

**Diskretisierungsverfahren zur  
Untersuchung von Atomen  
in zeitabhängigen elektrischen Feldern und  
in extrem starken Magnetfeldern**

DISSERTATION

zur Erlangung des Grades eines Doktors  
der Naturwissenschaften  
der Fakultät für Mathematik und Physik  
der Eberhard-Karls-Universität zu Tübingen

vorgelegt von  
Matthias Klews  
aus Esslingen a.N.

**2003**

Tag der mündlichen Prüfung: 7.11.2003

Dekan:

Prof. Dr. H. Müther

1. Berichterstatter:

Prof. Dr. H. Ruder / Prof. Dr. W. Schweizer

2. Berichterstatter:

Prof. Dr. W. Kley

# Zusammenfassung

## Diskretisierungsverfahren zur Untersuchung von Atomen in zeitabhängigen elektrischen Feldern und in extrem starken Magnetfeldern

In der vorliegenden Arbeit werden Atome in äußeren elektrischen und magnetischen Feldern mit numerischen Methoden untersucht. Im Vordergrund steht die Behandlung von Wasserstoff und Alkaliatomen unter Einfluß ultrakurzer elektrischer Feldimpulse (sogenannter „Trains“) und Viel-Elektronen-Atome in extrem starken Magnetfeldern. Bei allen Systemen wurde zur Lösung des quantenmechanischen Problems die Methode der Finiten Elemente gegebenenfalls in Kombination mit der Methode der Diskreten Variablen verwendet. Diese Verfahren werden im ersten Teil der Arbeit ausführlich dargestellt.

Im zweiten Teil der Arbeit wird zunächst auf zeitabhängige Probleme der Atomphysik, insbesondere Wellenpaketdynamik in Rydberg-Atomen eingegangen und die Bedeutung der Wellenpaketdynamik für das Gebiet des Quantenchaos kurz am Beispiel des diamagnetischen Wasserstoffatoms beleuchtet. Der Kern der Untersuchungen zur Quantendynamik bilden Simulationen des sogenannten gekickten Wasserstoffatoms. Dabei wird Wasserstoff einer Folge periodischer, ultrakurzer elektrischer Pulse ausgesetzt. Klassische Untersuchungen zeigen, daß der Phasenraum für bestimmte Parameterbereiche in reguläre und irreguläre Bereiche aufgeteilt ist. Im Mittelpunkt der quantenmechanischen Untersuchungen des vollständigen dreidimensionalen Problems stehen die Verbindungen zu den klassischen Eigenschaften und der Vergleich mit den in der Literatur vorhandenen eindimensionalen quantenmechanischen Modellen. Die Untersuchungen werden schließlich auf Alkaliatome und Systeme mit alternierenden und zeitlich zufallsverteilten elektrischen Pulsen ausgedehnt.

Im dritten Teil der Arbeit werden die Hartree-Fock-Gleichungen in adiabatischer Näherung mit der Methode der Finiten Elemente gelöst. Durch die Parallelisierung des Programmcodes ist es möglich, die zur Modellierung von Neutronenstermatmosphären notwendigen großen Mengen atomarer Daten von Übergängen in Viel-Elektronen-Atomen in extrem starken Magnetfeldern zu berechnen. Ein Schwerpunkt liegt auf der Berechnung von Eisenionen.



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>3</b>
<b>2</b>	<b>Diskretisierungsverfahren in der Quantenmechanik</b>	<b>7</b>
2.1	Grundlagen der Methode der Diskreten Variablen . . . . .	8
2.2	Die Schrödingergleichung in der Diskreten-Variablen-Darstellung	12
2.3	Grundlagen der Methode der Finiten Elemente . . . . .	16
2.4	Wahl der finiten Elemente . . . . .	17
2.5	Interpolationspolynome . . . . .	18
2.5.1	Lagrange-Interpolation . . . . .	19
2.5.2	Hermite-Interpolation . . . . .	20
2.5.3	B-Spline-Interpolation . . . . .	22
2.6	Anwendung des Finite-Elemente-Verfahrens auf die Schrödinger- gleichung . . . . .	24
2.6.1	Numerische Lösung des Eigenwertproblems . . . . .	27
2.6.2	Matrixstruktur der verschiedenen Interpolationsverfahren .	28
2.6.3	Der anharmonische Oszillator . . . . .	31
2.6.4	Das Hulthén-Potential . . . . .	34
2.6.5	H-Atom und Alkali-Atome mit und ohne Magnetfeld . . .	34
<b>3</b>	<b>Zeitintegrationsverfahren</b>	<b>41</b>
<b>4</b>	<b>Atome unter Einfluß periodischer elektrischer Pulse</b>	<b>45</b>
4.1	Ein Beispiel für Quantenchaos: das diamagnetische H-Atom . . .	46
4.2	Allgemeines zum gekickten Wasserstoffatom . . . . .	51
4.3	Gekicktes Wasserstoffatom: klassisches Modell . . . . .	52
4.4	Gekicktes Wasserstoffatom: quantenmechanische Behandlung . .	63
4.4.1	Allgemeines zur Numerik . . . . .	63
4.4.2	Resonanzen . . . . .	69

4.4.3	Quantenlokalisierung . . . . .	72
4.4.4	Vergleich mit klassischen Rechnungen . . . . .	76
4.4.5	Experimentelle Aspekte . . . . .	79
4.4.6	Gekickte Alkaliatome . . . . .	82
4.5	Ultrakurze alternierende elektrische Pulse . . . . .	87
4.6	Zufallsverteilte elektrische Pulse . . . . .	90
<b>5</b>	<b>Viel-Elektronen-Atome in Neutronensternmagnetfeldern</b>	<b>93</b>
5.1	Wasserstoff im starken Magnetfeld . . . . .	96
5.1.1	Hamiltonoperator . . . . .	96
5.1.2	Entwicklung nach orthogonalen Basisfunktionen . . . . .	96
5.1.3	Energieniveaus . . . . .	98
5.2	Die Hartree-Fock-Gleichungen in adiabatischer Näherung . . . . .	100
5.2.1	Grundlagen . . . . .	100
5.2.2	Die Einteilchenintegrale . . . . .	103
5.2.3	Die Zweiteilchenintegrale . . . . .	104
5.2.4	Durchführung der Variation . . . . .	106
5.2.5	Ablauf des Iterationsverfahrens . . . . .	109
5.2.6	Grenzen der adiabatischen Näherung . . . . .	110
5.3	Lösung der Hartree-Fock-Gleichungen mit der Methode der Finiten Elemente . . . . .	110
5.3.1	Formulierung als äquivalentes Variationsproblem . . . . .	111
5.3.2	Ausnutzung der Paritätseigenschaften . . . . .	113
5.3.3	Wahl der Startwellenfunktionen . . . . .	115
5.3.4	Konvergenzverhalten . . . . .	118
5.4	Ergebnisse . . . . .	122
5.4.1	Energien . . . . .	122
5.4.2	Magnetfeldabhängigkeit der Spektrallinien . . . . .	135
5.4.3	Oszillatorstärken . . . . .	139
5.5	Parallelisierung . . . . .	145
<b>6</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>149</b>
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>152</b>

# 1 Einleitung

Die Entwicklung der Computertechnologie der letzten Jahrzehnte hat es in Verbindung mit modernen numerischen Verfahren möglich gemacht, den Kenntnisstand nichtintegrabler Quantensysteme entscheidend zu erweitern. Große Fortschritte konnten insbesondere in atomphysikalischen Systemen gemacht werden, die für die Gebiete Quantenchaos und Astrophysik relevant sind.

Gegenstand des Quantenchaos ist die quantenmechanische Behandlung klassisch chaotischer Systeme und deren Verhalten im semiklassischen Limes. Klassisches Chaos ist über das exponentielle Auseinanderlaufen benachbarter Trajektorien definiert. Aufgrund der Unschärferelation macht der Begriff der Trajektorie und damit auch die klassische Definition von Chaos in der Quantenmechanik keinen Sinn. Wegen des Korrespondenzprinzips erwartet man dennoch Spuren des klassischen Chaos im semiklassischen Limes vorzufinden. Ein unter dieser Fragestellung umfassend untersuchtes atomphysikalisches System ist z.B. das Wasserstoffatom im starken Magnetfeld ([Hasagawa et al. 1989], [Friedrich, Wintgen 1989], [Schweizer 1995]).

Ein Schwerpunkt der Erforschung des Quantenchaos in der Atomphysik liegt derzeit auf der Untersuchung von hochangeregten Atomen, die zeitabhängigen externen Feldern ausgesetzt sind. Der Anstoß, sich mit diesen Systemen zu befassen, reicht bereits in das Jahr 1974 zurück, als [Bayfield, Koch 1974] in einem Experiment mit Rydbergatomen unter Einfluss von Mikrowellen eine von der Anregungsfrequenz abhängige Ionisationsschwelle beobachten konnten. Umfassende theoretische Arbeiten konnten schließlich dieses Verhalten mit den klassischen chaotischen Phasenraumstrukturen erklären (für einen Überblick siehe [Casati et al. 1994]).

Ein in Verhalten und Theorie ähnliches System ist das sogenannte geklickte Wasserstoffatom. Dabei wird das Wasserstoffatom analog zum geklickten Rotor [Ott 1993] einer Folge periodischer, ultrakurzer elektrischer Feldpulse ausgesetzt (sog. „Trains“). In der Literatur findet man mittlerweile einige Arbeiten, die das System klassisch behandeln (z.B. [Grozdanov, Taylor 1987], [Burgdörfer 1989],

[Yoshida et al. 2000a]), [Reinhold et al. 1997]) und bislang erst eine experimentelle Realisierung [Reinhold et al. 1997], jedoch mit Alkaliatomen. Das Hauptproblem der quantenmechanischen Behandlung besteht in der starken Kopplung an das Kontinuum. Während noch einige Arbeiten mit eindimensionalen quantenmechanischen Modellen publiziert wurden ([Yoshida et al. 1999b],[Yoshida et al. 2000a], [Yoshida et al. 2000b], [Persson et al. 2002]) sind quantenmechanische Behandlungen des vollständigen dreidimensionalen Systems sehr rar [Melles et al. 1993].

In der vorliegenden Arbeit werden Diskretisierungsverfahren benutzt, um eine quantenmechanische Behandlung des vollständigen dreidimensionalen Systems des gekickten Wasseroffs durchführen zu können. Zum Einsatz kommen dabei die Methode der Diskreten Variablen und die Methode der Finiten Elemente. Hauptaugenmerk wird dabei auf den Vergleich mit den in der Literatur vorhandenen Ergebnissen der eindimensionalen quantenmechanischen Behandlungen und der Vergleich mit klassischen Rechnungen gelegt. Darüberhinaus werden gekickte Alkaliatome und die in der Literatur weniger vertretenen Systeme mit alternierenden elektrischen Pulsen ([Carnegie 1984], [Casati et al. 1994], [Tannian et al. 2000]) und mit einer Zufallssequenz von elektrischen Pulsen ([Burgdörfer 1989],[Melles et al. 1993]) behandelt.

Der zweite Themenkomplex der vorliegenden Arbeit, bei dem Diskretisierungsverfahren effizient eingesetzt werden konnten, sind Atome in Neutronensternmagnetfeldern. In jüngster Zeit konnten erstmals mit den Röntgensatelliten *Chandra* und *XMM-Newton* im Spektrum des Neutronensterns 1E 1207.4-5209 Absorptionsfeatures beobachtet werden [Sanwal et al. 2002]. Um die beobachteten Neutronensternspektren interpretieren zu können, ist die Kenntnis umfangreicher atomarer Daten der Elemente in der Neutronensternatmosphäre notwendig. Neutronensterne haben Magnetfelder der Größenordnung  $10^8$  T [Trümper et al. 1977]. Während das Problem von Wasserstoff und Helium in extrem starken Magnetfeldern mittlerweile umfassend behandelt wurde (siehe z.B. [Braun et al. 1993], [Turner et al. 1993], [Ruder et al. 1994], [Jones et al. 1999]), sind Energien und insbesondere Oszillatorstärken höherer Elemente im für Neutronensternatmosphären relevanten Feldstärkebereich sehr rar ([Miller, Neuhauser 1991], [Mori, Hailley 2002]). Da Neutronensterne letztlich Überreste von Eisenkernen kollabierter Sterne sind, wird in ihrer Atmosphäre ein hoher Anteil an Eisenionen vermutet [Rajagopal et al. 1997]. Für die Modellierung von Modellatmosphären werden oftmals die Daten vieler tausend atomarer Übergänge benötigt. Um diese Daten in angemessener Zeit bereitstellen zu können, ist es notwendig, einen effizienten Programmcode zu entwickeln. Dazu werden in dieser Arbeit die Hartree-Fock-

---

Gleichungen in adiabatischer Näherung mit der Methode der Finiten Elemente gelöst und der Programmcode parallelisiert. Neben dem Vergleich mit bereits vorhandenen Literaturwerten wurden insbesondere Daten von Eisenionen berechnet.

In Kapitel 2 werden die Methode der Diskreten Variablen und die Methode der Finiten Elemente vorgestellt. Effizienz- und Konvergenztests erfolgen anhand einiger Systeme der nichtrelativistischen Quantenmechanik.

Kapitel 3 gibt einen kurzen Überblick über Zeitintegrationsverfahren der zeitabhängigen Schrödingergleichung.

In Kapitel 4 werden zunächst als Beispiel für Quantenchaos in der Atomphysik Wellenpaketdynamik im diamagnetischen Wasserstoffatom vorgestellt. Nach Formulierung der Problemstellung des gekickten Wasserstoffatoms, wird das System zunächst mit klassischen ein- und dreidimensionalen Modellen behandelt und schließlich mit den Methoden der vorangegangenen Kapiteln das vollständige dreidimensionale quantenmechanische Problem gelöst. Der Schwerpunkt der Untersuchungen liegt auf Vergleichen mit klassischen Rechnungen und eindimensionalen quantenmechanischen Rechnungen aus der Literatur. Darüberhinaus werden gekickte Alkaliatome und der Einfluß alternierender und zufallsverteilter Pulse untersucht.

In Kapitel 5 wird nach einem kurzen Überblick über den Stand der Neutronensternspektroskopie zunächst die Eigenschaften von Wasserstoff in Neutronensternmagnetfeldern beschrieben. Zur Lösung des Problems der Viel-Elektronen-Atome in extrem starken Magnetfeldern wird die Methode der Finiten Elemente zur Lösung der Hartree-Fock-Gleichungen in adiabatischer Näherung benutzt. Damit werden exemplarisch Energien und Oszillatorstärken der Elemente Helium bis Eisen in Neutronensternmagnetfeldern berechnet. Eine Beschreibung der Parallelisierungsmethode des Programmcodes schließen das Kapitel ab.

Eine Zusammenfassung der Ergebnisse mit einem Ausblick auf offene Probleme erfolgt in Kapitel 6.

## Einheiten und Konventionen

In dieser Arbeit werden soweit nicht anders angegeben atomare Einheiten ( $\hbar = e = m_e = \alpha c = 1$ ) verwendet. Längen werden in Einheiten des Bohrschen Radius  $a_0 = \hbar/\alpha m_e c \approx 0.53 \cdot 10^{-10}$  m und Energien in Hartrees  $E_H = \alpha^2 m_e c^2 \approx 27.2$  eV dargestellt. Die atomare Einheit für die Zeit ist  $\tau_0 = \hbar^3/m_e^4 \approx 0.024$  fs. Als Referenzgröße für die Magnetfeldstärke  $\beta = |\mathbf{B}|/B_0$  wird

$$B_0 = 2\alpha^2 m_e^2 c^2 / e\hbar \approx 4.70 \cdot 10^5 \text{ T} \quad (1.1)$$

und für die elektrische Feldstärke  $\Phi = |\mathbf{F}|/F_0$

$$F_0 = \alpha^3 m_e^2 c^3 / e\hbar \approx 5.14 \cdot 10^{11} \text{ V/m} \quad (1.2)$$

verwendet. Zum Vergleich mit der Literatur ist das Magnetfeld oftmals in Tesla und Energien in eV angegeben.

# 2 Diskretisierungsverfahren in der Quantenmechanik

Ein weitverbreiteter Ansatz zur Lösung der Schrödingergleichung ist die Entwicklung der Wellenfunktion nach globalen Basisfunktionen

$$\Psi(\vec{r}) = \sum_i a_i \phi_i(\vec{r}) \quad . \quad (2.1)$$

In die Schrödingergleichung eingesetzt, erhält man ein lineares Gleichungssystem, dessen Lösung die Entwicklungskoeffizienten  $a_i$  liefert. Für die in dieser Arbeit betrachteten Systeme der Atomphysik ist der Ansatz (2.1) jedoch nur bedingt einsetzbar. Im Falle starker Magnetfelder zeigen diese Entwicklungen im Übergangsbereich der Dominanz von Kugel- zu Zylindersymmetrie ein schlechtes Konvergenzverhalten. Für zeitabhängige Probleme müßten numerisch sehr aufwendige zeitabhängige Basisfunktionen verwendet werden. Sind externe elektrische Felder vorhanden, ist das Kontinuum miteinzubeziehen, was mit einer endlich dimensionalen Basis aus globalen Funktionen schwer zu bewerkstelligen ist. Ein möglicher Ansatz besteht aus einer Basis aus Eigenzuständen des feldfreien Atoms und Sturm-Liouvillescher Basisfunktionen [Melles et al. 1993].

Für die eben angesprochenen Probleme bieten Diskretisierungsverfahren eine effiziente Lösung. Dabei wird die Wellenfunktion  $\psi(\vec{r}_i)$  auf einem Gitter mit den Gitterpunkten  $\vec{r}_i$  dargestellt. Zwischen den Gitterpunkten wird die Wellenfunktion durch lokale Basisfunktionen  $f_i(\vec{r})$  interpoliert:

$$\psi(\vec{r}) = \sum_i f_i(\vec{r}) \psi(\vec{r}_i) \quad . \quad (2.2)$$

In der vorliegenden Arbeit wurden an Diskretisierungsverfahren die Methode der Finiten Elemente und die Methode der Diskreten Variablen eingesetzt. Bei zeitabhängigen Problemen und Eigenwertberechnungen, die mit der dreidimensionalen

Schrödingergleichung beschrieben werden, wurde mit der Methode der Diskreten Variablen das Problem auf die Lösung eines Systems gekoppelter eindimensionaler Differentialgleichungen zurückgeführt. Diese Methode wurde zuerst von [Melezhik 1986] auf Atome in äußeren Feldern angewandt und ist in der physikalischen Chemie weitverbreitet (z.B. [Lill et al.1982], [Light et al. 1985]). Dieses Gleichungssystem, sowie die Hartree-Fock-Gleichungen in adiabatischer Näherung werden dann mit der Methode der Finiten Elemente gelöst.

Die Methode der Finiten Elemente wurde ursprünglich für die Strukturmechanik entwickelt und ist mittlerweile zur Lösung von Differentialgleichungen unterschiedlichster Probleme weitverbreitet. Die Grundidee besteht darin, den Raum in kleine Teilbereiche (sog. finite Elemente) aufzuteilen und auf jedem Teilbereich Interpolationspolynome anzusetzen, deren Koeffizienten so zu wählen sind, daß die Lösung möglichst gut mit den Bedingungen für die tatsächliche Lösung vereinbar ist. Für die Lösung von Differentialgleichungen stetiger Probleme wird die Differentialgleichung in ein äquivalentes Variationsproblem überführt. Für die Extremwerte des Funktionals erhält man dann ein Gleichungssystem für die Koeffizienten der Polynomentwicklung. Die Methode der Finiten Elemente wird in zahlreichen Büchern ausführlich behandelt ([Marsal 1989], [Bathe 1986], [Zienkiewicz 1984]). Für die Anwendung auf das Wasserstoffproblem im starken Magnetfeld sei insbesondere auf [Shertzer 1989], [Shertzer et al. 1989] und [RamMohan et al. 1990] hingewiesen.

Im Folgenden werden die Diskretisierungsverfahren vorgestellt und zur Untersuchung von Konvergenz und Effizienz zunächst auf wohlbekannt Systeme der nichtrelativistischen Quantenmechanik angewandt.

### 2.1 Grundlagen der Methode der Diskreten Variablen

Um die Grundidee der Methode der diskreten Variablen zu erläutern, sei zunächst noch einmal die Entwicklung der Wellenfunktion nach einer globalen Basis  $\phi_n(x)$  in einer kartesischen Dimension zur Lösung der Schrödingergleichung

$$\hat{H}\psi_i(x) = E_i\psi_i(x) \tag{2.3}$$

betrachtet:

$$\psi_i(x) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n^i \phi_n(x) \quad . \tag{2.4}$$

Die Entwicklungskoeffizienten  $a_n^i$  lauten in der  $\phi_n(x)$ -Basis:

$$a_n^i = \int \phi_n^*(x) \psi_i(x) dx \quad . \quad (2.5)$$

Die Basisfunktionen  $\phi_i(x)$  seien die Eigenfunktionen eines Hamilton-Operators und bilden einen Hilbertraum mit den Orthonormalitäts- und Vollständigkeitsrelationen

$$\int dx \phi_m^*(x) \phi_n(x) = \delta_{mn} \quad , \quad (2.6)$$

$$\sum_{m=1}^{\infty} \phi_m^*(x_k) \phi_m(x_l) = \delta(x_k - x_l) \quad . \quad (2.7)$$

Setzt man den Ansatz (2.4) in die Schrödingergleichung (2.3) ein, so liefert Multiplikation mit  $\phi_m^*(x)$  und Integration über die  $x$ -Achse zusammen mit (2.6) das Gleichungssystem

$$\sum_{n=1}^{\infty} a_n^i \int dx \phi_m^*(x) \hat{H} \phi_n(x) = a_m^i E_i \quad i = 1, \dots, \infty \quad . \quad (2.8)$$

Bei einer numerischen Behandlung ist man gezwungen, sich in (2.8) auf eine endliche Basis und damit ein endliches Gleichungssystem zu beschränken. Die unbekanntenen Koeffizienten  $a_n^i$  werden dann durch Diagonalisierung der Hamiltonmatrix

$$H_{mn}^{VBR} = \int dx \phi_m^*(x) \hat{H} \phi_n(x) \quad (2.9)$$

bestimmt. Durch Erweiterung des endlichen Basissystems führt dieses Vorgehen zu immer genaueren Eigenfunktionen und Eigenwerten. Wie groß die Basis für eine vorgegebene Genauigkeit gewählt werden muß, läßt sich mit Konvergenzuntersuchungen feststellen. Da dieses Verfahren einem Variationsverfahren entspricht, nennt man es *Variable Basis Representation* (VBR) oder Spektraldarstellung.

Wird in (2.9) das Integral mit numerischer Quadratur mit  $N$  Stützpunkten berechnet,

$$H_{mn}^{FBR} = \sum_{k=1}^N \phi_m^*(x_k) \hat{H} \omega_k \phi_n(x_k) \quad , \quad (2.10)$$

so spricht man von der *Finite Basis Representation* (FBR). Die  $x_k$  sind die Stützpunkte und die  $\omega_k$  die Integrationsgewichte der Quadratur (z.B. einer Gauß-Legendre-Integration). Die Orthonormalitäts- und Vollständigkeitsrelationen (2.6) und

(2.7) lauten in dieser Darstellung

$$\sum_{k=1}^N \phi_m^*(x_k) \omega_k \phi_n(x_k) = \delta_{mn} \quad , \quad (2.11)$$

$$\sum_{m=1}^N \phi_m^*(x_k) \sqrt{\omega_k} \omega_l \phi_m(x_l) = \delta_{kl} \quad . \quad (2.12)$$

Existiert für ein zu lösendes Problem eine Quadratur, so daß die Summen (2.11), (2.12) mit den Relationen (2.6), (2.7) übereinstimmen, dann sind die Ergebnisse von FBR und VBR identisch. Die Entwicklungskoeffizienten (2.5) lauten in der FBR

$$a_n^i = \sum_{k=1}^N \omega_k \phi_n^*(x_k) \psi_i(x_k) \quad . \quad (2.13)$$

Beschränkt man sich auf  $M$  Basisfunktionen, so lautet die Entwicklung der Wellenfunktion

$$\psi(x) = \sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N \omega_n \phi_m^*(x_n) \psi(x_n) \phi_m(x) \quad (2.14)$$

$$= \sum_{n=1}^N \psi_n f_n(x) \quad (2.15)$$

mit

$$\psi_n = \sqrt{\omega_n} \psi(x_n) \quad (2.16)$$

und

$$f_n(x) = \sqrt{\omega_n} \sum_{m=1}^M \phi_m^*(x_n) \phi_m(x) \quad . \quad (2.17)$$

Die  $f_N$  bilden eine orthonormale Basis in einer diskretisierten Darstellung. Wählt man  $N = M$  so erhält man

$$f_n(x) = \sum_{m=1}^M \phi_m(x) T_{mn}^+ \quad (2.18)$$

mit dem unitären Transformationsoperator

$$T_{mn} = \sqrt{\omega_n} \phi_m(x_n) \quad . \quad (2.19)$$

Die Relationen (2.11) und (2.12) lauten mit dieser Definition

$$(TT^+)_{mn} = \delta_{mn} \quad , \quad (2.20)$$

$$(T^+T)_{kl} = \delta_{kl} \quad . \quad (2.21)$$

Diese Transformation führt auf die *Diskrete Variablen-Darstellung* (DVR), die zur FBR isomorph ist. Die Transformationsregel für einen beliebigen Operator  $A$  lautet:

$$A^{DVR} = T^+ A^{FBR} T \quad . \quad (2.22)$$

Durch die Transformation von FBR zu DVR wird die Darstellung mit  $N$  Basisfunktionen in eine Darstellung mit  $N$  Quadraturpunkten überführt.

In der Koordinatendarstellung ist der Potentialoperator  $\hat{V}$  des Hamiltonoperators  $\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$  multiplikativ. Daher läßt sich mit der Definition

$$\hat{V}_{mn} = \hat{V}(x_n) \delta_{mn} \quad (2.23)$$

die FBR des Potentialoperators

$$\hat{V}_{kl}^{FBR} = \sum_{n=1}^N \omega_n \phi_k^*(x_n) \hat{V}(x_n) \phi_l(x_n) \quad (2.24)$$

mit Hilfe des Transformationsoperators (2.19) folgendermaßen darstellen:

$$\hat{V}_{kl}^{FBR} = \sum_{mn} T_{km}^+ \hat{V}_{mn} T_{nl} \quad . \quad (2.25)$$

Wendet man die Transformationsvorschrift (2.22) auf den Hamiltonoperator an, erhält man mit (2.25) die DVR:

$$\begin{aligned} \hat{H}^{DVR} &= T \hat{H}^{FBR} T^+ \\ &= T \hat{T}^{FBR} T^+ + T \hat{V}^{FBR} T^+ \\ &= T \hat{T}^{FBR} T^+ + \hat{V} \quad . \end{aligned} \quad (2.26)$$

Die Verallgemeinerung der Methode der diskreten Variablen für mehrdimensionale Probleme ist mit geringem Aufwand möglich und findet sich z.B. in [Schweizer 2001].

## 2.2 Die Schrödingergleichung in der Diskreten-Variablen-Darstellung

Im Folgenden wird die Anwendung der Diskreten-Variablen-Methode auf die Lösung der Schrödingergleichung für Wasserstoff und Alkaliatome in homogenen elektrischen und magnetischen Feldern, die, falls beide Felder vorhanden, parallel orientiert sind, angewandt. Hierdurch ergibt sich eine starke Vereinfachung des Problems und des numerischen Aufwands. Dennoch läßt sich die Methode auch einfach für gekreuzte elektrische und magnetische Felder erweitern.

Der Hamiltonoperator in Anwesenheit von parallelen elektrischen und magnetischen Feldern lautet in sphärischen Koordinaten (z.B. [Faßbinder 1997]):

$$H(r, \theta, \phi) = -\frac{1}{2r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{2r^2} L^2(\theta, \phi) - i\beta \frac{\partial}{\partial \phi} + U(r, \theta, \phi) \quad , \quad (2.27)$$

wobei

$$L^2(\theta, \phi) = -\frac{1}{\sin \theta} \left( \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \quad (2.28)$$

und

$$U(r, \theta, \phi) = \frac{\beta^2}{2} r^2 \sin^2 \theta + F \cdot r \cdot \cos \theta + V(r) \quad . \quad (2.29)$$

Dabei sind  $\beta$  und  $F$  das magnetische und elektrische Feld und  $V(r)$  im Falle des Wasserstoffs das  $\frac{1}{r}$ -Coulomb-Potential. Für Alkaliatome können phänomenologische Potentiale verwendet werden. Es haben sich Modellpotentiale der Form

$$V(r) = -\frac{1}{r} (1 + (Z - 1)e^{-a_1 r} + a_2 r e^{-a_3 r}) \quad (2.30)$$

bewährt (genauer in Kapitel 2.6.5). Die Parameter  $a_n$  werden so bestimmt, daß Eigenwerte und Wellenfunktionen möglichst nahe an experimentellen Werten, oder an Vergleichswerten aus der Quantendefekttheorie liegen.

Über dem Unterraum  $\Omega = \{\theta, \phi\}$  existiert zum Operator (2.28) ein vollständiges Orthonormalsystem aus Eigenfunktionen:

$$\chi_{lm}(\theta, \phi) = \left( 2\pi \frac{(1 + \delta_{0m})(l + |m|)!}{(2l + 1)(l - |m|)!} \right)^{-\frac{1}{2}} P_l^{|m|}(\cos \theta) \begin{cases} \cos(m\phi) , & m \geq 0 \\ \sin(|m|\phi) , & m < 0 \end{cases} \quad (2.31)$$

Die Eigenwerte zu den Eigenfunktionen (2.31) sind  $\lambda_\nu = l(l + 1)$  wobei  $\nu$  zusammenfassend für die Quantenzahlen  $l$  und  $m$  steht. Die  $P_l^{|m|}$  sind die assoziierten Legendrepolynome.

Bei dem hier vorausgesetzten Fall reiner elektrischer bzw. magnetischer Felder und bei parallelen Feldern ist die  $z$ -Komponente des Drehimpulses eine Erhaltungsgröße, deshalb läßt sich die Winkelvariable  $\phi$  abseparieren. Der paramagnetische Term  $-i\beta\partial/\partial\phi$  in (2.27) bewirkt eine vom Magnetfeld abhängige Energieverschiebung, die in den folgenden Rechnungen nicht explizit berücksichtigt werden muß. Die Endergebnisse werden nachträglich modifiziert.

Der Operator (2.28) lautet in diesem Fall

$$L^2(\theta) = -\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \quad (2.32)$$

mit den Eigenfunktionen

$$\chi_l(\theta) = \left( 2\pi \frac{(1 + \delta_{0m})(l + |m|!)}{(2l + 1)(l - |m|)!} \right)^{-\frac{1}{2}} P_l^{|m|}(\cos\theta) \quad . \quad (2.33)$$

Die Magnetquantenzahl  $m$  taucht hier als fester Parameter auf. Die Diskretisierung des Winkelunterraums läßt sich auf die Variable  $\theta$  beschränken. Der  $\theta$ -Unterraum wird durch  $N$  Knotenpunkte  $\theta_k$  diskretisiert. An diesen Gitterpunkten werden dann eindimensionale Funktionen von  $r$  betrachtet:

$$\psi(r, \theta_k) = \psi_k(r) \quad . \quad (2.34)$$

Für die gesuchte Wellenfunktion  $\psi(r, \theta)$  wird folgender Ansatz gemacht:

$$\psi(r, \theta) = \sum_{k=1}^N \left( \sum_{\nu=1}^N \chi_\nu(\theta) (\chi_{\nu k})^{-1} \right) \psi_k(r) \quad . \quad (2.35)$$

Dabei ist  $(\chi^{-1})_{\nu k}$  die Inverse der quadratischen Matrix  $\chi_{k\nu} = \{\chi_\nu(\theta_k)\}$ , bestehend aus den ersten  $N$  Eigenfunktionen (2.33) an den Gitterpunkten  $\theta_k$ . Die Existenz der Inversen für ungerade  $N$  wurde von [Nikiforov et al. 1991] bewiesen.

Setzt man diesen Ansatz in die zeitunabhängige Schrödingergleichung mit dem Hamiltonoperator (2.27) ein, erhält man ein System gekoppelter, eindimensionaler Differentialgleichungen für die radialen Funktionen  $\psi_k$ :

$$\sum_{j=1}^N \left( D'_{kj}(r) + K'_{kj}(r) \right) \psi_j(r) = E \psi_k(r) \quad (2.36)$$

mit

$$D'_{kj}(r) = \left( -\frac{1}{2r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} + U(r, \theta_k) \right) \delta_{kj} \quad (2.37)$$

und

$$K'_{kj} = \frac{1}{2r^2} \sum_{l=m}^{m+N} l(l+1) \chi_{kl} (\chi^{-1})_{lj} \quad . \quad (2.38)$$

Mit den Definitionen

$$\psi(r) = \begin{pmatrix} \psi_1(r) \\ \vdots \\ \psi_N(r) \end{pmatrix} , \quad (2.39)$$

$$D(r) = \begin{pmatrix} D'(r) & 0 \\ 0 & D'(r) \end{pmatrix} , \quad (2.40)$$

$$K(r) = \begin{pmatrix} K'(r) & 0 \\ 0 & K'(r) \end{pmatrix} \quad (2.41)$$

läßt sich das Differentialgleichungssystem (2.36) als übersichtliche Matrixgleichung

$$(D(r) + K(r)) \psi(r) = E \psi(r) \quad (2.42)$$

darstellen. Dieses Differentialgleichungssystem läßt sich auf ein symmetrisches System abbilden. Geht man von einer normierten Wellenfunktion  $\psi$  aus, so ist:

$$\sum_{j,k=1}^N G'_{kj} \int_0^\infty dr r^2 \psi_k(r) \psi_j(r) = 1 \quad (2.43)$$

mit

$$G'_{kj} = \sum_{\nu=1}^N (\chi^{-1})_{\nu k} (\chi^{-1})_{\nu j} \quad . \quad (2.44)$$

Definiert man

$$G = \begin{pmatrix} G' & 0 \\ 0 & G' \end{pmatrix} \quad (2.45)$$

und multipliziert damit das Differentialgleichungssystem (2.42), so erhält man

$$(D_s(r) + K_s(r)) \psi(r) = E G \psi(r) \quad (2.46)$$

mit

$$D_s(r) = \begin{pmatrix} G' \cdot D'(r) & 0 \\ 0 & G' \cdot D'(r) \end{pmatrix}, \quad (2.47)$$

$$K_s(r) = \begin{pmatrix} G' \cdot K'(r) & 0 \\ 0 & G' \cdot K'(r) \end{pmatrix} \quad (2.48)$$

und

$$(G' \cdot D')_{kj}(r) = \left( -\frac{1}{2r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} + U(r, \theta) \right) G'_{kj}, \quad (2.49)$$

$$(G' \cdot K')_{kj}(r) = \frac{1}{2r^2} \sum_{l=m}^{N+m} l(l+1) (\chi^{-1})_{lk} (\chi^{-1})_{lj}. \quad (2.50)$$

Da die Legendrepolynome zur Klasse der orthogonalen Polynome gehören, bilden die Zeilen der Matrix  $\chi_{k\nu}$  ein Orthogonalsystem

$$\sum_{l=m}^{N+m} \chi_l(\theta_k) \chi_l(\theta_j) = \frac{1}{\omega_k} \delta_{kj}, \quad (2.51)$$

wenn die  $\omega_k$  Integrationsgewichte einer Gauß-Legendre-Integration mit  $N$  Stützstellen und  $\theta_k$  die Nullstellen des Legendrepolynoms  $P_{m+N}^m$  sind.

Ist nur ein externes Magnetfeld vorhanden, so läßt sich die Paritätserhaltung zur Reduzierung des Speicher- und Rechenaufwands nutzen. Dazu beschränkt man sich bei den Basisfunktionen (2.33) auf  $N$  Basisfunktionen mit ausschließlich positiver bzw. negativer Parität. Die  $\theta$ -Achse wird in  $2N$  Knotenpunkten diskretisiert, bei der Bildung der Matrix  $\chi_{k\nu} = \{\chi_\nu(\theta_k)\}$  werden dann die Basisfunktionen an den ersten  $N$  Diskretisierungspunkten ausgewertet. Bei der Berechnung von Eigenwerten hat man neben effizienterer Rechnungen den weiteren Vorteil, daß die gefundenen Eigenwerte und -funktionen wegen der festen Parität einfacher den korrekten Quantenzahlen zugeordnet werden können.

Eine Darstellung für den Fall beliebig zueinander orientierter elektrischer und magnetischer Felder findet sich in [Faßbinder 1997].

## 2.3 Grundlagen der Methode der Finiten Elemente

Gegeben sei eine Differentialgleichung

$$Df(\vec{r}) = 0 \quad (2.52)$$

mit dem Differentialoperator  $D$  und der gesuchten Lösungsfunktion  $f(\vec{r})$  mit  $\vec{r} \in \Omega \subset \mathbb{R}^n$  und den Randbedingungen

$$f(\vec{r}) = \phi(\vec{r}) \text{ auf } \Gamma, \text{ dem Rand von } \Omega \quad (2.53)$$

Im Falle eines stetigen Problems läßt sich die Differentialgleichung mittels der Umformulierung in ein äquivalentes Variationsproblem in die für das Finite-Elemente-Verfahren notwendige Integralform überführen. Dazu muß zunächst ein zur Differentialgleichung passendes Funktional

$$\Pi = \int_{\Omega} d\Omega G(f(\vec{r})) + \int_{\Gamma} d\Gamma \phi(\vec{r}) \quad (2.54)$$

gefunden werden. Der Definitionsbereich  $\Omega$  wird in Teilbereiche  $\Omega_i$ , die sogenannten finiten Elemente, aufgeteilt, wobei  $\cup_i \Omega_i = \Omega$ . Damit läßt sich das Funktional (2.54) als Summe über die finiten Elemente schreiben:

$$\Pi = \sum_i \left( \int_{\Omega_i} d\Omega G(f(\vec{r})) + \int_{\Gamma_i} d\Gamma \phi(\vec{r}) \right) \quad (2.55)$$

In jedem Element, spezifiziert durch den Index  $i$ , wird die Lösungsfunktion  $f(\vec{r})$  durch eine Entwicklung nach lokalen Basisfunktionen  $P_k^{(i)}$  mit den Entwicklungskoeffizienten  $\phi_k^{(i)}$  interpoliert:

$$\tilde{f}^{(i)} = \sum_k \phi_k^{(i)} P_k^{(i)} \quad (2.56)$$

Dieser Ansatz wird in das Funktional (2.54) eingesetzt und die Variation

$$\delta\Pi = 0 \quad (2.57)$$

bzgl. der Entwicklungskoeffizienten  $\phi_k^{(i)}$  durchgeführt. Damit ergibt sich für  $N$  finite Elemente mit jeweils  $M$  lokalen Basisfunktionen

$$\delta\Pi = \frac{\partial\Pi}{\partial\phi_1^{(1)}} \cdot \delta\phi_1^{(1)} + \dots + \frac{\partial\Pi}{\partial\phi_M^{(1)}} \cdot \delta\phi_M^{(1)} + \dots + \frac{\partial\Pi}{\partial\phi_1^{(N)}} \cdot \delta\phi_1^{(N)} + \dots + \frac{\partial\Pi}{\partial\phi_M^{(N)}} \cdot \delta\phi_M^{(N)} \quad (2.58)$$

Da die Variationen  $\delta\phi_k^{(i)}$  unabhängig voneinander durchgeführt werden können, ergibt sich das algebraische Gleichungssystem

$$\frac{\partial \Pi}{\partial \vec{\phi}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \Pi}{\partial \phi_1^{(1)}} \\ \vdots \\ \frac{\partial \Pi}{\partial \phi_M^{(N)}} \end{pmatrix} = 0 \quad . \quad (2.59)$$

Das Auffinden eines zu einer gegebenen Differentialgleichung passenden Funktionals ist im Allgemeinen eine nichttriviale Aufgabe. Für ein System linearer Differentialgleichungen

$$\hat{A}\vec{f} + \vec{b} = 0 \quad (2.60)$$

mit dem selbstadjungierten Operator  $\hat{A}$  läßt sich ein geschlossener Ausdruck für ein zugehöriges Funktional angeben (siehe z.B. [Zienkiewicz 1984]):

$$\Pi = \int_{\Omega} (\vec{f}^{*T} \cdot \hat{A}\vec{f} + 2\vec{f}^{*T} \cdot \vec{b}) d\Omega \quad . \quad (2.61)$$

Damit ergibt sich analog zu (2.59) ein lineares algebraisches Gleichungssystem mit einer symmetrischen, gebänderten Matrix  $L$ :

$$\frac{\partial \Pi}{\partial \vec{\phi}} = L\vec{\phi} + \vec{c} \quad . \quad (2.62)$$

Für Eigenwertgleichungen ergeben sich anstatt algebraischer Gleichungssysteme verallgemeinerte Eigenwertprobleme zur Bestimmung der lokalen Entwicklungskoeffizienten  $\phi_k^{(i)}$  (vgl.Kap.2.6).

## 2.4 Wahl der finiten Elemente

Bei den in dieser Arbeit behandelten quantenmechanischen Problemen wurden unterschiedliche Aufteilungen des Raumes in finite Elemente verwendet und sollen im Folgenden kurz beschrieben werden. Die Wahl eines problemangepaßten Finite-Elemente-Gitters hat erheblichen Einfluß auf die Konvergenzgeschwindigkeit des Verfahrens.

Die einfachste Aufteilung des Raumes mit dem Definitionsbereich  $[z_{min}, z_{max}]$  besteht aus  $N$  äquidistanten finiten Elementen, mit der Definition der Elementengrenzen

$$z_i = \frac{i-1}{N} \cdot (z_{max} - z_{min}) + z_{min} \quad , \quad i = 1, \dots, N+1 \quad . \quad (2.63)$$

In Problemen der Atomphysik ist die Wellenfunktion im Allgemeinen in Kernnähe struktureicher als bei größeren radialen Abständen  $r$ . Eine der Knotenstruktur des Wasserstoffs in Kugelkoordinaten im Intervall  $[0, r_{max}]$  hervorragend angepaßte Definition ist eine quadratische Aufweitung der Elementgrenzen

$$r_i = \frac{(i-1)^2}{N^2} r_{max} \quad , \quad i = 1, \dots, N+1 \quad . \quad (2.64)$$

Die Größe der finiten Elemente wächst linear an:

$$h_i = r_{i+1} - r_i = \frac{2i-1}{N^2} r_{max} \quad , \quad i = 1, \dots, N \quad . \quad (2.65)$$

Für die Hartree-Fock-Gleichungen in adiabatischer Näherung mit dem Definitionsbereich  $[0, z_{max}]$  wurde u.a. von [Pröschel 1982] zur Durchführung des Numerov-Verfahrens eine exponentielle Aufweitung benutzt:

$$z_i = \frac{1}{Z} e^{\rho_i} \quad \text{mit} \quad \rho_i = \rho_1 + (i-1)h_N \quad . \quad (2.66)$$

Dabei ist  $h_N$  die Schrittweite und  $\rho_1$  der Anfangswert, der bestimmt, wie nahe die erste Stützstelle  $z_1$  am Ursprung liegt. Bei den Rechnungen in Kapitel 5.3 zeigte sich, daß die quadratische Aufweitung der Finite-Elemente-Grenzen für die Lösung der Hartree-Fock-Gleichungen in adiabatischer Näherung mit der exponentiellen Aufweitung bezüglich der Konvergenzgeschwindigkeit vergleichbar ist.

## 2.5 Interpolationspolynome

Die Wellenfunktion wird auf jedem finiten Element durch eine Entwicklung nach  $K$  lokalen Basisfunktionen dargestellt ( $i$  ist der Index des finiten Elements):

$$\psi^{(i)}(r) = \sum_{k=1}^K \psi_k^{(i)} P_k(x) \quad . \quad (2.67)$$

Dabei wird auf jedem Element mit den Elementgrenzen  $[r_i, r_{i+1}]$  und der Länge  $h_i$  die lokale Koordinate

$$x = \frac{(r - r_i)}{h_i} \quad , \quad x \in [0, 1] \quad (2.68)$$

eingeführt. Zwischen der globalen Variablen  $r$  und der lokalen Variablen  $x$  besteht der Zusammenhang

$$r = r_i + h_i x \quad , \quad dr = h_i dx \quad . \quad (2.69)$$

Als lokale Basisfunktionen wurden in dieser Arbeit Hermite-Interpolationspolynome, Lagrange-Interpolationspolynome und B-Splines verwendet. Die B-Spline-Interpolation hat sich bei allen Problemen als überlegen erwiesen. Bei Lagrange- und Hermite-Interpolation spielen bestimmte Koordinaten, die Knoten des finiten Elements, eine entscheidende Rolle. Bei äquidistanter Knotenverteilung lauten die lokalen Koordinaten der Knoten

$$x_k = \frac{k-1}{K-1} \quad , \quad (k = 1, \dots, K) \quad . \quad (2.70)$$

Die Anzahl der Knoten  $K$  ist mit der Polynomordnung verknüpft. Im einfachsten Fall haben die finiten Elemente nur 2 Knoten, jeweils an ihren Elementgrenzen. Die Hinzunahme weiterer Knoten führt zu besser angepaßten Polynomsätzen höherer Ordnung. Dabei ist aber Vorsicht geboten, da zu hohe Polynomordnungen zu Oszillationen führen können.

## 2.5.1 Lagrange-Interpolation

Die Lagrange-Interpolation stellt den einfachsten Fall der Interpolation dar. Die Lagrange-Interpolationspolynome sind Polynome der Ordnung  $K-1$  und durch die Bedingung

$$P_k(x_j) = \delta_{kj} \quad (2.71)$$

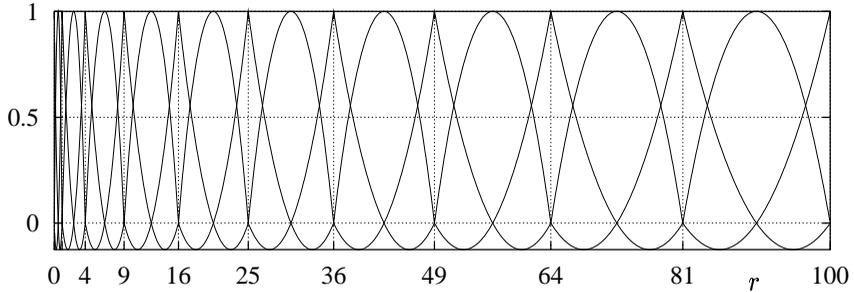
an den Knoten  $x_j$  der Elemente eindeutig bestimmt. Konkret lauten die Lagrange-Interpolationspolynome

$$P_i(x) = \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{K-1} \frac{(x - x_j)}{(x_i - x_j)} \quad . \quad (2.72)$$

Die Bedingung (2.71) impliziert, daß die Entwicklungskoeffizienten  $\psi_k^{(i)}$  in (2.67) den Werten der globalen Wellenfunktion  $\psi(r)$  an den Knotenpunkten entsprechen. Die Stetigkeit der interpolierten Wellenfunktion wird durch die Forderung

$$\psi_K^{(i)} = \psi_1^{(i+1)} \quad (2.73)$$

gewährleistet. In Abbildung 2.1 ist eine Basis aus Lagrange-Polynomen 2. Ordnung für quadratisch aufgeweitete finite Elementgrenzen mit 10 finiten Elementen und jeweils 3 Knoten dargestellt. Die Abstände der Knoten eines finiten Elements müssen nicht zwingend äquidistant sein.



**Abb. 2.1:** Basis aus Lagrange-Polynomen 2. Ordnung für quadratisch aufgeweitete Finite-Elemente-Grenzen für 10 finite Elemente mit jeweils 3 Knoten.

## 2.5.2 Hermite-Interpolation

Die Hermite-Interpolationspolynome sind durch die Bedingungen

$$P_k(x_j) = \delta_{kj} \quad , \quad \left. \frac{dP_k(x)}{dx} \right|_{x=x_j} = 0 \quad , \quad (2.74)$$

$$\tilde{P}_k(x_j) = 0 \quad , \quad \left. \frac{d\tilde{P}_k(x)}{dx} \right|_{x=x_j} = \delta_{kj} \quad (2.75)$$

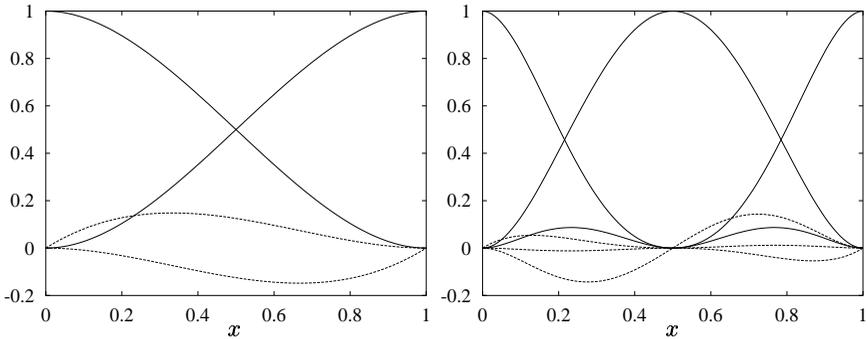
eindeutig bestimmt. Sie haben die Ordnung  $2K - 1$ . Die Entwicklung nach Hermite-Interpolationspolynomen auf dem  $i$ ten finiten Element lautet damit entsprechend (2.67)

$$\psi^{(i)}(r) = \sum_{k=1}^K \left( P_k(x) \psi_k^{(i)} + h_i \tilde{P}_k(x) \psi_k^{\prime(i)} \right) \quad . \quad (2.76)$$

Der Faktor  $h_i$  ergibt sich aus der Substitution (2.69). Die gegenüber der Lagrange-Interpolation zusätzlich auftretenden Koeffizienten  $\psi_k^{(i)}$  entsprechen den Werten der Ableitung der globalen Funktion  $\psi(r)$  an den Knoten der Elemente. Neben der Stetigkeit der Wellenfunktion wird nun auch die Stetigkeit der Ableitung verlangt:

$$\begin{aligned} \psi_K^{(i)} &= \psi_1^{(i+1)} \quad , \\ \psi'_K{}^{(i)} &= \psi'_1{}^{(i+1)} \quad . \end{aligned} \tag{2.77}$$

Das ist der entscheidende Vorteil gegenüber der Lagrange-Interpolation. In Abbildung 2.2 sind Beispiele für eine lokale Basis aus Hermite-Interpolationspolynomen für zwei und drei Knoten pro finitem Element dargestellt.



**Abb. 2.2:** Hermite-Interpolationspolynome mit a) 2 Knoten pro finitem Element (Polynome 3.Ordnung) und b) 3 Knoten pro finitem Element (Polynome 5.Ordnung). Durchgezogene Linien:  $P_k$ , gestrichelte Linien:  $\tilde{P}_k$ .

Mit den Abkürzungen

$$p_k(x) = \begin{cases} P_{(k+1)/2}(x) & \text{für } k \text{ ungerade} \\ \tilde{P}_{k/2}(x) & \text{für } k \text{ gerade} \end{cases} \quad , \tag{2.78}$$

$$\phi_k^{(i)} = \begin{cases} \psi_{(k+1)/2}^{(i)} & \text{für } k \text{ ungerade} \\ h_i \psi'_{k/2}{}^{(i)} & \text{für } k \text{ gerade} \end{cases} \tag{2.79}$$

ergibt sich eine übersichtlichere Darstellung von (2.76):

$$\psi^{(i)}(r) = \sum_{k=1}^{2K} p_k(x) \phi_k^{(i)} \quad . \quad (2.80)$$

### 2.5.3 B-Spline-Interpolation

Die Interpolation mit B-Splines unterscheidet sich maßgeblich von Lagrange- und Hermite-Interpolation. Die Entwicklung einer Wellenfunktion nach B-Splines lautet:

$$\psi(r) = \sum_{i=1}^n \alpha_i B_i(r) \quad . \quad (2.81)$$

Für eine gegebene Knotensequenz  $\{r_1, \dots, r_m\}$  sind die B-Splines definiert durch die Rekursionsformeln

$$B_{i,1}(r) = \begin{cases} 1 & , \quad r_i < r < r_{i+1} \\ 0 & , \quad \text{sonst.} \end{cases} \quad (2.82)$$

und

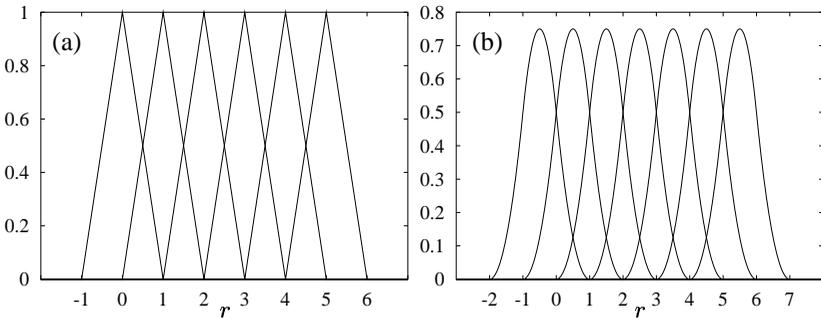
$$B_{i,k}(r) = \frac{r - r_i}{r_{i+k-1} - r_i} B_{i,k-1}(r) + \frac{r_{i+k} - r}{r_{i+k} - r_{i+1}} B_{i+1,k-1}(r) \quad . \quad (2.83)$$

Es sind Polynome vom Grade  $k - 1$  und bilden eine Zerlegung der Eins. Eine hohe Knotenzahl führt im Gegensatz zur Lagrange- und Hermite-Interpolation jedoch nicht zu Oszillationen. Ein wesentlicher Unterschied zur Lagrange- und Hermite-Interpolation im Rahmen eines Finite-Elemente-Ansatzes ist die globale Definition der B-Splines, daher entfällt in (2.67) der  $(i)$ -Index für  $\psi(r)$ . Es ergeben sich, wie im Folgenden noch ausführlicher gezeigt, für die B-Spline-Interpolation in Verbindung mit Finite-Elemente-Methoden zwei verschiedene Betrachtungsweisen:

- Aufteilung des Raumes in finite Elemente mit zwei Knoten (jeweils an den Elementengrenzen) mit einer nichtlokalen Basis; benachbarte finite Elemente haben gemeinsame Basis-Funktionen. Mit dieser Auffassung läßt sich formal wieder eine lokale Entwicklung entsprechend (2.67) durchführen, jedoch mit Basis-Funktionen, die sich über mehrere Elemente erstrecken.

- Globale Betrachtung des Raumes mit im Prinzip einem finiten Element mit hoher Knotenzahl und entsprechend vielen Basisfunktionen.

In Abbildung 2.3 sind Beispiele einfacher B-Spline-Basissysteme zur Interpolation von Funktionen im Intervall  $[0, 5]$  gezeigt. Es wurde hier eine einfache äquidistante Knotensequenz  $\{r_0 = 0, \dots, r_5 = 5\}$  gewählt. In 2.3a sind B-Splines 2.Ordnung aufgetragen. Um an den Rändern des Interpolationsintervalls die Zerlegung der Eins zu gewährleisten, muß die Knotenfolge um die Knoten  $r_{-1} = -1$  und  $r_6 = 6$  erweitert und die Randsplines, welche auch außerhalb des Interpolationsintervalls nicht verschwinden, hinzugenommen werden. In 2.3b sind für das gleiche Interpolationsintervall B-Splines 3.Ordnung aufgetragen. Der höheren Ordnung entsprechend müssen weitere Knoten ( $r_{-2} = -2, r_{-1} = -1, r_6 = 6, r_7 = 7$ ) und Randsplines hinzugenommen werden, um im gesamten Interpolationsintervall die Zerlegung der Eins zu ermöglichen.



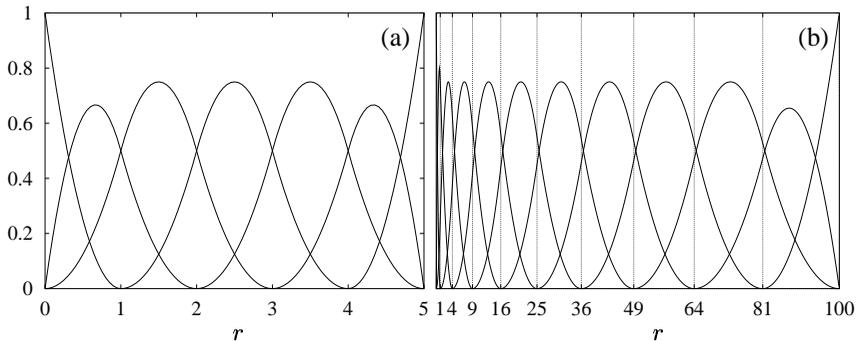
**Abb. 2.3:** Vollständige B-Spline-Basissätze zur Interpolation im Intervall  $[0, 5]$  (a) 2.Ordnung (b) 3.Ordnung .

Durch die freie Wahl der Knotensequenz läßt sich die unbefriedigende Notwendigkeit von Knotenpunkten außerhalb des Interpolationsintervalls vermeiden. Dazu vollzieht man einen Grenzübergang, bei denen man die Knotenpunkte außerhalb des Interpolationsintervalls gegen die Knotenpunkte der Intervallgrenzen streben läßt. Für das Beispiel in Abbildung 2.3b vollzieht man den Grenzübergang

$$r_{-2}, r_{-1} \rightarrow r_0 \quad \text{und} \quad r_5 \leftarrow r_6, r_7 \tag{2.84}$$

und man erhält eine B-Spline-Basis, deren Randsplines außerhalb des Interpolationsintervalls verschwinden (Abbildung 2.4a).

In Abbildung 2.4b) ist eine B-Spline-Basis mit quadratisch aufgeweiteten Knoten und multiplen Knoten an den Grenzen des Interpolationsintervalls dargestellt. Basen mit quadratisch aufgeweiteten Knoten wurden in der vorliegenden Arbeit für alle Probleme der Atomphysik verwendet.



**Abb. 2.4:** a) B-Spline-Basis 3.Ordnung zur Interpolation im Intervall  $[0, 5]$  mit den multiplen Knoten  $r_{-2} = r_{-1} = r_0 = 0$  und  $r_5 = r_6 = r_7 = 5$ . b) B-Spline-Basis 3.Ordnung mit quadratisch aufgeweiteten Knoten und multiplen Knoten an den Grenzen des Interpolationsintervalls  $[0, 100]$ .

## 2.6 Anwendung des Finite-Elemente-Verfahrens auf die Schrödingergleichung

Zur Erläuterung der wesentlichen Gesichtspunkte der Methode wird zunächst die eindimensionale, zeitunabhängige Schrödingergleichung behandelt. Zu gegebenem Potential  $V(z)$  lautet die Schrödingergleichung

$$\left( -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dz^2} + V(z) - E \right) \psi(z) = 0 \quad . \quad (2.85)$$

Nach (2.61) lautet das Funktional zum bzgl. (2.85) äquivalenten Variationsproblem  $\delta\Pi = 0$

$$\Pi = \int_{-\infty}^{\infty} dz \psi^+(z) \left( -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dz^2} + V(z) - E \right) \psi(z) \quad . \quad (2.86)$$

Im Folgenden wird es sich als günstig erweisen, den kinetischen Term in (2.86) umzuformen. Mittels partieller Integration erhält man

$$\int_{-\infty}^{\infty} dz \psi^+(z) \left( -\frac{d^2}{dz^2} \right) \psi(z) = \left[ -\psi^+(z) \frac{d}{dz} \psi(z) \right]_{-\infty}^{\infty} + \int_{-\infty}^{\infty} dz \frac{d\psi^+(z)}{dz} \frac{d\psi(z)}{dz} \quad . \quad (2.87)$$

Der erste Term auf der rechten Seite verschwindet unter der Voraussetzung hinreichend schnell abfallender Wellenfunktionen. Numerisch wird man einen endlichen Integrationsbereich wählen müssen. Dann verschwindet der Term strenggenommen nicht mehr vollständig, wählt man jedoch ein hinreichend großes Integrationsintervall  $[z_{min}, z_{max}]$ , so kann man ihn vernachlässigen. Damit wird das Funktional (2.86) zu

$$\Pi = \int_{z_{min}}^{z_{max}} dz \frac{1}{2} \frac{d\psi^+(z)}{dz} \frac{d\psi(z)}{dz} + \int_{z_{min}}^{z_{max}} dz \psi^+(z) V(z) \psi(z) - E \int_{z_{min}}^{z_{max}} dz \psi^+(z) \psi(z) \quad . \quad (2.88)$$

Das Integrationsintervall wird in  $N$  finite Elemente zerlegt und die Wellenfunktion auf jedem Element durch lokale Basisfunktionen gemäß (2.67) interpoliert. Damit ergibt sich für das Funktional (2.88) die Darstellung

$$\Pi = \sum_{i=1}^N \sum_{kj=1}^K \left( \psi_k^{(i)} H_{kj}^{(i)} \psi_j^{(i)} - E \psi_k^{(i)} S_{kj}^{(i)} \psi_j^{(i)} \right) \quad (2.89)$$

mit

$$H_{kj}^{(i)} = \frac{1}{2h_i} \int_0^1 dx \frac{dP_k(x)}{dx} \frac{dP_j(x)}{dx} + h_i \int_0^1 dx V(x_i + h_i x) P_k(x) P_j(x) \quad , \quad (2.90)$$

$$S_{kj}^{(i)} = h_i \int_0^1 dx P_k(x) P_j(x) \quad . \quad (2.91)$$

$x$  ist die lokale Variable auf dem  $i$ ten finiten Element mit der linken Grenze  $x_i$  und der Länge  $h_i$ . Der erste Integrand in (2.91) und der Integrand in (2.90) sind Polynome, so daß sich die Integrale mit einer Gauß-Legendre-Integration exakt berechnen lassen. Für zahlreiche Probleme der Quantenmechanik ergibt sich auch für das  $V(z)$  enthaltende Integral ein Polynom als Integrand. Die Stützstellenzahl der Gauß-Legendre-Integration richtet sich nach der Art des Potentials und der gewählten Interpolationsmethode. Konvergenzuntersuchungen haben gezeigt, daß auch für die in dieser Arbeit betrachteten Potentiale, die eine Polynomdarstellung des Integranden nicht zulassen, die Gauß-Legendre-Integration mit hinreichender Genauigkeit durchführbar ist.

Durch Ummummerierung der Koeffizienten  $\psi_j^{(i)}$  und Matrixelemente  $H_{kj}^{(i)}, S_{kj}^{(i)}$  wird der Index für die Elementnummer eliminiert und man erhält die lokale Matrixrelation

$$\Pi = \sum_{\mu\nu=1}^{n_1} \psi_\mu H_{\mu\nu} \psi_\nu - E \psi_\mu S_{\mu\nu} \psi_\nu \quad . \quad (2.92)$$

Anwendung des Variationsprinzips  $\delta\Pi = 0$  mit

$$\delta\Pi = \frac{\partial\Pi}{\partial\psi_1} \delta\psi_1 + \dots + \frac{\partial\Pi}{\partial\psi_n} \delta\psi_n \quad (2.93)$$

führt auf ein verallgemeinertes Eigenwertproblem

$$\sum_{\nu=1}^{n_1} H_{\mu\nu} \psi_\nu = E \sum_{\nu=1}^{n_1} S_{\mu\nu} \psi_\nu \quad (2.94)$$

zur Bestimmung der Energiewerte  $E$  und der unbekanntenen Koeffizienten  $\psi_\nu$  und damit der Wellenfunktion. Die Dimension  $n_1$  der Matrizen  $H_{\mu\nu}$  und  $S_{\mu\nu}$  und deren Gestalt hängt wiederum von der Art der Interpolation ab. Die wesentlichen Eigenschaften der Matrizen für die in 2.5 beschriebenen Interpolationsverfahren werden in 2.6.2 beschrieben.

### 2.6.1 Numerische Lösung des Eigenwertproblems

Um das verallgemeinerte Eigenwertproblem (2.94) zu lösen, wurde in dieser Arbeit das Programmpaket ARPACK verwendet. ARPACK ist eine Sammlung von Fortran77-Programmen zur Lösung großer Eigenwertprobleme. In der Praxis sind oft nicht sämtliche numerisch möglichen Eigenwerte eines Eigenwertproblems gefragt, man möchte vielmehr gezielt ab einem bestimmten Wert eine geringe Zahl von Eigenwerten und ggf. Eigenfunktionen bestimmen. In diesen Fällen ist eine vollständige Diagonalisierung nicht notwendig. Minimum und Anzahl der Energiewerte können bei ARPACK vorgegeben werden. Das Verfahren beruht auf einer Variante des Arnoldiverfahrens, die sogenannte "Implicit Restarted Arnoldi Method". Im Falle symmetrischer Matrizen, wie z.B. in (2.94), wird das Verfahren äquivalent zu einer Variante des Lanczos-Verfahrens, die sogenannte "Implicitly Restarted Lanczos Method". Diese Methode kann als Verbindung des Arnoldi/Lanczos-Verfahrens mit der "Implicitly Shifted QR"-Technik betrachtet werden. Im Folgenden wird der in ARPACK implementierte Algorithmus kurz beschrieben. Eine ausführlichere Darstellung findet man in [Lehoucq et al.1996].

Gesucht seien Eigenwerte einer Matrix  $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$  mit bestimmten Eigenschaften (z.B. die betragsmäßig kleinsten Eigenwerte ab einer vorgegebenen unteren Grenze). Es wird zunächst mit dem Startvektor  $v_1$  die  $m$ -fache Arnoldi-Faktorisierung  $AV_m = V_m H_m + \vec{f}_m \vec{e}_m^T$  durchgeführt. Dabei sind die Spalten von  $V_m \in \mathbb{C}^{n \times m}$  die Vektoren einer orthogonalen Basis des Krylov-Unterraums  $\mathcal{K}_m(A, \vec{v}_1) = \text{Span}\{\vec{v}_1, A\vec{v}_1, A^2\vec{v}_1, \dots, A^{m-1}\vec{v}_1\}$ ,  $V_m^H \vec{f}_k = 0$  und  $H_m \in \mathbb{C}^{m \times m}$  ist eine obere Hessenberg-Matrix. Für hermitesche Matrizen  $A$  ist  $H_m$  eine reelle, symmetrische tridiagonale Matrix und man erhält eine  $m$ -fache Lanczos-Faktorisierung. Die folgenden Iterationsschritte werden bis zur Konvergenz durchgeführt:

1. Berechnung der Eigenwerte  $\{\lambda_j : j = 1, 2, \dots, m\}$  von  $H_m$ . Die Eigenwerte werden nach vom Benutzer vorgegebenen Kriterien in einen Satz von Eigenwerten mit den gewünschten Eigenschaften  $\{\lambda_j : j = 1, 2, \dots, k\}$  und in einen Satz von Eigenwerten  $\{\lambda_j : j = k + 1, k + 2, \dots, m\}$ , welche die

Kriterien nicht erfüllen, sortiert.

2. Durchführung von  $p = m - k$  Schritten der QR-Iteration mit den unerwünschten Eigenwerten  $\{\lambda_j : j = k + 1, k + 2, \dots, m\}$  als Verschiebungen  $\mu_j$  für die QR-Zerlegung von  $H_m - \mu_j I$ . Man erhält schließlich  $H'_m = Q_m^{-1} H_m Q_m$  mit  $Q_m = Q^{(0)} \cdot \dots \cdot Q^{(p)}$ .
3. "Restart": die m-fache Arnoldi-Faktorisierung wird mit  $Q_k$  multipliziert.  $Q_k$  besteht aus den ersten k Spalten von  $Q_m$ . Das ergibt eine k-fache Arnoldi-Faktorisierung  $AV_m Q_k = V_m Q_k H'_m + \vec{f}_m \vec{e}_m^T$  wobei  $H'_k = H'_m(1 : k, 1 : k)$
4. Die k-fache Arnoldi-Iteration wird zu einer m-fachen erweitert.

Bei verallgemeinerten Eigenwertproblemen der Form  $A\vec{x} = \lambda M\vec{x}$  wird zunächst eine Spektraltransformation

$$A\vec{x} = \lambda M\vec{x} \Leftrightarrow (A - \sigma M)\vec{x} = (\lambda - \sigma)M\vec{x} \quad (2.95)$$

durchgeführt und dann das Eigenwertproblem

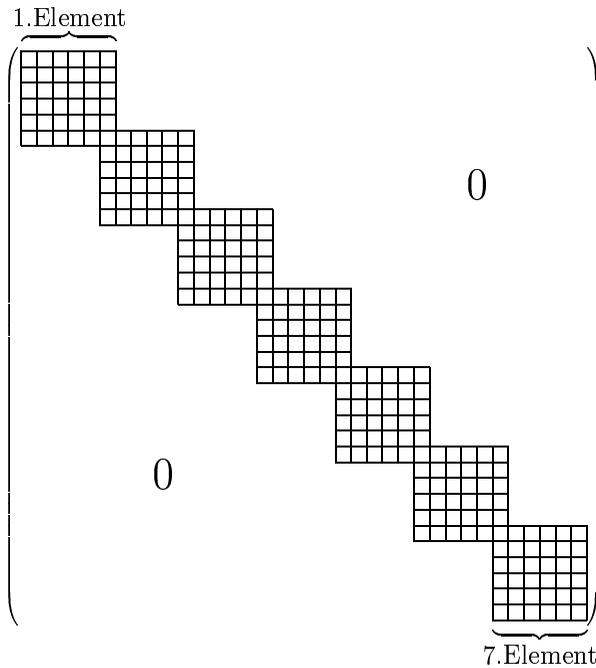
$$(A - \sigma M)^{-1} M\vec{x} = \vec{x}\theta \quad \text{mit} \quad \theta = \frac{1}{\lambda - \sigma} \quad (2.96)$$

betrachtet.

## 2.6.2 Matrixstruktur der verschiedenen Interpolationsverfahren

### Matrizen mit Lagrange-Interpolation

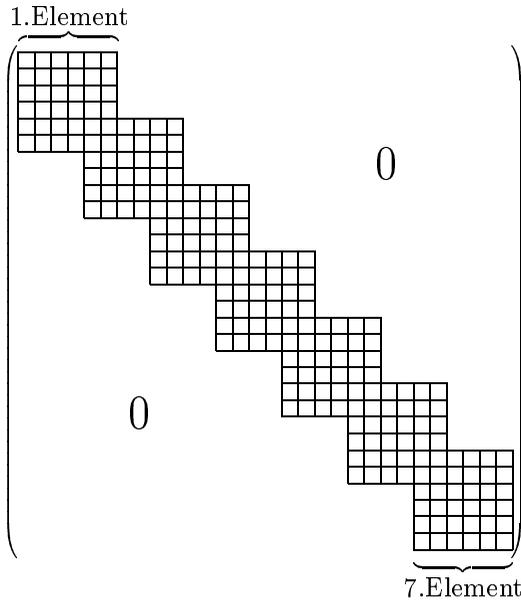
Um Stetigkeit zu gewährleisten, ist nach (2.73) der Funktionswert am  $K$ -ten Knoten des  $i$ ten Elements derselbe wie am ersten Knoten des  $(i + 1)$ ten Elements. Entsprechend ergibt sich an den Elementengrenzen ein Überlapp der die finiten Elemente repräsentierenden Teilmatrizen. In Abbildung 2.5 ist die Struktur der Matrizen  $H_{\mu\nu}$  und  $S_{\mu\nu}$  für Lagrange-Polynome 5.Ordnung (d.h. 6 Knoten pro Element) und sieben finiten Elementen dargestellt. Allgemein ergeben sich für  $K$  Knoten und  $N$  finite Elemente Matrizen der Dimension  $n_1 = (K - 1) \cdot N + 1$  mit  $n_0 = (K^2 - 1) \cdot N + 1$  nichtverschwindenden Matrixelementen.



**Abb. 2.5:** Struktur der Matrizen  $H_{\mu\nu}$  und  $S_{\mu\nu}$  für Lagrange-Polynome 5. Ordnung (d.h. 6 Knoten pro Element) und sieben finiten Elementen.

### Matrizen mit Hermite-Interpolation

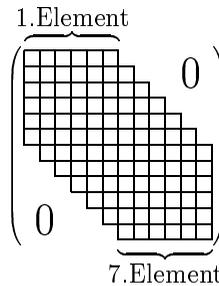
Da bei der Hermite-Interpolation nach (2.77) neben der Stetigkeit der Wellenfunktion auch die Stetigkeit der 1. Ableitung verlangt wird, ergibt sich an den gemeinsamen Knoten benachbarter finiter Elemente wie in Abbildung 2.6 ersichtlich ist, ein entsprechend größerer Überlapp in der Matrixstruktur. Die Dimension der Matrizen beträgt hier  $n_1 = 2 \cdot N \cdot (K - 1) + 2$  mit  $n_0 = 4 \cdot (K^2 - 1) \cdot N + 4$  nichtverschwindenden Matrixelementen.



**Abb. 2.6:** Struktur der Matrizen  $H_{\mu\nu}$  und  $S_{\mu\nu}$  für Hermite-Polynome 5. Ordnung (d.h. 3 Knoten pro Element) und sieben finiten Elementen.

### Matrizen mit B-Spline-Interpolation

Wie in Kapitel 2.5.3 erörtert, erstrecken sich die B-Splines i.A. über mehrere finite Elemente. Infolgedessen erhält man eine Matrixstruktur wie sie für unser bisheriges Beispiel in Abbildung 2.7 dargestellt ist. Die Ordnung der B-Splines ist mit der bisherigen Bezeichnungsweise allerdings um Eins höher als bei der Lagrange- und Hermite-Interpolation, dadurch sind auf jedem finiten Element ebenfalls 6 lokale Basisfunktionen definiert. Allgemein beträgt die Dimension der Matrizen  $n_1 = N + K - 1$  mit  $n_0 = (2K - 1) \cdot N + (K - 1)^2$  nichtverschwindenden Matrixelementen.  $K$  ist hier die Ordnung der B-Splines.



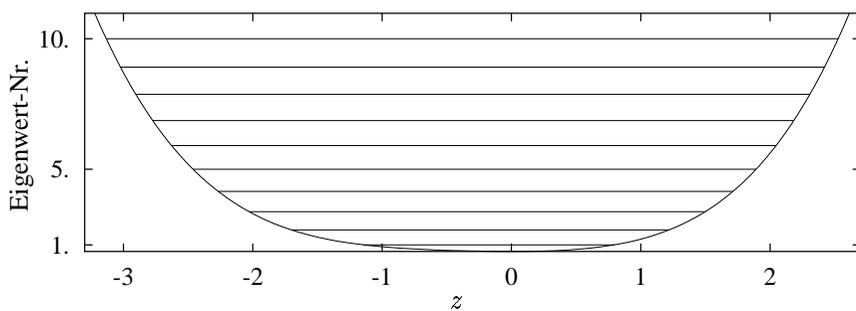
**Abb. 2.7:** Struktur der Matrizen  $H_{\mu\nu}$  und  $S_{\mu\nu}$  für B-Splines 6. Ordnung (d.h. 6 Basis-Funktionen pro Element) und sieben finiten Elementen.

### 2.6.3 Der anharmonische Oszillator

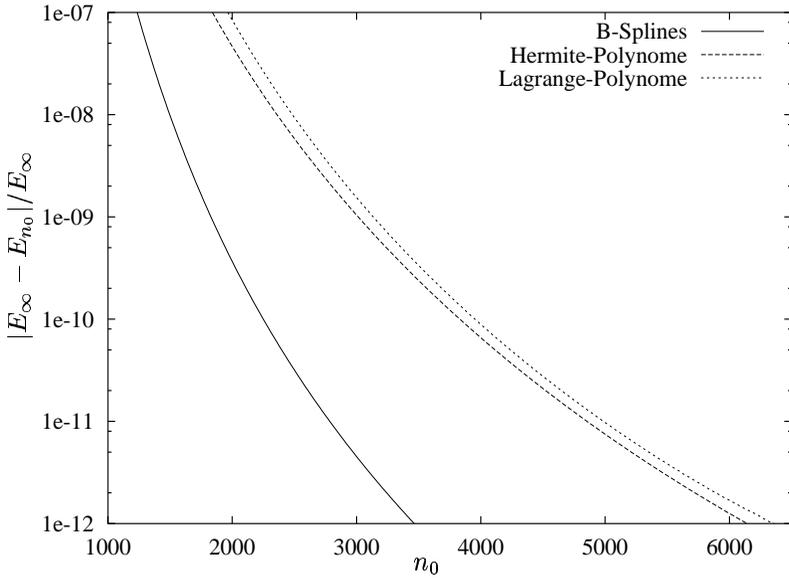
Die Potentialfunktion beim eindimensionalen, anharmonischen Oszillator lautet mit anharmonischen Termen bis einschließlich 4. Ordnung (die Vorfaktoren sind willkürlich gewählt):

$$V(z) = \frac{1}{2}z^2 + \frac{1}{3}z^3 + \frac{1}{4}z^4 \quad . \quad (2.97)$$

Der Potentialverlauf mit den ersten 10 Energieeigenwerten ist in Abbildung 2.8 graphisch dargestellt. Es ergeben sich positive, nichtentartete Energieeigenwerte. Die Energie des 10. Zustands konvergiert mit den in den vorigen Kapiteln beschriebenen Finite-Elemente-Verfahren gegen den Wert  $E_{10} = 18.750312668492$ . In Abbildung 2.9 ist ein Vergleich der Finite-Elemente-Verfahren mit den drei oben beschriebenen Interpolationstechniken dargestellt. Auf der Ordinate ist der relative Fehler bezüglich des Referenzwertes  $E_{10}$  und auf der Abszisse die Anzahl der nichtverschwindenden Matrixelemente  $n_0$  aufgetragen. Es wurden auf finiten Elementen mit gemäß (2.63) äquidistanten Elementgrenzen jeweils 6 Basisfunktionen benutzt und die Anzahl der finiten Elemente variiert. Offensichtlich ist der Speicherbedarf bei Hermite- und Lagrange-Interpolation bei gleicher Genauigkeit um fast einen Faktor 2 höher als bei der B-Spline-Interpolation.



**Abb. 2.8:** Das Potential des anharmonischen Oszillators  $V(z) = \frac{1}{2}z^2 + \frac{1}{3}z^3 + \frac{1}{4}z^4$  mit den ersten 10 Energieeigenwerten.



**Abb. 2.9:** Zusammenhang zwischen den nichtverschwindenden Matrixelementen  $n_0$  und der relativen Genauigkeit bei der Berechnung der Energieeigenwerte des anharmonischen Oszillators für Hermite-, Lagrange- und B-Spline-Interpolation.

### 2.6.4 Das Hulthén-Potential

Das Hulthén-Potential wurde als Approximation des Yukawa-Potentials mit analytischen Lösungen für den 2-Nukleonen S-Zustand ( $l=0$ ) eingeführt. Es lautet

$$V(r) = -V_0 \frac{e^{-r/a}}{1 - e^{-r/a}} \quad \text{mit } a > 0 \quad . \quad (2.98)$$

Dieses Potential verhält sich für kleine Werte von  $r$  wie das Coulomb-Potential  $V_c = -V_0 a/r$  und fällt für große Werte von  $r$  exponentiell ab. Dadurch ist die Anzahl der möglichen Energieeigenwerte im Gegensatz zum Coulomb-Potential begrenzt und wird durch den Parameter  $a$  bestimmt. Es gilt für  $V_0 = 1$  (siehe z.B. [Flügge 1971])

$$n < \sqrt{2a} \quad , \quad (2.99)$$

und das Spektrum lautet:

$$E_n = - \left( \frac{2a^2 - n^2}{4na} \right) \quad . \quad (2.100)$$

Für z.B.  $a = \sqrt{15}$  ergeben sich fünf Energieeigenwerte. Diese wurden wieder mit der Finite-Element-Methode mit den drei oben beschriebenen Interpolationsverfahren berechnet. Da analytische Lösungen bekannt sind, läßt sich der relative Fehler leicht bestimmen. In Abbildung 2.10 ist jeweils der relative Fehler des 1. und 5. Zustandes gegen die CPU-Zeiten bei simultaner Berechnung aller fünf Zustände aufgetragen. Es wurden finite Elemente mit quadratisch aufgeweiteten Finite-Element-Grenzen und je 6 Basisfunktionen verwendet und die Anzahl der finiten Elemente variiert (40-300 finite Elemente). Die Rechnungen wurden auf einer 200MHz PentiumPro-CPU durchgeführt. Die Daten wurden mit Polynomen 3.Ordnung gefittet, da sich aufgrund numerischer Gegebenheiten bei der Eigenwertberechnung mit ARPACK mit jedem zusätzlichen finiten Element die CPU-Zeit nicht zwingend erhöht. Es ergibt sich über die gesamte Abszisse eine offensichtliche Überlegenheit der B-Spline-Interpolation, welche hin zu größeren Genauigkeiten immer deutlicher wird.

### 2.6.5 H-Atom und Alkali-Atome mit und ohne Magnetfeld

Mit Ausnahme der Beschränkung auf Zustände mit  $l = 0$  ohne externe elektrische und magnetische Felder muß bei der Eigenwertbestimmung der Elemente der 1.

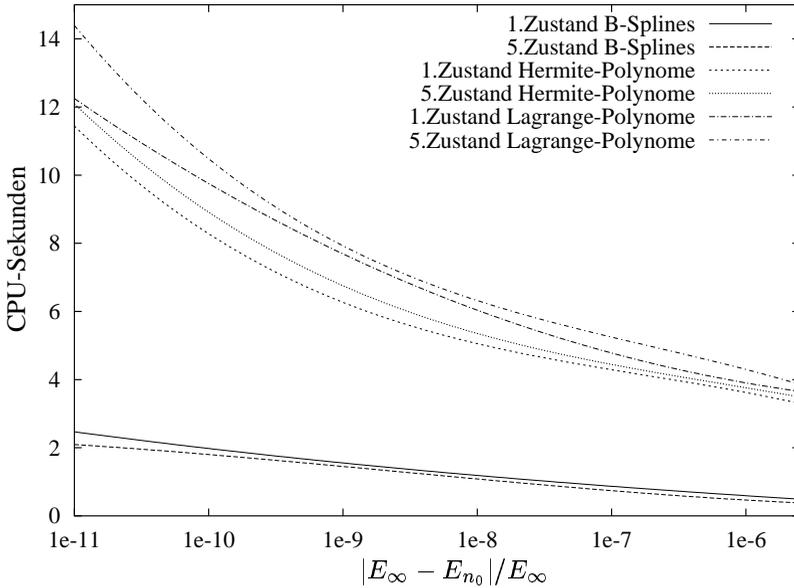


Abb. 2.10: Vergleich der Interpolationsverfahren bzgl. der Relation von Genauigkeit und Geschwindigkeit am Beispiel des Hulthén-Potentials bei der simultanen Berechnung aller Energiewerte (siehe Text).

Hauptgruppe das volle dreidimensionale Problem gelöst werden. Wie in Kapitel 2.2 gezeigt wurde, läßt sich das Problem mit der Methode der Diskreten Variablen auf ein gekoppeltes Differentialgleichungssystem von Funktionen mit einer Variablen umformulieren. Die Matrixgleichung des Differentialgleichungssystems lautet:

$$\left( -\frac{1}{2r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} G + W(r) - E \cdot G \right) \vec{\psi}(r) = 0 \quad . \quad (2.101)$$

Dabei ist  $G$  gemäß (2.45) definiert und es ist

$$W_{kj}(r) = V(r, \Omega_j) G_{kj} + (K_s)_{kj}(r) \quad . \quad (2.102)$$

Das Differentialgleichungssystem (2.101) läßt sich analog der eindimensionalen Schrödingergleichung (2.85) behandeln. Das Funktional lautet:

$$\Pi = \int_0^{\infty} dr r^2 \vec{\psi}^+(r) \left( -\frac{1}{2r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} G + W(r) - E \cdot G \right) \vec{\psi}(r) \quad . \quad (2.103)$$

Spaltet man den kinetischen Term in (2.103) auf in

$$\frac{1}{2r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} = \frac{1}{r} \frac{d}{dr} + \frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} \quad , \quad (2.104)$$

so erhält man auf die gleiche Weise wie in (2.87) die Relation

$$\int_0^{\infty} dr r^2 \vec{\psi}^+(r) \left( -\frac{1}{2r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} G \right) \vec{\psi}(r) = \frac{1}{2} \int_0^{\infty} dr r^2 \frac{\vec{\psi}^+(r)}{dr} G \frac{d\vec{\psi}(r)}{dr} \quad (2.105)$$

und mit den endlichen Integrationsgrenzen schließlich das Funktional

$$\begin{aligned} \Pi = \frac{1}{2} \int_0^{r_{max}} dr r^2 \frac{\vec{\psi}^+(r)}{dr} G \frac{d\vec{\psi}(r)}{dr} + \int_0^{r_{max}} dr r^2 \vec{\psi}^+(r) W(r) \vec{\psi}(r) \\ - E \int_0^{r_{max}} dr r^2 \vec{\psi}^+(r) G \vec{\psi}(r) \quad . \quad (2.106) \end{aligned}$$

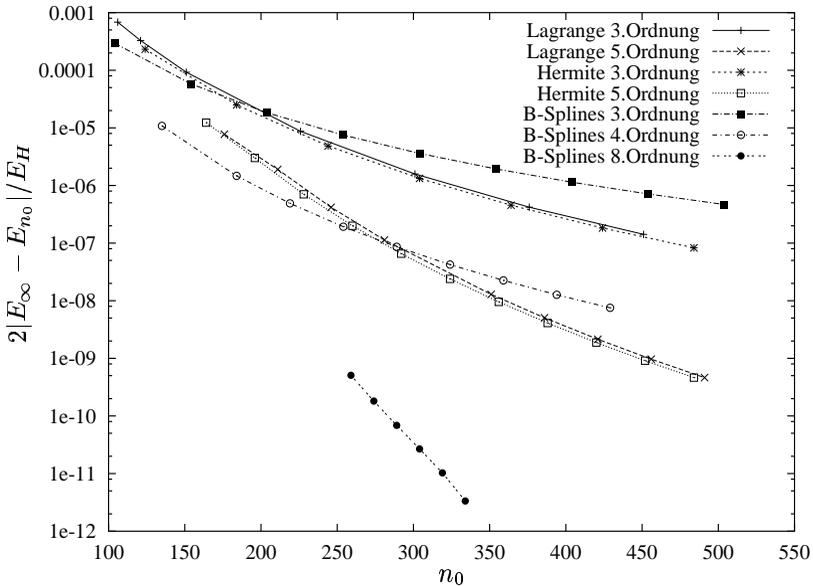
Die Matrizen in (2.89) lauten jetzt:

$$\begin{aligned} H_{kj}^{(i)} = \frac{1}{2h_i} G \int_0^1 dx (r_i + h_i x)^2 \frac{dP_k(x)}{dx} \frac{dP_j(x)}{dx} \\ + h_i \int_0^1 dx (r_i + h_i x)^2 W(r_i + h_i x) P_k(x) P_j(x) \quad , \quad (2.107) \end{aligned}$$

$$S_{kj}^{(i)} = h_i G \int_0^1 dx (r_i + h_i x)^2 P_k(x) P_j(x) \quad . \quad (2.108)$$

Es ergeben sich für die verschiedenen Interpolationsverfahren im Prinzip die gleichen Matrixstrukturen wie in 2.6.2, jedoch besteht jedes Matricelement bei Verwendung von  $M$  diskreten Variablen bereits aus einer Matrix der Dimension  $M \times$

$M$ . Dementsprechend erhöht sich die Dimension  $n_1$  der Matrizen um einen Faktor  $M$  und die Anzahl nichtverschwindender Matrixelemente  $n_0$  um einen Faktor  $M^2$ . In Abbildung 2.11 ist die Abhängigkeit des relativen Fehlers von der An-



**Abb. 2.11:** Vergleich der Interpolationsverfahren bzgl. der Relation von Genauigkeit und Anzahl nichtverschwindender Matrixelemente  $n_0$  am Beispiel der Berechnung des  $2s_0$ -Zustands von Wasserstoff.

zahl der nichtverschwindenden Matrixelemente für die verschiedenen Interpolationstechniken und für verschiedene Ordnungen der Polynome bei der Berechnung des  $2s_0$ -Zustands von Wasserstoff dargestellt. Offensichtlich sind die Fehler bei gleicher Anzahl von Basisfunktionen pro finitem Element und gleichem  $n_0$  für Lagrange- und Hermiteinterpolation vergleichbar, während B-Spline-Interpolation mit einer Basisfunktion weniger vergleichbare Genauigkeit liefert. B-Spline-Interpolation hat zusätzlich den Vorteil, daß B-Splines höherer Ordnung verwendet werden können (schwarze Kreise: B-Splines 8. Ordnung), ohne daß Oszillationen auftreten, was bei vergleichbarem  $n_0$  zu einer größeren Genauigkeit führt. Für die

Geschwindigkeit des Verfahrens in Verbindung mit ARPACK ist jedoch die Matrixdimension  $n_1$  die entscheidende Größe.

Zur Berechnung von Energien und Wellenfunktionen von Alkali-Atomen müßte im Prinzip das volle Mehrkörperproblem gelöst werden. Je niedriger der Drehimpuls des Valenzelektrons, desto größer ist die Überlappung mit der kernnahen Elektronenhülle. Dadurch wird die Kernladung geringer abgeschirmt und es kommt im Vergleich mit Wasserstoff zu einer Absenkung der Energieniveaus. Mit der Verwendung phänomenologischer Potentiale lassen sich Alkali-Atome jedoch ebenfalls als effektive 2-Körperprobleme berechnen. In dieser Arbeit wurden phänomenologische Potentiale der Form

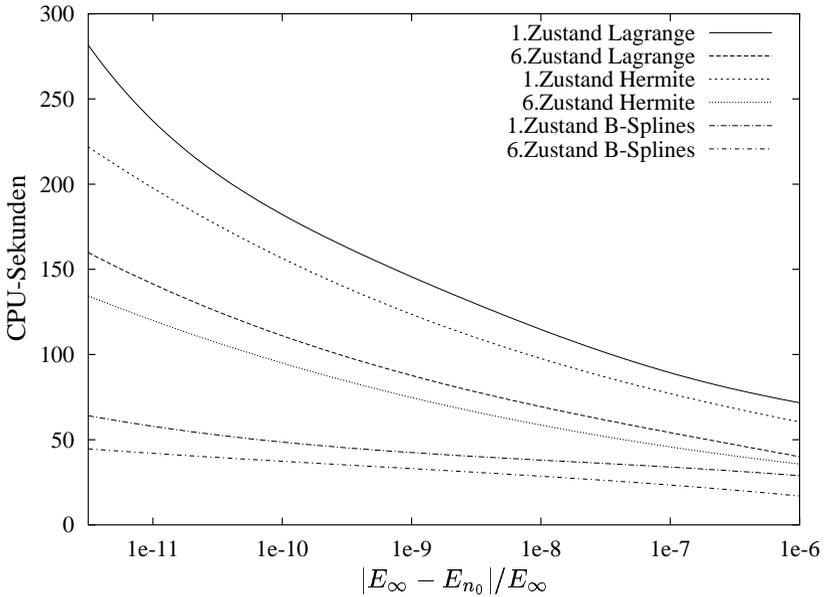
$$V(r) = -\frac{1}{r}(1 + (Z - 1)e^{-a_1 r} + a_2 r e^{-a_3 r}) \quad (2.109)$$

verwendet. Die Parameter für Alkali-Atome sind in Tabelle 2.1 aufgeführt. In Ab-

	$Z$	$a_1$	$a_2$	$a_3$	$\overline{\Delta E/E}$
Li	3	3.395	3.212	3.207	0.00007
Na <sup>†</sup>	11	7.902	23.510	2.688	0.00068
K	19	3.491	10.591	1.730	0.0026
Rb	37	3.431	10.098	1.611	0.0073
Cs	55	3.3	11.0	1.51	0.0064

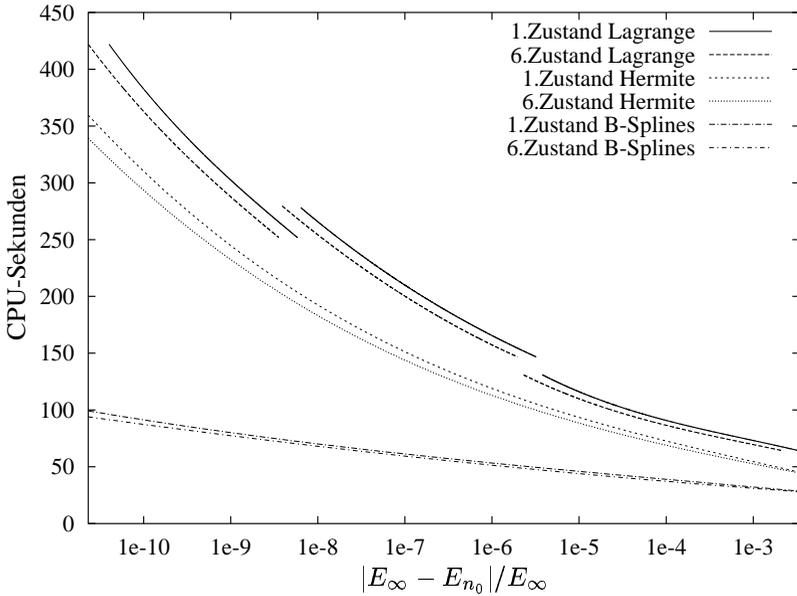
**Tab. 2.1:** Parameter für das Modell-Potential (2.109) (<sup>†</sup>Werte für Natrium entnommen aus [Hanssen et al. 1979]).

bildung 2.12 ist die Relation zwischen Genauigkeit und CPU-Zeit der verschiedenen Interpolationsmethoden bei der simultanen Berechnung der ersten sechs Zustände von Natrium in einem Magnetfeld von 4700 Tesla auf einer Pentium-II-CPU mit dem Prozessortakt von 300 MHz dargestellt. Es wurden 17 diskrete Variablen zur Diskretisierung des  $\theta$ -Raums und zwischen 30 und 300 finite Elemente benutzt. Die diskreten Datenpaare wurden wie in 2.6.4 gefittet. Am günstigsten haben sich jeweils Lagrange- und Hermite-Polynome 5.Ordnung und B-Splines 8.Ordnung erwiesen. Die Rechnung mit B-Spline-Interpolation ist bei gleicher Genauigkeit deutlich schneller durchzuführen. In Abbildung 2.13 wurden zu den selben physikalischen Parametern und Diskretisierungsgittern die ersten 6 Zustände von Rubidium berechnet. Die Unstetigkeiten der Kurven der Lagrange-Interpolation beruhen auf numerischen Effekten in Verbindung mit ARPACK. Zwischen 63 und 119 finiten Elementen benötigte ARPACK 8 Lanzcositerationen, an-



**Abb. 2.12:** Vergleich der Interpolationsverfahren bzgl. der Relation von Genauigkeit und CPU-Zeiten bei der simultanen Berechnung der ersten 6 Zustände von Natrium in einem Magnetfeld von 4700 T.

sonsten 7. Auch hier liefert die B-Spline-Interpolation die Ergebnisse am effizientesten.



**Abb. 2.13:** Vergleich der Interpolationsverfahren bzgl. der Relation von Genauigkeit und CPU-Zeiten bei der simultanen Berechnung der ersten 6 Zustände von Rubidium in einem Magnetfeld von 4700 T.

# 3 Zeitintegrationsverfahren

Bei den in dieser Arbeit berechneten Propagationen von Wellenpaketen ist es notwendig, Zeitintegrationsverfahren der Schrödingergleichung zu verwenden, die eine effiziente Rechnung bieten und deren numerischer Fehler dennoch Langzeitentwicklungen erlauben. Aus der Schrödingergleichung folgt, daß sich ein Startwellenpaket  $\psi(t_0)$  gemäß

$$\psi(t) = U(t, t_0)\psi(t_0) \quad (3.1)$$

entwickelt, mit dem unitären Zeitentwicklungsoperator

$$U(t, t_0) = \exp\left(-i \int_{t_0}^t H(t') dt'\right) \quad . \quad (3.2)$$

Für konservative Systeme vereinfacht sich (3.2) zu

$$U(t, t_0) = \exp(-iH(t - t_0)) \quad . \quad (3.3)$$

Bei numerischen Berechnungen muß man sich für ein endliches Basissystem entscheiden. In dieser Basisdarstellung liegt der Hamiltonoperator in Form einer endlichdimensionalen Hamiltonmatrix vor. Die direkte Berechnung der Matrixexponentiation in (3.2) z.B. mittels Padé-Approximation ist zu aufwendig, da der Rechenaufwand kubisch mit der Matrixdimension ansteigt und die Matrizen im Allgemeinen sehr groß sind. Im Folgenden werden einige der gängigen Methoden diskutiert. Da in dieser Arbeit ausschließlich Systeme betrachtet werden, die die meiste Zeit keine explizite Zeitabhängigkeit haben (Behandlung der periodischen elektrischen Pulse erfolgt in Kapitel 4.4), beziehen sich die folgenden Kapitel auf Exponentialfunktionen der Form (3.3).

Das einfachste Zeitintegrationsverfahren der Schrödingergleichung besteht in der Taylorentwicklung der Exponentialfunktion (3.3):

$$\exp(-iHdt) = 1 - iHdt + \dots \quad . \quad (3.4)$$

Solche Entwicklungen sind jedoch numerisch instabil und daher für Langzeitentwicklungen unbrauchbar, da sie nicht unitär sind und damit die Zeitumkehrinvarianz der Schrödingergleichung verletzen.

Eine Möglichkeit, diese Probleme zu umgehen, bietet die zeitsymmetrische Beziehung

$$\psi(t + dt) - \psi(t - dt) = (\exp(-iHdt) - \exp(iHdt)) \psi(t) \quad . \quad (3.5)$$

Taylorentwicklungen der Exponentialfunktionen führen dann auf die explizite Gleichung

$$\psi(t + dt) = \psi(t - dt) - 2idtH\psi(t) \quad . \quad (3.6)$$

Dieses Verfahren wurde z.B. in Zusammenhang mit der Finite-Differenzen-Methode von [Askar,Cakmak 1978] und mit der Fourier-Methode von [Kosloff, Kosloff 1983] verwendet. Die Effizienz dieser Methode wird im Zusammenhang mit der Methode der Finiten Elemente durch die Form der die Massenmatrix  $S$  enthaltenden Schrödingergleichung

$$H\psi(t) = iS \frac{\partial}{\partial t} \psi(t) \quad (3.7)$$

verringert. Daher muß in den Gleichungen (3.4) und (3.6) anstelle von  $H$  der Operator  $H' = S^{-1}H$  verwendet werden. Da die zu  $H'$  gehörende Matrix jedoch voll besetzt ist, ist der Speicher- und Rechenaufwand bei den in der Praxis auftretenden hochdimensionalen Basissystemen nicht vertretbar. Günstiger ist es, an der symmetrischen und positiv definiten Matrix  $S$  eine Cholesky-Zerlegung

$$S = LL^T \quad (3.8)$$

durchzuführen. Die Teilmatrizen  $L$  und  $L^T$  behalten die Bandstruktur der Matrix  $S$  bei. Numerisch können die Cholesky-Zerlegung und die Matrix-Vektor-Multiplikationen in der Schrödingergleichung, die nach der Cholesky-Zerlegung die Form

$$i \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\psi} = L^{-1} H (L^T)^{-1} \tilde{\psi} \quad (3.9)$$

mit  $\tilde{\psi} = L^T \psi$  annimmt, effizient z.B. mit der PORT-Programmbibliothek durchgeführt werden. In den Gleichungen (3.4) und (3.5) muss entsprechend (3.9)  $H$  und  $\psi(t)$  durch  $L^{-1} H (L^T)^{-1}$  und  $\tilde{\psi}(t)$  ersetzt werden.

Eine modernes und vielversprechendes Zeitintegrationsverfahren stellen die sogenannten exponentiellen Integratoren dar [Hochbruck et al.1997]. Dabei wird die Matrixexponentiation mit der i.A. sehr großen Hamiltonmatrix ( $dim \approx 200 - 20000$ ) auf die Exponentiation einer wesentlich kleineren Matrix zurückgeführt ( $dim < 50$ ). Mittels Krylov-Unterraumapproximation erhält man als Näherungsausdruck

$$\exp(-i\delta t H) \vec{\psi} \approx \|\vec{\psi}\| V_n \exp(B_n) \hat{e}_1 \quad . \quad (3.10)$$

Die Matrix  $V_n$  besteht aus den Spaltenvektoren

$$\begin{aligned} \vec{v}_1 &= \frac{\vec{\psi}}{\|\vec{\psi}\|} \quad , \quad (3.11) \\ \vec{v}_{n+1} &= \frac{1}{b_{n+1,n}} \left( -i \delta t H \vec{v}_n - \sum_{i=1}^n b_{i,n} \vec{v}_i \right) \end{aligned}$$

mit den Elementen der Matrix  $B_n$

$$b_{i,n} = \vec{v}_i \cdot (-i\delta t H \cdot \vec{v}_n) \quad . \quad (3.12)$$

$\hat{e}_i$  sind hier die kanonischen Einheitsvektoren. Der Betrag des Residuenvektors

$$\vec{r} = \|\vec{\psi}\| b_{n+1,n} \vec{v}_{n+1} \hat{e}_n \cdot (\exp(B_n) \cdot \hat{e}_1) \quad (3.13)$$

dient dabei als Maß der Genauigkeit der Approximation. Bei vorgegebener Genauigkeit kann die Zeitschrittweite mit Hilfe des Residuenvektors dynamisch angepasst werden. Dieses Verfahren ist ebenfalls unitär. Eine ausführlichere Darstellung findet sich in [Fröhlich 1998]. Im Zusammenhang mit der Methode der Finiten Elemente ist aufgrund der Cholesky-Zerlegung der Rechenaufwand hoch und eignet sich daher besser für Darstellungen mit globalen Basissystemen.

Das Verfahren, das sich für alle Rechnungen in dieser Arbeit als das effizienteste erwiesen hat, ist die sogenannte Cayley- oder Crank-Nicholson-Approximation. Der zu (3.1) äquivalente Ausdruck

$$\exp\left(\frac{i}{2} H dt\right) \psi(t+dt) = \exp\left(-\frac{i}{2} H dt\right) \psi(t) \quad (3.14)$$

lautet mit einer Taylorentwicklung 1.Ordnung

$$\left(1 + \frac{i}{2} H dt\right) \psi(t+dt) \approx \left(1 - \frac{i}{2} H dt\right) \psi(t) \quad . \quad (3.15)$$

Diese Approximation ist unitär und korrekt in der Ordnung  $dt^2$ . Im Gegensatz zu den oben beschriebenen Verfahren kann hier auf die Cholesky-Zerlegung verzichtet werden. Im Zusammenhang mit der Methode der Finiten Elemente lautet (3.15)

$$\left(S + \frac{i}{2}Hdt\right) \psi(t + dt) \approx \left(S - \frac{i}{2}Hdt\right) \psi(t) \quad (3.16)$$

und erfordert lediglich eine Matrix-Vektor-Multiplikation und die Lösung eines linearen Gleichungssystems mit einer dünnbesetzten, gebänderten Matrix.

# 4 Atome unter Einfluß periodischer elektrischer Pulse

Zu Beginn des 20. Jahrhunderts wurde erkannt, daß sich Atome nicht mit Methoden der klassischen Mechanik beschreiben lassen, was schließlich zur Entwicklung der Quantenmechanik führte. Nach dem Korrespondenzprinzip geht die Quantenmechanik für große Quantenzahlen in die klassische Mechanik über. Die Verbindung zwischen Quantenmechanik und klassischer Mechanik und insbesondere der Übergangsbereich ist bis heute ein aktueller Forschungsgegenstand. Von speziellem Interesse sind in diesem Zusammenhang Systeme, die in der klassischen Rechnung chaotisches Verhalten zeigen. Dabei stellt sich die Frage, inwiefern sich das in der klassischen Phasenraumbeschreibung manifestierte Chaos bei der Quantenmechanischen Behandlung des Systems bemerkbar macht. Dieses Forschungsgebiet wird als „Quantenchaos“ oder „Quantenchaologie“ bezeichnet.

Für Untersuchungen zum Quantenchaos günstige Systeme sind Rydberg-Atome in externen magnetischen und elektrischen Feldern. Diese Systeme zeigen in bestimmten Parameterbereichen in der klassischen Phasenraumbeschreibung chaotisches Verhalten, sie können mit der Quantenmechanik sehr gut beschrieben werden und lassen sich experimentell realisieren. Ein mittlerweile hinsichtlich Quantenchaos umfassend untersuchtes System ist das diamagnetische Wasserstoffatom [Schweizer 1995]. In 4.1 werden an diesem Beispiel die grundlegenden Methoden wie Poincaré-Schnitte und Wellenpaketdynamik, welche auch für die Untersuchung der ab Kapitel 4.2 folgenden zeitabhängigen Systeme benutzt werden, vorgestellt.

Der Schwerpunkt der quantendynamischen Untersuchungen dieser Arbeit ist das Wasserstoffatom und Alkaliatome, welche dem Einfluß ultrakurzer periodischer elektrischer Pulse, sogenannter „Trains“ ausgesetzt werden. Auch diese Systeme zeigen, ähnlich wie der „geklickte Rotor“ [Ott 1993], in der klassischen Behandlung chaotisches Verhalten und wurden bereits experimentell realisiert [Frey et al. 1999], [Tannian et al. 2000].

## 4.1 Ein Beispiel für Quantenchaos: das diamagnetische H-Atom

Der Hamiltonoperator des diamagnetischen Wasserstoffatoms lautet in Zylinderkoordinaten:

$$H = \frac{1}{2} \left( p_\rho^2 + p_z^2 + \frac{L_z^2}{\rho^2} \right) - \frac{1}{\sqrt{\rho^2 + z^2}} + \frac{1}{2} \beta^2 \rho^2 \quad (4.1)$$

Um numerische Schwierigkeiten bei der klassischen Behandlung durch die Singularität des Coulombterms zu umgehen, ist es günstig, semiparabolische Koordinaten zu verwenden. Der Zusammenhang zwischen Zylinder- und semiparabolischen Koordinaten lautet

$$\begin{aligned} \mu &= \sqrt{r+z} \quad , \\ \nu &= \sqrt{r-z} \quad , \\ r &= (\mu^2 + \nu^2)/2 \quad , \\ \rho &= \mu\nu \quad , \\ z &= (\mu^2 - \nu^2)/2 \quad . \end{aligned} \quad (4.2)$$

Mit den skalierten Größen

$$\tilde{\mu} = (2\beta)^{1/3} \mu \quad , \quad \tilde{\nu} = (2\beta)^{1/3} \nu \quad , \quad (4.3)$$

$$\tilde{p}_\mu = p_\mu \quad , \quad \tilde{p}_\nu = p_\nu \quad , \quad (4.4)$$

$$\epsilon = (2\beta)^{-2/3} E \quad , \quad l_z = (2\beta)^{1/3} L_z \quad , \quad \tilde{t} = 2\beta t$$

kann man (4.1) in die regularisierte Hamiltonfunktion

$$2 = \frac{1}{2} (\tilde{p}_\mu^2 + \tilde{p}_\nu^2) + \frac{1}{2} l_z^2 \left( \frac{1}{\tilde{\mu}^2 + \tilde{\nu}^2} \right) - \epsilon (\tilde{\mu}^2 + \tilde{\nu}^2) + \frac{1}{8} \tilde{\mu}^2 \tilde{\nu}^2 (\tilde{\mu}^2 + \tilde{\nu}^2) \quad (4.5)$$

überführen, welche für  $l_z = 0$  keine Singularitäten enthält. Die Systemdynamik wird jetzt nur noch durch den Parameter der skalierten Energie  $\epsilon$  bestimmt. Die aus (4.5) resultierenden Hamiltonschen Bewegungsgleichungen lassen sich numerisch z.B. mittels Runge-Kutta-Verfahren integrieren.

Um sich einen Überblick über die Phasenraumstruktur zu verschaffen, betrachtet man den Poincaré-Schnitt

$$P_\epsilon = \{(\nu, p_\nu) | H(\mu = 0, \nu, p_\nu, p_\mu) = \epsilon\} \quad , \quad (4.6)$$

d.h., Schnittpunkte der Trajektorien mit der Energie  $\epsilon$  mit der  $\mu = 0$ -Ebene. In Abbildung 4.1 sind Poincaré-Schnitte zu verschiedenen skalierten Energien dargestellt. Bei  $\epsilon = -1.0$  sind entlang der  $\nu = 0$ -Achse die elliptischen Fixpunkte der stabilen fundamentalen Bahnen  $[-]$  (parallel zum Magnetfeld) und  $[0]$  (senkrecht zum Magnetfeld) und entlang der  $p_\nu = 0$ -Achse die hyperbolischen Fixpunkte der instabilen fundamentalen Bahn  $[+]$  (quasizirkulär) gut zu erkennen. Mit zunehmender Energie verschwinden die regulären Strukturen. Eine umfangreiche Untersuchung findet man in [Schweizer 1995].

Quantenmechanisch verliert der Begriff der Phasenraumtrajektorie aufgrund der Unschärferelation ihren Sinn. Es ist aber möglich, Wellenpakete begrenzter Ausdehnung zu konstruieren, die zumindest für kurze Zeiten der klassischen Bewegung folgen (sog. Kohärenzzustände). Für große Zeiten zerläuft das Wellenpaket i.A. aufgrund der Dispersion. Für das Potential des harmonischen Oszillators konnte Schrödinger jedoch lokalisierte dispersionsfreie Wellenpakete konstruieren, welche für beliebig lange Zeiten der klassischen Bewegung folgen. Für das Coulombpotential ist das aufgrund nicht äquidistanter Energieniveaus nicht möglich. Dennoch finden sich in der Literatur einige Vorschläge für Kohärenzzustände des Wasserstoffatoms, die jedoch nicht die Eigenschaften von Kohärenzzuständen in Schrödingerschem Sinne aufweisen [Klews 1999].

Eine in den Koordinaten  $z$  und  $\rho$  gaußförmige Wellenfunktion lautet:

$$\begin{aligned} \psi_{\text{gau\ss}}(\rho, z; \rho_0, z_0; p_z^0, p_\rho^0) &= N \exp\left(-\frac{\alpha_z}{2}(z - z_0)^2 - \frac{\alpha_\rho}{2}(\rho - \rho_0)^2\right) \\ &\quad \times \exp(ip_z^0 z + ip_\rho^0 \rho) \quad . \end{aligned}$$

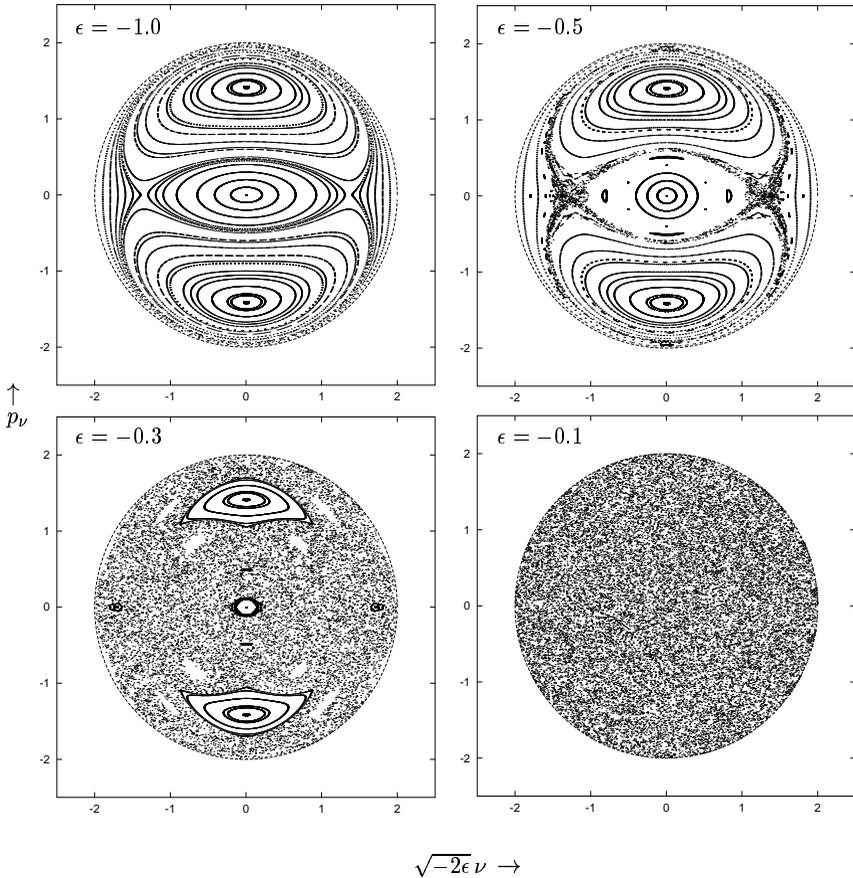
Die Zeitentwicklung der Wellenfunktion in einem äußeren Magnetfeld wurde mit den Diskretisierungsverfahren aus Kapitel 2 und der Zeitintegration aus Kapitel 3 berechnet. Da das Magnetfeld paritätserhaltend ist, lassen sich die Rechnungen mit symmetrisierten Wellenpaketen

$$\begin{aligned} \psi_{\text{gau\ss}}^{\text{symm}}(\rho, z) &= \psi_{\text{gau\ss}}(\rho, z; \rho_0, z_0, p_z^0, p_\rho^0) \\ &\quad + (-1)^{m+l} \psi_{\text{gau\ss}}(\rho, z; \rho_0, -z_0, p_z^0, -p_\rho^0) \end{aligned}$$

zu fester Parität durchführen. Dabei kann die in Kapitel 2.2 beschriebene Beschränkung der Basisfunktionen der Diskreten-Variablen-Methode auf Funktionen zu fester Parität ausgenutzt werden.

Eine auch im Folgenden wichtige Funktion zur Untersuchung periodischer Vorgänge der Quantendynamik ist die Autokorrelationsfunktion

$$C(t) = |\langle \psi(t) | \psi(0) \rangle| \quad , \quad (4.7)$$

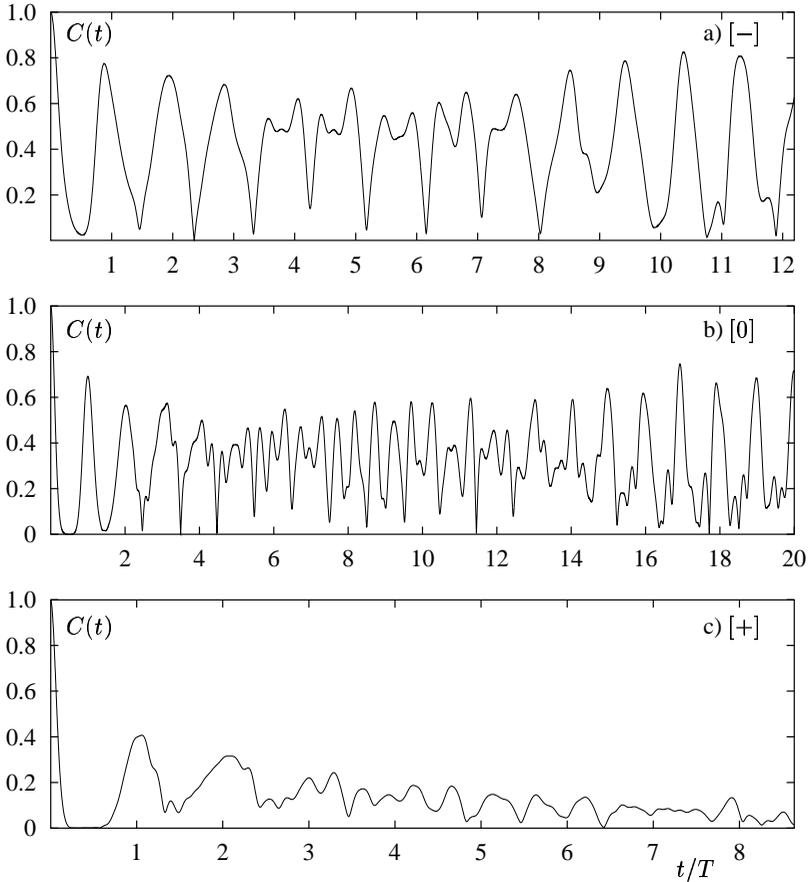


**Abb. 4.1:** Poincaré-Schnitte des diamagnetischen Wasserstoffs zu unterschiedlichen skalierten Energien.

d.h. der Überlapp des zeitentwickelten Wellenpakets mit dem Startwellenpaket.

In Abbildung 4.2 sind die Autokorrelationsfunktionen von Wellenpaketen der Form (4.7), die zur Energie  $\epsilon = -0.5$  mit der Magnetquantenzahl  $m = 0$ , mit positiver Parität bei einem äußeren Magnetfeld auf den fundamentalen Bahnen starten. Hier spiegelt sich unmittelbar die Struktur des klassischen Phasenraums wieder. Die Wellenpakete auf den Bahnen  $[-]$  und  $[0]$  zeigen offensichtlich oszillatorisches

Verhalten, sie sind auf den stabilen klassischen Bahnen „gefangen“. Der Phasenraumbereich um den hyperbolischen Fixpunkt der Bahn  $[+]$  ist bei  $\epsilon = -0.5$  irregulär. Entsprechend stark ist die Dispersion des dort startenden Wellenpakets.



**Abb. 4.2:** Autokorrelationsfunktionen von Wellenpaketen mit den Quantenzahlen  $m^\pi = 0^+$ , die auf den Fixpunkten der Bahnen  $[-]$ ,  $[0]$  und  $[+]$  starten. Die Parameter sind a)  $[-]$   $\epsilon = -0.5$ ,  $B = 6$  T,  $\alpha_\rho = \alpha_z = 0.2$ , b)  $[0]$   $\epsilon = -0.5$ ,  $B = 6$  T,  $\alpha_\rho = \alpha_z = 0.1$ , c)  $[+]$   $\epsilon = -0.5$ ,  $B = 2.35$  T,  $\alpha_\rho = \alpha_z = 0.05$ . Die Zeiten sind bei den Bahnen  $[-]$  und  $[0]$  in Einheiten der klassischen Umlaufperiode, bei der Bahn  $[+]$  aus Symmetriegründen in Einheiten der halben klassischen Umlaufperiode angegeben.

## 4.2 Allgemeines zum gekickten Wasserstoffatom

Unter dem sogenannten „gekickten Wasserstoffatom“ versteht man Wasserstoffatome, die einer periodischen Folge von ultrakurzen elektrischen Feldpulsen ausgesetzt werden (sog. „Trains“). Ein elektrischer Puls  $\vec{F}(t)$  verursacht am Elektron den Impulsübertrag

$$\Delta\vec{p} = - \int \vec{F}(t) dt \quad . \quad (4.8)$$

Die Dauer des Pulses  $T_P$  ist dabei wesentlich kürzer als die klassische Umlaufperiode  $T_n = 2\pi n^3$  des Elektrons, d.h. es gilt

$$T_P/T_n \ll 1 \quad . \quad (4.9)$$

Für diese Situation ist es hinreichend, den Impulsübertrag (4.8) durch einen  $\delta$ -förmigen Puls zu approximieren. Damit lautet der Hamiltonoperator des Systems für einen Train mit  $S$  elektrischen Pulsen

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2} - \frac{1}{r} + V_{ext}(t) \quad (4.10)$$

mit dem externen Potential

$$V_{ext}(t) = -\vec{r} \cdot \Delta\vec{p} \sum_{k=0}^{S-1} \delta(t - kT) \quad . \quad (4.11)$$

Zwischen den Pulsen bewegt sich das Elektron im gewöhnlichen konservativen Coulombpotential ohne externe Felder. Wenn die Richtung aller elektrischen Pulse dieselbe ist, z.B. entlang der  $z$ -Achse, so liegt Rotationssymmetrie um die  $z$ -Achse vor. In diesem Fall ist die  $z$ -Komponente des Drehimpulses eine Erhaltungsgröße.

Durch das elektrische Feld ist die Kopplung an das Kontinuum gegeben, was zur Ionisation führt. Die Fouriertransformation von (4.11) lautet:

$$V_{ext}(t) = -\frac{\vec{r} \cdot \Delta\vec{p}}{T} - \frac{2\vec{r} \cdot \Delta\vec{p}}{T} \sum_{m=1}^{\infty} \cos\left(\frac{2\pi mt}{T}\right) \quad . \quad (4.12)$$

Da 4.12 alle Oberschwingungen mit gleicher Stärke enthält, ist die Kopplung an das Kontinuum stärker als bei den bislang untersuchten artverwandten Systemen

wie dem gekickten Rotor (z.B. [Ott 1993]), dem gekickten harmonischen Oszillator [Gardiner et al. 1997] oder dem Wasserstoffatom in einem Mikrowellenfeld (z.B. [Casati et al. 1987], [Jensen et al. 1991]). Dies ist für die Numerik die Hauptschwierigkeit. Entwicklungen nach Basisfunktionen gebundener Zustände scheiden damit aus, mit der Ausnahme der Behandlung von Resonanzen zwischen gebundenen Zuständen [Dhar et al. 1983]. Ein Ansatz verfolgt die Entwicklung nach einer gemischten Basis aus gebundenen Wasserstoffeigenfunktionen und einer Sturmschen Basis [Melles et al. 1993]. Da die Sturmschen Funktionen ein vollständiges Orthogonal-System bilden, können die Kontinuumszustände mitbehandelt werden.

Die in jüngerer Zeit publizierten theoretischen Arbeiten, die das Problem quantenmechanisch behandeln, arbeiten mit Entwicklungen nach sturmschen Funktionen [Yoshida et al. 2000a] und der generalisierten Pseudospektralmethode [Persson et al. 2002] aber jeweils nur im Rahmen eines eindimensionalen Modells.

Bei den in dieser Arbeit verwendeten Diskretisierungsverfahren stellen die Kontinuumszustände kein prinzipielles Problem dar. Statt einer geeigneten Basis muss eine für die gewünschte Genauigkeit ausreichende Raumdiskretisierung durchgeführt und zur Unterdrückung numerisch bedingter Reflexionen am Integrationsrand hinreichend großer Integrationsradius bestimmt werden. Die Rechnungen behandeln das vollständige dreidimensionale Problem und konnten auch auf Alkaliatome ausgedehnt werden.

Zur Motivation, auch hinsichtlich der Fragestellungen des Quantenchaos, werden jedoch zunächst einige Eigenschaften des klassisch behandelten Systems beleuchtet.

### 4.3 Gekicktes Wasserstoffatom: klassisches Modell

Um sich einen globalen Eindruck der Dynamik im Phasenraum zu verschaffen, bietet es sich an, analog zum gekickten Rotor [Ott 1993] sogenannte Stroboskop-Schnitte des Phasenraums zu fertigen. Dabei werden jeweils nur unmittelbar vor dem nächsten elektrischen Puls die Koordinaten des Elektrons im Phasenraum aufgetragen. Zwischen den Pulsen bewegt sich das Elektron im gewöhnlichen  $1/r$ -Potential. Die Dynamik wird bestimmt durch die Abbildungsgleichungen des Keplerproblems, die auch in Büchern der Himmelsmechanik zu finden sind (z.B.

[Stiefel,Scheifele 1971]):

$$\begin{aligned}\vec{r}_{k+1} &= [1 - (1/r_k) \sigma_k^2 C_2(-2E_k \sigma_k^2)] \vec{r}_k \\ &+ [r_k \sigma_k C_1(-2E_k \sigma_k^2) + \vec{r}_k \cdot \vec{p}_k \sigma_k^2 C_2(-2E_k \sigma_k^2)] \vec{p}_k\end{aligned}\quad (4.13)$$

$$\begin{aligned}\vec{p}_{k+1} &= (1/r_{k+1}) \{ -(1/r_k) \sigma_k C_1(-2E_k \sigma_k^2) \vec{r}_k \\ &+ [r_k C_0(-2E_k \sigma_k^2) + \vec{r}_k \cdot \vec{p}_k \sigma_k C_1(-2E_k \sigma_k^2)] \vec{p}_k \}\end{aligned}\quad (4.14)$$

Dabei bezeichnen  $\vec{r}_k$  und  $\vec{p}_k$  den Ort und Impuls unmittelbar nach dem  $k$ -ten Stoß,  $\vec{r}_{k+1}$  und  $\vec{p}_{k+1}$  Ort und Impuls unmittelbar vor dem  $k + 1$ -ten Stoß. Die  $\sigma_k$  sind die Lösungen der generalisierten Keplergleichung

$$T = r_k \sigma_k C_1(-2E_k \sigma_k^2) + \sigma_k^3 C_3(-2E_k \sigma_k^2) + \sigma_k^2 C_2(-2E_k \sigma_k^2) \vec{r}_k \cdot \vec{p}_k\quad (4.15)$$

Hierin ist  $T$  die vorgegebene Periodendauer der elektrischen Impulse und  $C_n(u)$  die Stumpff'schen Funktionen

$$C_n(u) = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{u^k}{(2k+n)!}, \quad C_n(0) = \frac{1}{n!}\quad (4.16)$$

Davon werden benötigt:

$$\begin{aligned}C_0(v^2) &= \cos(v), \quad C_1(v^2) = \frac{\sin(v)}{v}, \\ C_2(v^2) &= \frac{1 - \cos(v)}{v^2}, \quad C_3(v^2) = \frac{v - \sin(v)}{v^3}, \\ C_0(-v^2) &= \cosh(v), \quad C_1(-v^2) = \frac{\sinh(v)}{v}, \\ C_2(-v^2) &= \frac{\cosh(v) - 1}{v^2}, \quad C_3(-v^2) = \frac{\sinh(v) - v}{v^3}\end{aligned}\quad (4.17)$$

Der elektrische Puls ändert den Impuls und die Energie des Elektrons folgendermaßen:

$$\begin{aligned}\vec{p}_k &\rightarrow \vec{p}_k + \Delta\vec{p}, \\ E_k &\rightarrow E_k + \vec{p}_k \cdot \Delta\vec{p} + \frac{(\Delta\vec{p})^2}{2}\end{aligned}\quad (4.18)$$

Die Systemdynamik des klassischen Coulombproblems ist für alle Energien ähnlich. Verschiedene Energieniveaus lassen sich mit den Skalierungstransformationen [Landau, Lifshitz 1960]

$$\begin{aligned}
 \vec{r} &\rightarrow n^2 \vec{r} \quad , & (4.19) \\
 \vec{p} &\rightarrow n^{-1} \vec{p} \quad , \\
 t &\rightarrow n^3 t \quad , \\
 \nu_n &\rightarrow n^{-3} \nu_n \quad , \\
 \Delta \vec{p} &\rightarrow n^{-1} \Delta \vec{p}
 \end{aligned}$$

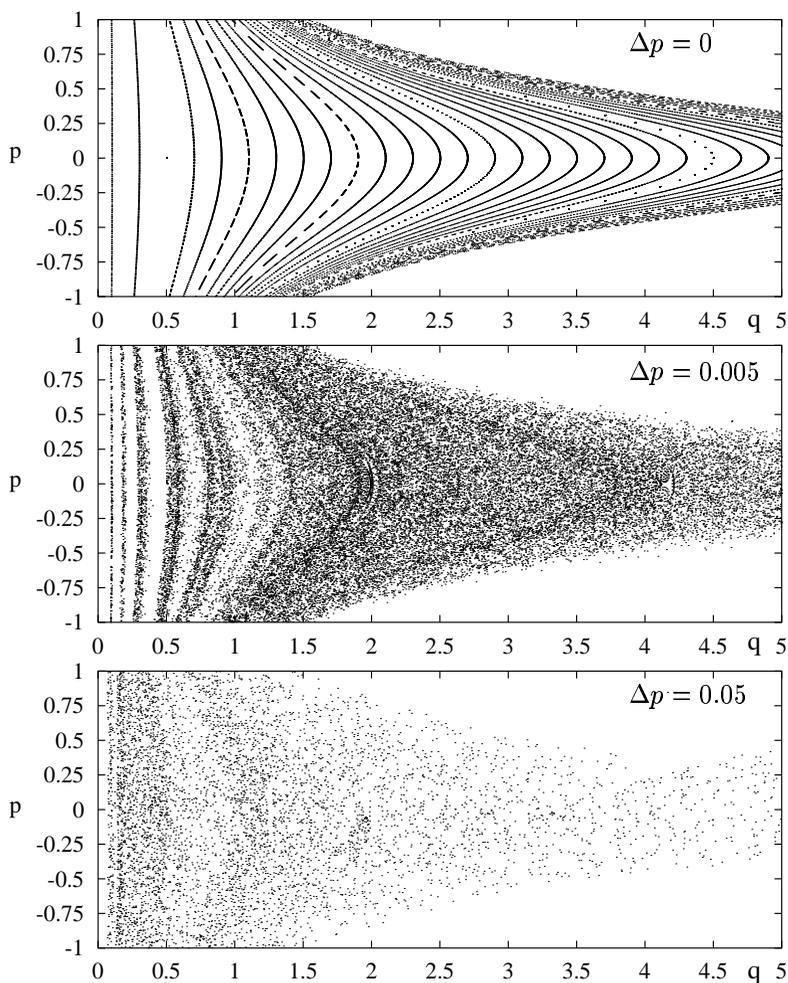
aufeinander abbilden.  $n$  ist hier ein Skalierungsparameter, der der klassischen Wirkung entspricht.

Im Folgenden wird zunächst das eindimensionale klassische Modell betrachtet. Die Systemdynamik sei dabei auf die positive  $z$ -Achse beschränkt. Das eindimensionale Modell kann auf ein zeitunabhängiges System mit zwei Freiheitsgraden kanonisch transformiert werden. Solche Systeme werden dann üblicherweise als System mit  $1\frac{1}{2}$  Freiheitsgraden bezeichnet.

In Abbildung 4.3 sind stroboskopische Phasenraumschnitte für vom Kern weggerichtete Stöße mit den Impulsüberträgen  $\Delta p = 0$ ,  $\Delta p = 0.005$  und  $\Delta p = 0.05$  mit der Periodendauer  $T = 2\pi$  dargestellt. Im obersten Bild ( $\Delta p = 0$ ) sind die üblichen Tori des eindimensionalen Coulombproblems zu sehen. Sobald das Elektron den periodischen Stößen ausgesetzt wird, ist in Übereinstimmung mit [Hillermeier et al. 1992] schon für sehr schwache Stöße der gesamte Phasenraum global chaotisch.

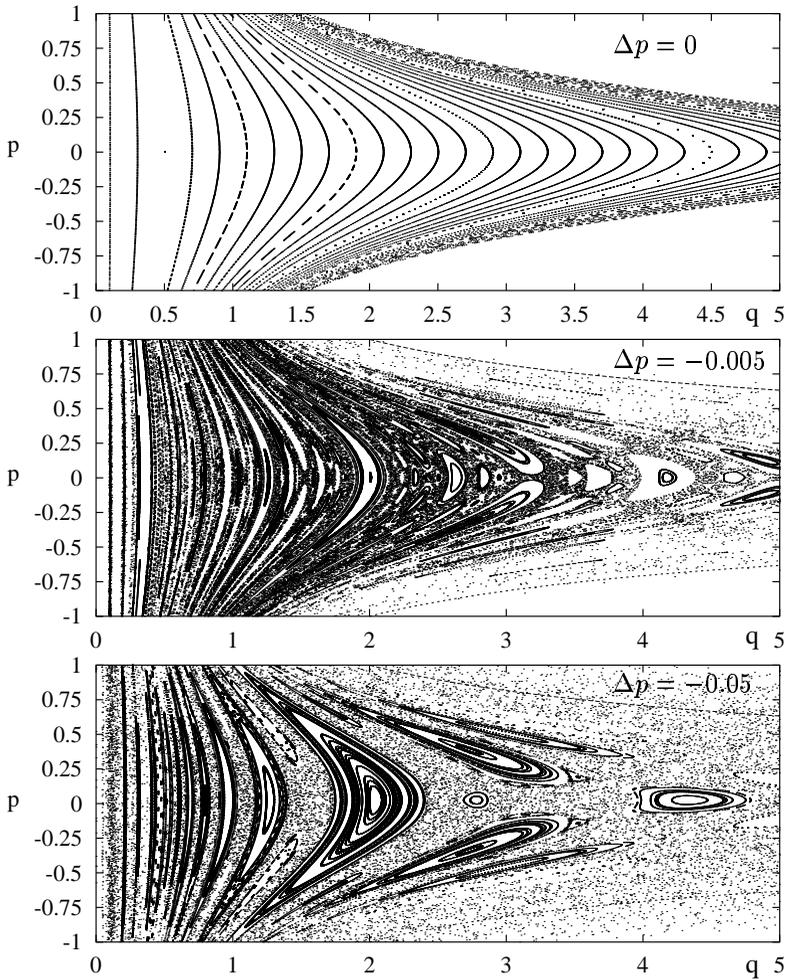
Für Stöße in Richtung des Kerns, Abbildung 4.4, können einige Tori schwache Stöße überleben, jedoch sind auch in diesem Fall für beliebig kleine Stöße chaotische Bereiche vorhanden. Die durchgezogenen Linien bei  $\Delta p = -0.005$  und  $\Delta p = -0.05$  stellen die Grenze zwischen positiver und negativer Gesamtenergie dar. Offensichtlich kann das Elektron für  $\Delta p < 0$  positive Energie erlangen, das Atom wird ionisiert. Je größer der Überlapp des ungestörten Torus, auf dem das Elektron startet, mit den den elektrischen Pulsen überlebenden Tori ist, desto geringer ist die Ionisationswahrscheinlichkeit [Frey et al. 1999]. Alle chaotischen Bereiche bilden einen dynamisch verbundenen chaotischen See. Elektronen mit negativer Energie, die sich bei Einsetzen der elektrischen Pulse in einem chaotischen Bereich des Phasenraums befinden, gelangen alle, zumindest im Limes großer Zeiten, in den Bereich positiver Energie.

Einen besseren Eindruck, wie strukturreich der Phasenraum im Falle negativer Impulsüberträge sein kann, kann man sich durch Transformation des Pha-



**Abb. 4.3:** Poincaré-Schnitte des gekickten Wasserstoffatoms bei einer Pulsperiode von  $T = 2\pi$  mit positivem Impulsübertrag.

senraums auf semiparabolische Koordinaten verschaffen. Beim eindimensionalen Modell kann man sich in kartesischen Koordinaten auf z.B. die  $z$ -Achse und in semiparabolischen Koordinaten auf die  $\mu$ -Achse beschränken. Für den Ort und Im-



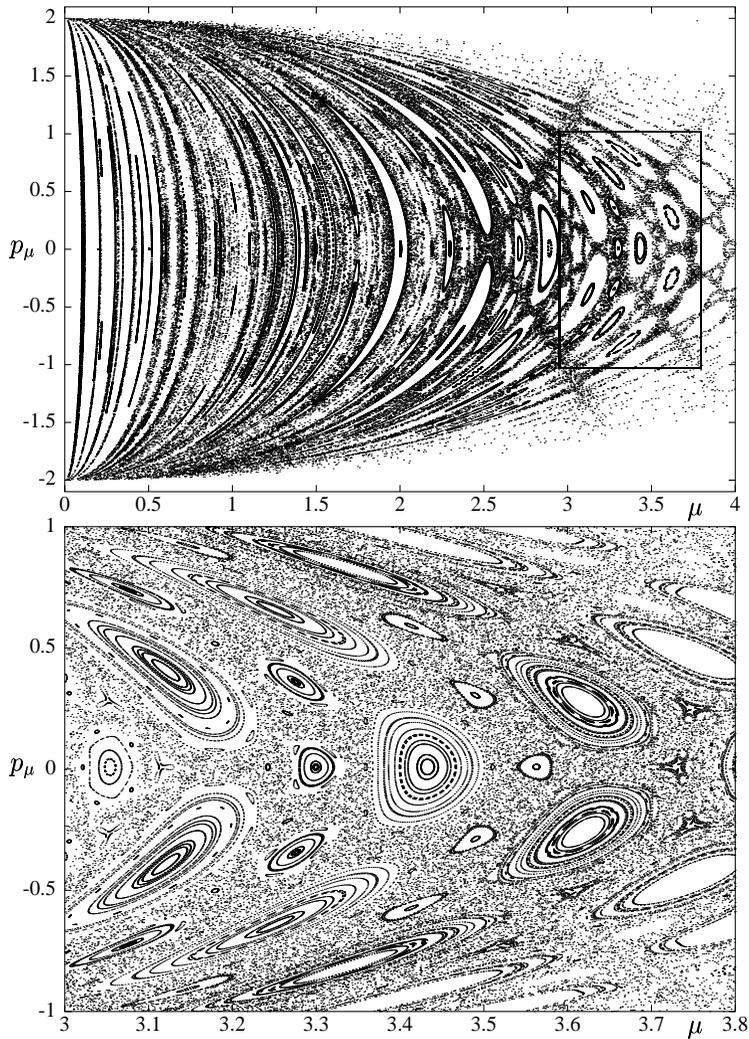
**Abb. 4.4:** Poincaré-Schnitte des gekickten Wasserstoffatoms bei einer Pulsperiode von  $T = 2\pi$  mit negativem Impulsübertrag.

puls des Elektrons in semiparabolischen Koordinaten ergibt sich in Abhängigkeit

von Ort und Impuls in kartesischen Koordinaten

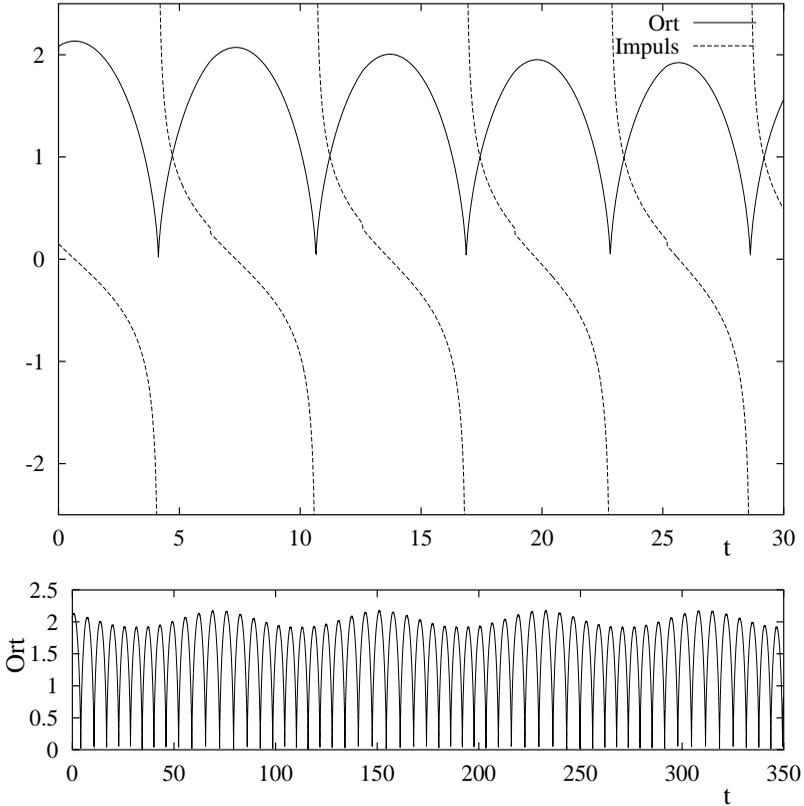
$$\begin{aligned}\mu &= \sqrt{2z} \quad , \\ p_\mu &= p_z \cdot \sqrt{2z} \quad .\end{aligned}\tag{4.20}$$

In Abbildung 4.5 ist der untere Phasenraumschnitt aus Abbildung 4.4 in semiparabolischen Koordinaten dargestellt. Das untere Bild in Abbildung 4.5 stellt den im oberen Bild eingezeichneten Ausschnitt vergrößert dar.



**Abb. 4.5:** Poincaré-Schnitte des gekickten Wasserstoffatoms in semiparabolischen Koordinaten bei einer Pulsperiode von  $T = 2\pi$  mit  $\Delta p = -0.05$ . Im unteren Bild ist der oben eingezeichnete Ausschnitt vergrößert dargestellt.

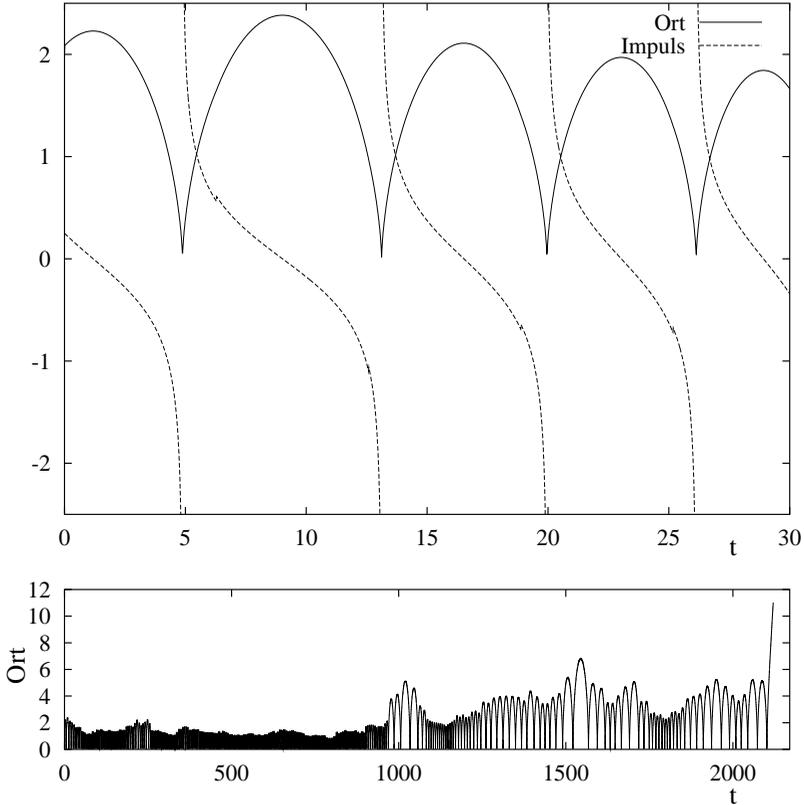
Um sich ein genaueres Bild von der Dynamik zu verschaffen, ist es aufschlußreich, den Verlauf von Ort und Impuls einzelner Trajektorien auch zwischen den Pulsen in Abhängigkeit von der Zeit aufzutragen. In Abbildung 4.6 ist der Verlauf der Trajektorie zu sehen, in dem das Elektron auf einem die Pulse mit  $\Delta p = -0.05$  und  $T = 2\pi$  (globale Phasenraumstruktur siehe Abb. 4.4) überlebenden Torus mit dem Startpunkt im Phasenraum  $p_0 = 0.2$ ,  $q_0 = 2.1$  startet. Die Trajektorie ist offensichtlich periodisch.



**Abb. 4.6:** Ort und Impuls als Funktion der Zeit einer Trajektorie mit  $p_0 = 0.2$ ,  $q_0 = 2.1$ ,  $\Delta p = -0.05$  und  $T = 2\pi$ .

#### 4 Atome unter Einfluß periodischer elektrischer Pulse

In Abbildung 4.7 ist der zeitliche Verlauf der Trajektorie aus Abbildung 4.6 dargestellt, jedoch mit umgedrehter Pulsrichtung. Entsprechend den Phasenraum-schnitten der Abbildungen 4.3 und 4.4 ändert sich die Situation dramatisch. Der nur sehr geringe Unterschied im Impulsübertrag führt dazu, daß das Atom nach  $t \approx 2200$  a.u. ionisiert wird.



**Abb. 4.7:** Ort und Impuls als Funktion der Zeit einer Trajektorie mit  $p_0 = 0.2$ ,  $q_0 = 2.1$ ,  $\Delta p = 0.05$  und  $T = 2\pi$ . Das Atom wird nach  $t \approx 2200$  a.u. ionisiert.

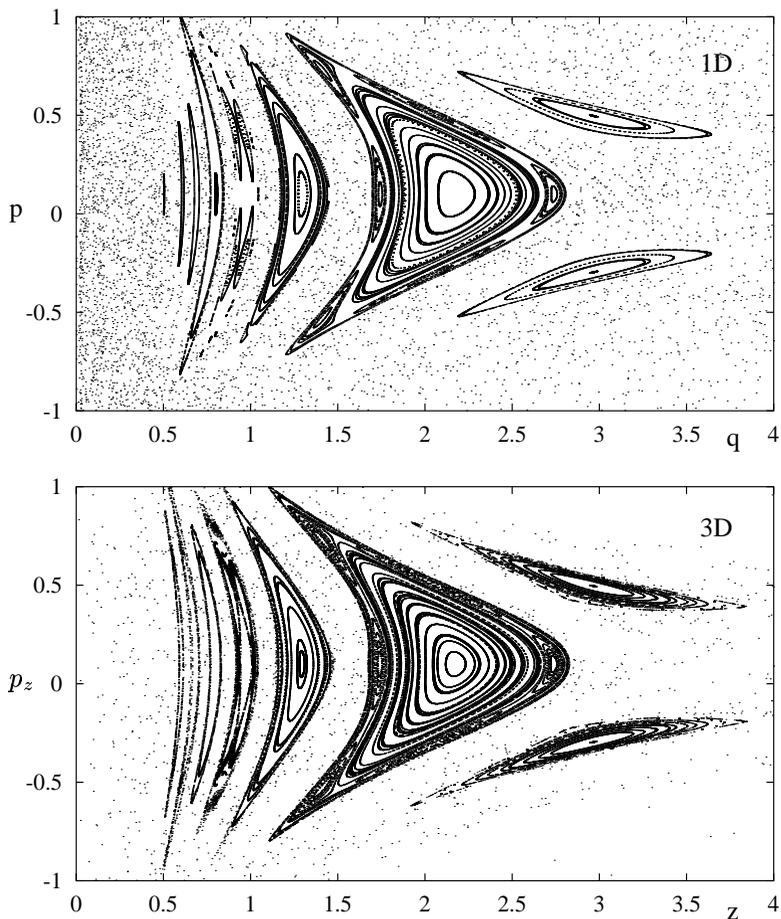
Für das dreidimensionale System lautet der Hamiltonoperator in Zylinderkoordinaten zwischen den Pulsen

$$H = \frac{p_z^2 + p_\rho^2}{2} + \frac{L_z^2}{2\rho^2} - \frac{1}{\sqrt{z^2 + \rho^2}} . \quad (4.21)$$

Hier wurde wieder vorausgesetzt, daß alle Pulse entlang der  $z$ -Achse gerichtet sind. Daher ist die  $z$ -Komponente des Drehimpulses eine Erhaltungsgröße und das dreidimensionale Problem des gekickten Wasserstoffs läßt sich auf ein zeitabhängiges zweidimensionales Problem, bzw. auf ein zeitunabhängiges Problem mit  $2\frac{1}{2}$  Freiheitsgraden reduzieren.

Wegen der höheren Dimension des Phasenraums lassen sich keine einfachen stroboskopischen Phasenraumschnitte wie im eindimensionalen Modell fertigen. Eine Möglichkeit, dennoch die globalen Phasenraumstrukturen zwischen dem ein- und dreidimensionalen Modell zu vergleichen, bieten Froeschlé-Schnitte [Froeschlé 1972]. Dabei wird im Phasenraum eine dünne Schicht um Ort und Impuls eines Freiheitsgrades, z.B.  $\rho$  und  $p_\rho$ , betrachtet. Nur wenn sich das Elektron unmittelbar vor dem Puls in dem vorgegebenen Bereich  $\rho^0 + \Delta\rho, p_\rho^0 + \Delta p_\rho$  aufhält, wird der Punkt im  $z$ - $p_z$ -Koordinatensystem aufgetragen.

In Abbildung 4.8 ist der Vergleich zwischen dem eindimensionalen Modell mit  $\Delta p = -0.2, T = 2\pi$  und dem dreidimensionalen Modell mit  $\Delta p_z = -0.2, T = 2\pi, L_z = 0.025$  dargestellt. Der Phasenraumschnitt im dreidimensionalen Fall wurde bei  $\rho \sim 0.1$  und  $p_\rho \sim 0$  durchgeführt. Die regulären Strukturen bleiben bei diesem Phasenraumschnitt im Wesentlichen erhalten. Die chaotischen Bereiche sind bei gleicher Anzahl von Startpunkten im Phasenraum im dreidimensionalen Fall weniger dicht mit Punkten gefüllt, da dem Elektron ein größerer Phasenraum zur Verfügung steht.



**Abb. 4.8:** Oben: Poincaré-Schnitt des 1D-Modells mit  $\Delta p = -0.2$  und  $T = 2\pi$ , unten: Froeschlé-Schnitt des 3D-Modells mit  $\Delta p_z = -0.2$ ,  $T = 2\pi$ ,  $L_z = 0.025$  bei  $\rho = 0.1$  und  $p_\rho = 0$ .

## 4.4 Gekicktes Wasserstoffatom: quantenmechanische Behandlung

### 4.4.1 Allgemeines zur Numerik

Die Zeitentwicklung quantenmechanischer Zustände unter Einfluß ultrakurzer, periodischer elektrischer Pulse basiert in der vorliegenden Arbeit im wesentlichen auf den Diskretisierungsverfahren aus Kapitel 2. Zwischen den Pulsen entwickelt sich das Wellenpaket gemäß des Zeitpropagationsoperators des feldfreien Wasserstoffs  $O(t) = \exp(-iH_H t)$ . Numerisch wurde dafür die in Kapitel 3 vorgestellte Cayley-Entwicklung verwendet.

Aus 4.11 geht hervor, daß der Zeitentwicklungsoperator einschließlich eines  $\delta$ -förmigen elektrischen Pulses entlang der  $z$ -Achse durch

$$O(T_+, T_-) = \exp \left[ -iH_H(T_+ - T_-) - iF\hat{z} \int_{T_-}^{T_+} \delta(t - T) dt \right] \quad (4.22)$$

gegeben ist. Vollzieht man den Grenzübergang  $(T_+ - T_-) \rightarrow 0$  erhält man

$$O_{Puls} = \exp(-iF\hat{z}) \quad . \quad (4.23)$$

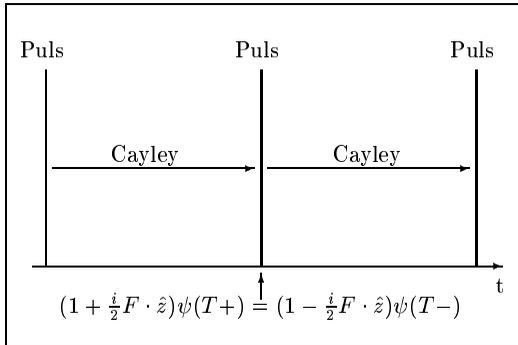
Damit lautet der Zusammenhang zwischen der Wellenfunktion unmittelbar vor dem Puls  $\psi(T_-)$  und der Wellenfunktion unmittelbar nach dem Puls  $\psi(T_+)$

$$\psi(T_+) = \exp(-iF\hat{z})\psi(T_-) \quad . \quad (4.24)$$

Der Operator (4.23) läßt sich im Falle kleiner Felder analog der Cayley-Form entwickeln, und man erhält

$$\left( 1 + \frac{i}{2} F \cdot \hat{z} \right) \psi(T_+) = \left( 1 - \frac{i}{2} F \cdot \hat{z} \right) \psi(T_-) \quad . \quad (4.25)$$

Numerisch läßt sich (4.25) durch eine einfache Matrix-Vektor-Multiplikation und der Lösung eines linearen Gleichungssystems implementieren. In Abbildung 4.9 ist das Prinzip der Zeitintegration einschließlich der elektrischen Pulse dargestellt. Die elektrischen Pulse können die Atome zu energetisch sehr hohen Rydberg-Niveaus anregen und koppeln die gebundenen Zustände an das Kontinuum. Der Integrationsradius ist sorgfältig zu wählen, damit am Integrationsrand, der die Wirkung einer unendlich hohen Potentialbarriere hat, keine elastische Streuung von



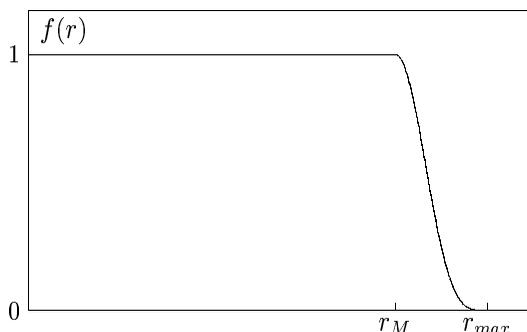
**Abb. 4.9:** Prinzip des Zeitintegrationsverfahrens: Zwischen den Pulsen erfolgt die Zeitentwicklung mit der Cayley-Approximation mit dem feldfreien Wasserstoff-Hamiltonoperator. Die Wirkung des elektrischen Pulses wird gemäß (4.25) berechnet.

Teilen des Wellenpakets auftritt. Um die Streuung gänzlich auszuschließen, wurde eine von [Yoshida et al. 1999a] vorgeschlagene „Masking Function“ implementiert. Die Masking Function lautet mit dem Integrationsradius  $r_{max}$  und dem Masking-Radius  $r_M$

$$f(r) = \sin^4 \left[ \frac{\pi(r - r_{max})}{2(r_M - r_{max})} \right] \quad \text{für } r > r_M \quad , \quad (4.26)$$

$$f(r) = 1 \quad \text{sonst.}$$

Diese Funktion ist in Abbildung 4.10 dargestellt. In den folgenden Rechnungen wurde meist das Verhältnis  $(r_{max} - r_M)/r_{max} \approx 0.1$  gewählt und das Wellenpaket nach jedem Zeitschritt mit (4.26) multipliziert. Damit sind zwar Reflexionen am Integrationsrand ausgeschlossen, jedoch werden auch Anteile des Wellenpakets ausgelöscht, die evtl. jenseits des Integrationsradius durch die elektrischen Pulse wieder in das Integrationsgebiet zurückgestoßen würden. Durch Beobachten der Zeitentwicklung der Norm des Wellenpakets nach jedem Zeitschritt kann man entscheiden, ob der Integrationsradius ausreichend ist. Das Festlegen von vernünftigen Integrations- und Maskingradii und damit verbunden die Anzahl der finiten Elemente, um Konvergenz zu erreichen, stellt bei dem in dieser Arbeit benutzten Methode die Hauptschwierigkeit dar. Da sich die unterschiedlichen Startwellen-



**Abb. 4.10:** Um Reflexionen am Integrationsrand zu vermeiden, wird die Wellenfunktion für  $r > r_M$  mit der Masking Function  $f(r) = \sin^4[\pi(r - r_{max})]/(2(r_M - r_{max}))]$  gefaltet.

pakete in den unterschiedlichen Parameterbereichen meist in kaum vorhersagbarer Weise entwickeln, ist man auf das Ausprobieren verschiedener Integrationsgitter angewiesen.

Um die Dynamik der Wellenpakete zu untersuchen, spielt die in (4.7) definierte Autokorrelationsfunktion eine wichtige Rolle. Im Folgenden wird dabei je nach deren Struktur und eventuellen Literaturvergleichen z.T. auch das Betragsquadrat der Autokorrelationsfunktion

$$C^2(t) = |\langle \psi(t) | \psi(0) \rangle|^2 \quad (4.27)$$

benutzt.

Eine weitere wichtige Größe ist neben der Norm und der Autokorrelationsfunktion der zeitliche Verlauf des Erwartungswerts der Drehimpulsquantenzahl  $\langle l \rangle_t$ , der durch die Gleichung

$$|\langle \psi(t) | L^2 | \psi(t) \rangle| = \langle l \rangle_t (\langle l \rangle_t + 1) \quad (4.28)$$

bestimmt ist. Nähert sich  $\langle l \rangle_t$  der Anzahl der diskreten Variablen bzw. der damit zusammenhängenden Anzahl der in der Entwicklung (2.35) enthaltenen Legendrepolynome, ist davon auszugehen, daß die Diskretisierung bezüglich des Winkels  $\theta$  nicht ausreichend ist.

In klassischen Rechnungen spiegeln sich sie regulären Phasenraumstrukturen unmittelbar im Ionisationsverhalten des gekickten Wasserstoffs wieder [Frey et al.

1999]. Für Vergleiche zwischen diesen Rechnungen und der quantenmechanischen Behandlung wird die sogenannte Survival Probability, d.h. die Wahrscheinlichkeit, daß das Atom nicht ionisiert wird, durch den Überlapp mit den gebundenen Wasserstoffeigenzuständen berechnet:

$$P_{sur}(t) = \sum_{nlm} |\langle nlm | \psi(t) \rangle|^2 \quad . \quad (4.29)$$

Die Ionisationswahrscheinlichkeit ergibt sich damit zu

$$P_{Ion}(t) = 1 - P_{sur}(t) \quad . \quad (4.30)$$

Numerisch ist man gezwungen, sich auf die Berücksichtigung einer Untermenge der Wasserstoffeigenfunktionen zu beschränken, was aber in der Praxis wenig Schwierigkeiten bereitet.

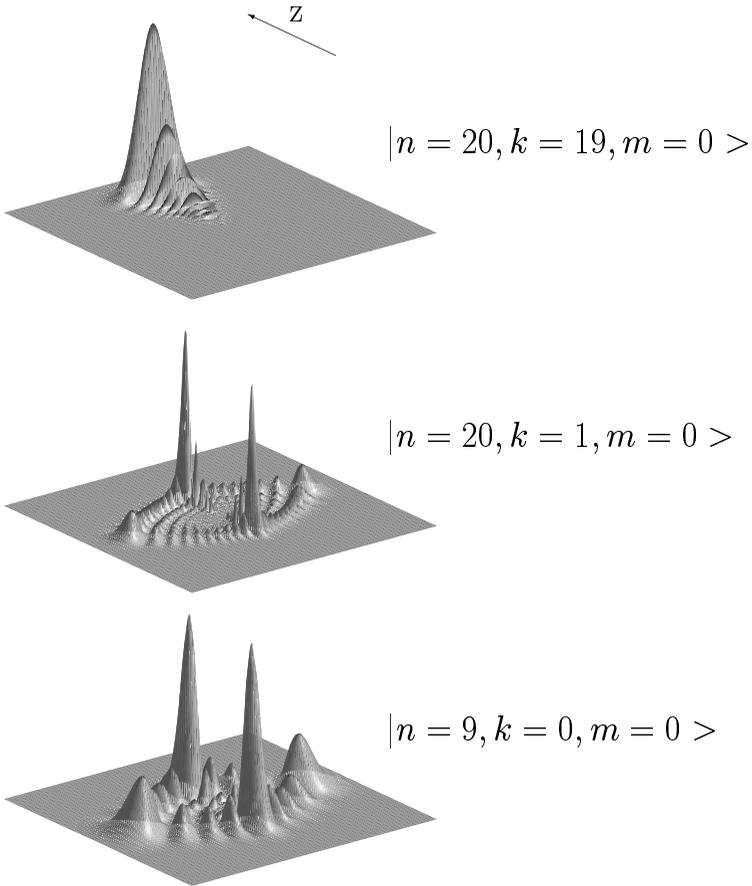
Für den Vergleich mit eindimensionalen klassischen Rechnungen sollte das Startwellenpaket zum einen möglichst nahe der  $z$ -Achse lokalisiert sein und andererseits experimentell leicht realisierbar sein. In den folgenden Rechnungen werden vorwiegend sog. parabolische Zustände (Stark-Zustände) als Startwellenfunktion verwendet. Sie sind Lösungen der feldfreien Schrödingergleichung, stellen jedoch im Gegensatz zu den herkömmlichen  $|nlm\rangle$ -Zuständen auch im Falle schwacher äußerer elektrischer Felder eine akzeptable Basis an Eigenzuständen dar. Diese Zustände lassen sich als Superposition von  $|nlm\rangle$ -Zuständen darstellen:

$$|nkm\rangle = \sum_l (-1)^m \sqrt{2l+1} \begin{pmatrix} (n-1)/2 & (n-1)/2 & l \\ (m-k)/2 & (m+k)/2 & -m \end{pmatrix} |nlm\rangle \quad . \quad (4.31)$$

Der Ausdruck in den großen Klammern stellt das Wigner-3j-Symbol dar und entspricht im wesentlichen den Clebsch-Gordan-Koeffizienten.  $k = -(n-1), -(n-3), \dots, (n-3), (n-1)$  ist die sog. parabolische Quantenzahl, die einfach gesagt ein Maß für die Verschiebung der Dichteverteilung entlang der  $z$ -Achse darstellt. Eine ausführlichere Darstellung der Stark-Zustände findet sich z.B. in [Bethe, Salpeter 1957].

In Abbildung 4.11 sind verschiedene hochangeregte Stark-Zustände abgebildet, die im Folgenden verwendet werden.

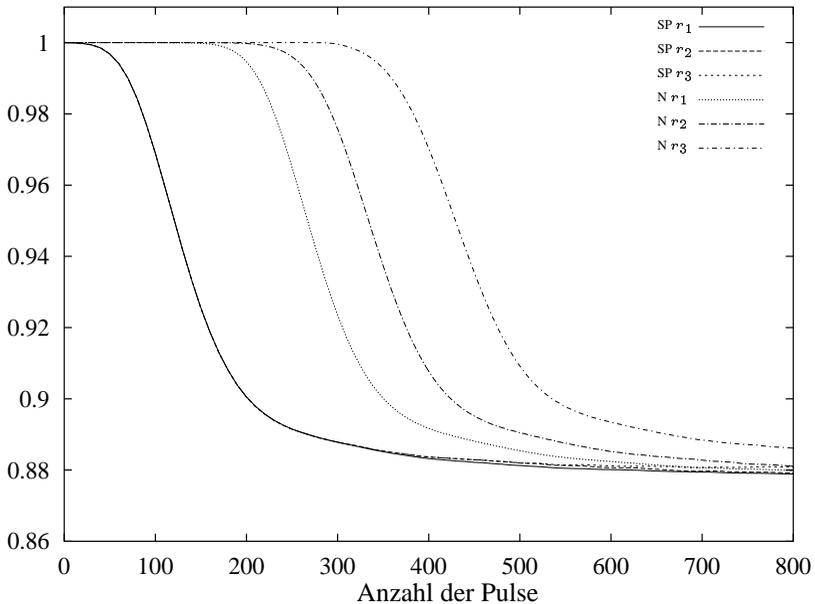
Abbildung 4.12 zeigt die Auswirkung unterschiedlicher Integrationsradien auf den Verlauf der Survival Probability und die Norm des Zustands  $\psi_0 = |n = 20, k = 19, m = 0\rangle$ , der hochfrequenten elektrischen Pulsen der Stärke  $\Delta p = 7.5 \cdot 10^{-4}$  mit der Periodendauer ( $T = T_{n=20}/40 = 1.3 \cdot 10^3$ ) a.u. ausgesetzt



**Abb. 4.11:** Wahrscheinlichkeitsdichten verschiedener Stark-Zustände. Von oben nach unten:  $|nkm\rangle = |20, 19, 0\rangle, |20, 1, 0\rangle$  und  $|9, 0, 0\rangle$ . Je höher die Quantenzahl  $k$ , desto stärker ist die Lokalisierung entlang der  $z$ -Achse.

wird. Die Survival Probability ist für die drei verschiedenen Integrationsradien  $r_1 = 10^4$  a.u.,  $r_2 = 1.4 \cdot 10^4$  a.u. und  $r_3 = 2 \cdot 10^5$  a.u. nahezu identisch,

obwohl die Norm für kleinere Integrationsradien früher zu kleineren Werten hin abfällt, da über den Integrationsrand driftende Anteile des Wellenpakets mittels Masking Function abgeschnitten werden. Qualitativ ergibt sich ein ähnliches Bild wie in [Persson et al. 2002], wo ein eindimensionales Modell mit den gleichen Parametern berechnet wurde. Offensichtlich ist die numerisch berechnete Survival Probability gegenüber der Wahl des Integrationsradius wesentlich unempfindlicher als die Norm.



**Abb. 4.12:** Einfluß des Integrationsradius auf die Entwicklung der Survival-Probability (SP) und der Norm (N) im Hochfrequenzbereich. Gestartet wurde mit dem Stark-Zustand  $|n = 20, k = 19, m = 0\rangle$ , welcher den hochfrequenten Feldimpulsen mit  $\Delta p = 7.5 \cdot 10^{-4}$  und  $\frac{1}{40}$  der klassischen Periodendauer ( $T = T_{n=20}/40 = 1.3 \cdot 10^3$  a.u.) ausgesetzt wird. Die Integrationsradien betragen  $r_1 = 10^4$  a.u.,  $r_2 = 1.4 \cdot 10^4$  a.u. und  $r_3 = 2 \cdot 10^5$  a.u.

### 4.4.2 Resonanzen

Für den Fall, daß die Frequenz der elektrischen Pulse der Übergangsfrequenz diskreter quantenmechanischer Zustände ähnlich ist, haben [Dhar et al. 1983] mittels einer einfachen Entwicklung nach wenigen Basiszuständen aus gebundenen Wasserstoffeigenfunktionen Resonanzen nachgewiesen. In Abbildung 4.13 ist die Dynamik des Zustandes  $|\psi(0)\rangle = |n = 9, k = 0, m = 0\rangle$  unter Einfluß ultrakurzer elektrischer Pulse der Periode  $T = 5357$  a.u. und der Feldstärke  $F = 2 \cdot 10^{-3}$  dargestellt. Die Pulsfrequenz entspricht der Übergangsfrequenz zwischen  $n = 9$ - und  $n = 10$ -Wasserstoffzuständen. Im unteren Bild ist der zeitliche Verlauf des Überlapps des Wellenpakets mit den Zuständen der  $n = 9$ - und  $n = 10$ -Mannigfaltigkeit, genauer

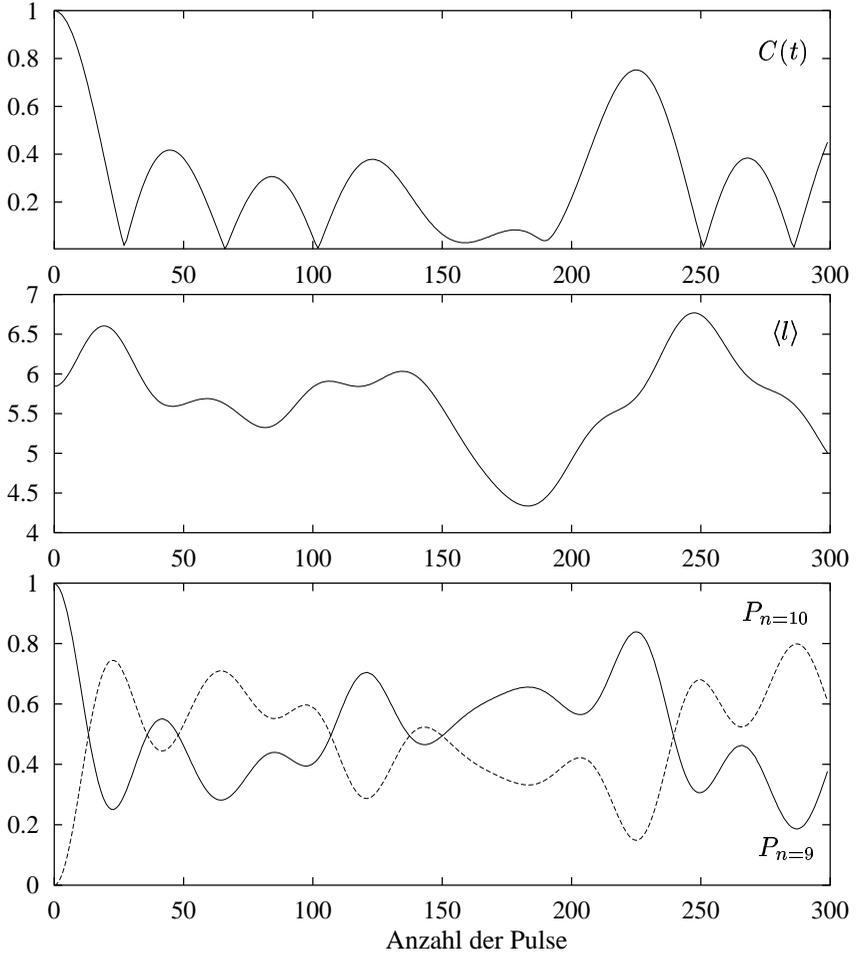
$$P_{n=9}(t) = \sum_{l=0}^8 |\langle 9, l, 0 | \psi(t) \rangle|^2, \quad (4.32)$$

$$P_{n=10}(t) = \sum_{l=0}^9 |\langle 10, l, 0 | \psi(t) \rangle|^2 \quad (4.33)$$

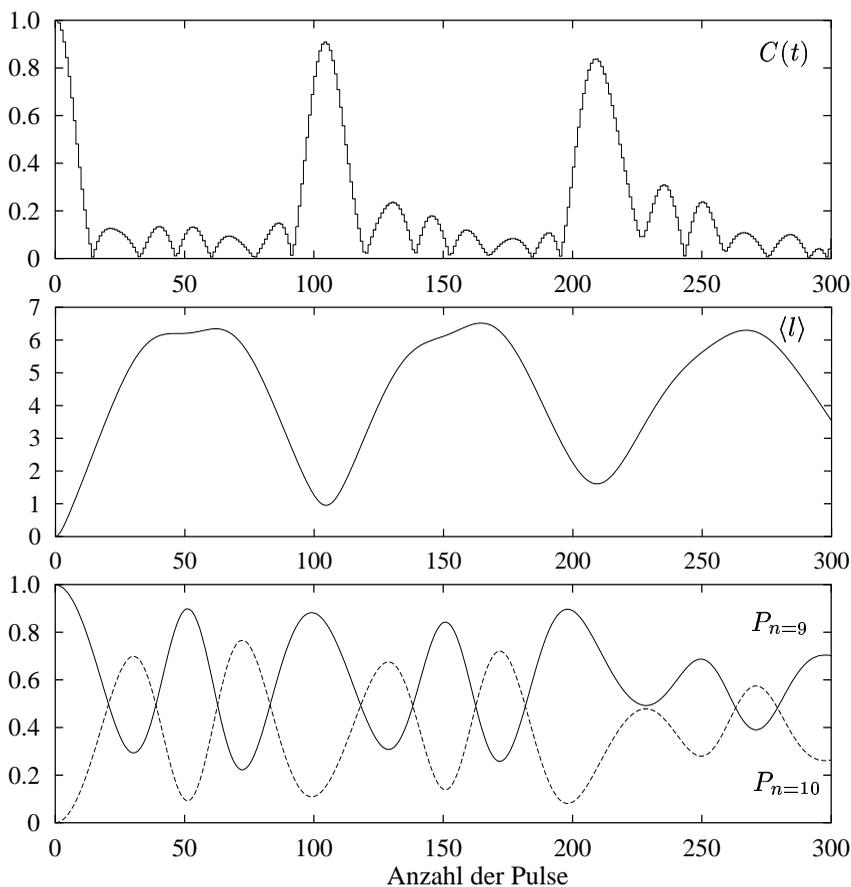
dargestellt. Da  $P_{n=9}(t) + P_{n=10}(t) \approx 1$ , liegt eine Resonanz zwischen diesen beiden Energieniveaus vor. Eine Entwicklung nach gebundenen Zuständen und ohne Berücksichtigung des Kontinuums, wie in [Dhar et al. 1983] ist in diesem Fall gerechtfertigt.

In Abbildung 4.14 ist die Dynamik bei gleichen Parametern, jedoch mit dem Startzustand  $|\psi(0)\rangle = |n = 9, l = 0, m = 0\rangle$  dargestellt. Es ergibt sich ebenfalls eine Resonanz zwischen  $n = 9$ - und  $n = 10$ -Wasserstoffzuständen. Auffällig ist der Verlauf der Autokorrelationsfunktion, die an die Intensitätsverteilung der Beugung von kohärentem Licht am Beugungsgitter erinnert. Auf die formale Ähnlichkeit von Beugungsgitter und gekicktem Wasserstoffatom wurde bereits in [Dhar et al. 1983] hingewiesen.

Der die Resonanzen verursachende Mechanismus wird durch Gleichung (4.12) offen gelegt. Stimmt die Frequenz einer der Fourierkomponenten mit der Übergangsfrequenz zweier Zustände überein, so kommt es zur Resonanz.



**Abb. 4.13:** Der Stark-Zustand  $|\psi(0)\rangle = |n = 9, k = 0, m = 0\rangle$  unter Einfluß ultrakurzer elektrischer Pulse der Periode  $T = 5357$  a.u. und der Feldstärke  $F = 2 \cdot 10^{-3}$ . Oben: die Autokorrelationsfunktion, mitte: Entwicklung des Erwartungswerts  $\langle l \rangle$ , unten: die Wahrscheinlichkeiten  $\sum_{l=0}^8 |\langle 9, l, 0 | \psi(t) \rangle|^2$  und  $\sum_{l=0}^9 |\langle 10, l, 0 | \psi(t) \rangle|^2$ . Die Zeiten sind in Einheiten der Puls-Periodendauer  $T$  aufgetragen.



**Abb. 4.14:** Der Wasserstoffeigenzustand  $|\psi(0)\rangle = |n=9, l=0, m=0\rangle$  unter Einfluß ultrakurzer elektrischer Pulse der Periode  $T = 5357$  a.u. und der Feldstärke  $F = 2 \cdot 10^{-3}$ . Oben: die Autokorrelationsfunktion, mitte: Entwicklung des Erwartungswerts  $\langle l \rangle$ , unten: die Wahrscheinlichkeiten  $\sum_{l=0}^8 |\langle 9, l, 0 | \psi(t) \rangle|^2$  und  $\sum_{l=0}^9 |\langle 10, l, 0 | \psi(t) \rangle|^2$ . Die Zeiten sind in Einheiten der Puls-Periodendauer  $T$  aufgetragen.

### 4.4.3 Quantenlokalisierung

Unter Quantenlokalisierung versteht man die Unterdrückung klassischer chaotischer Diffusion im Rahmen quantenchaotischer Untersuchungen. Quantenlokalisierung wurde zuerst für den gekickten Rotor aufgrund theoretischer Untersuchungen vermutet [Casati et al. 1987]. Es konnte gezeigt werden, daß Quantenlokalisierung auf die in der Festkörperphysik bekannte Anderson-Lokalierung zurückgeführt werden kann [Anderson 1958], [Fishman et al. 1982]. Schließlich konnte für Rydberg-Atome in Mikrowellenfeldern Quantenlokalisierung nachgewiesen werden [Jensen et al.1991], [Casati et al. 1997].

In [Yoshida et al. 2000a] wurde im Rahmen eines eindimensionalen Modells Quantenlokalisierung beim gekickten Wasserstoff nachgewiesen. Dabei blieb die Frage offen, ob auch im dreidimensionalen Fall Quantenlokalisierung auftritt. Abbildung 4.15 zeigt Autokorrelationsfunktionen für die gleichen Parameter wie von [Yoshida et al. 2000a] verwendet, als Startzustand dienten die Zustände  $|\psi(0)\rangle = |n, k = n - 1, m = 0\rangle$  mit den Hauptquantenzahlen  $n = 5, 10, 20, 30, 40, 50$ , also die parabolischen Zustände mit der, einfach gesagt, stärksten Lokalisierung entlang der  $z$ -Achse. Die skalierte Frequenz der elektrischen Pulse entlang der  $z$ -Achse mit dem Impulsübertrag  $\Delta\tilde{p} = 0.01$  betrug  $\tilde{\nu} = 16.8$ . Die gestrichelten Linien zeigen die klassische Autokorrelationsfunktion

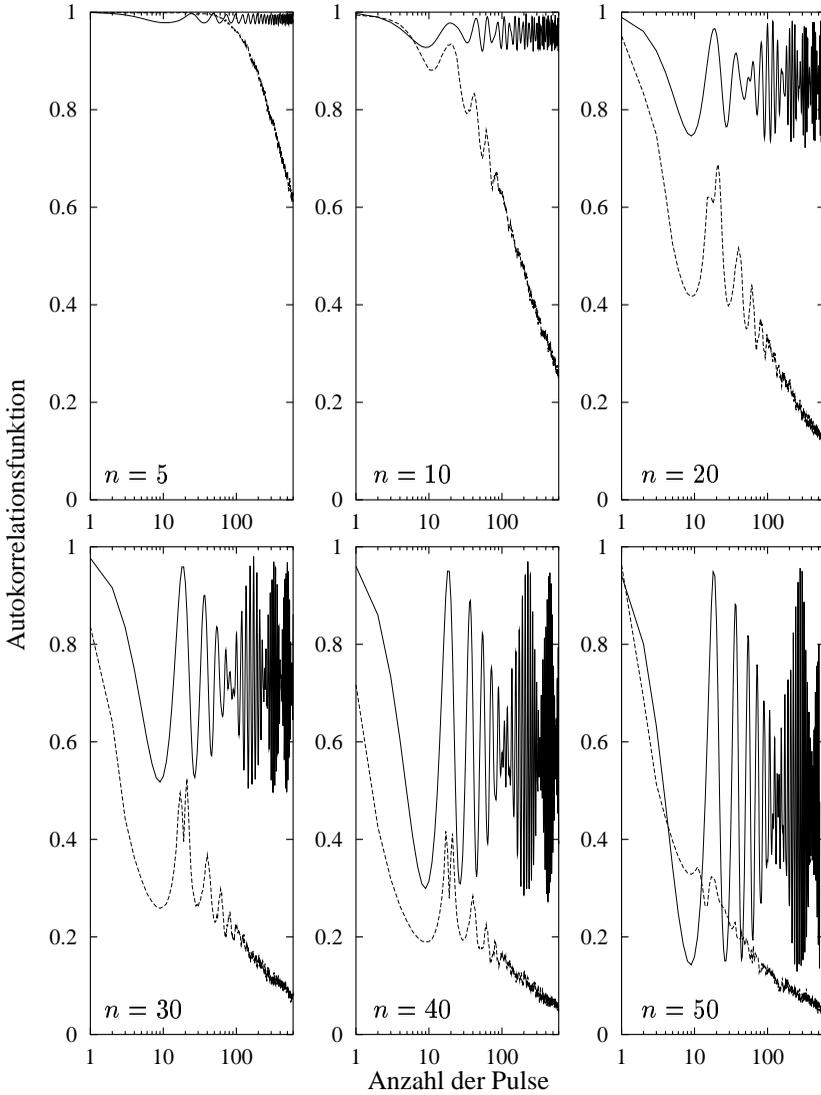
$$P_{Acf}^{kl}(t) = \int_{E_n - \Delta_n < H_H < E_n - \Delta_n} dq dp dE f(q, p, t) \quad . \quad (4.34)$$

Dabei ist  $f(q, p, t)$  die klassische Wahrscheinlichkeitsdichte im Phasenraum,  $E_n = -1/2n^2$  und  $\Delta_n = 1/4(n - 1)^2 - 1/4n^2$ . Da hier die quantisierten Energieniveaus miteingehen, ist (4.34) nicht exakt skaleninvariant. Der genaue Verlauf von  $P_{Acf}^{kl}(t)$  hängt von der Wahl der Starttrajektorien ab. Es zeigt sich jedoch, daß der qualitative Verlauf bei einer großer Anzahl von Starttrajektorien auch bei unterschiedlicher Verteilung im Phasenraum stets ähnlich ist und insbesondere für lange Zeiten bzw. einer großen Anzahl von elektrischen Stößen abnimmt, während die quantenmechanische Autokorrelationsfunktion oszillatorisches Verhalten mit näherungsweise konstanten Amplituden zeigt. Darin manifestiert sich die Quantenlokalisierung des gekickten Wasserstoffs.

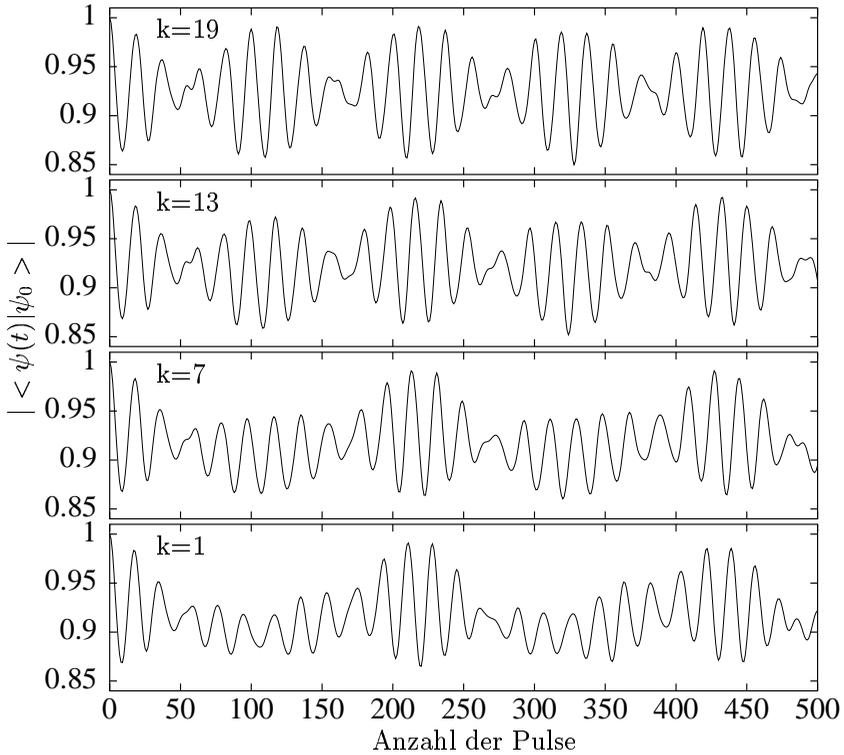
Die Ergebnisse der dreidimensionalen quantenmechanischen Rechnung sind für kleinere Hauptquantenzahlen nahezu ununterscheidbar vom eindimensionalen Fall. Für höhere  $n$  kommt es zunehmend zu Abweichungen in der Amplitude der Autokorrelationsfunktion, die Frequenz bleibt jedoch nahezu unverändert. Offensichtlich ist der zur Quantenlokalisierung führende Mechanismus auch im dreidi-

mensionalen Fall vorhanden.

In Abbildung 4.20 sind die Autokorrelationsfunktionen von Stark-Zuständen der Hauptquantenzahl  $n = 20$  mit unterschiedlichen parabolischen Quantenzahlen aufgetragen, die den gleichen elektrischen Pulsen wie der  $n = 20$ -Zustand in Abbildung 4.15 ausgesetzt sind. Mit abnehmender  $k$ -Quantenzahl sind die Zustände stärker auf der negativen  $z$ -Achse lokalisiert. Lokalisierung auf der negativen  $z$ -Achse ist gleichbedeutend mit Lokalisierung auf der positiven  $z$ -Achse, jedoch mit umgedrehten elektrischen Pulsen. In Kapitel 4.3 hat sich gezeigt, wie drastisch sich die eindimensionale Dynamik bei Umkehrung der Pulsrichtung ändert. Man könnte annehmen, daß sich bei abnehmender  $k$ -Quantenzahl eine ähnlich drastische Änderung der Systemdynamik zeigt, was jedoch offensichtlich nicht der Fall ist. In der eindimensionalen Dynamik ist die positive und negative  $z$ -Achse durch die Coulombsingularität unüberwindbar getrennt. Im mehrdimensionalen Fall existiert für das Elektron jedoch stets eine nichtverschwindende Wahrscheinlichkeit, sich in beliebiger Richtung um die Coulombsingularität aufzuhalten. Daher liegt im mehrdimensionalen Fall im Prinzip stets eine Mischung der eindimensional streng getrennten Systeme mit bzgl. der  $z$ -Achse positiven und negativen elektrischen Stößen vor.



**Abb. 4.15:** Autokorrelationsfunktionen  $|\langle \psi(t) | \psi_0 \rangle|^2$  der Stark-Zustände  $|n, k = n - 1, m = 0\rangle$  mit den Hauptquantenzahlen  $n = 5, 10, 20, 30, 40, 50$  unter Einfluß hochfrequenter Feldimpulse mit  $\tilde{\nu} = 16.8$  und  $\Delta\tilde{\nu} = 0.01$ . Die gestrichelte Linie ist die klassische Autokorrelationsfunktion (siehe Text).



**Abb. 4.16:** Autokorrelationsfunktionen der Stark-Zustände  $|n = 20, k, m = 0\rangle$  mit den parabolischen Quantenzahlen  $k = 1, 7, 13, 19$  unter Einfluß hochfrequenter Feldimpulse mit  $\tilde{\nu} = 16.8$  und  $\Delta\tilde{p} = 0.01$ .

#### 4.4.4 Vergleich mit klassischen Rechnungen

Gemäß des Grundproblems des Quantenchaos stellt sich die Frage, inwieweit sich das chaotische Verhalten der klassischen Behandlung des Systems des gekickten Wasserstoffatoms, wie in Kapitel 4.3 dargestellt, in der quantenmechanischen Behandlung bemerkbar macht. [Reinhold et al. 1997] führten in Parameterbereichen, in denen reguläre Strukturen im Phasenraum vorhanden sind, klassische Monte-Carlo-Rechnungen durch. Dabei zeigte sich, daß sich die Regularität unmittelbar im Ionisationsverhalten niederschlägt. Je größer der Überlapp des Starttorus mit den regulären Strukturen ist, desto geringer ist die Ionisationswahrscheinlichkeit. Das Korrespondenzprinzip läßt für Rydberg-Atome ein ähnliches Verhalten erwarten. Jedoch zeigte sich bereits in den vorangegangenen Kapiteln, daß quantenmechanische Effekte wie Resonanzen zwischen diskreten Energieniveaus bei periodischer Anregung und Quantenlokalisierung eine große Rolle spielen.

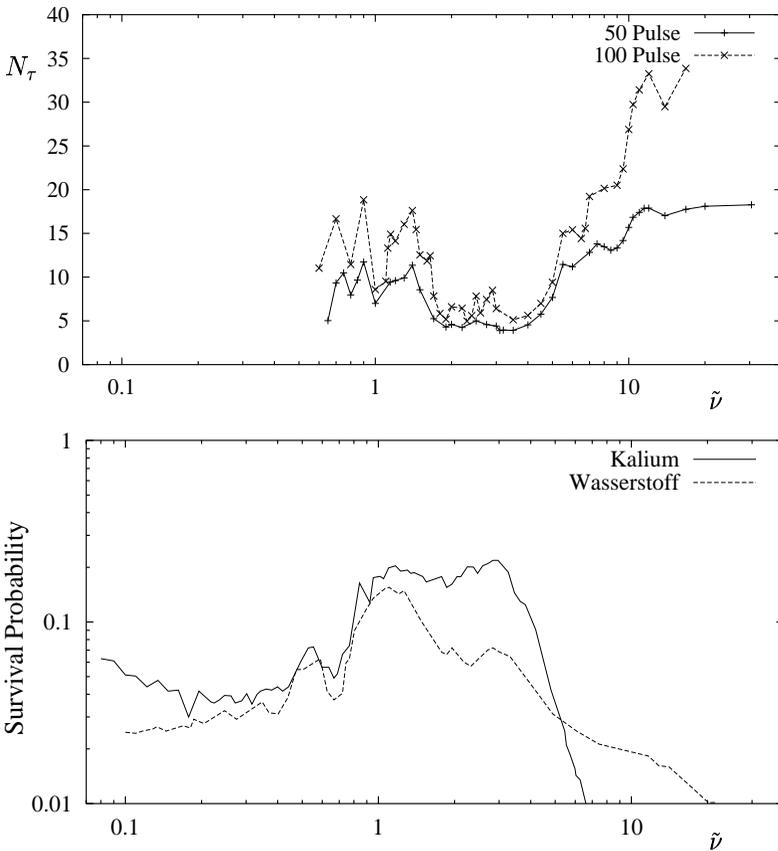
Im unteren Bild der Abbildung 4.17 ist die Survival Probability in Abhängigkeit von der skalierten Frequenz, berechnet mit klassischen Monte-Carlo-Methoden von [Reinhold et al. 1997] für Wasserstoff und Kalium aufgetragen. Als Ausgangszustand diente ein mikrokanonisches Ensemble welches der Energie eines  $n = 388$ -Zustands entspricht. Die Drehimpulsquantenzahl ist dabei  $l = 1$  und die Magnetquantenzahl einem Experiment gemäß statistisch verteilt. Die charakteristische Zunahme der Survival Probability im Bereich zwischen  $\tilde{\nu} \approx 0.8 - 5$  tritt auch bei einfachen, eindimensionalen klassischen Modellen auf und läßt sich eindeutig mit den regulären Strukturen der stroboskopischen Phasenraumschnitte in Verbindung bringen [Frey et al. 1999].

In den quantenmechanischen Rechnungen dieser Arbeit treten diese Strukturen nicht ausgeprägt auf. In Abbildung 4.18 ist der Verlauf der Survival Probability in Abhängigkeit von der skalierten Frequenz bei elektrischen Pulsen der Stärke  $\Delta\tilde{p} = -0.3$  für die Startzustände  $|n = 20, k = 19, m = 0\rangle$  (oben) und  $|n = 9, l = 0, m = 0\rangle$  (unten) nach jeweils 50 Pulsen aufgetragen.

Es zeigen sich allerdings bei der Anzahl der von den Wellenpaketen durchstreiften Phasenraumzellen in Abhängigkeit von der Frequenz ähnliche Strukturen. Die Anzahl der Phasenraumzellen nach Ablauf der Zeit  $\tau$  lassen sich aus der Autokorrelationsfunktion wie von [Heller 1987] angegeben berechnen:

$$\frac{1}{N_\tau} = \frac{2}{\tau} \int_0^\tau \left(1 - \frac{t}{\tau}\right) |C(t)|^2 dt \quad . \quad (4.35)$$

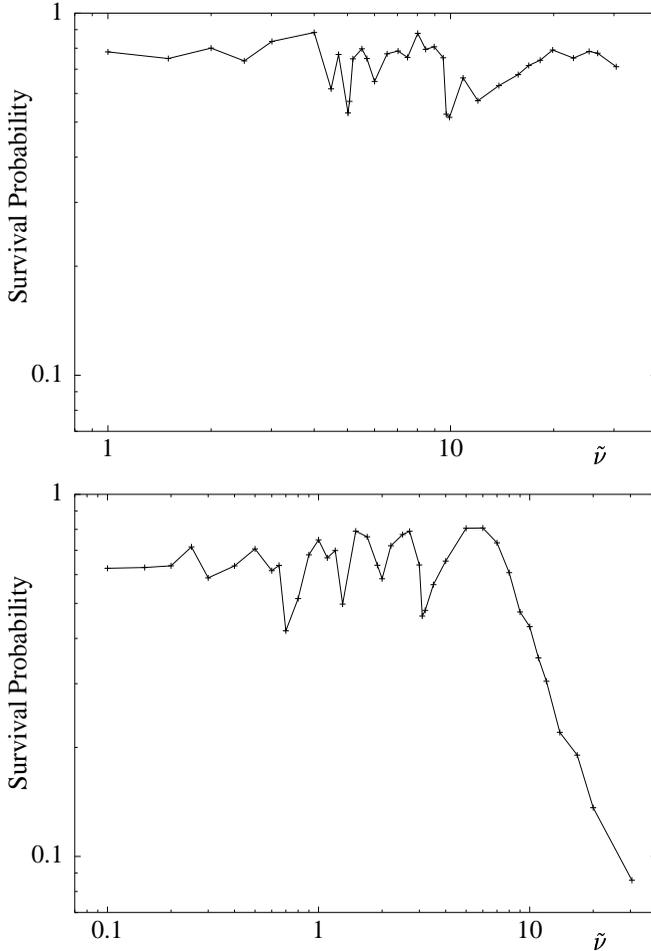
Im oberen Bild der Abbildung 4.17 ist die Anzahl der Phasenraumzellen in Abhän-



**Abb. 4.17:** Oben: Anzahl der durchstreiften Phasenraumzellen des Startzustands  $|\psi_0\rangle = |n = 9, k = 0, m = 0\rangle$  nach 50 bzw. 100 elektrischen Pulsen mit  $\Delta p = -0.3$  in Abhängigkeit der skalierten Frequenz. Unten: Survival-Probability von Wasserstoff- und Kalium-Zuständen mit  $n = 388$  in Abhängigkeit von der skalierten Frequenz berechnet mit CTMC (entnommen aus [Reinhold et al. 1997]).

gigkeit der skalierten Frequenz der elektrischen Pulse für 50 und 100 Pulse aufgetragen. Die Parameter wurden, soweit möglich, den Skalierungsgesetzen (4.19) gemäß den Parametern von [Reinhold et al. 1997] für den Startzustand  $|\psi_0\rangle = |n = 9, l = 0, m = 0\rangle$  angepasst. Offensichtlich durchstreift das Wellenpaket in

Frequenzbereichen, in denen es in der klassischen Rechnung verstärkt zu Ionisierung kommt, entsprechend mehr Phasenraumzellen.



**Abb. 4.18:** Survival Probability in Abhängigkeit von der skalierten Frequenz bei elektrischen Pulsen der Stärke  $\Delta\tilde{p} = -0.3$  für die Startzustände  $|n = 20, k = 19, m = 0\rangle$  (oben) und  $|n = 9, l = 0, m = 0\rangle$  (unten) nach jeweils 50 Pulsen.

### 4.4.5 Experimentelle Aspekte

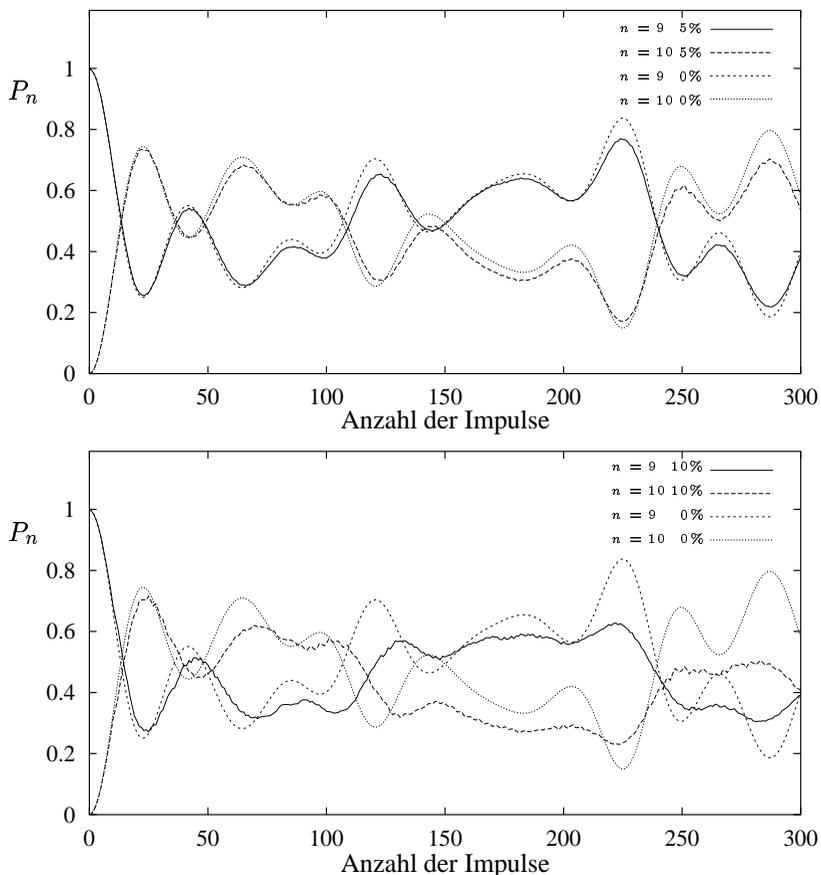
Bislang findet sich in der Literatur erst eine experimentelle Realisierung des gekickten Rydbergatoms [Frey et al. 1999]. Dabei wurden Kalium-Atome durch Laserpulse vom Grundzustand auf Rydbergniveaus der Hauptquantenzahlen  $n \sim 388$  angeregt. Die klassisch korrespondierende Umlaufdauer beträgt  $T_{n=388} \approx 9$  ns. Nach der Anregung passieren die Atome Elektroden, durch die mittels eines Pulsengenerators mit Frequenzen zwischen 20 Mhz und 230 Mhz die elektrischen Pulse realisiert werden. Die elektrischen Pulse haben eine zeitliche Dauer von  $T_P \approx 2$  ns. Damit ist die Voraussetzung (4.9) erfüllt. Nachdem die Atome 10 bis 50 elektrischen Pulsen ausgesetzt wurden, wurde die Ionisationswahrscheinlichkeit gemessen.

Mit dem in dieser Arbeit vorgestellten Verfahren ist es zwar prinzipiell möglich, auch die Dynamik von Wellenpaketen mit Anregungen, die mit denen im durchgeführten Experiment vergleichbar sind, zu berechnen. Jedoch ist der Rechenaufwand durch den großen Integrationsradius und die damit verbundene hohe Anzahl finiter Elemente und die langen charakteristischen Zeiten sehr hoch.

Für die in dieser Arbeit berechneten Wellenpakete mit Anfangszuständen der Hauptquantenzahlen  $n \approx 5 - 50$  ist mit Elektroden, die mit modernen Pulseneratoren gesteuert werden, die Bedingung (4.9) nicht zu erfüllen. Mittlerweile ist es jedoch gelungen, periodische Laserpulse mit einer zeitlichen Dauer im Attosekunden-Bereich zu erzeugen (z.B. [Kien et al. 1998]). In diesem Bereich ist es jedoch schwierig, zeitliche Äquidistanz der Pulse zu gewährleisten. Es stellt sich die Frage, wie groß die Abweichungen der Periodendauer zwischen den Pulsen sein darf, um dennoch Ergebnisse der idealisierten Simulationen experimentell nachvollziehen zu können.

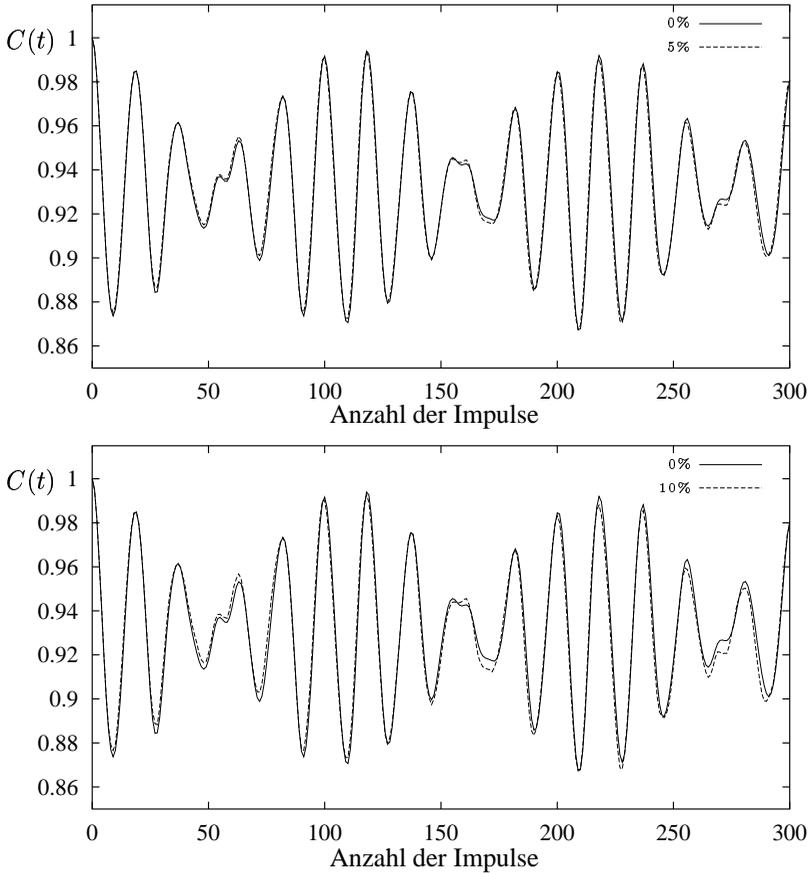
Abbildung 4.19 zeigt die Resonanz zwischen den  $n = 9$ - und  $n = 10$ -Niveaus aus Kapitel 4.4.2 bei zufälligen Abweichungen von der exakten Pulsperiode  $T = 5357$  von 5% (oberes Bild) und 10% (unteres Bild). Bei einer Abweichung von 5% bleibt das Resonanzverhalten im Wesentlichen unberührt. Bei einer Abweichung von 10% tritt bereits nach 300 Pulsen eine erhebliche Abweichung ein, die Wahrscheinlichkeit des Elektrons, sich auf den  $n = 9$ - und  $n = 10$ -Niveaus zu befinden, beträgt lediglich  $\sim 0.8$ .

Unempfindlicher gegenüber zeitlicher Abweichungen der Periodendauer zeigt sich das System im Parameterbereich, in dem, wie in Kapitel 4.4.3 gezeigt, Quantenlokalisierung auftritt. Abbildung 4.20 zeigt den Verlauf der Autokorrelationsfunktion des Startzustands  $\psi_0 = |n = 20, k = 19, m = 0\rangle$  mit den äußeren Parametern entsprechend Abbildung 4.15 bei zufälligen Abweichungen von der



**Abb. 4.19:** Änderung des Resonanzverhaltens bei zufälliger Abweichung von strenger Periodizität der elektrischen Pulse bei Abweichungen von 5% (oben) und 10% (unten). Die Parameter entsprechen den Daten aus Abbildung 4.13.

exakten Periodendauer um 5% (oberes Bild) und 10% (unteres Bild). In beiden Fällen treten nur sehr geringe Abweichungen von der idealisierten Rechnung auf.



**Abb. 4.20:** Autokorrelationsfunktionen von Stark-Zuständen im Hochfrequenzbereich bei zufälliger Abweichung von strenger Periodizität der elektrischen Pulse bei Abweichungen von 5% (oben) und 10% (unten). Die Parameter entsprechen den Daten aus Abbildung 4.15.

#### 4.4.6 Gekickte Alkaliatome

Vom experimentellen Standpunkt ist die Dynamik von gekickten Alkaliatomen interessanter, da Experimente mit Alkaliatomen i.A. leichter zu realisieren sind als mit Wasserstoff. Naiv könnte man annehmen, daß die Dynamik von Alkali-Rydbergzuständen wegen der Wasserstoffähnlichkeit den Ergebnissen der vorangegangenen Kapiteln sehr ähnlich ist. Durch die elektrischen Pulse kann das Elektron jedoch in Kernnähe geraten, wo sich die Quantendefekte, verursacht durch das Feld der anderen Elektronen, auswirken.

Beim System des diamagnetischen Rydbergatoms machte sich bei Wellenpaketen, die anfänglich auf klassischen periodischen Orbits des Wasserstoffatoms lokalisiert sind, der Einfluß der kernnahen Elektronen durch Streuung von Teilen des Wellenpakets auf andere Wasserstoffori bemerkbar [Schweizer, Jans 1998].

In Abbildung 4.21 ist dieselbe Rechnung wie in 4.14, jedoch für Lithium dargestellt. Die Unterschiede sind gravierend. In Tabelle 4.1 sind die  $n = 8, 9, 10$ -Niveaus von Lithium ohne externe Felder aufgeführt. Daraus geht hervor, daß die Pulsperiode  $T = 5357$  der Übergangsperiode der  $n = 8, l = 1$ - und  $n = 9, l = 0$ -Lithiumniveaus  $T_{8,1 \leftrightarrow 9,0} = 5516$  am nächsten kommt. Tatsächlich ist  $P_{n=8}(t) + P_{n=9}(t) \approx 1$ . Durch die Quantendefekte wird die  $l$ -Entartung aufgehoben. Dadurch stimmt die Übergangsperiode auf Niveaus mit höheren Drehimpulsquantenzahlen schlechter mit der Periode der elektrischen Pulse überein und werden deshalb nicht bevölkert, was man auch am zeitlichen Verlauf von  $\langle l \rangle$  erkennen kann. Es liegt eine fast exakte Zweizustands-Resonanz zwischen den  $n = 8, l = 1$ - und  $n = 9, 0$ -Niveaus vor. Die Wahrscheinlichkeit, daß der  $n = 10$ -Zustand wie im Falle des Wasserstoffs bevölkert wird, ist nahezu gleich 0 (gepunktete Linie).

Entspricht die Periode der elektrischen Pulse exakt der Übergangsperiode zwischen dem  $n = 8, l = 1$ - und dem  $n = 9, 0$ -Lithiumniveau ( $T \approx 5515$ ), so ergibt sich eine Besetzung der  $n = 8$ - und  $n = 9$ -Niveaus entsprechend Abbildung 4.22.  $n = 7$ -Niveaus höherer Drehimpulsquantenzahl haben die Energie  $E_7 \approx -0.01$ . Die Übergangsperiode zwischen dem  $n = 8, l = 1$ -Niveau und den  $n = 7$ -Niveaus beträgt  $T \approx 2730$  und entspricht damit ungefähr der ersten Oberfrequenz der anregenden elektrischen Pulse ( $5515/2 = 2757.5$ ). Dadurch kommt es zu einer Bevölkering der  $n = 7$ -Niveaus.

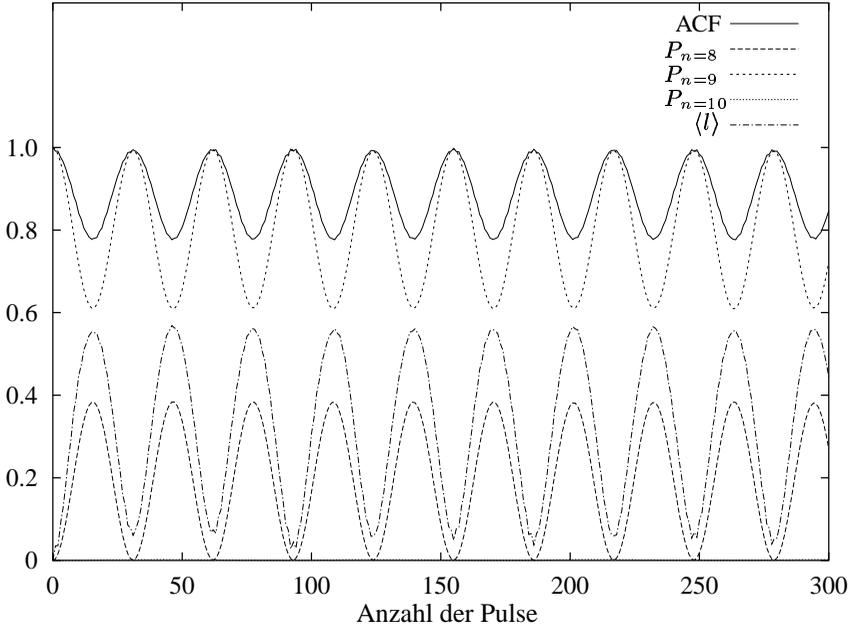
Neben dem verglichen mit Wasserstoff geänderten Resonanzverhalten geht auch die in Kapitel 4.4.3 gezeigte Quantenlokalisierung verloren. Abbildung 4.23 zeigt ein Vergleich des Verlaufs der Autokorrelationsfunktion von Wasserstoff, Lithium und Natrium im Falle hochfrequenter elektrischer Pulse. Die Parameter ent-

l	$n = 8$	$n = 9$	$n = 10$
0	-0.00866404041534	-0.00676547786395	-0.00542892381615
1	-0.00790458457348	-0.00623759440051	-0.00504724410963
2	-0.00781417989762	-0.00617403786378	-0.00500088327472
3	-0.00781251542963	-0.00617285088311	-0.00500000858058
4	-0.00781250007097	-0.00617283956212	-0.00500000004415
5	-0.00781250000016	-0.00617283950632	-0.00500000000012
6	-0.00781250000000	-0.00617283950617	-0.00500000000000
7	-0.00781250000000	-0.00617283950617	-0.00500000000000
8		-0.00617283950617	-0.00500000000000
9			-0.00500000000000

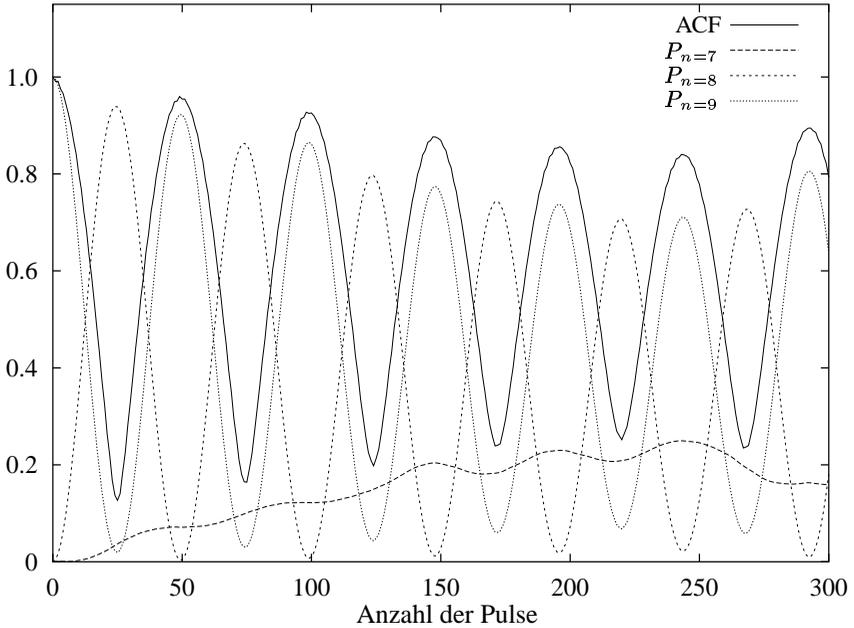
**Tab. 4.1:** Energien von Lithium-Niveaus der Hauptquantenzahlen  $n = 8, 9, 10$ . Die Daten wurden mit dem in Kapitel 2 vorgestellten Verfahren berechnet.

sprechen denen der Abbildung 4.15 mit  $n = 20$  ( $|\psi_0\rangle = |n = 20, k = 19, m = 0\rangle$ ,  $\tilde{\nu} = 16.8$ ,  $\Delta\tilde{p} = 0.01$ ). Die Startzustände von Natrium und Lithium wurden mit den in Kapitel 2 vorgestellten Verfahren berechnet. Offensichtlich kommt es zu einer Aufhebung der Quantenlokalisierung.

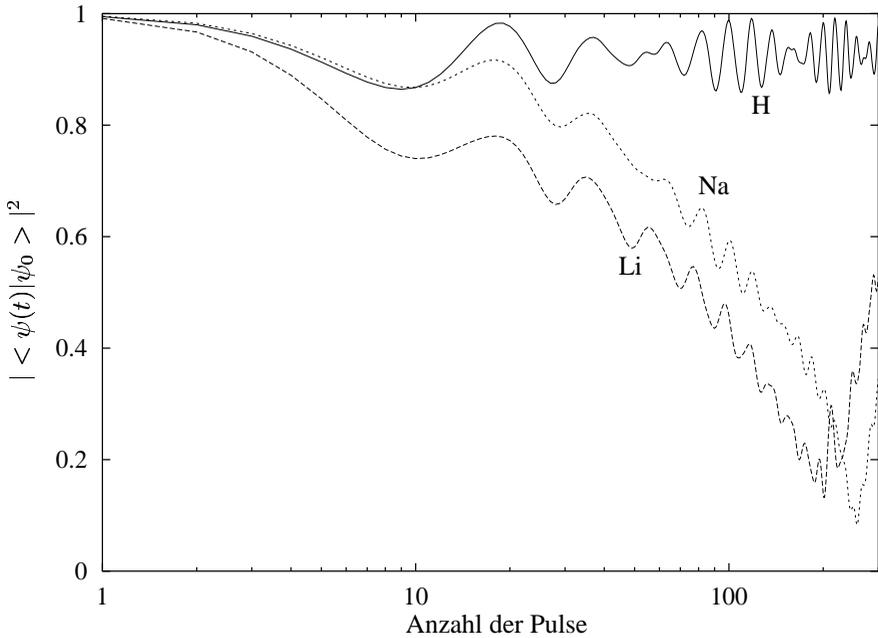
Im Falle von Ein-Elektron-Atomen höherer Kernladungszahl ist das Problem durch eine  $Z$ -Skalierung des externen elektrischen Feldes wieder auf das Wasserstoffproblem zurückführbar. Bei vollbesetzten Alkaliatomen erfahren Anteile des Wellenpakets, die in Kernnähe vordringen, ein der höheren Kernladung entsprechend stärkeres elektrisches Feld. Eine globale Skalierung der elektrischen Pulse ist nicht möglich.



**Abb. 4.21:** Entwicklung der Autokorrelationsfunktion, dem Überlapp mit Zuständen der  $n = 8, 9, 10$ -Mannigfaltigkeiten und des Erwartungswerts der Drehimpulsquantenzahl  $\langle l \rangle$  des Lithium-Zustands  $|\psi_0\rangle = |Li\ n = 9, l = 0, m = 0\rangle$  unter Einfluß kurzer Feldimpulse mit  $F = 2 \cdot 10^{-2}$  mit der Periode  $T = 5357$ .



**Abb. 4.22:** Entwicklung der Autokorrelationsfunktion und der Überlapp mit Zuständen der  $n = 7, 8, 9$ -Mannigfaltigkeiten des Lithium-Zustands  $|\psi_0\rangle = |Li\ n = 9, l = 0, m = 0\rangle$  unter Einfluß kurzer Feldimpulse mit  $F = 2 \cdot 10^{-2}$  mit der Periode  $T = 5515$ .



**Abb. 4.23:** Autokorrelationsfunktionen der Stark-Zustände  $|n = 20, k = 19, m = 0\rangle$  für Wasserstoff, Natrium und Lithium unter Einfluß hochfrequenter Feldimpulse mit  $\tilde{\nu} = 16.8$  und  $\Delta\tilde{p} = 0.01$ .

## 4.5 Ultrakurze alternierende elektrische Pulse

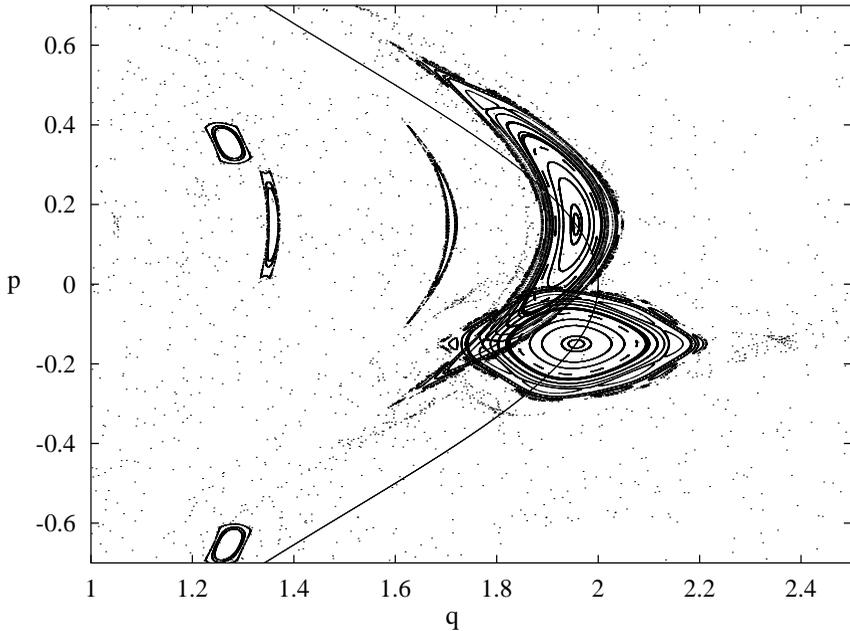
Die Variante des gekickten Wasserstoffatoms mit alternierenden Feldimpulsen wurde in der Literatur bislang nur dürftig behandelt ([Tannian et al. 2000], [Carnegie 1984], [Casati et al. 1994]). Das zu (4.11) analoge externe Potential lautet

$$V_{ext}(t) = \vec{r} \cdot \Delta \vec{p} \sum_{k=0}^{S-1} (-1)^{k+1} \delta(t - kT) \quad . \quad (4.36)$$

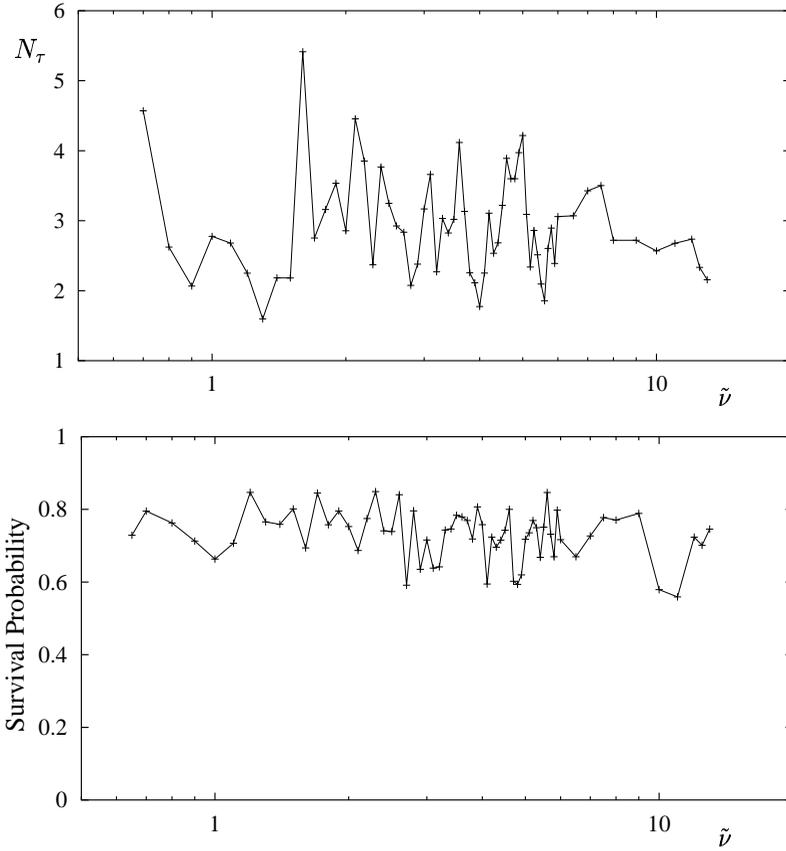
Wie beim herkömmlichen gekickten Wasserstoffatom gibt es auch hier Parameterbereiche, in denen der Phasenraum in reguläre und irreguläre Bereiche aufgeteilt ist. Abbildung 4.24 zeigt einen stroboskopischen Phasenraumschnitt mit Impulsüberträgen von  $|\Delta p| = 0.3$  und der Frequenz  $\nu = 2\pi$ . Es wurden die Phasenraumpunkte unmittelbar nach jedem Puls, unabhängig von der Pulsrichtung, geplottet. Daher ergibt sich eine offensichtliche Überlagerung regulärer Strukturen. [Tannian et al. 2000] führten für die gleichen Parameter dreidimensionale Froeschlé-Schnitte um  $\rho = 0.1$  und  $p_\rho = 0$  durch. Die wesentlichen Phasenraumstrukturen bleiben erhalten. Liegt der Starttorus wie in Abbildung 4.24 so, daß eine große Überlagerung mit regulären Strukturen gegeben ist, so ergibt sich in den klassischen Rechnungen von [Tannian et al. 2000] eine Erhöhung der Survival Probability. Verändert man die Frequenz, so „wandern“ die regulären Strukturen unter dem Starttorus hinweg, die Ionisierungswahrscheinlichkeit steigt.

In Abbildung 4.25 ist im unteren Bild die Survival Probability der vollständigen dreidimensionalen Rechnung nach 50 alternierenden Pulsen mit dem skalierten Impulsübertrag  $|\Delta \tilde{p}| = 0.3$  in Abhängigkeit von der skalierten Frequenz aufgetragen. Der Ausgangszustand war wieder der Stark-Zustand  $|\psi\rangle = |n = 20, k = 19, m = 0\rangle$ . Wie schon beim gekickten Wasserstoff mit fester Pulsrichtung ist von den Phasenraumstrukturen nichts zu erkennen. Nach den klassischen Rechnungen von [Tannian et al. 2000] sollte sich ein eindeutiger Peak um die skalierte Frequenz  $\tilde{\nu} = 1$  zeigen. Auch bei der Anzahl der durchstreiften Phasenraumzellen in Abbildung 4.25 oben, ist davon nichts zu erkennen.

Auch bei diesem System werden klassische Eigenschaften durch quantenmechanische Eigenheiten verwischt.



**Abb. 4.24:** Stroboskopischer Phasenraumschnitt mit Impulsüberträgen von  $|\Delta p| = 0.3$  und der Frequenz  $\nu = 2\pi$ . Die durchgezogene Linie entspricht einem ungestörten Torus der Energie  $E = -\frac{1}{2}$ .



**Abb. 4.25:** Oben: Anzahl der durchstreiften Phasenraumzellen des Startzustands  $|\psi_0\rangle = |n = 20, k = 19, m = 0\rangle$  nach 50 alternierenden elektrischen Pulsen mit  $|\Delta p| = 0.3$  in Abhängigkeit der skalierten Frequenz. Unten: Survival-Probability.

## 4.6 Zufallsverteilte elektrische Pulse

Um die Dynamik atomarer Zustände bei Beschuss von Festkörperoberflächen zu simulieren, wurde von [Melles et al. 1993] das Modell des mit elektrischen  $\delta$ -Pulsen angeregten Atoms vorgeschlagen. Die zeitlichen Abstände zwischen den Pulsen unterliegen dem Zufall.

Im Folgenden wird der Einfluß verschiedener Varianten von Zufallspulssequenzen mit jeweils 50 Pulsen mit dem Startzustand  $|\psi_0\rangle = |n = 20, k = 19, m = 0\rangle$  bei einer mittleren Periodendauer von  $\bar{T} = 2990$  untersucht.

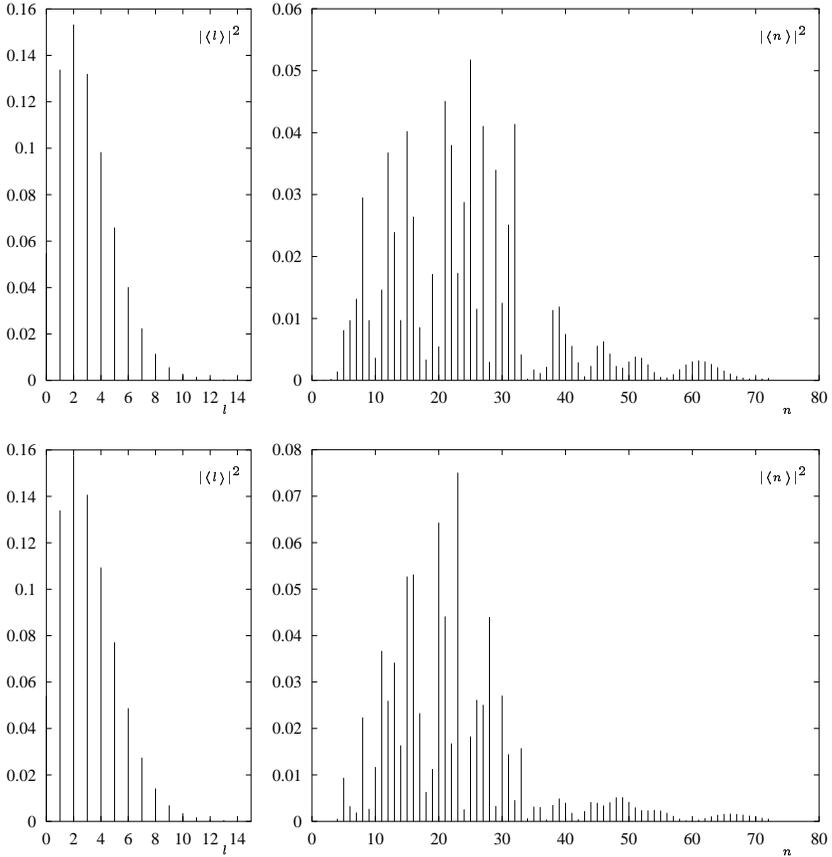
In Abbildung 4.26 oben wurde die elektrische Feldstärke  $F = 0.015$  und die Richtung des Feldes konstant gehalten. Das linke Bild zeigt die Besetzungswahrscheinlichkeit gebundener Zustände mit der Drehimpulsquantenzahl nach den 50 Pulsen. Das rechte Bild zeigt die Besetzungswahrscheinlichkeit gebundener Zustände mit der Hauptquantenzahl  $n$ . Die Ionisationswahrscheinlichkeit beträgt nach 50 Pulsen  $I_{50} = 0.276$ . Ändert man die zeitliche Zufallssequenz der Pulse, erhält man sehr ähnliche Ergebnisse.

In Abbildung 4.26 unten wurde die Feldstärke wieder konstant gehalten, jedoch mit alternierender Richtung. Die Verteilung auf die gebundenen Zustände ist bezüglich der  $l$ -Quantenzahl sehr ähnlich wie im oberen Bild. Die Ionisationswahrscheinlichkeit ist mit  $I_{50} = 0.223$  ebenfalls sehr ähnlich.

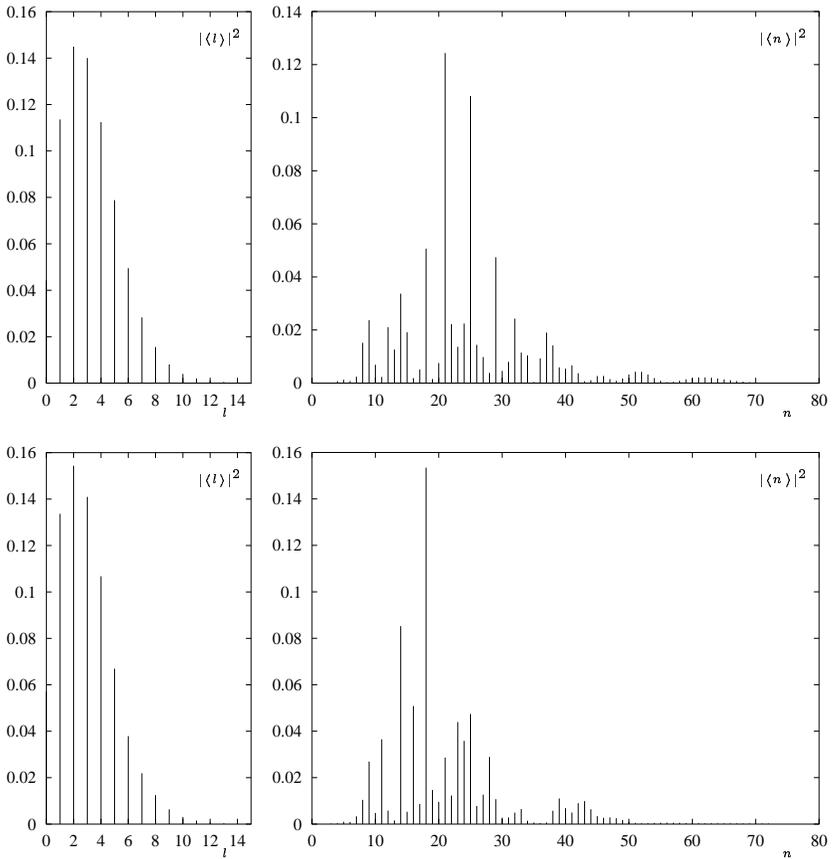
In Abbildung 4.27 oben wurde auch die elektrische Feldstärke zufallsverteilt. Die mittlere Feldstärke betrug  $\bar{F} = 0.015$ . Die Richtung des Feldes wurde konstant gehalten. Die Ionisationswahrscheinlichkeit beträgt  $I_{50} = 0.256$ .

Im unteren Teil der Abbildung 4.27 wurde bei einer zufallsverteilten mittleren Feldstärke  $\bar{F} = 0.015$  die Richtung des Feldes alternierend angesetzt. Die Ionisationswahrscheinlichkeit beträgt  $I_{50} = 0.255$ .

Zusammenfassend kann man feststellen, daß nach hinreichend vielen Pulsen bei mittlerer Periodendauer und Feldstärke die Details der Zufallssequenz keinen wesentlichen Einfluß auf die Ionisationswahrscheinlichkeit haben.



**Abb. 4.26:** Wahrscheinlichkeiten der Besetzung von gebundenen Zuständen in Abhängigkeit der Quantenzahlen  $l$  und  $n$  nach 50 zeitlich zufälligen elektrischen Pulsen mit einer mittleren Pulsperiode von  $\bar{T} = 2990$ . Oben: konstante Feldstärke  $F = 0.015$  in konstanter Richtung, unten: konstante Feldstärke  $F = 0.015$ , alternierende Pulse.



**Abb. 4.27:** Wahrscheinlichkeiten der Besetzung von gebundenen Zuständen in Abhängigkeit der Quantenzahlen  $l$  und  $n$  nach 50 zeitlich zufälligen elektrischen Pulsen mit einer mittleren Pulsperiode von  $\bar{T} = 2990$ . Oben: zufällige Feldstärke mit dem Mittel  $\bar{F} = 0.015$  in konstanter Richtung, unten: zufällige Feldstärke mit dem Mittel  $\bar{F} = 0.015$ , alternierende Pulse

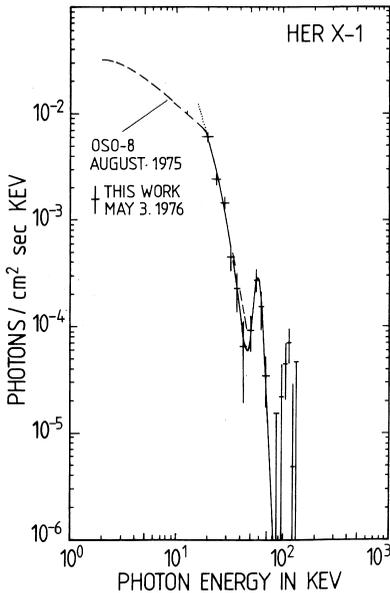
# 5 Viel-Elektronen-Atome in Neutronensternmagnetfeldern

Die quantitative Analyse des elektromagnetischen Spektrums eines Neutronensterns erlaubt prinzipiell die Bestimmung seiner Parameter wie Oberflächentemperatur, Masse, Radius und Magnetfeld. Aus der Kenntnis dieser Parameter lassen sich dann Rückschlüsse auf die innere Struktur ziehen. Die Berechnung synthetischer Spektren erfolgt anhand von Modellatmosphären, deren Vergleich mit der Beobachtung die korrekten Sternparameter liefern. Für die Modellierung benötigt man jedoch Kenntnisse über Strahlungstransport und Opazitäten, welche durch die in der Sternatmosphäre vorhandenen Elemente und den in den Elementen möglichen atomaren Übergängen mitbestimmt werden. Während atomare Daten wie Energieniveaus und Oszillatorstärken von Wasserstoff und Helium auch in Magnetfeldstärken, wie sie bei Neutronensternen vermutet werden ( $B \sim 10^8$  T), in ausreichender Zahl vorhanden sind, sind Daten von schweren Elementen sehr rar.

Ein einfaches Argument für die in Neutronensternen auftretenden Magnetfelder der oben genannten Größe ist die magnetische Flußerhaltung  $B \cdot R^2 = \text{const.}$  in Plasmakugeln. Geht man von einem Stern mittlerer Größe aus, mit einem Radius von  $R_i = 10^9$  m und einem Magnetfeld von  $B_i = 0.1$  T so ergibt die Flußerhaltung  $B_i \cdot R_i^2 = B_f \cdot R_f^2$  bei einem Kollaps auf den typischen Neutronensternradius  $R_f = 10^4$  m ein Magnetfeld von  $B_f = 10^8$  T.

In einem Ballonexperiment wurde das Röntgenspektrum von Her X-1 erfaßt [Trümper et al. 1977] (siehe Abb.5.1). Interpretiert man die Linie bei 58 keV als Zyklotronemissionslinie, verursacht durch einen Übergang von freien Elektronen vom ersten angeregten Landauniveau (Drehimpulsquantenzahl  $j = 1$ , Spinquantenzahl  $s = -1$  oder  $j = 0$  und  $s = 1$ ) zum Grundzustand ( $j = 0, s = -1$ ), so kann man aus den analytisch bekannten Landauniveaus

$$E_{j,s} = mc^2 \left( \left[ 1 + \left( \frac{p_z}{mc} \right)^2 + (2j + s + 1) \frac{B}{B_{cr}} \right]^{1/2} - 1 \right) \quad (5.1)$$

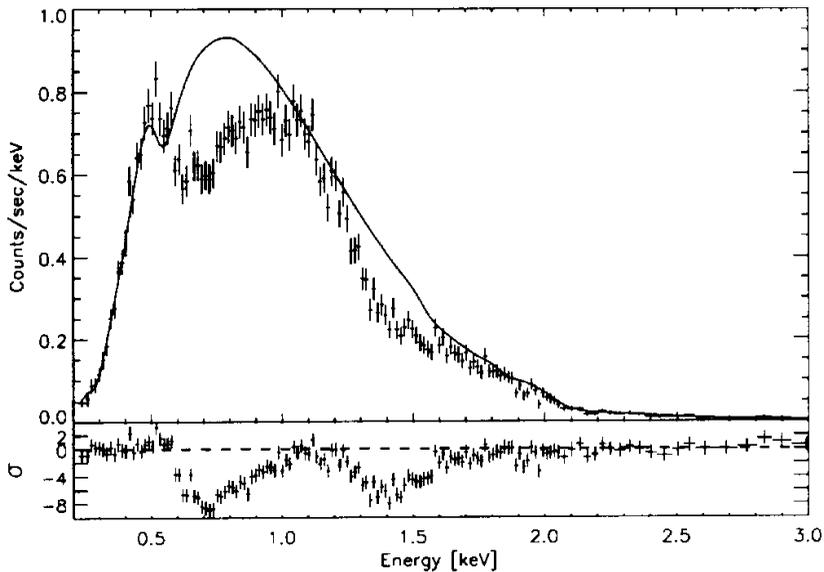


**Abb. 5.1:** Röntgenspektrum von Her X-1 (entnommen aus [Trümper et al. 1977]). Interpretiert man die 58 keV-Linie als Zyklotronemissionslinie, so kann man auf ein Magnetfeld von  $5.3 \cdot 10^8$  T schließen. Die Interpretation der 42 keV-Linie als Zyklotronabsorptionslinie läßt auf ein Magnetfeld von  $4 \cdot 10^8$  T schließen.

auf ein Magnetfeld von  $5.3 \cdot 10^8$  T schließen. Hierbei ist  $B_{cr} = (m^2 c^3)/eh = 44.14 \cdot 10^8$  T und  $p_z$  der Impuls des Elektrons entlang des Magnetfelds. Man kann allerdings auch die Linie bei 42 keV als eine Absorptionslinie interpretieren, woraus sich ein Feld von  $4 \cdot 10^8$  T ergibt.

Es liegt auf der Hand, daß sich die Struktur der Atomhülle in magnetischen Feldern dieser Größenordnung stark verändert. Allgemein läßt sich feststellen, daß die Wahrscheinlichkeitsdichten, einfach gesagt, senkrecht zum Magnetfeld zusammengedrückt werden [Ruder et al. 1994].

In jüngster Zeit wird mit den Röntgensatelliten *Chandra* und *XMM-Newton* umfangreiche Neutronensternspektroskopie betrieben. Im Vordergrund stehen dabei Untersuchungen isolierter Neutronensterne, da die Strahlung der Oberfläche nicht von der starken Emission einer Akkretionsscheibe überlagert wird. Die meisten Untersuchungen mit *Chandra* und *XMM-Newton* konnten keine Hinweise auf Absorptionslinien erbringen (Ein Überblick findet sich in [Pavlov et al. 2002] und [Becker, Aschenbach 2002]), dennoch lieferten sie neue Ansätze für das Verständnis vom Aufbau der Neutronensternatmosphären. [Pavlov et al. 2002] konnten diese Spektren mit ihrem Modell einer Wasserstoffatmosphäre in Einklang



**Abb. 5.2:** *Chandra/ACIS*-Spektrum des Neutronensterns 1E 1207.4-5209 (entnommen aus [Hailey, Mori 2002]). Die Absorptionsfeatures liegen bei  $\sim 0.7$  keV und  $\sim 1.4$  keV.

bringen und Oberflächentemperatur, Radius und Masse-Radius-Verhältnis einiger Neutronensterne bestimmen.

Das erste und bislang einzige Neutronensternspektrum, das Absorptionslinien zeigt, ist das Spektrum von 1E 1207.4-5209 [Sanwal et al. 2002], siehe Abbildung 5.2 (entnommen aus [Hailey, Mori 2002]). [Sanwal et al. 2002] haben zur Erklärung der Linien das Vorhandensein von einfach ionisiertem Helium bei  $B = (1.4 - 1.7) \cdot 10^9$  T vorgeschlagen. [Mereghetti et al. 2002] halten auch eine Eisenatmosphäre mit einem Magnetfeld von  $10^8$  T für möglich, jedoch präsentieren sie kein eigenes Modell sondern verweisen auf [Rajagopal et al. 1997]. [Hailey, Mori 2002] konnten das Spektrum an die Ergebnisse ihres Atmosphärenmodells fitten, ausgehend von einem hohen Anteil an heliumähnlichen Sauerstoff und Neon in einem Magnetfeld von  $\sim 10^8$  T.

Auch an der Universität Tübingen werden insbesondere in der Arbeitsgrup-

pe von Prof. Werner Neutronensternatmosphärenmodelle entwickelt. Da Neutronensterne letztendlich kollabierte Eisenkerne von massereichen Sternen sind, wird hier jedoch von einer Atmosphäre aus Eisenionen ausgegangen. Zur Modellierung benötigt man die atomaren Daten Tausender bis Millionen Übergänge aller Ionisationsstufen. In diesem Kapitel wird ein Verfahren vorgestellt, mit dem in kurzer Zeit diese Datenmengen produziert werden können. Dazu werden die Hartree-Fock-Gleichungen in adiabatischer Näherung mit der Methode der Finiten Elemente mit B-Spline-Interpolation gelöst. Abschließend wird der Programm-Code parallelisiert.

Um sich die wesentlichen Verhältnisse, Symmetrien, Quantenzahlen und numerischen Methoden klarzumachen, wird im Folgenden zunächst Wasserstoff betrachtet, bevor dann ab Kapitel 5.2 auf die schwereren Elemente eingegangen wird.

## 5.1 Wasserstoff im starken Magnetfeld

### 5.1.1 Hamiltonoperator

Der nichtrelativistische Hamiltonoperator für Wasserstoff in einem starken Magnetfeld entlang der  $z$ -Achse lautet (siehe z.B. [Faßbinder 1997])

$$H = -\frac{1}{2}\Delta - \frac{1}{r} + \beta l_z + \frac{1}{2}\beta^2 \rho^2 - \beta \quad . \quad (5.2)$$

Die ersten beiden Terme repräsentieren den Operator für die kinetische Energie und das Coulombpotential zwischen Kern und Elektron. Der 3. und 4. Term stellt die para- bzw. diamagnetische Wechselwirkung dar. Der 5. Term ist die Energieverschiebung aufgrund der Wechselwirkung zwischen Elektronenspin und Magnetfeld. Hier wurde bereits davon ausgegangen, daß der Elektronenspin antiparallel zum Magnetfeld ausgerichtet ist. Bei einem Feld von  $2 \cdot 10^8$  T würde ein Spinflip eine Energieerhöhung von 25 keV bedeuten, was zu einer Ionisierung des H-Atoms führen würde.

### 5.1.2 Entwicklung nach orthogonalen Basisfunktionen

Bei einem Magnetfeld von  $B_0 = 4.7 \cdot 10^5$  T ist die Coulombkraft gleichgroß wie die Lorentzkraft bzw. der Coulombradius gleich dem Larmorradius. Unterhalb dieses Felds überwiegt die Kugelsymmetrie des Coulombfelds, so daß sich

Entwicklungen in sphärischen Koordinaten anbieten:

$$\psi(r, \theta, \phi) = \sum_{nl} R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi) \quad . \quad (5.3)$$

Im Gegensatz zum feldfreien Fall, wo der Gesamtdrehimpuls eine Erhaltungsgröße ist, muß für  $B \neq 0$  eine Superposition von Drehimpulszuständen angesetzt werden. Die  $z$ -Komponente des Drehimpulses, welche mit der Magnetquantenzahl  $m$  verknüpft ist, ist auch bei externem Magnetfeld eine Erhaltungsgröße, ebenso die Parität  $\pi$ .  $Y_{lm}(\theta, \phi)$  sind die Kugelflächenfunktionen und als radialabhängige Funktionen  $R_{nl}$  kommen vollständige Basisfunktionen wie z.B. die Sturm-Liouvilleschen Funktionen in Betracht. (5.3) und (5.2) führen zusammen mit der zeitunabhängigen Schrödingergleichung auf gewöhnliche Eigenwertprobleme zur Bestimmung der Energien und Wellenfunktionen.

Oberhalb des Referenzfelds  $B_0$  überwiegt die Zylindersymmetrie des Magnetfelds. Daher sind Entwicklungen in Zylinderkoordinaten zweckmäßig:

$$\psi(z, \rho, \phi) = \sum_{\nu, n} P_{\nu m}(z) \cdot \phi_{nm}(\rho, \phi) \quad . \quad (5.4)$$

Dabei ist  $\nu$  die Quantenzahl der Quantisierung der  $z$ -Achse, welche wie die Hauptquantenzahl  $n$  beim feldfreien Wasserstoff mit der Knotenzahl der Wellenfunktion verknüpft ist,  $n$  ist hier die Landauquantenzahl und

$$\phi_{nm}(\rho, \phi) = \frac{1}{a_L \sqrt{\pi n! (n - m)!}} e^{im\phi} \left( \frac{\rho}{a_L} \right)^m e^{-\frac{\rho^2}{2a_L^2}} L_s^m \left( \frac{\rho^2}{a_L^2} \right) \quad (5.5)$$

sind die Landaufunktionen mit dem Larmorradius  $a_L = \sqrt{1/\beta}$ . Die Landaufunktionen sind die Wellenfunktionen von freien Elektronen im äußeren Magnetfeld. Sie sind orthogonal und normiert:

$$\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\infty \rho d\rho \phi_{nm}^* \phi_{n'm'} = \delta_{nn'} \delta_{mm'} \quad . \quad (5.6)$$

Für  $\beta \rightarrow \infty$  verbleibt von der Entwicklung (5.4) lediglich

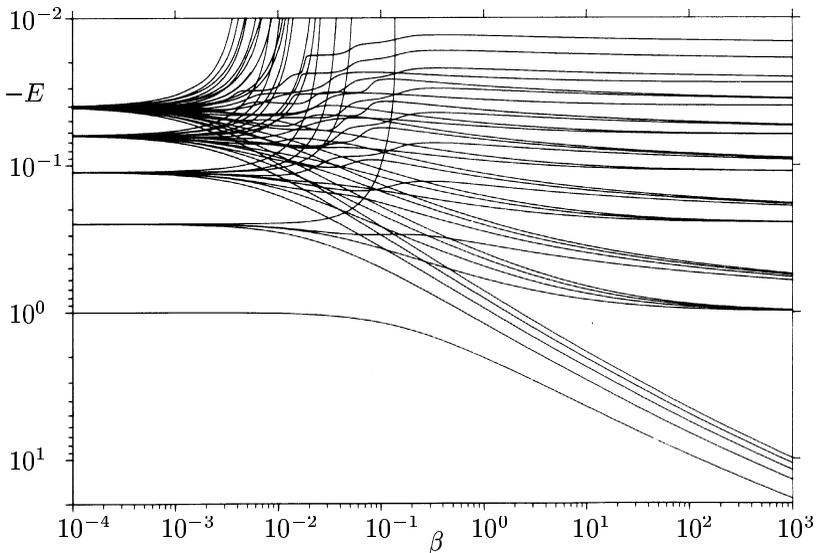
$$\psi(z, \rho, \phi) = P_{\nu m}(z) \cdot \phi_{0m}(\rho, \phi) \quad . \quad (5.7)$$

Auch bei Neutronensternmagnetfeldern stellt (5.7) eine brauchbare Näherung dar, da das erste angeregte Landauniveau bei einem Feld von z.B.  $2 \cdot 10^8$  T eine um

25 keV höhere Energie besitzt und damit Bindungszustände ausgeschlossen sind. Man spricht bei dem einfachen Produkt aus  $z$ -abhängiger Funktion und einer Landaufunktion des niedrigsten Landauniveaus in diesem Zusammenhang von der „adiabatischen Näherung“.

### 5.1.3 Energieniveaus

In Abbildung 5.3 sind die im feldfreien Fall niedrigsten fünf Energieniveaus in Abhängigkeit von Magnetfeld aufgetragen. Am linken Rand des Diagramms ist zu erkennen, wie sich die im Grenzfall  $\beta \rightarrow 0$  energetisch entarteten Niveaus bei steigendem Magnetfeld zunehmend aufspalten. Zunächst dominiert im Hamiltonoperator 5.2 der paramagnetische Term. Zustände unterschiedlicher Magnetquantenzahlen erhalten innerhalb einer  $n$ -Mannigfaltigkeit unterschiedliche Energie (Zeeman-Effekt). Der zunehmende Einfluß des diamagnetischen Terms führt



**Abb. 5.3:** Energieniveaus der Wasserstoffzustände mit den Hauptquantenzahlen  $n = 1, \dots, 5$  in Abhängigkeit vom Magnetfeld (Entnommen aus [Ruder et al. 1994]).

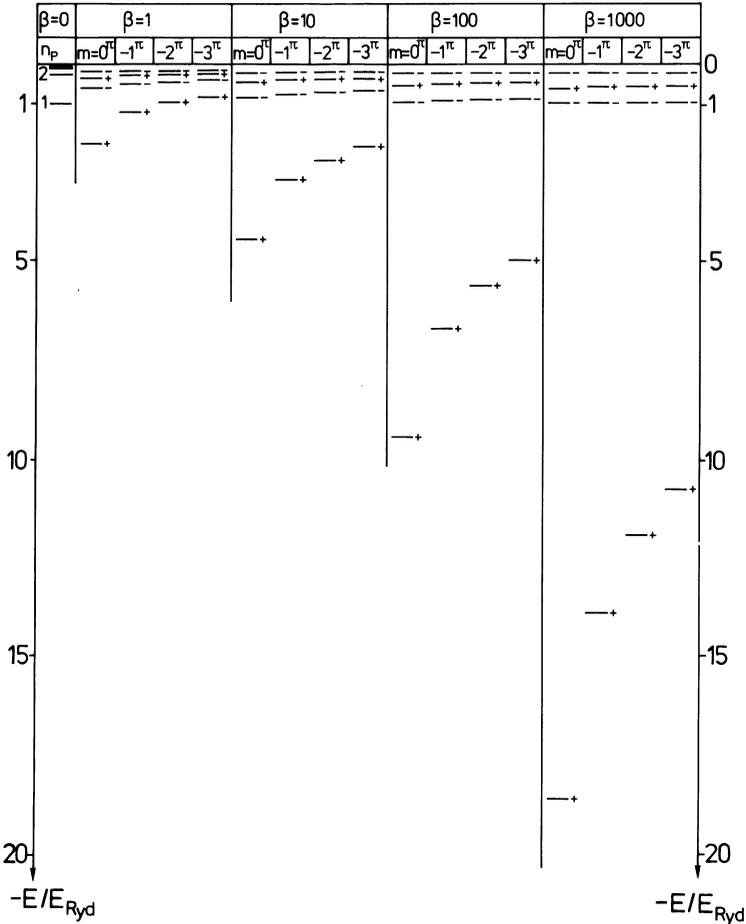


Abb. 5.4: Termschema des Wasserstoffs für 5 verschiedene Magnetfeldstärken (Entnommen aus [Ruder et al. 1994]).

zu einer Durchmischung von Zuständen unterschiedlicher Drehimpulsquantenzahl. Oberhalb von etwa  $\beta = 10^{-3}$  beginnen Zustände mit positiver Magnetquanten-

zahl auf höhere Landauniveaus gehoben zu werden und damit stark an Energie zuzunehmen. Ab etwa  $\beta = 10$  konvergieren die Niveaus mit  $\nu > 0$ , ähnlich zum feldfreien Fall wo  $E \sim 1/n^2$ , gegen eine Rydbergserie mit  $E \sim 1/\nu^2$ . Die Energie der Zustände mit  $\nu = 0$  dagegen werden mit zunehmendem Feld weiter abgesenkt und divergieren logarithmisch im Grenzfall  $\beta \rightarrow \infty$ . Diese Zustände nennt man „Tightly Bound States“.

Noch deutlicher wird die Gruppierung in Rydbergserien und das Absenken der tightly bound States in Abbildung 5.4. Die  $z$ -Parität der Zustände, welche aus der  $\nu$ -Quantenzahl über  $\pi_z = (-1)^\nu$  hervorgeht, ist an den Niveaus durch ein + bzw. – gekennzeichnet.

Für Ein-Elektron-Atome höherer Kernladungszahl gilt qualitativ das gleiche Termschema. Quantitativ ergeben sich die Energieniveaus aus den Wasserstoffniveaus mittels des Skalierungsgesetzes

$$E(Z, B) = Z^2 \cdot E(Z = 1, B/Z^2) \quad . \quad (5.8)$$

## 5.2 Die Hartree-Fock-Gleichungen in adiabatischer Näherung

Im Folgenden wird das Hartree-Fock-Verfahren als Lösungsverfahren für Mehr-elektronenatome in extrem starken Magnetfeldern vorgestellt.

### 5.2.1 Grundlagen

Da in Neutronensternmagnetfeldern die Zylindersymmetrie des Magnetfelds dominiert, liegt es auf der Hand, den Hamiltonoperator für ein N-Elektronensystem in Zylinderkoordinaten anzusetzen:

$$H = \sum_{i=1}^N -\frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)_i - i\beta \frac{\partial}{\partial \phi_i} + \frac{1}{2} \beta^2 \rho_i^2 - \beta - \frac{1}{\sqrt{\rho_i^2 + z_i^2}} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j \\ j \neq i}} \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad (5.9)$$

Auch hier wird davon ausgegangen, daß die Spins aller Elektronen antiparallel zum Magnetfeld ausgerichtet sind.

Bei Vernachlässigung des letzten Term, der die Coulombwechselwirkung zwischen den Elektronen beschreibt, könnte man den Hamiltonoperator als Summe von Einteilchenoperatoren auffassen und mittels eines Produktansatzes für die Gesamtwellenfunktion  $\Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \psi_1(\vec{r}_1) \cdot \dots \cdot \psi_N(\vec{r}_N)$  erhält man  $N$  unabhängige Einteilchen-Schrödingergleichungen

$$h_i \psi_i(\vec{r}_i) = \epsilon_i \psi_i(\vec{r}_i) \quad (5.10)$$

und die Gesamtenergie des Systems ergibt sich einfach aus der Summe der Einteilchenenergie  $\epsilon_i$ . Da eine physikalisch sinnvolle Gesamtwellenfunktion eines Fermionensystems antisymmetrisch unter Teilchenvertauschung sein soll, besteht eine erste Verbesserung dieses sehr einfachen Modells im Ansatz der Gesamtwellenfunktion in Form einer Slaterdeterminante aus Einteilchenwellenfunktionen  $\psi_i$ :

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_1(\vec{r}_1) & \dots & \psi_1(\vec{r}_N) \\ \vdots & & \vdots \\ \psi_N(\vec{r}_1) & \dots & \psi_N(\vec{r}_N) \end{vmatrix} . \quad (5.11)$$

Damit ist dem Pauli-Prinzip Rechnung getragen, welches ausschließt, daß sich zwei Elektronen im gleichen Zustand befinden. In extrem starken Magnetfeldern werden analog zu 5.7 in adiabatischer Näherung die Einteilchenwellenfunktionen als Produkte einer  $z$ -abhängigen Funktion und einer Landauf Funktion angesetzt:

$$\psi_i(z, \rho, \phi) = P_{\nu_i m_i}(z) \cdot \phi_{0 m_i}(\rho, \phi) \cdot \chi(s) . \quad (5.12)$$

Im Folgenden ist die Rechnung auf das niedrigste Landauniveau beschränkt und für die Magnetquantenzahlen gilt  $m \leq 0$ . Die Landauf Funktion für  $n = 0$  lautet:

$$\phi_{0 m}(\rho, \phi) = \frac{1}{a_L \sqrt{\pi |m|}} e^{i|m|\phi} \left( \frac{\rho}{a_L} \right)^m e^{-\frac{\rho^2}{2a_L^2}} L_{-m}^m \left( \frac{\rho^2}{a_L^2} \right) . \quad (5.13)$$

Da die Coulombwechselwirkung der Elektronen untereinander eine nichtvernachlässigbare Störung darstellt, ist eine Separation in Einteilchengleichungen wie in (5.10) nicht möglich. Eine weitverbreitete Näherungsmethode zur Berechnung von Wellenfunktionen und Energien von Mehrelektronensystemen ist das Hartree-Fock-Verfahren. Beim Hartree-Fock-Verfahren wird das einfache Einteilchenbild beibehalten und die Elektron-Elektron-Wechselwirkung durch effektive Potentiale berücksichtigt. Die Energie wird als Funktional der Gesamtwellenfunktion  $\Psi$  aufgefasst. Bei einer Variation der Gesamtwellenfunktion unter der Nebenbedingung

orthonormierter Einteilchenwellenfunktionen

$$\delta \left[ \langle \Psi, H \Psi \rangle - \sum_{i=1}^N \epsilon_i \langle \psi_i | \psi_i \rangle \right] = 0 \quad (5.14)$$

liefert das Minimum des Energiefunktionals die „beste“ Slaterdeterminante im Sinne des Ritzschen Variationsverfahrens. Die Lagrangeschen Parameter  $\epsilon_i$  sind nach Koopmans Theorem die Einteilchenenergien. Die Summe aller Einteilchenenergien ist jedoch nicht die Gesamtenergie des Atoms, da in jedem  $\epsilon_i$  die Wechselwirkung mit allen anderen Elektronen enthalten ist und damit bei einer einfachen Summation doppelt gezählt werden würde.

Bevor die Hartree-Fock-Gleichungen aus (5.14) abgeleitet werden, ist es günstig, den Hamiltonoperator (5.9) in eine Summe von Einteilchenoperatoren und eine Summe von Mehrteilchenoperatoren aufzuteilen:

$$H = \sum_{i=1}^N h_i + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j \\ j \neq i}} g_{ij} \quad (5.15)$$

mit

$$h_i = h_i(\rho, \phi) + h_i(s) + h_i(z, \rho, \phi) \quad , \quad (5.16)$$

$$h_i(\rho, \phi) = -\frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} - i\beta \frac{\partial}{\partial \phi_i} \right) \quad , \quad (5.17)$$

$$h_i(s) = -\beta \quad , \quad (5.18)$$

$$h_i(z, \rho, \phi) = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{Z}{\sqrt{\rho_i^2 + z_i^2}} \quad , \quad (5.19)$$

$$g_{ij} = \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad . \quad (5.20)$$

Die Gesamtenergie lautet mit dieser Aufteilung

$$\begin{aligned}
 \langle \Psi, H\Psi \rangle &= \sum_{i=1}^N \int \psi_i^* h_i \psi_i d\tau \\
 &+ \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j \\ j \neq i}} \iint \psi_i^*(\vec{r}_1) \psi_j^*(\vec{r}_2) g_{12} \psi_i(\vec{r}_1) \psi_j(\vec{r}_2) d\tau_1 d\tau_2 \\
 &- \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j \\ j \neq i}} \iint \psi_i^*(\vec{r}_1) \psi_j^*(\vec{r}_2) g_{12} \psi_j(\vec{r}_1) \psi_i(\vec{r}_2) d\tau_1 d\tau_2 \quad (5.21)
 \end{aligned}$$

In der Integration über  $\tau$  ist die Integration über Orts- und Spinraum enthalten. Das erste Integral enthält die kinetische Energie, das Coulombpotential zwischen Kern und Elektron und die Wechselwirkung zwischen Ladung und Spin des Elektrons und dem Magnetfeld. Das zweite Integral repräsentiert die Coulomb-Wechselwirkung zwischen den Elektronen und das dritte Integral die Austauschwechselwirkung der Elektronen aufgrund des Pauliprinzips.

## 5.2.2 Die Einteilchenintegrale

Das erste Integral lautet unter der Berücksichtigung der Orthonomiertheit der Wellenfunktionen ausgeschrieben:

$$\begin{aligned}
 \int \psi_i^* h_i \psi_i d\tau &= \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\infty} \rho d\rho \phi_i^*(\rho, \phi) h_i(\rho, \phi) \phi_i(\rho, \phi) - \beta \\
 &+ \int_0^{\infty} dz \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\infty} \rho d\rho P_i^*(z) \phi_i^*(\rho, \phi) h_i(z, \rho, \phi) P_i(z) \phi_i(\rho, \phi) \quad . \quad (5.22)
 \end{aligned}$$

Die Indizes an  $P_i$  und  $\phi_i$  repräsentieren die Quantenzahlen des  $i$ ten Elektrons. Die ersten beiden Terme sind identisch mit der Energie eines freien Elektrons im niedrigsten Landauniveau:

$$E = \beta \left( \frac{1}{2} + s \right) \quad . \quad (5.23)$$

Da wie oben erläutert für alle Elektronen  $s = -1/2$  ist, verbleibt von (5.22) nur noch:

$$\begin{aligned}
 \int \psi_i^* h_i \psi_i d\tau &= \int_{-\infty}^{\infty} dz \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\infty} \rho d\rho P_i^*(z) \psi_i^*(\rho, \phi) h_i(z, \rho, \phi) P_i(z) \phi_i(\rho, \phi) \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} dz \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\infty} \rho d\rho P_i^*(z) \psi_i^*(\rho, \phi) \left( -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{Z}{\sqrt{\rho_i^2 + z_i^2}} \right) P_i(z) \phi_i(\rho, \phi) \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} dz P_i(z) \left[ -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_i^{eff}(z) \right] P_i(z) \quad (5.24)
 \end{aligned}$$

mit dem effektiven Potential

$$V_i^{eff}(z) = - \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\infty} \rho d\rho \phi_i^*(\rho, \phi) \frac{Z}{\sqrt{\rho_i^2 + z_i^2}} \phi_i(\rho, \phi) \quad (5.25)$$

Die Umformungen von (5.25) in [Pröschel 1982] für die Magnetquantenzahlen  $m = 0$  und  $m = -1$  lassen sich leicht auf beliebige  $m$  erweitern und man erhält die numerisch leichter berechenbare Form

$$V_i^{eff}(z) = -\frac{2Z}{(-m)!} \sqrt{\beta} \int_0^{\infty} dy \exp\left(-\sqrt{\beta}zy - \frac{y^2}{4}\right) L_{-m}^0\left(\frac{y^2}{4}\right) \quad (5.26)$$

$L_i^j$  sind die assoziierten Laguerrepolynome.

### 5.2.3 Die Zweiteilchenintegrale

Die Coulombwechselwirkung zwischen den Elektronen wird in (5.21) durch das erste Doppelintegral repräsentiert. Dieses Integral läßt sich unter der Annahme identischer Spinfunktionen aller Elektronen umformen in:

$$\begin{aligned}
 \iint \psi_i^*(\vec{r}_1) \psi_j^*(\vec{r}_2) g_{12} \psi_i(\vec{r}_1) \psi_j(\vec{r}_2) d\tau_1 d\tau_2 &= \\
 \int_{-\infty}^{\infty} dz_1 \int_{-\infty}^{\infty} dz_2 P_i^2(z_1) P_j^2(z_2) V_{ij}^{Di}(z_1, z_2) &\quad (5.27)
 \end{aligned}$$

mit

$$V_{ij}^{Di}(z_1, z_2) = \int_0^{2\pi} d\phi_1 \int_0^{2\pi} d\phi_2 \int_0^{\infty} \rho_1 d\rho_1 \int_0^{\infty} \rho_2 d\rho_2 \phi_i^*(\rho_1, \phi_1) \phi_i(\rho_1, \phi_1) \\ \times \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \phi_j^*(\rho_2, \phi_2) \phi_j(\rho_2, \phi_2) \quad . \quad (5.28)$$

Auch diesen Ausdruck kann man analog zu den Fällen für  $m = 0$  und  $m = -1$ , wie in [Pröschel 1982] gezeigt, in das numerisch effizienter berechenbare Integral

$$V_{ij}^{Di}(z_1, z_2) = \frac{2\sqrt{\beta}}{(-m_i)!(-m_j)!} \\ \times \int_0^{\infty} dy \exp(-\sqrt{\beta}|z_i - z_j|y - \frac{y^2}{2}) L_{-m_i}(\frac{y^2}{4}) L_{-m_j}(\frac{y^2}{4}) \quad . \quad (5.29)$$

umformen.  $L_i = L_i^0$  sind die gewöhnlichen Laguerrepolynome.

Das zweite Doppelintegral repräsentiert die Elektronen-Austausch-Wechselwirkung und läßt sich analog zu (5.27) reduzieren auf:

$$\iint \psi_i^*(\vec{r}_1) \psi_j^*(\vec{r}_2) g_{12} \psi_j(\vec{r}_1) \psi_i(\vec{r}_2) d\tau_1 d\tau_2 = \\ \int_{-\infty}^{\infty} dz_1 \int_{-\infty}^{\infty} dz_2 P_i(z_1) P_j(z_2) P_i(z_2) P_j(z_1) V_{ij}^{Ex}(z_1, z_2) \quad (5.30)$$

mit

$$V_{ij}^{Ex}(z_1, z_2) = \int_0^{2\pi} d\phi_1 \int_0^{2\pi} d\phi_2 \int_0^{\infty} \rho_1 d\rho_1 \int_0^{\infty} \rho_2 d\rho_2 \phi_i^*(\rho_1, \phi_1) \phi_j(\rho_2, \phi_2) \\ \times \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \phi_i^*(\rho_2, \phi_2) \phi_j(\rho_1, \phi_1) \quad . \quad (5.31)$$

Analog zur direkten Elektron-Elektron-Wechselwirkung kann man auch diesen

Ausdruck vereinfachen:

$$V_{ij}^{Ex}(z_1, z_2) = \frac{2\sqrt{\beta}}{(-m_i)!(-m_j)!} \times \int_0^\infty dy \exp(-\sqrt{\beta}|z_i - z_j|y - \frac{y^2}{2}) \left(\frac{y^2}{4}\right)^{m_i - m_j} \left[ L_{-m_i}^{m_i - m_j} \left(\frac{y^2}{4}\right) \right]^2 . \quad (5.32)$$

Damit verbleiben in (5.21) nur noch Integrale, in denen über die  $z$ -Achse integriert wird:

$$\begin{aligned} \langle \Psi, H\Psi \rangle &= \sum_{i=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} P_i(z) \left[ -\frac{d^2}{dz^2} + V_i^{eff}(z) \right] P_i(z) \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j \\ j \neq i}}^N \left( \int_{-\infty}^{\infty} dz \int_{-\infty}^{\infty} dz' P_i(z) P_j(z') V_{ij}^{Di}(z, z') P_i(z) P_j(z') \right. \\ &\left. - \int_{-\infty}^{\infty} dz \int_{-\infty}^{\infty} dz' P_i(z) P_j(z') V_{ij}^{Ex}(z, z') P_j(z) P_i(z') \right) . \quad (5.33) \end{aligned}$$

## 5.2.4 Durchführung der Variation

Im Folgenden wird die Variation (5.14) mit den in den letzten Abschnitten bereitgestellten Ausdrücken durchgeführt.

Aufgrund der Orthonormalität der Landaufunktionen und Spinfunktionen erhält man

$$\sum_{i=1}^N \epsilon_i \langle \psi_i | \psi_i \rangle = \sum_{i=1}^N \epsilon_i \int_{-\infty}^{\infty} P_i^2(z) . \quad (5.34)$$

Mit (5.33) und (5.34) lautet das Variationsprinzip (5.14)

$$\begin{aligned}
 0 &= \sum_{i=1}^N \delta \int_{-\infty}^{\infty} dz P_i(z) \left[ -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_i^{eff}(z) \right] P_i(z) \\
 &+ \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j \\ j \neq i}}^N \left( \delta \int_{-\infty}^{\infty} dz \int_{-\infty}^{\infty} dz' P_i(z) P_j(z') V_{ij}^{Di}(z, z') P_i(z) P_j(z') \right. \\
 &\quad \left. - \delta \int_{-\infty}^{\infty} dz \int_{-\infty}^{\infty} dz' P_i(z) P_j(z') V_{ij}^{Ex}(z, z') P_j(z) P_i(z') \right) \\
 &+ \delta \sum_{i=1}^N \epsilon_i \int_{-\infty}^{\infty} P_i^2(z) \quad . \quad (5.35)
 \end{aligned}$$

Die Variation der Wellenfunktion  $P_i(z)$  ergibt im einzelnen:

$$\begin{aligned}
 \delta \int_{-\infty}^{\infty} dz P_i(z) \left[ -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_i^{eff}(z) \right] P_i(z) \\
 = 2 \int_{-\infty}^{\infty} dz \delta P_i(z) \left[ -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_i^{eff}(z) \right] P_i(z) \quad , \quad (5.36)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \delta \int_{-\infty}^{\infty} dz \int_{-\infty}^{\infty} dz' P_i(z) P_j(z') V_{ij}^{Di}(z, z') P_i(z) P_j(z') \\
 = 2 \int_{-\infty}^{\infty} dz \delta P_i(z) P_i(z) \int_{-\infty}^{\infty} dz' P_j(z') P_j(z') V_{ij}^{Di}(z, z') \quad , \quad (5.37)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \delta \int_{-\infty}^{\infty} dz \int_{-\infty}^{\infty} dz' P_i(z) P_j(z') V_{ij}^{Ex}(z, z') P_i(z') P_j(z) \\
 = 2 \int_{-\infty}^{\infty} dz \delta P_i(z) P_j(z) \int_{-\infty}^{\infty} dz' P_j(z') P_i(z') V_{ij}^{Ex}(z, z') \quad , \quad (5.38)
 \end{aligned}$$

$$\delta \int_{-\infty}^{\infty} P_i^2(z) = 2 \int_{-\infty}^{\infty} dz \delta P_i(z) P_i(z) \quad . \quad (5.39)$$

Einsetzen in (5.35) und Ausklammern von  $\delta P_i(z)$  ergibt

$$\begin{aligned} 0 &= \int_{-\infty}^{\infty} dz \delta P_i(z) \left( \left[ -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_i^{eff}(z) \right] P_i(z) \right. \\ &+ \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N P_i(z) \int_{-\infty}^{\infty} dz' P_j(z') P_j(z') V_{ij}^{Di}(z, z') \\ &\left. - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N P_j(z) \int_{-\infty}^{\infty} dz' P_j(z') P_i(z') V_{ij}^{Ex}(z, z') + \epsilon_i P_i(z) \right) \quad . \quad (5.40) \end{aligned}$$

Gleichung (5.40) ist erfüllt, wenn der Ausdruck in den runden Klammern verschwindet:

$$\begin{aligned} &\left( -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_i^{eff}(z) + \epsilon_i \right) P_i(z) \\ &+ \left( \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \int_{-\infty}^{\infty} dz' P_j(z') P_j(z') V_{ij}^{Di}(z, z') \right) P_i(z) \\ &- \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N P_j(z) \int_{-\infty}^{\infty} dz' P_j(z') P_i(z') V_{ij}^{Ex}(z, z') = 0 \quad . \quad (5.41) \end{aligned}$$

Die Gleichungen (5.41) sind die Hartree-Fock-Gleichungen in adiabatischer Näherung. Sie stellen ein System gekoppelter Integro-Differentialgleichungen dar. Über die Elektron-Elektron-Wechselwirkungsintegrale ist die Lösung des  $i$ ten Elektrons mit allen anderen Elektronen verknüpft.

Die Lösung des Gleichungssystems (5.41) erfolgt in dieser Arbeit iterativ. Dabei muß zu gegebenen Wellenfunktionen  $P_i$  in jedem Schritt der Lagrange-Parameter  $\epsilon_i$  bestimmt werden. Durch linksseitige Multiplikation von (5.41) mit

den normierten Wellenfunktionen  $P_i(z)$  und Integration über die  $z$ -Achse kann man nach  $\epsilon_i$  auflösen und erhält:

$$\begin{aligned} \epsilon_i = & \int_{-\infty}^{\infty} P_i(z) \left[ -\frac{d^2}{dz^2} + V_i^{eff}(z) \right] P_i(z) \\ & + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \left( \int_{-\infty}^{\infty} dz \int_{-\infty}^{\infty} dz' P_i(z) P_j(z') V_{ij}^{Di}(z, z') P_i(z) P_j(z') \right. \\ & \left. - \int_{-\infty}^{\infty} dz \int_{-\infty}^{\infty} dz' P_i(z) P_j(z') V_{ij}^{Ex}(z, z') P_j(z) P_i(z') \right) . \end{aligned} \quad (5.42)$$

### 5.2.5 Ablauf des Iterationsverfahrens

Die Lösung des Gleichungssystems erfolgt iterativ in folgenden Schritten:

1. Man beschafft sich zunächst Näherungslösungen  $P_i$  des  $z$ -Anteils der Wellenfunktionen (siehe Kapitel 5.3.3).
2. Die Wechselwirkungsintegrale werden berechnet.
3. Die Lagrangeparameter  $\epsilon_i$  werden gemäß (5.42) berechnet.
4. Gleichung (5.41) wird für jedes Elektron gelöst, d.h. neue  $P_i$  ausgerechnet. Die Lösung erfolgt in dieser Arbeit mit der Methode der Finiten Elemente (siehe Kapitel 5.3) welche auf das einfache lineare Gleichungssystem (5.55) führt.
5. Die Gesamtenergie wird gemäß (5.33) berechnet.
6. Mit den neuen  $P_i$  beginnt man von neuem mit Schritt 2, bis die Gesamtenergie aus Schritt 5 innerhalb einer vorgegebenen Genauigkeit konvergiert.

Damit erhält man eine selbstkonsistente Lösung der Hartree-Fock-Gleichungen.

### 5.2.6 Grenzen der adiabatischen Näherung

Aus den Skalierungsbeziehungen des Coulombproblems geht hervor, daß die adiabatische Näherung gut erfüllt ist, wenn zwischen Magnetfeld und dem in Kapitel 5.1.2 erläuterten Referenzfeld  $B_0 = 4.7 \cdot 10^5$  T die Bedingung

$$B \gg Z^2 \cdot B_0 \quad (5.43)$$

erfüllt ist. Für höhere Elemente in Neutronensternmagnetfeldern ist (5.43) für die äußeren Elektronen meist noch erfüllt, da diese durch die partielle Abschirmung der inneren Elektronen einer geringeren effektiven Kernladung ausgesetzt sind. Die innersten Elektronen bewegen sich aber unter Einfluß nahezu der kompletten Kernladung. Z.B. für Eisen mit der Kernladung  $Z = 26$  ist  $Z^2 \cdot B_0 = 3 \cdot 10^8$  T. Deshalb sind die mit der adiabatischen Näherung berechneten Energien für höhere Elemente in niedrigen Neutronensternmagnetfeldern mit Vorsicht zu genießen.

Für die Spektroskopie sind allerdings nicht die absoluten Energien interessant, sondern die Energiedifferenzen der Übergänge. An den Übergängen sind vor allem die äußeren Elektronen ( $\epsilon \geq -3\text{keV}$ ) beteiligt. Die ungenauen Anteile zur Gesamtenergie durch die inneren Elektronen entfallen in der Differenz näherungsweise. [Rajagopal et al. 1997] haben darauf hingewiesen, daß die Energien der äußeren Elektronen des Eisens mit der adiabatischen Näherung bereits bei  $3 \cdot 10^8$  T auf etwa 1% genau berechnet werden können.

Bei einem Magnetfeld von  $B_{krit} = 4.414 \cdot 10^9$  T übersteigt die Zyklotronenergie die Ruheenergie der Elektronen. Dennoch ist bei Feldern dieser Größenordnung eine nichtrelativistische Behandlung im Rahmen der adiabatischen Näherung gerechtfertigt. Zum einen ist die Bewegung entlang der  $z$ -Achse für Elektronen im niedersten Landauniveau nichtrelativistisch, solange die Bindungsenergie wesentlich kleiner als die Ruheenergie der Elektronen ist. Zum anderen hat die Landaufunktion bei einer relativistischen Behandlung die gleiche Form [Lai 2001].

## 5.3 Lösung der Hartree-Fock-Gleichungen mit der Methode der Finiten Elemente

Im Folgenden werden die Hartree-Fock-Gleichungen (5.41) mit der in Kapitel 2 beschriebenen Methode der Finiten Elemente gelöst und weitere Details des im Rahmen dieser Arbeit erstellten Programms zur Lösung des N-Elektronenproblems in extrem starken Magnetfeldern beschrieben.

### 5.3.1 Formulierung als äquivalentes Variationsproblem

Bei der Behandlung der Hartree-Fock-Gleichungen mit der Methode der Finiten Elemente muß, wie in Kapitel 2.3 beschrieben, zunächst ein Funktional  $\Pi$  gefunden werden, welches mittels des Variationsprinzips  $\delta\Pi = 0$  die gesuchte Lösung liefert. Die Hartree-Fock-Gleichungen in adiabatischer Näherung (5.41) besitzen bereits die Form der Gleichung (2.60)

$$\hat{A}P_i(z) + b(z) = 0 \quad (5.44)$$

mit

$$\hat{A} = \frac{d^2}{dz^2} - V_i^{eff}(z) - \epsilon_i - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dz' P_j^2(z') V_{ij}^{Di}(z, z') \quad (5.45)$$

und

$$b(z) = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N P_j(z) \int_{-\infty}^{\infty} dz' P_j(z') P_i(z') V_{ij}^{Ex}(z, z') \quad (5.46)$$

und das Funktional gemäß (2.61) lautet

$$\Pi = \int_{-\infty}^{\infty} \left( P_i(z) \hat{A}P_i(z) + 2P_i(z)b(z) \right) dz \quad (5.47)$$

Nachdem sich in Kapitel 2 die B-Spline-Interpolation der Hermite- und Lagrange-Interpolation als überlegen erwiesen hat, werden im Folgenden nur Entwicklungen nach B-Splines betrachtet. Die Entwicklung der gesuchten Lösungsfunktionen  $P_i(z)$  nach B-Splines lautet:

$$P_i(z) = \sum_k \alpha_k^{(i)} B_k(z) \quad (5.48)$$

Nach der Aufteilung des Raums in finite Elemente wird aus dem Integral in (5.47) eine Summe von Integralen über die lokalen Koordinaten der finiten Elemente.

Zusammen mit der Entwicklung (5.48) erhält man:

$$\Pi = \sum_j \left[ \int_0^{x_{max}^j} dx^{(j)} \sum_{kl} \alpha_k^{(i)} \alpha_l^{(i)} B_k(x^{(j)}) \hat{A} B_l(x^{(j)}) + 2 \int_0^{x_{max}^j} dx^{(j)} \sum_k \alpha_k^{(i)} B_k(x^{(j)}) b(x^{(j)}) \right] \quad (5.49)$$

$$= \sum_j \left( \sum_{k,l} \alpha_k^{(i)} \alpha_l^{(i)} A_{kl}^{(j)} + 2 \sum_k \alpha_k^{(i)} b_k^{(j)} \right) \quad (5.50)$$

$$(5.51)$$

mit

$$A_{kl}^{(j)} = \int_0^{x_{max}^j} dx^{(j)} B_k(x^{(j)}) \hat{A} B_l(x^{(j)}) \quad (5.52)$$

und

$$b_k^{(j)} = \int_0^{x_{max}^j} dx^{(j)} B_k(x^{(j)}) b(x^{(j)}) \quad (5.53)$$

Der Index  $i$  an den B-Spline-Entwicklungskoeffizienten deutet an, daß es sich um die Entwicklung der Wellenfunktion des  $i$ ten Elektrons handelt und der Index  $j$  steht für das  $j$ te finite Element. Die lokale Koordinate des  $j$ ten finiten Elements läuft von 0 bis  $x_{max}^{(j)}$ . Anwendung des Variationsprinzips

$$\delta\Pi = \sum_m \frac{\partial\Pi}{\partial\alpha_m^{(i)}} \delta\alpha_m^{(i)} = 0 \quad (5.54)$$

führt schließlich auf

$$\sum_j \left( \sum_l \alpha_l^{(i)} A_{ml}^{(j)} + b_m^{(j)} \right) = 0$$

$$\iff \sum_{jl} A_{ml}^{(j)} \alpha_l^{(i)} = - \sum_j b_m^{(j)} \quad (5.55)$$

Die Lösung des linearen Gleichungssystems (5.55) liefert die gesuchten Koeffizienten  $\alpha_k^{(i)}$  der Entwicklung der Wellenfunktion nach B-Splines.

### 5.3.2 Ausnutzung der Paritätseigenschaften

Auch in Anwesenheit des Magnetfelds ist die Parität eine Erhaltungsgröße (siehe Kapitel 5.1). Deshalb ist es möglich, bei der Berechnung der  $P_i$  nur die positive  $z$ -Achse zu berücksichtigen. Die Wellenfunktion auf der negativen  $z$ -Achse ergibt sich aus

$$P_i(-z) = (-1)^\nu P_i(z) \quad . \quad (5.56)$$

Die Integrale, welche im Funktional (5.47) zu berechnen sind, lassen sich mit der Paritätseigenschaft (5.56) auf Integrale über die positive  $z$ -Achse zurückführen:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dz P_i(z) \frac{d^2}{dz^2} P_i(z) &= \int_0^{\infty} dz P_i(z) \frac{d^2}{dz^2} P_i(z) + \int_0^{\infty} dz P_i(-z) \frac{d^2}{dz^2} P_i(-z) \\ &= \int_0^{\infty} dz P_i(z) \frac{d^2}{dz^2} P_i(z) + \int_0^{\infty} dz (-1)^{2\nu_i} P_i(z) \frac{d^2}{dz^2} P_i(z) \\ &= 2 \int_0^{\infty} dz P_i(z) \frac{d^2}{dz^2} P_i(z) \quad . \end{aligned} \quad (5.57)$$

Aus (5.25) folgt unmittelbar, daß  $V_i^{eff}(z) = V_i^{eff}(-z)$ . Damit ergibt sich analog zu (5.57)

$$\int_{-\infty}^{\infty} dz P_i(z) V_i^{eff}(z) P_i(z) = 2 \int_0^{\infty} dz P_i^2(z) V_i^{eff}(z) \quad (5.58)$$

und

$$\int_{-\infty}^{\infty} dz P_i(z) \epsilon_i P_i(z) = 2 \int_0^{\infty} dz P_i^2(z) \epsilon_i \quad . \quad (5.59)$$

Da  $V_{ij}^{Di}(z, z') = V_{ij}^{Di}(|z - z'|)$  ergibt sich für den Term, der die Coulombwechselwirkung für das Elektron enthält:

$$\begin{aligned}
 & \int_{-\infty}^{\infty} dz P_i(z) \left( \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \int_{-\infty}^{\infty} dz' P_j(z') P_j(z') V_{ij}^{Di}(|z - z'|) \right) \\
 &= \int_0^{\infty} dz P_i^2(z) \left[ \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \left( \int_0^{\infty} dz' P_j^2(z') V_{ij}^{Di}(|z - z'|) \right. \right. \\
 & \qquad \qquad \qquad \left. \left. + \int_0^{\infty} dz' P_j^2(-z') V_{ij}^{Di}(|z + z'|) \right) \right] \\
 &+ \int_0^{\infty} dz P_i^2(-z) \left[ \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \left( \int_0^{\infty} dz' P_j^2(z') V_{ij}^{Di}(|-z - z'|) \right. \right. \\
 & \qquad \qquad \qquad \left. \left. + \int_0^{\infty} dz' P_j^2(-z') V_{ij}^{Di}(|-z + z'|) \right) \right] \\
 &= 2 \int_0^{\infty} dz P_i^2(z) \left[ \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \left( \int_0^{\infty} dz' P_j^2(z') (V_{ij}^{Di}(|z - z'|) + V_{ij}^{Di}(|z + z'|)) \right) \right]
 \end{aligned} \tag{5.60}$$

Für den die Elektronenaustauschwechselwirkung enthaltenden Term ergibt sich analog

$$\int_{-\infty}^{\infty} dz P_i(z) \left( \sum_{j \neq i} \int_{-\infty}^{\infty} dz' P_j(z') P_i(z') V_{ij}^{Ex}(|z - z'|) \right)$$

$$= 2 \int_0^{\infty} dz P_i(z) \left( \sum_{j \neq i} \int_0^{\infty} dz' P_i(z') P_j(z') (V_{ij}^{Ex}(|z - z'|) + (-1)^{\nu_i + \nu_j} V_{ij}^{Ex}(|z + z'|)) \right). \quad (5.61)$$

Dieser Term ist offensichtlich der einzige, in dem die Paritäten der Wellenfunktionen bei der Berechnung eine Rollen spielen.

Damit sind alle Integrale auf Integrale über die positive  $z$ -Achse zurückgeführt.

### 5.3.3 Wahl der Startwellenfunktionen

Die Wahl vernünftiger Startwellenfunktionen ist ausschlaggebend für die Konvergenz und die Konvergenzgeschwindigkeit gegen physikalisch sinnvolle, selbstkonsistente Lösungen. Wegen den in Kapitel 5.1 erläuterten Symmetrien ist es vernünftig, die Startwellenfunktionen in der Form

$$P_i(z) = p_{\nu_i}(z) \cdot \exp(a_{m_i \nu_i} |z|) \quad a_{m_i \nu_i} < 0 \quad (5.62)$$

mit dem Polynom

$$p_{\nu_i}(z) = \sum_{k=0}^{\nu_i} b_{m_i k} z^k \quad (5.63)$$

anzusetzen. Damit ist die korrekte Anzahl der  $\nu_i$  Knoten auf der  $z$ -Achse und der Abfall der Wellenfunktion für  $|z| \rightarrow \infty$  gegeben.

Die durch den Faktor  $\exp(a_{m_i \nu_i} |z|)$  gegebene Unstetigkeit bei  $z = 0$  läßt sich durch einen Ansatz der Form

$$P_i(z) = p_{\nu_i}(z) \cdot \exp(a_{m_i \nu_i} \cdot z^2) \quad (5.64)$$

vermeiden. Der Ansatz (5.64) konnte jedoch die Konvergenzgeschwindigkeit nicht verbessern und die Diskontinuität bei  $z = 0$  des Ansatzes (5.63) ist meist bereits nach dem ersten Iterationsschritt verschwunden.

Die Wahl der Parameter  $a_{m_i \nu_i}$  und  $b_{m_i k}$  hängen von der Elektronen-Konfiguration, der Kernladungszahl und dem Magnetfeld ab, müssen im Allgemeinen jedoch nicht sehr genau der Endlösung entsprechen. Bei grob falscher Wahl der Parameter erhält man meistens sinusförmige Wellen, welche wegen dem unendlich hohen Potentialwall durch den abgeschnittenen rechten Rand des Integrationsgebiets bei  $z_{max}$  stehenden Wellen entsprechen. Ein erster Hinweis für vernünftige Parameter liefern die Lösungen für das Wasserstoffproblem für  $B \rightarrow \infty$

Parameter	$\nu = 1$	$\nu = 2$	$\nu = 3$	$\nu = 4$
$a_{00}$	-4	-4	-4	-4
$a_{-1\nu}$	-1	-1	-0.8	-0.8
$b_{-10}$	0	0.2	0	2
$b_{-11}$	1	0	-10	0
$b_{-12}$	0	-2	0	-16
$b_{-13}$	0	0	3	0
$b_{-14}$	0	0	0	1

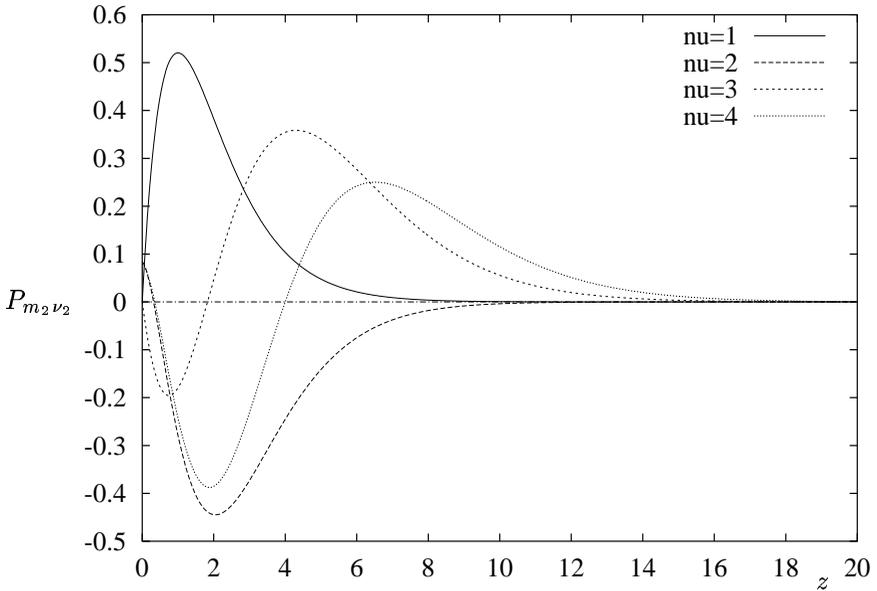
**Tab. 5.1:** Parameter möglicher Startwellenfunktionen zur Berechnung angeregter Heliumzustände für  $\beta_2 = 50\dots 500$ . Die Elektronen haben die Quantenzahlen  $m_1 = 0, \nu_1 = 0$  und  $m_2 = -1, \nu_2 = 1\dots 4$ . In diesen Parametern ist die Norm der Wellenfunktion noch nicht berücksichtigt.

[Louden 1959] oder Lösungen anderer Verfahren auf der Seite schwächerer Magnetfelder (ab  $4.7 \cdot 10^5$  T). Man kann dann das Magnetfeld langsam erhöhen und jeweils die Lösung des vorher berechneten kleineren Magnetfelds als Startwellenfunktion verwenden. Mit etwas Erfahrung ist das Abschätzen vernünftiger Parameter keine große Schwierigkeit.

In Tabelle 5.1 sind beispielhaft Parameter für angeregte Helium-Zustände aufgeführt, die für die skalierten Magnetfelder  $\beta_2 = 50\dots 500$  zur Konvergenz führen. Ein Elektron befindet sich jeweils in einem Zustand mit den Quantenzahlen  $m_1 = 0$  und  $\nu = 0$ , so daß lediglich der Parameter  $a_{00}$  festgelegt werden muß. Das 2. Elektron befindet sich in einem Zustand mit den Quantenzahlen  $m_2 = -1, \nu_2 = 1\dots 4$ . In Abbildung 5.5 sind die normierten Startwellenfunktionen des Elektrons mit  $\nu > 0$  mit den Parametern aus Tabelle 5.1 graphisch dargestellt.

Bei der Vorgabe von Startwellenfunktionen sind die Koeffizienten der Entwicklung nach Lagrange-Interpolationspolynomen gerade die Funktionswerte der Wellenfunktion an den Knotenpunkten. Bei Hermite-Interpolation erhält man die Koeffizienten aus den Funktionswerten und der ersten Ableitung der Funktion. Bei der B-Spline-Interpolation muß das Interpolationsproblem mit vollständigen Randbedingungen

$$\psi(r_j) = \sum_{i=1}^n \alpha_i B_i(r_j) \quad j = 1\dots m \quad (5.65)$$



**Abb. 5.5:** Normierte Startwellenfunktionen des Elektrons mit  $\nu > 0$  zur Berechnung angeregter Heliumzustände gemäß Tabelle 5.1.

und

$$\psi'(r_j) = \sum_{i=1}^n \alpha_i B_i'(r_j) \quad (5.66)$$

gelöst werden.  $\{r_1, \dots, r_m\}$  ist die Knotensequenz gemäß Kapitel 2.5.3. Die Gleichungen (5.65) und (5.66) führen auf inhomogene, quadratische lineare Gleichungssysteme, deren eindeutige Lösung die gesuchten Koeffizienten  $\alpha_i$  zur Darstellung der Anfangswellenfunktion in einer B-Spline-Basis liefern. Eine ausführlichere Darstellung findet sich in [Oevel 1996].

Die Randbedingung  $P(0) = 0$  bei Berechnung von Zuständen ungerader Parität läßt sich mit der B-Spline-Interpolation besonders einfach berücksichtigen. Dazu wird in der Entwicklung (5.65)  $B_1$  ignoriert. Alle weiteren B-Splines ver-

schwinden bei  $z = 0$  (siehe Kapitel 2.5.3).

### 5.3.4 Konvergenzverhalten

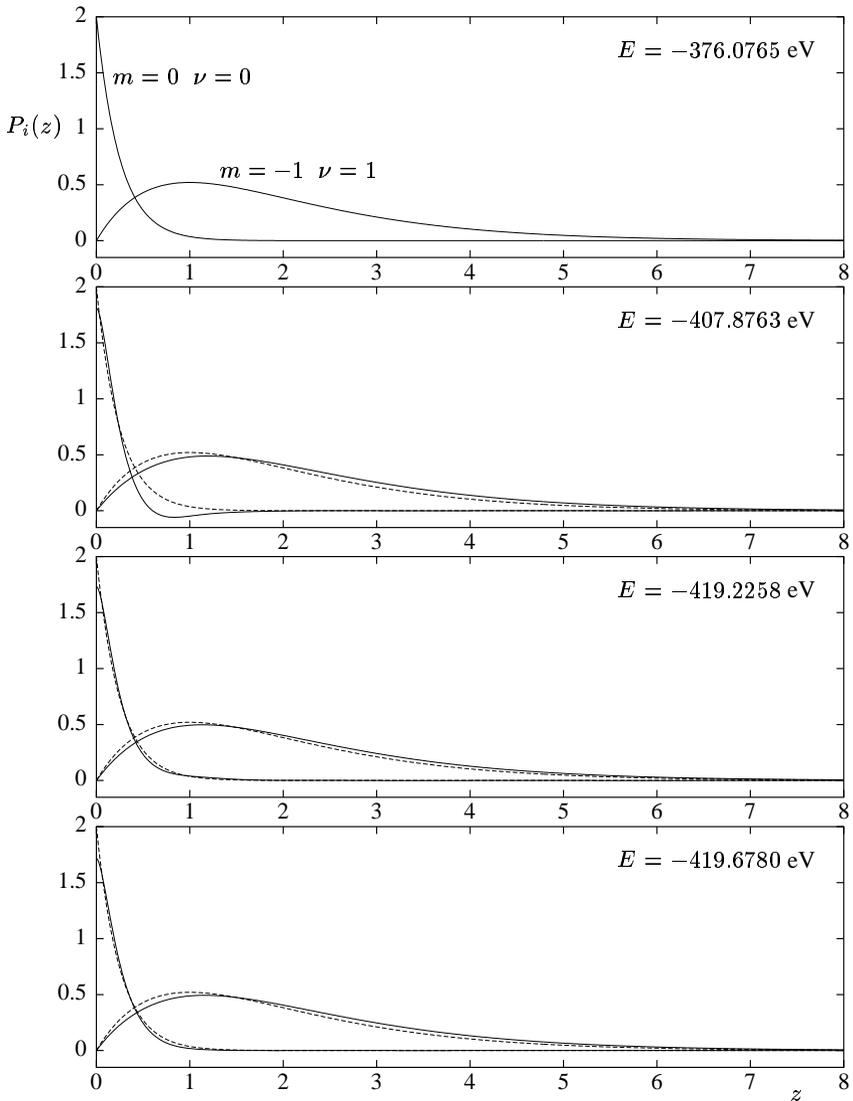
Um die Gesamtenergie mit einer relativen Genauigkeit von z.B.  $10^{-5}$  zu berechnen, sind im Allgemeinen 4-5 Iterationsschritte ausreichend. In Abbildung 5.6 ist die Entwicklung der Wellenfunktionen des ersten angeregten Helium-Zustands ( $m_1 = 0 \nu_1 = 0, m_2 = -1 \nu_2 = 1$ ) bei  $\beta_2 = 50$  während der ersten 3 Iterationsschritte abgebildet. Im Folgenden wird die Besetzung der Orbitale oftmals mit der abkürzenden Schreibweise ( $(-m_1) \nu_1 - \dots - (-m_N) \nu_N$ ) angegeben.

Im obersten Bild sind mit durchgezogener und in den unteren Bildern mit gestrichelter Linie Startwellenfunktionen gemäß Tabelle 5.1 dargestellt. Nach diesen 3 Iterationsschritten ändert sich der Energiewert noch minimal und konvergiert gegen  $-419.7031$  eV, die graphische Darstellung der Wellenfunktion ist dann allerdings nicht mehr von dem untersten Bild in Abbildung 5.6 zu unterscheiden.

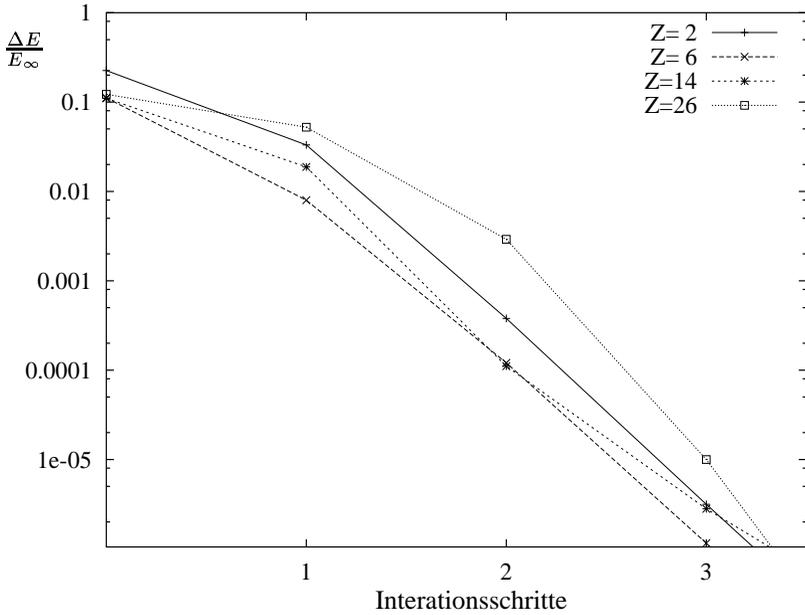
In Abbildung 5.7 ist der relative Fehler der Gesamtenergie in Abhängigkeit von der Anzahl der Iterationsschritte für die Berechnung der Grundzustandsenergien von Helium, Kohlenstoff, Silizium und Eisen aufgetragen. Der Schnittpunkt der Kurven mit der Ordinate ist der relative Fehler der Gesamtenergie der Startwellenfunktionen und damit von deren Wahl abhängig.

In Abbildung 5.8 ist die Abhängigkeit des relativen Fehlers von der Anzahl der finiten Elemente bei Interpolation mit B-Splines 6. Ordnung für die Grundzustände und angeregter Zustände von Helium und Kohlenstoff dargestellt. Die Unterschiede des Konvergenzverhaltens bezüglich der Anzahl der finiten Elemente ist nur gering von der Kernladungszahl abhängig.

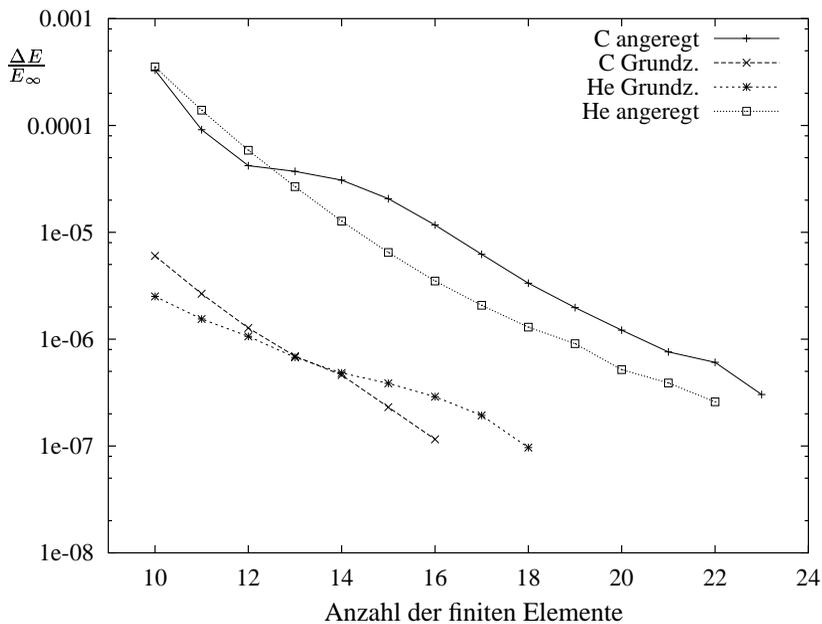
### 5.3 Lösung der Hartree-Fock-Gleichungen mit der Methode der Finiten Elemente



**Abb. 5.6:** Entwicklung der Wellenfunktionen des Heliumzustands (00-11) während der ersten 3 Iterationsschritten. Die Startwellenfunktion (durchgezogene Linie im obersten Bild, sonst gestrichelte Linie) wurde gemäß Tabelle 5.1 gewählt.



**Abb. 5.7:** Der relative Fehler der Gesamtenergie in Abhängigkeit von der Anzahl der Iterationsschritte für die Berechnung der Grundzustandsenergien von Helium, Kohlenstoff, Silizium und Eisen.



**Abb. 5.8:** Der relative Fehler der Gesamtenergie in Abhängigkeit von der Anzahl der finiten Elemente bei Interpolation mit B-Splines 6. Ordnung für die Berechnung der Grundzustandsenergien von Helium und Kohlenstoff und der angeregten Zustände von Helium (00-11) und Kohlenstoff (01-10-20-30-40-50).

## 5.4 Ergebnisse

Mit dem in Kapitel 5.3 beschriebenen Lösungsverfahren wurden Grundzustände und angeregte Zustände der Elemente von Helium bis Eisen berechnet. Die Gestalt der Wellenfunktionen zu exemplarischen Konfigurationen und Datentabellen zu Energien und Oszillatorstärken werden in diesem Kapitel vorgestellt.

Die Magnetfelder sind zum Vergleich mit Literaturwerten entweder in Tesla, in atomaren Einheiten oder in  $Z$ -skalierten atomaren Einheiten angegeben.

### 5.4.1 Energien

#### Helium

Im Grundzustand des Heliums befindet sich ein Elektron im Zustand  $m_1 = 0, \nu_1 = 0$  und das andere im Zustand  $m_2 = -1, \nu_2 = 0$ , was den beiden tiefstliegenden Tightly-Bound-States des Wasserstoffs entspricht (siehe Abbildung 5.4).

In Tabelle 5.2 ist die Energie des Heliumgrundzustands in Abhängigkeit von der Magnetfeldstärke und in Tabelle 5.3 die Energien einiger angeregter Heliumzustände bei  $\beta_Z = 50$  zusammen mit bereits vorhandenen Literaturwerten aufgeführt. [Ruder et al. 1994] lösten die Hartree-Fock-Gleichungen in adiabatischer Näherung mit dem Numerov-Verfahren, [Jones 1985] benutzten die sogenannte *unrestricted Hartree-Fock-Method with even-tempered Gaussian basis functions*.

[Mori,Hailey 2002] erweitern die Lösung der Hartree-Fock-Gleichungen in adiabatischer Näherung mittels Numerov-Verfahren durch störungstheoretische Methoden auf höhere Landau-Levels. In Tabelle 5.2 sind jedoch deren Ergebnisse mit Beschränkung auf das niederste Landauniveau angegeben.

Da mit Ausnahme von [Jones et al. 1999] alle Rechnungen auf den Hartree-Fock-Gleichungen in adiabatischer Näherung beruhen, sollten die Ergebnisse übereinstimmen. Die Abweichungen, die im Promille-Bereich liegen, ergeben sich durch die Genauigkeit der Rechnungen insbesondere in Kernnähe [Pröschel 1982].

In Abbildung 5.9 sind die  $z$ -Komponenten  $P_i(z)$  der Wellenfunktionen der beiden Elektronen von Helium mit unterschiedlichen Anregungen bei  $\beta_Z = 50$  aufgetragen. Zu erkennen ist der in Kapitel 5.1 erläuterte Zusammenhang zwischen  $\nu$ -Quantenzahl und Knotenzahl der Wellenfunktion. Dabei ist zu beachten, daß sich die Wellenfunktion unter Beachtung der Paritätseigenschaft auf der negativen  $z$ -Achse fortsetzt.

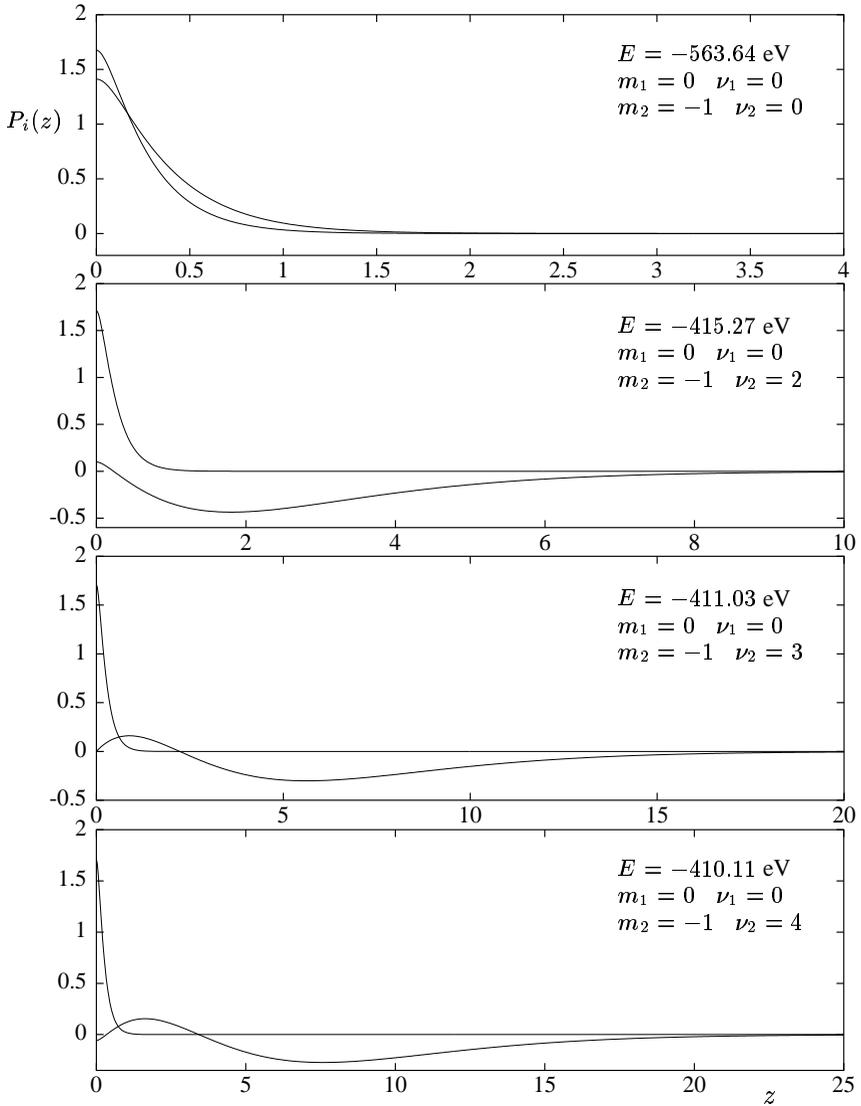
$\beta_Z$	Energie[eV]	Ruder	Jones	Mori
1	-134.29	-134.29	-146.94	-134.36
2	-176.30	-176.30	-186.85	-176.34
5	-249.80	-249.80	-258.19	-249.71
10	-322.22	-322.22	-329.27	-322.31
20	-412.27	-412.22	-418.22	-412.19
50	-563.65	-563.61	-568.39	-562.74
100	-706.98	-706.99	-710.95	-705.91
200	-879.03	-879.04		-879.14
500	-1156.62	-1156.63		-1158.49
1000	-1409.12	-1409.13		-1410.90

**Tab. 5.2:** Energien der Grundzustände von Helium bei unterschiedlicher Magnetfeldstärke. Die Elektronen haben die Quantenzahlen  $m_1 = 0, \nu_1 = 0$  und  $m_2 = -1, \nu_2 = 0$ .

$(m_1, \nu_1)$	Energie[eV]	Ruder	Jones	Mori	Miller
(0,1)	-421.74	-421.71	-426.39	-423.29	-413.7
(0,2)	-416.19	-416.17	-420.88	-418.34	-408.8
(-1,1)	-419.70	-419.68	-424.38	-421.72	-412.2
(-1,2)	-415.27	-415.25	-419.95	-416.61	-407.8
(-1,3)	-411.03				
(-1,4)	-410.11				
(-2,0)	-521.40	-521.37	-525.97	-521.73	
(-2,1)	-419.50	-419.49	-424.18	-421.45	
(-2,2)	-414.86	-414.83	-419.52	-416.26	

**Tab. 5.3:** Energien angeregter Heliumzustände bei  $\beta_Z = 50$ . Das 1. Elektron hat die Quantenzahlen wie in der Tabelle angegeben. Das 2. Elektron hat die Quantenzahlen  $m_2 = 0, \nu_2 = 0$ .

## 5 Viel-Elektronen-Atome in Neutronensternmagnetfeldern



**Abb. 5.9:**  $z$ -Komponenten der Wellenfunktionen des Grundzustands und angeregter Zustände von Helium bei  $\beta_Z = 50$ .

## Höhere Elemente

Bei der Besetzung der Energieniveaus werden zuerst die Tightly-Bound-States von Elektronen bevölkert. Bei höheren Elementen kann man sich am Termschema des Wasserstoffs (Abb. 5.4) klar machen, daß es, abhängig vom Magnetfeld, zu Konfigurationen kommen kann, bei denen es energetisch günstiger ist, wenn die Elektronen statt der Tightly-Bound-States mit den kleinsten Magnetquantenzahlen die Niveaus mit  $\nu = 1$  und wieder mit  $m = 0$  beginnend, dann zu kleineren Magnetquantenzahlen fortschreitend besetzen. Mit abnehmendem Magnetfeld werden die Tightly-Bound-States angehoben, so daß das Besetzen der  $\nu = 1$ -Niveaus für zunehmend leichtere Elemente die Energie absenkt.

In Abbildung 5.10 sind die  $z$ -Komponenten der Einteilchenwellenfunktionen des Grundzustands von vollbesetztem Eisen bei  $10^8$  T dargestellt. Dabei befinden sich 21 Elektronen auf  $\nu = 0$ -Niveaus mit den Magnetquantenzahlen  $m = 0$  bis  $m = 20$ . Die restlichen 5 Elektronen befinden sich auf  $\nu = 1$ -Niveaus mit den Magnetquantenzahlen  $m = 0$  bis  $m = 4$ . Die  $\nu = 1$ -Niveaus sind in dieser Konstellation im Mittel so nahe am Kern, daß sich eine gegenüber einer fortlaufenden Besetzung von  $\nu = 0$ -Niveaus eine Absenkung der Energie ergibt.

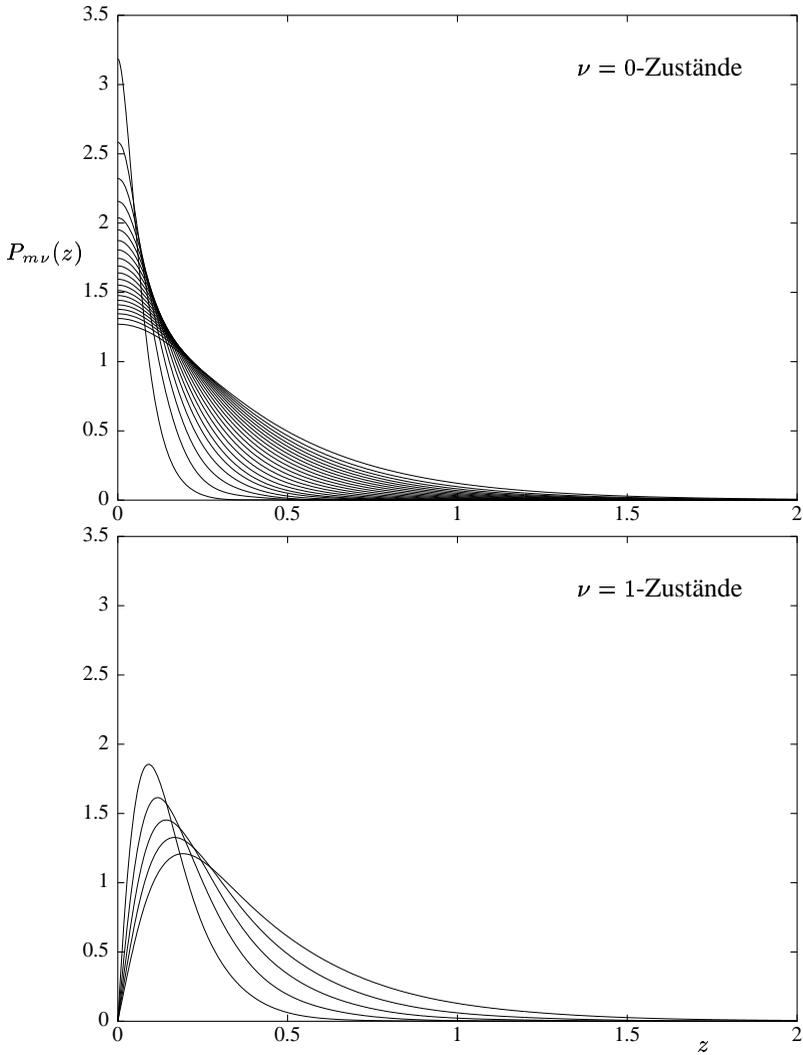
In den Tabellen 5.4 bis 5.7 sind die Grundzustandsenergien höherer Elemente bei den Magnetfeldern  $0.1 \cdot 10^8$ ,  $0.5 \cdot 10^8$ ,  $10^8$  und  $5 \cdot 10^8$  T aufgeführt. Bei den Daten von Mori ist hier jedoch bereits der Einfluß höherer Landauniveaus berücksichtigt worden, die Abweichungen von der adiabatischen Näherung nehmen mit der Kernladungszahl zu (siehe auch Kapitel 5.2.6). Die Zahl in eckigen Klammern gibt an, wieviele Elektronen sich in  $\nu = 1$ -Niveaus befinden.

Wie zu Beginn des Kapitels 5 erläutert, ist in der Atmosphäre von Neutronensternen ein hoher Anteil an Eisen in allen Ionisationsstufen zu erwarten. In Tabelle 5.8 sind die Grundzustandsenergien von Eisenionen in Magnetfeldern von  $10^8$  bis  $5 \cdot 10^9$  T aufgetragen. In Tabelle 5.9 sind Energien von Zuständen, in denen sich das Elektron mit der niedrigsten bzw. betragsmäßig größten Magnetquantenzahl im  $\nu = 1$ -Niveau befindet, aufgeführt. In der Tabelle treten Lücken bei den Zuständen auf, bei denen sich bereits im Grundzustand zwei oder mehr Elektronen in  $\nu = 1$ -Niveaus befinden. Die Oszillatorstärken bei Übergängen zwischen diesen Zuständen und den Grundzuständen folgen in Kapitel 5.4.3 in Tabelle 5.15.

Bei der numerischen Berechnung von Zuständen, bei denen die angeregten Elektronen Zustände niedriger Magnetquantenzahlen besetzen, stellt sich das Problem, daß sich die Elektronen der  $\nu = 0$ -Zustände sehr dicht am Kern befinden, während die  $z$ -Komponente der Wellenfunktion der angeregten Elektronen weit vom Kern entfernt flach ausläuft (siehe Abbildung 5.11). Anstatt die Anzahl der

finiten Elemente zu erhöhen, um den Bereich in Kernnähe trotz des großen Integrationsradius fein genug zu diskretisieren, ist es effizienter, lediglich einen kleinen Teil des gesamten Integrationsgebiets in Kernnähe in quadratisch aufgeweitete finite Elemente aufzuteilen. Der flach auslaufende Schweif der Wellenfunktion des angeregten Elektrons läßt sich erfahrungsgemäß mit 2 bis 3 finiten Elementen hinreichend genau erfassen.

Ein weiteres Element, welches in Neutronensternatmosphären vermutet wird, ist Silizium. In Tabelle 5.10 sind Energien von angeregten Siliziumzuständen in den Magnetfeldern skaliertener Energie  $\beta = 200, 500, 1000$  aufgeführt. Ein Elektron befindet sich im Zustand  $(m, 1)$ , die anderen Elektronen befinden sich in den Zuständen  $(m_i, 0)$ ,  $i = 0, \dots, 12$ ,  $m_i \neq m$ . Die Oszillatorstärken bei Übergängen zwischen diesen Zuständen und dem Grundzustand befindet sich in Tabelle 5.14.



**Abb. 5.10:** Wellenfunktionen der Elektronen im Eisen-Grundzustand bei  $B = 10^8$  T.

$Z$	Energie[keV]	Ivanov	Neuhauser	Mori
3	-0.5167	-0.54042	-0.516	-0.5160
4	-0.8474	-0.89833	-0.89833	-0.8897
5	-1.239	-1.33229	-1.238	-1.238
6	-1.687	-1.83895	-1.678	-1.687
7	-2.184	-2.41607	-2.17	-2.186
8	-2.752[1]	-3.08253[1]	-2.71	-2.754[1]
9	-3.373[1]	-3.82966[1]	-3.36	-3.373[1]
10	-4.041[1]	-4.65087[1]		-4.049[1]

**Tab. 5.4:** Energien der Grundzustände der Elemente mit den Kernladungszahlen  $Z = 3 \dots 10$  bei einem Magnetfeld von  $0.1 \cdot 10^8$  T. Die Zahlen in eckigen Klammern geben an, wieviele Elektronen sich in Orbitalen mit der Quantenzahl  $\nu = 1$  befinden (siehe Text).

$Z$	Energie[keV]	Ivanov	Neuhauser	Mori
3	-0.9459	-9.6180	-0.944	-0.9449
4	-1.582	-1.61624	-1.580	-1.580
5	-2.349	-2.41101	-2.347	-2.349
6	-3.236	-3.33639	-3.22	-3.237
7	-4.234	-4.38483	-4.22	-4.353
8	-5.336	-5.55032	-5.32	-5.338
9	-6.535	-6.82794	-6.51	-6.544
10	-7.826	-8.21365	-7.819	-7.834
11	-9.205		-9.197	-9.224
12	-10.729[1]		-10.27[1]	-10.750[1]
13	-12.331[1]		-12.32[1]	-12.364[1]
14	-14.020[2]		-14.00[1]	-14.062[2]

**Tab. 5.5:** Energien der Grundzustände der Elemente mit den Kernladungszahlen  $Z = 3 \dots 14$  bei einem Magnetfeld von  $0.5 \cdot 10^8$  T. Die Zahlen in eckigen Klammern geben an, wieviele Elektronen sich in Orbitalen mit der Quantenzahl  $\nu = 1$  befinden (siehe Text).

$Z$	Energie[keV]	Ivanov	Neuhauser	Mori	Jones
3	-1.211	-1.22443	-1.209	-1.214	
4	-2.044	-2.07309	-2.042	-2.056	
5	-3.057	-3.10924	-3.054	-3.085	
6	-4.236	-4.31991	-4.20	-4.288	
7	-5.568	-5.69465	-5.54	-5.657	
8	-7.045	-7.22492	-7.02	-7.176	
9	-8.658	-8.90360	-8.63	-8.845	
10	-10.400	-10.72452	-10.39	-10.664	-10.70
11	-12.266		-12.25	-12.625	
12	-14.249		-14.23	-14.745	
13	-16.352[1]		-16.34[1]	-16.973[1]	
14	-18.619[1]		-18.60[1]	-19.408[1]	-19.09
15	-21.002[1]		-20.95[1]	-21.987[1]	
16	-23.482[2]		-23.43[2]	-24.718[2]	
17	-26.130[2]		-26.07[2]	-27.618[2]	
18	-28.890[2]		-28.82[2]	-30.766[2]	
19	-31.756[2]			-34.036[2]	
20	-34.750[3]			-37.500[3]	-35.48
21	-37.865[3]				
22	-41.083[3]				
23	-44.426[4]				
24	-47.877[4]				
25	-51.430[5]				
26	-55.108[5]		-55.10[6]	(55.410[5])	-56.01

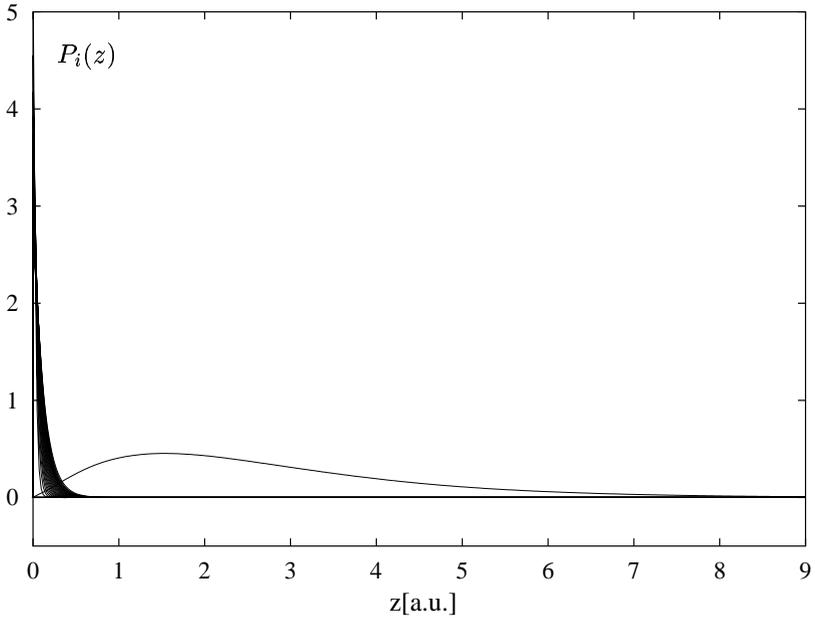
**Tab. 5.6:** Energien der Grundzustände der Elemente mit den Kernladungszahlen  $Z = 3 \dots 26$  bei einem Magnetfeld von  $10^8$  T. Die Zahlen in eckigen Klammern geben an, wieviele Elektronen sich in Orbitalen mit der Quantenzahl  $\nu = 1$  befinden (siehe Text). Der Wert für  $Z = 26$  von Mori wurde ebenfalls ohne Berücksichtigung höherer Landauniveaus berechnet.

$Z$	Energie[keV]	Ivanov	Neuhauser	Mori	Jones
3	-2.080	-2.08931	-2.076	-2.078	
4	-3.591	-3.61033	-3.584	-3.586	
5	-5.465	-5.49950	-5.456	-5.476	
6	-7.679	-7.73528	-7.60	-7.695	-8.03
7	-10.214	-10.29919	-10.20	-10.231	
8	-13.055	-13.17543	-13.00	-13.099	
9	-16.185	-16.34997	-16.10	-16.264	
10	-19.594	-19.81072	-19.57	-19.702	-20.24
11	-23.268		-24.64	-23.406	
12	-27.199		-27.17	-27.436	
13	-31.376		-31.35	-31.675	
14	-35.793		-35.74	-36.154	-36.76
15	-40.438		-40.35	-40.915	
16	-45.308		-45.22	-45.881	
17	-50.395		-50.30	-51.067	
18	-55.693		-55.95	-56.530	
19	-61.196			-62.181	
20	-66.901			-68.031	-68.37
21	-72.899[1]			-74.184[1]	
22	-79.112[1]			-80.602[1]	
23	-85.530[1]			-87.263[1]	
24	-92.148[1]			-94.259[1]	
25	-98.964[1]			-101.25[1]	
26	-106.134[2]		-106.09[2]	-108.64[2]	-108.18

**Tab. 5.7:** Energien der Grundzustände der Elemente mit den Kernladungszahlen  $Z = 3 \dots 26$  bei einem Magnetfeld von  $5 \cdot 10^8$  T. Die Zahlen in eckigen Klammern geben an, wieviele Elektronen sich in Orbitalen mit der Quantenzahl  $\nu = 1$  befinden (siehe Text).

Anz. $e^-$	$1 \cdot 10^8$ T	$5 \cdot 10^8$ T	$1 \cdot 10^9$ T	$2 \cdot 10^9$ T	$5 \cdot 10^9$ T
2	16667	32163	42210	54984	77045
3	21465	41738	54967	71861	101192
4	25409	49668	65571	85943	121447
5	28897[1]	56460	74677	98067	138952
6	32117[1]	62393	82644	108697	154343
7	34909[1]	67636	89697	118122	168021
8	37362[1]	72306	95986	126539	180259
9	39558[2]	76486	101623	134090	191258
10	41620[2]	80239	106688	140884	201167
11	43449[2]	83614	111247	147003	210106
12	45075[2]	86782[1]	115349	152516	218168
13	46521[2]	89633[1]	119038	157477	225433
14	47869[3]	92182[1]	122348	161932	231965
15	49066[3]	94454[1]	125308	165920	237820
16	50121[3]	96472[1]	127944	169476	243045
17	51047[3]	98254[1]	130278	172627	247684
18	51865[4]	99817[1]	132331	175401	251774
19	52594[4]	101175[1]	134118	177821	255349
20	53216[4]	102358[2]	135671[1]	179910	258443
21	53737[4]	103386[2]	137030[1]	181689	261084
22	54166[4]	104240[2]	138164[1]	183174	263291
23	54508[4]	104931[2]	139087[1]	184396	265126
24	54783[5]	105469[2]	139813[1]	185351	266578
25	54982[5]	105867[2]	140356[1]	186003	267686
26	55109[5]	106134[2]	140728[1]	186595	268446

**Tab. 5.8:** Grundzustandsenergien von Eisenionen. Die Energie ist in -eV, das Magnetfeld in Tesla angegeben.



**Abb. 5.11:** Einteilchenzustände von vollbesetztem Eisen bei  $5 \cdot 10^9$  T. Das Elektron mit der niedrigsten Magnetquantenzahl befindet sich im  $\nu = 1$ -Zustand.

Anz. $e^-$	$1 \cdot 10^8$ T	$5 \cdot 10^8$ T	$1 \cdot 10^9$ T	$2 \cdot 10^9$ T	$5 \cdot 10^9$ T
2	13504	24463	31188	39462	53265
3	19239	36134	46829	60233	83045
4	23665	45191	59013	76491	106530
5		52713	69155	90062	126220
6		59167	77871	101748	143228
7		64809	85500	111991	158173
8		69797	92252	121070	171448
9		74240	98272	129173	183317
10		78215	103664	136439	193976
11		81781	108505	142970	203572
12			112857	148846	212220
13			116768	154133	220012
14			120280	158885	227026
15			123424	163145	233325
16			126230	166952	238965
17			128724	170340	243993
18			130925	173336	248452
19			132855	175968	252379
20				178260	255809
21				180233	258775
22				181912	261303
23				183317	263420
24				184466	265203
25				185309	266613
26				186094	267667

**Tab. 5.9:** Energien angeregter Eisenionen. Das Elektron mit der betragsmäßig größten Magnetquantenzahl befindet sich im Zustand  $\nu = 1$ . Die Energien sind in -eV, das Magnetfeld in Tesla angegeben. In der Tabelle treten Lücken bei den Zuständen auf, bei denen sich bereits im Grundzustand zwei oder mehr Elektronen in  $\nu = 1$ -Niveaus befinden.

m	$\beta = 200$ $0.94 \cdot 10^8 \text{ T}$	$\beta = 500$ $2.35 \cdot 10^8 \text{ T}$	$\beta = 1000$ $4.7 \cdot 10^8 \text{ T}$
0	-	-21986.45	-29185.88
1	-16692.36	-24185.71	-32033.49
2	-17199.10	-24949.67	-33020.15
3	-17466.26	-25349.61	-33535.90
4	-17629.70	-25594.70	-33852.82
5	-17737.69	-25757.97	-34064.70
6	-17813.01	-25872.86	-34214.35
7	-17867.71	-25956.79	-34324.08
8	-17909.01	-26020.07	-34407.10
9	-17941.81	-26069.49	-34472.13
10	-17969.86	-26109.96	-34525.47
11	-17997.06	-26145.53	-34572.31
12	-18030.42	-26180.94	-34618.79
13	-	-26225.52	-34677.22

**Tab. 5.10:** Energien angeregter Silizium-Zustände. Ein Elektron befindet sich im Zustand  $(m, 1)$ , die anderen Elektronen befinden sich in den Zuständen  $(m_i, 0)$ ,  $i = 0, \dots, 12$ ,  $m_i \neq m$ . Die Grundzustandsenergien bei diesen Magnetfeldern sind  $E_{\beta=200} = -18156.73[1] \text{ eV}$ ,  $E_{\beta=500} = -26402.84 \text{ eV}$ ,  $E_{\beta=1000} = -34923.53 \text{ eV}$ .

### 5.4.2 Magnetfeldabhängigkeit der Spektrallinien

Betrachtet man einen Neutronenstern bzgl. seines Magnetfeldverlaufs als einfachen magnetischen Dipol, sollte sich aufgrund dem aus der klassischen Elektrodynamik bekannten Verlauf des magnetischen Dipolfeldes

$$\vec{B}(\vec{r}) = N \frac{3(\vec{M} \cdot \vec{r})\vec{r} - r^2 \vec{M}}{r^5} \quad (5.67)$$

der Betrag des Feldes von den Polen zum Äquator um einen Faktor 2 ändern. Für die Spektroskopie stellt sich die Frage, wie stark die Energie-Niveaus und insbesondere die Energiedifferenzen durch diesen Magnetfeldgradienten beeinflusst werden. In Abbildung 5.12 ist der Verlauf der Energien des Heliumgrundzustands und der ersten beiden angeregten Zustände, zu denen aufgrund von Auswahlregeln Übergänge möglich sind, in Abhängigkeit vom Magnetfeld im Bereich von  $10^8$  bis  $2 \cdot 10^8$  T aufgetragen. Die Energien ändern sich um bis zu rund 25%, jedoch ist aus Abbildung 5.13 ersichtlich, daß die Wellenlängen  $\lambda = \Delta E$  der bei den Übergängen emittierten elektromagnetischen Wellen sich nur gering ändert.

In Tabelle 5.11 sind die Energien des Kohlenstoff-Grundzustands und angeregter Kohlenstoffzustände in Magnetfeldern von  $10^8$  bis  $1.5 \cdot 10^9$  T aufgeführt. Ein Elektron befindet sich im Zustand  $(m_0, \nu_0)$  wie im Kopf der Tabelle angegeben, die anderen Elektronen in den  $\nu = 0$ -Niveaus mit den betragsmäßig kleinsten Magnetquantenzahlen  $m \neq m_0$ . In Abbildung 5.14 sind oben die Energien in Abhängigkeit vom Magnetfeld, unten die Wellenlängen bei Übergängen vom Grundzustand zu angeregten Zuständen in Abhängigkeit vom Magnetfeld grafisch dargestellt. Mit zunehmendem Magnetfeld ist eine immer geringere „Verwaschung“ der Spektrallinien durch den Magnetfeldgradienten des Neutronensterns zu erwarten.

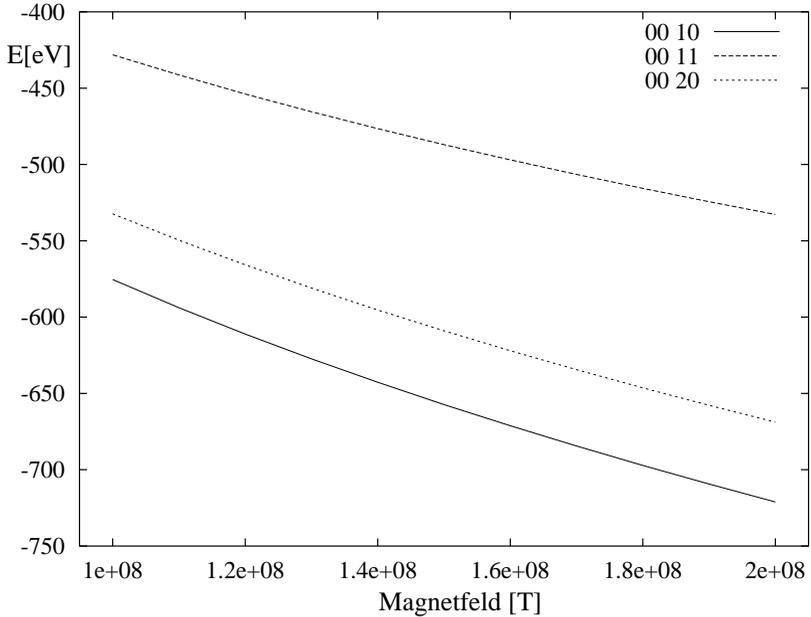


Abb. 5.12: Abhängigkeit der Energie des Heliumgrundzustands und der angeregten Zustände mit der Konfiguration (00-11) und (00-20) vom Magnetfeld.

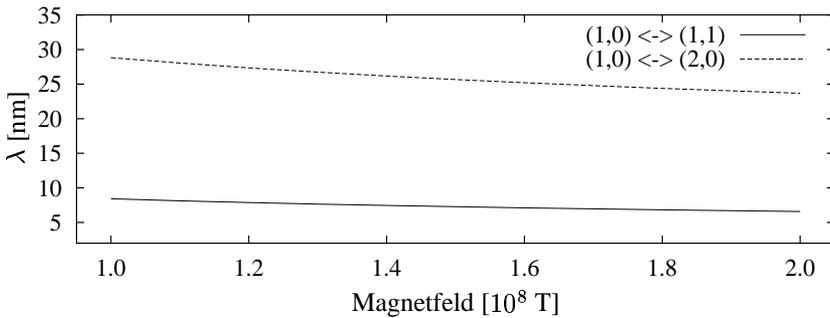
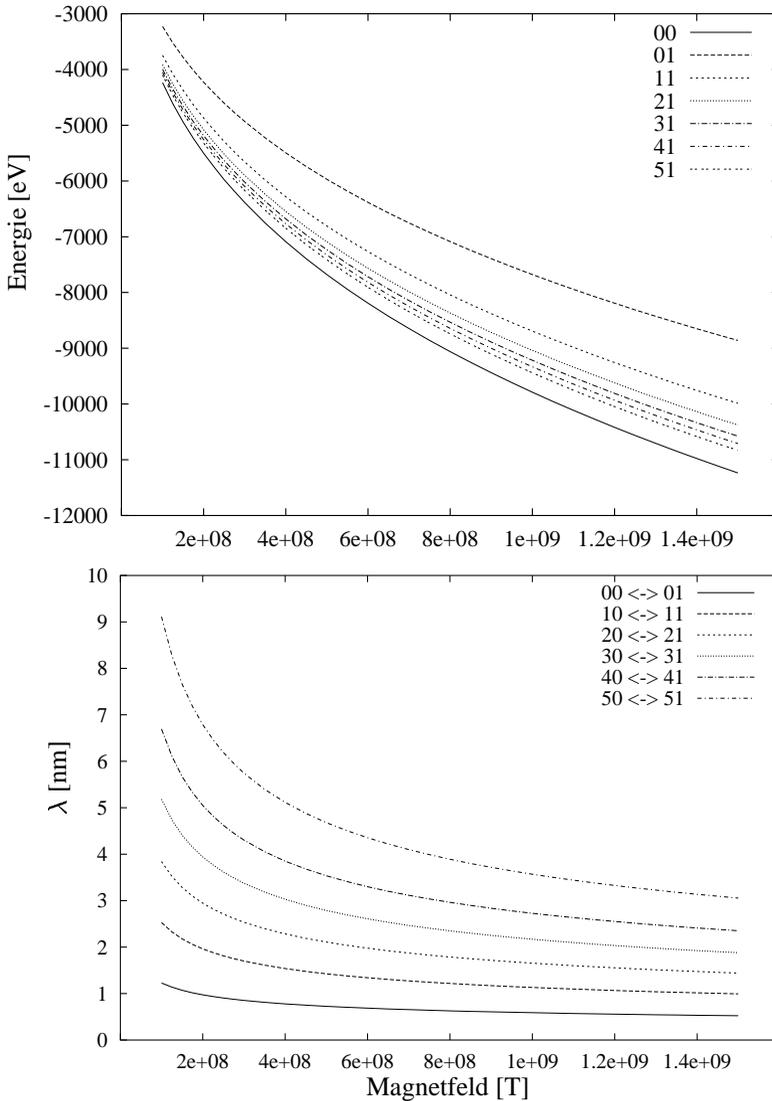


Abb. 5.13: Wellenlängen der Helium-Übergänge zwischen den Zuständen aus Abbildung 5.12.

$B[10^8 \text{ T}]$	(0,0)	(0,1)	(1,1)	(2,1)	(3,1)
1.0	-4236.15	-3226.85	-3745.85	-3913.34	-3996.97
1.5	-4940.88	-3782.03	-4371.30	-4563.36	-4659.75
2.0	-5502.01	-4226.81	-4870.03	-5081.15	-5187.50
2.5	-5975.17	-4603.43	-5290.98	-5517.87	-5632.49
3.0	-6387.87	-4933.00	-5658.40	-5898.85	-6020.61
3.5	-6756.01	-5227.76	-5986.34	-6238.74	-6366.80
4.0	-7089.70	-5495.53	-6283.73	-6546.84	-6680.58
4.5	-7395.83	-5741.64	-6556.66	-6829.50	-6968.40
5.0	-7679.30	-5969.92	-6809.48	-7091.26	-7234.91
5.5	-7943.77	-6183.22	-7045.43	-7335.47	-7483.54
6.0	-8192.03	-6383.71	-7266.97	-7564.73	-7716.91
6.5	-8426.28	-6573.12	-7476.06	-7781.04	-7937.09
7.0	-8648.26	-6752.82	-7674.26	-7986.04	-8145.73
7.5	-8859.42	-6923.92	-7862.82	-8181.04	-8344.18
8.0	-9060.92	-7087.36	-8042.79	-8367.12	-8533.54
8.5	-9253.76	-7243.91	-8215.06	-8545.20	-8714.75
9.0	-9438.78	-7394.24	-8380.37	-8716.05	-8888.60
9.5	-9616.69	-7538.90	-8539.34	-8880.34	-9055.75
10.0	-9788.10	-7678.37	-8692.54	-9038.63	-9216.79
10.5	-9953.55	-7813.10	-8840.42	-9191.41	-9372.21
11.0	-10113.51	-7943.43	-8983.42	-9339.12	-9522.48
11.5	-10268.39	-8069.71	-9121.89	-9482.14	-9667.96
12.0	-10418.56	-8192.22	-9256.17	-9620.81	-9809.01
12.5	-10564.35	-8311.21	-9386.54	-9755.43	-9945.93
13.0	-10706.04	-8426.93	-9513.25	-9886.26	-10078.99
13.5	-10843.89	-8539.57	-9636.56	-10013.55	-10208.45
14.0	-10978.15	-8649.32	-9756.65	-10137.52	-10334.52
14.5	-11109.02	-8756.36	-9873.72	-10258.36	-10457.41
15.0	-11236.71	-8860.83	-9987.96	-10376.25	-10577.29

**Tab. 5.11:** Energien des Kohlenstoff-Grundzustands und angeregter Kohlenstoffzustände bei unterschiedlicher Magnetfeldstärke. Ein Elektron hat die Quantenzahlen wie in der Tabelle angegeben, die restlichen 5 Elektronen befinden sich im Grundzustand, d.h. (m,0).



**Abb. 5.14:** Oben: grafische Darstellung der Energien aus Tabelle 5.11. Unten: Wellenlänge bei Übergängen von den angeregten Zuständen zum Grundzustand.

### 5.4.3 Oszillatorstärken

Für die Analyse atomarer Spektren ist neben den Energieniveaus auch die Bestimmung von Linienintensitäten von großer Bedeutung. Als Maß für die Linienintensität ist es üblich, die dimensionslosen Oszillatorstärken zu verwenden. Die größte Bedeutung kommt den Dipolübergängen zu, da sie die Übergänge mit der größten Übergangswahrscheinlichkeit sind. Ausführlichere Darstellungen der Theorie elektromagnetischer Übergänge findet man z.B. in [Friedrich 1990].

Das Dipolmatrixelement eines  $\Delta M = q$  Dipol-Übergangs zwischen zwei Zuständen  $\Psi_i$  und  $\Psi_f$  eines N-Elektronen-Atoms ist definiert durch

$$p_{fi}^{(q)} = \langle \Psi_f | \sum_{j=1}^N \frac{r_j^{(q)}}{a_Z} | \Psi_i \rangle \quad . \quad (5.68)$$

Das Betragsquadrat von (5.68)

$$d_{fi}^{(q)} = |p_{fi}^{(q)}|^2 \quad (5.69)$$

bezeichnet man als Dipolstärke. Die Oszillatorstärke ergibt sich aus der Dipolstärke durch Multiplikation mit der Energiedifferenz der Zustände  $\Psi_i$  und  $\Psi_f$  in Einheiten von  $E_Z = Z^2 \cdot E_0$ :

$$f_{fi}^{(q)} = \left( \frac{E_f - E_i}{E_Z} \right) d_{fi}^{(q)} \quad . \quad (5.70)$$

Liegen die Vielteilchenzustände in Form von Slaterdeterminanten vor, lassen sich Vielteilchenmatrixelemente auf Matrixelemente der Einteilchenwellenfunktionen zurückführen. Allgemein gilt für einen Vielteilchenoperator, der sich als Summe von Einteilchenoperatoren schreiben läßt, mit den Vielteilchenzuständen

$$\Psi_i = (N!)^{-1/2} \det \left( \psi_m^{(i)}(\vec{r}_n) \right) \quad \text{und} \quad \Psi_f = (N!)^{-1/2} \det \left( \psi_m^{(f)}(\vec{r}_n) \right) \quad (5.71)$$

die Beziehung [Friedrich 1990]

$$\langle \Psi_f | \sum_{m=1}^N \hat{V}(m) | \Psi_i \rangle = \langle \Psi_f | \Psi_i \rangle \sum_{m,n=1}^N \langle \psi_m^{(f)} | \hat{V} | \psi_n^{(i)} \rangle B_{nm} \quad . \quad (5.72)$$

Dabei ist

$$\langle \Psi_f | \Psi_i \rangle = \det(A_{mn}) \quad \text{mit} \quad A_{mn} = \langle \psi_m^{(f)} | \psi_n^{(i)} \rangle \quad (5.73)$$

und die Matrix  $B$  ist die Inverse der in (5.73) definierten Matrix  $A$ . Für die Berechnung von Dipolstärken lautet der Vielteilchenoperator gemäß (5.68)

$$\hat{V} = \sum_{m=1}^N \frac{r_m^{(q)}}{a_Z} . \quad (5.74)$$

Für 2-Elektronensysteme erhält man unter Berücksichtigung der Orthogonalität der Landaufunktionen aus (5.72) die Dipolstärken für  $\Delta M = 0$ -Übergänge:

$$\begin{aligned} p_{fi}^{(0)} &= \delta_{m_1, m_1'} \delta_{m_2, m_2'} \\ &\times \left( \langle P'_{m_1' \nu_1'} | z | P_{m_1 \nu_1} \rangle \langle P'_{m_2' \nu_2'} | P_{m_2 \nu_2} \rangle + \langle P'_{m_1' \nu_1'} | P_{m_1 \nu_1} \rangle \langle P'_{m_2' \nu_2'} | z | P_{m_2 \nu_2} \rangle \right) \\ &- \delta_{m_2, m_1'} \delta_{m_1, m_2'} \\ &\times \left( \langle P'_{m_1' \nu_1'} | z | P_{m_2 \nu_2} \rangle \langle P'_{m_2' \nu_2'} | P_{m_1 \nu_1} \rangle + \langle P'_{m_1' \nu_1'} | P_{m_2 \nu_2} \rangle \langle P'_{m_2' \nu_2'} | z | P_{m_1 \nu_1} \rangle \right), \end{aligned} \quad (5.75)$$

für  $\Delta M = 1$ -Übergänge:

$$\begin{aligned} p_{fi}^{(1)} &= -\langle P'_{m_1' \nu_1'} | P_{m_1 \nu_1} \rangle \langle P'_{m_2' \nu_2'} | P_{m_2 \nu_2} \rangle \\ &\times \left( \delta_{m_2, m_2'} \delta_{m_1+1, m_1'} \sqrt{\frac{|m_1|}{2\beta_Z}} + \delta_{m_1, m_1'} \delta_{m_2+1, m_2'} \sqrt{\frac{|m_2|}{2\beta_Z}} \right) \\ &+ \langle P'_{m_1' \nu_1'} | P_{m_2 \nu_2} \rangle \langle P'_{m_2' \nu_2'} | P_{m_1 \nu_1} \rangle \\ &\times \left( \delta_{m_1, m_2'} \delta_{m_2+1, m_1'} \sqrt{\frac{|m_2|}{2\beta_Z}} + \delta_{m_2, m_1'} \delta_{m_1+1, m_2'} \sqrt{\frac{|m_1|}{2\beta_Z}} \right) \end{aligned} \quad (5.76)$$

und für  $\Delta M = -1$ -Übergänge:

$$\begin{aligned} p_{fi}^{(-1)} &= \langle P'_{m_1' \nu_1'} | P_{m_1 \nu_1} \rangle \langle P'_{m_2' \nu_2'} | P_{m_2 \nu_2} \rangle \\ &\times \left( \delta_{m_2, m_2'} \delta_{m_1-1, m_1'} \sqrt{\frac{|m_1'|}{2\beta_Z}} + \delta_{m_1, m_1'} \delta_{m_2-1, m_2'} \sqrt{\frac{|m_2'|}{2\beta_Z}} \right) \\ &- \langle P'_{m_1' \nu_1'} | P_{m_2 \nu_2} \rangle \langle P'_{m_2' \nu_2'} | P_{m_1 \nu_1} \rangle \\ &\times \left( \delta_{m_1, m_2'} \delta_{m_2-1, m_1'} \sqrt{\frac{|m_1'|}{2\beta_Z}} + \delta_{m_2, m_1'} \delta_{m_1-1, m_2'} \sqrt{\frac{|m_2'|}{2\beta_Z}} \right). \end{aligned} \quad (5.77)$$

Die analogen Ausdrücke für höhere Elemente sind wegen ihrer Unhandlichkeit und ihrer strukturellen Ähnlichkeit nicht aufgeführt. Aus den Ausdrücken 5.75 bis 5.77 ist unmittelbar einsichtig, daß die Auswahlregeln

$$\Delta m = \pm 1 \quad \Delta \nu = \text{gerade} \quad (5.78)$$

und

$$\Delta m = 0 \quad \Delta \nu = \text{ungerade} \quad (5.79)$$

gelten.

In Tabelle 5.12 sind Oszillatorstärken von Übergängen zwischen dem Grundzustand und angeregter Zustände von Helium aufgeführt. Das 2. Elektron befindet sich immer im Zustand  $(0, 0)$ . Zum Vergleich mit Literaturwerten ist das Magnetfeld in Z-skalierten atomaren Einheiten angegeben. Die Werte stimmen in der angegebenen Genauigkeit, soweit vorhanden, mit den Daten von [Ruder et al. 1994] perfekt überein.

$(m, \nu) \rightarrow (m', \nu')$	$\beta_Z = 5$	$\beta_Z = 10$	$\beta_Z = 50$	$\beta_Z = 100$	$\beta_Z = 500$
$(1, 0) \rightarrow (1, 1)$	0.500	0.410	0.239	0.184	0.099
$(1, 0) \rightarrow (2, 0)$	0.0735	0.0464	0.0154	0.00936	0.00285
$(2, 0) \rightarrow (2, 1)$	0.598	0.511	0.318	0.250	0.138
$(2, 0) \rightarrow (3, 0)$	0.045	0.0287	0.00974	0.00602	0.00190
$(3, 0) \rightarrow (3, 1)$	0.661	0.577	0.375	0.299	0.167
$(3, 0) \rightarrow (4, 0)$	0.0336	0.0217	0.00752	0.00469	0.00151
$(4, 0) \rightarrow (4, 1)$	0.702	0.621	0.417	0.337	0.191

**Tab. 5.12:** Oszillatorstärken von Heliumübergängen. Das 2. Elektron befindet sich im Zustand  $(0,0)$ .

In Tabelle 5.13 sind Oszillatorstärken von Kohlenstoffübergängen aufgeführt. Die Übergänge finden zwischen den Zuständen  $(m, 0) \rightarrow (m, 1)$  statt. Die anderen Elektronen befinden sich in den Zuständen  $(m_i, 0)$ ,  $i = 0, \dots, 5$ ,  $m_i \neq m$ . Vergleicht man die Oszillatorstärken mit denen von [Miller, Neuhauser 1991], so weichen diese zwischen 5% und 20% ab. Tendenziell ist die Übereinstimmung bei höheren Magnetfeldern und kleineren Magnetquantenzahlen besser. Im Rahmen dieser Arbeit konnte nicht mehr geklärt werden, welche Oszillatorstärken die genaueren sind.

m	$\beta = 200$	$\beta = 500$	$\beta = 1000$
-0	0.0477	0.0126	0.00628
-1	0.0707	0.0270	0.0152
-2	0.101	0.0450	0.0269
-3	0.136	0.0668	0.0413
-4	0.172	0.0917	0.0585
-5	0.205	0.119	0.0793

**Tab. 5.13:** Oszillatorstärken von Kohlenstoffübergängen. Die Übergänge finden zwischen den Zuständen  $(m, 0) \rightarrow (m, 1)$  statt. Die anderen Elektronen befinden sich in den Zuständen  $(m_i, 0)$ ,  $i = 0, \dots, 5$ ,  $m_i \neq m$ .

In Tabelle 5.14 sind die Oszillatorstärken von Siliziumübergängen aufgeführt. Die Übergänge finden dabei wie bei den Kohlenstoffoszillatorstärken in Tabelle 5.13 zwischen dem Grundzustand und dem angeregten Zustand, in dem ein Elektron die Quantenzahlen  $(m, 1)$  besitzt, statt. Bei  $\beta = 200$  hat ein Elektron bereits im Grundzustand die Quantenzahlen  $(0, 1)$ , das Orbital mit den Quantenzahlen  $(13, 0)$  ist dagegen unbesetzt. Deshalb treten in der Tabelle Lücken auf.

In Tabelle 5.15 sind Oszillatorstärken der Übergänge zwischen Grundzuständen und angeregten Zuständen von Eisenionen aus den Tabellen 5.8 und 5.9 aufgeführt.

m	$\beta = 200$	$\beta = 500$	$\beta = 1000$
0	-	0.340	0.0297
1	0.0836	0.185	0.0121
2	0.0791	0.0792	0.0105
3	0.0599	0.0517	0.0112
4	0.0490	0.0448	0.0130
5	0.0461	0.0448	0.0154
6	0.0476	0.0482	0.0187
7	0.0517	0.0539	0.0226
8	0.0576	0.0613	0.0273
9	0.0647	0.0701	0.0327
10	0.0724	0.0802	0.0388
11	0.0800	0.0912	0.0458
12	0.0852	0.103	0.0536
13	-	0.113	0.0628

**Tab. 5.14:** Oszillatorstärken von Siliziumübergängen. Die Übergänge finden zwischen den Zuständen  $(m, 0) \rightarrow (m, 1)$  statt. Die anderen Elektronen befinden sich in den Zuständen  $(m_i, 0)$ ,  $i = 0, \dots, 12$ ,  $m_i \neq m$ . Da bei  $\beta = 200$  ein Elektron bereits im Grundzustand die Quantenzahlen  $(0, 1)$  besitzt, gibt es bei  $m = 0$  und  $m = 13$  keine Übergänge nach obigem Schema.

Anz. $e^-$	$1 \cdot 10^8$	$5 \cdot 10^8$	$1 \cdot 10^9$	$2 \cdot 10^9$	$5 \cdot 10^9$
2	0.9048	0.8287	0.7825	0.7274	0.6418
3	0.9310	0.8630	0.8208	0.7691	0.6864
4	0.9442	0.8803	0.8401	0.7905	0.7096
5		0.8903	0.8513	0.8027	0.7225
6		0.8965	0.8579	0.8094	0.7291
7		0.9002	0.8614	0.8127	0.7315
8		0.9021	0.8628	0.8133	0.7304
9		0.9026	0.8623	0.8116	0.7265
10		0.9018	0.8603	0.8079	0.7200
11		0.9000	0.8568	0.8022	0.7108
12			0.8516	0.7943	0.6987
13			0.8446	0.7843	0.6836
14			0.8356	0.7714	0.6650
15			0.8243	0.7554	0.6422
16			0.8099	0.7355	0.6144
17			0.7917	0.7106	0.5809
18			0.7684	0.6792	0.5000
19			0.7378	0.6394	0.4905
20				0.5882	0.4308
21				0.5224	0.3598
22				0.4367	0.2784
23				0.3291	0.1908
24				0.2040	0.1077
25				0.0874	0.0433
26				0.0161	0.0081

**Tab. 5.15:** Oszillatorstärken von Eisenionen. Berechnet wurden die Übergänge zwischen den Zuständen aus den Tabellen 5.8 und 5.9.

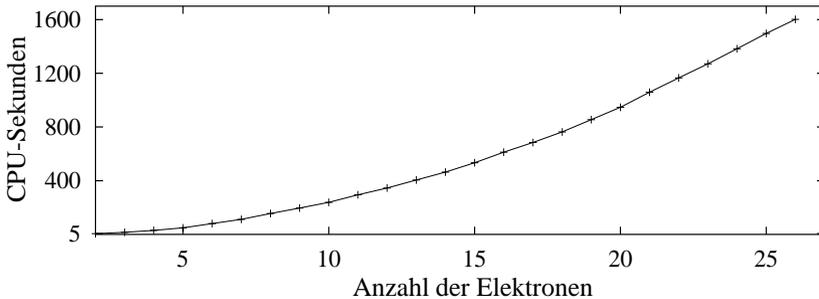
## 5.5 Parallelisierung

Bei der Modellierung synthetischer Neutronensternatmosphären werden i.A. viele Hunderttausend bis hin zu Millionen atomarer Übergänge der in der Atmosphäre vermuteten Elemente in mannigfaltigen Anregungs- und Ionisationsstufen berücksichtigt. Daher ist es notwendig, einen Programmcode zu entwickeln, der in annehmbarer Zeit entsprechend viele Zustände berechnen kann. Aus Abb. 5.15 geht am Beispiel der Berechnung der Grundzustände von Eisenionen hervor, daß die CPU-Zeiten stark von der Anzahl der Elektronen abhängen. Desweiteren können die CPU-Zeiten, falls eine hohe Genauigkeit der Energiewerte gewünscht wird, insbesondere bei einer größeren Anzahl von Elektronen, sehr groß werden. Als Beispiel dazu sind in Abbildung 5.16 die CPU-Zeiten in Abhängigkeit des relativen Fehlers bedingt durch unterschiedliche Anzahl finiter Elemente bei der Berechnung des Eisengrundzustands bei  $2 \cdot 10^8$  T aufgetragen.

Es bietet sich an, auf Parallelrechnern die Lösung der Gleichungen (5.41) auf mehrere Prozessoren zu verteilen. Günstigstenfalls stimmt die Anzahl der Elektronen mit der Anzahl der Prozessoren überein, so daß pro Prozessor der Zustand von je einem Elektron berechnet wird. Übersteigt die Anzahl der Prozessoren die der Elektronen, bietet es sich an, mehrere Gesamtzustände parallel zu berechnen.

Die Parallele Version des in Kapitel 5.3 beschriebenen seriellen Programmcodes arbeitet im Detail folgendermassen:

1. Jedem Prozess wird, je nach Anzahl der zur Verfügung stehenden Prozessoren, die Berechnung von einem oder mehreren Elektronen zugeteilt.
2. Der root-Prozess liest die zur Berechnung erforderlichen Parameter wie Magnetfeld, Integrationsradius, Startwellenfunktionen usw. ein und teilt sie den anderen Prozessen mit.
3. Jeder Prozess berechnet die Potentiale (5.25), (5.25) und (5.31) für die ihm zugeteilten Elektronen.
4. Jeder Prozess löst für die ihm zugeteilten Elektronen die Gleichungen (5.41) und berechnet die Einteilchenenergien (5.42).
5. Jeder Prozess teilt die von ihm berechneten Wellenfunktionen allen anderen Prozessen mit.
6. Die Gesamtenergie (5.21) wird berechnet und mit der Gesamtenergie des vorherigen Iterationsschrittes verglichen. Ist die Differenz größer als gewünscht, wird mit Schritt 3 fortgefahren.



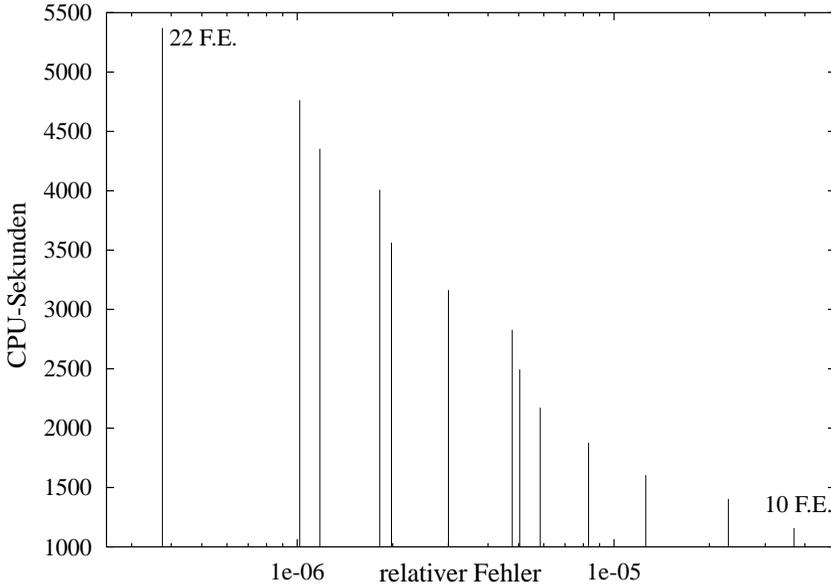
**Abb. 5.15:** Relation zwischen der CPU-Zeit für 5 Iterationsschritte und der Anzahl der Elektronen bei der Berechnung von Eisenionen mit 15 finiten Elementen und B-Splines 6. Ordnung auf einer Single-Processor-Maschine mit einem Athlon XP1600+ Prozessor.

Für die Verteilung der Prozesse auf die Knoten eines Parallelrechners und die Interprozesskommunikation wurde MPI verwendet. Die Rechnungen wurden auf dem Phönix-Cluster des Instituts für Theoretische Astrophysik in Tübingen durchgeführt. Der Phönix-Cluster besteht aus 16 Knoten mit je 2 Prozessoren des Typs Athlon XP 1600+. Die Knoten sind mit 100MBit-Ethernet verbunden.

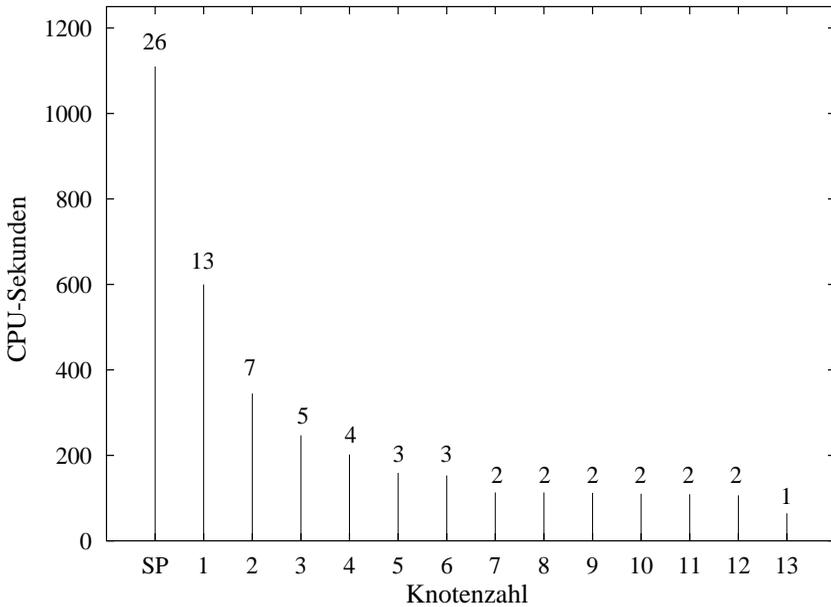
Die Geschwindigkeit des Netzwerks beeinflusst die Performance nicht wesentlich, da nur geringe Kommunikation stattfindet. Berechnet man z.B. vollbesetztes Eisen mit  $m = 15$  finiten Elementen und B-Splines der Ordnung  $k = 6$  auf 26 Prozessoren, so beträgt bei Nutzung des Datentyps *real\*8* die Größe des die Einteilchen-Wellenfunktion darstellenden Lösungsvektors  $(m + k - 1) \cdot 8$  Bytes = 160 Bytes. Diese Datenmenge wird per MPI-Broadcast von jedem Prozess an jeden anderen gesendet, dadurch müssen nach jedem Iterationsschritt in diesem praxisnahen Beispiel insgesamt rund 98 kByte gesendet werden. Obwohl z.B. bei 2-Elektronensystemen berechnet auf einem Knoten mit 2 Prozessoren nach jedem Iterationsschritt nur 160 Bytes ausgetauscht werden müssen, wird dennoch kein Speedup von 2 erreicht, da sich die Prozessoren einen Speicherbus teilen.

In Abbildung 5.17 ist die Relation zwischen CPU-Zeit und der Anzahl der Knoten des Phönix-Clusters bei der Berechnung des Eisengrundzustands bei  $5 \cdot 10^8$  T aufgetragen. Über den Balken ist die maximale Anzahl der Elektronen angegeben, die pro Prozessor gerechnet werden. Auf 13 Knoten berechnet jeder Prozessor

jeweils ein Elektron des vollbesetzten Eisens. Bei 12 Knoten berechnen 2 Prozessoren je 2 Elektronen und die restlichen 22 Prozessoren je ein Elektron. Mit abnehmender Knotenzahl berechnen immer mehr Prozessoren je 2 Elektronen, bis schließlich auf 6 Knoten von 2 Prozessoren bereits 3 Elektronen berechnet werden. Mit weiter abnehmender Knotenzahl kann das Schema weiter fortgeführt werden.



**Abb. 5.16:** Relation zwischen CPU-Zeit und relativem Fehler bei der Berechnung des Eisengrundzustands bei einem Magnetfeld von  $2 \cdot 10^9$  T bei Variation der Anzahl der finiten Elemente. Es wurden 10 bis 22 finite Elemente verwendet. Die Energie konvergiert gegen den Wert  $E_\infty = -186595.2790$  eV.



**Abb. 5.17:** Relation zwischen CPU-Zeit und Anzahl der Knoten (mit je 2 Athlon XP1600+ Prozessoren) bei der Berechnung des Eisengrundzustands. Die Zahlen über den Balken geben die maximale Anzahl der Elektronen an, die pro Prozessor gerechnet werden (siehe Text).

# 6 Zusammenfassung und Ausblick

In der vorliegenden Arbeit wurden zur numerischen Behandlung von aktuellen Problemen der Atomphysik Diskretisierungsverfahren verwendet. Untersucht wurden effektive Ein-Elektronen-Probleme mit und ohne expliziter Zeitabhängigkeit sowie zeitunabhängige Viel-Elektronen-Probleme. Zum Einsatz kamen dabei die Methode der Diskreten Variablen und die Methode der Finiten Elemente. Zwei Schwerpunkte der Untersuchungen bildeten zum einen die Quantendynamik von Wasserstoff und Alkaliatomen unter Einfluß ultrakurzer, periodischer elektrischer Pulse und zum anderen die Berechnung von Energien und Oszillatorstärken der Elemente Helium bis Eisen in extrem starken Magnetfeldern. Nach der physikalischen Modellbildung wurden die darauf angewendeten numerischen Verfahren in Programmcodes umgesetzt. Der Code für das Problem der Viel-Elektronen-Atome in extrem starken Magnetfeldern wurde parallelisiert.

Nach ausgiebigen Konvergenztests anhand bekannter Systeme der nichtrelativistischen Quantenmechanik stellte sich die B-Spline-Interpolation für die Methode der Finiten Elemente für Probleme, die durch gewöhnliche Differentialgleichungen beschrieben werden, als am effizientesten heraus. Partielle Differentialgleichungen wurden mit der Methode der Diskreten Variablen auf Systeme gewöhnlicher Differentialgleichungen umformuliert.

Zur Integration der zeitabhängigen Schrödingergleichung wurden verschiedene Zeitintegrationsverfahren untersucht. Dabei stellte sich in Verbindung mit der Methode der Finiten Elemente die Cayley-Approximation als am günstigsten heraus.

Die Untersuchung von Wasserstoff und Alkaliatomen unter Einfluß ultrakurzer elektrischer Pulse wird durch die Eigenschaften des klassischen Systems motiviert. Klassisch läßt sich ein Zusammenhang zwischen Ionisierungswahrscheinlichkeit in Abhängigkeit von der Pulsfrequenz und regulärer Phasenraumstrukturen herstellen. Bei der dreidimensionalen quantenmechanischen Behandlung zeigt

ein Vergleich zwischen klassisch und quantenmechanisch berechneter Ionisationswahrscheinlichkeit nur eine geringe Ähnlichkeit.

In bereits veröffentlichten Arbeiten, in denen mit eindimensionalen quantenmechanischen Modellen beim gekickten Wasserstoffatom Quantenlokalisierung nachgewiesen werden konnte, blieb die Frage offen, ob sich auch bei einer dreidimensionalen Behandlung Quantenlokalisierung einstellt [Yoshida et al. 2000a]. Mit den Methoden der vorliegenden Arbeit konnte diese Frage positiv beantwortet werden [Klews, Schweizer 2001].

Hinsichtlich experimenteller Untersuchungen des gekickten Wasserstoffs und ähnlicher Systeme wurde untersucht, wie genau die Periodizität der elektrischen Pulse eingehalten werden muß, um noch eine Übereinstimmung mit idealisierten Modellen zu erzielen. Da sich Experimente bequemer mit Alkaliatomen als mit Wasserstoff durchführen lassen, stellt sich die Frage, inwieweit sich das Verhalten des gekickten Wasserstoffs in gekickten Alkaliatomen wiederfindet. Es zeigt sich, daß sich die Dynamik in Parameterbereichen, in denen Resonanzen auftreten, bereits durch die geringen Quantendefekte Lithiums deutlich unterscheidet.

Bei der Untersuchung von Wasserstoff mit ultrakurzen, periodischen, alternierenden elektrischen Pulsen zeigt sich ebenfalls, daß sich die klassisch vorhandenen regulären Phasenraumstrukturen nicht sichtbar in der quantenmechanisch berechneten Ionisationswahrscheinlichkeit niederschlagen.

Eine Sequenz von zeitlich zufallsverteilten Pulsen mit variierender Pulsintensität kann als Modell für die Elektronen-Dynamik in Atomen, mit denen Festkörperoberflächen beschossen werden, dienen. Für die Ionisierungswahrscheinlichkeit ist nach einer größeren Zahl von Pulsen im Wesentlichen nur die Anzahl der Pulse maßgebend und nicht die Details der zufälligen Pulsfolge.

Zur Lösung des Problems von Viel-Elektronen-Atomen in extrem starken Magnetfeldern wurden die Hartree-Fock-Gleichungen in adiabatischer Näherung mit der Methode der Finiten Elemente gelöst. Um die zur Modellierung von Neutronensternatmosphären notwendigen zahlreichen Daten atomarer Übergänge effizient berechnen zu können, wurde der Programmcode parallelisiert und der Zusammenhang zwischen Performance und Genauigkeit in Verbindung mit der Anzahl der finiten Elemente herausgearbeitet. Die Genauigkeit der Energien und Oszillatorstärken wurde, soweit vorhanden, mit Literaturwerten verglichen. Exemplarisch wurden einige Daten von Grund- und Anregungszuständen von Kohlenstoff, Silizium, Eisen und Eisenionen berechnet.

Für das Problem des gekickten Wasserstoffs und die in dieser Arbeit behandelten verwandten Systeme steht eine systematische Untersuchung mit noch höherer Anregung der Ausgangszustände, für die man aufgrund des Korrespondenzprin-

---

zips eine bessere Übereinstimmung mit den klassischen Eigenschaften erwartet, noch aus. Es ist zwar mit den vorgestellten Diskretisierungsverfahren prinzipiell möglich, Systeme mit noch höherer Anregung zu berechnen, der numerische Aufwand für umfangreiche Parameterstudien ist dabei jedoch aufgrund des großen Integrationsradius und der entsprechend hohen Anzahl finiter Elemente beträchtlich.

Der Programmcode erlaubt das Zuschalten eines statischen, zu den elektrischen Pulsen parallelen Magnetfelds. Damit könnte untersucht werden, ob dieses Feld einen stabilisierenden Einfluß auf die gekickten Atome hat. Dieses System hat bislang keinen Eingang in die Literatur gefunden.

Im Hartree-Fock-Code zur Berechnung atomarer Daten in Neutronensternmagnetfeldern sollten höhere Landauniveaus miteinbezogen werden, da insbesondere für die Berechnung der Wellenfunktionen kernnaher Elektronen schwerer Elemente aufgrund der adiabatischen Näherung nur eine mäßige Genauigkeit zu erwarten ist. Außerdem kann damit der berechenbare Magnetfeldbereich vergrößert werden. Mit der Formulierung des Problems im Rahmen eines Multikonfigurationsansatzes wurde bereits begonnen.

Wünschenswert ist auch eine Automatisierung der Wahl der Startwellenfunktionen des Iterationsverfahrens, damit es möglich ist, ohne Kontrolle der Zwischenergebnisse eine große Menge an atomaren Übergängen zu berechnen.

# Literaturverzeichnis

- [Anderson 1958] Anderson P.W., Phys. Rev. **109**, 1492 (1958)
- [Askar,Cakmak 1978] Askar A., Cakmak S., J. Chem. Phys. **68**, 2794 (1978)
- [Bathe 1986] Bathe K.J., FINITE-ELEMENT-METHODEN, Springer-Verlag Berlin (1986)
- [Bayfield, Koch 1974] Bayfield J.E., Koch P.M., Phys. Rev. Lett. **33**, 258 (1974)
- [Becker, Aschenbach 2002] Becker W., Aschenbach B., Proceedings of the 270. WE-Heraeus Seminar on Neutron Stars, Pulsars and Supernova Remnants, Jan21-25, Physikzentrum Bad Honnef, Preprint (astro-ph/0208466)
- [Bethe,Salpeter 1957] Bethe H.A., Salpeter E.E., QUANTUM MECHANICS OF ONE- AND TWO-ELECTRON ATOMS, Springer-Verlag Berlin (1957)
- [Blümel, Smilansky 1984] Blümel R., Smilansky U., Phys. Rev. A **30**, 1040 (1984)
- [Braun et al. 1993] Braun M., Schweizer W., Herold H., Phys. Rev. A **48**, 1916 (1993)
- [Burgdörfer 1989] Burgdörfer J., Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B **42**, 500 (1989)
- [Canuto,Kelly 1972] Canuto V., Kelly D.C., Astrophys. Space Sci. **17**, 277 (1972)
- [Carnegie 1984] Carnegie A., J. Phys. B **17**, 3435 (1984)
- [Casati et al. 1994] Casati G., Guarneri I., Mantica G., Phys. Rev. A **50**, 5018 (1994)
- [Casati et al. 1997] Casati G., Chirikov B.V., Izraelev F.M., Ford J., Lect. Notes. Phys. **93**, 334 (1997)

- 
- [Casati et al. 1987] Casati G., Chirikov B.V., Shepelyanski D.L., Guarneri I., Phys. Rep. **154**, 77 (1987)
- [Dhar et al. 1983] Dhar A.K., Nagaranjan M.A., Izrailev F.M., Whitehead R.R., J. Phys. B **16**, L17 (1983)
- [Faßbinder,Schweizer 1996] Faßbinder P., Schweizer W., Phys. Rev. A **53**, 2135 (1996)
- [Faßbinder 1997] Faßbinder P., DISKRETISIERUNGSVERFAHREN ZUR UNTERSUCHUNG VON ATOMEN IN ÄUSSEREN FELDERN WEISSER ZWERGSTERNE UND DER DYNAMIK VON WELLENPAKETEN,Dissertation, Tübingen (1997)
- [Fishman et al. 1982] Fishman S., Gempel D.R., Prange R.E., Phys. Rev. Lett. **49**, 509 (1982)
- [Flügge 1971] Flügge S., PRACTICAL QUANTUM MECHANICS, Springer-Verlag Berlin (1971)
- [Frey et al. 1999] M. T. Frey, F. B. Dunning, C. O. Reinhold, S. Yoshida, J. Burgdörfer, Phys. Rev. A **59**, 1434 (1999)
- [Friedrich, Wintgen 1989] Friedrich H., Wintgen D., Phys. Rep. **183**, 37 (1989)
- [Friedrich 1990] Friedrich H., THEORETISCHE ATOMPHYSIK, Springer-Verlag Berlin (1990)
- [Fröhlich 1998] Fröhlich M., EXPONENTIELLE INTEGRATOREN, Diplomarbeit, Tübingen (1998)
- [Froeschlé 1972] Froeschlé C., Atron. Astrophys. **16**, 172 (1972)
- [Gardiner et al. 1997] Gardiner S.A., Cirac J.I., Zoller P., Phys. Rev. Lett. **79**, 4790 (1997)
- [Grozdanov, Taylor 1987] Grozdanov T.P., Taylor H.S., J. Phys. B **20**, 3683 (1987)
- [Hailey, Mori 2002] Hailey C.J., Mori K., ApJ **578**, L133 (2002)
- [Hanssen et al. 1979] Hanssen J., McCarrol R., Valiron P., J. Phys. B **12**, 899 (1979)

- [Hasagewa et al. 1989] Hasagewa H., Robnik M., Wunner G., Prog. Theor. Phys. **98**, 198 (1989)
- [Heller 1987] Heller E.J., Phys. Rev. A **35**, 1360 (1987)
- [Hillermeier et al. 1992] Hillermeier C.F., Blümel R., Smilansky U., Phys. Rev. A **45**, 3486 (1992)
- [Hochbruck et al.1997] Hochbruck M., Lubich C. , Selhofer H., SIAM J. Sci. Comput. **19**, 1552 (1997)
- [Jensen et al.1991] Jensen R.V., Susskind S.M., Sanders M.M., Phys. Rep. **201**, 1 (1991)
- [Jones 1985] Jones P.B., MNRAS **216**, 503 (1985)
- [Jones et al. 1999] Jones M.D., Ortiz G., Ceperly M.D., Phys. Rev. A **59**, 2875 (1999)
- [Jordan et al. 1998] Jordan S., Schmelcher P., Becken W., Schweizer W., Astron. Astrophys. **336**, L33 (1998)
- [Kien et al. 1998] Kien F.L., Midorikawa K., Suda A., Phys. Rev. A **58**, 3311 (1998)
- [Klews 1999] Klews M., UNTERSUCHUNG VON KOHÄRENTEN ZUSTÄNDEN UND RYDBERG-WELLENPAKETEN IN ÄUSSEREN FELDERN, Diplomarbeit, Tübingen 1999
- [Klews,Schweizer 2001] Klews M., Schweizer W., Phys. Rev. A **64**, 053403 (2001)
- [Kosloff,Kosloff 1983] Kosloff D., Kosloff R., J. Comp. Phys. **52** , 35 (1983)
- [Lai 2001] Lai D., Rev. Mod. Phys. **73**, 629 (2001)
- [Landau, Lifshitz 1960] Landau L.D., Lifshitz E.M., MECHANICS, Pergamon Press Oxford (1960)
- [Lehoucq et al.1996] Lehoucq R.B., Sorensen D.C., Yang C., 1996, ARPACK USERS GUIDE: SOLUTION OF LARGE SCALED EIGENVALUE PROBLEMS BY IMPLICITLY RESTARTED ARNOLDI METHODS

- 
- [Light et al.1985] Light J.C., Hamilton I.P., Lill J.V., J. Chem. Phys. **82**, 1400 (1985)
- [Lill et al.1982] Lill J.V., Parker G.A., Light J.C., Chem. Phys. Lett. **89**, 483 (1982)
- [Louden 1959] Louden, R., Am. J. Phys. **27**, 649 (1959)
- [Marsal 1989] Marsal D., FINITE DIFFERENZEN UND ELEMENTE, Springer-Verlag Berlin (1989)
- [Melezhik 1986] Melezhik V.S., J. Comp. Phys. **65**, 1 (1986)
- [Melezhik 1991] Melezhik V.S., J. Comp. Phys. **92**, 67
- [Melezhik 1993] Melezhik V.S., Phys. Rev. A **48**, 4528 (1993)
- [Melles et al. 1993] Melles M., Reinhold C.O., Burgdörfer J., Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B **79**, 109 (1993)
- [Mereghetti et al. 2002] Mereghetti S., De Luca A., Caraveo P.A., Becker W., Mignani R., Bignami G.F., ApJ im Druck, Preprint (astro-ph/0207296) (2002)
- [Miller,Neuhauser 1991] Miller M.C., Neuhauser D., MNRAS, 253, 107 (1991)
- [Mori,Hailey 2002] Mori K., Hailey C.J., Apj **564**, 914 (2002)
- [Neuhauser et al. 1986] Neuhauser D., Langanke K., Koonin S.E., Phys. Rev. A **33**, 2084 (1986)
- [Nikiforov et al. 1991] Nikiforov A.F., Suslov S.K., Uvarov V.B., CLASSICAL ORTHOGONAL POLYNOMIALS OF A DISCRETE VARIABLE, Springer-Verlag, Heidelberg (1991)
- [Oevel 1996] Oevel W., EINFÜHRUNG IN DIE NUMERISCHE MATHEMATIK, Spektrum Akademischer Verlag Heidelberg (1996)
- [Ott 1993] E. Ott, CHAOS IN DYNAMICAL SYSTEMS, Cambridge University Press, New York (1993)
- [Pavlov et al. 2002] Pavlov G.G., Zavlin V.E., Sanwal D., Preprint (astro-ph/0206024) (2002)

- [Persson et al. 2002] Persson E., Yoshida S., Tong X., Reinhold C.O., Burgdörfer J., Phys. Rev. A **66**, 043407 (2002)
- [Pröschel 1982] Pröschel P., HARTREE-FOCK-RECHNUNGEN AN ATOMEN IN EXTREM STARKEN FELDERN, Dissertation, Nürnberg (1982)
- [Rajagopal et al. 1997] Rajagopal M., Romani R.W., Miller M.C., ApJ **479**, 347 (1997)
- [Ram-Mohan et al. 1990] Ram-Mohan L.R., Saigal S., Dossa D., Shertzer J., Comput. Phys. **4**, 50 (1990)
- [Reinhold et al. 1997] Reinhold C.O., Burgdörfer J., M. T. Frey, F. B. Dunning, Phys. Rev. Lett. **79**, 5226 (1997)
- [Ruder et al. 1994] Ruder H., Wunner G., Herold H., Geyer F., ATOMS IN STRONG MAGNETIC FIELDS, Springer-Verlag Berlin Heidelberg (1994)
- [Sanwal et al. 2002] Sanwal D., Pavlov G.G., Zavlin V.E., Teter M.A., ApJ **574**, L61 (2002)
- [Schiff,Snyder 1939] Schiff L.I., Snyder H., Phys. Rev. **55**, 59 (1939)
- [Schweizer 1995] Schweizer W., DAS DIAMAGNETISCHE WASSERSTOFFATOM: EIN BEISPIEL FÜR CHAOS IN DER QUANTENMECHANIK, Deutsch-Verlag, Frankfurt a.M. (1995)
- [Schweizer,Jans 1998] Schweizer W., Jans W., Phys. Rev. A **57**, 1186 (1998)
- [Schweizer 2001] Schweizer W., NUMERICAL QUANTUM DYNAMICS, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht (2001)
- [Shertzer 1989] Shertzer J., Phys. Rev. A **39**, 3833 (1989)
- [Shertzer et al. 1989] Shertzer J., Ram-Mohan L.R., Dossa D., Phys. Rev. A **40**, 4777 (1989)
- [Stiefel,Scheifele 1971] Stiefel E.L., Scheifele G., LINEAR AND REGULAR CELESTIAL MECHANICS, Springer, New York (1971)
- [Tannian et al. 2000] Tannian B.E., Stokely C.L., Dunning F.B., Reinhold C.O., Yoshida S., Burgdörfer J., Phys. Rev. A **62**, 043402 (2000)

- 
- [Thurner et al. 1993] Thurner G., Körbel H., Braun M., Herold H., Ruder H., Wunner G., J. Phys. B **26**, 4719 (1993)
- [Trümper et al. 1977] Trümper J., Pietsch W., Reppin C., Voges W., Staubert E., Kenziorra E., ApJ **219** L105-110 (1978)
- [Yoshida et al. 1999a] Yoshida S., Watanabe S., Reinhold C.O., Burgdörfer J., Phys. Rev. A **60**, 1113 (1999)
- [Yoshida et al. 1999b] Yoshida S., Reinhold C.O., Kristöfel P., Burgdörfer J., Watanabe S., Dunning F.B., Phys. Rev. A **59**, R4121 (1999)
- [Yoshida et al. 2000a] Yoshida S., Reinhold C.O., Kristöfel P., Burgdörfer J., Phys. Rev. A **62** 023408
- [Yoshida et al. 2000b] Yoshida S., Reinhold C.O., Burgdörfer J., Phys. Rev. Lett. **84** 2602 (2000)
- [Zienkiewicz 1984] Zienkiewicz O.C., METHODE DER FINITEN ELEMENTE, Carl Hanser Verlag, München (1984)



# Lebenslauf

Matthias Klews, geboren am 7.5.1970 in Esslingen a.N.

8/1976–7/1981	Grund- und Hauptschule in Ostfildern-Nellingen
8/1981–7/1987	Realschule Nellingen
8/1987–5/1990	Technisches Gymnasium in Esslingen-Zell Abschluß: Allgemeine Hochschulreife
10/1990–9/1991	Wehrdienst
10/1991–3/1999	Studium der Physik an der Universität Tübingen Abschluß: Diplom-Physiker
8/1999–7/2003	Dissertation über das Thema „Diskretisierungsverfahren zur Untersuchung von Atomen in zeitabhängigen elektrischen Feldern und in extrem starken Magnetfeldern“ am Institut für Astronomie und Astrophysik der Universität Tübingen unter Anleitung von Prof. Dr. H. Ruder

## Beschäftigungen:

8/1998–7/1999	Wissenschaftliche Hilfskraft an der Universität Tübingen
8/1999–12/2000	Wissenschaftlicher Angestellter an der Universität Tübingen
3/2001–4/2001	Wissenschaftliche Hilfskraft an der Universität Tübingen
seit Juli 2001	Wissenschaftlicher Angestellter an der Universität Tübingen

## Akademische Lehrer:

M. Baumann, K. Bräuer, H. Clement, W. Dittrich, H. Fischer, K.-H. Gaukler, F. Gönnenwein, W.-D. Hartmann, F. Hasselbach, R. Hübener, E. Kendziorra, O. Lutz, H. Mauder, H. Pfister, E. Plies, H. Ruder, W. Schweizer, R. Staubert, J. Strähle, G. Wagner, G. Wunner