

Transparente Randbedingungen in der relativistischen Quantenmechanik

Bachelorarbeit

zur Erlangung des akademischen Grades
Bachelor of Science (Physik)

vorgelegt von

Oliver Friedrich

Universität Heidelberg
Fakultät für Physik und Astronomie

Heidelberg, den 11.07.2011

In meiner Arbeit habe ich untersucht, wie man numerische Randartefakte in der relativistischen Quantenmechanik unterdrücken kann. Für die nichtrelativistische Quantenmechanik sind hierfür bereits effektive Methoden entwickelt worden. Eine dieser Methoden habe ich nun auf die relativistische Quantenmechanik übertragen.

In my thesis I investigated how numerical artefacts can be suppressed in relativistic quantum mechanics. For non-relativistic quantum mechanics several effective methods have been developed for this purpose. In this thesis I am adapting one of these methods to the relativistic case.

Diese Bachelor Arbeit wurde von Oliver Friedrich unter der Anleitung von Herrn Professor Christoph Helmut Keitel mit der Unterstützung von Herrn Doktor Heiko Bauke am Max-Planck-Institut für Kernphysik in Heidelberg ausgearbeitet.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	3
2	Quantenmechanik und Numerische Physik	5
2.1	Die Schrödinger-Gleichung	5
2.2	Die Dirac-Gleichung	6
2.3	Die Klein-Gordon-Gleichung	9
2.4	Zeitentwicklung und Crank-Nicolson-Verfahren	11
3	Numerische Randartefakte – Umgang mit Reflexionen am Rand eines numerischen Gitters	14
3.1	Multiplikation mit Dämpfungsfunktionen	15
3.2	Absorbierende komplexwertige Potentiale	15
3.3	Exakte Randbedingungen	17
4	Vorbereitungen für die Simulation	20
4.1	Ein absorbierendes Potential für die Schrödinger-Gleichung . .	20
4.2	Ein absorbierendes Potential für die Klein-Gordon-Gleichung .	25
4.3	Ein absorbierendes Potential für die Dirac-Gleichung	33
5	Wellenpakete für die relativistische Quantenmechanik	36
5.1	Ein Wellenpaket für die Klein-Gordon-Gleichung	36
5.2	Ein Wellenpaket für die Dirac Gleichung	44
6	Simulationen in der Bachelorarbeit - Effektivität des imaginären Randpotentials	46
6.1	Absorbtiionswirkung in Schrödinger-, Klein-Gordon- und Dirac-Gleichung im nichtrelativistischen Grenzfall	46
6.2	Absorbtiion in Dirac- und Klein-Gordon-Gleichung für relativistische Impulse	56
6.3	Ergänzung zu Abschnitt 4.2	65
7	Zusammenfassung und Ausblick	67

A	Das atomare Einheitensystem	73
B	Eigenschaften der Dirac'schen Delta-Distribution	75
C	Herleitung der oberen Potentialabschätzung	76
D	Baker-Campbell-Hausdorff-Formel / Zassenhaus-Formel	80

Kapitel 1

Einleitung

Diese Arbeit beschäftigt sich mit der Anwendung absorbierender Randbedingungen bei numerischen Simulationen in der relativistischen Quantenmechanik. Will man quantenmechanische Prozesse auf dem Computer simulieren, so muss die Dynamik stets auf einen endlichen Raumbereich eingeschränkt werden. Am Rand dieses Bereichs kann es dann zu numerischen Artefakten kommen, zum Beispiel zur unphysikalischen Reflektion von Wellen zurück in den vom Computer berechneten Bereich. Um ungewollte Randeffekte bei der Berechnung von Wellengleichungen zu unterdrücken, wurden bereits effektive Methoden entwickelt. Diese beschränken sich jedoch in der Quantenmechanik weitgehend auf die nichtrelativistische Schrödinger-Gleichung. In meiner Bachelorarbeit habe ich daher versucht, eine Form transparenter Randbedingungen für die Schrödinger-Gleichung auf die relativistische Quantenmechanik zu übertragen. Die analytischen Ergebnisse dieser Übertragung wurden im Anschluss durch numerische Simulationen getestet. Dazu habe ich Computerprogramme zur Lösung der zeitabhängigen Schrödinger-, Dirac- und Klein-Gordon-Gleichung geschrieben und dabei transparente Randbedingungen verwendet.

Meine Bachelorarbeit ist wie folgt aufgebaut. In Kapitel 2 werden die Bewegungsgleichungen der nichtrelativistischen und relativistischen Quantenmechanik, also die Schrödinger-, die Dirac- und die Klein-Gordon-Gleichung, kurz vorgestellt. Außerdem wird beschrieben, wie ich diese numerisch gelöst habe. Das darauf folgende Kapitel 3 beschreibt verschiedene Methoden, mit denen numerische Randeffekte in der nichtrelativistischen Quantenmechanik behandelt werden. Im ersten Abschnitt des Kapitels 4 werden insbesondere die Ergebnisse eines Artikels von D. Neuhauser und M. Bauer [1] zur Konstruktion eines imaginären, absorbierenden Potentials in der Schrödinger-Gleichung dargestellt. Anschließend beschreibe ich, auf welche Weise ich diese Methode auf die relativistische Quantenmechanik übertragen

habe. In Kapitel 5 soll eine spezielle Form des Wellenpakets für die Dirac- und die Klein-Gordon-Gleichung hergeleitet werden. Diese Wellenpakete habe ich später als Anfangswellenfunktionen in den Computersimulationen benutzt. Die in meiner Bachelorarbeit durchgeführten Simulationen und deren Ergebnisse werden in Kapitel 6 besprochen. Zunächst werden die Programme, die ich zum Lösen von Schrödinger-, Klein-Gordon- und Dirac-Gleichung im Rahmen der Bachelorarbeit geschrieben habe, auf ihre Konsistenz im nicht-relativistischen Grenzfall überprüft. Außerdem habe ich überprüft, ob die in Kapitel 4 hergeleiteten Maße eines absorbierenden Potentials im nicht-relativistischen Grenzfall gleichermaßen in allen drei Gleichungen wirken. Im zweiten Teil des Kapitels 6 wird dann die Absorbtionswirkung des hergeleiteten Potentials im relativistischen Bereich für die Klein-Gordon- und die Dirac-Gleichung untersucht. Daran schließt sich in Kapitel 7 eine Zusammenfassung der Ergebnisse dieser Arbeit an. Mit einigen Vorschlägen, wie man in der weiteren Untersuchung komplexer, absorbierender Potentiale für die relativistische Quantenmechanik fortfahren kann, schließe ich meine Arbeit ab.

Kapitel 2

Quantenmechanik und Numerische Physik

2.1 Die Schrödinger-Gleichung

Die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = \hat{H} \psi(x, t) \quad (2.1)$$

mit dem Hamiltonoperator

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(x) \quad (2.2)$$

beschreibt das Verhalten von Wellenfunktionen in der nichtrelativistischen Quantenmechanik. In den meisten Fällen ist dabei das Potential $V(x)$ – und somit auch der Hamiltonoperator \hat{H} – nicht von der Zeit abhängig.

Die Lösungen $\psi(x, t)$ der Schrödinger-Gleichung beschreiben die Wellenfunktion eines Teilchens der Masse m , das sich im Potential $V(x)$ bewegt. Mithilfe der Wellenfunktion lassen sich Aussagen über Erwartungswerte von Observablen des Teilchens treffen, so zum Beispiel über die Wahrscheinlichkeitsdichte für einen Aufenthalts am Ort x

$$\rho(x, t) = \frac{\psi(x, t)^\dagger \cdot \psi(x, t)}{\langle \psi | \psi \rangle}, \quad (2.3)$$

der Erwartungswert einer Impulsmessung

$$\langle \hat{P} \rangle (t) = \frac{\int \psi(x, t)^\dagger \cdot \hat{P} \psi(x, t) dx}{\langle \psi | \psi \rangle}, \quad (2.4)$$

und den Erwartungswert einer Ortsmessung

$$\langle \hat{X} \rangle (t) = \frac{\int \psi(x, t)^\dagger \cdot \hat{X} \psi(x, t) dx}{\langle \psi | \psi \rangle}. \quad (2.5)$$

Der Impulsoperator \hat{P} , der Ortsoperator \hat{X} und die Norm der Wellenfunktion $\langle \psi | \psi \rangle$ sind dabei gegeben durch

$$\langle \psi | \psi \rangle = \int \hat{\psi}(x, t)^\dagger \cdot \psi(x, t), \quad (2.6)$$

$$\hat{P} \psi(x, t) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi(x, t), \quad (2.7)$$

$$\hat{X} \psi(x, t) = x \cdot \psi(x, t) \quad (2.8)$$

und $\psi(x, t)^\dagger$ ist die komplex konjugierte Wellenfunktion. Man sieht in (2.3) das $\rho(x, t)$ stets positiv ist. Das ist notwendig, wenn ρ als Wahrscheinlichkeitsdichte interpretiert werden soll. Eine weitere mit der Dichte ρ eng verknüpfte Größe ist die Wahrscheinlichkeitsstromdichte

$$j(x, t) = \frac{i\hbar}{2m} (\psi(x, t) \frac{\partial}{\partial x} \psi(x, t)^\dagger - \psi(x, t)^\dagger \frac{\partial}{\partial x} \psi(x, t)). \quad (2.9)$$

Mit der Schrödinger-Gleichung lässt sich zeigen, dass diese Stromdichte zusammen mit der Wahrscheinlichkeitsdichte die Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(x, t) + \frac{\partial}{\partial x} j(x, t) = 0 \quad (2.10)$$

erfüllt. Das rechtfertigt auch die Interpretation von j als Wahrscheinlichkeitsstromdichte.

2.2 Die Dirac-Gleichung

Es soll an dieser Stelle die eindimensionale Dirac-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \hat{H} \psi(x, t) \quad (2.11)$$

betrachtet werden mit dem Hamiltonoperator

$$\hat{H} = -i\hbar c \cdot \sigma_1 \frac{\partial}{\partial x} + mc^2 \cdot \sigma_3 + V(x) \quad (2.12)$$

und den Pauli-Matrizen

$$\begin{aligned}\sigma_1 &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ \sigma_3 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.\end{aligned}\tag{2.13}$$

Die Dirac-Gleichung ist forminvariant unter Lorentztransformationen und gehört daher zu den Gleichungen der relativistischen Quantenmechanik. Ihre Lösungen sind im eindimensionalen Fall zweikomponentige, sogenannte Spinore:

$$\psi(x, t) = \begin{pmatrix} \chi(x, t) \\ \phi(x, t) \end{pmatrix}.\tag{2.14}$$

Der Spinor beschreibt relativistische Fermionen der Masse m im Potential $V(x)$. In einer Dimension tritt allerdings der Spin der Fermionen nicht zum Vorschein. Für zwei Spinore ψ_1 und ψ_2 führt man folgende Notation ein:

$$\begin{aligned}\psi_1^\dagger(x, t) \cdot \psi_2(x, t) &= \chi_1(x, t)^\dagger \cdot \chi_2(x, t) + \phi_1(x, t)^\dagger \cdot \phi_2(x, t) \\ \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle (t) &= \int \psi_1^\dagger(x, t) \cdot \psi_2(x, t) dx.\end{aligned}\tag{2.15}$$

Erwartungswerte für Observable eines Teilchens können mithilfe des Spinors berechnet werden, so zum Beispiel die Wahrscheinlichkeitsdichte für einen Aufenthalt am Ort x

$$\rho(x, t) = \psi^\dagger(x, t) \cdot \psi(x, t),\tag{2.16}$$

der Erwartungswert einer Impulsmessung

$$\langle \hat{P} \rangle (t) = \frac{\langle \psi | \hat{P} \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle},\tag{2.17}$$

und der Erwartungswert einer Ortsmessung

$$\langle \hat{X} \rangle (t) = \frac{\langle \psi | \hat{X} \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle},\tag{2.18}$$

wobei Impuls- und Ortsoperator dieselben sind, wie in der Schrödinger-Gleichung.

Insbesondere ist die Dichte $\rho(x, t)$ wieder stets positiv, was Voraussetzung dafür ist, dass sie als Wahrscheinlichkeitsdichte interpretiert werden kann. Auch aus der Dirac-Gleichung lässt sich dann eine Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(x, t) + \frac{\partial}{\partial x} j(x, t) = 0\tag{2.19}$$

mit der Wahrscheinlichkeitsstromdichte

$$j(x, t) = c\psi(x, t)^\dagger \sigma_1 \psi(x, t) \quad (2.20)$$

herleiten.

Die Lösungen der freien Dirac-Gleichung, also bei verschwindendem Potential, sind ebene Wellen. Es zeigt sich aber, dass es zwei Arten von ebenen Wellen gibt:

$$\psi_+(x, t) = \sqrt{\frac{E_p + mc^2}{2E_p}} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ pc \\ E_p + mc^2 \end{pmatrix} \cdot e^{i\frac{px - E_p t}{\hbar}} \quad (2.21)$$

und

$$\psi_-(x, t) = \sqrt{\frac{E_p + mc^2}{2E_p}} \cdot \begin{pmatrix} -pc \\ E_p + mc^2 \\ 1 \end{pmatrix} \cdot e^{i\frac{px + E_p t}{\hbar}}. \quad (2.22)$$

Dabei ist $E_p = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4}$ die relativistische Gesamtenergie eines Teilchens mit der Masse m und dem Impuls p . Offenbar haben beide Lösungen den selben Impuls p , d.h. sie sind Eigenfunktionen des Impulsoperators mit dem Eigenwert p

$$\begin{aligned} \hat{P}\psi_+(x, t) &= p\psi_+(x, t) \\ \hat{P}\psi_-(x, t) &= p\psi_-(x, t). \end{aligned} \quad (2.23)$$

Beide ebenen Wellen sind auch Eigenfunktionen des Energieoperators $\hat{E} = i\hbar\partial_t$. Für diesen haben ihre Eigenwerte jedoch entgegengesetzte Vorzeichen

$$\begin{aligned} \hat{E}\psi_+(x, t) &= +E_p\psi_+(x, t) \\ \hat{E}\psi_-(x, t) &= -E_p\psi_-(x, t). \end{aligned} \quad (2.24)$$

Man spricht daher bei Lösungen der Form (2.22) von Lösungen negativer Energie. Sie treten in der Dirac-Gleichung wie auch in der Klein-Gordon-Gleichung auf und werden als Antiteilchen interpretiert. Es zeigt sich, dass Teilchen und Antiteilchen mit dem selben Impuls dennoch eine entgegengesetzte Phasengeschwindigkeit haben, sich also in entgegengesetzte Richtungen bewegen [2]:

$$v_+ = \frac{p}{E_p} = -\frac{p}{-E_p} = -v_-. \quad (2.25)$$

2.3 Die Klein-Gordon-Gleichung

Die eindimensionale Klein-Gordon-Gleichung

$$(i\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} - V(x))^2 \psi(x, t) = -\hbar^2 c^2 \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} + m^2 c^4 \psi(x, t) \quad (2.26)$$

ist ebenfalls invariant unter Lorentztransformationen. Sie geht direkt aus der relativistischen Energie-Impuls-Beziehung

$$(E_p - V(x))^2 = pc^2 + m^2 c^4 \quad (2.27)$$

für ein Teilchen mit der Masse m und dem Impuls p hervor, indem man dem Korrespondenzprinzip entsprechend die Energie E_p durch

$$E_p \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad (2.28)$$

und den Impuls p durch

$$p \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad (2.29)$$

ersetzt. Es sollen im Weiteren kurz jene Aspekte der Klein-Gordon-Gleichung erläutert werden, die ich in dieser Arbeit verwende. Eine detaillierte Untersuchung der Klein-Gordon-Gleichung ist zum Beispiel in [3] zu finden.

Auch in der Klein-Gordon-Gleichung kann man eine Kontinuitätsgleichung der Form

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(x, t) + \frac{\partial}{\partial x} j(x, t) = 0 \quad (2.30)$$

herleiten, wobei der Einfachheit halber das Potential $V(x)$ vernachlässigt wurde. Die Stromdichte j ist wie in der Schrödinger-Gleichung durch

$$j(x, t) = \frac{i\hbar}{2m} (\psi(x, t) \frac{\partial}{\partial x} \psi(x, t)^\dagger - \psi(x, t)^\dagger \frac{\partial}{\partial x} \psi(x, t)) \quad (2.31)$$

gegeben. Die Dichte $\rho(x, t)$ hingegen lautet

$$\rho(x, t) = \frac{i\hbar}{2m} (\psi(x, t)^\dagger \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) - \psi(x, t) \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t)^\dagger). \quad (2.32)$$

Das stellt einen wesentlichen Unterschied zur Schrödinger-Gleichung dar, denn die Dichte (2.32) ist nicht mehr positiv definit. Sie kann daher insbesondere keine Wahrscheinlichkeitsdichte mehr darstellen. Stattdessen wird ρ als Ladungsdichte interpretiert.

Eine alternative Form der Klein-Gordon-Gleichung lautet

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \chi(x, t) = \hat{H} \chi(x, t) \quad (2.33)$$

mit dem Hamiltonoperator

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} (\sigma_3 + i\sigma_2) + mc^2 \sigma_3 + V(x) \quad (2.34)$$

und den Pauli-Matrizen

$$\begin{aligned} \sigma_2 &= \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix} \\ \sigma_3 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.35)$$

Die Lösungen von (2.34) haben dann wieder zwei Komponenten:

$$\chi(x, t) = \begin{pmatrix} \chi_1(x, t) \\ \chi_2(x, t) \end{pmatrix}. \quad (2.36)$$

Diese Komponenten sind mit der Wellenfunktion aus (2.26) durch

$$\chi_1(x, t) = \frac{1}{2} \left(\psi(x, t) + \frac{i\hbar}{mc^2} \partial \partial t \psi(x, t) \right) \quad (2.37)$$

und

$$\chi_2(x, t) = \frac{1}{2} \left(\psi(x, t) - \frac{i\hbar}{mc^2} \partial \partial t \psi(x, t) \right) \quad (2.38)$$

verknüpft. Die Ladungsdichte erhält dann die einfache Form

$$\rho(x, t) = \hat{\chi}_1(x, t) \chi_1(x, t) - \hat{\chi}_2(x, t) \chi_2(x, t). \quad (2.39)$$

Die Lösungen der Klein-Gordon-Gleichung ohne Potential sind erneut ebene Wellen. Wie in der Dirac-Gleichung gibt es zwei Arten von ebenen Wellen:

$$\psi_+(x, t) = \frac{1}{2\sqrt{E_p \cdot mc^2}} \cdot \begin{pmatrix} mc^2 + E_p \\ mc^2 - E_p \end{pmatrix} \cdot e^{-i \frac{E_p t - px}{\hbar}} \quad (2.40)$$

und

$$\psi_-(x, t) = \frac{1}{2\sqrt{E_p \cdot mc^2}} \cdot \begin{pmatrix} mc^2 - E_p \\ mc^2 + E_p \end{pmatrix} \cdot e^{i \frac{E_p t + px}{\hbar}}. \quad (2.41)$$

Wellen der Form $\psi_-(x, t)$ haben wieder negative Energieeigenwerte und werden als Antiteilchen zu $\psi_+(x, t)$ mit entgegengesetzter Ladung interpretiert. In der Klein-Gordon-Gleichung korrespondiert dies dazu, dass die aus $\psi_-(x, t)$ resultierende Ladungsdichte stets negativ ist, während die aus $\psi_+(x, t)$ resultierende Ladungsdichte stets positiv ist.

2.4 Zeitentwicklung und Crank-Nicolson-Verfahren

Alle in dieser Arbeit betrachteten quantenmechanischen Gleichungen lassen sich in der Form

$$i\hbar\psi(x, t) = \hat{H}\psi(x, t) \quad (2.42)$$

schreiben, wobei \hat{H} der Hamiltonoperator des zu betrachtenden Systems ist. Gleichung (2.42) hat die formale Lösung

$$\psi(x, t) = e^{-i\frac{\hat{H}t}{\hbar}} \cdot \psi_0(x) \quad (2.43)$$

mit einer Anfangswellenfunktion $\psi_0(x)$, wobei Exponentialfunktion eines Operators als unendliche Reihe definiert ist:

$$e^{-i\frac{\hat{H}t}{\hbar}} = \sum_{k=0}^{\infty} \left(-i\frac{\hat{H}t}{\hbar}\right)^k \frac{1}{k!} =: \hat{U}(t). \quad (2.44)$$

Man nennt $\hat{U}(t)$ auch den Zeitentwicklungsoperator des Systems. Will man mit Gleichung (2.43) bei einer gegebenen Anfangsfunktion $\psi_0(x)$ die Wellenfunktion zu einem Zeitpunkt t numerisch berechnen, so muss man zunächst eine geeignete Näherung für den durch eine unendliche Reihe definierten Zeitentwicklungsoperator finden. Soll aus $\psi_0(x)$ die Wellenfunktion zu einem Zeitpunkt Δt kurz nach dem Start der Zeitentwicklung berechnet werden, kann man sich zum Beispiel auf die ersten beiden Summanden in (2.44) beschränken. Gleichung (2.43) wird dann zu

$$\psi(x, \Delta t) = \left(1 - i\frac{\hat{H}\Delta t}{\hbar}\right) \cdot \psi_0(x). \quad (2.45)$$

Um (2.45) am Computer zu lösen, muss als nächstes der Raumbereich, auf dem die Lösung gesucht wird, diskretisiert werden. Angenommen man sucht die Lösung auf einem Intervall (x_0, x_N) . Dann kann man dieses Intervall in N gleich große Teilintervalle aufteilen und sich nur noch für den Wert der Wellenfunktion an den Eckpunkten $\{x_0, \dots, x_N\}$ dieser Intervalle interessieren. Aus der Startfunktion $\psi_0(x)$ wird dann ein Vektor aus Anfangswerten

$$\psi_0(x) \rightarrow \vec{\psi}_0 = \begin{pmatrix} \psi_0(x_0) \\ \vdots \\ \psi_0(x_N) \end{pmatrix}, \quad (2.46)$$

und dasselbe geschieht mit der Wellenfunktion ψ zur Zeit Δt

$$\psi(x, \Delta t) \rightarrow \vec{\psi}(\Delta t) = \begin{pmatrix} \psi(x_0, \Delta t) \\ \vdots \\ \psi(x_N, \Delta t) \end{pmatrix}. \quad (2.47)$$

Nun fährt man damit fort, den Hamiltonoperator zu diskretisieren. Angenommen man befindet sich in der Schrödinger-Theorie für ein Teilchen der Masse m in einem Potential $V(x)$. Der Hamiltonoperator lautet dann:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(x). \quad (2.48)$$

Die darin auftretende zweite Ableitung Δ kann am Punkt x_i näherungsweise durch finite Differenzen ersetzt werden [4], zum Beispiel durch

$$\Delta\psi_0(x_i) = \frac{\psi_0(x_i + \Delta x) - 2\psi_0(x_i) + \psi_0(x_i - \Delta x)}{\Delta x^2} + \mathcal{O}(\Delta x^4). \quad (2.49)$$

Die rechte Seite von (2.45) wird dann zur Multiplikation des Vektors $\vec{\psi}_0$ mit einer Matrix $(1 - i\frac{\hat{H}\Delta t}{\hbar})$,

$$\begin{aligned} \vec{\psi}_i(\Delta t) &= \left((1 - i\frac{\hat{H}\Delta t}{\hbar}) \cdot \vec{\psi}_0 \right)_i \\ &= -\frac{i\hbar\Delta t}{2m\Delta x^2}(\vec{\psi}_{0,i+1} + \vec{\psi}_{0,i-1}) \\ &\quad + (1 - \frac{iV(x_i)\Delta t}{\hbar} + \frac{i\hbar\Delta t}{m\Delta x^2})\vec{\psi}_{0,i}. \end{aligned} \quad (2.50)$$

Auf diese Weise lassen sich also die Einträge von $\vec{\psi}(\Delta t)$ direkt aus denen von $\vec{\psi}_0$ berechnen. Es zeigt sich jedoch, dass man so eine vergleichsweise schlechte Näherung der ursprünglichen quantenmechanischen Gleichung erhält. Insbesondere ist die Norm der Wellenfunktion durch diese Methode nicht erhalten [4]. Ich habe daher in dieser Arbeit eine andere Methode zur Ausführung der Zeitentwicklung gewählt. Hierzu betrachtet man einen Zeitpunkt zwischen $t = 0$ und $t = \Delta t$, zum Beispiel $t = \Delta t/2$. Es gilt dann mit dem Zeitentwicklungsoperator von oben

$$\begin{aligned} \psi(x, \Delta t/2) &= \hat{U}(\Delta t/2)\psi_0(x) \\ \psi(x, \Delta t) &= \hat{U}(\Delta t/2)\psi(x, \Delta t/2) \end{aligned} \quad (2.51)$$

beziehungsweise unter Ausnutzung der Eigenschaften der Exponentialfunktion

$$\begin{aligned}\psi(x, \Delta t/2) &= \hat{U}(\Delta t/2)\psi_0(x) \\ \psi(x, \Delta t/2) &= \hat{U}(-\Delta t/2)\psi(x, \Delta t).\end{aligned}\tag{2.52}$$

Approximiert man wieder den Zeitentwicklungsoperator \hat{U} durch die ersten beiden Summanden aus (2.44), so kann man aus (2.52) die Gleichung

$$\left(1 + i\frac{\hat{H}\Delta t}{2\hbar}\right) \cdot \psi(x, \Delta t) = \left(1 - i\frac{\hat{H}\Delta t}{2\hbar}\right) \cdot \psi_0(x)\tag{2.53}$$

erhalten. Diskretisiert man nun erneut das Intervall (x_0, x_N) sowie den Hamiltonoperator, so wird (2.53) zu einem linearen Gleichungssystem, mit dem die Werte der Wellenfunktion zum Zeitpunkt Δt berechnet werden können.

Auf diese Weise kann eine viel bessere Näherung für $\psi(x, \Delta t)$ gewonnen werden und insbesondere bleibt die Norm der Wellenfunktion auf diese Weise zu jedem Zeitpunkt erhalten (vgl. [4]). Man nennt diese Methode das Crank-Nicolson-Verfahren. In meiner Bachelorarbeit habe ich ausschließlich das Crank-Nicolson-Verfahren zum Lösen von Schrödinger, Dirac und Klein-Gordon Gleichung verwendet.

Kapitel 3

Numerische Randartefakte – Umgang mit Reflexionen am Rand eines numerischen Gitters

Bei der numerischen Lösung von Wellengleichungen muss der Raumbereich, in dem die jeweilige Gleichung gelöst werden soll, diskretisiert werden. Das kann zum Beispiel geschehen, indem der Raum durch ein diskretes Gitter approximiert wird. Insbesondere muss dabei der Bereich, auf dem die Gleichung gelöst wird, endlich gewählt werden, da sonst auch das Gitter unendlich viele Punkte enthält.

Löst man nun eine Wellengleichung auf dem Gitter (vgl. Abs. 2.4), so kommt es zu unerwünschten numerischen Artefakten am Gitterrand [5, 6]. Um dies zu veranschaulichen, kann man eine Wellenfunktion $\psi(x)$ auf einem eindimensionalen, äquidistanten Gitter betrachten. Die Approximation der zweiten Ableitung von ψ am Punkt x_i des Gitters mit finiten Differenzen kann z.B. durch

$$\psi''(x_i) = \frac{\psi(x_{i+1}) - 2\psi(x_i) + \psi(x_{i-1}))}{\Delta x^2} + \mathcal{O}(\Delta x^4) \quad (3.1)$$

geschehen [4]. Dabei ist Δx der Abstand benachbarter Punkte im Gitter und x_{i+1} sowie x_{i-1} sind die benachbarten Punkte von x_i . Falls $x_i = x_0$ der linke Randpunkt des Gitters ist, dann gibt es im Gitter aber keinen Punkt $x_{i-1} = x_{-1}$. Taucht also in der zu lösenden Wellengleichung die zweite Ableitung von $\psi(x)$ auf, steht man vor dem Problem, wie der entsprechende Differenzenquotient (3.1) am Randpunkt x_0 gebildet werden soll. Ein Weg sind sogenannte periodische Randbedingungen [6]. Diese bestehen darin, in

(3.1) statt des Funktionswertes $\psi(x_{-1})$ den Wert $\psi(x_a)$ einzusetzen, wobei x_a der rechte Rand des Gitters sei. Das verknüpft den linken Rand des Gitter mit dem rechten Rand. Erreicht also die Wellenfunktion $\psi(x)$ den linken Rand des Gitters, dann erfolgt eine Transmission der Welle, sodass diese am rechten Rand wieder in das Gitter eintritt.

Eine andere Möglichkeit ist es, in (3.1) den Funktionswert $\psi(x_{-1})$ wegzulassen zu lassen. Dies ist äquivalent zu der Forderung, dass die Wellenfunktion links vom Gitter immer den Wert Null annimmt bzw. dass sich links vom Gitter eine unendlich hohe Potentialbarriere befindet. Das führt wiederum dazu, dass die Welle am Rand des Gitters reflektiert wird.

Die so entstehende Transmission bzw. Reflexion der Welle am Gitterrand ist unphysikalisch und resultiert allein aus der numerischen Lösungsmethode. Man strebt daher danach, solche Effekte zu unterbinden.

3.1 Multiplikation mit Dämpfungsfunktionen

Bei der numerischen Lösung quantenmechanischer Gleichungen werden in der Regel aus den Funktionswerten $\psi(x_i, t)$ der Wellenfunktion zum Zeitpunkt t die Funktionswerte $\psi(x_i, t + \Delta t)$ zum späteren Zeitpunkt $t + \Delta t$ berechnet.

Man kann nun die oben erwähnten Artefakte unterbinden, in dem man nach jedem Zeitschritt Δt die Wellenfunktion mit einer Dämpfungsfunktion $f(x)$ multipliziert. Betrachtet man wieder den linken Rand des Gitters, so hat die Funktion f am Randpunkt x_0 den Wert 0 und steigt dann innerhalb eines bestimmten Randbereiches (x_0, x_r) auf den Wert $f(x_r) = 1$ an [7]. Tritt die Wellenfunktion in diesen Randbereich ein, wird sie idealer Weise so schnell abgedämpft, dass keine Reflektionen am Rand mehr auftreten. Der Anstieg der Dämpfungsfunktion darf jedoch nicht zu steil sein, da sonst innerhalb des Dämpfungsbereichs neue Reflektionen entstehen [5]. Eine nähere Untersuchung dieses Ansatzes führt auf die Einführung imaginärer, absorbierender Potentiale [5].

3.2 Absorbierende komplexwertige Potentiale

Um zu verstehen, inwiefern imaginäre Potentiale in Wellengleichungen absorbierend wirken und warum sie mit den zuvor erwähnten Dämpfungsfunktionen verwandt sind, kann man zum Beispiel die Schrödinger-Gleichung für ein Teil-

chen der Masse m mit einem imaginären Potentialterm betrachten:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t) + iV(x)\psi(x, t) \\ &= \left(\frac{1}{2m} \hat{P}^2 + iV(x) \right) \psi(x, t). \end{aligned} \quad (3.2)$$

Gleichung (3.2) wird gelöst durch

$$\psi(x, t) = e^{-\frac{i\Delta t}{\hbar} \left(\frac{\hat{P}^2}{2m} + iV(x) \right)} \psi(x, t_0). \quad (3.3)$$

Für sehr kleine Δt kann man den Exponenten in (3.3) aufteilen (siehe Anhang D zur Baker-Campbell-Hausdorff-Formel). Man erhält dann

$$\psi(x, t) = e^{\frac{\Delta t}{\hbar} V(x)} e^{-\frac{i\Delta t}{2m\hbar} \hat{P}^2} \psi(x, t_0) + \mathcal{O}(\Delta t^2). \quad (3.4)$$

Man erkennt nun, dass der erste Faktor auf der rechten Seite von (3.4) eine dämpfende Wirkung auf die Wellenfunktion $\psi(x, t)$ hat, wenn $V(x)$ negative Werte annimmt. Außerdem zeigt sich an (3.4) auch die Verwandtschaft imaginärer Potentiale zu den Dämpfungsfunktionen [5], da der erste Faktor auf der rechten Seite auch aufgefasst werden kann als Multiplikation der Wellenfunktion mit einer Dämpfungsfunktion nach jedem Zeitschritt.

Imaginäre Potentiale werden häufig verwendet, um Randartefakte bei der numerischen Lösung von Wellengleichungen zu unterdrücken. In [5] haben R. Kosloff und D. Kosloff gezeigt, wie die Multiplikation mit dämpfenden Funktionen auf den Einsatz von imaginären Potentialen verallgemeinert werden kann, um so die Absorbtiionswirkung genauer zu quantifizieren. Exemplarisch haben sie imaginäre Randpotentiale zur Lösung der zweidimensionalen Schrödinger-Gleichung und der akustischen Wellengleichung implementiert. Baer und Neuhauser zeigen in [1], dass im Gegensatz zu der von R. und D. Kosloff verwendeten Potentialform auch ein zum Rand linear ansteigendes imaginäres Potential in der Schrödinger-Gleichung gute Absorbtiionseigenschaften aufweist. In [6] zeigen Macías, Muga und Brouard, dass ein absorbierendes Randpotential nicht ausschließlich imaginär sein muss. Sie vergleichen unterschiedliche, von anderen Gruppen für die Schrödinger-Gleichung vorgeschlagene Potentialformen und optimieren deren Parameter zu gemischt komplexen Werten. Zwar hat nur ein imaginäres Potential die oben beschriebene dämpfende Wirkung, da insbesondere nur ein imaginäres Potential die Unitarität des Zeitentwicklungsoperators zerstört, doch die Absorbtiionsfähigkeit des Randpotentials hängt auch davon ab, wie stark eine eintreffende Welle

bereits am Potential selbst reflektiert wird [5, 6, 1, 8]. Diese Reflektion kann unter Umständen verringert werden, wenn man am Rand des numerischen Gitters imaginäre und reelle Potentiale kombiniert. Das reelle Potential ist dabei meist negativ [6, 8], um den Eintritt der Welle in den Randbereich zu erleichtern. Komplexe Randpotentiale werden für die Schrödinger-Gleichung mittlerweile bevorzugt, da sie bessere Absorbtionseigenschaften aufweisen [6, 8].

In Abb. (5.2) sind schematisch die von [1, 9, 10, 11, 12, 5] verwendeten sowie zwei weitere in [6] untersuchte Potentiale am rechten Rand eines Intervalls dargestellt. Die Potentiale waren in ihrer ursprünglichen Verwendung rein imaginär und wurden erst in [6] mit reellen Anteilen kombiniert. Die Definition der Potentiale ist in (3.5) zu sehen. Bei a_i und b_i handelt es sich jeweils um reelle Konstanten.

$$\begin{aligned}
\operatorname{Im}(V_1(x)) &= -a_1 \cdot x \\
\operatorname{Im}(V_2(x)) &= -\frac{a_2}{\cosh^2(b_2(1-x))} \\
\operatorname{Im}(V_3(x)) &= -a_3 \frac{e^{-b_3(1-x)}}{1-x} \\
\operatorname{Im}(V_4(x)) &= -a_4 \cdot e^{-\frac{b_4}{x}} \\
\operatorname{Im}(V_5(x)) &= -a_5 \cdot x^{b_5} \\
\operatorname{Im}(V_6(x)) &= -\frac{a_6}{1+e^{-b_6 \cdot x}} \tag{3.5}
\end{aligned}$$

In der relativistischen Quantenmechanik finden komplexe Potential bisher keine Anwendung als absorbierende Randpotentiale.

3.3 Exakte Randbedingungen

Eine weitere Methode, Reflektionen am Rand des Berechnungsgebiets zu vermeiden, sind sogenannte exakte Randbedingungen. Auch diese Methode wird bei der numerischen Lösung der Schrödinger-Gleichung vielfach angewandt [13, 14]. Denkt man wieder an ein diskretisiertes Intervall mit den

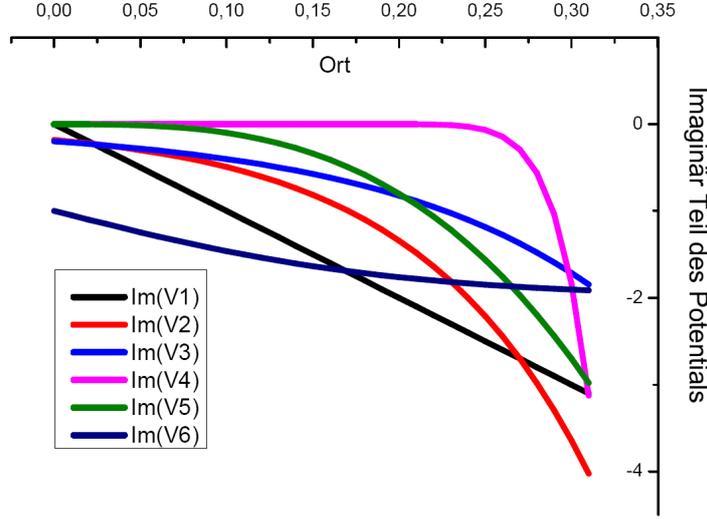


Abbildung 3.1: Imaginärteil verschiedener absorbierender Randpotentiale. V_1 verwendet in [1] und [9], V_2 verwendet in [5], V_3 und V_6 untersucht in [6], V_4 verwendet in [10] und V_5 verwendet in [11]. Die Definition der Potentiale sind in (3.5) gegeben.

Punkten x_0, \dots, x_N , so wird mithilfe der transparenten Randbedingungen der exakte Wert der Wellenfunktion $\psi(x, t)$ an den Stellen x_0 und x_N zur Zeit t rekonstruiert. Betrachtet man zum Beispiel die Schrödinger-Gleichung ohne Potential im Intervall (x_l, x_r) ,

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(x, t), \quad (3.6)$$

so ist nach [13] die exakte Randbedingung am linken Rand x_l gegeben durch

$$\psi(x_l, t) = -\frac{e^{i\pi/4}}{\sqrt{\pi}} \int_0^t \frac{\partial_n \psi(x_l, s)}{\sqrt{t-s}} ds, \quad (3.7)$$

wobei mit ∂_n die aus dem Intervall heraus gerichtete Ableitung gemeint ist. Die Herleitung von (3.7) ist zum Beispiel in [15] gegeben. Um das Integral in (3.7) auszuwerten, benötigt man die gesamte Information der Wellenfunktion am Ort x_l vom Start der Zeitentwicklung bis zum Zeitpunkt t . Zudem ändert sich der Integrand mit jedem Zeitschritt, sodass das Integral bei jedem Zeitschritt neu ausgewertet werden muss. Der Einsatz von exakten Randbedingungen kann daher sehr rechenaufwändig werden [15]. Um dies zu umgehen, müssen Näherungen an die eigentlichen exakten Randbedingungen

eingesetzt werden. Diese werden in [14] absorbierende Randbedingungen genannt. Das Aufstellen exakter Randbedingungen wird zusätzlich erschwert, wenn am Rand des Berechnungsgebiets ein nicht verschwindendes Potential existiert. Für spezielle Potentialformen wurde dies bereits untersucht [16, 17] und in [14] wird ein allgemeines Verfahren zur Aufstellung absorbierender Randbedingungen für die Schrödinger-Gleichung beschrieben. Auch für die relativistische Quantenmechanik sind bereits exakte Randbedingungen aufgestellt worden, so zum Beispiel in [18] für die Klein-Gordon-Gleichung.

Kapitel 4

Vorbereitungen für die Simulation

4.1 Ein absorbierendes Potential für die Schrödinger-Gleichung

In diesem Abschnitt sollen kurz die Ergebnisse des Artikels [1] von D. Neuhauser und M. Baer dargestellt werden. Sie untersuchen darin für die Schrödinger-Gleichung, welche Maße ein lineares, negativ imaginäres Potential am Rand eines eindimensionalen numerischen Gitters haben muss, um ein Wellenpaket mit mittlerem Impuls p , das sich auf den Gitterrand zu bewegt, möglichst vor der Reflektion am Gitterrand zu absorbieren. Das Szenario ist in Abb. 4.1 dargestellt. Der Punkt x_l in Abb. 4.1 soll den linken Rand des Gitters bezeichnen und x_r einen Punkt rechts davon. Das absorbierende Potential hat auf dem Gitter die Gestalt $V(x) = -iV_I(x)$ mit

$$\begin{aligned} V_I(x) &= A \frac{x_r - x}{x_r - x_l}, \text{ falls } x_l \leq x \leq x_r \\ &= 0, \text{ falls } x > x_r, \end{aligned} \tag{4.1}$$

sodass $V(x_l) = -iA$ gilt. A ist dabei eine positive reelle Konstante.

Es gibt im Wesentlichen zwei Bedingungen an das absorbierende Potential. Zum Einen muss sein Betrag groß genug sein, um das Wellenpaket in der Zeit, in der es sich im Potential befindet, möglichst vollständig zu absorbieren. Andererseits darf sein Betrag aber nicht zu steil ansteigen, damit das Wellenpaket nicht schon am Potential selbst reflektiert wird. Da das von Neuhauser und Baer gewählte Potential im Betrag linear von x_r nach x_l ansteigt, ergibt sich daraus eine obere Begrenzung für die Potentialhöhe A aus (4.1).

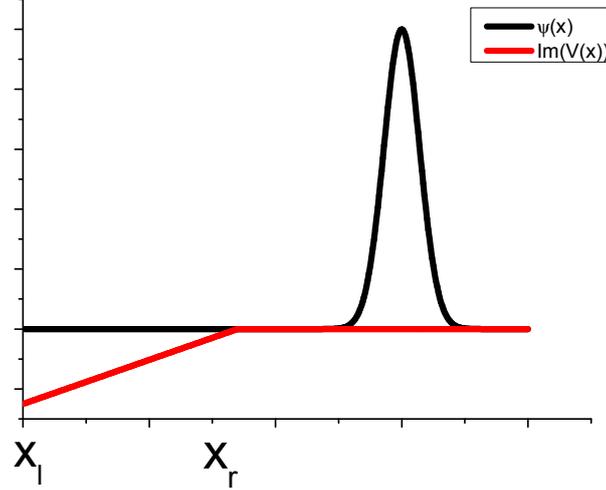


Abbildung 4.1: Ein Wellenpaket bewegt sich auf den Rand eines numerischen Gitters zu. Im Intervall (x_l, x_r) befindet sich ein negativ imaginäres Potential, das das Wellenpaket noch vor der Reflexion am Gitterrand absorbieren soll.

Um herauszufinden, was diese Bedingungen für das linear ansteigende Potential bedeuten, setzt man es in die eindimensionale Schrödinger-Gleichung ein und erhält

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t) - iV_I(x) \psi(x, t). \quad (4.2)$$

Multipliziert man (4.2) von rechts mit der komplex konjugierten Wellenfunktion $\psi^\dagger(x, t)$, so ergibt sich die Gleichung

$$i\hbar \psi(x, t)^\dagger \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \psi(x, t)^\dagger \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t) - iV_I(x) \psi(x, t)^\dagger \psi(x, t), \quad (4.3)$$

und das Komplexkonjugierte hiervon lautet

$$-i\hbar \psi(x, t) \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t)^\dagger = -\frac{\hbar^2}{2m} \psi(x, t) \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t)^\dagger + iV_I(x) \psi(x, t) \psi(x, t)^\dagger. \quad (4.4)$$

Subtrahiert man (4.4) von (4.3) und teilt die entstehende Gleichung durch $i\hbar$, dann führt das auf die Kontinuitätsgleichung mit einem negativ imaginärem Potential,

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(x, t) = -\frac{2i}{\hbar} V_I(x) \rho(x, t) - \frac{\partial}{\partial x} j(x, t), \quad (4.5)$$

mit der Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte

$$\rho(x, t) = \psi(x, t)^\dagger \psi(x, t) \quad (4.6)$$

und der Wahrscheinlichkeitsstromdichte

$$j(x, t) = \frac{\hbar}{2mi} (\psi(x, t)^\dagger \frac{\partial}{\partial x} \psi(x, t) - \psi(x, t) \frac{\partial}{\partial x} \psi(x, t)^\dagger). \quad (4.7)$$

Um zu untersuchen, wie hoch der Betrag des imaginären Potentials mindestens sein muss, um ein Wellenpaket mit mittlerem Impuls p zu absorbieren, nimmt man als nächstes an, dass das Wellenpaket bereits ganz in den Bereich (x_l, x_r) eingedrungen sei. Integration von Gleichung (4.5) über diesem Intervall liefert dann

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int_{x_l}^{x_r} \rho(x, t) dx &= -\frac{2}{\hbar} \int_{x_l}^{x_r} V_I(x) \rho(x, t) dx - (j(x_r, t) - j(x_l, t)) \\ &= -\frac{2}{\hbar} \int_{x_l}^{x_r} V_I(x) \rho(x, t) dx. \end{aligned} \quad (4.8)$$

Neuhauser und Baer definieren darauf die mittlere vom Teilchen erfahrene Potentialhöhe

$$\tilde{V}_I(t) = \frac{\int_{x_l}^{x_r} V_I(x) \rho(x, t) dx}{\int_{x_l}^{x_r} \rho(x, t) dx} \quad (4.9)$$

und die Wahrscheinlichkeit eines Aufenthalts im Intervall (x_l, x_r)

$$Q(x_l, x_r, t) = \int_{x_l}^{x_r} \rho(x, t) dx. \quad (4.10)$$

Damit wird Gleichung (4.8) zu

$$\frac{\partial}{\partial t} Q(x_l, x_r, t) = -\frac{2}{\hbar} \tilde{V}_I(t) \cdot Q(x_l, x_r, t). \quad (4.11)$$

mit der Lösung

$$Q(x_l, x_r, t) = Q(x_l, x_r, t_0) \cdot e^{-\frac{2}{\hbar} \int_{t_0}^t \tilde{V}_I(t') dt'}. \quad (4.12)$$

Das Integral im Exponenten soll nun durch einen mittleren Wert V_{IM} von $\tilde{V}_I(t)$ angenähert werden. Das setzt voraus, dass das absorbierende Potential $V_I(x)$ auf dem Randbereich (x_l, x_r) nur schwach variiert, sodass im Zeitraum (t_0, t) gilt

$$\tilde{V}_I(t) \approx V_{IM}. \quad (4.13)$$

Gleichung (4.12) wird dann zu

$$Q(x_l, x_r, t) \approx Q(x_l, x_r, t_0) \cdot e^{-\frac{2}{\hbar} V_{IM}(t - t_0)}. \quad (4.14)$$

Damit die Wahrscheinlichkeitsdichte im Intervall (x_l, x_r) in der Zeit $\Delta t = t - t_0$ fast vollständig absorbiert wird, muss der Exponent in (4.14) im Betrag viel größer als eins sein. Das führt zu der Bedingung

$$\begin{aligned} \frac{2}{\hbar} V_{IM} \Delta t &\gg 1 \\ \Rightarrow V_{IM} &\gg \frac{\hbar}{2\Delta t}. \end{aligned} \quad (4.15)$$

Die Zeit Δt ist dabei die Zeit, die das Wellenpaket im Intervall (x_l, x_r) verweilt. Diese entspricht in etwa der Zeit t_{trans} , die ein Teilchen der Geschwindigkeit $v = p/m$ benötigt, um sich einmal von x_r bis zum linken Rand des numerischen Gitters x_l zu bewegen, dort reflektiert zu werden und das Intervall (x_l, x_r) wieder zu verlassen. p ist dabei der mittlere Impuls des Teilchens und m seine Masse. Die Zeit t_{trans} ist gegeben durch

$$t_{trans} = \frac{2\Delta x}{v}, \quad (4.16)$$

mit

$$\Delta x = x_r - x_l. \quad (4.17)$$

Man erhält daher folgende Bedingung an V_{IM} :

$$V_{IM} \gg \frac{\hbar p}{4m\Delta x}. \quad (4.18)$$

Um diese Bedingung zu erfüllen, habe ich in meiner Arbeit den mittleren Betrag des Potentials $V(x)$ gleich dem Wert V_{IM} gesetzt. In der Definition (4.1) des Randpotentials ist also $A = 2V_{IM}$.

Es wird nun in [1] weiter gefordert, dass am Potential $V(x)$ selbst möglichst keine Reflektionen auftreten sollen. Man definiert dazu die Wellenzahl

$$k(x) = \frac{\sqrt{2m(E - V(x))}}{\hbar}, \quad (4.19)$$

wobei E die klassische kinetische Energie eines Teilchens mit dem Impuls p ist, und fordert, dass die relative Änderung des Betrags von $k(x)$ über eine Strecke $\delta x = |k(x)|^{-1}$ sehr klein sein soll, also dass

$$1 \gg \left| \frac{\partial k(x)}{\partial x} \cdot \frac{\delta x}{k(x)} \right| \quad (4.20)$$

gelten soll. Hierfür sei auf den Anhang C verwiesen, indem ich diese Forderung im Zusammenhang mit der Klein-Gordon-Gleichung genauer motiviere.

Aus (4.20) folgt

$$\frac{\hbar}{m}|k(x)|^2 \gg \left| \frac{1}{\sqrt{2m(E - V(x))}} \frac{\partial V(x)}{\partial x} \right|, \quad (4.21)$$

wobei benutzt wurde, dass $\delta x = |k(x)|^{-1}$ ist. Verwendet man außerdem die Beziehungen

$$\begin{aligned} |\sqrt{2m(E - V(x))}| &= |\sqrt{2m(E + iV_I(x))}| \\ &= (4m^2(E^2 + V_I^2(x)))^{1/4} \end{aligned} \quad (4.22)$$

und

$$\left| \frac{\partial V(x)}{\partial x} \right| = \frac{2V_{IM}}{\Delta x}, \quad (4.23)$$

so erhält man die Forderung

$$V_{IM} \ll \frac{\Delta x (4m^2(E^2 + V_I^2(x)))^{3/4}}{2m\hbar}. \quad (4.24)$$

(4.24) ist auf jeden Fall erfüllt, wenn

$$\begin{aligned} V_{IM} \ll \frac{\Delta x (4m^2(E^2))^{3/4}}{2m\hbar} &= \frac{\Delta x}{2\hbar} \sqrt{8mE^3} \\ &= \frac{\Delta x p^3}{2m\hbar} \end{aligned} \quad (4.25)$$

gilt.

Damit ergibt sich für den mittleren Betrag V_{IM} des absorbierenden Randpotentials eine obere und eine untere Beschränkung. Insgesamt lauten beide

$$\frac{\hbar p}{4m\Delta x} \ll V_{IM} \ll \frac{\Delta x p^3}{2m\hbar}. \quad (4.26)$$

Offenbar kann man (4.26) stets erfüllen, wenn man Δx nur sehr groß wählt. Dann wird die untere Grenze für V_{IM} beliebig klein und die obere Grenze beliebig groß. Um das numerische Gitter möglichst klein zu halten, ist man jedoch an einem kleinen Intervall (x_l, x_r) interessiert.

In den nächsten beiden Abschnitten stelle ich nun dar, wie ich im Rahmen der Bachelorarbeit Neuhausers und Baers Argumentation nachvollzogen habe, um eine analoge Bedingung zu (4.26) für den relativistischen Fall, also für die Dirac- und die Klein-Gordon-Gleichung, herzuleiten.

4.2 Ein absorbierendes Potential für die Klein-Gordon-Gleichung

In diesem Abschnitt werden die in [1] für die Schrödinger-Gleichung angestellten Überlegungen auf die Klein-Gordon-Gleichung übertragen. Dazu habe ich für die Klein-Gordon-Gleichung die selbe Situation wie in Abb. 4.1 betrachtet, mit dem Potential der Form $V(x) = -iV_I(x)$ und

$$\begin{aligned} V_I(x) &= A \frac{x_r - x}{x_r - x_l}, \text{ falls } x_l \leq x \leq x_r \\ &= 0, \text{ falls } x > x_r. \end{aligned} \quad (4.27)$$

A ist dabei wieder eine positive reelle Konstante, x_l ist der linke Rand des eindimensionalen Gitters und x_r ein Punkt rechts davon. Mit diesem Potential muss der Operator

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad (4.28)$$

in der freien Klein-Gordon-Gleichung ersetzt werden durch

$$(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + iV_I(x)). \quad (4.29)$$

Die Klein-Gordon-Gleichung mit Potential lautet dann

$$\begin{aligned} 0 &= ((i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + iV_I(x))^2 + \hbar^2 c^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} - m^2 c^4) \psi(x, t) \\ \Rightarrow 0 &= (-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} - V_I^2(x) - 2\hbar V_I(x) \frac{\partial}{\partial t} - \hbar (\frac{\partial V_I(x)}{\partial t}) + \hbar^2 c^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} - m^2 c^4) \psi(x, t) \\ \Rightarrow 0 &= (-\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{V_I^2(x)}{\hbar^2} - \frac{2}{\hbar} V_I(x) \frac{\partial}{\partial t} + c^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{m^2 c^4}{\hbar^2}) \psi(x, t). \end{aligned} \quad (4.30)$$

Multipliziert man (4.30) von links mit der komplex konjugierten Wellenfunktion $\hat{\psi}(x, t)$, so ergibt sich

$$0 = \psi(x, t)^\dagger (-\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{V_I^2(x)}{\hbar^2} - \frac{2}{\hbar} V_I(x) \frac{\partial}{\partial t} + c^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{m^2 c^4}{\hbar^2}) \psi(x, t), \quad (4.31)$$

und bildet man das komplex Konjugierte dieser Gleichung, dann erhält man

$$0 = \psi(x, t) (-\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{V_I^2(x)}{\hbar^2} - \frac{2}{\hbar} V_I(x) \frac{\partial}{\partial t} + c^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{m^2 c^4}{\hbar^2}) \psi(x, t)^\dagger. \quad (4.32)$$

Subtrahiert man als nächstes (4.32) von (4.31), so erhält man

$$\begin{aligned}
0 = & -(\psi(x, t)^\dagger \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi(x, t) - \psi(x, t) \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi(x, t)^\dagger) - \\
& \frac{2}{\hbar} V_I(x) (\psi(x, t)^\dagger \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) - \psi(x, t) \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t)^\dagger) + \\
& c^2 (\psi(x, t)^\dagger \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t) - \psi(x, t) \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t)^\dagger), \tag{4.33}
\end{aligned}$$

und Multiplikation mit $\frac{i\hbar}{2mc^2}$ führt auf die Kontinuitätsgleichung mit negativ imaginärem Potential,

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(x, t) = -\frac{2}{\hbar} V_I(x) \rho(x, t) - \frac{\partial}{\partial x} j(x, t), \tag{4.34}$$

mit der Ladungsdichte

$$\rho(x, t) = \frac{i\hbar}{2mc^2} (\psi(x, t)^\dagger \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) - \psi(x, t) \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t)^\dagger) \tag{4.35}$$

und der Stromdichte

$$j(x, t) = \frac{e\hbar}{2mi} (\psi(x, t)^\dagger \frac{\partial}{\partial x} \psi(x, t) - \psi(x, t) \frac{\partial}{\partial x} \psi(x, t)^\dagger). \tag{4.36}$$

Man erkennt an (4.34), dass $V_I(x)$ auch in der Klein-Gordon-Gleichung rücktreibend auf die Dichte $\rho(x, t)$ wirkt. Analog zum vorherigen Abschnitt habe ich nun (4.34) über dem Intervall (x_l, x_r) integriert. Man erhält so die Gleichung

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} \int_{x_l}^{x_r} \rho(x, t) dx &= -\frac{2}{\hbar} \int_{x_l}^{x_r} V_I(x) \rho(x, t) dx - (j(x_r, t) - j(x_l, t)) \\
&= -\frac{2}{\hbar} \int_{x_l}^{x_r} V_I(x) \rho(x, t) dx. \tag{4.37}
\end{aligned}$$

Das ist analog zum Ergebnis aus [1] für die Schrödinger-Gleichung. Der Unterschied ist jedoch, dass die Ladungsdichte $\rho(x, t)$ in der Klein-Gordon-Gleichung nicht positiv definit ist. Falls das Wellenpaket sowohl Bereiche positiver als auch negativer Ladungsdichte enthält, kann es dazu kommen, dass die zeitliche Ableitung in (4.37) positiv ist, obwohl das Integral der Dichte über (x_l, x_r) ebenfalls positiv ist. Dies kann geschehen, falls die Bereiche negativer Ladungsdichte schneller abgedämpft werden als die Bereiche positiver Ladungsdichte. Umgekehrt verhält es sich, falls das Wellenpaket aus mehrheitlich negativer Ladungsdichte besteht.

In Kapitel 6 werde ich in einem Computerszenario demonstrieren, wie sich das absorbierende Potential verhält, falls es gleichzeitig negative und positive Ladungsdichten enthält. Dort will ich auch theoretisch motivieren, warum die Absorbition in diesem Fall so funktioniert, als wären die Bereiche positiver und negativer Dichte getrennt voneinander in den absorbierenden Bereich eingedrungen. Im Folgenden will ich aber davon ausgehen, dass das einfallende Wellenpaket ausschließlich Anteile positiver oder negativer Ladungsdichte enthält.

Wie in [1] kann man ausgehend von (4.37) die Größe $\tilde{V}_I(t)$ als mit der Ladungsdichte $\rho(x, t)$ gewichtete, mittlere Höhe von $V_I(x)$ zum Zeitpunkt t definieren,

$$\tilde{V}_I(t) = \frac{\int_{x_l}^{x_r} V_I(x) \rho(x, t) dx}{\int_{x_l}^{x_r} \rho(x, t) dx}, \quad (4.38)$$

sowie die Gesamtladung im Intervall (x_l, x_r) zur Zeit t ,

$$Q(x_l, x_r, t) = \int_{x_l}^{x_r} \rho(x, t) dx. \quad (4.39)$$

Damit wird Gleichung (4.37) zu

$$\frac{\partial}{\partial t} Q(x_l, x_r, t) = -\frac{2}{\hbar} \tilde{V}_I(t) \cdot Q(x_l, x_r, t). \quad (4.40)$$

Diese Gleichung hat die Lösung

$$Q(x_l, x_r, t) = Q(x_l, x_r, t_0) \cdot e^{-\frac{2}{\hbar} \int_{t_0}^t \tilde{V}_I(t') dt'}. \quad (4.41)$$

Das Integral im Exponenten soll nun wieder durch einen mittleren Wert V_{IM} von $\tilde{V}_I(t)$ angenähert werden. Voraussetzung hierfür ist erneut, dass das absorbierende Potential $V_I(x)$ auf (x_l, x_r) nur schwach variiert, sodass im Zeitraum (t_0, t) gilt

$$\tilde{V}_I(t) \approx V_{IM}. \quad (4.42)$$

Mit diesem V_{IM} folgt für die Lösung von (4.40)

$$Q(x_l, x_r, t) \approx Q(x_l, x_r, t_0) \cdot e^{-\frac{2}{\hbar} V_{IM} (t - t_0)}. \quad (4.43)$$

Damit die Ladung im Intervall (x_l, x_r) in der Zeit $\Delta t = t - t_0$ fast vollständig abgedämpft wird, muss daher wieder

$$\begin{aligned} \frac{2}{\hbar} V_{IM} \Delta t &\gg 1 \\ \Rightarrow V_{IM} &\gg \frac{\hbar}{2\Delta t} \end{aligned} \quad (4.44)$$

gelten. Die Zeit Δt , die das Wellenpaket im Intervall (x_l, x_r) verweilt, lässt sich dabei erneut durch die Zeit t_{trans} abschätzen, die das Wellenpaket benötigt, um sich einmal von x_r bis zum linken Rand des numerischen Gitters x_l zu bewegen, dort reflektiert zu werden und das Intervall (x_l, x_r) wieder zu verlassen. Diese Zeit ist gegeben durch

$$t_{trans} = \frac{2\Delta x}{v}, \quad (4.45)$$

wobei $\Delta x = x_r - x_l$ und v die Geschwindigkeit des Wellenpakets ist. Das ist aber der erste Unterschied zu den Überlegungen von Neuhauser und Baer in der Schrödinger-Gleichung. Denn im Gegensatz zur nichtrelativistischen Quantenmechanik ist diese Geschwindigkeit in der Klein-Gordon-Gleichung mit dem mittleren Impuls des Wellenpakets durch die Beziehung

$$v = \frac{pc}{\sqrt{p^2 + m^2c^2}} = \frac{pc^2}{E_p} \quad (4.46)$$

verbunden. c ist dabei die Lichtgeschwindigkeit und $E_p = \sqrt{p^2c^2 + m^2c^4}$ die relativistische Gesamtenergie eines Teilchens mit dem Impuls p (vgl. Abschnitt 2.2). Man erhält daher im relativistischen Fall als untere Schranke für V_{IM}

$$V_{IM} \gg \frac{\hbar}{2\Delta t} \gg \frac{\hbar}{2t_{trans}} = \frac{\hbar pc^2}{4\Delta x E_p}. \quad (4.47)$$

Eine weitere Einschränkung entsteht wie im Schrödinger-Fall dadurch, dass das Potential $V(x)$ nur moderat ansteigen darf, da das eintreffende Teilchen sonst bereits an V reflektiert wird und nicht lange genug im Intervall (x_l, x_r) verharret, um absorbiert zu werden. Für die Schrödinger-Gleichung hatten Neuhauser und Baer gefordert, dass die relative Änderung des Betrags von

$$\begin{aligned} k(x) &= \frac{\sqrt{2m(E - V(x))}}{\hbar} \\ &= \frac{\sqrt{2m(E + iV_I(x))}}{\hbar} \end{aligned} \quad (4.48)$$

über eine Strecke $\delta x = |k(x)|^{-1}$ klein bleibt, d.h. dass

$$1 \gg \left| \frac{\partial k(x)}{\partial x} \cdot \frac{\delta x}{k(x)} \right| \quad (4.49)$$

gilt. E war dabei die klassische kinetische Energie eines Teilchens mit dem Impuls p , und für ein reelles Potential wäre (4.48) die De Broglie Wellenzahl, die dem Impuls p entspricht. Um (4.58) auf den relativistischen Fall zu

übertragen, habe ich $k(x)$ durch

$$\begin{aligned} k(x) &= \frac{\sqrt{(E_p - V(x))^2 - m^2 c^4}}{\hbar c} \\ &= \frac{\sqrt{(E_p + iV(x))^2 - m^2 c^4}}{\hbar c} \end{aligned} \quad (4.50)$$

ersetzt. E_p ist darin wie zuvor die relativistische Gesamtenergie eines Teilchens mit dem Impuls p . Für ein reelles Potential wäre dann (4.50) die De Broglie Wellenzahl eines relativistischen Teilchens beim Impuls p . Für dieses $k(x)$ habe ich dann analog zum vorherigen Abschnitt folgende Bedingung aufgestellt:

$$\begin{aligned} 1 &\gg \left| \frac{\partial k(x)}{\partial x} \cdot \frac{\delta x}{k(x)} \right| \\ \Rightarrow 1 &\gg \left| \frac{\partial k(x)}{\partial x} \cdot \frac{1}{k(x)^2} \right|. \end{aligned} \quad (4.51)$$

Eine genauere Diskussion dieser Bedingung soll im Anhang C erfolgen, während ich in diesem Abschnitt zunächst (4.50) in (4.51) einsetze und wie im vorherigen Abschnitt fortfahre. Aus (4.51) folgt

$$\begin{aligned} |k(x)^2| &\gg \left| \frac{1}{\hbar c} \cdot \frac{E_p + iV_I(x)}{\sqrt{(E_p + iV_I(x))^2 - m^2 c^4}} \cdot \frac{\partial V_I(x)}{\partial x} \right| \\ \Rightarrow |k(x)^3| &\gg \left| \frac{1}{(\hbar c)^2} \cdot (E_p + iV_I(x)) \cdot \frac{\partial V_I(x)}{\partial x} \right|. \end{aligned} \quad (4.52)$$

Die Ableitung des Randpotentials war gegeben durch $-2iV_{IM}/\Delta x$ und (4.52) wird damit zu folgender Einschränkung für V_{IM} :

$$V_{IM} \ll \left| \frac{k(x)^3 (\hbar c)^2 \Delta x}{2(E + iV_I(x))} \right| \quad (4.53)$$

Damit das Wellenpaket in das absorbierende Potential eindringt, muss (4.53) insbesondere am Anfang des Absorbitionsbereichs gelten. Dort ist aber $V(x) = 0$ sowie $k(x) = p/\hbar$ und man erhält die Forderung

$$V_{IM} \ll \frac{p^3 c^2 \Delta x}{2\hbar E_p}. \quad (4.54)$$

Man muss jedoch Folgendes beachten: Falls V_{IM} die Ungleichung (4.54) erfüllt, heißt das noch nicht, dass auch (4.53) an jedem Ort x in (x_l, x_r) erfüllt ist.

Ich werde darauf am Ende dieses Abschnitts noch einmal eingehen. Zunächst fasse ich jedoch die bisherigen Ergebnisse zusammen:

Die Übertragung der Argumente Neuhausers und Baers auf die relativistische Klein-Gordon-Gleichung liefert für den mittleren Betrag V_{IM} des Randpotential die Einschränkung

$$\frac{\hbar pc^2}{4\Delta x E_p} \ll V_{IM} \ll \frac{p^3 c^2 \Delta x}{2\hbar E_p}. \quad (4.55)$$

An dieser Stelle sei noch einmal die Form des hier gewählten absorbierenden Potentials wiederholt:

$$\begin{aligned} V(x) &= -2iV_{IM} \frac{x_r - x}{x_r - x_l}, & \text{falls } x_l \leq x \leq x_r \\ &= 0, & \text{falls } x > x_r. \end{aligned} \quad (4.56)$$

Man kann (4.55) wieder leicht erfüllen, indem man Δx sehr groß wählt. Die untere Grenze für V_{IM} wird dann beliebig klein und die obere Grenze beliebig groß. Man ist aber an kleinen Intervallen (x_l, x_r) interessiert, um das numerische Gitter möglichst klein zu halten. In Abb. 4.2 wird für $\Delta x = 0.5 \text{ s.a.u.}$ die Impulsabhängigkeit der nun hergeleiteten Grenzen von V_{IM} mit den Grenzen verglichen, die im vorherigen Abschnitt für die Schrödinger-Gleichung angegeben wurden. Offenbar stimmen die Grenzen im nicht relativistischen Grenzfall, also für kleine Impulse, überein. Das lässt sich auch zeigen, indem man verwendet, dass bei kleinen Impulsen (d.h. für $pc \ll mc^2$) näherungsweise

$$E_p = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4} \approx mc^2 \quad (4.57)$$

gilt. Denn dann werden die für die Klein-Gordon-Gleichung hergeleiteten Einschränkungen zu

$$\frac{\hbar pc^2}{4\Delta x E_p} \rightarrow \frac{\hbar p}{4m\Delta x} \quad (4.58)$$

und

$$\frac{p^3 c^2 \Delta x}{2\hbar E_p} \rightarrow \frac{p^3 \Delta x}{2m\hbar}. \quad (4.59)$$

Das entspricht genau den Grenzen für das absorbierende Potential in der nichtrelativistischen Schrödinger-Gleichung. Ein wesentlicher Unterschied zwischen dem Schrödinger- und dem Klein-Gordon-Fall besteht in dem Verhalten der unteren Grenze bei sehr hohen Impulsen. Während diese Grenze im Schrödinger-Fall unbeschränkt anwächst, gilt für die Klein-Gordon-Gleichung bei hohen Impulsen (d.h. für $pc \gg mc^2$) näherungsweise

$$E_p = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4} \approx pc, \quad (4.60)$$

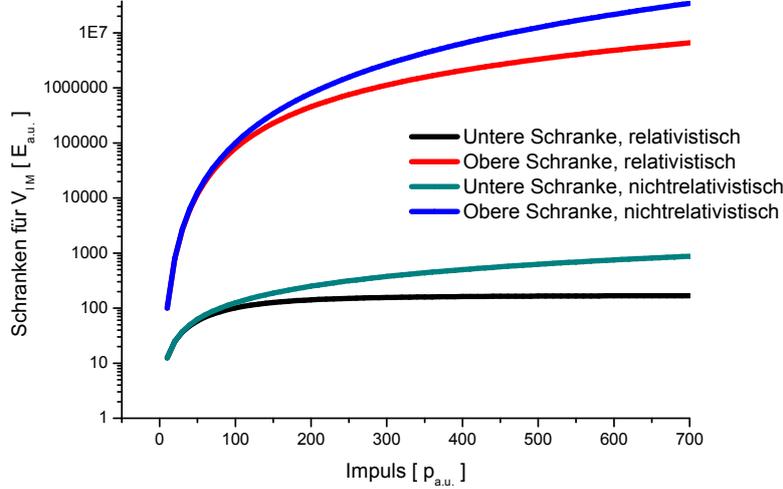


Abbildung 4.2: Obere und untere Schranke für V_{IM} bei verschiedenen Impulsen p und $\Delta x = 0.5 s_{a.u.}$.

sodass sich die untere Schranke für V_{IM} dem konstanten Wert

$$\frac{\hbar p c^2}{4\Delta x E_p} \rightarrow \frac{\hbar c}{4\Delta x} \quad (4.61)$$

annähert. Der Grund hierfür ist die Endlichkeit der Lichtgeschwindigkeit, denn die untere Schranke für V_{IM} hing im Wesentlichen von der Verweildauer des Wellenpakets im absorbierenden Bereich ab. Diese kann aber nicht beliebig klein werden, da die Geschwindigkeit des Wellenpakets nicht beliebig groß werden kann.

Es bleiben noch zwei Punkte zu klären. Zum einen hatte ich in den vorangegangenen Betrachtungen stets angenommen, dass das Wellenpaket, das auf den Rand des numerischen Gitters trifft, ganz vom Intervall (x_l, x_r) eingeschlossen wird. Da dieses Intervall aber möglichst klein gewählt werden soll, wird dies in der Regel nicht der Fall sein. In Gleichung (4.37)

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{x_l}^{x_r} \rho(x, t) dx = -\frac{2e}{\hbar} \int_{x_l}^{x_r} V_I(x) \rho(x, t) dx - (j(x_r, t) - j(x_l, t)) \quad (4.62)$$

erkennt man, dass $j(x, t)$ im Falle eines breiten Wellenpakets an der Stelle x_r nicht verschwindet, dass also zusätzliche Teile der Wellenfunktion von

außen in den Absorbitionsbereich eindringen. Um das Problem zu umgehen, integriert man die Kontinuitätsgleichung stattdessen über ein Intervall (x_l, \tilde{x}) mit einem \tilde{x} rechts von x_r , sodass das Wellenpaket ganz in (x_l, \tilde{x}) enthalten ist (vgl. [1]). Der mittlere Betrag \tilde{V}_{IM} auf diesem Intervall ist dann gegeben durch

$$\tilde{V}_{IM} = V_{IM} \frac{x_r - x_l}{\tilde{x} - x_l} \quad (4.63)$$

und die Zeit $\Delta\tilde{t}$, die das Wellenpaket im Intervall (x_l, \tilde{x}) verweilt, kann abgeschätzt werden durch

$$\Delta\tilde{t} = \Delta t \frac{\tilde{x} - x_l}{x_r - x_l}, \quad (4.64)$$

sodass sich wieder die gleiche untere Schranke für V_{IM} ergibt wie zuvor. Daher bleiben die Überlegungen dieses Abschnitts auch für breite Wellenpakete gültig.

Als letztes soll noch ein genauerer Blick auf Bedingung (4.53) geworfen werden. Diese lautete

$$V_{IM} \ll \left| \frac{k(x)^3 (\hbar c)^2 \Delta x}{2(E_p + iV_I(x))} \right|. \quad (4.65)$$

Ich will im Folgenden demonstrieren, dass (4.65) schon gilt, wenn

$$V_{IM} \ll \left| \frac{p^3 c^2 \Delta x}{2\hbar E_p} \right| \quad (4.66)$$

erfüllt ist. Hierzu habe ich zunächst festgestellt, dass der Betrag von $k(x)$ durch

$$\begin{aligned} |k(x)| &= \frac{\sqrt{|(E_p + iV_I(x))^2 - m^2 c^4|}}{\hbar c} \\ &= \frac{(4E_p^2 V_I^2(x) + (E_p^2 - V_I^2(x) - m^2 c^4)^2)^{1/4}}{\hbar c} \\ &= \frac{((E_p^2 + V_I^2(x))^2 + m^4 c^8 + 2m^2 c^4 (V_I^2(x) - E_p^2))^{1/4}}{\hbar c} \end{aligned} \quad (4.67)$$

gegeben ist. Daran sieht man, dass der Absolutbetrag von $k(x)$ mit größer werdendem $V_I(x)$ ansteigt. Das liegt daran, dass mit steigendem Potential die imaginäre, dämpfende Komponente von $k(x)$ größer wird. Für die obere

Schranke von V_{IM} folgt damit

$$\begin{aligned}
V_{IM} &\ll \frac{(\hbar c)^2 \Delta x |k(x)|}{2} \cdot \frac{|k(x)|^2}{\sqrt{E_p^2 + V_I^2(x)}} \\
&\ll \frac{(\hbar c)^2 \Delta x |k(x)|}{2} \cdot \sqrt{E_p^2 + V_I^2(x) + m^2 c^4 \frac{2V_I^2(x) + m^2 c^4 - E_p^2}{E_p^2 + V_I^2(x)}}.
\end{aligned} \tag{4.68}$$

Um zu sehen, dass diese Schranke mit steigendem $V_I(x)$ ebenfalls ansteigt, habe ich nun den letzten Summanden in der Wurzel von (4.68) nach V_I abgeleitet. Man erhält dann

$$\frac{\partial}{\partial V_I} \frac{2V_I^2 + m^2 c^4 - E^2}{E^2 + V_I^2} = 2V_I \frac{3E^2 - m^2 c^4}{(V_I^2 + E^2)^2} = 2V_I \frac{2E^2 + p^2 c^2}{(V_I^2 + E^2)^2}. \tag{4.69}$$

Die rechte Seite von (4.69) ist stets positiv für positives $V_I(x)$. Das bedeutet, dass die obere Grenze für V_{IM} in (4.53) ansteigt, wenn sich der Wert von $V_I(x)$ erhöht. Daher ist

$$\left| \frac{p^3 c^2 \Delta x}{2\hbar E_p} \right| < \left| \frac{k(x)^3 (\hbar c)^2 \Delta x}{2(E_p + iV_I(x))} \right| \tag{4.70}$$

und man kann ohne Einschränkung der Gültigkeit die rechte Seite von (4.70) durch deren linke Seite als obere Schranke von V_{IM} ersetzen.

4.3 Ein absorbierendes Potential für die Dirac-Gleichung

Es bleibt noch zu überprüfen, ob die Bedingung (4.55) auch für ein imaginäres Randpotential in der Dirac-Gleichung hinreichend ist. Um ein Potential der Form $V(x) = -iV_I(x)$ mit

$$\begin{aligned}
V_I(x) &= A \frac{x_r - x}{x_r - x_l}, \text{ falls } x_l \leq x \leq x_r \\
&= 0, \text{ falls } x > x_r,
\end{aligned} \tag{4.71}$$

in der Dirac-Gleichung zu berücksichtigen, ersetzt man erneut den Operator der Gesamtenergie durch

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rightarrow (i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + iV_I(x)). \tag{4.72}$$

Die Dirac-Gleichung lautet dann

$$0 = (i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + iV_I(x) + i\hbar c\sigma_1 \frac{\partial}{\partial x} - \sigma_3 mc^2)\psi(x, t). \quad (4.73)$$

Die σ_i sind dabei wieder die Pauli-Matrizen. Gleichung (4.73) multipliziert man nun von links mit dem zu $\psi(x, t)$ adjungierten Spinor $\psi(x, t)^\dagger$, und erhält

$$0 = i\hbar\psi(x, t)^\dagger \frac{\partial\psi(x, t)}{\partial t} + iV_I(x)\psi(x, t)^\dagger\psi(x, t) + i\hbar c\psi(x, t)^\dagger\sigma_1 \frac{\partial\psi(x, t)}{\partial x} - mc^2\psi(x, t)^\dagger\sigma_3\psi(x, t) \quad (4.74)$$

und die dazu adjungierte (transponierte und komplex konjugierte) Gleichung

$$0 = -i\hbar \frac{\partial\psi(x, t)^\dagger}{\partial t} \psi(x, t) - iV_I(x)\psi(x, t)^\dagger\psi(x, t) - i\hbar c \frac{\partial\psi(x, t)^\dagger}{\partial x} \sigma_1^\dagger \psi(x, t) - mc^2\psi(x, t)^\dagger\sigma_3^\dagger\psi(x, t). \quad (4.75)$$

Als nächstes subtrahiert man wieder (4.75) von (4.74). Da die Pauli-Matrizen selbstadjungiert sind, folgt dann

$$0 = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}(\psi(x, t)^\dagger\psi(x, t)) + i\hbar c \frac{\partial}{\partial x}(\psi(x, t)^\dagger\sigma_1\psi(x, t)) + 2iV(x)\psi(x, t)^\dagger\psi(x, t) \quad (4.76)$$

Teilt man auf beiden Seiten noch durch $i\hbar$, dann erhält man die Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(x, t) = -\frac{2}{\hbar}V_I(x)\rho(x, t) - \frac{\partial}{\partial x}j(x, t), \quad (4.77)$$

mit der Wahrscheinlichkeitsdichte

$$\rho(x, t) = \psi(x, t)^\dagger\psi(x, t) \quad (4.78)$$

und der Wahrscheinlichkeitsstromdichte

$$j(x, t) = c\psi(x, t)^\dagger\sigma_1\psi(x, t). \quad (4.79)$$

Das ist identisch zu dem Ergebnis (4.34) für die Klein-Gordon Gleichung. Und man befindet sich sogar in einer besseren Ausgangslage als zuvor, da die Dichte $\rho(x, t)$ in der Dirac Gleichung stets positiv ist. Man erhält daher komplett analog zu Abschnitt 4.2 die untere Beschränkung

$$\frac{\hbar pc^2}{4\Delta x E_p} \ll V_{IM} \quad (4.80)$$

für den mittleren Betrag V_{IM} des absorbierenden Potentials.

Als obere Beschränkung für V_{IM} in 4.2 habe ich ebenfalls gefordert, dass die relative Änderung der Wellenzahl $k(x) = \sqrt{(E - V)^2 - m^2 c^4}$ über eine Strecke $\delta x = |k(x)|^{-1}$ klein bleibt (vgl. (4.51)), damit Reflexionen am Potential selbst klein bleiben. Zur näheren Begründung dieser Bedingung sei erneut auf den Anhang C verwiesen. Da die Wellenzahl k in Dirac- und Klein-Gordon-Gleichung identisch ist, gelangt man so zur gleichen oberen Schranke für V_{IM} wie bei der Klein-Gordon-Gleichung. Ich werde daher in dieser Arbeit an ein absorbierendes Randpotential der Form (4.71) in der Dirac-Gleichung ebenfalls die Bedingung

$$\frac{\hbar p c^2}{4\Delta x E_p} \ll V_{IM} \ll \frac{p^3 c^2 \Delta x}{2\hbar E_p} \quad (4.81)$$

stellen. Die Breite des absorbierenden Bereichs, Δx , soll dabei wieder möglichst klein gewählt werden.

Kapitel 5

Wellenpakete für die relativistische Quantenmechanik

5.1 Ein Wellenpaket für die Klein-Gordon-Gleichung

In den in Kapitel 6 folgenden Simulationen benutze ich ein Wellenpaket als Anfangsfunktion. Dieses soll möglichst ein Wellenpaket mit einem definierten Impuls darstellen. An dieser Stelle folgt daher für die Klein-Gordon Gleichung eine ausführliche Herleitung eines Wellenpakets.

Ein Wellenpaket, das ein mit Geschwindigkeit v bewegtes Teilchen beschreibt, soll im Ruhesystem des Teilchens möglichst eine um den Ursprung symmetrische Impulsverteilung besitzen. Daher soll das Paket zunächst im Ruhesystem des Teilchens in ebenen Wellen der Klein-Gordon-Gleichung entwickelt werden. Diese haben die Form

$$\psi_p(x', t') = \frac{1}{2\sqrt{E_{p'} \cdot mc^2}} \cdot \begin{pmatrix} mc^2 + E_{p'} \\ mc^2 - E_{p'} \end{pmatrix} \cdot e^{-i \frac{E_{p'} t' - p' x'}{\hbar}}. \quad (5.1)$$

Die gestrichelten Koordinaten stehen dabei für das Ruhesystem des Teilchens, p ist der Impuls im Ruhesystem und $E_p = \sqrt{m^2 c^4 + p^2 c^2}$ die damit über die relativistische Energie-Impulsbeziehung verbundene Energie. Die ebenen Wellen sollen nun um den Impuls $p = 0$ herum mit einer Gaussverteilung der Breite σ gewichtet werden. So erhält man die folgende Entwicklung des

Wellenpakets im Ruhe system des Teilchens:

$$\psi_{rest}(x', t') = \int \frac{dp'}{2E_{p'}} \cdot \sqrt{\frac{E_{p'}}{mc^2}} \cdot \left(\frac{mc^2 + E_{p'}}{mc^2 - E_{p'}} \right) \cdot e^{-\frac{p'^2}{2\sigma^2}} \cdot e^{-i \frac{E_{p'}t' - p'x'}{\hbar}}. \quad (5.2)$$

Es ist jetzt nicht offensichtlich, wie diese Wellenfunktion in ein anderes Inertialsystem zu übertragen ist. Will man eine Darstellung im Laborsystem erhalten, das sich gegenüber dem Ruhesystem des Teilchens mit der Geschwindigkeit v bewegt, muss man insbesondere das Integrals $\int dp$ transformieren. Ich habe die Wellenfunktion im Ruhesystem dafür zuerst in die Form

$$\begin{aligned} \psi_{rest}(x', t') &= \int dp' dE' \cdot \delta(E'^2 - m^2c^4 - p'^2c^2) \cdot \theta(E') \cdot \left(\frac{mc^2 + E'}{mc^2 - E'} \right) \cdot \\ &\quad e^{-\frac{p'^2}{2\sigma^2}} \cdot e^{-i \frac{E't' - p'x'}{\hbar}} \cdot \sqrt{\frac{E'}{mc^2}} \\ &= \int dp'^2 c \cdot \delta(c^2 \cdot p'_\mu p'^\mu - m^2c^4) \cdot \theta(cp'_0) \cdot \left(\frac{mc^2 + cp'_0}{mc^2 - cp'_0} \right) \cdot \\ &\quad e^{-\frac{p_1'^2}{2\sigma^2}} \cdot e^{-i \frac{p'_\mu x'^\mu}{\hbar}} \cdot \sqrt{\frac{cp'_0}{mc^2}} \end{aligned} \quad (5.3)$$

gebracht, wobei ich die Eigenschaften der δ -Funktion ausgenutzt habe, die im Anhang B näher beschrieben werden. Ausgehend von der Schreibweise (5.3) ist es nun möglich, mithilfe der Lorentztransformation in das Laborsystem zu wechseln, um die Darstellung des Wellenpakets in diesem System zu erhalten. Diese lautet

$$\begin{aligned} \psi_{lab}(x, t) &= \int dp^2 c \cdot \delta(c^2 p_\mu p^\mu - m^2c^4) \cdot \theta(c\gamma p_0 - c\beta\gamma p_1) \cdot \left(\frac{mc^2 + c\gamma p_0 - c\beta\gamma p_1}{mc^2 - c\gamma p_0 + c\beta\gamma p_1} \right) \cdot \\ &\quad e^{-\frac{(\gamma p_1 - \beta\gamma p_0)^2}{2\sigma^2}} \cdot e^{-i \frac{p_\mu x^\mu}{\hbar}} \cdot \sqrt{\frac{c\gamma p_0 - c\beta\gamma p_1}{mc^2}}, \end{aligned} \quad (5.4)$$

wobei man die delta-Funktion mit

$$\delta(c^2 p_\mu p^\mu - m^2c^4) = \frac{\delta(p_0 - \sqrt{m^2c^2 + p_1^2})}{2c^2 \sqrt{m^2c^2 + p_1^2}} + \frac{\delta(p_0 + \sqrt{m^2c^2 + p_1^2})}{2c^2 \sqrt{m^2c^2 + p_1^2}} \quad (5.5)$$

weiter auswerten kann und so zunächst für das Wellenpaket die Form

$$\psi_{lab}(x, t) = \psi_1(x, t) + \psi_2(x, t) \quad (5.6)$$

mit

$$\begin{aligned} \psi_1(x, t) = & \int \frac{dp}{2E_p} \cdot \theta(\gamma E_p - c\beta\gamma p) \cdot \left(mc^2 + \gamma E_p - c\beta\gamma p \right) \cdot e^{-\frac{(\gamma p - \beta\gamma \frac{E_p}{c})^2}{2\sigma^2}} \\ & \cdot e^{-i\frac{E_p t - px}{\hbar}} \cdot \sqrt{\frac{\gamma E_p - c\beta\gamma p}{mc^2}} \end{aligned} \quad (5.7)$$

und

$$\begin{aligned} \psi_2(x, t) = & \int \frac{dp}{2E_p} \cdot \theta(-\gamma E_p - c\beta\gamma p) \cdot \left(mc^2 - \gamma E_p - c\beta\gamma p \right) \cdot e^{-\frac{(\gamma p + \beta\gamma \frac{E_p}{c})^2}{2\sigma^2}} \\ & \cdot e^{-i\frac{-E_p t - px}{\hbar}} \cdot \sqrt{\frac{-\gamma E_p - c\beta\gamma p}{mc^2}} \end{aligned} \quad (5.8)$$

im Laborsystem erhält. Man sieht aber, dass die Heavysidefunktion in (5.7) stets den Wert 1 hat, während die Heavysidefunktion in (5.8) stets verschwindet. Das Wellenpaket hat daher im Laborsystem die Darstellung

$$\begin{aligned} \psi_{lab}(x, t) = & \int \frac{dp}{2E_p} \cdot \left(mc^2 + \gamma E_p - c\beta\gamma p \right) \cdot e^{-\frac{(\gamma p - \beta\gamma \frac{E_p}{c})^2}{2\sigma^2}} \cdot e^{-i\frac{E_p t - px}{\hbar}} \\ & \cdot \sqrt{\frac{\gamma E_p - c\beta\gamma p}{mc^2}}. \end{aligned} \quad (5.9)$$

Normiert man $\psi_{lab}(x, t)$, sodass das Integral der Dichte über den gesamten Raum den Wert 1 hat, dann erhält man das Wellenpaket, das ich auch in den Simulationen aus Kapitel 6 als Anfangswellenfunktion benutzen werde. Insbesondere werde ich dabei $t = 0$ setzen, sodass man (5.9) leicht als Fouriertransformierte der Wellenfunktion $\hat{\psi}_{lab}(p, t)$ im Impulsraum erkennen kann. Diese lautet dann

$$\hat{\psi}_{lab}(p, 0) = \frac{1}{2E_p} \cdot \left(mc^2 + \gamma E_p - c\beta\gamma p \right) \cdot e^{-\frac{(\gamma p - \beta\gamma \frac{E_p}{c})^2}{2\sigma^2}} \cdot \sqrt{\frac{\gamma E_p - c\beta\gamma p}{mc^2}}. \quad (5.10)$$

Als Vorbereitung für die Interpretation der in dieser Arbeit durchgeführten Simulationen schließe ich nun eine qualitative Untersuchung dieses Wellenpakets an. Zunächst soll dabei die Impulsraumfunktion $\hat{\psi}_{lab}(p, 0)$ betrachtet werden. Diese hat zwei Komponenten. Außerdem ist sie durch zwei Parameter bestimmt: die Breite σ der Gaussverteilung und den Impuls p_0 , der

dem Übergang vom Laborsystem in das Ruhesystem des durch das Paket beschriebenen Teilchens entspricht. Das Teilchen soll dabei stets die Masse eines Elektrons, also die Masseneinheit im atomaren Einheitensystem, haben. In den Abbildungen 5.1, 5.2 und 5.3 sind für eine Breite von $\sigma = 50 p_{a.u.}$ und für unterschiedliche Werte von p_0 (von $0 p_{a.u.}$ bis $300 p_{a.u.}$ in $50 p_{a.u.}$ -Schritten) die erste und zweite Komponente von $\hat{\psi}_{lab}(p, 0)$ sowie die aus den beiden Komponenten resultierende Ladungsdichte im Impulsraum dargestellt.

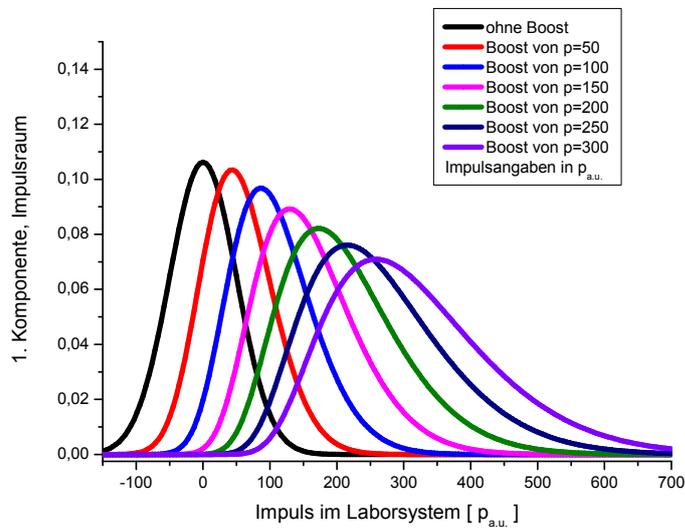


Abbildung 5.1: Für unterschiedlichen Boost p wird die erste Komponente des Wellenpakets zum Zeitpunkt $t = 0$ im Impulsraum dargestellt.

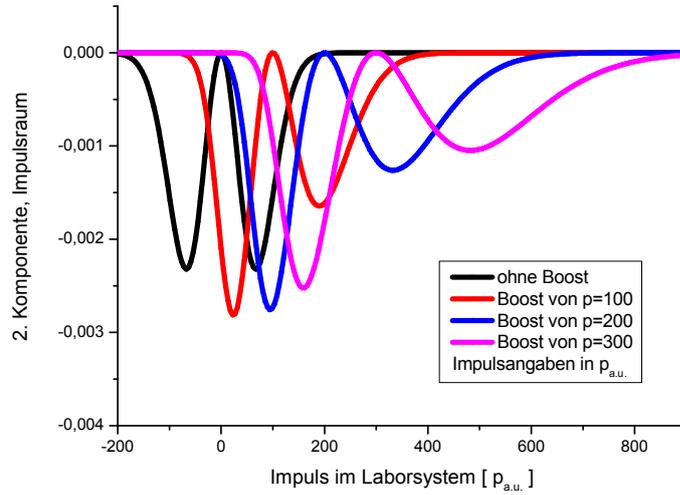


Abbildung 5.2: Zweite Komponente des Wellenpakets im Impulsraum bei unterschiedlichem Boost. Zur Übersichtlichkeit wurden hier nur drei verschiedene Boosts dargestellt.

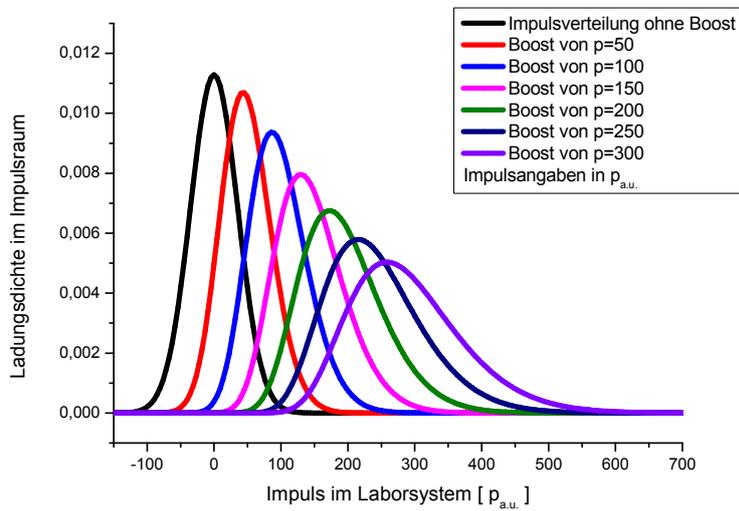


Abbildung 5.3: Die Dichte des Wellenpakets im Impulsraum bei unterschiedlichen Boosts.

Mit zunehmenden Boost wird die ursprünglich Gauss ähnliche Form immer mehr verzerrt. Zudem wird das Wellenpaket flacher und breiter. Außerdem fällt bei sehr großem Boost das Maximum der Verteilung nicht auf den eigentlichen Boost-Impuls. Ich werde weiter unten auf diese Tatsache eingehen, zunächst sollen aber die Ladungsdichte des Wellenpakets im Ortsraum untersucht werden. In Abbildung 5.4 ist diese wieder bei einer Impulsraumbreite von $50 p_{a.u.}$ dargestellt. Zur Übersichtlichkeit werden größere Impulschritte gewählt.

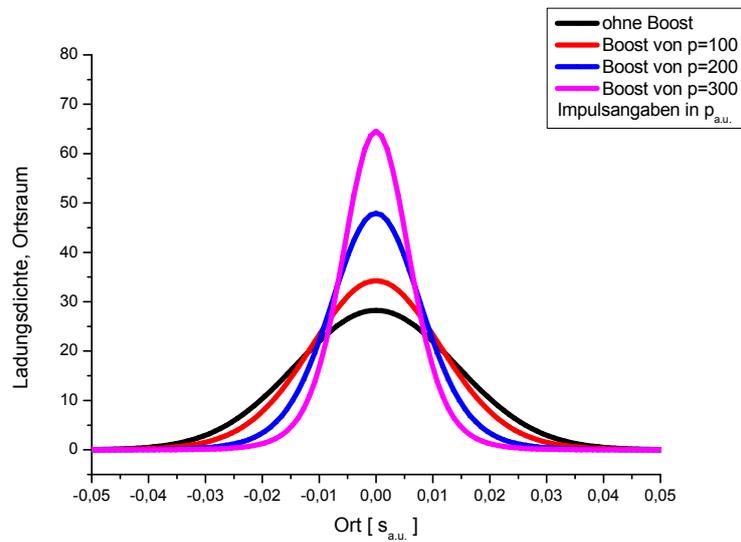


Abbildung 5.4: Ladungsdichte im Ortsraum bei unterschiedlichen Boosts.

Man erkennt, dass das Wellenpaket mit größer werdendem Impuls gestaucht wird. Verantwortlich dafür ist die Lorentzkontraktion in Folge des Boosts. Auf Abbildung 5.5 ist daher die Breite des Wellenpakets in Abhängigkeit des Boost-Impulses aufgetragen. Um die Breite zu bestimmen, wurde an jedem Paket separat ein Gaussfit vorgenommen. Die rote Linie deutet die Erwartung aufgrund der Lorentzkontraktion an, ausgehend von der Breite des Pakets ohne Boost.

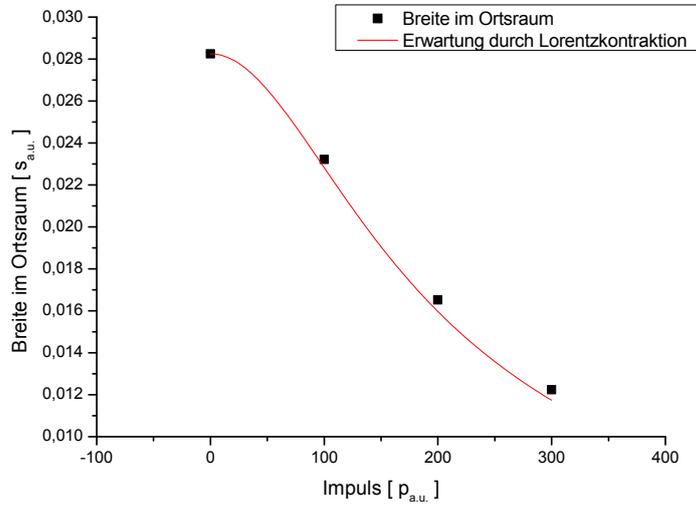


Abbildung 5.5: Vergleich der Breiten einiger Wellenpakete mit der erwarteten Lorentzkontraktion.

Im Folgenden soll noch untersucht werden, welches der mittlere Impuls des in Bewegung befindlichen Wellenpakets ist. Im Impulsraum lässt sich dies mithilfe der Impulsraumfunktion $\hat{\psi}_{lab}(p, 0)$ leicht berechnen. Es zeigt sich, dass dieser mittlere Impuls stark von der Verteilungsbreite σ abhängt. Auf den Abbildungen 5.6 und 5.7 ist daher für Boost-Impulse von $100 p_{a.u.}$ und $300 p_{a.u.}$ die Abhängigkeit des mittleren Impulses von der Breite σ dargestellt.

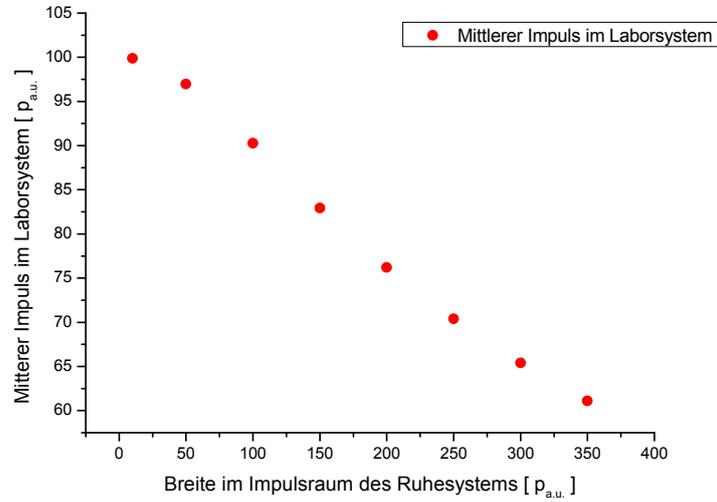


Abbildung 5.6: Mittlerer Impuls eines Wellenpakets in Abhängigkeit von seiner Breite im Impulsraum. Boost $p_0 = 100 p_{a.u.}$.

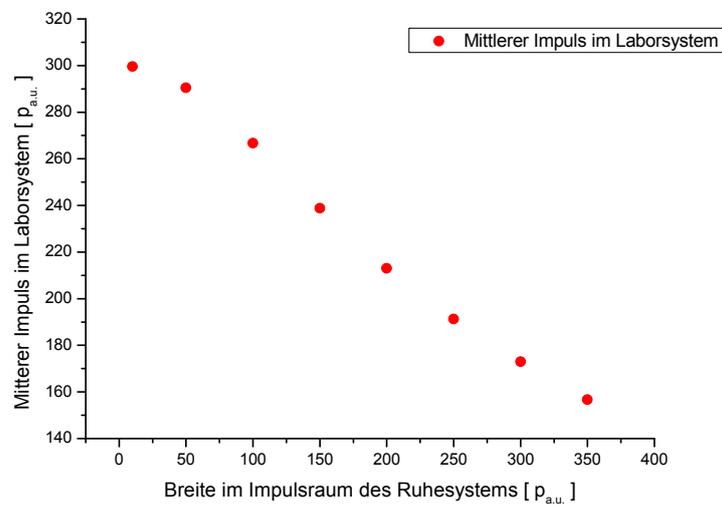


Abbildung 5.7: Mittlerer Impuls eines Wellenpakets in Abhängigkeit von seiner Breite im Impulsraum. Boost $p_0 = 300 p_{a.u.}$.

Je breiter das Wellenpaket desto weniger merkt es also den eigentlichen Boost. Das ist insbesondere wichtig, wenn in Kapitel 6 getestet wird, wie wirksam ein Randpotential Teilchen unterschiedlicher Impulse absorbiert. Um den Impuls eines Teilchens festzulegen, ist dann darauf zu achten, ob es bei einem gegebenen Boost und einer gegebenen Breite den gewünschten mittleren Impuls wirklich erreicht.

In Abb. 5.8 wurde der Plot zur Lorentzkontraktion auf die wirklichen mittleren Impulse der kontrahierten Wellenpakete korrigiert,

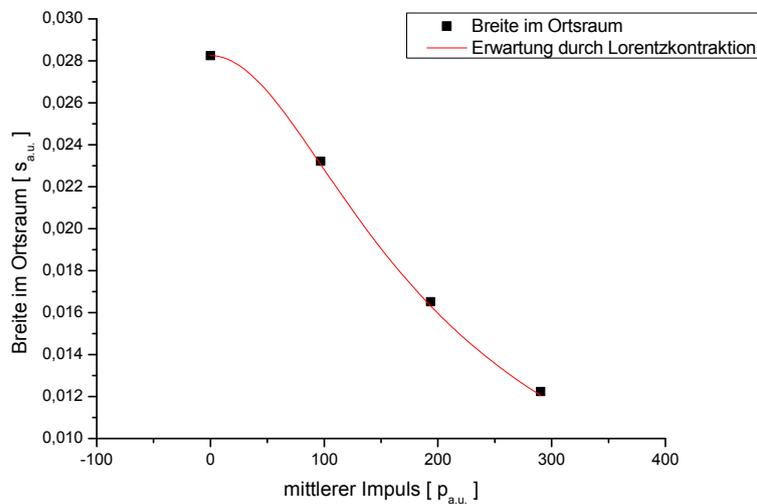


Abbildung 5.8: Vergleich der Breite einiger Wellenpakete mit der erwarteten Lorentzkontraktion. Für den Impuls des Wellenpakets wurde der mittlere Impuls und nicht der Boost-Impuls verwendet.

Das Ergebnis stimmt sogar noch besser mit der Erwartung durch die Lorentzkontraktion überein.

5.2 Ein Wellenpaket für die Dirac Gleichung

Für die numerischen Simulationen in Kapitel 6 wird auch ein Wellenpaket für die Dirac-Gleichung als Anfangsfunktion benötigt. Um dieses zu erhalten, bin ich komplett analog zu Abschnitt (5.1) für die Klein-Gordon Gleichung vorgegangen, und habe zunächst das Wellenpaket eines ruhenden Teilchens in einem zum Laborsystem mit der Geschwindigkeit v bewegten System betrachtet. Dieses lässt sich wieder als Superposition ebener Wellen entwickeln.

Diese haben in der Dirac-Gleichung die Form

$$\psi_{p'}(x', t') = \sqrt{\frac{E_{p'} + mc^2}{2E_{p'}}} \cdot \left(\frac{1}{p'c} \right) \cdot e^{-i \frac{E_{p'}t' - p'x'}{\hbar}} \quad (5.11)$$

. Die ebenen Wellen werden wieder mit einer Gaussverteilung zu einem Wellenpaket überlagert:

$$\begin{aligned} \psi_{rest}(x', t') &= \int dp' \cdot e^{-\frac{p'^2}{2\sigma^2}} \cdot \psi_{p'}(x', t') \\ &= \int dp' \cdot e^{-\frac{p'^2}{2\sigma^2}} \cdot \sqrt{\frac{E_{p'} + mc^2}{2mc^2}} \cdot \left(\frac{1}{p'c} \right) \cdot e^{-i \frac{E_{p'}t' - p'x'}{\hbar}} \\ &= \int dp'^2 c^2 \cdot 2p'_0 \cdot \delta(c^2 \cdot p'_\mu p'^\mu - m^2 c^4) \cdot \theta(cp'_0) \cdot e^{-\frac{p_1'^2}{2\sigma^2}} \cdot \sqrt{\frac{cp'_0 + mc^2}{2mc^2}} \cdot \\ &\quad \left(\frac{1}{p'_1 c} \right) \cdot e^{-i \frac{p'_\mu x'^\mu}{\hbar}} . \end{aligned} \quad (5.12)$$

Man kann nun (5.12) wieder in das Laborsystem transformieren (vgl. (5.3)) und erhält

$$\begin{aligned} \psi_{lab}(x, t) &= \int \frac{dp}{2E_p} \cdot 2(\gamma E_p - \gamma \beta pc) \cdot e^{-\frac{\gamma p - \gamma \beta \frac{E_p^2}{c}}{2\sigma^2}} \sqrt{\frac{\gamma E_p - \gamma \beta pc + mc^2}{2mc^2}} \cdot \\ &\quad \cdot \left(\frac{1}{\gamma pc - \gamma \beta E_p} \right) \cdot e^{-i \frac{E_p t - px}{\hbar}} . \end{aligned} \quad (5.13)$$

Normiert man jetzt wieder $\psi_{lab}(x, t)$, dann erhält man das Wellenpaket, das ich in den folgenden Simulationen als Anfangswellenfunktion für die Dirac-Gleichung benutzt habe.

Kapitel 6

Simulationen in der Bachelorarbeit - Effektivität des imaginären Randpotentials

In meiner Bachelorarbeit habe ich mit C++ Programme zum Lösen der eindimensionalen Schrödinger-, Klein-Gordon- und Dirac-Gleichung geschrieben. Alle drei Programme basieren auf dem Crank-Nicolson-Verfahren, die Klein-Gordon-Gleichung wurde hierfür in der Hamilton'schen, zweikomponentigen Form betrachtet.

6.1 Absorbtiionswirkung in Schrödinger-, Klein-Gordon- und Dirac-Gleichung im nichtrelativistischen Grenzfall

Zunächst habe ich im nichtrelativistischen Grenzfall die Wirkung des imaginären Potentials in der Schrödinger-, Klein-Gordon- und Dirac-Gleichung verglichen. Die drei Gleichungen wurden dafür auf einem Intervall der Länge $5 s_{a.u.}$ gelöst. Das Raugitter enthielt 2048 Punkte und ein Zeitschritt betrug $10^{-5} t_{a.u.}$. Als Startwellenfunktion wurden jeweils die oben hergeleiteten Wellenpakete für die Klein-Gordon- und die Dirac-Gleichung bzw. ein gewöhnliches gaussförmiges Wellenpaket für die Schrödinger-Gleichung verwendet. Alle drei Wellenpakete haben zu Beginn im Ortsraum eine Breite von $0,3 s_{a.u.}$. Ihr Anfangsimpuls wird variiert von $10 p_{a.u.}$ bis $35 p_{a.u.}$. Im nichtrelativistischen Grenzfall kommt es nicht zu dem oben diskutierten Phänomen, dass Boost-Impuls und mittlerer Impuls der Wellenpakete in Dirac- und Klein-Gordon-Gleichung nicht übereinstimmen.

Im Abstand von $0,5 s_{a.u.}$ von den Rändern des Intervalls beginnt jeweils ein negativ imaginäres, lineares Randpotential. Die Wellenfunktionen starten in der Mitte des Intervalls. Das Szenario ist in Abb. 6.1 dargestellt.

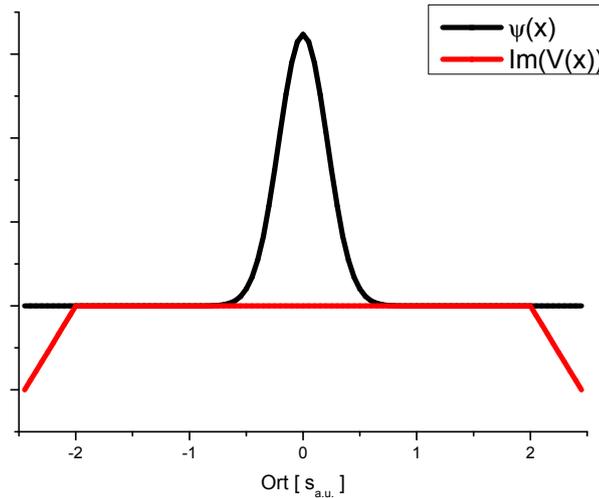


Abbildung 6.1: Das Szenario, das in diesem Abschnitt berechnet wird. Ein Wellenpaket startet in der Mitte des berechneten Intervalls und bewegt sich auf ein negativ imaginäres Potential am Rand des Intervalls zu.

Die Einschränkungen, die in Kapitel 4 für das absorbierende Randpotential aufgestellt wurden, waren durch

$$\frac{\hbar p c^2}{4\Delta x E_p} \ll V_{IM} \ll \frac{p^3 c^2 \Delta x}{\hbar 2 E_p}. \quad (6.1)$$

gegeben. Dabei war V_{IM} der mittlere Betrag von $V(x)$ und Δx hat in diesem Abschnitt den Wert $0,5 s_{a.u.}$. In Abb. 6.2 ist die Abhängigkeit der beiden Schranken aus (6.1) vom Impuls p dargestellt. Diese stimmen im nichtrelativistischen Grenzfall näherungsweise mit den Grenzen Neuhausers und Baers für die Schrödinger-Gleichung überein. Die blaue Linie in Abb. 6.2 stellt den Wert dar, der in diesem Abschnitt für V_{IM} gewählt wurde. Ich habe nun überprüft, wie gut das so gewählte Potential verschiedene Impulse absorbiert, indem ich in allen drei Gleichungen die Wellenpakete mit Impulsen von $10 p_{a.u.}$ bis $35 p_{a.u.}$ auf den Rand Gitters treffen ließ.

Auf den Abbildungen 6.3 bis 6.6 sehen Sie die Absorbitionsverläufe der drei Wellenpakete und anschließend die insgesamt absorbierte Norm bei unterschiedlichen Impulsen in Abb. 6.7.

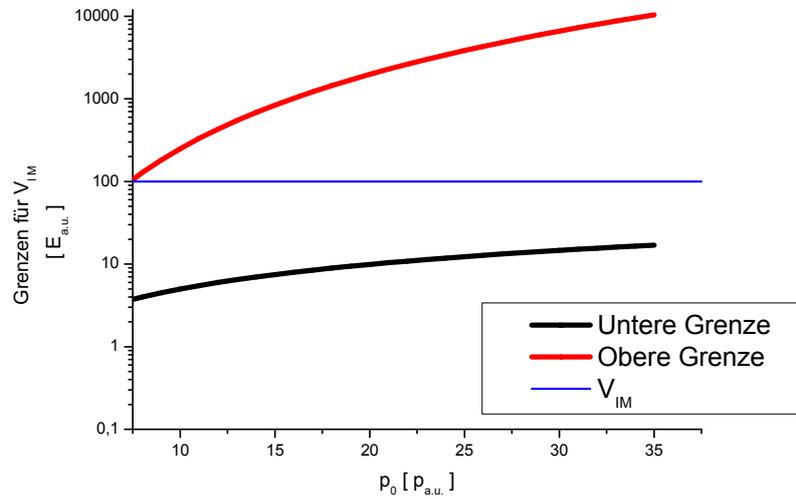


Abbildung 6.2: Darstellung der eingrenzenden Bedingungen für das Randpotential. Die roten Punkte stellen die rechte Seite von (6.1), die schwarzen Punkte die linke Seite dar. Die blaue Linie steht für den Wert von V_{IM} , der in diesem Abschnitt für das Randpotential gewählt wurde.

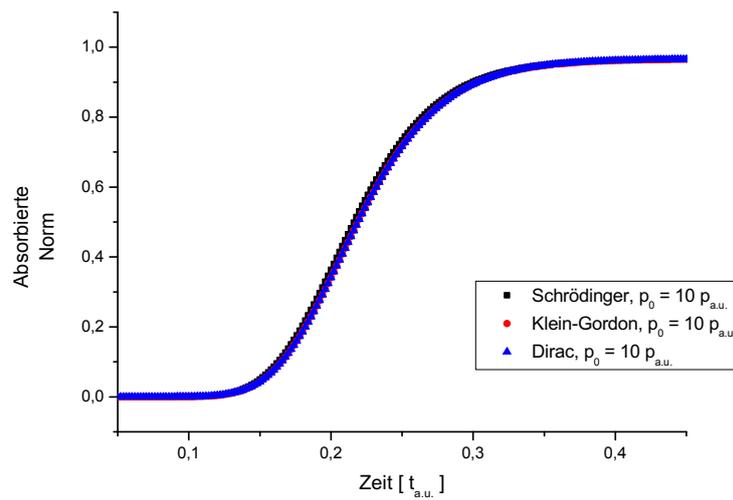


Abbildung 6.3: Absorptionsverlauf für $p = 10 p_{a.u.}$.

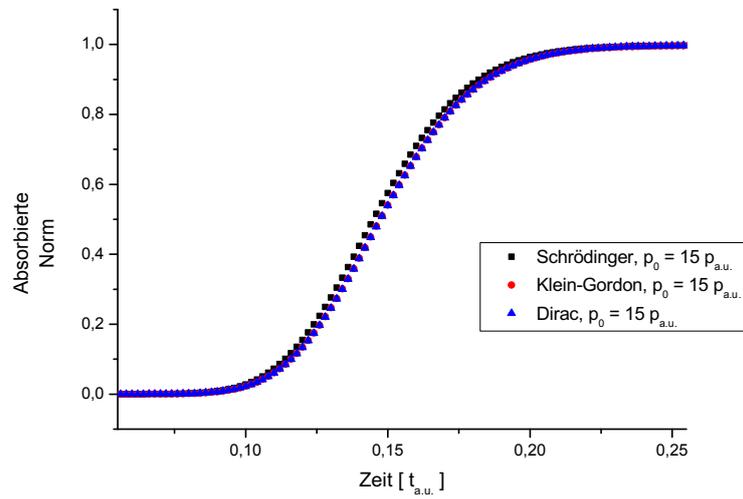


Abbildung 6.4: Absorbtionsverlauf für $p = 15 p_{a.u.}$.

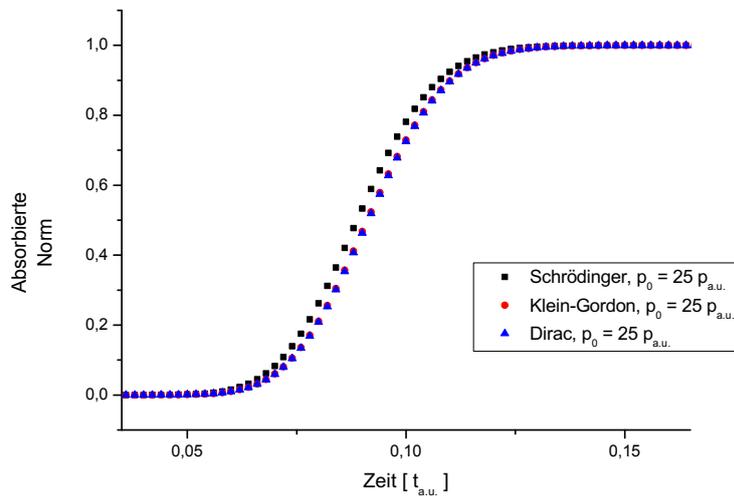


Abbildung 6.5: Absorbtionsverlauf für $p = 25 p_{a.u.}$.

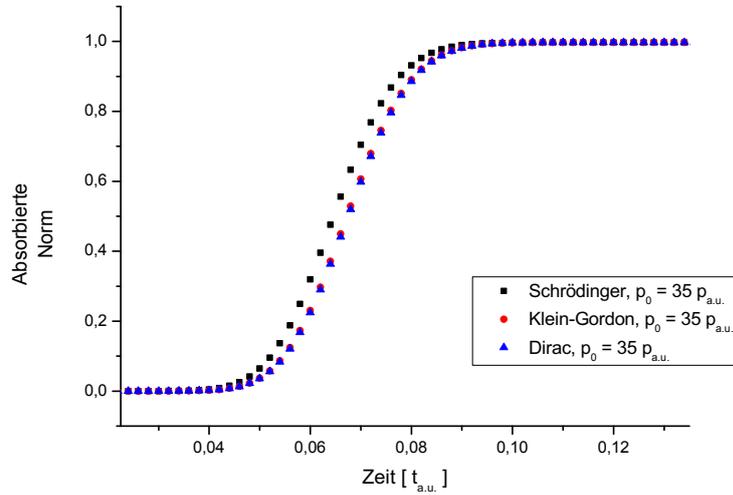


Abbildung 6.6: Absorptionsverlauf für $p = 35 p_{a.u.}$.

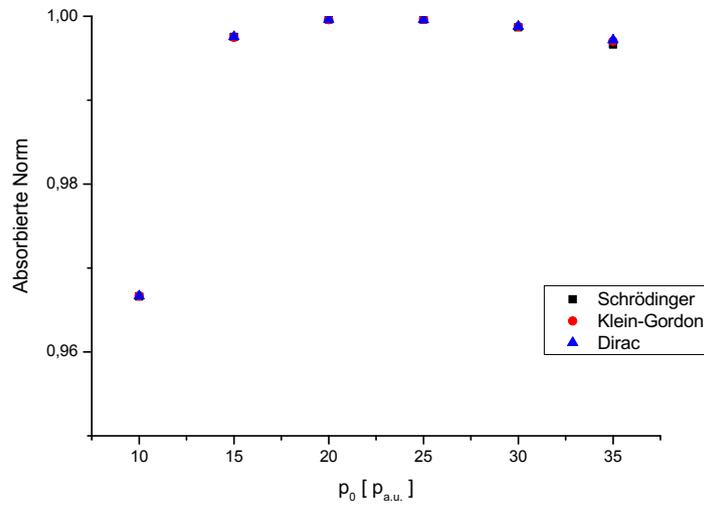


Abbildung 6.7: Die Gesamtabsorption in Abhängigkeit vom mittleren Impuls der Wellenpakete. Die Kollision mit dem Intervallrand wurde dabei als beendet betrachtet, wenn sich die Norm der Wellenpakete über eine Zeit von $0.002 t_{a.u.}$ um höchstens $5 \cdot 10^{-5}$ änderte. Eine solche Grenze muss gesetzt werden, da bei beliebig langer Laufzeit das Wellenpaket reflektiert und am gegenüberliegenden Intervallrand erneut absorbiert wird.

Der Verlauf stimmt für die Dirac- und die Klein-Gordon-Gleichung bei jedem Impuls gut überein. Es ergeben sich jedoch mit wachsendem Impuls größer werdende Abweichungen zur Schrödinger Gleichung. Es handelt sich um Abweichungen aufgrund der Relativitätstheorie, denn obwohl die drei Wellenpakete in allen drei Abbildungen den selben Impuls aufweisen, besitzen die Wellenpakete für Dirac- und Klein-Gordon-Gleichung im Vergleich zur Schrödinger-Gleichung eine immer geringere Geschwindigkeit. In Folge dessen treten sie erst später in das absorbierende Potential ein.

In Abb. 6.7 kann man sehen, dass die letztendlich erreichten Gesamtabsorbtionen in allen drei Gleichungen gut übereinstimmen. Das zeigt insbesondere, dass die verwendeten Wellenpakete im nichtrelativistischen Bereich äquivalent sind und dass auch die aufgestellten Bedingungen für das absorbierende Randpotential bei niedrigen Impulsen in den drei Gleichungen übereinstimmen.

Das gewählte Randpotential (vgl. blaue Linie in Abb. 6.2) liegt für kleine Impulse dicht an der oberen Grenze aus (6.1) und nähert sich für große Impulse der unteren Grenze. Das korrespondiert zu den Gesamtabsorbtionen aus Abb. 6.7.: In einem kleinen Impulsbereich werden die Wellenpakete zu mehr als 99,9% absorbiert (für $p = 20 \text{ a.u.}$ und $p = 25 \text{ a.u.}$). Jenseits dieses Bereichs fällt die Absorbtion wieder ab. Für $p = 10 \text{ a.u.}$ sinkt sie sogar auf unter 95%, während bei den anderen Impulsen stets mehr als 99% des Wellenpakets absorbiert werden. Schaut man auf Abb. 6.2, wird deutlich, dass die rechte Seite von (6.1) für $p = 10 \text{ a.u.}$ nur schlecht erfüllt ist. Teile der Welle werden daher schon am Potential selbst reflektiert.

Um den Absorbtionverlauf zu veranschaulichen, ist in den Abbildungen 6.8, 6.9 und 6.10 die Bewegung des Wellenpakets in der Schrödinger-, Dirac- und Klein-Gordon-Gleichung für einen Impuls von $20 p_{a.u.}$ dargestellt. Die Abbildungen 6.11 bis 6.15 zeigen im Vergleich dazu die Bewegung eines Klein-Gordon-Wellenpakets ohne absorbierendes Randpotential.

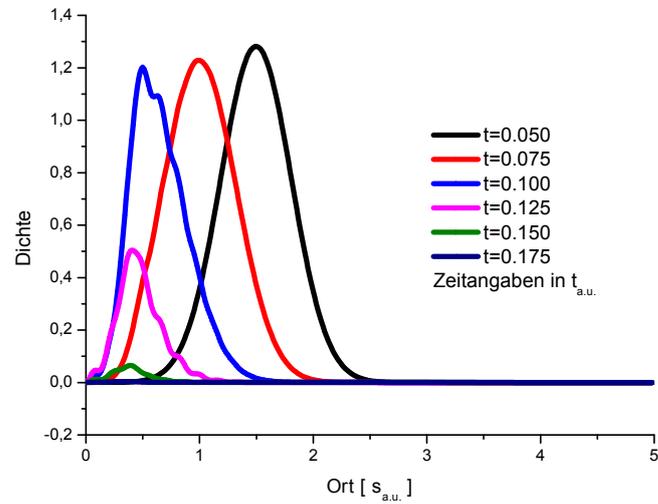


Abbildung 6.8: Bewegung des Wellenpakets in der Schrödinger-Gleichung bei einem Impuls von $20 p_{a.u.}$. Das absorbierende Potential befindet sich auf einem Streifen von $0.5 s_{a.u.}$ am Rand des Gitters. Teile des Wellenpakets gelangen bis zum Gitterrand und werden reflektiert. Diese Reflektionen schaffen es jedoch nicht, den Randbereich wieder zu verlassen. Die Zeiten sind in atomaren Einheiten gegeben.

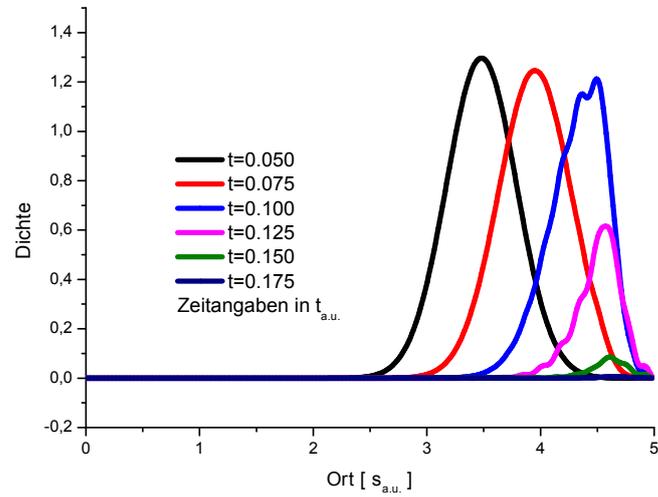


Abbildung 6.9: Bewegung des Wellenpakets in der Klein-Gordon-Gleichung bei einem Impuls von $20 p_{a.u.}$. Zur Anschaulichkeit läuft das Wellenpaket in die entgegengesetzte Richtung.

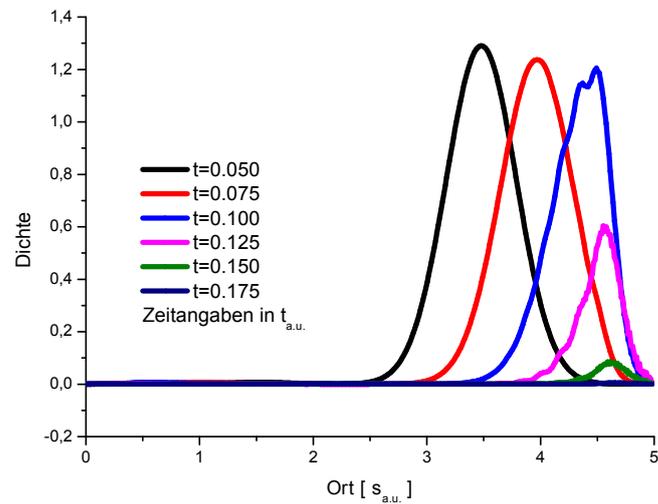


Abbildung 6.10: Bewegung des Wellenpakets in der Dirac-Gleichung bei einem Impuls von $20 p_{a.u.}$.

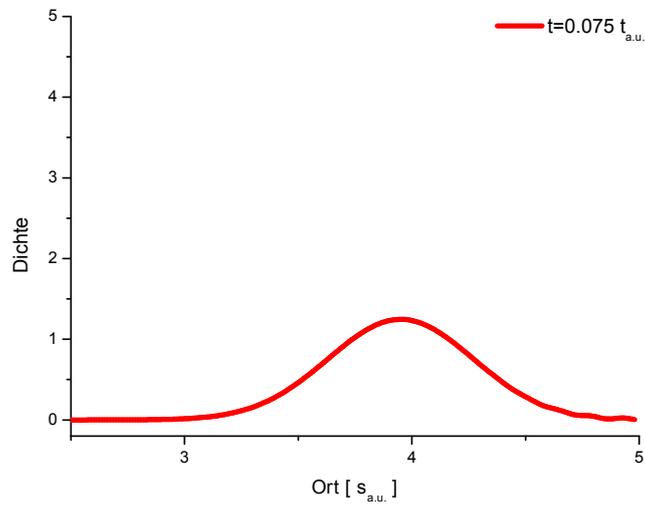


Abbildung 6.11: Bewegung des Wellenpakets in der Klein-Gordon-Gleichung. Der Impuls beträgt erneut $20 p_{a.u.}$, es wurde jedoch kein Randpotential installiert. Die Fortsetzung des Verlaufs ist auf den Abbildungen 6.12 bis 6.15 zu sehen.

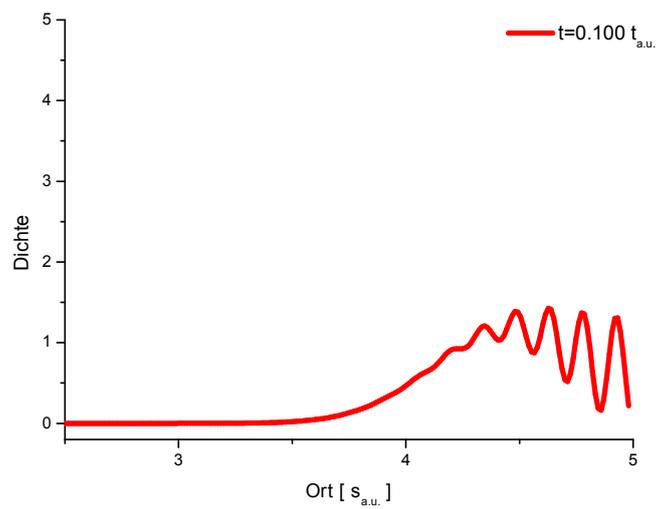


Abbildung 6.12: Fortsetzung des Wellenpaketverlaufs.

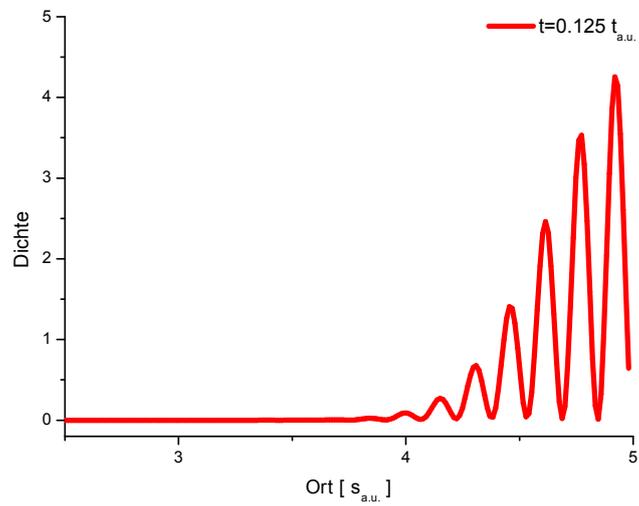


Abbildung 6.13: Fortsetzung des Wellenpaketverlaufs.

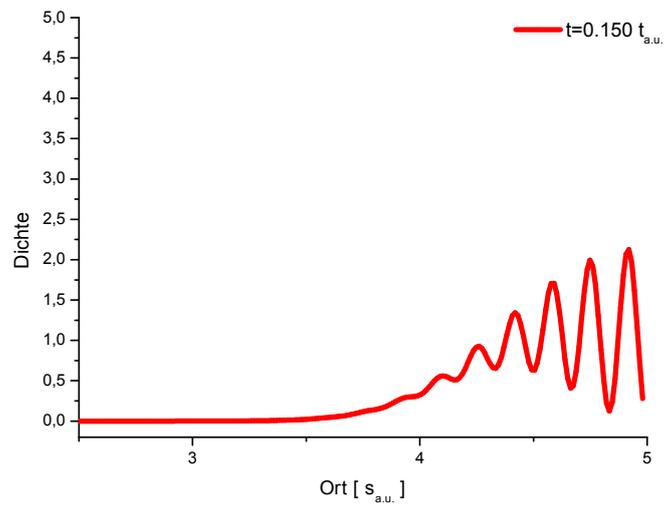


Abbildung 6.14: Fortsetzung des Wellenpaketverlaufs.

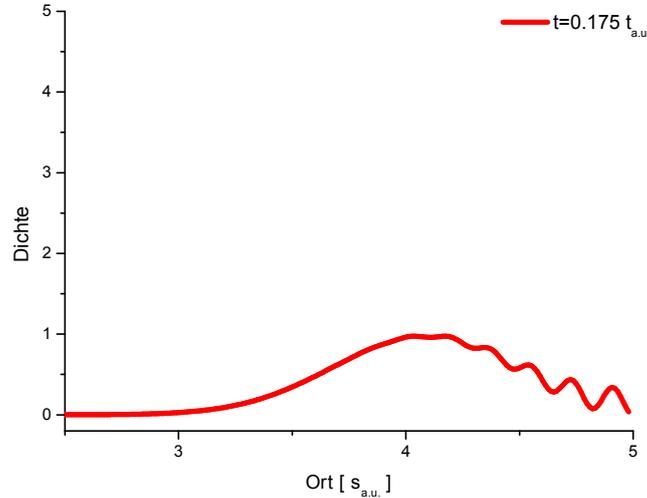


Abbildung 6.15: Fortsetzung des Wellenpaketverlaufs.

6.2 Absorbtion in Dirac- und Klein-Gordon-Gleichung für relativistische Impulse

Als nächstes habe ich die Absorbtionsfähigkeit des linearen, negativ imaginären Potentials in der Klein-Gordon- und der Dirac-Gleichung bei relativistischen Impulsen untersucht. Das betrachtete Intervall hat in diesem Abschnitt eine Länge von $2 s_{a.u.}$. Das Gitter besteht nun aus 10000 Punkten und ein Zeitschritt beträgt nachwievor $10^{-5} t_{a.u.}$. Das absorbierende Potential wurde auf einem Streifen der Breite $0.2 s_{a.u.}$ installiert. Das untersuchte Wellenpaket wird im Impulsraum stets mit der Breite $\sigma = 10 p_{a.u.}$ gewählt und der Impuls des Boosts wird von $50 p_{a.u.}$ bis $600 p_{a.u.}$ variiert. Die Breite im Impulsraum musste hier sehr klein gewählt werden, damit der mittlere Impuls des Wellenpakets in guter Näherung dem Impuls des Boosts entspricht (vgl. Abschnitt 5.1).

In Abb. 6.16 sind für dieses Szenario analog zu Abb. 6.2 die obere und untere Schranke für den mittleren Wert V_{IM} des absorbierenden Potentials dargestellt. V_{IM} hat in diesem Abschnitt etwa den Wert $2200 E_{a.u.}$, denn es zeigt sich, dass dieser Wert über einen großen Impulsbereich zwischen den beiden Grenzen (siehe Abb. 6.16) liegt.

In den Abbildungen 6.17 bis 6.21 sind die Absorbtionsverläufe in der Dirac- und Klein-Gordon-Gleichung bei verschiedenen Impulsen gegenübergestellt. In Abb. 6.22 wird die erreichte Gesamtabsorbtion in Abhängigkeit vom

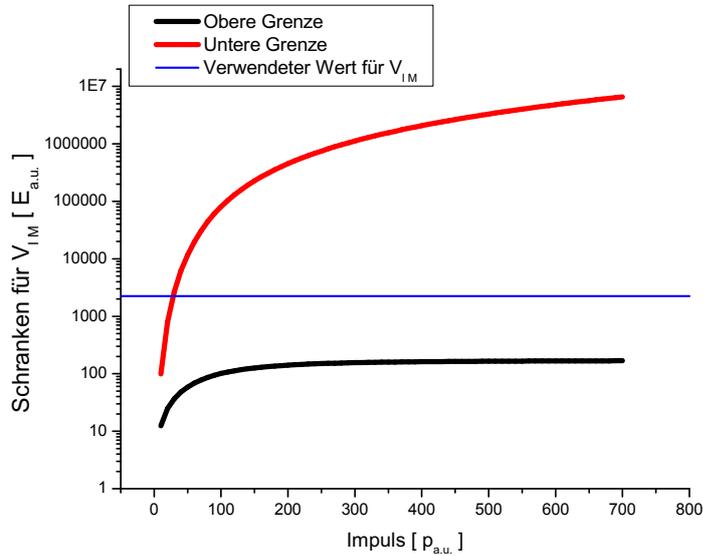


Abbildung 6.16: Darstellung der eingrenzenden Bedingungen für das Randpotential. Die roten Punkte stellen die rechte Seite von (6.1), die schwarzen Punkte die linke Seite dar. Auch hier steht die blaue Linie für den Wert von V_{IM} , der in diesem Abschnitt für das Randpotential gewählt wurde.

Impuls des Wellenpakets zusammengefasst. Offenbar sind die Absorptionsverläufe für die Dirac- und die Klein-Gordon-Gleichung weitgehend identisch. Etwa ab einem Impuls von $400 p_{a.u.}$ treten aber leichte Abweichungen zwischen beiden Wellenpaketen auf. Es zeigt sich, dass dies auf den größer werdenden Fehler der numerischen Methode zurückzuführen ist. Ich werde das weiter unter näher erläutern. Zunächst sollen jedoch die in Abb. 6.22 dargestellten Gesamtabsorbtionen diskutiert werden. Für einen mittleren Impuls der Wellenpakete von $50 p_{a.u.}$ ist diese am geringsten. Wie in Abb. 6.16 zu sehen, liegt das gewählte Potential in diesem Impulsbereich dicht an der oberen Schranke, d.h. bei niedrigen Impulsen ist die Reflektion am Potential selbst der größte Störeffekt. Für größere Impulse liegt die Absorbtion in einem weiten Bereich über 99.9%. Sie sinkt jedoch mit steigendem Impuls wieder und liegt ab $p = 400 p_{a.u.}$ erneut unter 99.9%. Der Grund hierfür ist, dass das verwendete Potential sich bei hohen Impulsen wieder der unteren Schranke aus Abb. 6.16. nähert. Das Wellenpaket enthält also immer mehr hohe Impulsanteile, die schnell genug sind, um den Absorbtionsbereich noch vor der vollständigen Absorbtion zu verlassen. Da die Lichtgeschwindigkeit nicht überschritten werden kann, flacht die Absorbtionskurve bei hohen Impulsen aber ab. Bei sehr hohen Impulsen wird die Absorbtionsfähigkeit also nahezu

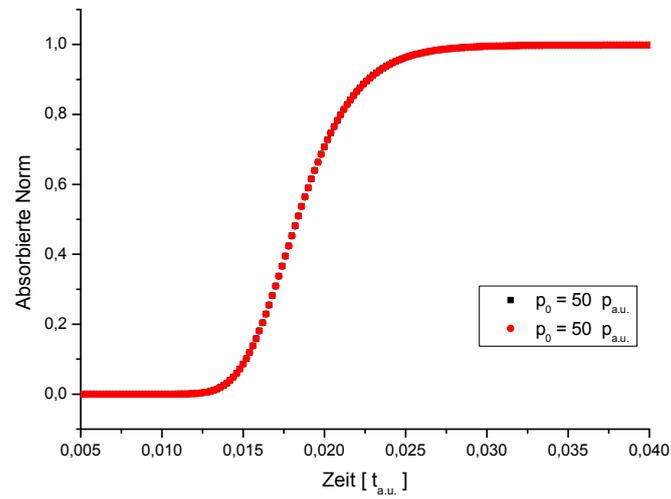


Abbildung 6.17: Absorbtionsverlauf für $p = 50 p_{a.u.}$

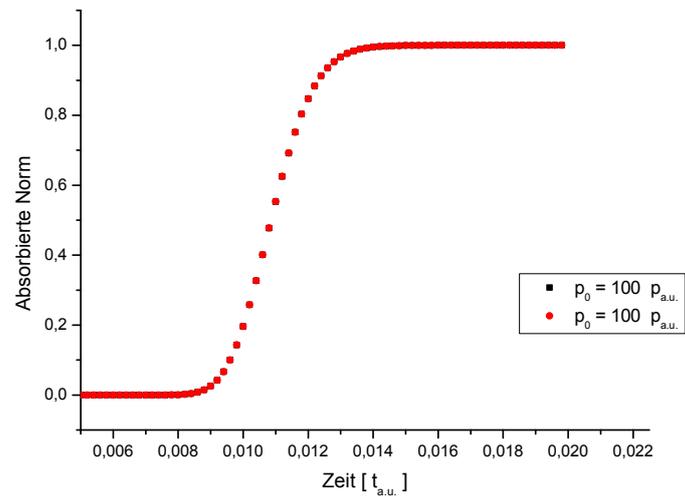


Abbildung 6.18: Absorbtionsverlauf für $p = 100 p_{a.u.}$

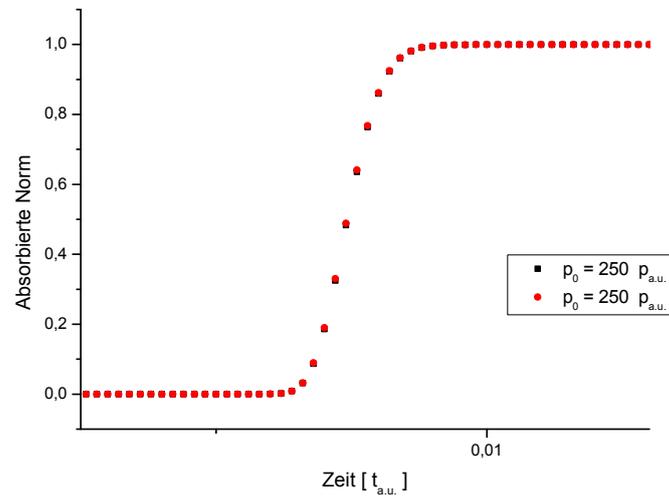


Abbildung 6.19: Absorbtionsverlauf für $p = 250 \text{ p.a.u.}$

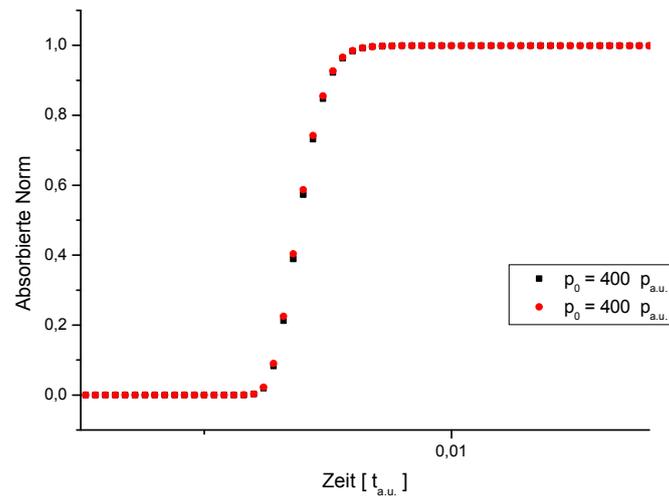


Abbildung 6.20: Absorbtionsverlauf für $p = 400 \text{ p.a.u.}$

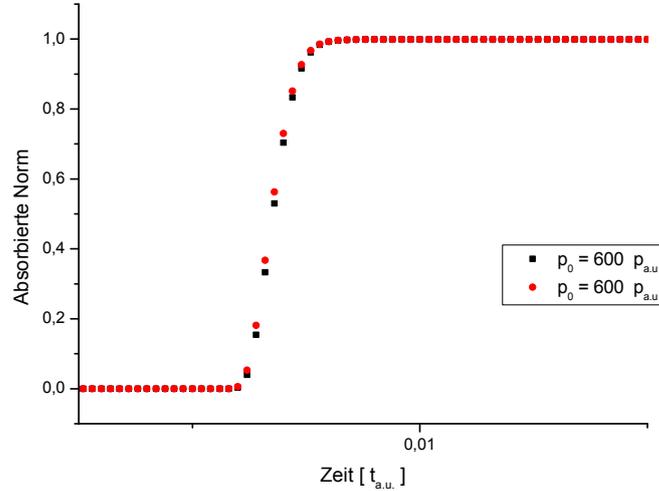


Abbildung 6.21: Absorptionsverlauf für $p = 600 p_{a.u.}$

konstant.

Auch in Abb. 6.22 sieht man, dass bei hohen Impulsen scheinbar Abweichungen zwischen Dirac- und Klein-Gordon-Gleichung auftraten. Das ist aber nur ein numerischer Effekt, der sich bei der Wahl einer kleineren Zahl von Gitterpunkten sogar noch deutlicher zeigt. In Abb. 6.23 und Abb. 6.24 wird dies bei einem Impuls von $250 p_{a.u.}$ und für einen Impuls von $600 p_{a.u.}$ demonstriert. Ein Impuls von $p = 600 p_{a.u.}$ entspricht einer Wellenlänge von

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p} \approx 0.01 \text{ a.u.} \quad (6.2)$$

Die Auflösung des Gitters entspricht bei 10000 Gitterpunkten $0.0002 s_{a.u.}$, und bei 2048 Gitterpunkten etwa $0.001 s_{a.u.}$. Da sich die ursprüngliche Impulsraumbreite des Wellenpakets durch den Boost vergrößert (vgl. Abbildung 5.3 in Abschnitt 5.1), treten hohe Impulsanteile auf, die vom Gitter nur noch unzureichend repräsentiert werden. Das Wellenpaket verlangsamt sich dadurch (siehe Abb. 6.23).

Zur Veranschaulichung der Wellenbewegung zeige ich in den Abbildungen 6.25 und 6.26 noch einmal den Verlauf des Wellenpakets im Ortsraum bei einem Impuls von $100 p_{a.u.}$. Die Abbildungen 6.27 bis 6.30 zeigen im Vergleich dazu die Reflexion eines Klein-Gordon-Wellenpakets ohne absorbierendes Randpotential.

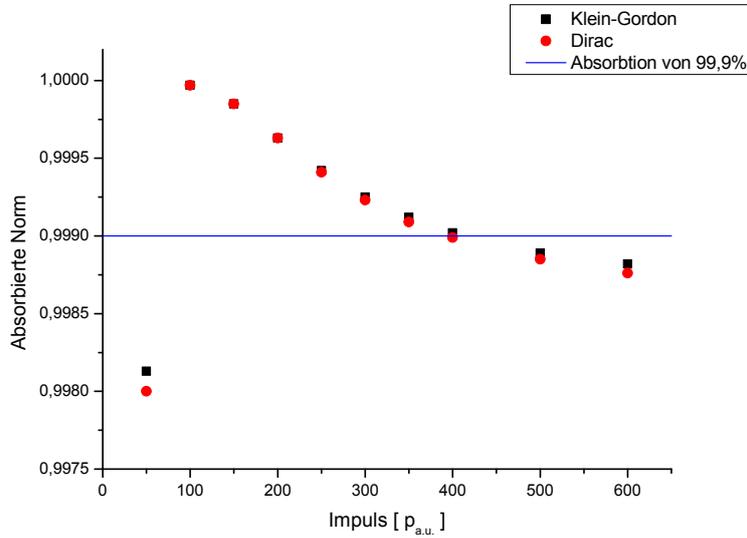


Abbildung 6.22: Insgesamt absorbierte Norm in Abhängigkeit vom Impuls des Wellenpakets. Die Kollision mit dem Intervallrand gilt wieder als abgeschlossen, wenn sich die Norm des Wellenpakets in einer Zeit von $0.002 t_{a.u.}$ um höchstens $5 \cdot 10^{-5}$ ändert. Dieses Kriterium ist am Ende der Simulation bei $p = 50 p_{a.u.}$ nur knapp und bei allen anderen Impulsen stark übererfüllt.

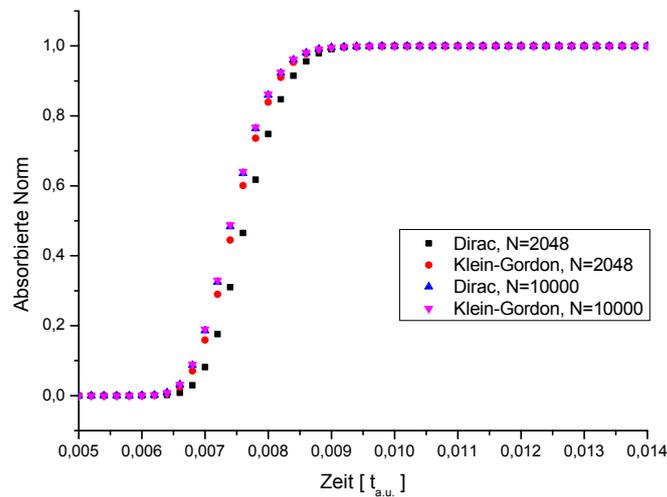


Abbildung 6.23: Für $p = 250 p_{a.u.}$ sind die Absorptionsverläufe bei 2048 Gitterpunkten und bei 10000 Gitterpunkten dargestellt.

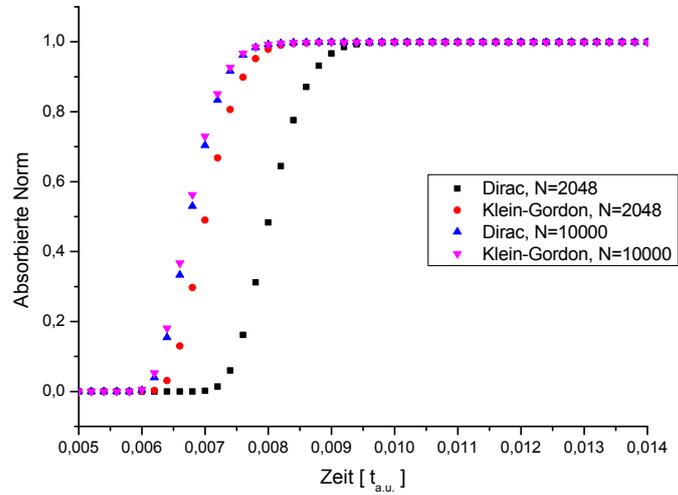


Abbildung 6.24: Absorptionsverläufe für $p = 600 p_{a.u.}$ bei 2048 Gitterpunkten und bei 10000 Gitterpunkten. Selbst bei 10000 Gitterpunkten zeigen sich nun leichte Abweichungen zwischen dem Dirac- und dem Klein-Gordon-Wellenpaket.

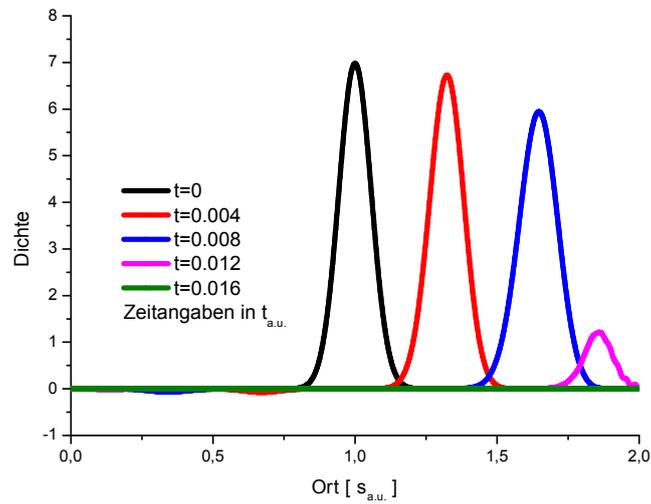


Abbildung 6.25: Bewegung eines Wellenpakets mit einem Impuls von $100 p_{a.u.}$ in der Klein-Gordon-Gleichung. Das absorbierende Potential befindet sich am Rand in einem Streifen der Breite $0.2 s_{a.u.}$.

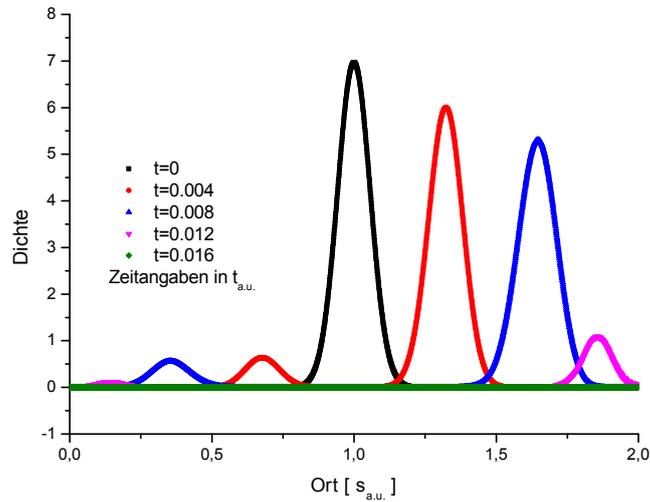


Abbildung 6.26: Bewegung eines Wellenpakets mit einem Impuls von $100 p_{a.u.}$ in der Dirac-Gleichung. Bei hohen Impulsen enthalten beide Wellenpakete Anteile negativer Energie, die sich in entgegengesetzter Richtung zu den positiven Energieanteilen bewegen. Im für die Dirac-Gleichung konstruierten Wellenpaket sind die negativen Energieanteile jedoch deutlich höher.

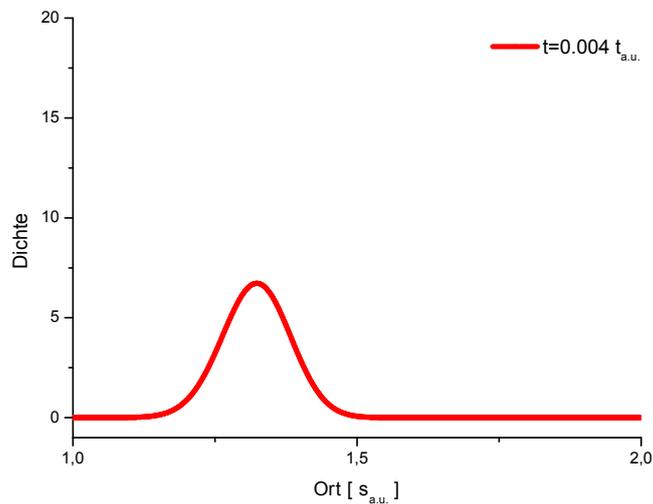


Abbildung 6.27: Bewegung des Klein-Gordon-Wellenpakets ohne absorbierendes Potential. Die Fortsetzung des Verlaufs ist auf den Abbildungen 6.28 bis 6.30 zu sehen.

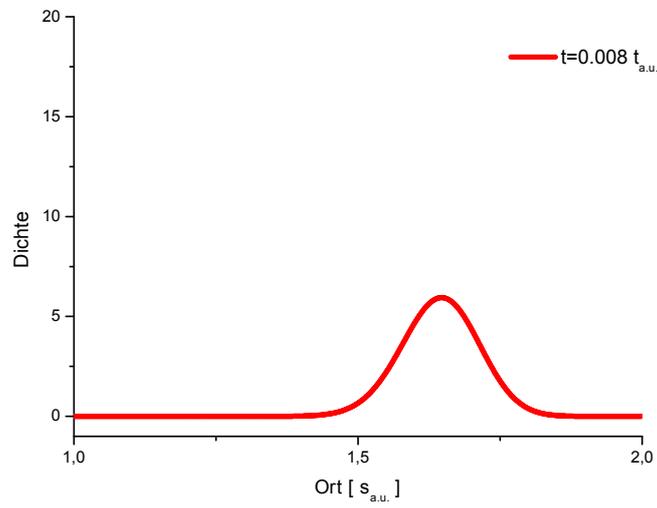


Abbildung 6.28: Fortsetzung des Wellenverlaufs.

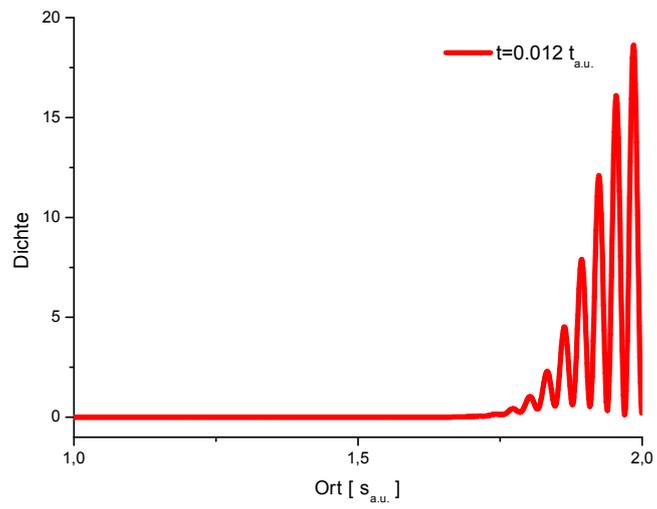


Abbildung 6.29: Fortsetzung des Wellenverlaufs.

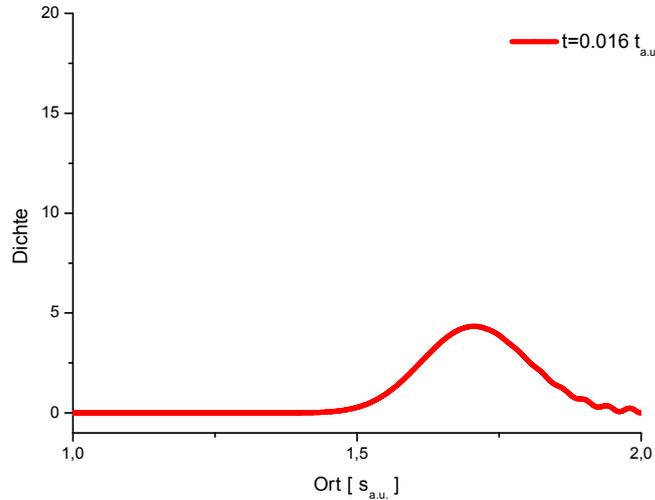


Abbildung 6.30: Fortsetzung des Wellenverlaufs.

6.3 Ergänzung zu Abschnitt 4.2

Abschließend will ich in diesem Abschnitt demonstrieren, dass in der Klein-Gordon-Gleichung auch bei gleichzeitiger Anwesenheit von positiver und negativer Ladungsdichte im Randbereich die absorbierende Wirkung des imaginären Potentials erhalten bleibt. In Abb. 6.31 bewegen sich ein Paket mit positiver und ein Paket mit negativer Ladungsdichte auf den absorbierenden Rand zu. Es zeigt sich, dass beide Pakete fast vollständig absorbiert werden.

Um zu motivieren, warum keine gegenseitige Beeinflussung zwischen den Bereichen positiver und negativer Ladungsdichte stattfindet, kann man zum Beispiel einen Blick auf die Zeitentwicklung der Wellenfunktion in der Klein-Gordon-Gleichung werfen. Verwendet man ein negativ imaginäres Potential, so lautet diese

$$\psi(x, t + \Delta t) = e^{-i \frac{\hat{H} \Delta t}{\hbar}} \psi(x, t) \quad (6.3)$$

mit dem Hamiltonoperator

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} (\sigma_3 + i\sigma_2) + mc^2 \sigma_3 - iV_I(x). \quad (6.4)$$

Es wurde dabei die zweikomponentige Form der Gleichung benutzt. Teilt man den Hamiltonoperator in den Operator \hat{H}_0 eines freien Teilchens und

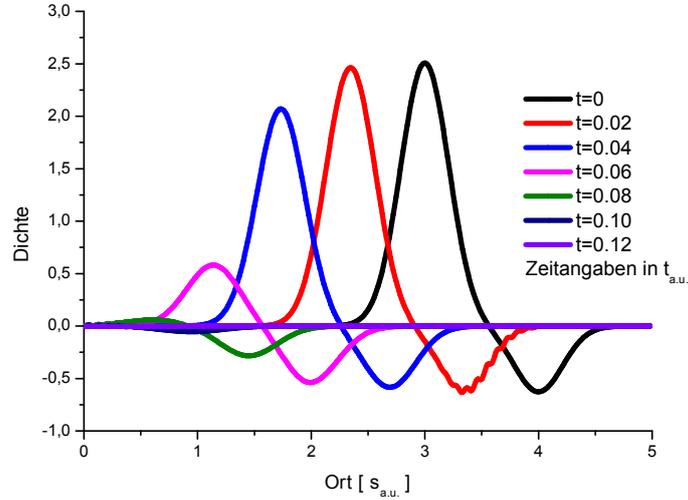


Abbildung 6.31: Positive und negative Ladungsdichte treffen auf das imaginäre Potential. Der absorbierende Bereich beginnt hier schon bei $2 s_{a.u.}$

das Potential auf, so wird (6.3) zu

$$\psi(x, t + \Delta t) = e^{(-i \frac{(\hat{H}_0 - iV_I(x))\Delta t}{\hbar})} \psi(x, t) \quad (6.5)$$

$$= e^{-\frac{V_I(x)\Delta t}{\hbar}} e^{-i \frac{\hat{H}\Delta t}{\hbar}} \psi(x, t) + \mathcal{O}(\Delta t^2) \quad (6.6)$$

Daran erkennt man, dass das imaginäre Potential auf beide Komponenten der Wellenfunktion

$$\psi(x, t) = \begin{pmatrix} \psi_1(x, t) \\ \psi_2(x, t) \end{pmatrix} \quad (6.7)$$

eine ausschließlich dämpfende Wirkung hat. Die Ladungsdichte am Ort x ist durch

$$\rho(x, t) = |\psi_1(x, t)|^2 - |\psi_2(x, t)|^2 \quad (6.8)$$

gegeben, sodass man für den Betrag der Ladungsdichte zum Zeitpunkt $t + \Delta t$ folgendes Ergebnis erhält:

$$|\rho(x, t + \Delta t)| = e^{-2 \frac{V_I(x)\Delta t}{\hbar}} |\rho(x, t)| + \mathcal{O}(\Delta t^2). \quad (6.9)$$

Die dämpfende Wirkung des imaginären Potentials ist also ausschließlich lokal. Die beiden Wellenpakete werden daher so abgedämpft, als wären sie einzeln in den absorbierenden Bereich eingetreten.

Kapitel 7

Zusammenfassung und Ausblick

In meiner Arbeit habe ich untersucht, wie man numerische Randartefakte in der relativistischen Quantenmechanik unterdrücken kann. Für die nichtrelativistische Quantenmechanik sind hierfür bereits effektive Methoden entwickelt worden. Insbesondere der Einsatz von imaginären Potentialen am Rand eines numerischen Gitters ist für die Schrödinger-Gleichung weit verbreitet. Ich habe diesen Ansatz in der vorliegenden Arbeit auf die Gleichungen der relativistischen Quantenmechanik, also auf die Dirac- und die Klein-Gordon-Gleichung, übertragen.

In [1] haben D. Neuhauser und M. Baer beschrieben, wie man in der Schrödinger-Gleichung mit einem linearen, imaginären Potential Reflexionen am Rand eines numerischen Gitters vermeiden kann. Aufbauend auf ihrer Argumentation konnte ich Bedingungen aufstellen, unter denen ein solches Potential auch für die Dirac- und die Klein-Gordon-Gleichung gute Absorptionseigenschaften aufweist. Wählt man das Potential von der Form

$$\begin{aligned} V(x) &= -2iV_M \frac{x_r - x}{x_r - x_l} && , \text{ falls } x_l \leq x \leq x_r \\ &= 0 && , \text{ falls } x > x_r, \end{aligned} \quad (7.1)$$

dann muss sein mittlerer Betrag V_{IM} die Ungleichung

$$\frac{\hbar p c^2}{4\Delta x E_p} \ll V_{IM} \ll \frac{p^3 c^2 \Delta x}{2\hbar E_p} \quad (7.2)$$

erfüllen um auftreffende Wellen mit dem Impuls p zu absorbieren. Soll ein Wellenpaket am Gitterrand absorbiert werden, muss (7.2) also für alle signifikanten Impulsanteile des Pakets erfüllt sein.

Um meine theoretischen Ergebnisse zu überprüfen, habe ich in Computersimulationen Wellenpakete mit verschiedenen mittleren Impulsen auf ein

Randpotential der Form (7.1) treffen lassen. Für nichtrelativistische Impulse verwendete ich einen Absorbtiionsstreifen der Breite $0,5 s_{a.u.}$ mit einer mittleren Potentialhöhe von $100 E_{a.u.}$. Damit konnten im Bereich von $p = 15 p_{a.u.}$ bis $p = 35 p_{a.u.}$ beim Auftreffen des Pakets mehr als 99% der Ladungs- bzw. Wahrscheinlichkeitsdichte absorbiert werden.

Für relativistische Impulse besitzt schon ein Absorbtiionsstreifen von $0,2 s_{a.u.}$ mit einer mittleren Potentialhöhe von etwa $2000 E_{a.u.}$ sehr gute Absorbtiionseigenschaften. Im gesamten Bereich von $p = 50 p_{a.u.}$ bis $p = 600 p_{a.u.}$ betrug die Absorbtiion nach dem Auftreffen des Wellenpakets auf den Gitterrand über 99,8%.

Ich komme daher in meiner Bachelorarbeit zu dem Ergebnis, dass ein imaginäres Potential der Form (7.1) gut in der Lage ist, numerischen Randartefakte in Simulationen der Dirac- und der Klein-Gordon-Gleichung zu unterdrücken. Ein wesentlicher Unterschied zur Schrödinger-Gleichung ist insbesondere, dass die Absorbtiionsfähigkeit des Potentials bei hohen Impulsen nahezu konstant ist. Der Grund dafür ist, dass sich Wellen in der Dirac- und der Klein-Gordon-Gleichung höchstens mit Lichtgeschwindigkeit ausbreiten. Das garantiert für alle Impulse eine minimale Aufenthaltsdauer des Wellenpakets im absorbierenden Bereich.

Um sehr präzise Simulationen durchzuführen ist es jedoch wünschenswert den Einsatz imaginärer Potentiale in der relativistischen Quantenmechanik weiter zu verbessern. Vor allem die Reflektionen am Potential selbst müssen verringert werden, da diese bei geringen Impulsen zu einem deutlichen Absinken der Absorbtiionsfähigkeit des Potentials führen.

Als erster Schritt könnten hierfür andere Potentialformen untersucht werden. Aufgrund der in Anhang C beschriebenen Formäquivalenz der stationären Schrödinger- und der stationären Klein-Gordon-Gleichung kann man zum Beispiel die Argumente von D. E. Manolopoulos zur Schrödinger-Gleichung aus [19] auf die Klein-Gordon-Gleichung übertragen. Darin beschreibt Manolopoulos, wie man für die Schrödinger-Gleichung imaginäre Potentiale konstruieren kann, die für einen bestimmten Impuls p in beliebiger Ordnung der WKB-Näherung reflektionsfrei sind. Wichtig ist es dabei, auch für die Dirac-Gleichung Transmissions- und Reflektionskoeffizienten eines imaginären Potentials mit dem WKB-Mechanismus genauer zu bestimmen.

Als zweiten Schritt könnten dann die gefundenen imaginären Potentiale auch für relativistische Quantengleichungen mit reellen Anteilen kombiniert werden, so wie es Macías et al. in [6] für die Schrödinger-Gleichung tun.

Erklärung

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

Heidelberg, den 11.07.11,

Literaturverzeichnis

- [1] D. Neuhauser and M. Baer. The time-dependent Schrödinger equation: Application of absorbing boundary conditions. *Journal of Chemical Physics*, 90:4351–4355, 1989.
- [2] P. Strange. *Relativistic Quantum Mechanics*. Cambridge University Press, 1998.
- [3] F. Gross. *Relativistic Quantum Mechanics and Field Theory*. Wiley-VCH, 1993.
- [4] Steven E. Koonin. *Computational Physics*. The Benjamin/Cummings Publishing Company, Inc., 1986.
- [5] R. Kosloff and D. Kosloff. Absorbing boundaries for wave propagation problems. *Journal of Computational Physics*, 63:363–376, 1986.
- [6] D. Macías, S. Brouard, and J. G. Muga. Optimization of absorbing potentials. *Chemical Physics Letters*, 228:672–677, 1994.
- [7] M. Ruf, H. Bauke, and C. H. Keitel. A real space split operator method for the Klein-Gordon equation. *Journal of Computational Physics*, 228:9092–9106, 2009.
- [8] J. G. Muga, J. P. Paolo, B. Navarro, and I. L. Egusquiza. Complex absorbing potentials. *Physics Reports*, 395:357–426, 2004.
- [9] M. S. Child. Analysis of a complex absorbing barrier. *Journal of Molecular Physics*, 72:89–93, 1991.
- [10] A. Vibok and G. G. Balint-Kurti. Reflection and transmission of waves by a complex potential – a semiclassical Jeffreys-Wentzel-Kramers-Brillouin treatment. *Journal of Chemical Physics*, 96:7615–7620, 1992.

- [11] T. Seideman and W. H. Miller. Calculation of the cumulative reaction probability via a discrete variable representation with absorbing boundary conditions. *Journal of Chemical Physics*, 96:4412–4422, 1992.
- [12] F. Huarte-Larranaga, X. Giménez, A. Aguilar, and M. Baer. On the accuracy of reactive scattering calculations with absorbing potentials: a new implementation based on a generalized R-matrix propagation. *Chemical Physics Letters*, 291:346–350, 1998.
- [13] X. Antoine and C. Besse. Unconditionally stable discretization schemes of non-reflecting boundary conditions for the one-dimensional Schrödinger equation. *Journal of Computational Physics*, 188:157–175, 2003.
- [14] X. Antoine, C. Besse, and P. Klein. Absorbing boundary conditions for the one-dimensional Schrödinger equation with exterior repulsive potential. *Journal of Computational Physics*, 228:312–335, 2009.
- [15] X. Antoine and C. Besse. Construction, structure and asymptotic approximations of a microdifferential transparent boundary condition for the linear Schrödinger equation. *Journal de Mathématiques Pures et Appliquées*, 80:701–738, 2001.
- [16] Matthias Ehrhardt and Andrea Zisowsky. Fast calculation of energy and mass preserving solutions of Schrödinger-Poisson systems on unbounded domains. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 187:1–28, 2006.
- [17] C. Zheng. A perfectly matched layer approach to the nonlinear Schrödinger wave equations. *Journal of Computational Physics*, 227:537–556, 2007.
- [18] H. Han and D. Yin. Absorbing boundary conditions for the multi-dimensional Klein-Gordon equation. *Communications in Mathematical Sciences*, 5:743–764, 2007.
- [19] D. E. Manolopoulos. Derivation and reflection properties of a transmission-free absorbing potential. *Journal of Chemical Physics*, 117:9552–9559, 2002.
- [20] M. S. Child. *Semiclassical Mechanics with Molecular Applications*. Oxford University Press, 1991.

- [21] H. Cheng, D. D. Coon, and X. Zhu. Multidimensional WKB approach to high-energy elastic scattering at fixed angle. *Physical Review D*, 26:896–907, 1982.
- [22] V. S. Popov, V. L. Eletsky, V. D. Mur, and D. N. Voskresensky. WKB approximation for the Dirac Equation at z_i . *Physics Letters B*, 1982.
- [23] A. Messiah. *Quantum Mechanics Volume I*. North-Holland Publishing Company, 1958.
- [24] U. Storch and H. Wiebe. *Lehrbuch der Mathematik Band 4 – Analysis auf Mannigfaltigkeiten - Funktionentheorie - Funktionalanalysis*. Spektrum Wissenschaftsverlag, 2001.

Anhang A

Das atomare Einheitensystem

Das atomare Einheitensystem ist auf den vier Dimensionen Länge, Masse, Drehimpuls und Ladung aufgebaut. Die Grundeinheit der Länge ist der Bohr'sche Radius

$$s_{a.u.} = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2},$$

die Grundeinheit der Masse ist die Masse eines Elektrons

$$m_{a.u.} = m_e,$$

die Grundeinheit für den Drehimpuls ist das reduzierte Planck'sche Wirkungsquantum

$$J_{a.u.} = \hbar$$

und die Grundeinheit für die Ladung ist die elementar Ladung

$$Q_{a.u.} = e.$$

Aus den Grundeinheiten leitet man nun alle weiteren Einheiten ab. Die drei in dieser Arbeit verwendeten abgeleiteten Einheiten sind der Impuls

$$p_{a.u.} = \frac{J_{a.u.}}{s_{a.u.}}, \quad (\text{A.1})$$

die Energie

$$E_{a.u.} = \frac{J_{a.u.}^2}{s_{a.u.}^2 m_{a.u.}} \quad (\text{A.2})$$

und die Geschwindigkeit

$$v_{a.u.} = \frac{J_{a.u.}}{s_{a.u.} m_{a.u.}}. \quad (\text{A.3})$$

Die Lichtgeschwindigkeit hat im atomaren Einheitensystem etwa den Wert $c = 137,04 v_{a.u.}$. Ein Elektron mit dem Impuls $p = 50 a.u.$ bewegt

sich klassisch mit der Geschwindigkeit $v \approx 0,36 c$. Berücksichtigt man die Relativitätstheorie, kommt man nur auf eine Geschwindigkeit von $v \approx 0,34 c$.

Anhang B

Eigenschaften der Dirac'schen Delta-Distribution

Die Dirac'sche δ -Funktion in einer Dimension ist dadurch definiert, dass für eine stetige Funktion $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ gilt:

$$\int_{\mathbb{R}} f(x) \cdot \delta(x - a) dx = f(a), \text{ mit } a \in \mathbb{R}. \quad (\text{B.1})$$

Weiter gilt für ein $b \in \mathbb{R}$:

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}} f(x) \cdot \delta(b \cdot (x - a)) dx &= \int_{\mathbb{R}} f\left(\frac{x}{b}\right) \cdot \frac{\delta(x - a \cdot b)}{|b|} dx \\ &= \frac{f(a)}{|b|}. \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

Man schreibt daher auch suggestiv:

$$\delta(b \cdot x) = \frac{\delta(x)}{|b|}. \quad (\text{B.3})$$

Man kann (B.3) folgender Maßen verallgemeinern: Ist $g : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ eine differenzierbare Funktion mit den Nullstellen x_1, \dots, x_n , dann gilt:

$$\delta(g(x)) = \sum_{i=1}^n \frac{\delta(x - x_i)}{|g'(x_i)|}. \quad (\text{B.4})$$

Das ist die Eigenschaft der δ -Funktion, die in (5.3) und später in (5.7) ausgenutzt wurde, um die Lorentztransformation des Wellenpakets durchzuführen.

Anhang C

Herleitung der oberen Potentialabschätzung

Um die Absorbtionsfähigkeit eines Potentials der Form

$$\begin{aligned} V(x) &= 0 && , \text{ falls } x < x_1 \\ &= -ix \cdot V_{IM} && , \text{ falls } x_1 \leq x \leq x_2 \\ &= 0 && , \text{ falls } x_2 < x \end{aligned} \quad (\text{C.1})$$

bei einem bestimmten Impuls zu untersuchen, soll die stationäre Klein-Gordon-Gleichung

$$\begin{aligned} 0 &= \left((E - V(x))^2 + \hbar^2 c^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} - m^2 c^4 \right) \psi(x) \\ &= \left(k(x)^2 + \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \psi(x) \end{aligned} \quad (\text{C.2})$$

betrachtet werden, wobei $k(x)$ durch

$$k(x) = \frac{\sqrt{(E - V(x))^2 - m^2 c^4}}{\hbar c} \quad (\text{C.3})$$

gegeben ist. Gleichung (C.2) ist nun Form-equivalent zur stationären Schrödinger-Gleichung

$$0 = \left(k(x)^2 + \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \psi(x) \quad (\text{C.4})$$

mit

$$k(x) = \frac{\sqrt{2m(E - V(x))}}{\hbar}, \quad (\text{C.5})$$

wobei $V(x)$ das gleiche Potential sei, wie in der Klein-Gordon-Gleichung. In [19] wurde für ein solches imaginäres Potential in der Schrödinger-Gleichung folgende Lösung in erster WKB-Näherung verwendet (für die WKB-Methode siehe zum Beispiel [20]):

$$\begin{aligned}
\psi(x) &= e^{-i\frac{px}{\hbar}} & , \text{ falls } x < x_1 \\
&= \sqrt{\frac{p}{\hbar k(x)}} \cdot e^{i \int_{x_1}^x k(x') dx' + i\frac{px_1}{\hbar}} & , \text{ falls } x_1 \leq x \leq x_2 \\
&= e^{i \int_{x_1}^{x_2} k(x') dx' + i\frac{p(x_1 - x_2 + x)}{\hbar}} & , \text{ falls } x_2 < x
\end{aligned} \tag{C.6}$$

Diese Lösung ist insbesondere reflektionsfrei [19]. Man muss daher das imaginäre Potential scheinbar nur noch so wählen, dass auch die Transmission möglichst gering ist. Sonst könnte die Welle noch durch das Potential hindurch auf den Rand eines numerischen Gitters treffen und dort reflektiert werden. Der Transmissionskoeffizient T ist gegeben durch

$$T = e^{-2\text{Im} \int_{x_1}^{x_2} k(x) dx} . \tag{C.7}$$

Aufgrund der Formäquivalenz von stationärer Schrödinger- und stationärer Klein-Gordon-Gleichung lässt sich nun die WKB-Methode auf die Klein-Gordon-Gleichung übertragen [21]. Man kann deshalb die Herleitung des Transmissionskoeffizienten (C.7) analog zu [19] durchführen. In Abschnitt 4.2 wurde gezeigt, dass auch in der Klein-Gordon-Gleichung mit steigendem Betrag von $V(x)$ der imaginär Teil von $k(x)$ ansteigt. Deshalb suggeriert (C.7), dass wie im Schrödinger-Fall nur der Betrag des absorbierenden Potentials rasch genug ansteigen muss, damit die Welle komplett absorbiert wird. Doch wie im Schrödinger-Fall ist auch hier der Gültigkeitsbereich der WKB-Näherung eine Beschränkung für das Potential. Für diese muss gelten (vgl. [20]):

$$\left| \frac{k'(x)}{k^2(x)} \ll 1 \right| \tag{C.8}$$

Falls (C.8) nicht erfüllt ist, kann die reflexionsfreie WKB-Näherung nicht mehr verwendet werden. Ich habe daher auch im Klein-Gordon-Fall diese Bedingung benutzt, um eine obere Schranke für das absorbierende Potential zu erhalten.

Auf die Dirac-Gleichung kann der WKB-Mechanismus nicht so leicht übertragen werden [22]. Die Darstellung dieser Übertragung sprengt leider den Rahmen dieser Arbeit. Man kann aber zumindest wie in [23] argumentieren, dass ein Wellenpaket sich in einem Potential nahezu klassisch bewegt, falls die Änderung des Potentials über eine Wellenlänge sehr klein ist gegen die kinetische Energie des Pakets. Verwendet man $E_{kin} = E_p - mc^2$ und $\lambda = 2\pi\hbar/p$ so erhält man

$$V_{IM} \ll \frac{p\Delta x}{2\pi\hbar}(E_p - mc^2). \quad (\text{C.9})$$

Es zeigt sich, dass diese Bedingung bei hohen Impulsen wesentlich tiefer liegt als die in dieser Arbeit verwendete Bedingung. Außerdem ist (C.9) unbefriedigend, da $E_{kin} = E_p - mc^2$ nur für kleine Werte des Randpotentials gilt. Es müsste daher statt dessen ein WKB-Mechanismus für imaginäre Potentiale in der Dirac Gleichung erarbeitet werden.

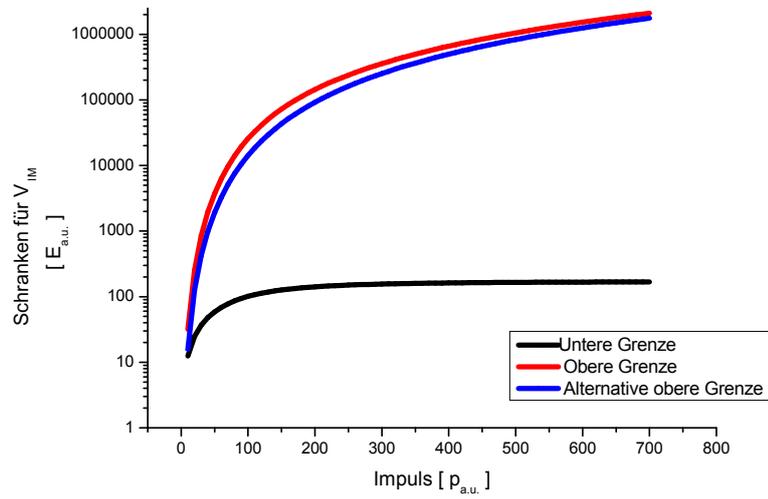


Abbildung C.1: Die in Abschnitt 6.2 verwendeten Grenzen für das Potential im Vergleich zur alternativen oberen Grenze für die Dirac-Gleichung.

Anhang D

Baker-Campbell-Hausdorff- Formel / Zassenhaus-Formel

Ist \hat{A} ein linearer Operator auf einem Hilbertraum, so ist $e^{\hat{A}}$ definiert als

$$e^{\hat{A}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\hat{A}^n}{n!}. \quad (\text{D.1})$$

Ist nun \hat{B} ein weiterer linearer Operator, der nicht mit \hat{A} kommutiert, d.h. $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$, dann gilt

$$e^{\hat{A}} \cdot e^{\hat{B}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\hat{A}^n}{n!} \cdot \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\hat{B}^n}{n!} \neq \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\hat{A} + \hat{B})^n}{n!} = e^{\hat{A} + \hat{B}}. \quad (\text{D.2})$$

Die Exponentialfunktion von Operatoren verhält sich also anders, als man es von den reellen Zahlen gewohnt ist. Es gibt aber dennoch eine Beziehung zwischen der linken und der rechten Seite von (D.2), die sogenannte Baker-Campbell-Hausdorff-Formel. Es gilt:

$$e^{\hat{A}} \cdot e^{\hat{B}} = e^{\hat{A} + \hat{B} + Z(\hat{A}, \hat{B})} \quad (\text{D.3})$$

mit

$$Z(\hat{A}, \hat{B}) = \sum_{i=1}^{\infty} Z_i(\hat{A}, \hat{B}). \quad (\text{D.4})$$

Die ersten drei Summanden in (D.4) sind

$$\begin{aligned}
Z_1 &= \frac{1}{2}[\hat{A}, \hat{B}] \\
Z_2 &= \frac{1}{1}2[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] - \frac{1}{1}2[\hat{B}, [\hat{A}, \hat{B}]] \\
Z_3 &= \frac{1}{2}4[\hat{A}, [\hat{B}, [\hat{B}, \hat{A}]]].
\end{aligned} \tag{D.5}$$

Die allgemeine Formel für Z_i ist zum Beispiel in [24] gegeben. Eine zu (D.3) verwandte Formel ist die Zassenhaus-Formel. Sie lautet

$$e^{\hat{A} + \hat{B}} = e^{\hat{A}} \cdot e^{\hat{B}} \cdot e^{W(\hat{A}, \hat{B})} \tag{D.6}$$

mit

$$W(\hat{A}, \hat{B}) = \sum_{i=1}^{\infty} W_i(\hat{A}, \hat{B}). \tag{D.7}$$

Die ersten beiden W_i sind dabei gegeben durch:

$$\begin{aligned}
W_1 &= -\frac{1}{2}[\hat{A}, \hat{B}] \\
W_2 &= \frac{1}{3}[\hat{B}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \frac{1}{6}[\hat{B}, [\hat{A}, \hat{B}]].
\end{aligned} \tag{D.8}$$

Setzt man nun $\hat{A} = \Delta t \cdot \hat{T}$ und $\hat{B} = \Delta t \cdot \hat{V}$ mit Operatoren \hat{T} und \hat{V} , so ist $W(\Delta t \cdot \hat{T}, \Delta t \cdot \hat{V})$ von der Ordnung $\mathcal{O}(\Delta t^2)$. Verwendet man die Reihendarstellung von $e^{W(\Delta t \cdot \hat{T}, \Delta t \cdot \hat{V})}$, dann folgt daraus insbesondere:

$$e^{\Delta t \cdot (\hat{T} + \hat{V})} = e^{\Delta t \cdot \hat{T}} \cdot e^{\Delta t \cdot \hat{V}} + \mathcal{O}(\Delta t^2). \tag{D.9}$$