Bachelorarbeit

Untersuchung der Breathing-Mode für mehrere Fermionen in einer harmonischen Falle

Christian-Albrechts-Universität zu Kiel

Jan Willem Abraham

Juli 2010

Erklärung der Selbstständigkeit

Erklärung gemäß Paragraph 9 Abs. 7 der Prüfungsverfahrensordnung der Christian-Albrechts-Universität zu Kiel für Studierende der Bachelor- und Master-Studiengänge

Hiermit erkläre ich, dass ich die Arbeit selbstständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt habe und die Arbeit in keinem anderen Prüfungsverfahren eingereicht habe.

Datum, Unterschrift

Investigation of the breathing mode for a harmonically trapped multi-fermion system

Abstract

The present thesis is concerned with the numerical analysis of the quantum breathing mode. The system under consideration consists of several harmonically trapped fermions, interacting via Coulomb's law. In a classical treatment, the breathing mode corresponds to the uniform radial expansion and contraction of the system. It is known that the associated breathing frequency has the fixed value $\sqrt{3}\Omega$ with trap frequency Ω . Using a quantum approach, the bahaviour of the breathing mode changes. In recent works it was revealed that two frequencies $\omega_{\mathbf{R}}$ and $\omega_{\mathbf{x}}$ belong to the quantum breathing mode. While the former has a fixed value, the latter depends on the relative strength of interparticle interaction. The main focus of this work lies on the numerical investigation of the question whether the frequency $\omega_{\mathbf{x}}$ is independent from the particle number for arbitrary coupling. In order to answer this question time-dependent Hartree-Fock calculations have been performed for up to 20 particles and different interaction strengths. The main result is that the computations yield a very small dependence of the breathing frequency $\omega_{\mathbf{x}}$ from the particle number. However, it is discussed that this might follow from the Hartree-Fock approximation. Another important observation is that the analysis of the produced data does not allow a doubtless identification of the fixed frequency $\omega_{\mathbf{R}}$.

Untersuchung der Breathing-Mode für mehrere Fermionen in einer harmonischen Falle

Zusammenfassung

Die vorliegende Arbeit befasst sich mit der numerischen Analyse der Breathing-Mode in quantenmechanischer Betrachtung. Das untersuchte System besteht aus mehreren Fermionen in einer harmonischen Falle, die über das Coulomb-Gesetz wechselwirken. In klassischer Betrachtung entspricht die Breathing-Mode einer uniformen radialen Expansion und Kontraktion des Systems. Es ist bekannt, dass die zugehörige Breathing-Frequenz den festen Wert $\sqrt{3\Omega}$ hat, wobei Ω die Fallenfrequenz ist. Ein quantenmechanischer Ansatz führt auf ein anderes Verhalten der Breathing-Mode. In vorangegangenen Arbeiten wurde gezeigt. dass zwei Frequenzen $\omega_{\mathbf{R}}$ und $\omega_{\mathbf{x}}$ zur Quanten-Breathing-Mode gehören. Während Erstere einen festen Wert hat, hängt Letztere von der relativen Stärke der Teilchenwechselwirkung ab. Im Blickpunkt dieser Arbeit stehen numerische Untersuchungen zu der Frage, ob die Frequenz $\omega_{\mathbf{x}}$ bei beliebiger Kopplungsstärke unabhängig von der Teilchenzahl ist. Um diese Frage zu beantworten, wurden Time-dependent-Hartree-Fock-Rechnungen für bis zu 20 Teilchen bei unterschiedlichen Kopplungsstärken durchgeführt. Das Hauptergebnis ist, dass die Berechnungen eine sehr kleine Abhängigkeit der Breathing-Frequenz $\omega_{\mathbf{x}}$ von der Teilchenzahl hervorbringen. Es wird jedoch diskutiert, dass dies ein Effekt der Hartree-Fock-Näherung sein könnte. Eine andere wichtige Beobachtung ist, dass die Auswertung der produzierten Daten keine zweifelsfreie Identifizierung der festen Frequenz $\omega_{\mathbf{R}}$ erlaubt.

Inhaltsverzeichnis

1	Einle	eitung		1
2	Finit 2.1	e Syster Norma 2.1.1 2.1.2	ne in externem Potential Ilmoden	3 3 5
3	Brea 3.1 3.2 3.3	thing-N Quant 3.1.1 Bekan 3.2.1 3.2.2 Unters	Iode eines Coulomb-Systems in harmonischer Falle enmechanische Betrachtung der Breathing-Mode	6 6 7 8 9 12
4	Num 4.1 4.2	nerik Zeitab Funkti 4.2.1 4.2.2 4.2.3	hängige Hartree-Fock-Gleichungen	14 14 16 16 17 18
5	Erge 5.1 5.2	bnisse Form 6 5.1.1 Konve 5.2.1 5.2.2 5.2.3 5.2.4	des Spektrums	 20 20 21 22 23 24 24
	5.3	5.2.5 Unters 5.3.1 5.3.2	Abhängigkeit des Spektrums von Basisparametern $n_{\rm r}$ und $n_{\rm b}$ uchung der Teilchenzahlabhängigkeit für ausgewählte Kopplungsstärken Kopplungsstärke $\lambda = 0, 1 \dots $	24 25 27 27 29

	5.3.3	Kopplungsstärke $\lambda=1$	29
6	Zusammenfassung und Ausblick		
Lit	Literaturverzeichnis		
A	Rückführun	g von $(ilde{\mathbf{R}}^2)_{ij}$ auf 1D-Matrixelemente	36
В	Beispiel für	eine ini-Datei	38

kapitel 1

Einleitung

Quantensysteme in optischen oder magnetischen Fallen, darunter insbesondere auch harmonische Fallen, gewinnen zunehmend das Interesse der Forschung. Untersucht werden unter anderem korrelierte Elektronen in Metall-Clustern ([Bal05]) oder Quantenpunkten ([Fil01]) sowie ultrakalte Bose- und Fermigase in Fallen oder optischen Gittern ([Bl005]). Im Blickpunkt aktueller Forschung stehen außerdem Bose-Einstein-Kondensate in niedrigen Dimensionen ([GÖ1]) und nichtideale Wechselwirkungseffekte wie Superfluidität und Kristallisation ([Fil08]). Der Diagnostik statischer und zeitabhängiger Eigenschaften dienen dabei kollektive Oszillationen (Normalmoden), von denen die sogenannte Breathing-Mode besonders wertvolle Informationen liefert.

In klassischer Betrachtungsweise ist gut bekannt, dass die Breathing-Mode eine feste Frequenz hat, die unabhängig von Teilchenzahl und Dimension ist. Da im Allgemeinen jedoch eine quantenmechanische Betrachtung nötig ist, bei der die Teilchen eine relevante Ausdehnung bekommen, wurden in [Bau09] und [Bau10b] jüngst Untersuchungen hierzu durchgeführt. Es stellte sich dabei heraus, dass in quantenmechanischer Betrachtungsweise zwei Breathing-Frequenzen existieren, die zu einer Schwebung führen. Von diesen hat eine Frequenz einen festen Wert, während die andere von der Kopplungsstärke abhängig ist. Das klassische Resultat wird dabei durch den Grenzfall einer besonders starken Kopplungsstärke mit eingeschlossen. Analog ergibt sich der ebenfalls bekannte reine Quanten-Fall für verschwindende Kopplungsstärke, bei dem eine Frequenz zweifach entartet erhalten bleibt. Es besteht ein Interesse daran, die Breathing-Frequenzen bei vorgegebenen äußeren Parametern wie zum Beispiel der Kopplungsstärke auszurechnen, denn experimentell lässt sich schließlich durch Messung der Frequenzen auf äußere Parameter rückschließen.

In den Arbeiten [Bau09] und [Bau10b] wurde ein Hauptaugenmerk darauf gelegt, die Abhängigkeit der Breathing-Frequenzen von der Kopplungsstärke für zwei Teilchen zu untersuchen. Außerdem wurden bereits erste Untersuchungen über den Einfluss der Teilchenzahl durchgeführt, die aber noch keine endgültige Aussage zuließen. Um dieser Frage weiter nachzugehen, sollen im Rahmen dieser Arbeit bis zu 20 über das Coulombgesetz wechselwirkende spinpolarisierte Fermionen in einer Raumdimension hinsichtlich einer Teilchenzahlabhängigkeit der Breathing-Mode untersucht werden. Da hierfür umfangreiche numerische Berechnungen notwendig sind, werden die Untersuchungen nur für ausgewählte Kopplungsstärken durchgeführt. Dass Systeme wie das hier behandelte von aktueller experimenteller Relevanz sind, bezeugt beispielsweise die Arbeit [Hal09], in der die Anregung kollektiver Oszillationen eines bosonischen Quantengases in einer Dimension dokumentiert ist.

Diese Arbeit ist so strukturiert, dass in den Kapiteln 2 und 3 zunächst das System theoretisch beschrieben und einige bekannte Resultate analytisch hergeleitet werden. In Kapitel 4 wird das numerische Verfahren erklärt, mit dem die Berchnungen für dieses Problem durchgeführt werden. In den letzten beiden Kapiteln folgen schließlich die Auswertung der Ergebnisse sowie eine Diskussion mit Ausblick.

kapitel 2

Finite Systeme in externem Potential

2.1 Normalmoden

Ein finites System ist die Gesamtheit in endlicher Zahl vorliegender Teilchen. Diese können sowohl durch gegenseitige Wechselwirkung als auch durch ein externes Potential Kräfte verspüren. Durch gezielte Anregung aus einer Ruhelage heraus kann ein finites System in externem Potential dazu gebracht werden, kollektive Schwingungen auszuführen. Dabei können unterschiedliche Schwingungszustände auftreten, die sich als Linearkombination von Normalmoden darstellen lassen. Im Allgemeinen ist das System quantenmechanisch zu betrachten, wobei sich im Falle besonders starker Teilchenwechselwirkungen die Teilchendichten so sehr lokalisieren, dass auch eine klassische Rechnung möglich ist. Es stellt sich heraus, dass im klassischen Fall für kleine Anregungen aus einer Gleichgewichtslage heraus drei von der Teilchenzahl unabhängige Normalmoden existieren: Das System als Ganzes kann rotieren (Rotationsmode), der Massenschwerpunkt kann schwingen (Sloshing-*Mode*) und das System kann sich in puslierenden Bewegungen ausdehnen und wieder zusammenziehen (Breathing-Mode). Letztere Mode wird als radial bezeichnet, wenn alle Teilchenpositionen stets proportional zur Gleichgewichtsposition sind. Haben alle Teilchen dieselbe Proportionalitätskonstante, nennt man die Mode zusätzlich uniform. Während die ersten beiden Moden von besonderer Allgemeinheit sind, müssen für das Vorhandensein einer uniformen radialen Breathing-Mode strenge Bedingungen erfüllt sein. Diese werden umfangreich untersucht in [Hen09].

In diesem Kapitel erfolgt zunächst eine allgemeine Betrachtung zur Existenz von Normalmoden, um schließlich die Breathing-Mode in ihrer zentralen Rolle hervorzuheben. Es handelt sich hierbei stets um eine klassische Betrachtung, die im Allgemeinen zwar nicht gültig ist, von der aber dennoch grundlegende Einblicke in das Systemverhalten zu erwarten sind ([Sch95]).

2.1.1 Existenz von Normalmoden

Orientierend an [Hen09] soll nun ein einführender Ansatz für die klassische Normalmodenanalyse dargestellt werden. Ausgegangen werde dafür also von N Teilchen, deren Positionen mit $\mathbf{r} = (\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \in \mathbb{R}^{dN}$ bezeichnet werden. d sei dabei die Dimension des Systems. Für die Teilchen existiere eine beliebige Wechselwirkung $w(|\mathbf{r}_{ij}|)$, wobei \mathbf{r}_{ij} eine Abkürzung für den Differenzvektor $\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$ ist. Die Wechselwirkung hängt also nur



Abbildung 2.1: Schematische Darstellung von Sloshing-Mode (a), Rotationsmode (b) und Breathing-Mode (c) für ein zweidimensionales Dreiteilchensystem.

vom Abstand der Teilchen ab. Weiterhin existiere ein isotropes externes Potential $V(|\mathbf{r}_i|)$. Die Hamiltonfunktion für ein solches System ist unter Annahme gleicher Teilchenmassen gegeben durch

$$H = \sum_{i=1}^{N} \frac{m}{2} \dot{\mathbf{r}}_{i}^{2} + \underbrace{\sum_{i=1}^{N} V(|\mathbf{r}_{i}|) + \sum_{i < j}^{N} w(|\mathbf{r}_{ij}|)}_{U(\mathbf{r})}.$$
(2.1)

Es werde die Existenz eines Gleichgewichtszustandes $\mathbf{r}^* = (\mathbf{r}_1^*, \mathbf{r}_2^*, \dots, \mathbf{r}_N^*)$ angenommen. Dieser kennzeichnet sich dadurch, dass die Kräfte $\mathbf{F}_k = -\nabla_k U(\mathbf{r})$ auf alle einzelnen Teilchen an dieser Stelle verschwinden:

$$\mathbf{0} = \nabla_k U(\mathbf{r})|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}^*} = \frac{V'(|\mathbf{r}_k^*|)}{|\mathbf{r}_k^*|} \mathbf{r}_k^* + \sum_{\substack{l=1\\l\neq k}}^N \frac{w'(|\mathbf{r}_{kl}^*|)}{|\mathbf{r}_{kl}^*|} \mathbf{r}_{kl}^* \qquad \forall k \le N.$$
(2.2)

Es werden nur kleine Auslenkungen aus dem Gleichgewicht $\mathbf{r}(t)$ mit $|\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}^*| \ll |\mathbf{r}^*|$ betrachtet, sodass sich das Potential gemäß

$$U(\mathbf{r}) \approx U(\mathbf{r}^*) + (\mathbf{r} - \mathbf{r}^*)^T \underbrace{\nabla U(\mathbf{r})|_{\mathbf{r} = \mathbf{r}^*}}_{= 0} + \frac{1}{2} (\mathbf{r} - \mathbf{r}^*)^T \mathcal{H}^{\mathbf{r}^*}(\mathbf{r} - \mathbf{r}^*)$$
(2.3)

harmonisch approximieren lässt. Dabei ist $\mathcal{H}^{\mathbf{r}^*} = \nabla \nabla^T U(\mathbf{r})|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}^*}$ die Hesse-Matrix von U an der Stelle \mathbf{r}^* . Zu beachten ist, dass ∇ ein Ausdruck der Dimension dN ist. Da die Hesse-Matrix reell, symmetrisch und positiv-semidefinit ist, hat das Eigenwertproblem

$$\lambda m \hat{\mathbf{r}} = \mathcal{H}^{\mathbf{r}^*} \hat{\mathbf{r}} \tag{2.4}$$

dN Eigenwerte $\lambda_i \geq 0$ und dN linear unabhängige Eigenvektoren $\hat{\mathbf{r}}_i$. Diese Eigenvektoren geben die Verschiebung der Teilchen an und repräsentieren die verschiedenen Moden. Die Frequenzen der Moden erhält man aus $\omega_i = \sqrt{\lambda_i}$. Die Existenzbedingungen und Eigenschaften der Moden ergeben sich also im Wesentlichen aus dem Eigenwertproblem der Hesse-Matrix. Bekannte Ergebnisse für Coulomb-Systeme in harmonischen Fallen (Fallenfrequenz Ω) sind $\lambda = 0$ (Rotationsmode), $\lambda = \Omega^2$ (Sloshing-Mode) und $\lambda = 3\Omega^2$ (Breathing-Mode). Die Moden können teilweise entartet sein, d.h., zu einer Mode können mehrere Eigenvektoren gehören. Im zweidimensionalen Fall ist beispielsweise die Sloshing-Mode zweifach entartet, denn dem Schwerpunkt stehen zwei Basis-Richtungen zur Verfügung, in denen er schwingen kann. Eine Illustration der unterschiedlichen Moden ist in Abbildung 2.1 zu finden.

2.1.2 Zentrale Rolle der Breathing-Mode

In [Bau09] und [Bau10b] wurde gezeigt, dass die leicht experimentell anregbare Breathing-Mode Träger wichtiger Informationen über die Dimension des Systems, die Spin-Statistik der Teilchen sowie die Form und relative Stärke λ der Teilchenwechselwirkung ist. Letztere ist definiert als Quotient aus Wechselwirkungsenergie E_C und Fallenenergie E_0 , also

$$\lambda = \frac{E_C}{E_0}.\tag{2.5}$$

Die relative Stärke der Teilchenwechselwirkung, verkürzt auch nur Kopplungsstärke oder Kopplungsparameter genannt, ist eine wichtige Größe, die noch einmal in Gleichung (3.7) exakt eingeführt wird.

Das Hauptziel der Untersuchungen in den genannten Arbeiten [Bau09] und [Bau10b] bestand stets darin, den Einfluss bestimmter Systemparameter auf den Wert der Breathing-Frequenz zu erkennen. Im eindimensionalen Fall wurden Breathing-Frequenzen für Wechselwirkungen proportional zu r^{-n} für n = 1, 2, 3 (r: Betrag des Teilchenabstandes) und eine umfassende Breite an Kopplungsparametern λ ermittelt. Für die Teilchenzahl N = 2 konnte die zeitabhängige Schrödingergleichung dafür exakt numerisch gelöst werden. Für größere Teilchenzahlen bis zu N = 6 wurden Multi-configurational-Hartree-Fock-Rechnungen durchgeführt, da sich die Schrödingergleichung nicht mehr lösen lässt. Ebenso wurden Einflüsse des Spins und der System-Dimensionalität untersucht. Unklar blieb, ob die Breathing-Frequenz bei gegebenem λ abhängig von der Teilchenzahl N ist. Dies soll für den Fall einer Coulomb-Wechselwirkung (n = 2) für Fermionen im eindimensionalen Raum in dieser Arbeit untersucht werden. Eine genaue Vorstellung des betrachteten Systems erfolgt daher im nächsten Kapitel.

kapitel 3

Breathing-Mode eines Coulomb-Systems in harmonischer Falle

Ein Coulomb-System in einer harmonischen Falle ist ein Spezialfall des in Abschnitt 2.1.1 vorgestellten Systems. Im Falle gleicher Massen und gleicher Ladungen ($\forall i \leq N$: $m_i = m, q_i = q$) wird die Situtation unter Beibehaltung der alten Bezeichnungen durch das Potential

$$U(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{2} m \Omega^2 \mathbf{r}_i^2 + \sum_{i< j}^{N} \frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0} \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}$$
(3.1)

harmonisches Fallenpotential abstoßendes Coulomb-Potential

charakterisiert. Da im Allgemeinen ein quantenmechanischer Ansatz für die Beschreibung des Systems erforderlich ist, soll dieser zu Beginn des Kapitels vorgeführt werden. Dabei wird auch der bereits erwähnte Kopplungsparamter λ eingeführt, der ein zentrales Maß dafür ist, wie stark die Teilchen miteinander wechselwirken. Im Folgenden wird inbesondere die quantenmechanische Beschreibung der Breathing-Mode erläutert. Obwohl es sich hierbei um ein numerisch zu lösendes Problem handelt (s. Kapitel 4), können auch analytisch einige wichtige Ergebnisse über den Einfluss von λ auf die Breathing-Mode erzielt werden. Auch diese werden in diesem Kapitel vorgestellt.

3.1 Quantenmechanische Betrachtung der Breathing-Mode

In quantenmechanischer Betrachtung hat das System der zeitabhängigen Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \hat{H} \Psi(\mathbf{r}, t)$$
(3.2)

zu genügen. Der zugehörige Hamilton-Operator ist gegeben durch

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \nabla_i^2 + \frac{1}{2} m \Omega^2 \sum_{i=1}^N \mathbf{r}_i^2 + a \sum_{i(3.3)$$

mit $a \equiv \frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0}$. Durch die Einführung der Größen $\tilde{\mathbf{r}} = \frac{1}{l_0}\mathbf{r}$ und $\tilde{t} = \Omega t$ lässt sich Gleichung (3.2) zur Vereinfachung in eine dimensionslose Form transformieren. Diese hat nach

Fortlassen des Tilde-Symbols folgende Gestalt:

$$i\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathbf{r},t) = \left(-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\nabla_{i}^{2} + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\mathbf{r}_{i}^{2} + \underbrace{\frac{m\,a\,l_{0}}{\hbar^{2}}}_{\lambda}\sum_{i< j}^{N}\frac{1}{|\mathbf{r}_{i} - \mathbf{r}_{j}|}\right)\Psi(\mathbf{r},t).$$
(3.4)

Dabei sind $l_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\Omega}}$ die Oszillator-Länge und λ der bereits erwähnte Kopplungsparameter. Definiert man als Fallenenergie für ein Teilchen

$$E_0 = \frac{1}{2}m\Omega^2 l_0^2 \tag{3.5}$$

und als Wechselwirkungsenergie

$$E_C = a \frac{1}{2l_0},$$
 (3.6)

so ergibt sich λ , wie in Abschnitt 2.1.2 bereits genannt, zu

$$\lambda = \frac{E_C}{E_0} = \frac{a}{m\Omega^2 l_0^3} = \frac{al_0}{m\Omega^2 l_0^4} = \frac{m \, a \, l_0}{\hbar^2}.$$
(3.7)

Aufgrund der in Gleichung 3.4 erfolgten Reskalierung der Größen werden Längen, Zeiten und Energien ab sofort in Einheiten von l_0 , Ω^{-1} bzw. $\hbar\Omega$ angegeben.

3.1.1 Anfangsbedingung und Anregung der Breathing-Mode

Die Differentialgleichung (3.4) muss mit einer Anfangsbedingung versehen werden. Durch die Wahl eines antisymmetrischen (A) oder symmetrischen (S) Zustands

$$\Psi^{S,A}(\mathbf{r}_1\dots\mathbf{r}_i\dots\mathbf{r}_k\dots\mathbf{r}_N, t=0) = \pm\Psi^{S,A}(\mathbf{r}_1\dots\mathbf{r}_k\dots\mathbf{r}_i\dots\mathbf{r}_N, t=0)$$
(3.8)

kann festgelegt werden, ob es sich bei den Teilchen um Fermionen oder Bosonen handelt. Da der Hamilton-Operator spinunabhängig ist, bleibt die Symmetrie für alle Zeiten erhalten ([Bau09]).

Wie in [Bau09] beschrieben, kann für die alleinige Anregung einer radialen Breathing-Mode die Fallenfrequenz kurzzeitig ausgeschaltet werden oder instantan einen anderen Wert annehmen. Der Hamiltonoperator erhält also eine Zeitabhängigkeit derart, dass der Term mit dem Fallenpotential für die Zeiten $0 \le t \le t_{\text{off}}$ wegfällt oder verändert wird. Ein typischer Wert für t_{off} ist 0,1. Die spezielle Wahl dieser Größe und auch die Art der Veränderung des Fallenpotentials spielen für die Anregung der Breathing-Mode keine signifikante Rolle. Neben diesen Möglichkeiten kann man auch das Fallenpotential mit verschiedenen Frequenzen periodisch modulieren. Wenn dann Resonanz auftritt, entspricht die Frequenz der Modulierung einer zur Breathing-Mode gehörenden Frequenz. Das in dieser Arbeit verwendete Programm verwendet jedoch die zuerst genannte Möglichkeit des kurzen Ausschaltens der Falle. Durch die repulsive Wechselwirkung und die quantenmechanische Verbreiterung werden die Teilchen dann aus dem Gleichgewichtszustand getrieben und nach erneutem Einschalten der Falle zu einer Schwingung angeregt. Die Auslenkung aus dem Gleichgewichtszustand wird dabei klein gehalten. Da das System hier quantenmechanisch betrachtet wird, sind geeignete Observablen zu finden, in denen sich ein quantenmechanisches Analogon zur klassischen Breathing-Mode zeigt (s. Abschnitt 3.2.2).

3.2 Bekannte theoretische Ergebnisse

In diesem Abschnitt soll zunächst der Grenzfall starker Wechselwirkung $(\lambda \to \infty)$ analytisch nachvollzogen werden, der das gut bekannte Ergebnis $\omega_{\rm BM} = \sqrt{3}\Omega$ liefert. Anschließend wird der Fall beliebiger Kopplungen diskutiert. Von diesem ist bekannt, dass im Allgemeinen zwei Breathing-Frequenzen existieren, die sich in einer Schwebung überlagern. Es wird gezeigt, dass eine Frequenz dabei universell ist und stets den Wert $\omega_{\rm BM} = 2\Omega$ hat. Bei verschwindender Wechselwirkung ($\lambda = 0$) bleibt diese Frequenz zweifach entartet erhalten.

3.2.1 Breathing-Mode im klassischen Grenzfall

Das Verfahren aus Abschnitt 2.1.1 eignet sich für eine umfassende formale Analyse der Normalmoden. Für die Breathing-Frequenz eines Coulomb-Systems in harmonischer Falle lässt sich jedoch eine einfachere mathematische Betrachtung durchführen, bei der das Eigenwertproblem der Hesse-Matrix umgangen werden kann. Dies wird nun orientierend an [Dub96] vorgeführt.

Die Bewegungsgleichung für das k-te Teilchen ist

$$m\ddot{\mathbf{r}}_k = -\nabla_k U(\mathbf{r}). \tag{3.9}$$

Da eine uniforme radiale Bewegung als Lösung gesucht ist, kann der Ansatz $\mathbf{r}(t) = f(t)\mathbf{r}^*$ gemacht werden, in dem f eine zu bestimmende skalare Funktion ist, die als zeitabhänige Proportionalitätskonstante gedeutet werden kann. Eingesetzt in (3.9) liefert dieser Ansatz

$$m\ddot{f}\mathbf{r}_{k}^{*} = -m\Omega^{2}f\mathbf{r}_{k}^{*} - \frac{1}{f^{2}}\nabla_{k}\left(\sum_{i< j}^{N}\frac{q^{2}}{4\pi\varepsilon_{0}}\frac{1}{|\mathbf{r}_{i} - \mathbf{r}_{j}|}\right)\Big|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}^{*}}.$$
(3.10)

Wegen der Gleichgewichtszustandsdefinition $\mathbf{0} = \nabla_k U(\mathbf{r})|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}^*}$ gilt

$$-\nabla_k \left(\sum_{i$$

womit man

$$\left[\ddot{f} + \Omega^2 \left(f - \frac{1}{f^2}\right)\right] \mathbf{r}_k^* = \mathbf{0}$$
(3.12)

erhält. Da \mathbf{r}_k^* im Allgemeinen ungleich null ist, bleibt eine nichtlineare Differentialgleichung für f übrig:

$$\ddot{f} + \Omega^2 \left(f - \frac{1}{f^2} \right) = 0.$$
 (3.13)

Weil nur kleine Auslenkungen betrachtet werden sollen, kann $\frac{1}{f^2}$ um die Ruhelage f = 1 entwickelt werden. Somit lässt sich (3.13) linearisieren zu

$$\ddot{f} + 3\Omega^2 f = 3\Omega^2. \tag{3.14}$$

Die Lösung dieser Gleichung führt auf die Breathing-Frequenz $\omega_{BM} = \sqrt{3}\Omega$, welche beachtenswerterweise unabhängig von Teilchezahl N und Dimension d ist.

3.2.2 Beliebige Kopplung und Quanten-Grenzfall

In quantenmechanischer Betrachtung drückt sich die Breathing-Mode unter anderem in der Observablen $\mathbf{r}^2 = \sum_{i=1}^{N} \mathbf{r}_i^2$ aus, welche proportional zur potentiellen Energie der Falle ist. Da die Teilchen eine Ausdehnung haben, kann man nicht ohne weiteres von einer radialen uniformen Bewegung sprechen. Es ist also keine vollständige Analogie zum klassischen Fall gegeben, weshalb die Bezeichnung "Breathing-Mode" nicht unbedingt gerechtfertigt ist. Es soll jedoch die Ausdrucksweise aus der bisherigen Literatur übernommen werden, in der die Breathing-Mode die Schwingungszustände bestimmter quantenmechanischer Observablen bezeichnet. Wenn sich die Erwartungswerte der Observablen aus mehreren harmonischen Schwingungen superponieren, spricht man von mehreren Breathing-Moden. In den Arbeiten [Bau09] und [Bau10b] wurde gezeigt, dass für beliebige Kopplungen zwei Breathing-Moden existieren, welche sich durch einen prinzipiellen zeitlichen Verlauf der Art $\langle \mathbf{r}^2 \rangle(t) = a \sin(\omega_1(t-t_0)) + b \sin(\omega_2(t-t'_0)) + c$ ausdrücken. Dies soll nun analytisch nachvollzogen werden, indem Gleichung (3.4) in Relativ- und Schwerpunktkoordinaten transformiert wird. Damit stets klar ist, nach welcher Variablen differenziert wird, werden in diesem Abschnitt die ∇ -Symbole durch Ausdrücke der Form $\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i}$ ersetzt. Als neue Koordinaten werden die Schwerpunktkoordinate

$$\mathbf{R} \equiv \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \mathbf{r}_i \tag{3.15}$$

sowie die Relativkoordinaten

$$\mathbf{x} \equiv (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_{N-1}) \tag{3.16}$$

gewählt, die durch $\mathbf{x}_i \equiv \mathbf{r}_{i,i+1}$ definiert seien. Es wird also $\Psi(\mathbf{r},t)$ in Gleichung (3.4) durch $\Psi(\mathbf{R},\mathbf{x},t)$ ersetzt. Nun soll summandenweise gezeigt werden, wie die Transformation durchzuführen ist. Für den ersten Summanden der rechten Seite in Gleichung (3.4) sind die Regeln zur totalen Ableitung anzuwenden:

$$-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\frac{\partial^2}{\partial\mathbf{r}_i^2} = -\frac{1}{2}\left(\sum_{i=1}^{N}\frac{\partial^2}{\partial\mathbf{R}^2}\frac{1}{N^2} + 2\sum_{i=1}^{N-1}\frac{\partial^2}{\partial\mathbf{x}_i^2}\right)$$
(3.17)

$$= -\frac{1}{2N}\frac{\partial^2}{\partial \mathbf{R}^2} - \sum_{i=1}^{N-1}\frac{\partial^2}{\partial \mathbf{x}_i^2}.$$
(3.18)

Für den zweiten Summanden erhält man

$$\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\mathbf{r}_{i}^{2} = \frac{1}{2}N\mathbf{R}^{2} + \frac{1}{4N}\sum_{i=1}^{N}\sum_{k=1}^{N}\mathbf{r}_{ik}^{2},$$
(3.19)

was durch Ausrechnen leicht nachzuvollziehen ist. Zu beachten ist, dass \mathbf{r}_{ik}^2 noch in den Relativkoordinaten **x** ausgedrückt werden muss. Dazu kann folgendes "Teleskopieren" angewendet werden:

$$\mathbf{r}_{ik}^{2} = \begin{cases} \left(\sum_{l=i}^{k-1} \mathbf{x}_{l}\right)^{2}, & \text{falls } i < k \\ \left(\sum_{l=k}^{i-1} \mathbf{x}_{l}\right)^{2}, & \text{falls } i > k \\ 0, & \text{falls } i = k. \end{cases}$$
(3.20)

Der dritte Summand ergibt sich schließlich zu

$$\lambda \sum_{i
(3.21)$$

Somit lässt sich der Hamilton-Operator in zwei unabhängige Summanden aufteilen:

$$\hat{H}_{\mathbf{R}} = -\frac{1}{2N}\frac{\partial^2}{\partial \mathbf{R}^2} + \frac{1}{2}N\mathbf{R}^2 \tag{3.22}$$

und

$$\hat{H}_{\mathbf{x}} = -\sum_{i=1}^{N-1} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{x}_i^2} + \frac{1}{4N} \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^N \mathbf{r}_{ik}^2 + \lambda \sum_{i< j}^N \frac{1}{\left|\sum_{l=i}^{j-1} \mathbf{x}_l\right|}.$$
(3.23)

Die zeitabhänige Schrödingergleichung hat nun also die transformierte Form

$$i\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathbf{R},\mathbf{x},t) = \left(\hat{H}_{\mathbf{R}} + \hat{H}_{\mathbf{x}}\right)\Psi(\mathbf{R},\mathbf{x},t).$$
(3.24)

Mit dem Produktansatz

$$\Psi(\mathbf{R}, \mathbf{x}, t) = \phi(\mathbf{R}, t) \,\varphi(\mathbf{x}, t) \tag{3.25}$$

lässt sich diese in die zwei unabhängig zu lösenden Probleme

$$i\frac{\partial}{\partial t}\phi(\mathbf{R},t) = \hat{H}_{\mathbf{R}}\phi(\mathbf{R},t)$$
(3.26)

und

$$i\frac{\partial}{\partial t}\varphi(\mathbf{x},t) = \hat{H}_{\mathbf{x}}\varphi(\mathbf{x},t)$$
(3.27)

separieren. Das Schwerpunktproblem (3.26) lässt sich mittels der Skalierung $\mathbf{\tilde{R}} = \sqrt{N}\mathbf{R}$ auf die aus Lehrbüchern bekannte Oszillator-Form

$$i\frac{\partial}{\partial t}\phi(\tilde{\mathbf{R}},t) = \left(-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial\tilde{\mathbf{R}}^2} + \frac{1}{2}\tilde{\mathbf{R}}^2\right)\phi(\tilde{\mathbf{R}},t)$$
(3.28)

bringen. Hieraus kann nun eine universelle Breathing-Mode ermittelt werden (s. auch [Bau10b]). Betrachte dafür einen beliebigen anfänglichen angeregten Zustand, der sich gemäß

$$\phi(\tilde{\mathbf{R}}, t=0) = \sum_{n} c_n \phi_n(\tilde{\mathbf{R}})$$
(3.29)

ausdrücken lässt. Dabei ist ϕ_n eine Lösung des Eigenwertproblems

$$\left(-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial\tilde{\mathbf{R}}^2} + \frac{1}{2}\tilde{\mathbf{R}}^2\right)\phi_n(\tilde{\mathbf{R}}) = E_n\phi_n(\tilde{\mathbf{R}}).$$
(3.30)

Die zugehörigen Energie-Eigenwerte sind bekannt: $E_n = n + \frac{d}{2}$ für alle $n \in \{0, 1, 2, ...\}$. Die Zeitentwicklung des Zustandes in Gleichung (3.29) ist gegeben durch

$$\phi(\tilde{\mathbf{R}},t) = \sum_{n} c_n \phi_n(\tilde{\mathbf{R}}) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n t}.$$
(3.31)

Es wurde bereits erwähnt, dass sich die Breathing-Mode in der Größe $\mathbf{r}^2 = \sum_{i=1}^{N} \mathbf{r}_i^2$ manifestiert. In den neuen Koordinaten lässt sich diese gemäß Gleichung (3.19) ausdrücken. Für den ersten Summanden aus (3.19) lässt sich eine Breathing-Frequenz ermitteln, indem der zeitliche Verlauf des Erwartungswertes $\langle \mathbf{R}^2 \rangle(t) = \frac{1}{\sqrt{N}} \langle \tilde{\mathbf{R}}^2 \rangle(t)$ bestimmt wird. Es ergibt sich dafür

$$\langle \tilde{\mathbf{R}}^2 \rangle(t) = \int \mathrm{d}\tilde{\mathbf{R}} \mathrm{d}\mathbf{x} \, \Psi^*(\tilde{\mathbf{R}}, \mathbf{x}, t) \tilde{\mathbf{R}}^2 \Psi(\tilde{\mathbf{R}}, \mathbf{x}, t)$$
(3.32)

$$=\sum_{i,j} c_i^* c_j \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(E_j - E_i)t} \underbrace{\int \mathrm{d}\tilde{\mathbf{R}} \,\phi_i^*(\tilde{\mathbf{R}}) \tilde{\mathbf{R}}^2 \phi_j(\tilde{\mathbf{R}})}_{\equiv (\tilde{\mathbf{R}}^2)_{ii}} \underbrace{\int \mathrm{d}\mathbf{x} \,\varphi^*(\mathbf{x}, t)\varphi(\mathbf{x}, t)}_{=1 \text{ für alle } t}$$
(3.33)

$$=\sum_{i,j} c_i^* c_j e^{-i(j-i)t} (\tilde{\mathbf{R}}^2)_{ij}.$$
(3.34)

Durch die Rückführung auf Matrixelemente des eindimensionalen harmonischen Oszillators (s. Anhang A) lässt sich zeigen, dass nur die Fälle i = j und $i = j \pm 2$ Beiträge in der letzten Summe liefern. Da der erste Fall keinen Beitrag zur Schwingung liefert, oszilliert $\langle \mathbf{R}^2 \rangle(t)$ nur mit $\omega_{\mathbf{R}} = 2$. Genauso wie im klassischen Grenzfall hängt diese Frequenz nicht von der Teilchenzahl N oder der Dimension des Systems d ab. Da der Kopplungsparameter λ im Schwerpunktproblem (3.26) nicht auftaucht, ist diese Schwerpunktsmode für alle Kopplungen präsent.

Der zweite Summand in Gleichung (3.19) ist für eine weitere Frequenz $\omega_{\mathbf{x}}$ verantwortlich, die von λ abhängig ist. Dies ist jedoch nicht sofort ersichtlich, sondern ein bereits bekanntes numerisches Ergebnis. Im quantenmechanischen Grenzfall nimmt diese Frequenz ebenfalls den Wert 2 an (vgl. [Bau09]). Um dies für mehr als zwei Teilchen zu zeigen, ist die Einführung von Relativ- und Schwerpunktkoordinaten jedoch nicht mehr zweckmäßig. Da der Summand mit λ in Gleichung (3.4) wegfällt, kann diese einfacher mit dem Produktansatz $\Psi(\mathbf{r},t) = \prod_{i=1}^{N} \phi_i(\mathbf{r}_i,t)$ nach gleichem Prinzip gelöst werden. Es bleibt also festzuhalten, dass neben der festen Frequenz $\omega_{\mathbf{R}} = 2$ eine weitere Frequenz $\omega_{\mathbf{x}}$ existiert, die sich je nach Kopplungsstärke zwischen den Grenzfällen 2 und $\sqrt{3}$ bewegt. Aufgrund fehlender Eindeutigkeit soll deshalb die eingangs verwendete Bezeichnung $\omega_{\rm BM}$ nicht mehr verwendet werden. In Abbildung 3.1 sind in [Bau10b] für den Fall von zwei Teilchen ermittelte Werte für diese Frequenz $\omega_{\mathbf{x}}$ in Abhängigkeit von λ dargestellt.



Abbildung 3.1: Breathing-Frequenzen $\omega_{\mathbf{x}}$ in Abhängigkeit von Kopplungsstärke λ . Die Werte wurden für den Fall von zwei Teilchen durch numerische Lösung der Schrödingergleichung ermittelt. Gut zu erkennen sind die Übergänge der Breathing-Frequenzen zu den Werten $\sqrt{3}$ im klassischen Grenzfall und 2 im idealen Quantenfall.

3.3 Untersuchungsgegenstand dieser Arbeit

In den vorangegangenen Arbeiten [Bau09] und [Bau10b] wurden die Frequenzen $\omega_{\mathbf{x}}$ u.a. für über das Coulomb-Gesetz wechselwirkende Fermionen im eindimensionalen Fall ermittelt. Dabei wurde der gesamte λ -Bereich für bis zu sechs Teilchen abgedeckt. Während man die Frequenzen für zwei Teilchen noch durch eine exakte numerische Lösung der Schrödingergleichung erhalten konnte, war man für größere Teilchenzahlen auf die Hartree-Fock-Näherung angewiesen (s. Abschnitt 4.1). Es deutete sich an, dass es zusätzlich keine oder nur eine schwache Abhängigkeit der Breathing-Frequenzen von der Teilchenzahl gibt. Dies konnte jedoch nicht endgültig geklärt werden. Um dieser Frage der Teilchenzahlabhängigkeit weiter nachzugehen, wurden im Rahmen dieser Arbeit umfassende Hartree-Fock-Rechnungen für bis zu 20 Teilchen bei ausgewählten Kopplungsstärken λ numerisch durchgeführt. Dabei wurde sich auf Fermionen gleicher Massen und Ladungen im eindimensionalen Fall beschränkt.

KAPITEL 4

Numerik

Um die Breathing-Frequenzen $\omega_{\mathbf{x}}$ und $\omega_{\mathbf{R}}$ zu bestimmen, ist grundsätzlich die zeitabhängige Schrödingergleichung (3.4) zu lösen, damit schließlich die zeitabhängigen Erwartungswerte geeigneter Observablen bestimmet werden können. Für zwei Teilchen ist eine Lösung der Schrödingergleichung noch exakt numerisch möglich. Geht man zu höheren Teilchenzahlen über, wird dies schnell schwieriger und man ist auf Näherungen angewiesen. Für das hier behandelte Problem werden die zeitabhängigen Hartree-Fock-Gleichungen benutzt, welche mit einem Computerprogramm numerisch gelöst werden können. In diesem Kapitel sollen die Herleitung der Hartree-Fock-Gleichungen und die Funktionsweise des verwendeten Programms vorgestellt werden.

4.1 Zeitabhängige Hartree-Fock-Gleichungen

Die zeitabhängigen Hartree-Fock-Gleichungen (oft mit TDHF für "time-dependent Hartree-Fock" abgekürzt) ergeben eine genäherte Lösung der *N*-Teilchen-Schrödingergleichung. Im Folgenden werden die wichtigsten Schritte für die Herleitung der Hartree-Fock-Gleichungen aus dem Lehrbuch [Sch07] nachgezeichnet. Dieser Weg führt über eine Slater-Determinante der Einteilchenwellenfunktionen. Es sei jedoch bereits darauf hingewiesen, dass das verwendete Programm einem anderen möglichen Zugang über eine Dichtematrix folgt. Da dieser in die relativ komplizierte Theorie der Nichtgleichgewichts-Greenfunktionen eingebettet ist, wird dieser hier ausgespart. Einige grundlegende Anmerkungen dazu finden sich dennoch in Abschnitt 4.2.

Der Ansatz für die N-Teilchen-Wellenfunktion in Hartree-Fock-Näherung lautet

$$\Psi(1,2,...,N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_1(1) & \cdots & \phi_1(N) \\ \vdots & \vdots \\ \phi_N(1) & \cdots & \phi_N(N) \end{vmatrix}$$
(4.1)

mit der Abkürzung $1 = (x_1, m_{s_1})$. Dabei sind die ϕ_i die bereits normierten Einteilchen-Wellenfunktionen, die aufgrund der Vernachlässigung von Spin-Bahn-Wechselwirkungen als Produkt von Orts- und Spinzustand angesetzt werden:

$$\phi_i(k) = \phi_i(\mathbf{r}_k)\chi_i(m_{s_k}). \tag{4.2}$$

Die Näherung besteht also darin, dass durch den Ansatz als Slater-Determinante Korrelationen zwischen den Teilchen vernachlässigt werden. Da der Zustand aus dem Ansatz (4.1) antisymmetrisch ist, gilt diese Herleitung für Fermionen. Der Hamilton-Operator für das spezielle Problem dieser Arbeit wurde bereits in Gleichung (3.3) eingeführt. Für diese Herleitung soll jedoch die allgemeinere Form

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \nabla_i^2 + \sum_{i=1}^N V(\mathbf{r}_i, t) + \sum_{i(4.3)$$

verwendet werden. \hat{H} hat den Erwartungswert

$$\langle H \rangle = \sum_{i=1}^{N} \int d\mathbf{r}' \, \phi_i^*(\mathbf{r}') \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}', t) \right) \phi_i(\mathbf{r}') \tag{4.4}$$

$$+\sum_{i< j}^{N} \int d\mathbf{r}' d\mathbf{r}'' \, w(|\mathbf{r}' - \mathbf{r}''|) \phi_i^*(\mathbf{r}') \phi_i(\mathbf{r}') \phi_j^*(\mathbf{r}'') \phi_j(\mathbf{r}'') \tag{4.5}$$

$$-\sum_{i< j}^{N} \delta_{m_{s_i}m_{s_j}} \int d\mathbf{r}' d\mathbf{r}'' \, w(|\mathbf{r}' - \mathbf{r}''|) \phi_i^*(\mathbf{r}') \phi_i(\mathbf{r}'') \phi_j(\mathbf{r}'') \phi_j(\mathbf{r}''), \tag{4.6}$$

wobei auf den Beweis hier verzichtet wird. Gemäß dem Ritzschen Variationsprinzip lässt sich zu einem Zeitpunkt t_0 die Grundzustandswellenfunktion bestimmen, indem das Funktional

$$\langle \tilde{H} \rangle = \langle H \rangle - \sum_{i=1}^{N} \varepsilon_i \left(\int d\mathbf{r}' \, \left| \phi_i(\mathbf{r}') \right|^2 - 1 \right) \tag{4.7}$$

minimiert wird. Dabei wurde durch die Lagrange-Parameter ε_i berücksichtigt, dass die $\phi_i(i)$ normiert sein sollen. Die Minimierung von (4.7) wird nun erreicht, indem die Funktionalableitungen nach den $\phi_i^*(\mathbf{r})$ mit der Definition

$$\frac{\delta G\left[\phi_i(\mathbf{r}')\right]}{\delta \phi_j(\mathbf{r})} = \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{G\left[\phi_i(\mathbf{r}') - \varepsilon \delta_{ij} \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r})\right] - G\left[\phi_i(\mathbf{r}')\right]}{\varepsilon}$$
(4.8)

gebildet werden. Dabei ist zu beachten, dass die $\phi_i(\mathbf{r'})$ als von den $\phi_i^*(\mathbf{r'})$ unabhängige Parameter des Funktionals $\langle \tilde{H} \rangle$ betrachtet werden. Durch Anwenden der Definition (4.8) erhält man schließlich einen Satz von N Hartree-Fock-Gleichungen:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{i=1}^N \nabla_i^2 + V(\mathbf{r}_i, t_0)\right)\phi_i(\mathbf{r}) + \int d\mathbf{r}' \,w(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \tag{4.9}$$

$$\times \sum_{\substack{j=1\\j\neq i}}^{N} \phi_{j}^{*}(\mathbf{r}') \left[\phi_{j}(\mathbf{r}')\phi_{i}(\mathbf{r}) - \phi_{j}(\mathbf{r})\phi_{i}(\mathbf{r}')\delta_{m_{s_{i}}m_{s_{j}}} \right] = \varepsilon_{i}\phi_{i}(\mathbf{r}).$$
(4.10)

Die Hartree-Fock-Gleichungen lassen sich numerisch selbstkonsistent lösen, indem man ausgehend von bestimmten Funktionen ϕ_1, \ldots, ϕ_N ein iteratives Verfahren durchführt. Die

zeitabhängigen Gleichungen haben analog zur zeitabhängigen Schrödingergleichung die Form

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{i=1}^N \nabla_i^2 + V(\mathbf{r}_i, t)\right)\phi_i(\mathbf{r}, t) + \int d\mathbf{r}' \, w(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \tag{4.11}$$

$$\times \sum_{\substack{j=1\\j\neq i}}^{N} \phi_{j}^{*}(\mathbf{r}',t) \left[\phi_{j}(\mathbf{r}',t)\phi_{i}(\mathbf{r},t) - \phi_{j}(\mathbf{r},t)\phi_{i}(\mathbf{r}',t)\delta_{m_{s_{i}}m_{s_{j}}} \right] = \mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial t}\phi_{i}(\mathbf{r},t).$$
(4.12)

4.2 Funktionsweise des Numerik-Programms

Für die Lösung der Hartree-Fock-Gleichungen wurde das Numerik-Programm $Carlot-ta^1$ genutzt. Es handelt sich dabei um ein Programm, mit dem sich zeitabhängige Nichtgleichgewichts-Greenfunktionen als Lösung der Kadanoff-Baym-Gleichungen bestimmen lassen. Wie schon erwähnt, werden die Hartree-Fock-Gleichungen also nicht in der Darstellung aus der Herleitung in Abschnitt 4.1 gelöst. Stattdessen erfolgt eine reduzierte quantenstatistische Beschreibung mit der sogenannten Einteilchen-Dichtematrix $\rho(x,x',t) = -iG^{<}(x,t,x',t)$, wobei $G^{<}$ als Korrelationsfunktion bezeichnet wird. Man erhält die Dichtematrix in diesem Fall als einzeitigen Limes der zweizeitigen Einteilchen-Nichtgleichgewichts-Greenfunktion G(x,t,x',t'). Vorteilhaft an der Berechnung mittels der Dichtematrix ist, dass die Teilchenzahl lediglich als Parameter eingeht und nicht die Größe eines ganzen Satzes von Gleichungen bestimmt. Dafür verzichtet man allerdings auf die Informationen, die sich aus der N-Teilchen-Wellenfunktion ergeben. Die Dichtematrix liefert alle Einteilchengrößen und einige N-Teilchengrößen, z.B. die Gesamtenergie. Ausführliche Erklärungen zu den Green-Funktionen finden sich in [Bal07] und [Bau10a].

Zu Anfang berechnet das Programm stets den energetisch niedrigsten Gleichgewichtszustand. Anschließend wird die Dichtematrix in der Zeit propagiert, wobei der Hamilton-Operator ein kurzzeitiges Ausschalten der Falle beinhaltet. Da das Programm für die Berechnungen die sogenannte FE-DVR-Basis-Darstellung verwendet, erfolgt im nächsten Unterabschnitt eine Erläuterung dazu. Anschließend werden die relevanten Parameter für die Berechnungen sowie das Vorgehen bei der Datenauswertung erläutert.

4.2.1 FE-DVR-Basisdarstellung

Das Numerik-Programm entwickelt die Green-Funktion in der FE-DVR-Basis (detailliert beschrieben in [Res00]), da sich diese als sehr problemangepasst erwiesen hat. Die Abkürzung steht dabei für "finite-element discrete variable representation".

In der FE-DVR-Darstellung wird das physikalisch und numerisch relevante Intervall $[0,x_0]$ in $n_r - 1$ finite Elemente $[x^i,x^{i+1}]$ gleicher Größe geteilt. Für jedes finite Element werden n_b sogenannte generalisierte Gauß-Lobatto-Punkte x_k^i berechnet, mit deren Hilfe eine lokale DVR-Basis konstruiert werden kann. Eine solche DVR-Basis besteht aus einer Brückenfunktion, die zwei nebeneinanderliegende Elemente miteinander verknüpft, und Element-Funktionen, die nur innerhalb ihrer Grenzen in $]x^i, x^{i+1}[$ von null verschieden sind.

¹ basierend auf [Bal10] geschrieben von Dipl.-Phys. Karsten Balzer, ITAP Uni Kiel

Die Gesamtzahl der verwendeten Basis-Funktionen ergibt sich zu $n_{\text{ges}} = (n_{\text{b}} - 1)(n_{\text{r}} - 1) - 1$. Die Endlichkeit dieser Anzahl bewirkt einen numerischen Fehler, dessen Größe in Konvergenzbetrachtungen abzuschätzen ist. In Abbildung 4.1 wird eine Basiskonstruktion beispielhaft veranschaulicht.



Abbildung 4.1: Konstruktion einer Basis für $n_{\rm b} = 4$. Dargestellt sind zwei benachbarte finite Elemente FE *i* und FE *i* + 1. Jedes Element enthält 4 Gauß-Lobatto-Punkte (quadratische Punkte), wobei der Endpunkt des Elements *i* gleich dem ersten Punkt des Elements *i* + 1 ist. Zu jedem Element gehören 2 Elementfunktionen. Zwei nebeneinanderliegende Elemente werden durch eine Brückenfunktion verbunden.

4.2.2 Parameter für die Berechnungen

Das Numerik-Programm wurde zunächst für die Behandlung des speziellen Problems der Breathing-Mode eingestellt. Im Folgenden werden die Parameter aufgezählt, die für die einzelnen Berechnungen speziell gewählt wurden. Lediglich die ersten beiden Parameter legen die physikalischen Rahmenbedingungen fest. Die anderen Parameter bestimmen die Numerik. Alle anderen nicht aufgezählten Parameter wurden nicht verändert und können in einer Beispiel-ini-Datei in Anhang B eingesehen werden.

- N: Anzahl der Teilchen
- λ : Stärke der Wechselwirkung der Teilchen untereinander (vgl. Gleichung (3.7))
- x_0 : Breite des eindimensionalen Ortsgitters. Der Wert wurde meist so gewählt, dass die Einteilchendichte im Gleichgewichtszustand stark genug, d.h. auf etwa 10^{-10} , abgefallen ist.

- n_r : Anzahl der Punkte $x^1 = 0, \ldots, x^{n_r} = x_0$, die das Ortsgitter in finite Elemente teilen
- $n_{\rm b}$: Anzahl der generalisierten Gauß-Lobatto-Punkte $x_1^i = x^i, \ldots, x_{n_{\rm b}}^i = x^{i+1}$
- t_{prop}: Endzeitpunkt der Zeitpropagation
- $\Delta t_{\rm prop}$: Größe des Zeitschritts bei der Zeitpropagation
- κ : Abschneideparameter im Potential $\frac{\lambda}{\sqrt{(x_i x_k)^2 + \kappa^2}}$, der Divergenzen verhindert.

4.2.3 Ausgaben des Programms und deren Auswertung

Noch bevor zeitabhängige Größen ausgegeben werden, berechnet das Programm die Energie des Gleichgewichtszustandes. Vor der Zeitpropagation ist darauf zu achten, dass die berechnete Energie konvergiert ist. Es werden zu Anfang außerdem die zugehörigen Einteilchendichten ausgegeben. In den Abbildungen 4.2 und 4.3 kann man die Dichten für 2 und 5 Teilchen bei unterschiedlichen Kopplungsparametern vergleichen. Wie bereits gezeigt, ist eine geeignete Observable für die Breathing-Mode die potentielle Energie $E_{\text{pot}} \propto \sum_{i=1}^{N} \mathbf{r}_i^2$. Daher gibt das Programm einen Datensatz mit dem zeitlichen Verlauf des Erwartungswertes dieser Größe aus (s. Abbildung 4.4). Mittels einer diskreten Fourier-Transformation¹ kann daraus ein Spektrum erstellt werden, das sich hinsichtlich der Breathing-Frequenzen untersuchen lässt. Durch die Wahl eines Wertes für die Kopplungsstärke λ werden die Fallenfrequenz Ω und damit alle Einheiten wie in Abschnitt 3.1 festgelegt.



Abbildung 4.2: Einteilchendichte n für 2 Teilchen bei unterschiedlichen Kopplungsstärken. Zu sehen ist, dass die Lokalisierung und die Abstoßung der Teilchen mit λ zunehmen.

¹ Für die Berechnungen in dieser Arbeit wurde das Programm *Grace* (http://plasma-gate.weizmann. ac.il/Grace/) verwendet.



Abbildung 4.3: Einteilchendichte *n* für 5 Teilchen bei unterschiedlichen Kopplungsstärken. Auch hier ist der gleiche Einfluss von λ wie schon bei 2 Teilchen zu beobachten.



Abbildung 4.4: Zeitlicher Verlauf des Erwartungswertes der potentiellen Energie. Sehr gut zu erkennen ist das Vorhandensein einer Schwebung.

kapitel 5

Ergebnisse

Das Ziel dieser Arbeit liegt insbesondere darin, für verschiedene Kopplungsstärken Breathing-Frequenzen in Abhängigkeit von der Teilchenzahl zu bestimmen. Dafür muss das Spektrum des Erwartungswertes der potentiellen Energie ausgewertet werden. Da hier einige Besonderheiten auftreten, wird dem Spektrum zu Anfang ein eigener Abschnitt gewidmet. Da am Anfang einer numerischen Berechnung eine Konvergenzuntersuchung für die einstellbaren Parameter durchgeführt werden sollte, werden anschließend Ergebnisse hierzu vorgestellt. Zuletzt werden die Ergebnisse für die Teilchenzahlabhängigkeit der Breathing-Frequenzen $\omega_{\mathbf{x}}$ präsentiert.

5.1 Form des Spektrums

Ein beispielhaftes Spektrum kann in Abbildung 5.1 eingesehen werden. Dabei ist zu sehen, dass hauptsächlich zwei Peaks auftreten. In einer Vergrößerung wird außerdem gezeigt, dass kleine hochfrequente Störungen auftreten, deren Herkunft nicht klar ist. Möglicherweise





handelt es sich hierbei um Hartree-Fock-Artefakte. Prinzipiell wird erwartet, dass man im Spektrum die Breathing-Frequenzen $\omega_{\mathbf{x}}$ und $\omega_{\mathbf{R}}$ findet. So liegt es nahe, die großen Peaks in dieser Abbildung mit $\omega_{\mathbf{x}}$ und $\omega_{\mathbf{R}}$ zu identifizieren, so wie es in Abbildung 5.2 dargestellt ist. Für $\omega_{\mathbf{R}}$ ist dies jedoch problematisch, was im folgenden Unterabschnitt diskutiert wird.

5.1.1 Auffälligkeit der Schwerpunktsmode

Analytisch wurde gezeigt, dass die Schwerpunktsmode die feste Frequenz $\omega_{\mathbf{R}} = 2$ hat. Im Spektrum ist diese Frequenz aber nicht eindeutig zu finden. So ist die entsprechende Frequenz in Abbildung 5.2 zum Beispiel etwas zu groß. Teilweise ist sogar auch gar kein möglicher Peak für $\omega_{\mathbf{R}}$ auszumachen, wie in Abbildung 5.10 für große Teilchenzahlen ersichtlich ist. Für zwei Teilchen war der Peak jedoch in allen durchgeführten Rechnungen zu sehen. In Abbildung 5.3 ist das Verhalten der Peaks bei verschiedenen Kopplungsstärken zu erkennen. Es stellt sich heraus, dass die entsprechende Frequenz mit zunehmender Kopplungsstärke wächst: Hat die Frequenz bei $\lambda = 0,1$ noch den Wert 2,004, so hat sie bei $\lambda=3$ bereits den Wert 2,381. Dies ist ein weiteres Indiz dafür, dass der Peak nicht die Schwerpunktsmode repräsentiert. Eine mögliche Erklärung für dieses Problem ist, dass die Frequenz $\omega_{\mathbf{R}} = 2$ zwar vorhanden ist, aber im Spektrum nur so schwach ist, dass sie überdeckt wird. Der in der Nähe von $\omega = 2$ liegende Peak könnte stattdessen ein Hartree-Fock-Artefakt sein. Dass es sich bei den von 2 abweichenden Werten um einen numerischen Fehler handelt, ist nicht sehr wahrscheinlich, da die andere Frequenz ω_x gut mit den exakten Werten aus der Schrödingergleichung übereinstimmt und auch genauere Testrechnungen kein signifikant anderes Resultat liefern.



Abbildung 5.2: Relevanter Teil des Spektrums. Die Peaks werden mit den Breathing-Frequenzen identifiziert. Für $\omega_{\mathbf{R}}$ ist dies allerdings fragwürdig.



Abbildung 5.3: Verhalten des Peaks, von dem nicht klar ist, ob er die Schwerpunktsmode repräsentiert. Mit zunehmender Kopplungsstärke verschiebt sich der Peak zu deutlich größeren Frequenzen hin. Die Rechnung wurde für N = 2 durchgeführt.

5.2 Konvergenzuntersuchungen

Eine numerische Rechnung liefert keine Garantie, dass sich die errechneten Werte bei genaueren Einstellungen nicht noch stark ändern können. Führt man jedoch eine Konvergenzuntersuchung durch, lässt sich eine vernünftige Abschätzung über die Güte der Werte machen. In diesem Fall sind vor allem die Parameter $t_{\rm prop}$ und $\Delta t_{\rm prop}$ sowie die Basisgröße numerisch relevant. Deshalb werden im Folgenden Konvergenzuntersuchungen bezüglich dieser Parameter durchgeführt. Es zeigt sich, dass die Numerik umso aufwendiger sein muss, je größer die Kopplungsstärke und die Teilchenzahl sind. Deshalb ist davon auszugehen, dass ein Parametersatz, der ein konvergiertes Ergebnis produziert, ebenfalls ein konvergiertes Ergebnis für geringere Teilchenzahlen oder Kopplungsstärken produziert. Als Maß für die Güte einer Konvergenzrechnung kann der Einfluss auf das letztendlich interessierende Ergebnis ω_x genommen werden. Außerdem kann die Stärke der durch den endlichen Zeitschritt bedingten Abnahme der Gesamtenergie betrachtet werden, welche dazu führen kann, dass bestimmte Frequenzen nicht mehr aufgelöst werden können.

5.2.1 Wahl des Abschneideparameters

In eindimensionalen Problemen wie hier ist es üblich, das abstoßende Coulomb-Potential durch einen Abschneideparameter zu regularisieren. Dadurch bekommt man eine kleine qualitative Veränderung des Potentials, was in gewissen Situationen aber auch eher der physikalischen Realität entsprechen kann. Der Abschneideparameter κ wird in allen in dieser Arbeit aufgeführten Rechnungen zu 0,1 gewählt. Da er das Wechselwirkungspotential verändert, ist er nicht völlig losgelöst von λ zu sehen. Je kleiner κ ist, desto größer ist die Anforderung an den numerischen Aufwand. Ein kleinerer Wert von κ entspricht zwar immer mehr dem reinen Coulomb-Potential, verlangt aber, wie sich in Proberechnungen zeigt, bereits bei $\kappa = 0,01$ eine sehr große Basisanzahl. Um die Rechenzeit dafür zu sparen und gleichzeitig das Ergebnis nicht zu sehr zu verfälschen, erweist sich $\kappa = 0,1$ als sinnvoller Wert. Der Einfluss von κ auf die Breathing-Frequenz wird in [Bau09] näher untersucht.

5.2.2 Abhängigkeit des Spektrums von Propagationsdauer t_{prop}

Für ein exaktes Ergebnis wäre eine unendlich lange Zeitreihe notwendig. Da man in der Praxis gezwungen ist, die Rechnungen nach einer gewissen Propagationsdauer $t_{\rm prop}$ abzubrechen, ist der Einfluss dieser Größe zu untersuchen. Prinzipiell führt eine längere Propagationsdauer natürlich zu einem genaueren Ergebnis. Neben einer Verschiebung der Breathing-Frequenzen bestimmt $t_{\rm prop}$ als einziger Parameter die Größe des Diskretisierungsintervalls bei der Fourieranalyse. Je größer $t_{\rm prop}$ ist, desto feiner können schließlich die Frequenzen aufgelöst werden. Die Größe des Diskretisierungsintervalls für die Frequenzen im Spektrum lässt sich nämlich gemäß

$$\Delta \omega = \frac{2\pi}{t_{\rm prop}} \tag{5.1}$$

angeben. Zur Demonstration, dass eine längere Zeitreihe allerdings auch einen undeutlichen Peak liefern kann, sind in Abbildung 5.5 die relevanten Teile des Spektrums für $t_{\rm prop} = 1600$ und $t_{\rm prop} = 1800$ vergleichend dargestellt. Bei der Zeitreihe mit $t_{\rm prop} = 1800$ sind die Punkte der Frequenzen näher beieinander als bei $t_{\rm prop} = 1600$. Dennoch hat der zugehörige Peak eine abgestumpfte Spitze. Dies liegt daran, dass die Punkte ungünstig um den tatsächlichen Wert herum verteilt sind. Obwohl die Rechnung für $t_{\rm prop} = 1600$ eigentlich ungenauer ist, erhält man also einen Peak mit klar definierterer Spitze, weil die Punkte auf der Frequenzachse passender verteilt sind. Um aus einem abgestumpften Peak dennoch einen sinnvollen Wert zu erhalten, kann man einen Spline durch die Punkte legen und von diesem das Maximum bestimmen. Für alle weiteren Konvergenzbetrachtungen ist zu beachten, dass bereits das durch $t_{\rm prop}$ vorgegebene Diskretisierungsintervall eine Grenze für sichtbare Abweichungen der Frequenzen liefert. In Abbildung 5.4 ist die Abhängigkeit der ermittelten Breathing-Frequenz $\omega_{\mathbf{x}}$ von der Propagationsdauer $t_{\rm prop}$ zu erkennen. Zu



Abbildung 5.4: Abhängigkeit der Breathing-Frequenz $\omega_{\mathbf{x}}$ von der Propagationsdauer t_{prop} . Gerechnet wurde mit den Parametern N = 2, $\lambda = 1$, $\Delta t_{\text{prop}} = 0,001$, $n_{\text{r}} = n_{\text{b}} = 12$.



Abbildung 5.5: Vergleich der Peaks von ω_x bei verschiedenen Zeitreihen. Obwohl die längere Zeitreihe eine feinere Auflösung ermöglicht, hat der zugehörige Peak eine stumpfe Spitze.

beachten ist, dass die Werte ohne Splines ermittelt worden sind. Trotzdem ist bereits eine Konvergenz ersichtlich. Für die Berechnungen in der Arbeit wurde der Schluss gezogen, dass Zeitreihen bis $t_{\rm prop} = 1000$ meist einen guten Kompromiss aus Genauigkeit und Rechenzeit darstellen.

5.2.3 Abhängigkeit des Spektrums von Zeitschritt Δt_{prop}

Der Einfluss des Zeitschritts macht sich vergleichsweise stark in der Abnahme der Gesamtenergie bemerkbar. Außerdem zeigt Abbildung 5.6, dass die Schärfe der Peaks in den Spektren maßgeblich durch den Zeitschritt bestimmt werden. Interessanterweise liefern die zugehörigen Datensätze dennoch fast immer den gleichen Wert für die Breathing-Frequenz. Bis auf den Fall $\Delta t_{\rm prop} = 0.05$, bei dem sich $\omega_{\bf x} = 1.942$ ergibt, hat $\omega_{\bf x}$ stets den Wert 1,898. Trotzdem zeigen Testrechnungen mit stärkeren Wechselwirkungen, dass etwas größere Zeitschritte schnell zu ungenaue Ergebnisse produzieren. Zusammen mit der Tatsache, dass die Laufzeit des Programms antiproportional zu $\Delta t_{\rm prop}$ ist, lässt dies einen Zeitschritt von etwa 0,001 sinnvoll erscheinen.

5.2.4 Abhängigkeit der Grundzustandsenergie von Basisparametern n_r und n_b

Bei vorgegebener Kopplungsstärke λ (und festgelegtem κ) hängt die errechnete Energie des Gleichgewichtszustandes, hier Grundzustandsenergie E genannt, nur von der Wahl der Basisparameter $n_{\rm r}$ und $n_{\rm b}$ ab. Abbilding 5.7 liefert einen Überblick über das Konvergenzverhalten des Grundzustandes bezüglich dieser Parameter. Es zeigt sich, dass für den Fall von 16 Teilchen mit $\lambda = 1$ der Bereich eines konvergierten Grundzustandes ab etwa $n_{\rm b} = 13$ beginnt. Natürlich hängt dies allerdings von der Zahl der betrachteten Stellen des Energie-Wertes ab. In Abbildung 5.8 ist zusätzlich demonstriert, dass der Grundzustande



Abbildung 5.6: Spektrum in Abhängigkeit vom Zeitschritt Δt_{prop} . Gerechnet wurde mit den Parametern N = 2, $\lambda = 1$, $t_{\text{prop}} = 1000$, $n_{\text{r}} = n_{\text{b}} = 12$.

umso langsamer konvergiert, je größer die Teilchenzahlen und die Kopplungsstärken werden. Dafür wurde bei verschiedenen Teilchenzahlen und Kopplungsstärken der Quotient aus der jeweils berechneten Energie E und dem genauesten Wert der Energie E_0 (bei $n_{\rm b} = n_{\rm r} = 15$) ermittelt. Große Teilchenzahlen und Kopplungsparameter stellen also eine besondere numerische Herausforderung dar, da sie besonders rechenintensiv sind.

5.2.5 Abhängigkeit des Spektrums von Basisparametern n_r und n_b

Im vorherigen Abschnitt wurde die Abhängigkeit der Grundzustandsenergie von der Basisgröße demonstriert. Von besonderem Interesse ist jedoch die Auswirkung auf die schließlich zu bestimmende Breathing-Frequenz ω_x . In Abbildung 5.9 sind Abhängigkeiten der Frequenz ω_x von n_r und n_b dargestellt, bei denen jeweils ein Basisparameter festgehalten und der andere variiert wird. Als Konsequenz dieser Berechnungen kann man davon ausgehen, dass man sich für Kopplungsstärken $\lambda \leq 1$ mit $n_r \geq 12$ und $n_b \geq 12$ deutlich im konvergierten Bereich befindet. Es fällt außerdem auf, dass die Breathing-Frequenz weniger empfindlich bezüglich der Basiseinstellung als die Grundzustandsenergie ist. Dies ist darauf zurückzuführen, dass insbesondere der Parameter $t_{\rm prop}$ eine Limitierung der auflösbaren Frequenzen darstellt. Die Größe der Basis ist mit Bedacht zu wählen, denn hier kann man viel Rechenaufwand sparen. Andererseits hat es auch Vorteile, die Basis



Abbildung 5.7: Grundzustandsenergie für N = 16 und $\lambda = 1$ in Abhängigkeit von den Basisparametern $n_{\rm r}$ und $n_{\rm b}$.



Abbildung 5.8: Vergleich der Konvergenzgeschwindigkeiten für unterschiedliche Teilchenzahlen und Kopplungsstärken. Für die Berechnungen wurde $n_r = 15$ festgesetzt.

etwas größer zu wählen, sodass man sicher davon ausgehen kann, dass die Werte bezüglich der Basis konvergiert sind.



Abbildung 5.9: Abhängigkeit der Breathing-Frequenz $\omega_{\mathbf{x}}$ von der Basisgröße. Gerechnet wurde mit den Parametern N = 5, $\lambda = 1$, $t_{\text{prop}} = 1000$, $\Delta t_{\text{prop}} = 0,001$.

5.3 Untersuchung der Teilchenzahlabhängigkeit für ausgewählte Kopplungsstärken

Wie sich in Abschnitt 5.2.4 gezeigt hat, ist der Rechenaufwand für die Grundzustandsenergie bei kleinen Kopplungsstärken am geringsten. Deshalb wurden in dieser Arbeit nur Untersuchungen für $\lambda = 0,1,0,5$ und 1 durchgeführt. In diesem Abschnitt werden die zugehörigen Ergebnisse sortiert nach Kopplungsstärke präsentiert.

5.3.1 Kopplungsstärke $\lambda = 0,1$

Da $\lambda = 0,1$ eine relativ kleine Kopplungsstärke ist, sind die Anforderungen an die Numerik vergleichsweise klein. Die hier berechneten Daten für 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 12, 14, 16 und 20 Teilchen wurden mit $\Delta t_{\rm prop} = 0,002$ und $t_{\rm prop} = 655,35$ produziert. Bei 20 Teilchen wurde die Basisgröße durch $n_{\rm b} = n_{\rm r} = 14$ bestimmt und bei 2 Teilchen durch $n_{\rm b} = n_{\rm r} = 11$. Für jede der genannten Teilchenzahlen ergab sich die gleiche Breathing-Frequenz $\omega_{\rm x} = 1,985$. Dieser Wert deckt sich exakt mit dem Hartree-Fock-Wert aus [Bau10b], ist jedoch etwas kleiner als der Wert $\omega_{\rm x} = 1,98656$, der sich aus der direkten Lösung der Schrödingergleichung für zwei Teilchen ergibt. Wie bereits in [Bau10b] zu sehen, ist dies typisch und resultiert aus der Vernachlässigung der Korrelationen bei der Hartree-Fock-Näherung.

Es bleibt festzuhalten, dass für $\lambda = 0,1$ keine Teilchenzahlabhängigkeit bei der Breathing-Frequenz $\omega_{\mathbf{x}}$ zu sehen ist. Für einige Teilchenzahlen ist das zugehörige Spektrum in Abbildung 5.10 dargestellt.



Abbildung 5.10: Spektrum für ausgewählte Teilchenzahlen bei $\lambda = 0,1$.



Abbildung 5.11: Relevanter Teil des Spektrums für ausgewählte Teilchenzahlen bei $\lambda = 0.5$. Für mittlere Teilchenzahlen ist die Breathing-Frequenz kleiner.

5.3.2 Kopplungsstärke $\lambda = 0.5$

Die Berechnungen für $\lambda = 0,5$ wurden mit $\Delta t_{\rm prop} = 0,001$ bzw. höchstens $\Delta t_{\rm prop} = 0,002$ und $t_{\rm prop} = 1000$ durchgeführt. Die maximale Basisgröße wurde durch $n_{\rm b} = n_{\rm r} = 13$ im Falle von 20 Teilchen festgelegt. Es wurden Berechnungen für 2, 3, 4, 6, 8, 10, 11, 13, 14, 16, 18 und 20 Teilchen durchgeführt. Die ermittelten Werte für die Breathing-Frequenzen betragen (ohne Spline-Interpolation) $\omega_{\mathbf{x}} = 1,942$ für 2, 11, 13, 14, 16, 18 und 20 Teilchen und $\omega_{\mathbf{x}} = 1,935$ für 3, 4, 6, 8 und 10 Teilchen. Es ist auffällig, dass die Breathing-Frequenz für mittlere Teilchenzahlen etwas kleiner wird. Da das gleiche Verhalten auch bei $\lambda = 1$ auftritt, wird dies im zugehörigen Abschnitt 5.3.3 diskutiert. Für ausgewählte Teilchenzahlen kann das für $\lambda = 0,5$ ermittelte Spektrum in Abbildung 5.11 eingesehen werden.

Der Vergleich mit den Werten aus [Bau10b] zeigt, dass der Wert $\omega_{\mathbf{x}} = 1,94211$ aus der Lösung der Schrödingergleichung wieder etwas größer ist. Die dort bereits berechneten Hartree-Fock-Werte stimmen wieder gut mit denen aus dieser Arbeit überein.



5.3.3 Kopplungsstärke $\lambda = 1$

Abbildung 5.12: Spektrum um den ω_x -Peak herum für ausgewählte Teilchenzahlen bei $\lambda = 1$. Für Teilchenzahlen von 3 bis 11 wird die Breathing-Frequenz kleiner.

Die Berechnungen für $\lambda = 1$ wurden mit $\Delta t_{\rm prop} = 0,001$ und $t_{\rm prop} = 1000$ durchgeführt. Die maximale Basisgröße wurde durch $n_{\rm b} = n_{\rm r} = 13$ festgelegt, wobei in einzelnen Proberechnungen auch größere Basen verwendet wurden, die jedoch kein anderes Ergebnis lieferten. Auffallend ist auch hier, dass ein kleiner Sprung bei der Breathing-Frequenz auftritt: Für 2, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19 und 20 Teilchen ergibt sich die Frequenz $\omega_{\mathbf{x}} = 1,898$

und für 3, 5, 7, 9, 11 die auf der nächstkleineren Diskretisierungsstufe liegende Frequenz $\omega_{\mathbf{x}} = 1,891$ (ohne Spline-Interpolation). Für andere dazwischen liegende Teilchenzahlen wurden zwar keine Werte ermittelt, doch es ist kein Abweichen von dieser Tendenz zu erwarten. Dieser Trend, dass die Breathing-Frequenz ab N = 3 für einige Teilchenzahlen kleiner wird und dann wieder auf den Wert von N = 2 ansteigt, konnte auch durch genauere Parametereinstellungen nicht unterdrückt werden. Die Ursache für dieses Verhalten kann nicht endgültig geklärt werden. Selbst wenn ein numerischer Fehler ausgeschlossen werden kann, bleibt offen, ob dies ein realer physikalischer Effekt ist oder lediglich durch die Hartree-Fock-Näherung entstanden ist. Für ausgewählte Teilchenzahlen ist das Spektrum in Abbildung 5.12 zu sehen. Die Kurven sind darin ohne Spline-Interpolation dargestellt. Führt man dennoch eine Spline-Interpolation durch, erhält man einen etwas weicheren Verlauf für die Frequenzen $\omega_{\mathbf{x}}$, der in Abbildung 5.13 dargestellt ist. Trotzdem ist dieser Verlauf nur bedingt aussagekräftig, denn die zu geringe Auflösung stellt auch eine Limitierung der Genauigkeit der Splines dar. Außerdem wurde deren Maximum grafisch abgelesen, was zu einer weiteren Ungenauigkeit führt. Diese wurde abgeschätzt und durch Fehlerbalken in die Abbildung eingetragen. Unter Berücksichtigung dieser Unzulänglichkeiten lässt sich festhalten, dass auch das Ergebnis mit den splineinterpolierten Werten einen deutlichen Sprung bei den Frequenzen zeigt.



Abbildung 5.13: Teilchenzahlabhängigkeit der Breathing-Frequenzen $\omega_{\mathbf{x}}$ mit Werten, die durch Spline-Interpolation ermittelt worden sind. Auch in diesem Verlauf ist ein recht deutlicher Sprung bei N = 3 und etwa N = 11 zu sehen.

Um die Güte dieses Ergebnisses zu belegen, soll nun noch einmal gezielt der Einfluss der Länge der Zeitpropagation t_{prop} untersucht werden. Da t_{prop} die maximale Frequenzauflösung bestimmt (s. Abschnitt 5.2.2), ist dies ein wichtiger Parameter und könnte einen Einfluss auf die Teilchenzahlabhängigkeit haben. Deshalb wurden für 2 und 3 Teilchen mit gleichen Numerik-Einstellungen recht lange Zeitreihen bis $t_{\rm prop} = 2000$ aufgenommen. In Abbildung 5.14 sind die zugehörigen Breathing-Frequenzen ω_x für beide Teilchenzahlen in Abhängigkeit von $t_{\rm prop}$ dargestellt. Dabei zeigt sich, dass sich an dem qualitativen Ergebnis eines Sprungs in der Frequenz beim Übergang von 2 zu 3 Teilchen nichts ändert. Für einen besseren Überblick über die Frequenzauflösung sind in die Abbildung zusätzlich die entsprechenden Diskretisierungsniveaus der Frequenz mit eingezeichnet.



Abbildung 5.14: Breathing-Frequenzen $\omega_{\mathbf{x}}$ für 2 und 3 Teilchen in Abhängigkeit von t_{prop} . Auch mit zunehmender Propagationsdauer bleiben die Frequenzen unterschiedlich. Die zusätzlich eingezeichneten Balken veranschaulichen das jeweils durch t_{prop} festgelegte Diskretisierungsintervall $\Delta \omega = \frac{2\pi}{t_{\text{prop}}}$. Für beide Teilchenzahlen wurde mit $N = 2, \lambda = 1, \Delta t_{\text{prop}} = 0,001, n_{\text{r}} = n_{\text{b}} = 12$ gerechnet.

Vergleichswerte für diese Kopplungsstärke aus [Bau10b] lauten $\omega_{\mathbf{x}} = 1,90114$ mittels Schrödingergleichung für zwei Teilchen und $\omega_{\mathbf{x}} = 1,892$ mittels Hartree-Fock für zwei Teilchen. Für größere Teilchenzahlen war dort ein leichter Anstieg ausgehend von $\omega_{\mathbf{x}} = 1,892$ zu beobachten, was an einer ungenauen Rechnung liegen könnte. Auch hier ist der Wert, der sich aus der Schrödingergleichung ergibt, erwartungsgemäß etwas größer. Die Hartree-Fock-Werte stimmen im Groben überein, jedoch war der beschriebene Trend vorher nicht zu sehen.

KAPITEL 6

Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit wurde das Verhalten der Breathing-Frequenz $\omega_{\mathbf{x}}$ bei verschiedenen Kopplungsstärken λ in Abhängigkeit von der Teilchenzahl untersucht. Während sich bei $\lambda = 0,1$ eine konstante Breathing-Frequenz zeigt, tritt bei $\lambda = 0,5$ und $\lambda = 1$ gleichermaßen der Trend auf, dass die Frequenz ab drei Teilchen für einige Teilchenzahlen kleiner wird, für noch größere Teilchenzahlen jedoch wieder den Wert von zwei Teilchen annimmt und bei diesem bleibt. Umfangreiche numerische Tests sowie die Tatsache, dass dieser Effekt bei zwei verschiedenen Kopplungsstärken zu beobachten ist, belegen, dass das Verhalten wahrscheinlich nicht auf einen numerischen Fehler zurückzuführen ist. Dennoch ist nicht gesichert, dass diese Abhängigkeit von der Teilchenzahl auch in der Realität auftritt. Nicht auszuschließen ist nämlich, dass es sich bei dem Ergebnis um einen Effekt handelt, der aus der Hartree-Fock-Näherung resultiert.

Als Endergebnis für diese Arbeit lässt sich schließlich formulieren: Für spinpolarisierte Fermionen in einer Raumdimension, die sich in einer harmonischen Falle befinden und über das Coulomb-Gesetz wechselwirken, kann in Hartree-Fock-Näherung eine gewisse sehr kleine Abhängigkeit der Breathing-Frequenz von der Teilchenzahl festgestellt werden. Es ist jedoch nicht auszuschließen, dass diese ein Näherungseffekt ist oder in noch genaueren Rechnungen nicht mehr auftritt.

Zukünftige Arbeiten könnten sich in folgender Weise mit der weiteren Untersuchung dieser Schwankung in der Frequenz beschäftigen: Einerseits kann trotz der in dieser Arbeit erfolgten Konvergenzuntersuchungen die Numerik insbesondere durch längere Zeitreihen und damit auch einer feineren Frequenzauflösung überprüft werden. Andererseits können, sofern es die Rechenkapazitäten zulassen, auch noch höhere Teilchenzahlen untersucht werden, um festzustellen, ob die Frequenz noch weitere Male andere Werte annimmt. Der in dieser Arbeit relativ ungenau behandelte Fall $\lambda = 0,1$ könnte des Weiteren noch genauer berechnet werden, um herauszufinden, ob der beschriebene Trend hier möglicherweise auch auftritt. Da in dieser Arbeit nur ein Bereich von relativ kleinen Kopplungsstärken untersucht wurde, ist darüber hinaus natürlich noch die ganze Breite an stärkeren Kopplungen zu betrachten. Wie sich allerdings in Konvergenzrechnungen dieser Arbeit gezeigt hat, ist dies ebenfalls mit einem hohen numerischen Aufwand verbunden.

Neben dem Verhalten der Breathing-Frequenz $\omega_{\mathbf{x}}$ bei verschiedenen Teilchenzahlen ist ein anderes zentrales Ergebnis dieser Arbeit, dass die Frequenz der Schwerpunktsmode $\omega_{\mathbf{R}} = 2$ nicht eindeutig im Spektrum zu identifizieren ist. Es ist begründet worden, dass der entsprechende Peak ein Hartree-Fock-Artefakt darstellen könnte und die eigentliche Frequenz $\omega_{\mathbf{R}}$ im Spektrum lediglich überdeckt sein könnte. Ein Ziel künftiger Untersuchung sollte es sein, diese Frequenz sichtbar zu machen.

Die Untersuchungen in dieser Arbeit wurden für einen sehr speziellen Fall durchgeführt und bedürfen immer noch einer genaueren Fortführung. Dennoch besteht auf längere Sicht natürlich auch ein Interesse daran, die Breathing-Mode für höhere Dimensionen, andere Wechselwirkungen (z.B. Dipolwechselwirkung) und andere Spin-Eigenschaften zu untersuchen und schließlich ein allgemeines Ergebnis zu finden.

Literaturverzeichnis

- [Bal05] BALETTO, Francesca und FERRANDO, Riccardo: Structural properties of nanoclusters: Energetic, thermodynamic, and kinetic effects. *Rev. Mod. Phys.* (2005), Bd. 77(1): 371–423
- [Bal07] BALZER, K.: Nonequilibrium Green's function approach to artificial atoms (2007)
- [Bal10] BALZER, K.; BAUCH, S. und BONITZ, M.: Efficient grid-based method in nonequilibrium Green's function calculations: Application to model atoms and molecules. *Phys. Rev. A* (2010), Bd. 81(2): 022510
- [Bau09] BAUCH, S.; BALZER, K.; HENNING, C. und BONITZ, M.: Quantum breathing mode of trapped bosons and fermions at arbitrary coupling. *Phys. Rev. B* (2009), Bd. 80(5): 054515
- [Bau10a] BAUCH, S.; BALZER, K.; LUDWIG, P.; FILINOV, A. und BONITZ, M.: Introduction to Complex Plasmas, Bd. 59, Springer: Atomic, Optical and Plasma Physics (2010)
- [Bau10b] BAUCH, S.; HOCHSTUHL, D.; BALZER, K. und BONITZ, M: Quantum breathing mode of interacting particles in harmonic traps. *Journal of Physics: Conference Series* (2010), Bd. 220(1): 012013
 - [Blo05] BLOCH, Immanuel: Ultracold quantum gases in optical lattices. *Nature Phys* (2005), Bd. 1(23)
- [Dub96] DUBIN, Daniel H. E. und SCHIFFER, J. P.: Normal modes of cold confined one-component plasmas. *Phys. Rev. E* (1996), Bd. 53(5): 5249–5267
- [Fil01] FILINOV, A. V.; BONITZ, M. und LOZOVIK, Yu. E.: Wigner Crystallization in Mesoscopic 2D Electron Systems. *Phys. Rev. Lett.* (2001), Bd. 86(17): 3851–3854
- [Fil08] FILINOV, A.; BÖNING, J.; BONITZ, M. und LOZOVIK, Yu.: Controlling the spatial distribution of superfluidity in radially ordered Coulomb clusters. *Phys. Rev. B* (2008), Bd. 77(21): 214527
- [G01] GÖRLITZ, A.; VOGELS, J. M.; LEANHARDT, A. E.; RAMAN, C.; GUSTAVSON, T. L.;
 ABO-SHAEER, J. R.; CHIKKATUR, A. P.; GUPTA, S.; INOUYE, S.; ROSENBAND,
 T. und KETTERLE, W.: Realization of Bose-Einstein Condensates in Lower
 Dimensions. *Phys. Rev. Lett.* (2001), Bd. 87(13): 130402

- [Hal09] HALLER, Elmar; GUSTAVSSON, Mattias; MARK, Manfred J.; DANZL, Johann G.; HART, Russell; PUPILLO, Guido und NAGERL, Hanns-Christoph: Realization of an Excited, Strongly Correlated Quantum Gas Phase. *Science* (2009), Bd. 325(5945): 1224–1227
- [Hen09] HENNING, C.: Ground State and Excitation Properties of Yukawa Balls (2009)
- [Res00] RESCIGNO, T. N. und MCCURDY, C. W.: Numerical grid methods for quantummechanical scattering problems. *Phys. Rev. A* (2000), Bd. 62(3): 032706
- [Sch95] SCHWEIGERT, Vitaly A. und PEETERS, François M.: Spectral properties of classical two-dimensional clusters. *Phys. Rev. B* (1995), Bd. 51(12): 7700–7713
- [Sch07] SCHWABL, Franz: Quantenmechanik (QM I), Springer, 7 Aufl. (2007)

ANHANG A

Rückführung von $(ilde{\mathbf{R}}^2)_{ij}$ auf 1D-Matrixelemente

Es soll gezeigt werden, wie sich die Terme $(\tilde{\mathbf{R}}^2)_{ij}$ auf Matrixelemente des harmonischen Oszillators im eindimensionalen Fall zurückführen lassen. Für diese Berechnung wird ab sofort die Tilde bei $\tilde{\mathbf{R}}$ weggelassen, da sie keine Bedeutung mehr hat. In dem Ausdruck

$$\phi(\mathbf{R},t) = \sum_{n} c_n \phi_n(\mathbf{R}) e^{-iE_n t}$$
(A.1)

ist zu beachten, dass verschiedene Energien E_n den gleichen Wert haben können: Da das Problem mehrdimensional ist, setzt sich diese Gesamtenergie nämlich aus den Einzelbeiträgen für jede Dimension zusammen, die bei unterschiedlicher Aufteilung die gleiche Gesamtenergie ergeben können. Wenn d wieder die Dimension des Systems ist, seien die einzelnen Komponenten von \mathbf{R} durch

$$\mathbf{R} = (R_1, R_2, \dots, R_d) \tag{A.2}$$

gegeben. Da sich der mehrdimensionale Oszillator durch einen Separationsansatz lösen lässt, ist es zweckmäßig, die zeitabhängige Wellenfunktion nun gemäß

$$\phi(\mathbf{R},t) = \sum_{n_1} \sum_{n_2} \dots \sum_{n_d} c_{n_1 \dots n_d} \phi_{n_1}(R_1) \phi_{n_2}(R_2) \dots \phi_{n_d}(R_d) e^{-i(E_{n_1} + \dots + E_{n_d})t}$$
(A.3)

zu schreiben, wobei

$$E_{n_i} = n_i + \frac{1}{2} \quad \forall n_i \in \{0, 1, 2, \ldots\}$$
 (A.4)

die Energie
eigenwerte des entsprechenden eindimensionalen Problems für den i-ten Oszillator sind.

Mit dieser Darstellung gewinnt man den Verlauf des zeitlichen Erwartungswertes von

 \mathbf{R}^2 folgendermaßen:

$$\langle \mathbf{R}^2 \rangle(t) = \int d\mathbf{R} d\mathbf{x} \, \Psi^*(\mathbf{R}, \mathbf{x}, t) \mathbf{R}^2 \Psi(\mathbf{R}, \mathbf{x}, t)$$
(A.5)

$$= \sum_{n_1, \tilde{n}_1} \dots \sum_{n_d, \tilde{n}_d} c^*_{n_1 \dots n_d} c_{\tilde{n}_1 \dots \tilde{n}_d} e^{-i(E_{\tilde{n}_1} - E_{n_1} + \dots + E_{\tilde{n}_d} - E_{n_d})}$$
(A.6)

$$\times \int \mathrm{d}R_1 \dots \mathrm{d}R_2 \,\phi_{n_1}^*(R_1) \dots \phi_{n_d}^*(R_d) \left(R_1^2 + \dots + R_d^2\right) \phi_{\tilde{n}_1}(R_1) \dots \phi_{\tilde{n}_d}(R_d) \quad (A.7)$$

$$= \sum_{n_1, \tilde{n}_1} \dots \sum_{n_d, \tilde{n}_d} c^*_{n_1 \dots n_d} c_{\tilde{n}_1 \dots \tilde{n}_d} e^{-i(\tilde{n}_1 - n_1 + \dots + \tilde{n}_d - n_d)}$$
(A.8)

$$\times \sum_{i=1}^{d} \left[\left(\underbrace{\int \mathrm{d}R_i \,\phi_{n_i}^*(R_i) R_i^2 \phi_{\tilde{n}_i}(R_i)}_{(R_i^2)_{n_i,\tilde{n}_i}} \right) \delta_{n_1,\tilde{n}_1} \dots \delta_{n_{i-1},\tilde{n}_{i-1}} \delta_{n_{i+1},\tilde{n}_{i+1}} \dots \delta_{n_d,\tilde{n}_d} \right]. \quad (A.9)$$

Dabei sind $(R_i^2)_{n_i,\tilde{n}_i}$ Matrixelemente des zur Koordinate R_i gehörigen eindimensionalen harmonischen Oszillators. Wenn man den Ortsoperator mit Hilfe von Leiteroperatoren ausdrückt, erhält man leicht das aus Lehrbüchern bekannte Ergebnis, dass diese Matrixelemente nur für $n_i = \tilde{n}_i$ und $n_i = \tilde{n}_i \pm 2$ einen Beitrag liefern. Berücksichtigt man nun noch die zahlreichen Kronecker-Deltas, erkennt man, dass im Exponenten von $e^{-i(\tilde{n}_1 - n_1 + ... + \tilde{n}_d - n_d)}$ stets 0 oder ±2i steht. Die Schwingung erfolgt also mit der Frequenz 2.

anhang B

Beispiel für eine ini-Datei

#	
#	_CARLOTTA_INIT_FILE_"carlotta.ini"
#	
#	
#	17 7
#	<int:nr> 2 </int:nr>
	10
#	_ <int:nb>3_ </int:nb>
	10
#	_<1nt:nx>4_ 1000
#	1000
#	
#	_ <int:npart>5_ </int:npart>
	2
#	[_ <double:beta>6_ </double:beta>
#	100
π	1.0
#	_ <double:kappa>8_ </double:kappa>
	0.1
#	_ <double:d>_[distance]9_ </double:d>
#	1.0 $ (int:snin) [0: off 1: on] $ 10 $ $
π	0
#	
#	
#	<pre> _<int:mba>_[0: Hartree-Fock, 1: 2nd Born]11_ </int:mba></pre>
#	0
#	
#	<pre> _<int:snitmax>_<double:snitacc>12_ </double:snitacc></int:snitmax></pre>
	100000 1.0e-15
#	_ <double:alpha>13_ </double:alpha>
#	0.923456789
#	
#	<pre> _<int:tgridtype>_[0: (um,pm), 1: zm]14_ </int:tgridtype></pre>
	0
#	<pre> _<int:um>_<int:pm>_<double:zm>15_ </double:zm></int:pm></int:um></pre>
щ	
Ħ	<pre>10 1 0e-10</pre>
#	<double:dcutoff> 17 </double:dcutoff>
	1.0e-50

#	_ <double:dmu></double:dmu>	_18_
	0.0	
#		
#		
#	<pre> _<int:qprop>_[0: off, 1: on]_<int:qmix>_[0: off, 1: on]</int:qmix></int:qprop></pre>	_19_
#	<pre> _<double:propt>_<double:propdt>_<double:propdts></double:propdts></double:propdt></double:propt></pre>	_20_
#	<pre> _<double:e0>_<double:omega0>_<double:t0>_<double:dt0></double:dt0></double:t0></double:omega0></double:e0></pre>	_21_
	0.0 0.0 0.1 0.1	
#	<pre> _<double:propdeltat></double:propdeltat></pre>	_22_
	0.1	
#	<pre> _<int:qpropic>_[0: off, 1: on, 2: no correlations]</int:qpropic></pre>	_23_
#	-	
#		
#	<pre> _<int:qpara>_[0: off, 1: on]_<int:nodes></int:nodes></int:qpara></pre>	_24_
	0 10	
#		
#		