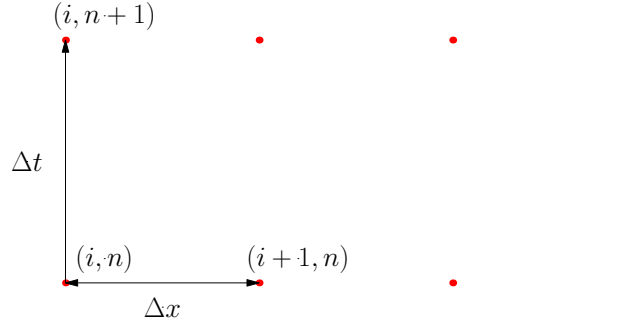


Abbildung 3: Ausschnitt des eindimensionalen Raum - Zeit - Gitter mit den Gitterparametern Δx und Δt . An den einzelnen Gitterpunkten ist das Schema für die Indizierung angegeben.

den n -ten Punkt auf dem Zeitgitter und den i -ten Punkt auf dem Raum - Gitter. Analog bezeichne $V_i^n \triangleq V(a + i\Delta x, t_0 + n\Delta t)$ das Potential auf einem solchen Punkt des Raum-Zeit-Gitters. Damit lässt sich das Problem vollkommen auf dem Gitter darstellen. Um das Problem vollständig zu lösen, müssen jetzt noch die Größen auf den einzelnen Gitterpunkten sinnvoll miteinander in Beziehung gesetzt werden. Dies geschieht innerhalb dieser Arbeit mit dem weit verbreiteten Crank-Nicolson-Verfahren.

3.1.2 1D - Crank - Nicolson - Verfahren

Bei der Auswahl eines geeigneten Verfahrens zum Lösen der TDSE kann man sich jetzt zu nutze machen, dass die Struktur der TDSE einer Diffusionsgleichung mit komplexen Koeffizienten entspricht. Ein häufig genutztes Verfahren in diesem Anwendungsbereich ist das Crank - Nicolson - Verfahren. Dieses hat außerdem den Vorteil, dass es die Normierung der Wellenfunktion erhält.

Für die Herleitung des 1D-Crank-Nicolson-Verfahrens gehen wir von der 1D-TDSE

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t) + V(x, t) \Psi(x, t) \quad (32)$$

aus. Die formale Lösung dieser Gleichung ist bekannterweise

$$\Psi(x, t) = \hat{T} \exp \left(-i \int_{t_0}^t \hat{H}(\bar{t}) d\bar{t} \right) \Psi_0(x). \quad (33)$$

$\Psi_0(x) = \Psi(x, t_0)$ entspricht dabei der Wellenfunktion zum Anfangszeitpunkt $t = t_0$. $\hat{U}(t, t_0) = \hat{T} \exp \left(-i \int_{t_0}^t \hat{H} dt \right)$ ist der Zeitentwicklungsoperator. Für die numerische Auswertung muss das Integral in (33) diskretisiert werden. Dazu lässt sich die Zeitdimension des in 3.1.1 eingeführten Gitters verwenden. Damit lässt sich das Integral zwischen den einzelnen Gitterpunkten zerlegen und man

erhält

$$\hat{T} \exp \left(-i \int_{t_0}^t \hat{H}(\bar{t}) d\bar{t} \right) = \hat{T} \exp \left(-i \sum_{n=0}^{N_t-1} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \hat{H}(\bar{t}) d\bar{t} \right) = \hat{T} \prod_{n=0}^{N_t-1} \exp \left(-i \int_{t_n}^{t_{n+1}} \hat{H}(\bar{t}) d\bar{t} \right) \quad (34)$$

als eine Darstellung des Zeitentwicklungsoperators. Aus (34) wird ersichtlich, dass sich die gesamte Propagation in der Zeit aus einzelnen Zeitschritten zusammensetzen lässt. Wählt man jetzt den Zeitschritt Δt so klein, dass sich der Hamiltonoperator des Systems sich in diesem Zeitraum kaum ändert, lassen sich die verbleibenden Integrale

$$\hat{T} \exp \left(-i \int_{t_n}^{t_{n+1}} \hat{H}(\bar{t}) d\bar{t} \right) \approx \exp \left(-i \hat{H}(t_n) \Delta t \right) =: \hat{u}_n \quad (35)$$

im Zeitentwicklungsoperator abschätzen. \hat{u}_n propagiert dabei die Wellenfunktion vom Zeitpunkt t_n zum Zeitpunkt t_{n+1} . Ausgehend von Cayleys' Darstellung[8] der Operatorexponentialfunktion

$$\exp \left(-i \int_{t_n}^{t_{n+1}} \hat{H}(\bar{t}) d\bar{t} \right) \approx \frac{1 - \frac{1}{2} i \hat{H}(t_n) \Delta t}{1 + \frac{1}{2} i \hat{H}(t_n) \Delta t} \quad (36)$$

lässt sich jetzt das Crank - Nicolson - Schema ableiten. Die Wahl dieser Darstellung erhält insbesondere die Unitarität des Zeitentwicklungsoperators. Die Normierung der Wellenfunktion

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = 1 \quad (37)$$

bleibt also bei der Propagation mit diesem Operator für alle Zeitpunkte erhalten. Mit (36) und (35) ergibt sich für die Wellenfunktionen zum Zeitpunkt t_n und t_{n+1} die Beziehung

$$\left(1 + \frac{1}{2} i \hat{H}(t_n) \delta t \right) \Psi(x, t_{n+1}) = \left(1 - \frac{1}{2} i \hat{H}(t_n) \delta t \right) \Psi(x, t_n). \quad (38)$$

Approximiert man die Ableitungen im Hamiltonoperator durch finite Differenzen ergibt sich die Darstellung

$$\hat{H} \Psi_i^n = \frac{\hat{p}^2}{2} \Psi_i^n + V(x) \Psi_i^n \approx \frac{\Psi_{i+1}^n - 2\Psi_i^n + \Psi_{i-1}^n}{2(\Delta x)^2} + V_i^n \Psi_i^n \quad (39)$$

des Hamiltonoperators auf dem Gitter. Mit Gl. (39) und den Abkürzungen

$$\alpha = i \frac{\Delta t}{4(\Delta x)^2}, \quad (40)$$

sowie

$$a_i = c_i = -\alpha, \quad b_i = 1 + 2\alpha + \frac{1}{2} i \Delta t V_i^n; \quad i = 1 \dots N_x - 2 \quad (41)$$

lassen sich beide Seiten von (38) auswerten. Die linke Seite von Gleichung (38) geht über in

$$\left(1 + \frac{1}{2}i\hat{H}(t_n)\Delta t\right) \Psi(x, t_{n+1}) \approx a_i\Psi_{i-1}^{n+1} + b_i\Psi_i^{n+1} + c_i\Psi_{i+1}^{n+1}. \quad (42)$$

Analog lässt sich die rechte Seite von (38) zu

$$\begin{aligned} \left(1 - \frac{1}{2}i\hat{H}(t_n)\Delta\right) \Psi(x, t_n) \approx \left(1 - 2\alpha - \frac{1}{2}i\Delta tV_i^n\right) \Psi_i^n + \\ \alpha\Psi_{i-1}^n + \alpha\Psi_{i+1}^n =: r_i^n; i = 1 \dots N_x - 2 \end{aligned} \quad (43)$$

umschreiben. Zusammen ergeben (42) und (43) ein tridiagonales lineares Gleichungssystem für die Ψ_i^n bei festem n . In Matrixform notiert erhält man folgendes System

$$\begin{pmatrix} b_0 & c_0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ a_1 & b_1 & c_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & a_2 & b_2 & c_3 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & a_{N_x-1} & b_{N_x-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_0^n \\ \Psi_1^n \\ \vdots \\ \vdots \\ \Psi_{N_x-1}^n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r_0^n \\ r_1^n \\ \vdots \\ \vdots \\ r_{N_x-1}^n \end{pmatrix}. \quad (44)$$

Die bisher unbekanntenen Matrixelemente b_0, c_0, r_0^n sowie $b_{N_x-1}, c_{N_x-1}, r_{N_x-1}^n$ sind durch die Randbedingungen am linken bzw. rechten Rand gegeben. Im Rahmen dieser Arbeit werden nur Dirichletrandbedingungen verwendet. Die Bedingungen

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \Psi(x, t) = 0 \text{ und } \lim_{x \rightarrow -\infty} \psi(x, t) = 0 \quad (45)$$

führen auf reflektierende Ränder des Gitters. Die Forderung (45) kann dadurch erfüllt werden, dass man $\Psi_0^n = \Psi_{N_x-1}^n = 0$ setzt. Setzt man dies in die Spezialfälle der Gleichungen (42) und (43) für $i = 0, N_x - 1$ ein, ergeben sich die Koeffizienten zu

$$a_0 = a_{N_x-1} = c_0 = c_{N_x-1} = 0; b_0, b_{N_x-1} \in \mathbb{C} \setminus \{0\} \quad (46)$$

Die Forderung $b_0 \neq 0, b_{N_x-1} \neq 0$ ist für die eindeutige Lösbarkeit von (44) nötig. Im Rahmen dieser Arbeit wurde einfach $b_0 = b_{N_x-1} = 1 + i$ gewählt.

Das Crank - Nicolson - Schema lässt sich auf höhere Dimensionen erweitern. Verfahren dazu finden sich z.B. in [8]. Allerdings ist hierbei zu beachten, dass der Rechenaufwand pro zusätzlicher Dimension exponentiell ansteigt und das Verfahren bei Behandlung von Mehrteilchensystemen selbst an die Grenzen heutiger Großrechner stoßen kann.

3.1.3 Imaginary Time Propagation (ITP)

An dieser Stelle soll auf eine alternative Verwendungsmöglichkeit für das soeben abgeleitete Propagationsverfahren hingewiesen werden. Durch Übergang von der Zeit t auf eine imaginäre Zeit it lässt sich das Verfahren so adaptieren, dass man damit die Energieeigenzustände eines beliebigen zeitunabhängigen Potentials konstruieren kann. Führt man in Gleichung (32) die imaginäre Zeit ein,

so geht die TDSE in eine Diffusionsgleichung über. Propagiert man einen beliebigen Anfangszustand über diese Gleichung in der imaginären Zeit, konvergiert dieser gegen den Grundzustand des Potentials. Eine genaue Begründung für dieses Verhalten wird in [3] gegeben. Da die Normierung bei der Propagation in der imaginären Zeit nicht erhalten bleibt, muss der Zustand in jedem Zeitschritt nachnormiert werden. Auch höhere Zustände lassen sich so erreichen. Orthogonalisiert man den zu berechnenden $n + 1$ -ten Zustand in Ortsdarstellung über das Gram-Schmidtsches-Orthogonalisierungsverfahren

$$\bar{\Psi}_{n+1}(\vec{r}) = \Psi_{n+1}(\vec{r}) - \sum_{j=0}^n \left(\int_{-\infty}^{\infty} d^3\vec{r} \Psi_{n+1}^*(\vec{r}) \phi_j(\vec{r}) \right) \phi_j(\vec{r}) \quad (47)$$

in jedem Zeitschritt, konvergiert dieser gegen den nächst höheren Zustand. Alle Zustände lassen sich also sukzessiv nach dieser Vorschrift konstruieren. Als Maß für die Konvergenz der Zustände lässt sich die auf der Wahrscheinlichkeitsdichte basierende Größe

$$\Delta\xi := \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, i(t + \Delta t)) - \Psi(x, it)|^2 dx \quad (48)$$

definieren. Diese wurde schon erfolgreich in [3] verwendet und hat gegenüber anderen Größen, wie z.B. der Energie, den Vorteil, dass diese sensitiv auf Dichteschwankungen reagiert.

3.1.4 Berechnung der Erwartungswerte und Spektren

Mittels des Crank - Nicolson - Verfahrens lässt sich jetzt die Wellenfunktion an jedem Ort zu jeder Zeit bestimmen. Durch die Wellenfunktion ist das Verhalten des System vollständig bestimmt und es lassen sich die verschiedenen Observablen der Quantenmechanik aus der Wellenfunktion berechnen. Aus der Quantenmechanik ist bekannt, dass

$$\langle A \rangle (t) = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t) \hat{A} \Psi(x, t) dx \quad (49)$$

der Erwartungswert eines Operators \hat{A} in Ortsdarstellung bzgl. der Wellenfunktion $\Psi(x, t)$ ist. Zur numerischen Berechnung müssen sowohl das Integral, als auch der Operator, diskretisiert werden. Die Wellenfunktion außerhalb der Simulationsbox $[a, b]$ wird bei der Berechnung des Integrals als identisch 0 angenommen. Für die Darstellung auf dem äquidistanten Gitter erweist es sich als sinnvoll auch die Quadratur äquidistant durchzuführen. Das Integral zerfällt somit in eine Summation über alle Ortsgitterpunkte zu einem festen Zeitpunkt $t = t_0 + n\Delta t$. Damit ist

$$\langle A \rangle (t) = \int_a^b \Psi^*(x, t) \hat{A} \Psi(x, t) dx \approx \sum_{i=0}^{N_x-1} (\Psi_i^n)^* \hat{A} \Psi_i^n \Delta x \quad (50)$$

der Erwartungswert des Operators \hat{A} bzgl. der Wellenfunktion Ψ_i^n auf dem Gitter. Eventuell im Operator auftauchende Ableitungen werden durch finite Differenzen approximiert. Damit ergeben sich die Erwartungswerte für den Ort

$$\langle x \rangle (t) = \int_a^b \Psi^*(x, t) x \Psi(x, t) dx \approx \sum_{i=0}^{N_x-1} (\Psi_i^n)^* (a + i\Delta x) \Psi_i^n \Delta x \quad (51)$$

,den Impuls

$$\langle p \rangle (t) = \int_a^b -\Psi^*(x, t) i \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t) dx \approx \sum_{i=0}^{N_x-1} -i (\Psi_i^n)^* (\Psi_{i+1}^n - \Psi_i^n) \quad (52)$$

und der potentiellen Energie

$$\langle V \rangle (t) = \int_a^b \Psi^*(x, t) V(x, t) \Psi(x, t) dx \approx \sum_{i=0}^{N_x-1} -(\Psi_i^n)^* V_i^n \Psi_i^n \Delta x. \quad (53)$$

Eine alternative Methode die Erwartungswerte für den Impuls und die kinetische Energie zu berechnen ist der Übergang auf die Darstellung im Impulsraum. Anstatt den Operator fehlerbehaftet durch eine finite Differenz darzustellen, benötigt der Algorithmus im Impulsraum nur eine Multiplikation mit einem reellen Wert. Bekannterweise ergibt sich die Wellenfunktion im Impulsraum

$$\Psi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x) e^{ikx} dx \quad (54)$$

als Fouriertransformierte der Wellenfunktion im Ortsraum. Bei der Diskretisierung auf dem Gitter geht die kontinuierliche Fouriertransformation (FT) in eine diskrete Fouriertransformation (DFT) über. Zur Berechnung der DFT wird normalerweise ein FFT - Algorithmus verwendet. Da die DFT im Allgemeinen nicht die Normierung der Wellenfunktion erhält, muss diese noch nachnormiert werden. Im Folgenden wird die Wellenfunktion im Impulsraum durch einen lateinischen Ortsindex gekennzeichnet z.B. Ψ_α^n . Damit lässt sich der Impulserwartungswert mit $k_\alpha = -\frac{\pi}{\Delta x} + \alpha \frac{2\pi}{\Delta x(N_x-1)}$ als

$$\langle p \rangle (t) = \int_{-\frac{\pi}{\Delta x}}^{\frac{\pi}{\Delta x}} \Psi^*(k, t) k \Psi(k, t) dk \approx \sum_{\alpha=0}^{N_x-1} (\Psi_\alpha^n)^* k_\alpha \Psi_\alpha^n \Delta k \quad (55)$$

schreiben. Analog ist der Erwartungswert der kinetischen Energie in dieser Darstellung durch

$$\langle E_{kin} \rangle (t) = \frac{1}{2} \int_{-\frac{\pi}{\Delta x}}^{\frac{\pi}{\Delta x}} \Psi^*(k, t) k^2 \Psi(k, t) dk \approx \frac{1}{2} \sum_{\alpha=0}^{N_x-1} (\Psi_\alpha^n)^* (k_\alpha)^2 \Psi_\alpha^n \Delta k \quad (56)$$

zu berechnen. Die Form der Berechnung liefert oftmals genauere Ergebnisse als die direkte Berechnung, da die Diskretisierung nicht von Δx abhängt, sondern über $\Delta k = \frac{2\pi}{(b-a)}$ mit der reziproken Boxlänge skaliert. Für große Simulationsboxen erhält man also einen geringeren zusätzlichen Diskretisierungsfehler. Für kleine Boxgrößen wird der Fehler allerdings groß und man sollte für solche Systeme die direkte Berechnung mittels finiten Differenzen verwenden. Da die Systeme in dieser Arbeit ausnahmslos größer als $100.0 a.u.$ waren, wurde hier auf eine Implementierung des direkten Verfahrens verzichtet. Zusätzlich muss die Größe des Impulsraums so gewählt werden, dass die Wellenfunktion im Impulsraum möglichst vollständig in ihm liegt. Ein weiterer Vorteil dieses Ansatzes ist es, dass man zusätzlich das Impulsspektrum ohne weiteren Mehraufwand erhält. Dieses lässt sich auch gleich nutzen um das Impulsspektrum eines freies

Teilchens zu berechnen. Betrachtet man ein Teilintervall $[c, d]$ der Simulationsbox, in dem das Potential klein gegenüber der kinetischen Energie des Teilchens ist, lässt sich die Wellenfunktion dort als freies Teilchen annehmen und es gilt die Dispersionsrelation $E = \frac{k^2}{2}$. Durch Variablentransformation ergibt sich das Energiespektrum des freien Teilchens

$$\Psi(E) = \Psi(k(E) = \sqrt{2E}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_c^d \Psi(x) e^{i\sqrt{2E}x} dx \quad (57)$$

aus dem bereits bekannten Impulsspektrum. Das Energiespektrum wird hier nicht normiert, da dies für die Anwendungen in dieser Arbeit nicht erforderlich ist. Sollte das Energiespektrum für weitere Berechnungen verwendet werden, so ist dies zu berücksichtigen. Eine weitere wichtige Observable ist die Gesamtenergie des Systems. Da diese normalerweise erhalten bleibt, lässt sie sich für die Fehlererkennung und Abschätzung der Konvergenz heranziehen. Im Fall eines zeitunabhängigen Hamiltonians ist die Gesamtenergie

$$E_{\text{ges}} = \langle E_{\text{kin}} \rangle (t) + \langle V \rangle (t) = \text{const.} \quad (58)$$

eine Erhaltungsgröße. Im Fall eines Systems mit Laserfeld ist der Hamiltonian aber zeitabhängig und die Energie des Teilchens $E_{\text{sys}} = \langle E_{\text{kin}} \rangle (t) + \langle V \rangle (t)$ bleibt nicht erhalten, da die Energie des Feldes nicht berücksichtigt wird. Das Laserfeld $E(t)$ in Dipolapproximation verrichtet in einem kleinen Zeitintervall dt die Arbeit

$$dW = -\langle \dot{x} \rangle E(t) dt \quad (59)$$

am Teilchensystem. Durch partielle Integration erhält man daraus die Feldenergie

$$E_{\text{Feld}}(t) = - \int_{t_0}^t dt \langle x \rangle \frac{\partial}{\partial t} E(t). \quad (60)$$

Dabei wurde angenommen, dass die Feldenergie zum Anfangszeitpunkt t_0 gleich Null ist. Außerdem wird der Randterm der oberen Grenze nicht mit berücksichtigt. Dieser geht schon in die potentielle Energie ein und darf nicht doppelt berücksichtigt werden. Dann bleibt die Gesamtenergie

$$E_{\text{ges}} = \langle E_{\text{kin}} \rangle (t) + \langle V \rangle (t) + E_{\text{Feld}}(t) \quad (61)$$

erhalten.

3.1.5 Implementierung in ISO/IEC C++

Zur numerischen Lösung der TDSE wurde das CN-Verfahren für diese Arbeit in ISO/IEC C++ implementiert. Das Programm nutzt dabei die Sprachkonstrukte des Standards von 2003. Konstrukte des kommenden Standards C++0x können optional aktiviert werden, sollte der Compiler sie unterstützen. Das Programm nutzt intensiv Meta Template Programming (MTP) zur automatischen Codeoptimierung und -generierung. Ein entsprechend standardkonformer und moderner Compiler ist nötig um das Programm problemlos zu kompilieren. Besonders sei hier auf das auf [9] basierende FactorySubscriber - Pattern hingewiesen, das eine wesentliche Verbesserung der Laufzeiten ermöglichte. Für eine kurze Einführung in die Programmierung mit MTP siehe z.B. [10]. Zum Kompilieren wird außerdem eine aktuelle Version der boost - Bibliothek benötigt. Als Algorithmus zur

Lösung des tridiagonalen Gleichungssystems wurde eine optimierte Version des Fast Thomson - Algorithmus aus [8] verwendet. Zur schnellen Berechnung des Spektrums wird eine nach [11] implementierte Multi-Radix-Variante des Cooley-Tukey Algorithmuses verwendet. Das Programm unterstützt die parallele Ausführung mehrere Rechnungen sowohl auf Architekturen mit gemeinsamen Speicher, als auch mit verteiltem Speicher. Für die Nutzung des Programms auf einer Architektur mit verteiltem Speicher ist das Linken gegen das oasis - Framework und gegebenenfalls gegen eine MPI - Bibliothek nötig. Zusätzlich ist ein externes Programm zur Berechnung des Spektrums vorhanden. Das Programm unterstützt den g++ - Compiler in den Versionen 4.2, 4.3 und 4.4, sowie den msv - Compiler in den Versionen 9.0 und 10.0. Andere Compiler wurden bis jetzt nicht getestet, es sollte aber kein Problem sein das Programm mit anderen standardkonformen Compilern zu kompilieren. Auf Betriebssystemseite wurde das Programm ausführlich unter Kubuntu 10.4, sowohl unter der x86-Architektur, als auch unter der x86-64-Architektur, getestet. Auch hier sollte es kein Problem sein das Programm unter anderen Betriebssystemen zu nutzen.

4 Numerische Ergebnisse

4.1 Konvergenz - Untersuchung des CN - Algorithmuses

4.1.1 Harmonischer Oszillator

Als erstes Testsystem soll hier der harmonische Oszillator verwendet werden. Dieses System eignet sich für eine erste Untersuchung der Konvergenz besonders, da seine Eigenschaften bekannt und gut untersucht sind. Ein Vergleich des numerischen Ergebnisses mit der exakten Lösung ist also leicht möglich. Der harmonische Oszillator wird durch den Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2} + \frac{1}{2}\omega^2\hat{x}^2 \quad (62)$$

mit der Frequenz ω beschrieben. Als Anfangszustand des Systems wird einfach ein Gaußsches Wellenpaket

$$\Psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{\sigma}\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2}\frac{(x-x_0)^2}{\sigma^2}\right) \quad (63)$$

als kohärenter Zustand genutzt. Als Systemparameter wurden dabei $\omega = 0.25$ a.u., $x_0 = -5.5$ a.u. und $\sigma = 2.0$ a.u. gewählt. Es stellt sich allerdings heraus, dass es sich als schwierig erweist für das System einen aussagekräftigen Fehler zu definieren. Die Normierung scheidet für die Fehlerbetrachtung aus, da das CN - Verfahren garantiert, dass die Normierung unabhängig von den Gitterparametern erhalten bleibt. Eine weitere Idee wäre es, die mittlere Schwankung der Gesamtenergie zu betrachten. Versuche mit dieser Fehlerdefinition haben aber gezeigt, dass dieser Fehler für sehr große Gitterabstände wieder sinkt und deswegen nicht aussagekräftig ist. Letztendlich erweist es sich als sinnvoll den Fehler über die Periodizität des harmonischen Oszillators zu definieren. Da diese Eigenschaft der Observablen den harmonischen Oszillators auszeichnet ist jede Abweichung von der Periodizität natürlich ein Maß für einen Fehler. Die Ände-

rung der Gesamtenergie über einen Abstand von 4 Perioden des Oszillators

$$\Delta\epsilon = \frac{E_{\text{ges}}(4T) - E_{\text{ges}}(0)}{4T} \quad (64)$$

stellt also ein Maß für den numerischen Fehler dar, das im Folgenden für dieses System genutzt wird. Abbildung 4 zeigt den Fehler für den harmonischen Oszillator in Abhängigkeit von Δt für verschiedene Werte von Δx . Für einen Wert von

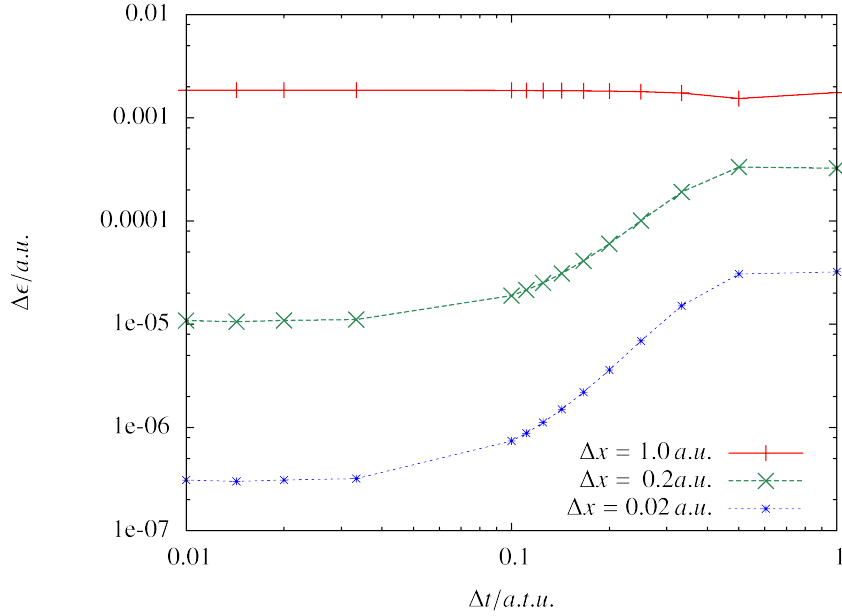


Abbildung 4: Fehler $\Delta\epsilon$ für einen um $x_0 = -5.0$ a.u. aus der Ruhelage ausgelenkten kohärenten Zustand in einem harmonischen Oszillator der Fallenfrequenz $\omega = 0.25$ a.u. in Abhängigkeit von Δt bei verschiedenen Δx .

$\Delta x = 1.0$ a.u. erhält man eine fast konstante Fehlerkurve in Δt a.u.. Dies zeigt schon, dass dieser Wert wahrscheinlich nicht ausreicht, um das System genau genug zu simulieren. Senkt man den Wert von Δx weiter, ergibt sich eine Abhängigkeit des Fehlers von Δt . Ab einem Wert von ungefähr $\Delta t = 0.6$ a.u. sinkt der Fehler bei beiden Kurven ab und konvergiert dann ungefähr bei $\Delta t = 0.03$ a.u. gegen einen festen Wert. Es ist also nicht ratsam den Parameter Δt noch kleiner zu wählen, da dies mehr Rechenzeit kostet, aber den Fehler nicht weiter verringert. Erwartungsgemäß wird die Fehlerkurve bei kleinerem Δx nach unten verschoben.

Die gleiche Betrachtung lässt sich in Abhängigkeit von Δx bei verschiedene Δt durchführen. Dies zeigt Abbildung 5. Auch hier zeigt sich, dass $\Delta t = 1.0$ a.u. kein geeigneter Parameter ist. Im Gegensatz zur Zeitabhängigkeit sinkt der Fehler hier zwar, aber der Vergleich mit $\Delta x = 0.1$ a.u. zeigt, dass sich ein wesentlich besseres Fehlerverhalten erreichen lässt. Der Fehler für $\Delta t = 0.1$ a.u. fängt ab $\Delta x = 0.4$ a.u. an innerhalb einer Größenordnung um fast zwei Größenordnungen im Fehler zu sinken. Dadurch liegen für $\Delta x = 0.07$ a.u. schon zwei Größenordnungen zwischen dem Fehler für $\Delta t = 1.0$ a.u. und $\Delta t = 0.1$ a.u., obwohl der

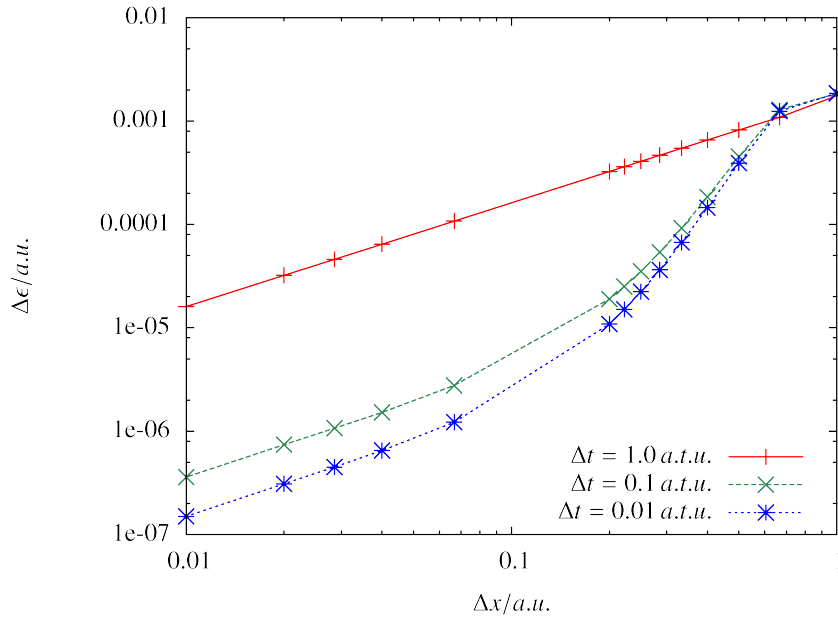


Abbildung 5: Fehler $\Delta\epsilon$ für einen um $x_0 = -5$ a.u. aus der Ruhelage ausgelenkten kohärenten Zustand in einem harmonischen Oszillator der Fallenfrequenz $\omega = 0.25$ a.u. in Abhängigkeit von Δx bei verschiedenen Δt .

Parameter nur um eine Größenordnung kleiner gewählt wurde. Dieser Schritt ermöglicht also eine wesentliche Reduzierung des Fehlers bei verhältnismäßig niedrigem Mehraufwand. Der Schritt auf $\Delta t = 0.01$ a.u. wirkt sich nicht mehr so drastisch aus und die Kurve verläuft fast parallel zur Kurve für $\Delta t = 0.1$ a.u.. Hier ist also zu überprüfen, ob die Verbesserung der Genauigkeit den erhöhten Rechenaufwand rechtfertigt. Zusammenfassend lässt sich sagen, dass Werte von $\Delta t = 0.03$ a.u. und $\Delta x = 0.07$ a.u. einem guten Kompromiss zwischen Genauigkeit und Laufzeit darstellen. Natürlich ist diese Fehlerabschätzung nicht universell und die Konvergenz ist für jedes untersuchte System zu überprüfen. Aber diese Abschätzung ermöglicht zumindest ein grobes Gespür für das Fehlerverhalten des CN - Verfahrens. So ist z.B. zu erwarten, dass die Konvergenz des Fehlers in Abhängigkeit von Δt auch bei anderen Systeme zu beobachten und Δt aufgrund dessen nicht zu klein gewählt werden sollte.

4.1.2 Elektronenstreuung im $H - H^+$ - System

Eine weitere Konvergenzuntersuchung für ein $H - H^+$ - System wird später im Rahmen der weiteren Simulationen durchgeführt, um die Konvergenz in den weiteren Simulationen sicher zu stellen. Da für diese Untersuchung noch einige Definitionen nötig sind, soll hier nur darauf hingewiesen werden.

4.2 Pump-Probe-Simulation

4.2.1 Systemaufbau und Durchführung

Das System für das Pump-Probe-Simulation besteht in diesem Fall dieser Arbeit aus einem einfach geladenen 1D-Modellion und einem 1D - Modellwasserstoffatom, dass zum Anfangszeitpunkt des Experiments im Grundzustand präpariert ist. Das System wird durch den Hamiltonoperator

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{1}{\sqrt{(x-x_0)^2 - \kappa^2}} - \frac{1}{\sqrt{(x-(x_0+D))^2 - \kappa^2}} + E(t)x \quad (65)$$

mit den Positionen des Atoms bzw. des Ions x_0 bzw. $x_0 + D$ und dem Abschneideparameter κ beschrieben. Dieser ist nötig um die Singularität des Coulombpotentials in x_0 bzw. $x_0 + D$ im eindimensionalen System zu vermeiden. Andernfalls könnte man das Potential auf dem Gitter nicht darstellen. Für die folgenden Simulationen wurde $\kappa = 0.1$ gewählt. Anhand des Hamiltonoperators (65) lässt sich ablesen, dass die beiden regularisierten Coulombpotentiale sich in einem Abstand D (siehe Abb. 6) zueinander befinden. Der Abstand D ist dabei frei wählbar, aber während der Simulation fest. Das elektrische Feld

$$E(t) = E_{01} \cos(\omega_1(t-t_0)) \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{(t-t_0)^2}{\sigma_1^2}\right) + E_{02} \cos(\omega_2(t-(t_0+\tau))) \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{(t-(t_0+\tau))^2}{\sigma_2^2}\right) \quad (66)$$

beschreibt die beiden Laserpulse. Die Pulse wurden jeweils als monochromatische Welle mit einer Gaußförmigen Einhüllenden angesetzt. Der erste Puls erreicht zum Zeitpunkt $t = t_0$ die maximale Feldstärke und beschreibt den Pumpuls. Der zweite Puls erreicht seine maximale Feldstärke dagegen zum Zeitpunkt $t = t_0 + \tau$. Dieser Puls stellt den Probepuls dar. Beide Pulse befinden sich also bzgl. ihrer maximalen Feldstärke in einem zeitlichen Abstand τ zu einander (siehe Abb. 7). Auch dieser ist während einer Simulation fest gewählt. Der XUV-Pumpuls kann nun das Wasserstoff-Atom ionisieren und das Elektron ins Kontinuum befördern, wo es vom IR-Probepuls beschleunigt wird und sowohl an dem ursprünglichen Ion als auch an dem ionisierten Atom streuen kann. Während der Streuprozesse kann es Energie aus dem Feld aufnehmen oder abgeben. Nach dem Ende der Simulation lässt sich aus den Daten das Spektrum des freien Elektrons berechnen. Führen wir diesen Prozess für mehrere Pulsabstände τ bei festem D durch, erhalten wir eine Darstellung des Spektrums in Abhängigkeit von τ . Dieses wird in den folgenden Abschnitten als τ -abhängiges Spektrum oder kurz Spektrum bezeichnet. Im Rahmen dieser Arbeit wurden Simulationen für zwei Abstände $D = 80.0$ a.u. und $D = 150.7$ a.u. durchgeführt. Das zweite System wurde dabei gerade so konstruiert, dass es die klassische Resonanzbedingung (vgl. (27)) erfüllen kann. Das Spektrum entstand in beiden Fällen durch die Berechnung des Spektrums für 200, im Intervall $[100.0, 500.0]$ äquidistant verteilte, Werte für τ , die dann in einem Datensatz zusammengefasst wurden.

4.2.2 Eigenzustände des regularisierten Coulombpotentials

Der Grundzustand für das atomare System lässt sich mittels ITP berechnen. Die Wahrscheinlichkeitsdichten der ersten beiden Eigenzustände des regularisierten

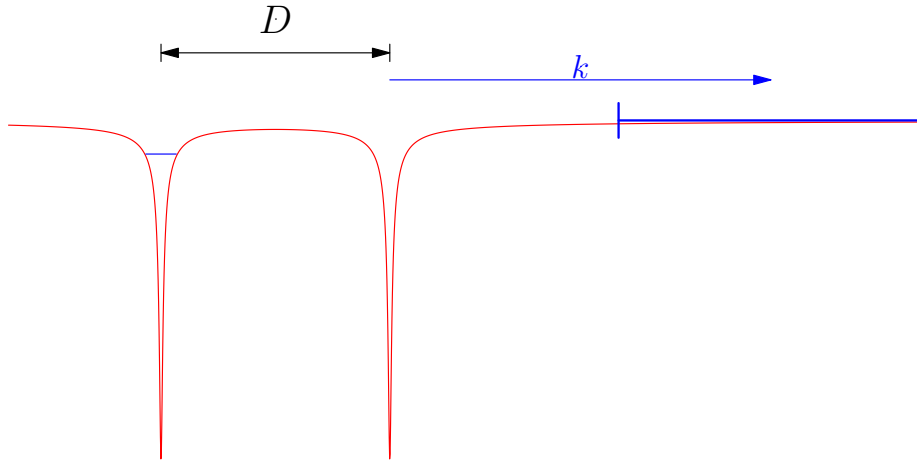


Abbildung 6: schematische Darstellung eines $\text{H} - \text{H}^+$ - Systems. Das Elektron kann sich in dem System bewegen und an den Elektronen streuen (vgl. Abschnitt 2.3). Nach dem Verlassen des Systems wird das freie Teilchen in dem blau gekennzeichneten Intervall detektiert und sein Energiespektrum bestimmt. Für das Detektionsintervall ist gefordert, dass dort die potentielle Energie klein gegenüber der kinetischen Energie des Teilchens ist.

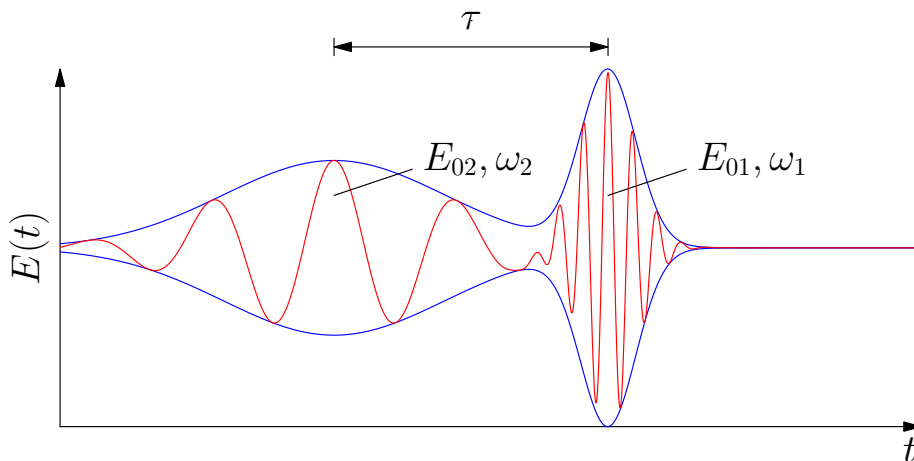


Abbildung 7: schematische Darstellung des in der Simulation verwendeten Pump- und des Probepulses. Die Pulse sind aus Darstellungsgründen nicht maßstabsgetreu gezeichnet. Beide Pulse sind monochromatische Wellen (rot) mit einer gaußförmigen Einhüllenden (blau) und befinden sich bezüglich der Maxima der Einhüllenden in einem zeitlichen Abstand τ .

Coulombpotentials

$$V(x) = \frac{-1}{\sqrt{x^2 + \kappa^2}} \quad (67)$$

sind in Abbildung 4.2.2 für $\kappa = 0.1$ zusammen mit ihren jeweiligen Eigenenergien dargestellt. Bei der Wahl des Anfangszustandes ist zu beachten, dass der tief

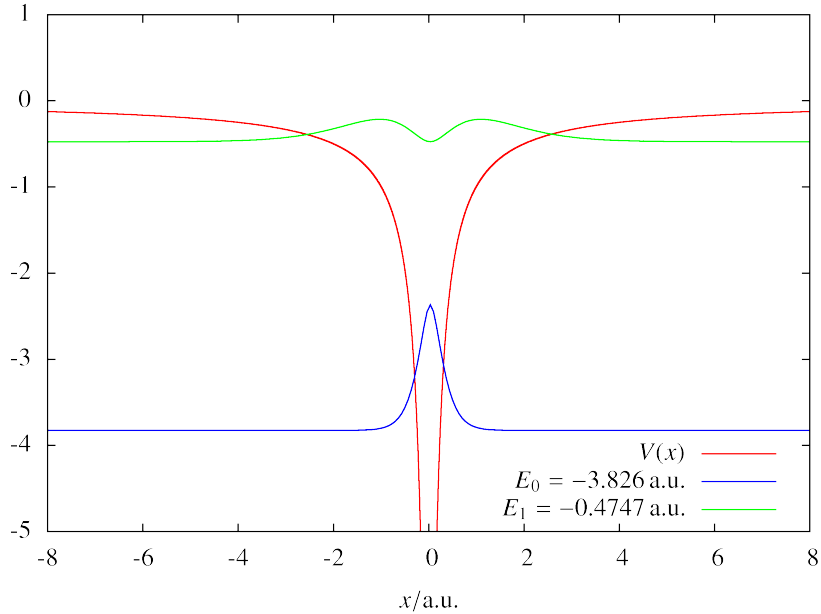


Abbildung 8: Das regularisierte Coulombpotential $V(x) = \frac{-1}{\sqrt{x^2 + \kappa^2}}$ ($\kappa = 0.1$) mit den Wahrscheinlichkeitsdichten seiner ersten beiden Energieeigenzustände. Die jeweiligen Energieeigenwerte stehen in der Legende. Die Zustände wurden mittels ITP berechnet.

liegende erste Eigenzustand eine Artefakt der Regularisierung ist. Für $\kappa \rightarrow 0$ verschwindet dieser Zustand und es ist daher fraglich, ob dieser von physikalischer Relevanz ist. Da der Energieeigenwert $E_1 = 0.4747$ a.u. des zweiten Eigenzustandes ungefähr der analytisch berechneten Eigenenergie des Grundzustandes des 1D - Coulombpotentials entspricht, wurde dieser in den Simulationen als Grundzustand des Atoms verwendet. Mit diesem Zustand sind wesentlich realistischere Ergebnisse zu erwarten. Eine ausführliche Behandlung der Eigenzustände des 1D-Coulombpotentials ist in [3] gegeben.

4.2.3 Konvergenzuntersuchung für die Elektronenstreuung im $\text{H} - \text{H}^+$ - System

Da sich das System für die Pump-Probe-Simulation fundamental von dem des harmonischen Oszillator unterscheidet, soll im folgenden Abschnitt das Konvergenzverhalten für dieses System noch einmal genau untersucht werden. Da es das Ziel der Simulation ist das Energiespektrum des freien Elektrons zu untersuchen, erweist es sich als sinnvoll gerade diese Größe für das Konvergenzverhalten

zu untersuchen. Im Folgenden wurde das Energiespektrum für verschiedene Gittergrößen $N_x \times N_t$ berechnet. Die Simulationsbox ist 7000.0 a.u. groß und das System wird über einen Zeitraum von 1000.0 a.u. propagiert. Aus der Abbildung

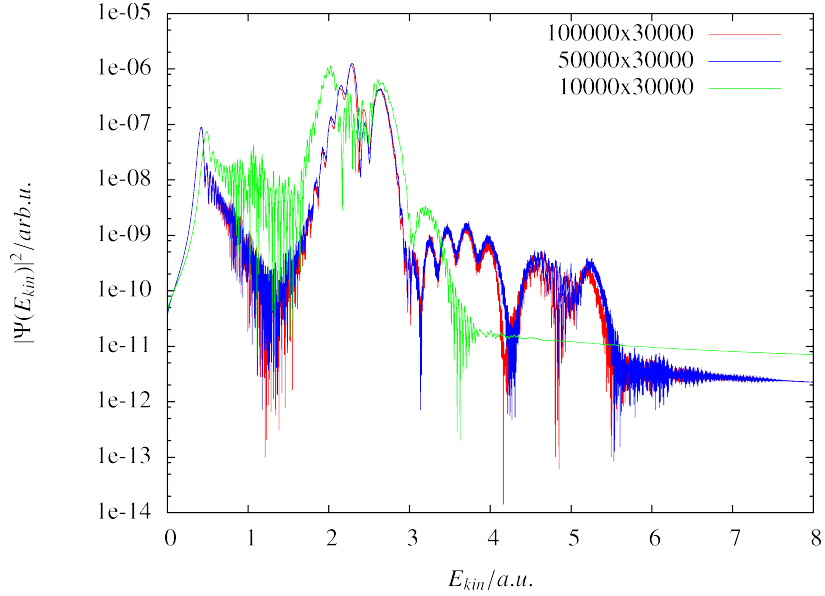


Abbildung 9: Spektren eines freien Teilchens für einH – H⁺ - System, das sich in einem Pumb-Probe-Laserfeld befindet (siehe Abschnitt 4.2.1). Die Spektren wurden für verschiedene Gittergrößen $N_x \times N_t$ aufgenommen. N_x und N_t bezeichnen die Anzahl der Gitterpunkte in der Raum- bzw. Zeitrichtung. Die Anzahl der Zeitgitterpunkte wurde hier fest gewählt.

9 ist ersichtlich, dass ein 10000×30000 Gitter nicht ausreicht um das System zu beschreiben. Dies ist insofern zu erwarten, da ein solches Gitter weit unter der Abschätzung durch den harmonischen Oszillator liegt und der Anfangszustand auf diesem Gitter nicht vollständig konvergiert. Erhöht man die Anzahl der Raumpunkte N_x auf 50000 konvergiert der Anfangszustand auf dem Gitter und das Spektrum auf diesem Gitter unterscheidet sich fundamental von dem vorherigen Fall. Erhöht man die Anzahl der Raumpunkte weiter auf 100000 lässt sich keine weitere signifikante Änderung im Spektrum erkennen. Man kann also annehmen, dass das System bzgl. der Raumdimension konvergiert ist. Um die Konvergenz sicher zu stellen wurde hier eine Anzahl der Raumgitterpunkte von 100000 gewählt um die Konvergenz in der Anzahl der Zeitgitterpunkte zu untersuchen. Vergleicht man das Spektrum in 4.2.3 für die Gitter 100000×30000 und 100000×100000 fällt auf, dass diese für kleine Werte von E_{kin} noch übereinstimmen, aber für größere Werte von E_{kin} langsam auseinanderlaufen. Um die Bewegung schnellerer Teilchen genau aufzulösen, benötigt man eine wesentlich genauere Zeitauflösung als bei langsamen Teilchen. Dieser Effekt ist also zu erwarten. Erhöht man die Anzahl der Zeitpunkte weiter, so ändert sich das Spektrum nicht mehr signifikant. Eine Anzahl von 100000 Zeitpunkten scheint also ausreichend zu sein, um das System hinreichend genau zu beschreiben. Zusammen-

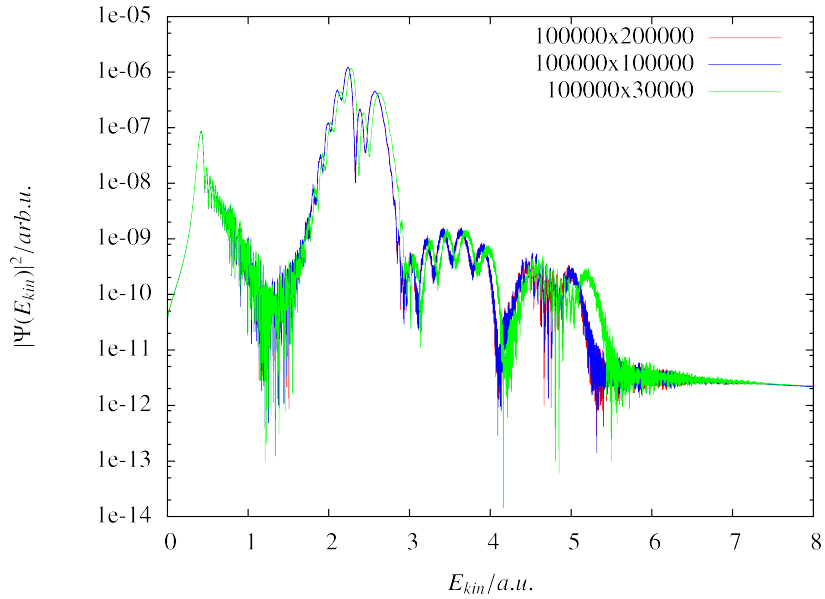
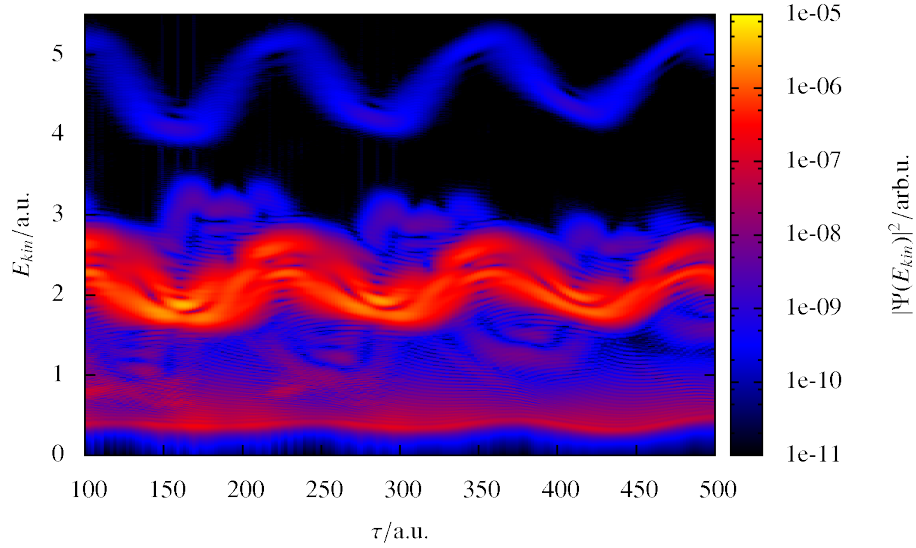


Abbildung 10: Spektren eines freien Teilchens für ein $\text{H} - \text{H}^+$ - System, das sich in einem Pumb-Probe-Laserfeld befindet (siehe Abschnitt 4.2.1). Die Spektren wurden für verschiedene Gittergrößen $N_x \times N_t$ aufgenommen. N_x und N_t bezeichnen die Anzahl der Gitterpunkte in der Raum- bzw. Zeitrichtung. Die Anzahl der Ortsgitterpunkte wurde hier fest gewählt.

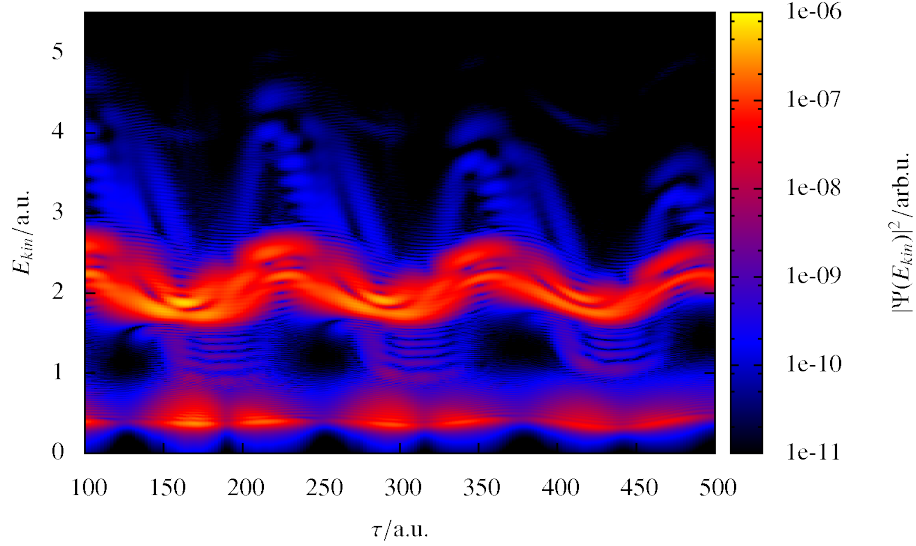
menfassend lässt sich sagen, dass man ein 100000×100000 Gitter benötigt um das System exakt zu beschreiben. Ein solches Gitter liegt auch im Rahmen der Rechenkapazität heutiger Personalcomputer. Eine weitere Erhöhung der Gitterpunktanzahl würde nach den bisherigen Erkenntnissen nur die benötigte Rechenzeit weiter steigern und keine erkennbare Verbesserung des Spektrums mit sich bringen. Dies sollte nur erwägt werden, wenn die Systemparameter so verändert werden, dass eine höhere Auflösung nötig wird. In diesem Fall ist eine erneute Untersuchung der Konvergenz für das neue System durchzuführen.

4.2.4 Vergleich der quantenmechanischen Ergebnisse mit klassischen Theorien

Nach der Durchführung der Simulation ergeben sich die Spektren 11(a) und 11(b) für die Ionenabstände $D = 80.0 \text{ a.u.}$ und $D = 150.7 \text{ a.u.}$. Auffällig ist hier vor allem der große Unterschied in der maximal erreichten Energie in den beiden Systemen. Dies ist allerdings nicht vollkommen überraschend, da das System mit $D = 150.7 \text{ a.u.}$ gerade die klassische Resonanzbedingungen (27) erfüllen kann und für solche Systeme eine höhere Maximalenergie zu erwarten ist. Zusätzlich erhält man für den Abstand $D = 80.0 \text{ a.u.}$ eine weitere Spektralkomponente um die Energie $E_{\text{kin}} = 4.47 \text{ a.u.}$ Diese Energie entspricht einfach der Summe der Grundzustandsenergie und der doppelten Photonenenergie. Die dort beobachtete Spektralkomponente entspricht also einfach einen freien Elektron,



(a) Abstand $D = 80.0$ a.u.



(b) Abstand $D = 150.7$ a.u.

Abbildung 11: Spektren eines freien Elektrons im $\text{H} - \text{H}^+$ - System in Abhängigkeit des Pulsabstandes τ für verschiedene Abstände D . Die Parameter des Pumpimpulses sind $E_{01} = 0.03$ a.u., $\omega_1 = 2.47$ a.u. und $\sigma_1 = 20.0$ a.u. Für den Probestimpuls wurden die Parameter $E_{02} = 0.01$ a.u., $\omega_2 = 0.05$ a.u. und $\sigma_2 = 377.0$ a.u. gewählt.

dass bei der Ionisation zwei Photonen absorbiert hat. Wieso diese Spektralkomponenten bei einem Abstand $D = 80.0$ a.u. so stark auftritt und im Resonanzfall bei $D = 150.7$ a.u. nahezu verschwindet ist noch nicht ganz klar. Da diese Komponente des Spektrums bei beiden Systemen nach der Ionisation nachgewiesen werden kann und diese beim resonanten System erst im Laufe der Propagation verschwindet, wird dieser Anteil des Spektrums im Resonanzfall möglicherweise durch die dort auftretenden Prozesse so stark abgeschwächt, dass man ihn nicht mehr nachweisen kann.

Ein Phänomen, dass in beiden Fällen auftritt, ist die sinoidale Schwankung der Spektralkomponenten um die Anfangsenergie des freien Elektrons $E_{\text{kin}} = 2.0$ a.u. in Abhängigkeit von τ . Wie in 2.2 bereits erwähnt, ist eine solche Abhängigkeit für den Endimpuls von der Quiverphase zu erwarten. Die Quiverphase in diesem System ist gerade $\Phi = -\omega(t_0 + \tau)$. Abb. 12 zeigt zum Vergleich den klassisch berechneten Impuls für ein Teilchen im Feld zu einem festen Zeitpunkt t_f für verschiedene τ . Die klassische Beschreibung der Bewe-

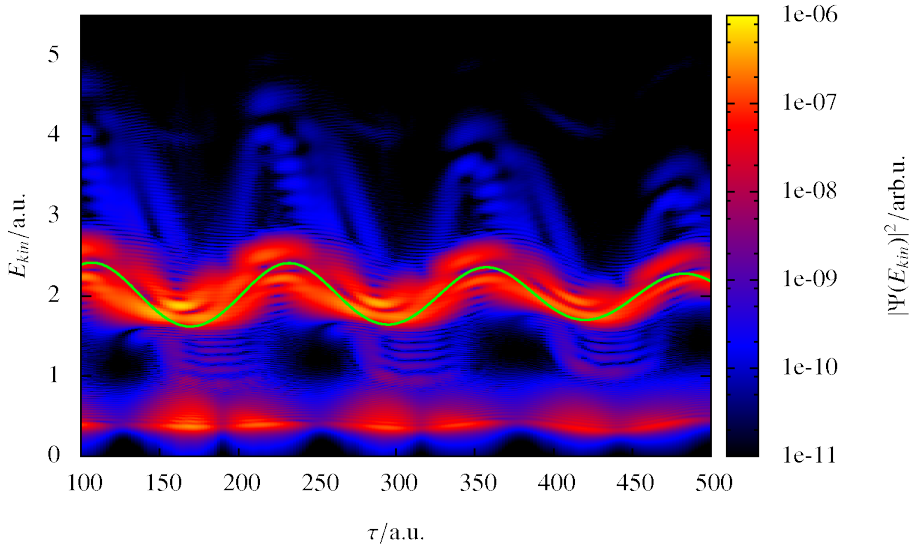


Abbildung 12: Spektrum eines freien Elektrons im $\text{H} - \text{H}^+$ - System in Abhängigkeit des Pulsabstandes τ für einen Ionenabstand $D = 150.7$ a.u.. Die grüne Kurve gibt den nach Abschnitt 2.2 Gleichung (17) berechneten Quiverimpuls zum Zeitpunkt der ersten Streuung t_c für das Elektron an.

gung des Elektrons im Feld gibt also das quantenmechanische Ergebnis sehr gut wieder. Insbesondere zeigt dies, dass sich das ionisierte Elektron tatsächlich wie ein Punktteilchen behandeln lässt.

Augrund der Übereinstimmung des klassischen Modells der Quiver-Bewegung mit den quantenmechanischen Ergebnissen, lassen sich jetzt Vergleiche mit den darauf aufbauenden Streutheorien anstellen. Eine erste Abschätzung für die Genauigkeit der, in 2.3 hergeleiteten, klassischen Modelle liefern die klassischen Cutoff - Energien. Dabei sind hauptsächlich die maximal erreichbaren Energi-

en von Interesse, da diese bei einer Übereinstimmung eine einfache a priori - Abschätzung der quantenmechanisch maximal erreichbaren Energie zur Verfügung stellen würden. Dies hat auch eine ganz praktische Relevanz für die Simulation solcher Systeme. Lässt sich die maximal erreichbare Energie des Elektrons, und damit auch sein maximaler Impuls, vor der Simulation hinreichend genau abschätzen, kann die Strecke, die das Teilchen während des Simulationszeit zurücklegt berechnet werden. Man erhält damit eine Abschätzung für die benötigte Größe der Simulationsbox und kann diese ohne Probesimulationen festlegen. Dies ist natürlich vor allem bei längeren Simulationen von Vorteil. Da die Resonanzbedingung (27) eine periodische Abhängigkeit von der Phase ϕ des Laserfeldes aufweist, ist zu erwarten, dass das Spektrum an mehreren Stellen ein Energiemaximum annimmt. Da die Maximalenergie abhängig von der Phase des Feldes sind, müssen diese Stellen zuerst bestimmt werden. Die Phase des Laserfeldes lässt sich einfach ablesen und ist in diesem Fall gerade $\phi = -\omega(t_0 + \tau)$. Der Zeitpunkt des ersten Streuprozesses ergibt sich mit den bekannten Bezeichnungen zu $t_{c1} = t_0 + \frac{D}{k_0}$. Nach der ersten Streuung hat das Elektron einen Impuls k_1 . Analog ergibt sich der Zeitpunkt der zweiten Streuung $t_{c2} = t_{c1} + \frac{D}{k_1}$. Ausgehend von der Resonanzbedingung für den ersten Streuprozess (vgl. (27))

$$\frac{\pi}{2} + 2\pi m = \omega t_{c1} + \phi; \quad m = 0, 1, 2, \dots \quad (68)$$

ergibt sich mit den gerade eingeführten Größen die Bestimmungsformel

$$\tau_{\text{opt}} = \frac{\pi}{2\omega} + \frac{2\pi}{\omega} m + \frac{D}{k_0}; \quad m = 0, 1, 2, \dots \quad (69)$$

für jene Werte von τ , bei denen die erste Resonanzbedingung gerade erfüllt wird. Dabei wird davon ausgegangen, dass die Erzeugung des freien Teilchens im Kontinuum als instane Streuung zum Zeitpunkt t_0 mit einem Endimpuls k_0 betrachtet wird. Beide Prozesse lassen sich so identifizieren, da beide als instantan angenommen werden und bei beiden nur der Endimpuls ausschlaggebend ist. Dadurch lassen sich die Resonanzbedingungen für die Coulombstreuung auch für die Behandlung des gerade erzeugten freien Elektrons nutzen. Die Resonanzbedingung für den zweiten Streuprozess ist dann nach Konstruktion des Systems erfüllt. Wir erwarten also Maxima bei solchen Werten, die die Gleichung (69) erfüllen. Der Wert für das zweite zu erwartende Maximum ist in den Spektren 13(a) und 13(b) als grüne gestrichelte Linie eingezeichnet. Im Fall des resonanten Spektrums ($D = 150.7$ a.u.) stimmt die berechnete Position des Maximums genau mit der Position im Spektrum überein. Für das Spektrum mit dem Ionenabstand $D = 80.0$ a.u. ist es nicht ganz so einfach ein Maximum festzulegen, aber die klassisch berechneten Werte geben zumindest qualitativ die Positionen wieder, an denen eine erhöhte maximale Energie zu beobachtet ist. Analog ergeben sich die Stellen aller anderen Maxima aus der klassischen Abschätzung. Mit den Formeln für die klassischen Maximalimpulse

$$k_1 = k_{\text{max}}^{(1)} = -k_0 - 2v_0 \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{(t_{c1} - (t_0 + \tau_{\text{opt}}))^2}{\sigma^2}\right) \quad (70)$$

und

$$k_2 = k_{\text{max}}^{(2)} = -\left(k_{\text{max}}^{(1)} - 2v_0 \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{(t_{c2} - (t_0 + \tau_{\text{opt}}))^2}{\sigma^2}\right)\right) \quad (71)$$

eines Einfach- bzw. Zweifachstreuprozesses lassen sich jetzt die Maximalenergien für die verschiedenen τ_{opt} bestimmen. Streuprozesse höherer Ordnung spielen hierbei keine Rolle, da keines der untersuchten Systeme mehr als zwei der klassischen Resonanzbedingungen (27) erfüllen kann. Aus den, in der Abbildung 13(b) eingetragenen, Cutoff-Energien für die ersten vier τ_{opt} wird ersichtlich, dass im Fall des resonanten Systems die klassischen Maximalenergien tatsächlich erreicht und sogar leicht überschritten werden. Auch das Verhalten des Systems ohne Resonanz lässt sich mit dem klassischen Modell erklären. Da dieses System i.A. keine der Resonanzbedingungen erfüllt, ist der Energieübertrag bei einem Streuprozess nicht maximal. Zusätzlich kann das Elektron nur maximal einmal an einem Ion streuen, da es das System vor einem weiteren möglichen Streuprozess verlässt. Das Teilchen könnte dem entsprechend maximal die Cutoff-Energien für den Einfachstreuprozess erreichen. Diese sind für die verschiedenen τ_{opt} in Abbildung 13(a) eingetragen und geben das Verhalten auch hier zumindest qualitativ gut wieder. Die Übereinstimmung ist nicht ganz so exakt wie im Fall der Resonanz, was darauf hindeutet, dass in solchen Systemen Prozesse eine Rolle spielen, die in der klassischen Beschreibung nicht berücksichtigt werden. Auch die Struktur des Spektrums im Resonanzfall lässt sich zumindest qualitativ mit dem klassischen Streumodell erklären. Betrachtet man nun die klassische Impulsbestimmungsgleichung(vgl. (22))

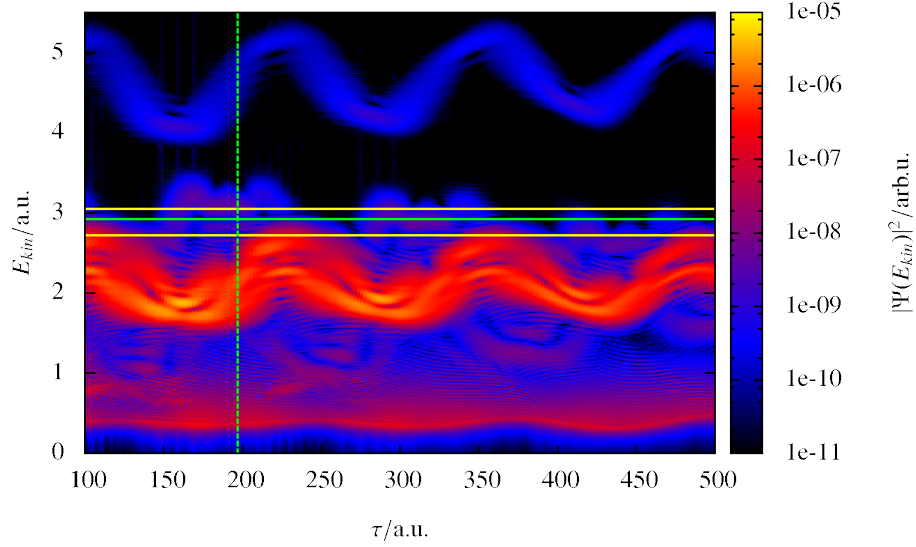
$$\begin{aligned} k &= -(k_0 - 2v_0 f(t_{c1}) \sin(\omega(t_{c1} - (t_0 + \tau)))) \\ &= -\left(k_0 - 2v_0 f(t_{c1}) \sin\left(\omega\left(\frac{D}{k_0} - \tau\right)\right)\right) \end{aligned} \quad (72)$$

für den Einfachstreuprozess mit den eingesetzten Größen und das berechnete Spektrum 13(b), so erkennt man, dass der erreichte Endimpuls bei einer Streuung abnimmt, wenn man sich von den τ_{opt} entfernt. Daran ändert im Prinzip auch ein nachfolgender zweiter Stoßprozess nichts, da dieser ebenfalls nicht den maximalen Impulsübertrag bewirkt. Nach einer halben Periode des IR-Pulses nimmt der Impuls, wie zu erwartet, sein Minimum an und steigt dann wieder, bis das nächste τ_{opt} nach genau einer Periode des IR-Pulses erreicht ist. Aus dem klassischen Streumodell ergeben sich also nicht nur die korrekten Maximalenergien, sondern auch die Werte für τ , an denen der Impulsgewinn minimal oder maximal wird. Durch diese Betrachtung haben wir außerdem einen Zusammenhang zwischen dem Spektrum und dem IR-Puls erhalten. Die Maxima besitzen genau einen Abstand, der einer Periode des IR-Pulses entspricht. Von der Korrektheit dieses Zusammenhang kann man sich auch ohne klassische Approximationen überzeugen, in dem man zu einer Betrachtung der Energien übergeht und den Energieerhaltungssatz ausnutzt. Bereits im Kapitel über die Numerik wurde die Energieänderung des elektromagnetischen Feldes in Dipolapproximation

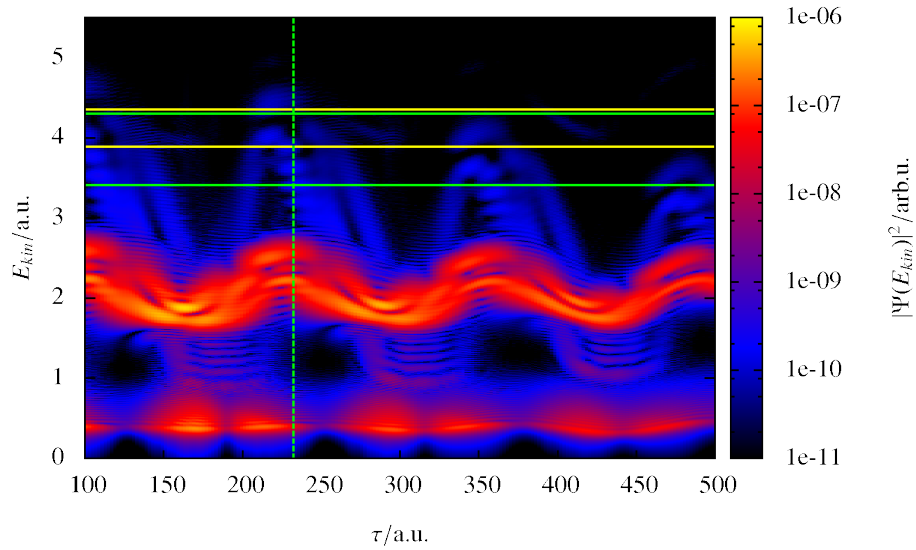
$$dE_{\text{Feld}} = -\langle x \rangle \frac{\partial}{\partial t} E(t) dt \quad (73)$$

in einem kleinen Zeitraum dt abgeleitet. Angenommen das Feld des IR - Pulses sei von der Form $E(t, \tau) = E(t - (t_0 + \tau))$. Dann gilt mit $u = t - (t_0 + \tau)$ der Zusammenhang

$$\frac{\partial E(u)}{\partial t} = \frac{\partial E(u)}{\partial u} \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial E(u)}{\partial u} = -\frac{\partial E(u)}{\partial u} \frac{u}{\partial \tau} = -\frac{\partial E(u)}{\partial \tau} \quad (74)$$



(a) Abstand $D = 80.0$ a.u.



(b) Abstand $D = 150.7$ a.u.

Abbildung 13: Spektren eines freien Elektrons im $\text{H}-\text{H}^+$ -System in Abhängigkeit des Pulsabstandes τ für verschiedene Abstände D . Die horizontalen Linien geben von oben nach unten die maximal erreichbaren Energien für das ersten, zweiten, dritten und vierten Energiemaximum an. Diese wurden nach Gleichung (23) aus Abschnitt 2.3 berechnet. Die vertikalen gestrichelten Linien geben jeweils die nach (69) bestimmte Position des zweiten Energiemaximums an.

zwischen den Ableitungen des Feldes nach t und nach τ . Damit lässt sich (73) zu

$$dE_{\text{Feld}} = \langle x \rangle \frac{\partial}{\partial \tau} E(t, \tau) dt \quad (75)$$

umschreiben. Dies heißt aber, dass für Prozesse, die in einem solchen kleinen Zeitraum dt ablaufen

$$0 = dE_{\text{ges}} = dE_{\text{System}} + dE_{\text{Feld}} = dE_{\text{System}} + \langle x \rangle \frac{\partial}{\partial \tau} E(t, \tau) dt \quad (76)$$

bzw. daraus abgeleitet

$$dE_{\text{System}} = -dE_{\text{Feld}} = -\langle x \rangle \frac{\partial}{\partial \tau} E(t, \tau) dt \quad (77)$$

aufgrund der Energieerhaltung für alle t gelten muss. Hierbei sind dE_{ges} , dE_{System} und dE_{Feld} jeweils die Änderung der Energie des Gesamtsystems inklusive Laserfeld, des Systems ohne Laserfeld, also des Elektrons, und des Feldes. Die Forderung, dass der Prozess schnell abläuft ist erfüllt, wenn der Streuprozess wieder als instantan angenommen wird. Gleichung (77) lässt sich jetzt so interpretieren, dass eine minimale Ableitung des Feldes als Funktion von τ bei einem festem Streuzeitpunkt t_c zu einem maximalen Energieübertrag führt. Entsprechend führt eine maximale Ableitung in diesem Punkt zu einem maximalen Energieverlust des Teilchens an das Laserfeld. Abbildung 14 zeigt gerade die

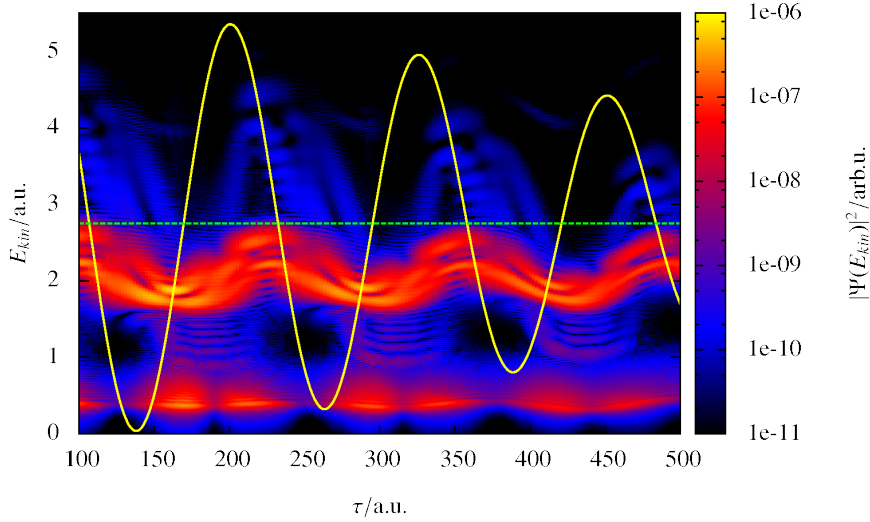


Abbildung 14: Spektrum eines freien Elektrons im $\text{H} - \text{H}^+$ - System in Abhängigkeit des Pulsabstandes τ für einen Ionenabstand $D = 150.7 \text{ a.u.}$. Die gelbe Kurve gibt die Feldstärke des Pumpimpulses zum Zeitpunkt der ersten Streuung $t_{c1} = t_0 + \frac{D}{k_0}$ in Abhängigkeit von τ an. Die gestrichelte Linie entspricht einer Feldstärke von $E = 0$.

Abhängigkeit des Laserfeldes von τ zum klassisch abgeschätzten Zeitpunkt der

ersten Streuung $t_{c1} = t_0 + \frac{D}{k_0}$. Wie zu erkennen ist die höchste erreichbare Energie bei minimaler Steigung des Graphen maximal und bei maximaler Steigung minimal. Der Zusammenhang zwischen Feld und Spektrum wird also auch von diesem Modell verifiziert und stimmt vollkommen mit dem klassischen Modell überein. Eine Frage, die noch bestehen bleibt, ist, ob das klassische Modell die Form des Spektrums auch quantitativ so genau vorhersagen kann.

5 Zusammenfassung und Ausblick

Der Großteil dieser Arbeit hat sich mit der Bewegung von Elektronen in atomaren Systemen im starken Laserfeldern beschäftigt. Alle Berechnungen wurden dabei in 1D - Modellsystemen durchgeführt. Die Untersuchungen wurde dabei hauptsächlich mit Hilfe von numerischen Lösungen der zeitabhängigen Schrödingergleichung durchgeführt. Dazu wurde im Rahmen dieser Arbeit ein Programmpaket entwickelt, dass die TDSE mittels des Crank - Nicolson - Verfahrens löst und interessierende Observablen aus der Lösung berechnen kann. Ein besonderes Augenmerk galt dabei der Berechnung des Energiespektrums eines freien Teilchens. Um die Eigenzustände eines beliebigen (zeitunabhängigen) Potentials zu konstruieren zu können, wurde das Imaginary Time Propagation (ITP) - Verfahren motiviert und innerhalb des Programmpaketes implementiert. Als erste Anwendung des Lösungsverfahrens wurde das Fehlerverhalten der Lösung eines harmonischen Oszillators untersucht. Anhand der so erhaltenen Fehlerkurven, wurde die Genauigkeit und das generelle Konvergenzverhalten des CN - Verfahrens diskutiert. Außerdem wurde eine erste Abschätzung für sinnvolle numerischen Parameter gegeben. Um die Genauigkeit der Ergebnisse im Fall der Ionen-systeme im starken Laserfeld sicherzustellen, wurde separat eine Konvergenzuntersuchung mit einem solchen Systemaufbau durchgeführt und analysiert. Die hier bestimmten Gittergrößen dienten als Basis für alle weiteren Simulationen. Im theoretischen Teil der Arbeit wurde zunächst die zeitabhängige Schrödingergleichung unter Vorhandensein eines elektromagnetischen Feldes abgeleitet und dann mit Hilfe der Dipolapproximation und unter Ausnutzung der Eichfreiheit auf eine Form gebracht, die sich mit dem CN - Verfahren behandeln lässt. Da Streuprozesse in den Systemen, die im Rahmen dieser Arbeit untersucht wurden, eine tragende Rolle spielen, wurden einige klassische und quasiklassische Modelle für die Bewegung eines freien Teilchens in einem Laserfeld und die darauf aufbauenden Streuprozesse behandelt. Anhand dieser Modelle wurden einige spezielle Eigenschaften dieser Art von Systemen diskutiert. Der Hauptteil dieser Arbeit beschäftigt sich mit der Simulation eines Pump-Probe-Experiments in einem 1D - Atom-Ion-System und der Untersuchung des dabei entstehenden Spektrums in Abhängigkeit des Zeitabstandes der beiden Pulse. Als Atom wurde für die Untersuchung ein Modellwasserstoffatom im Grundzustand gewählt, dass dazu verwendet wurde mittels des Pumpimpulses freie Elektronen mit einem spezifischen Impuls zu erzeugen, die dann mit den Ionen im System streuen können. Die so erhaltenen Spektrum, wurden mit den Vorhersagen der bereits diskutierten klassischen und quasiklassischen Modelle verglichen. Als besonders interessant stellten sich dabei die Systeme heraus, die eine, im Rahmen der klassischen Modelle abgeleitete, Resonanzbedingung für die Streuprozesse erfüllen. In diesem Fall stimmen die Vorhersagen der (quasi-)klassischen Theorien sowohl qualitativ als auch quantitativ mit den quantenmechanischen Beobachtungen

überraschend gut überein. Einige der Eigenschaften des Spektrums konnten sogar exakt reproduziert werden. Auch eine Verknüpfung der Strukturen von Protopuls und Spektrum ließ sich nachweisen und konnten über die klassischen Modelle erklärt werden. Dieses Ergebnis ließ sich auch durch ein alternatives, quantenmechanisches Modell verifizieren, dass dazu nur die Energieerhaltung in dem System ausnutzt. Aufgrund der einfachen Struktur der klassischen Theorien können so gute quantitative Vorhersagen über das Systemverhalten gemacht werden. Insbesondere ist es damit möglich, die im System auftretenden Prozesse mit hoher Genauigkeit zu steuern und zu optimieren, ohne eine große Anzahl von quantenmechanischen Simulationen durchführen zu müssen.

Ob die klassischen Modelle auch die Struktur des Spektrums insgesamt vorhersagen können, ist bisher allerdings noch nicht ganz klar. Erste Rechnungen zeigen zwar, dass dies prinzipiell möglich ist, aber es war bisher nur möglich die Hälfte der Daten mit dem klassischen Modell in Übereinstimmung zu bringen. Eine mögliche Erklärung für dieses Phänomen, die sich aus weiteren Untersuchungen ergab, ist die Erkenntnis, dass die Beiträge zum Spektrum möglicherweise nicht nur von einem Wellenpaket stammen. Diese Theorie wird von einer Untersuchung der zeitlich aufgelösten Wahrscheinlichkeitsdichte gestützt, in der die Erzeugung mehrerer Wellenpakete zu unterschiedlichen Zeitpunkten beobachtet wurde. Aufgrund des zeitlichen Abstandes bei der Erzeugung würden die einzelnen Spektren der Teilchen im Gesamtspektrum relativ zu einander verschoben sein. Ob dieses Modell die Diskrepanz zwischen klassischer Theorie und dem Spektrum allerdings vollständig erklärt, konnte noch nicht verifiziert werden. Ein erster Schritt wäre zu überprüfen, ob die verschiedenen Wellenpakete tatsächlich unterschiedliche Teile des Spektrums erzeugen. Eine Idee um dies zu erreichen, wäre z.B. eine Untersuchung eines zeitlich aufgelösten Spektrums. In diesem wäre es vielleicht möglich die zeitlich separierten Teilchen nacheinander zu detektieren und ihre Anteile am Spektrum zu trennen. Danach wäre eine Untersuchung der einzelnen Anteile mittels der klassischen Modelle möglich. Diese Untersuchung ließe sich ohne größeren Mehraufwand mit den bereits zur Verfügung stehenden Mitteln durchführen. Weitere interessante Fragestellungen wären z.B. eine Untersuchung von mehrdimensionalen Systemen auf ähnliche Eigenschaften oder die Kombination mit weiteren Prozessen. Als Beispiel seien hier Effekte in Mehrteilchensystemen, wie z.B. Doppelionisation erwähnt. Das Programmpaket wurde so implementiert, dass eine Erweiterung auf die dafür benötigten Methoden mit relativ wenig Aufwand möglich ist.

Literatur

- [1] MAIMAN, T. H.: Stimulated Optical Radiation in Ruby. Nature, 187(4736):493–494, 1960. 10.1038/187493a0.
- [2] KULL, H.-J. und V. T. TIKHONCHUK: Fast electrons from electron-ion collisions in strong laser fields. Physics of Plasmas, 12(6):063301, 2005.
- [3] BAUCH, S.: Coulomb scattering and ionization in strong laser fields. Diplomarbeit, Christian Albrechts Universität zu Kiel, Juli 2008.
- [4] GÖRLINGER, J., H.-J. KULL und V. T. TIKHONCHUK: Double Plateau in the Energy Distribution of Electrons Scattered by Ion Pairs in a Strong Laser Field. Laser Physics, 15:245, 2005.
- [5] KRAUSZ, FERENC und MISHA IVANOV: Attosecond physics. Rev. Mod. Phys., 81(1):163–234, Feb 2009.
- [6] GOULIELMAKIS, E., M. SCHULTZE, M. HOFSTETTER, V. S. YAKOVLEV, J. GAGNON, M. UIBERACKER, A. L. AQUILA, E. M. GULLIKSON, D. T. ATTWOOD, R. KIENBERGER, F. KRAUSZ und U. KLEINEBERG: Single-Cycle Nonlinear Optics. Science, 320(5883):1614–1617, 2008.
- [7] UIBERACKER, M., TH. UPHUES, M. SCHULTZE, A. J. VERHOEF, V. YAKOVLEV, M. F. KLING, J. RAUSCHENBERGER, N. M. KABACHNIK, H. SCHRODER, M. LEZIUS, K. L. KOMPA, H.-G. MULLER, M. J. J. VRAKKING, S. HENDEL, U. KLEINEBERG, U. HEINZMANN, M. DRESCHER und F. KRAUSZ: Attosecond real-time observation of electron tunnelling in atoms. Nature, 446(7136):627–632, 2007. 10.1038/nature05648.
- [8] PRESS, WILLIAM H., SAUL A. TEUKOLSKY, WILLIAM T. VETTERLING und BRIAN P. FLANNERY: Numerical Recipes in C++: The Art of Scientific Computing. Cambridge University Press, Februar 2002.
- [9] PELEG, GUY: Subscribing Template Classes with Object Factories in C++. http://www.artima.com/cppsource/subscription_problem.html, September 2007.
- [10] VELDUIZEN, TODD: Techniques for Scientific C++. <http://www.cs.indiana.edu/l/www/ftp/techreports/TR542.pdf>, August 2000.
- [11] TEMPERTON, CLIVE: Self-sorting mixed-radix fast Fourier transforms. Journal of Computational Physics, 52(1):1–23, 1983.

Danksagungen

Zunächst möchte ich meinem Betreuer, Herr Prof. Dr. Michael Bonitz, danken, dessen hoher persönlicher Einsatz in der Lehre mich erst zu einer Bachelorarbeit in der theoretischen Physik inspiriert hat. Des Weiteren möchte ich noch Sebastian Bauch danken, der mir jederzeit mit Rat zur Seite stand und bei der Anfertigung dieser Arbeit eine unschätzbare Hilfe war. Zu guter Letzt möchte ich noch meiner Familie für ihre Unterstützung in dieser arbeitsintensiven Zeit danken.

Eidesstattliche Erklärung

Die vorliegende Arbeit ist von mir selbständig und nur unter Zuhilfenahme der angegebenen Quellen und Hilfsmittel angefertigt worden.

Ort, Datum

Unterschrift