

**TECHNISCHE
UNIVERSITÄT
DRESDEN**

Klassische und quantenmechanische Beschreibung von Singularitäten in der Verteilung der Zeitverzögerung von 2D-Streusystemen

Diplomarbeit
zur Erlangung des wissenschaftlichen Grades
Diplom-Physiker

vorgelegt von

Stefan Majewsky
geboren am 06.11.1989 in Schwerin

Institut für Theoretische Physik
Fachrichtung Physik
Fakultät für Mathematik und Naturwissenschaften
Technische Universität Dresden

2012

Eingereicht am 20. Februar 2012

1. Gutachter: Prof. Dr. Roland Ketzmerick
2. Gutachter: Prof. Dr. Holger Schanz

Zusammenfassung

Die Zeitverzögerung bei der Streuung in zwei Dimensionen ist eine Funktion von zwei unabhängigen Parametern. Wenn diese Funktion Sattelpunkte aufweist, so hat der entsprechende Funktionswert theoretisch ein unendlich großes Gewicht in der Wahrscheinlichkeitsverteilung der Zeitverzögerungen. Dieser Zusammenhang soll analytisch und numerisch nachgewiesen und detailliert beschrieben werden.

Insbesondere soll die klassische und quantenmechanische Wahrscheinlichkeitsverteilung der Zeitverzögerung für ein Modellsystem aus mehreren nichtüberlappenden zentralsymmetrischen Potentialen berechnet werden. Erwartete Ergebnisse sind Aussagen über die Parameterwerte, bei denen der oben genannte Effekt zu beobachten ist sowie Näherungsformeln für die Verteilung der Zeitverzögerung in der Nähe der Singularitäten. Außerdem soll die quantenmechanisch zu erwartende Glättung der Verteilungsfunktion quantitativ beschrieben werden.

Abstract

For scattering problems in two dimensions, time-delay is a function of two independent parameters. If this function features saddle points, the corresponding function value should theoretically have an infinite weight in the probability distribution of time-delays. This correlation shall be confirmed analytically and numerically and studied in-depth.

In particular, the classical and quantum-mechanical probability distribution of time-delays shall be calculated for a model system consisting of multiple non-overlapping potentials with rotational symmetry. We expect to obtain information about the parameter values where the aforementioned effects can be observed, and analytical approximations for the time-delay distribution near the singularities. Furthermore, the smoothing of the distribution in the quantum-mechanical regime shall be quantified.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Zeitverzögerung in klassischen Streusystemen	5
2.1	Definition durch die Wirkung	6
2.2	Geometrisch motivierte Definitionen	7
2.2.1	Eigentliche Zeitverzögerung	7
2.2.2	Definition über retardierten Ort	8
2.2.3	Definition über Aufenthaltszeit	10
2.2.4	Numerische Bestimmung der Zeitverzögerung	12
2.3	Zeitverzögerungsfunktion und -verteilung	13
2.4	Rechenregeln	16
2.4.1	Koordinatensystemwechsel	16
2.4.2	Verkettung	17
3	Klassische Modellsysteme	19
3.1	Harte Scheibe	19
3.2	Verschobene harte Scheibe	20
3.2.1	Verhalten in der Umgebung von stationären Punkten	22
3.3	Weiches Scheibenpaar	24
3.3.1	Sattelpunkte	24
3.3.2	Extrempunkte	27
3.3.3	Zusammenfassung	29
4	Quantenmech. Zeitverzögerung	31
4.1	Quantisierung der klassischen Definition	31
4.1.1	Definition über Aufenthaltszeit	31
4.1.2	Wigner-Smith-Matrix	32
4.1.3	Numerische Umsetzung	33
4.2	Einheitenlose Formulierung	33
4.3	Gegenüberstellung von Zeitentwicklungsmethoden	35
4.4	Split-Operator-Methode	35
4.4.1	Parameterwahl	38
4.4.2	Zur Abschätzung des systematischen Fehlers	39

4.5	Unterdrückung der periodischen Randbedingung	40
4.6	Harte Potentiale	41
5	Quantenmechanische Modellsysteme	47
5.1	Stationäre Punkte	47
5.2	Unschärfefeffekte	49
5.3	Numerische Ungenauigkeiten	50
5.3.1	Skalierungsverhalten der numerischen Methoden	52
5.4	Zusammenfassung der Ergebnisse	54
6	Zusammenfassung und Ausblick	55
Anhang		57
A	Verhalten der Verteilung einer Funktion in der Nähe stationärer Punkte	57
A.1	Umgebung eines Sattelpunktes	57
A.2	Umgebung eines Extremums	59
B	Zeitverzögerung für das weiche Scheibenpaar	61
	Abbildungsverzeichnis	65
	Literaturverzeichnis	67

1 Einleitung

Die Dynamik physikalischer Prozesse wird in allen Größenordnungen, vom Standardmodell der Teilchenphysik [1] bis hin zu den Bahnen von Himmelskörpern [2], durch Wechselwirkungen bestimmt. Deren wohl reinste Form ist der *Streuprozess* [3], die zeitlich begrenzte Wechselwirkung zweier physikalischer Strukturen. Der Begriff der „Streuung“ ergibt sich, da die offensichtlichste Konsequenz einer solchen Interaktion meist eine Änderung der Bewegungsrichtung der Wechselwirkungspartner ist.

Nicht zuletzt aufgrund der guten Anschaulichkeit wurde die Orts- und Richtungsabhängigkeit von Streuprozessen intensiv untersucht und ist mittlerweile gut verstanden. Der *Wirkungsquerschnitt* zum Beispiel, der anschaulich als Maß für die Fläche aufgefasst werden kann, die ein Streupartner dem anderen entgegenstellt, bildet die Grundlage für die Ableitung von Interaktionswahrscheinlichkeiten in der Teilchenphysik[4].

Das Streueignis beeinflusst die Bewegung der Streupartner aber auch in Hinblick auf die Zeitkoordinate. Am anschaulichsten ist dies, wenn die Wechselwirkung anziehend wirkt, so dass beide Partner zumindest für eine gewisse Zeit aneinander gebunden werden. Ohne die Wechselwirkung wäre die Fortbewegung der Streupartner nicht durch diese Bindung verzögert worden; es ist also eine *Zeitverzögerung* [5, 6] aufgetreten. Umgekehrt führt eine abstoßende Wechselwirkung dazu, dass sich der Abstand beider Streupartner nach der initialen Annäherung schneller vergrößert als ohne die Wechselwirkung. In diesem Falle ist die Zeitverzögerung negativ.

In der vorliegenden Arbeit soll die Abhängigkeit der Zeitverzögerung von den Anfangsbedingungen der Trajektorien der Streupartner untersucht werden. Solche Untersuchungen wurden bereits früher durchgeführt, insbesondere für chaotische Streusysteme, also solche Systeme, in denen geringe Änderungen der Anfangsbedingungen zu deutlichen Änderungen der Streudynamik führen. Chaotische Streuung kann in einer Vielzahl von Systemen beobachtet werden und ist deswegen sowohl für Experimente gut zugänglich [7] als auch für praktische Anwendungen relevant; siehe hierzu die Zusammenstellungen [8, 9]. In Streusystemen mit chaotischer Dynamik können sich unendliche Zeitverzögerungen ergeben, wenn die Streutrajektorien sich beliebig nahe an einen im System gefangenen Orbit annähern können [10]. Im Allgemeinen ergibt sich für die Zeitverzögerung T eine asymptotisch exponentielle Verteilung [10, 11, 12] der Form

$$P(T \rightarrow \infty) \sim e^{-\gamma \cdot T}.$$

Für reguläre Streusysteme folgt hingegen i. A. eine polynomielle Abhängigkeit [13, 14]

$$P(T \rightarrow \infty) \sim T^{-\alpha}.$$

Dieser Zusammenhang kann natürlich nur gelten, wenn die Zeitverzögerung nach oben unbeschränkt ist. Es muss also Trajektorien geben, die sich beliebig lange im Streusystem aufhalten. Dies ist z. B. in Kavitäten der Fall, in welchen der Streubereich durch eine fast geschlossene Potentialbarriere begrenzt ist. Manche Trajektorien können sich in diesem Bereich sehr lange aufhalten, ohne auf einen Ausgang aus dem Bereich zu treffen. In dieser Arbeit sollen jedoch Streupotentiale mit regulärer Dynamik betrachtet werden, in denen die Zeitverzögerung nach oben beschränkt ist.

In räumlich beschränkten quantenmechanischen Systemen können Streuechos, also periodische Strukturen in der Zeitverzögerungsverteilung, entstehen, wenn Teile des Wellenpaketes im Streusystem gefangen werden [15, 16]. Eine phänomenologisch ähnliche Struktur, allerdings mit anderen Ursachen auf Grundlage klassischer Dynamik wurde von Prusty und Schanz [17] untersucht. Dabei bewegt sich ein Streuteilchen durch einen endlich großen drahtförmigen Leiter. Die Passage des Teilchens durch die Endflächen des Leiters definiert absolute Grenzen für die Interaktion des Teilchens mit dem Leiter. Es genügt somit, statt der relativ (zur freien Bewegung) definierten Zeitverzögerung die absolut definierte *Passagezeit* des Teilchens durch den Leiter zu betrachten.

Das in Referenz [17] betrachtete System ist in Abb. 1.1a beispielhaft dargestellt. Teilchen können sich in- und außerhalb des Leiters frei bewegen, werden aber an den Leiterwänden elastisch reflektiert. Außerdem bewegen sich die geladenen Teilchen innerhalb des Leiters unter dem Einfluss eines Magnetfeldes, also auf Kreisbahnen. Jedem Teilchen kann eine Passagezeit durch den Leiter zugeordnet werden. Bei Betrachtung einer großen Anzahl von Teilchen mit einer gewissen Verteilung von Anfangsbedingungen (parametrisierbar z. B. durch die y -Koordinate

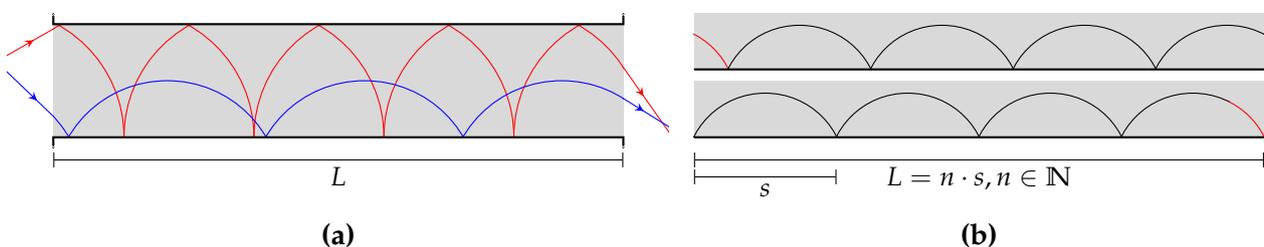


Abbildung 1.1: Trajektorien in einem zweidimensionalen Draht: (a) Innerhalb des Drahtes der Länge L (grau hinterlegt) bewegen sich geladene Streuteilchen (farbige Trajektorien) unter dem Einfluss eines senkrecht zur Darstellungsebene gerichteten Magnetfeldes. (b) Für Trajektorien, deren Periodenlänge s ein Teiler der Drahtlänge L ist, können durch Abschneiden eines Stückes beliebiger Länge (rot) und Anfügen dieses Stückes am anderen Ende der Trajektorie unendlich viele neue Trajektorien im selben Draht konstruiert werden, mit gleicher Passagezeit, aber unterschiedlichen Anfangsbedingungen.

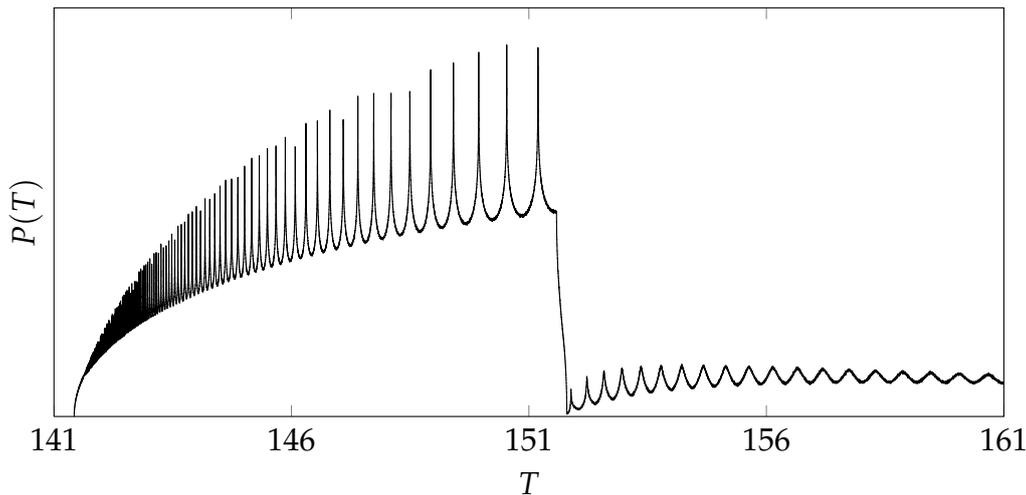


Abbildung 1.2: Beispiel einer Passagezeitverteilung für das in 1.1 beschriebene Drahtsystem: Auf einem glatten Grundverlauf finden sich in regelmäßigen Abständen Pulse. Die Peaks links der Sprungstelle sind logarithmische Singularitäten, deren Auftreten sich durch stationäre Punkte in der zugrundeliegenden Passagezeitfunktion $T(y, \phi)$ erklären. Die Peaks rechts der Sprungstelle resultieren aus dem in Abb. 1.1b beschriebenen systemspezifischen Verhalten.

und die Impulsrichtung ϕ bei Eintritt in den Leiter) ergibt sich somit eine Verteilung von Durchlaufzeiten.

Diese Verteilung zeigt eine ausgeprägte Pulsstruktur. Anstelle einer gleichmäßigen Verteilung der Durchlaufzeiten häufen sich diese bei mehreren Zeitpunkten. Dies wurde auf zwei Effekte zurückgeführt: Einerseits können für bestimmte Trajektorien, deren Periodenlänge ein Teiler der Leiterlänge ist, unendlich viele andere Trajektorien mit identischer Durchlaufzeit gefunden werden (vgl. Abb. 1.1b). Andererseits treten in der Zeitverzögerungsfunktion $T(y, \phi)$ stationäre Punkte auf, die in der Verteilung zu logarithmischen Singularitäten führen, also zu unendlicher Wahrscheinlichkeit einzelner endlicher Zeitverzögerungen.

Der erste Effekt ist spezifisch für das betrachtete System, der zweite jedoch resultiert aus der konkreten Form der Zeitverzögerungsfunktion, die die Verteilung erzeugt. Entsprechend sollten logarithmische Singularitäten auch in den Zeitverzögerungsverteilungen von anderen Arten von Systemen auffindbar sein.

In dieser Arbeit wird zur Prüfung dieser Hypothese die Zeitverzögerung einfacher Streusysteme betrachtet. Hierbei wird von besonderem Interesse sein, dass die Zeitverzögerung i. A. keine global definierte Größe ist, sondern von der Wahl des Koordinatensystems abhängig sein kann. Das Streuszenario besteht im klassischen Fall aus punktförmigen Testteilchen, die mit einem räumlich begrenzten Streupotential interagieren. Damit Berechnungen möglichst analytisch durchgeführt werden können, werden sehr einfache Potentiale betrachtet, zusammengesetzt aus ein oder zwei scheibenförmigen Bereichen konstanter Potentialhöhe. Es wird sich zeigen, dass die gesuchten logarithmischen Singularitäten beobachtet werden können. Allerdings ist die Ableitung der Zeitverzögerungsverteilung schon bei einfachsten Systemen nicht mehr analytisch möglich.

In Referenz [17] wurde nur die klassische Dynamik untersucht. Ein Schwerpunkt der Betrachtung soll daher in dieser Arbeit insbesondere die klassisch-quantenmechanische Korrespondenz sein. Hierzu wird die Definition der Zeitverzögerung quantisiert und auf Wellenpakete angewendet, deren Interaktion mit einem Streupotential durch die Split-Operator-Methode [18] numerisch abgeschätzt wird. Diese Berechnungen führen auch auf logarithmische Singularitäten, die mit dem klassischen Falle verglichen werden können.

Die Betrachtungen beginnen in Kapitel 2 mit der Einführung des Begriffes der Zeitverzögerung für klassische Streutrajektorien und der Ableitung grundlegender Rechenregeln. Danach werden in Kapitel 3 die Zeitverzögerungsverteilungen für zwei Modellsysteme berechnet und diskutiert. In den Kapiteln 4 und 5 werden diese Betrachtungen schließlich auf das quantenmechanische Regime übertragen, wobei das besondere Interesse auf der numerischen Bestimmung der Zeitverzögerung liegt.

2 Zeitverzögerung in klassischen Streusystemen

Im Folgenden werden ausschließlich zweidimensionale Systeme ($\mathbf{q}, \mathbf{p} \in \mathbb{R}^2$) betrachtet. Die Hamilton-Funktion eines klassischen Streusystems

$$H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = H_0(\mathbf{p}) + V(\mathbf{q}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{q}) \quad (2.1)$$

wird durch das räumlich begrenzte Streupotential $V(\mathbf{q})$ beschrieben. Die konkrete Beschreibung der räumlichen Beschränktheit des Streupotentials ist dabei von der Fragestellung abhängig. Manchmal wird nur für große $|\mathbf{q}|$ ein asymptotisches Abfallen schneller als $1/q$ gefordert, sodass langreichweitige Potentiale wie Gravitations- oder elektromagnetische Wechselwirkungen ausgeschlossen werden. Für die folgenden Betrachtungen wird

$$V(\mathbf{q}) = 0 \quad \forall |\mathbf{q}| \geq R \quad (2.2)$$

gefordert. Das heißt, dass das Potential in einem kreisförmigen Bereich der Ausdehnung R um $\mathbf{q} = 0$ lokalisiert [19]. Der Radius R ist nicht eindeutig definiert. Vielmehr sind alle Werte über einem von der Form des Potentials bestimmten Radius R_0 zulässig. Diese Wahlfreiheit wird im klassischen Fall keine Rolle spielen, im quantenmechanischen Fall hingegen von großer Bedeutung für die Definition der Zeitverzögerung sein.

Der Bereich $I(R) = \{\mathbf{q} : |\mathbf{q}| < R\}$ wird im Folgenden als *Interaktionsbereich* bezeichnet. Abbildung 2.1 zeigt verschiedene Möglichkeiten zur Wahl des Interaktionsbereiches für ein Dreis-

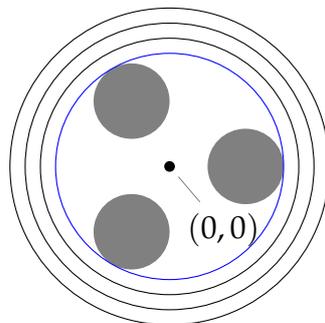


Abbildung 2.1: Definition des Interaktionsbereiches: Für ein Dreischeiben-Billardpotential (grau) können verschiedene mögliche Interaktionsbereiche (schwarz berandet) definiert werden, insbesondere der kleinstmögliche Interaktionsbereich (blau berandet).

Scheiben-Billard. Da das Potential auf den Interaktionsbereich beschränkt ist, können klassische Teilchen sich außerhalb des Interaktionsbereiches frei bewegen. Somit lassen sich Streutrajektorien in drei Abschnitte unterteilen:

- eine einlaufende freie Bewegung, die auf den Interaktionsbereich hinführt,
- eine im Allgemeinen nichtintegrale Bewegung innerhalb des Interaktionsbereiches und
- eine auslaufende freie Bewegung, die vom Interaktionsbereich wegführt.

Hiervon ausgenommen sind diejenigen Trajektorien, die den Interaktionsbereich nicht durchqueren. Aus der Energieerhaltung folgt ein Impulserhaltungssatz

$$|\mathbf{p}_e| = |\mathbf{p}_a| \quad (2.3)$$

zwischen den freien Anteilen der Streutrajektorie. Die Notationen \square_e und \square_a stehen dabei für Größen, die zum ein- bzw. auslaufenden Anteil einer Trajektorie gehören.

Im weiteren Verlauf dieses Kapitels werden verschiedene Definitionen der Zeitverzögerung in klassischen Streuproblemen vorgestellt und bzgl. ihrer Anwendbarkeit auf numerische sowie analytische Verfahren bewertet. Um ein Gefühl für das Verhalten dieser Definition zu erhalten, soll die Zeitverzögerung für ein einfaches Beispielsystem berechnet werden. Es ist besonders instruktiv, hierfür ein verschwindendes Streupotential $V = 0$ zu wählen, um die intuitive Erwartung zu prüfen, dass in einem solchen System mangels beschleunigender oder verzögernder Einflüsse die Zeitverzögerung für alle Streutrajektorien verschwinden sollte. Nach der Einführung der verschiedenen Definitionen werden noch einige allgemeine Rechenregeln für die Zeitverzögerung abgeleitet, die dann auf konkrete Systeme angewendet werden.

2.1 Definition durch die Wirkung

In Referenz [20] wird die Zeitverzögerung über die reduzierte Wirkung

$$A = - \int d\mathbf{p} \cdot \mathbf{q} = - \int dt \dot{\mathbf{p}}(t) \cdot \dot{\mathbf{q}}(t) \quad (2.4)$$

eingeführt. Obwohl die zugehörige Streutrajektorie über unendliche Zeitbereiche verläuft, ist diese Wirkung wohl definiert, da sich der Impuls nur für eine begrenzte Zeit innerhalb des Interaktionsbereiches ändert. Die Zeitverzögerung ergibt sich dann zu

$$T_{\text{action}} = \frac{\partial A}{\partial E}. \quad (2.5)$$

Diese Gleichung ist wie folgt zu lesen: Die Wirkung A hängt von den Anfangsbedingungen der Streutrajektorie ab. Diese Anfangsbedingungen werden so parametrisiert, dass die Energie E des Streuteilchens ein unabhängiger Parameter ist (siehe Abschnitt 2.3). Der Index an T dient

nur dazu, im Rahmen dieser Zusammenstellung die verschiedenen Definitionen der Zeitverzögerung zu unterscheiden.

Dass T_{action} für $V = 0$ verschwindet, folgt aus $A = 0$ wegen $p = \text{const}$. Diese Definition wird in dieser Arbeit nicht angewendet, weil die Energieableitung für numerische Anwendungen unhandlich ist und für die benötigten analytisch-geometrischen Ableitungen besser angepasste Formulierungen existieren. Diese werden im nächsten Abschnitt vorgestellt.

2.2 Geometrisch motivierte Definitionen

2.2.1 Eigentliche Zeitverzögerung

Für die Definition der eigentlichen Zeitverzögerung¹ betrachtet man eine Durchquerungszeit $t_a - t_e$, während welcher sich ein Teilchen unter Interaktion mit dem Streupotential von dem Ort $\mathbf{q}_e = \mathbf{q}(t_e)$ nach $\mathbf{q}_a = \mathbf{q}(t_a)$ bewegt. Diese Zeit vergleicht man mit der Zeit $t_0(\mathbf{q}_e, \mathbf{q}_a)$, die das Teilchen benötigt, um sich ausschließlich unter dem Einfluss der freien Hamilton-Funktion H_0 von \mathbf{q}_e zum Koordinatenursprung und von dort nach \mathbf{q}_a zu bewegen (siehe Abb. 2.2). Indem man die Zeitpunkte t_a und t_e gegen $\pm\infty$ streben lässt, ist durch diese Zeitendifferenz eine Zeitverzögerung

$$T_{\text{proper}} := \lim_{\substack{t_e \rightarrow -\infty \\ t_a \rightarrow +\infty}} [(t_a - t_e) - t_0(\mathbf{q}_e, \mathbf{q}_a)] = \lim_{\substack{t_e \rightarrow -\infty \\ t_a \rightarrow +\infty}} \left[(t_a - t_e) - \frac{|\mathbf{q}_e| + |\mathbf{q}_a|}{v} \right] \quad (2.6)$$

eindeutig definiert. Hierbei ist $v = |\mathbf{p}_e|/m = |\mathbf{p}_a|/m$ die Geschwindigkeit des Testteilchens. Eine Ableitung dieser Darstellung aus T_{action} erfolgt in Referenz [8].

Zur Ableitung der Zeitverzögerung im potentialfreien Fall $V = 0$ sei die freie Trajektorie durch $\mathbf{q}(t) = \mathbf{q}_0 + \mathbf{v} \cdot t$ beschrieben, wobei t so gewählt ist, dass \mathbf{q}_0 der Punkt der Gerade ist, der

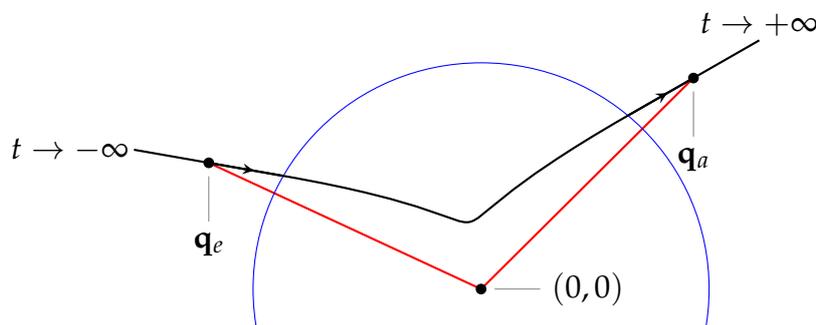


Abbildung 2.2: Die eigentliche Zeitverzögerung vergleicht die tatsächliche Trajektorie zwischen \mathbf{q}_e und \mathbf{q}_a (schwarz) mit einer Referenztrajektorie durch den Koordinatenursprung (rot). Der blaue Kreis ist der Interaktionsbereich, das Streupotential ist nicht dargestellt.

¹In der englischsprachigen Literatur ist die im Folgenden beschriebene Definition als „proper time delay“ bekannt; eine deutsche Übersetzung ist nicht bekannt. Im Folgenden wird die wörtliche Übersetzung als „eigentliche Zeitverzögerung“ sowie das Symbol T_{proper} verwendet.

am dichtesten am Koordinatenursprung liegt. Aufgrund dieser Wahl ist $\mathbf{q}_0 \perp \mathbf{v}$ und somit $\mathbf{q}^2(t) = \mathbf{q}_0^2 + \mathbf{v}^2 \cdot t^2$. In (2.6) eingesetzt ist

$$\begin{aligned} T_{\text{proper}} &= \lim_{t_e \rightarrow -\infty} \lim_{t_a \rightarrow \infty} \left[(t_a - t_e) - \sqrt{\mathbf{q}_0^2/\mathbf{v}^2 + t_e^2} - \sqrt{\mathbf{q}_0^2/\mathbf{v}^2 + t_a^2} \right] \\ &= \lim_{t_e \rightarrow -\infty} \lim_{t_a \rightarrow \infty} \left[(t_a - t_e) - \sqrt{t_e^2} - \sqrt{t_a^2} \right] = 0. \end{aligned}$$

Im Limes für große Zeiten wurde der konstante Term $\mathbf{q}_0^2/\mathbf{v}^2$ gegenüber $t_{e/a}^2$ vernachlässigt. Der Umweg, den die Referenztrajektorie gehen muss, um den Koordinatenursprung zu besuchen, wird anschaulich umso kleiner, je früher sie von der tatsächlichen Trajektorie abbiegt. Wie bei diesem Beispiel steht auch in anderen einfachen Fällen, etwa bei harten Potentialen ($V(\mathbf{q}) \in \{0, \infty\} \forall \mathbf{q}$, vgl. Abschnitt 4.6), die benötigte Durchlaufzeit in direktem Zusammenhang zur geometrischen Länge der Trajektorie.

Aufgrund ihrer guten Anschaulichkeit ist die eigentliche Zeitverzögerung, so wie alle in diesem Abschnitt vorgestellten geometrisch motivierten Definitionen der Zeitverzögerung, für analytische Rechnungen geeignet. Die Notwendigkeit des Überganges zu unendlichen Zeiten schränkt jedoch die Eignung für numerische Anwendungen stark ein.

2.2.2 Definition über retardierten Ort

Eine äquivalente Definition, die ohne Zeitlimites auskommt, wird von Narnhofer [19] beschrieben. Hierzu wird ein *retardierter Ort*

$$\bar{\mathbf{q}}(t) = \mathbf{q}(t) - \mathbf{v}(t) \cdot t \quad (2.7)$$

eingeführt, welcher für freie Bewegungen per Konstruktion eine Erhaltungsgröße ist. Den freien Anteilen einer Streutrajektorie können somit insbesondere zwei retardierte Orte $\bar{\mathbf{q}}_e$ und $\bar{\mathbf{q}}_a$ zugeordnet werden, deren Differenz als Ortsverschiebung durch die Streuung aufgefasst werden kann (vgl. Abb. 2.3).

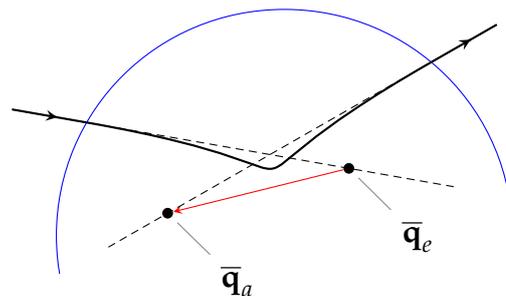


Abbildung 2.3: Die retardierten Orte der freien Anteile der Streutrajektorie beschreiben eine anschauliche Ortsverschiebung durch die Streuung (rot).

Narnhofer betrachtet den Anteil des retardierten Ortes, der parallel zum Impuls der freien Trajektorien steht, und gelangt zu einer grenzwertfreien Darstellung der Zeitverzögerung

$$T_N = \frac{\bar{\mathbf{q}}_e \cdot \mathbf{v}_e - \bar{\mathbf{q}}_a \cdot \mathbf{v}_a}{v^2}. \quad (2.8)$$

Wiederum ist $v = |\mathbf{v}_e| = |\mathbf{v}_a|$. T_N verschwindet im freien Fall $V = 0$, da dann die ein- und auslaufende Trajektorie zusammenfallen ($\bar{\mathbf{q}}_e = \bar{\mathbf{q}}_a$ und $\mathbf{v}_e = \mathbf{v}_a$).

Es soll gezeigt werden, dass die Definitionen (2.6) und (2.8) übereinstimmen. Hierfür definieren wir $\tau_e(R)$ und $\tau_a(R)$ als die Zeiten, zu denen die Trajektorie den Interaktionsbereich $I(R)$ betritt bzw. verlässt, und zeigen, dass beide Definitionen dieselbe Form annehmen, wenn sie durch $\tau(R) := \tau_a(R) - \tau_e(R)$ dargestellt werden. In

$$\begin{aligned} T_{\text{proper}} &= \lim_{t_e \rightarrow -\infty} \left(-t_e - \frac{|\mathbf{q}_e|}{v} \right) + \lim_{t_a \rightarrow \infty} \left(t_a - \frac{|\mathbf{q}_a|}{v} \right) \\ &= \tau(R) + \underbrace{\lim_{t_e \rightarrow -\infty} \left(\tau_e(R) - t_e - \frac{|\mathbf{q}_e|}{v} \right)}_{=: T_{\text{proper},e}} + \underbrace{\lim_{t_a \rightarrow \infty} \left(t_a - \tau_a(R) - \frac{|\mathbf{q}_e|}{v} \right)}_{=: T_{\text{proper},a}} \end{aligned} \quad (2.9)$$

ist die i. A. nichtintegrale Dynamik im Interaktionsbereich komplett in der Aufenthaltszeit $\tau(R)$ gekapselt. Die beiden hinteren Summanden beschreiben Beiträge zur Zeitverzögerung der freien Anteile der Streutrajektorie. Deren Berechnung soll hier nur für den auslaufenden Anteil ausgeführt werden; der einlaufende Anteil wird analog behandelt.

Gemäß Abb. 2.4 wird $T_{\text{proper},a}$ durch geometrische Größen dargestellt. Es gilt

$$\begin{aligned} T_{\text{proper},a} &= (t_a - \tau_a) - \frac{|\mathbf{q}_a|}{v} = \frac{|\mathbf{q}_a - \mathbf{q}(\tau_a)|}{v} - \frac{|\mathbf{q}_a|}{v} =: \frac{s_a - q_a}{v} \\ q_a &= s_a - v \cdot T_{\text{proper},a} \\ q_a^2 &= s_a^2 - 2s_a \cdot v \cdot T_{\text{proper},a} + v^2 \cdot T_{\text{proper},a}^2. \end{aligned} \quad (2.10)$$

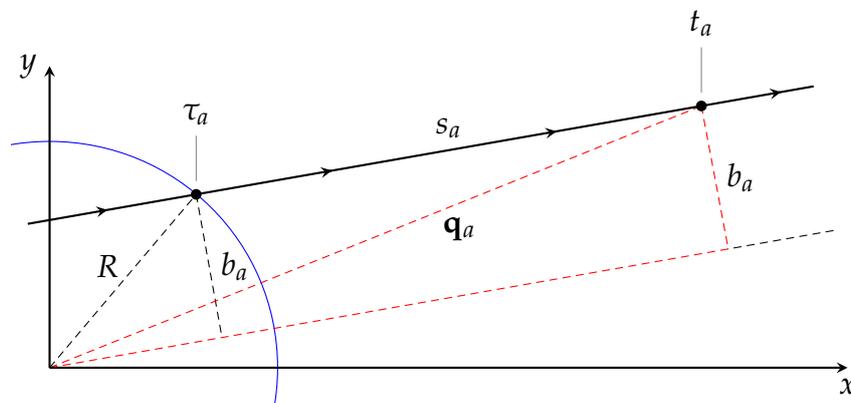


Abbildung 2.4: Skizze zum obigen Beweis: Durch die Punkte $\mathbf{q}(\tau_a)$ und $\mathbf{q}_a = \mathbf{q}(t_a)$ ist die Hilfsgröße s_a definiert. b_a ist der Streuparameter, R_a der Interaktionsradius.

In Abb. 2.4 ist q_a die Hypotenuse des rechtwinkligen roten Dreiecks; dessen Katheten sind $\sqrt{R^2 - b_a^2} + s_a$ und b_a . Somit gilt

$$q_a^2 = \left(\sqrt{R^2 - b_a^2} + s_a \right)^2 + b_a^2 = R^2 + 2s_a \cdot \sqrt{R^2 - b_a^2} + s_a^2. \quad (2.11)$$

Der Vergleich der Gleichungen (2.10) und (2.11) liefert

$$-2s_a \cdot v \cdot T_{\text{proper},a} + v^2 \cdot T_{\text{proper},a}^2 = R^2 + 2s_a \cdot \sqrt{R^2 - b_a^2}.$$

Mit $t_a \rightarrow \infty$ geht $s_a \rightarrow \infty$ und die Terme, die kein s_a enthalten, sind vernachlässigbar. Es verbleibt zunächst

$$T_{\text{proper},a} = -\frac{\sqrt{R^2 - b_a^2}}{v}$$

sowie nach analoger Rechnung für den einlaufenden Anteil schließlich

$$T_{\text{proper}} = \tau(R) - \frac{\sqrt{R^2 - b_e^2} + \sqrt{R^2 - b_a^2}}{v}. \quad (2.12)$$

Indem $\bar{\mathbf{q}}_{e/a}$ in (2.8) durch $\mathbf{q}(\tau_{e/a})$ dargestellt wird, kann die Narnhofer-Zeitverzögerung

$$T_N = \frac{[\mathbf{q}(\tau_e) - \mathbf{v}_e \tau_e] \cdot \mathbf{v}_e - [\mathbf{q}(\tau_a) - \mathbf{v}_a \tau_a] \cdot \mathbf{v}_a}{v^2} = \tau(R) - \frac{\mathbf{q}(\tau_e) \cdot \mathbf{v}_e}{v^2} + \frac{\mathbf{q}(\tau_a) \cdot \mathbf{v}_a}{v^2}$$

auf $\tau(R)$ zurückgeführt werden. Bis auf einen Faktor $1/v$ sind die zwei letzten Terme die Komponenten von $\mathbf{q}(\tau_{e/a})$ in Richtung des Einheitsvektors $\mathbf{v}_{e/a}/v$. Aus dem kleinen rechtwinkligen Dreieck in Abb. 2.4 liest man hierfür den Wert $\pm \sqrt{R^2 - b_{e/a}^2}$ ab. Eingesetzt ergibt sich dasselbe Ergebnis

$$T_N = \tau(R) - \frac{\sqrt{R^2 - b_e^2} + \sqrt{R^2 - b_a^2}}{v} \quad (2.13)$$

wie in Gleichung (2.12). Eigentliche und Narnhofer-Zeitverzögerung fallen also zusammen.

2.2.3 Definition über Aufenthaltszeit

Die im obigen Beweis als Zwischenergebnis gewonnene Gleichung (2.12) ist eine eigenständige Definition T_{dwell} der Zeitverzögerung² mittels der *Aufenthaltszeit*

$$\tau(R) := \tau_a(R) - \tau_e(R). \quad (2.14)$$

²Das Symbol T_{dwell} wird in Anlehnung an die englische Übersetzung *dwell time* gewählt. Üblich ist auch *sojourn time*.

Hierbei sind $\tau_e(R)$ und $\tau_a(R)$, gegeben durch

$$\begin{aligned} |\mathbf{q}(\tau_e(R))| &= R & |\mathbf{q}(\tau_a(R))| &= R \\ \mathbf{q}(\tau_e(R)) \cdot \mathbf{p}(\tau_e(R)) &< 0 & \mathbf{q}(\tau_a(R)) \cdot \mathbf{p}(\tau_a(R)) &> 0, \end{aligned} \quad (2.15)$$

eindeutig definiert, sofern der Interaktionsradius R die Bedingung (2.2) erfüllt. Diese Definition der Zeitverzögerung mittels Aufenthaltszeiten wird sich insbesondere für den Übergang von klassischer zu quantenmechanischer Betrachtung als nützlich erweisen [6].

Die Darstellung (2.12) hängt von den Streuparametern $b_{e/a}$ der freien Streutrajektorien ab. Falls dies je nach Anwendung ungünstig ist, kann die Zeitverzögerung auch als eine Differenz zwischen der Aufenthaltszeit des gestreuten Teilchens und der Aufenthaltszeit nicht mit dem Streupotential interagierender Teilchen beschrieben werden. Bianchi [6] weist darauf hin, dass solche Definitionen im Allgemeinen jedoch nur im Limes $R \rightarrow \infty$ wohldefiniert sind.

Die Aufenthaltszeit eines freien Teilchens, genauer: eines am Streupotential $V = 0$ gestreuten Teilchens, mit dem Streuparameter $b_e = b_a \equiv b$ beträgt (vgl. Abb. 2.5)

$$\tau_0(R) = \frac{s_0(R, b)}{v} = 2 \cdot \frac{\sqrt{R^2 - b^2}}{v}.$$

Somit verschwindet die Zeitverzögerung T_{dwell} gemäß (2.12) für freie Teilchen. Wählt man zu einem gestreuten Teilchen mit den Streuparametern $b_{e/a}$ ein freies Teilchen mit identischer Trajektorie für $t \rightarrow -\infty$, dessen Aufenthaltszeit als $\tau_{0,e}$ bezeichnet sein soll, so wird (2.12) zu

$$T_{\text{dwell}} = \tau(R) - \tau_{0,e}(R) + \frac{\sqrt{R^2 - b_e^2} - \sqrt{R^2 - b_a^2}}{v} = \lim_{R \rightarrow \infty} [\tau(R) - \tau_{0,e}(R)]. \quad (2.16)$$

Nur im Grenzfall $R \rightarrow \infty$ verschwindet die Abhängigkeit von $b_{e/a}$. Eine analoge Definition auf der Grundlage der auslaufenden statt der einlaufenden Trajektorie ist auch möglich und ergibt

$$T_{\text{dwell}} = \lim_{R \rightarrow \infty} [\tau(R) - \tau_{0,a}(R)]. \quad (2.17)$$

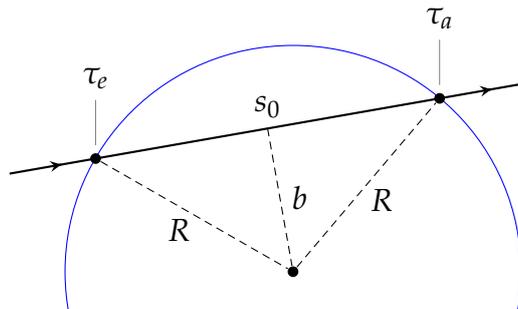


Abbildung 2.5: Für ein freies Teilchen mit dem Streuparameter b entspricht die Aufenthaltszeit $\tau = \tau_a - \tau_e$ der Passagelänge s_0 durch den Interaktionsbereich (Radius R).

Der numerisch ungünstige Limes kann im Allgemeinen nur dann eliminiert werden, wenn die Aufenthaltszeiten beider freier Trajektorien verwendet werden,

$$T_{\text{dwell}} = \tau(R) - \frac{\tau_{0,e}(R) + \tau_{0,a}(R)}{2}, \quad (2.18)$$

was für numerische Anwendungen aber ebenfalls ungünstig oder zumindest asuggestiv ist, da sie immer in einer bestimmten Zeitrichtung operieren.

Ein Spezialfall ist der eines um den Koordinatenursprung dreh-symmetrischen Potentials. In diesem Falle ist der Drehimpuls erhalten, es gilt also $b_e = b_a$, und (2.12) wird zu

$$T_{\text{dwell}} = \tau(R) - \frac{2\sqrt{R^2 - b^2}}{v} = \tau(R) - \tau_0(R), \quad (2.19)$$

wobei kein Limes notwendig ist.

2.2.4 Numerische Bestimmung der Zeitverzögerung

Eine alternative Methode, die Abhängigkeit von $b_{e/a}$ in T_{dwell} zu eliminieren, besteht darin, die Ein- bzw. Austrittszeit³ $\tau_{e/a}(R)$ in (2.14) anders zu konstruieren. Die neuen Zeiten $\bar{\tau}_{e/a}(R)$ ergeben sich, indem die Bedingungen (2.15) durch

$$\mathbf{q}(\bar{\tau}_e(R)) \cdot \mathbf{e}_p(\bar{\tau}_e(R)) = -R, \quad \mathbf{q}(\bar{\tau}_a(R)) \cdot \mathbf{e}_p(\bar{\tau}_a(R)) = R. \quad (2.20)$$

ersetzt werden. Hierbei ist $\mathbf{e}_p(t)$ der Einheitsvektor mit $\mathbf{e}_p(t) \parallel \mathbf{p}(t)$. Bei Formulierung für beliebige \mathbf{q} und nach Ersetzung der \mathbf{p} durch die konstanten Impulse $\mathbf{p}_{e/a}$ der freien Trajektorien,

$$\mathbf{q} \cdot \mathbf{e}_{p,e} = -R, \quad \mathbf{q} \cdot \mathbf{e}_{p,a} = R, \quad (2.21)$$

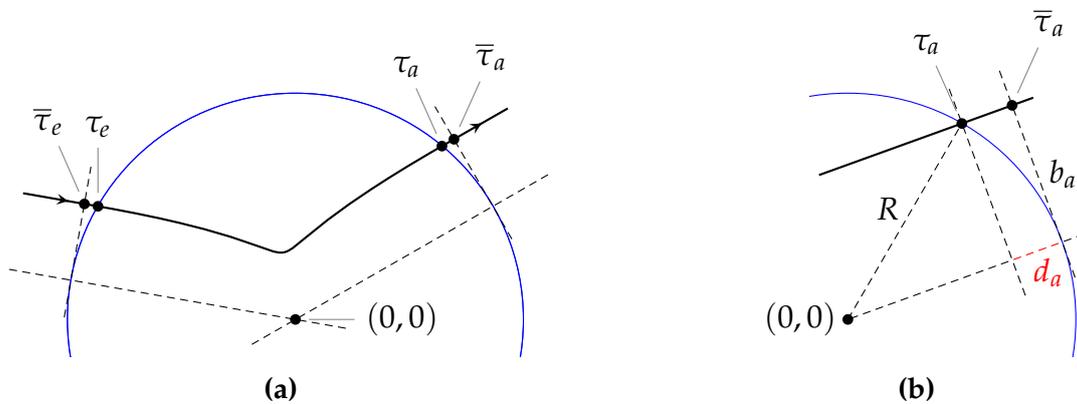


Abbildung 2.6: (a) vergleicht die Ein- und Austrittszeiten $\tau_{e/a}$ (Schnitt mit der Interaktionsbereichsberandung) mit $\bar{\tau}_{e/a}$ (Schnitt mit zur Trajektorie orthogonaler Tangente am Interaktionsbereich); (b) führt zum Vergleich beider Zeiten die Hilfsgröße $d_{e/a}$ ein.

³In englischen Texten wird τ_e meist als *arrival time* und τ_a entsprechend als *departure time* bezeichnet.

definieren die Gleichungen (2.20) Tangenten (in höheren Dimensionen tangentielle Hyperebenen) an den Interaktionsbereich $I(R)$. Die Durchstoßzeiten der Streutrajektorie durch diese Ebenen sind die Zeiten $\bar{\tau}_{e/a}(R)$, wie in Abb. 2.6a dargestellt. Die Definition (2.12) der Zeitverzögerung über die Aufenthaltszeit kann nun genutzt werden, um die Zeitverzögerung mittels $\bar{\tau}(R) := \bar{\tau}_a(R) - \bar{\tau}_e(R)$ statt $\tau(R)$ zu definieren.

$$T = \tau(R) - \frac{\sqrt{R^2 - b_e^2} + \sqrt{R^2 - b_a^2}}{v}$$

$$T = \bar{\tau}(R) + [\tau_a(R) - \bar{\tau}_a(R)] - [\tau_e(R) - \bar{\tau}_e(R)] - \frac{\sqrt{R^2 - b_e^2} + \sqrt{R^2 - b_a^2}}{v}$$

$$T = \bar{\tau}(R) - \frac{d_a + d_e}{v} - \frac{\sqrt{R^2 - b_e^2} + \sqrt{R^2 - b_a^2}}{v}$$

Hierin wurden die Zeitdifferenzen $\tau_{e/a} - \bar{\tau}_{e/a}$ durch geometrische Strecken $d_{e/a}$ der freien Streutrajektorien identifiziert. Aus Abb. 2.6b folgt $d_{e/a} = R - \sqrt{R^2 - b_{e/a}^2}$ und somit

$$T_{\text{num}} = \bar{\tau}(R) - \frac{2R}{v}. \quad (2.22)$$

Wie gewünscht ist der Streuparameter der freien Trajektorien aus dieser Definition eliminiert. Die Definition (2.22) wurde im Rahmen dieser Arbeit zur numerischen Bestimmung der Zeitverzögerung eingesetzt.

2.3 Zeitverzögerungsfunktion und -verteilung

Die Zeitverzögerung nimmt im Allgemeinen unterschiedliche Werte für unterschiedliche Trajektorien an. Um diese Abhängigkeit zu beschreiben, müssen die Streutrajektorien parametrisiert werden. Hierzu wird eine Parametrisierung des einlaufenden freien Anteils der Streutrajektorien genutzt.

Freie Trajektorien in zwei Dimensionen werden durch eine Gleichung $\mathbf{q}(t) = \mathbf{q}_0 + \mathbf{v}_0 \cdot t$ und damit zunächst durch vier Parameter $(\mathbf{q}_0, \mathbf{v})$ beschrieben. Durch Translation der Zeitachse ergeben sich jedoch Äquivalenzklassen zusammenfallender Trajektorien. Weiterhin wollen wir nur Streuteilchen mit einer festen freien Energie $E = \mathbf{p}_0^2/2m = mv_0^2/2$ betrachten; Änderungen der Energie der Streuteilchen können, sofern erforderlich, durch Umskalierung der Potentialwerte modelliert werden. Somit werden nur zwei Parameter zur Beschreibung der Streutrajektorien benötigt.

Die Geschwindigkeit hat durch die Vorgabe der freien Energie einen festen Betrag v_0 . Als Parameter verbleibt die Richtung, der Einfallswinkel φ_e , welcher hier wie üblich gegen die positive x -Achse gemessen wird. Damit ist

$$\mathbf{v}_{0,e} = v_0 \cdot \begin{pmatrix} -\cos \varphi_e \\ -\sin \varphi_e \end{pmatrix}. \quad (2.23)$$

scheinlichkeitsverteilung $P(b_e, \varphi_e)$, die *Zeitverzögerungsverteilung*

$$P(T) = \int_{-R}^R db_e \int_0^{2\pi} d\varphi_e P(b_e, \varphi_e) \cdot \delta(T - T(b_e, \varphi_e)) \quad (2.26)$$

betrachtet werden. Streuparameter $|b_e| > R$ werden mangels Streuung vernachlässigt. Eine praxisrelevante Wahrscheinlichkeitsverteilung erhält man aus einer Parametrisierung mittels der Winkel ϕ_e und ψ_e anstelle von b_e und φ_e . Der Winkel gegenüber der x -Achse aus Sicht des Koordinatenursprungs, unter dem die Streutrajektorie den Interaktionsbereich betritt, wird als

$$\phi_e = \sphericalangle(\mathbf{e}_x, \mathbf{q}(\tau_e))$$

bezeichnet. Diese Art von „Einfallswinkel“ unterscheidet sich deutlich vom Winkel φ_e , der über den Impuls definiert und somit unter Koordinatensystemtranslation invariant ist. Der Impuls des einfallenden Teilchens ist erst über den Winkel

$$\psi_e = \sphericalangle(-\mathbf{q}(\tau_e), \mathbf{p}(\tau_e))$$

zwischen Impuls- und nach innen gerichtetem Normalenvektor der Berandung des Interaktionsbereiches eindeutig gegeben; vgl. Abb. 2.8. Der Übergang zur Parametrisierung durch b_e/φ_e erfolgt mittels

$$\begin{pmatrix} b_e \\ \varphi_e \end{pmatrix} (\phi_e, \psi_e) = \begin{pmatrix} -R \cdot \sin \psi_e \\ \phi_e + \psi_e \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} \phi_e \\ \psi_e \end{pmatrix} (b_e, \varphi_e) = \begin{pmatrix} \varphi_e + \arcsin \frac{b_e}{R} \\ -\arcsin \frac{b_e}{R} \end{pmatrix}. \quad (2.27)$$

Daraus folgt gemäß $|P(b_e, \varphi_e) \cdot db_e d\varphi_e| = |P(\phi_e, \psi_e) \cdot d\phi_e d\psi_e|$ der Zusammenhang

$$P(b_e, \varphi_e) = R \cdot \cos \psi_e \cdot P(\phi_e, \psi_e). \quad (2.28)$$

Die Wahrscheinlichkeitsverteilung $P(\phi_e, \psi_e)$ bevorzugt üblicherweise einfliegende Streuteilchen,

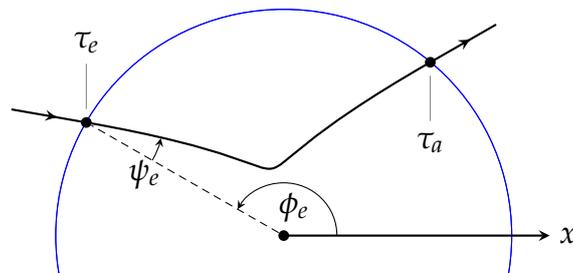


Abbildung 2.8: Freie Anteile einer Streutrajektorie können auch durch die Winkel $\phi_{e/a}$ (Winkel zur x -Achse des Schnitts mit der Interaktionsbereichsberandung) und $\psi_{e/a}$ (Winkel zwischen Impulsrichtung und Koordinatenursprung aus Sicht des Streuteilchens beim Eintritt in den Interaktionsbereich) parametrisiert werden.

die auf den Koordinatenursprung ausgerichtet sind, zum Beispiel

$$P(\phi_e, \psi_e) = P(\phi_e) \cdot \cos \psi_e.$$

Der Übergang zu $P(b_e, \varphi_e)$ ist günstig, weil $\cos \psi_e$ in Gleichung (2.28) gerade als Umrechnungsfaktor auftaucht. Insbesondere ergibt eine konstante Verteilung in ϕ_e dann eine konstante Verteilung $P(b_e, \varphi_e)$. Diese konstante Verteilung wird vom großem Interesse sein, da Gleichung (2.26) dann zu

$$P(T) = \frac{1}{4\pi R} \cdot \int_{-R}^R db_e \int_0^{2\pi} d\varphi_e \delta(T - T(b_e, \varphi_e)) \quad (2.29)$$

wird. In dieser Darstellung folgen alle interessanten Eigenschaften der Zeitverzögerungsverteilung $P(T)$ aus der Struktur der Zeitverzögerungsfunktion $T(b_e, \varphi_e)$ (siehe Kapitel 3).

Anstelle des gesamten Parameterraumes kann auch nur ein Teilbereich I mit der Fläche $A = |I|$ betrachtet werden; dann ist

$$P(T) = \frac{1}{A} \cdot \iint_I db_e d\varphi_e \delta(T - T(b_e, \varphi_e)). \quad (2.30)$$

2.4 Rechenregeln

2.4.1 Koordinatensystemwechsel

Für die Zeitverzögerungsfunktion in der Parametrisierung durch b_e und φ_e ist eine Drehung um einen Winkel θ nur eine Verschiebung des unabhängigen Parameters

$$\varphi_e \rightarrow \varphi'_e := \varphi_e + \theta,$$

welche das Verhalten von $T(b_e, \varphi_e)$ nicht verändert. Da alle physikalisch sinnvollen Wechsel des Koordinatensystems dargestellt werden können als eine Drehung, gefolgt von einer Verschiebung des Koordinatenursprungs in einer festen Koordinatenrichtung, gefolgt von einer weiteren Drehung, ist also nur noch das Verhalten unter Verschiebung des Koordinatenursprungs in einer festen Richtung von Interesse.

Es wird also eine Translation des Koordinatenursprungs betrachtet. Der neue Koordinatenursprung $\mathbf{q}' = (0, 0)^T$ liegt im alten Koordinatensystem bei $\mathbf{q} = (Q, 0)^T$ (vgl. Abb. 2.9). Die über die Impulsrichtung definierten Winkel $\varphi_{e/a}$ ändert dies nicht ($\varphi'_{e/a} = \varphi_{e/a}$), wohl aber den Streuparameter

$$b_e \rightarrow b'_e := b_e + Q \cdot \sin \varphi_e. \quad (2.31)$$

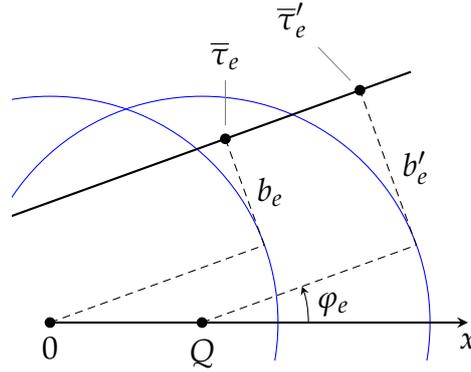


Abbildung 2.9: Eine Translation des Koordinatensystems verändert die Streuparameter sowie die Ein-/Austrittszeiten der freien Anteile einer Streutrajektorie.

Dieses Verhalten entspricht einer nichttrivialen glatten Krümmung des (b_e, φ_e) -Parameterraumes. Weiterhin ändert sich der Wert der Zeitverzögerung, weil die Translation zu anderen Ein- und Austrittszeiten $\bar{\tau}_{e/a}$ führt. Es ergibt sich

$$T'(b'_e, \varphi_e) = T(b_e, \varphi_e) + \frac{Q}{v} \cdot \cos \varphi_e + \frac{Q}{v} \cdot \cos \varphi_a, \quad (2.32)$$

worin jeweils ein Beitrag aus veränderter Eintrittszeit und Austrittszeit stammt. Für $V = 0$ ist $\cos \varphi_e = -\cos \varphi_a$, weswegen sich die Zeitverzögerung $T = 0$ in diesem Fall nicht ändert.

2.4.2 Verkettung

Potentiale können aus verschiedenen, an bestimmten Stellen des Interaktionsbereiches lokalisierten Anteilen bestehen, für die eine Zeitverzögerungsfunktion einzeln ermittelt werden kann. Ein Beispiel ist der bekannte Dreischeibenstreuer, der aus drei voneinander räumlich getrennten harten Scheibenpotentialen besteht.

Eine Verkettung der einzelnen Zeitverzögerungsanteile erfordert allerdings Kenntnis über die zeitliche Abfolge der Interaktionen des Streuteilchens mit den einzelnen Potentialanteilen. Diese Forderung entspricht einer Einschränkung der zulässigen Anfangsbedingungen, für die die resultierende geschlossene Form der Gesamtzeitverzögerung Gültigkeit hat.

Sei also $V = V_1 + V_2$ ein Potential aus zwei räumlich getrennten Bestandteilen; das heißt, die Träger $\text{supp } V_{1/2} \subset \mathbb{R}^2$ sind disjunkt. Für V_1 sowie V_2 seien die Zeitverzögerungsfunktionen T_1 sowie T_2 im selben Koordinatensystem bekannt, gegebenenfalls durch Translation von in anderen Koordinatensystemen erhaltenen Ergebnissen.

Weiter sei bekannt, dass ein Streuteilchen für gegebene b_e und φ_e zuerst mit dem Potential V_1 interagiert und danach mit dem Potential V_2 . Aus diesem Grund wird die Gesamtzeitverzögerung dieses Teilchens mit T_{12} bezeichnet. Die Zeitverzögerung (2.8) nach Narnhofer

$$T_{12}(b_e, \varphi_e) = \frac{\bar{\mathbf{q}}_{e,1} \cdot \mathbf{v}_{e,1} - \bar{\mathbf{q}}_{a,2} \cdot \mathbf{v}_{a,2}}{v^2} = \frac{\bar{\mathbf{q}}_{e,1} \cdot \mathbf{v}_{e,1} - \bar{\mathbf{q}}_{a,1} \cdot \mathbf{v}_{a,1}}{v^2} + \frac{\bar{\mathbf{q}}_{e,2} \cdot \mathbf{v}_{e,2} - \bar{\mathbf{q}}_{a,2} \cdot \mathbf{v}_{a,2}}{v^2}$$

kann als Summe der Zeitverzögerungen T_1 und T_2 für die Streutrajektorie dargestellt werden, da die einlaufende Trajektorie des zweiten Streueignisses mit der auslaufenden Trajektorie des ersten Streueignisses zusammenfällt ($\bar{\mathbf{q}}_{a,1} \cdot \mathbf{v}_{a,1} = \bar{\mathbf{q}}_{e,2} \cdot \mathbf{v}_{e,2}$). Es gilt also

$$T_{12}(b_e, \varphi_e) = T_1(b_e, \varphi_e) + T_2(b_{e,2}, \varphi_{e,2}).$$

Sind für das erste Teilpotential neben der Zeitverzögerungsfunktion T_1 auch die Abbildungen $b_{a,1}(b_{e,1}, \varphi_{e,1})$ sowie $\varphi_{a,1}(b_{e,1}, \varphi_{e,1})$ bekannt, die die einlaufende in die auslaufende Streutrajektorie überführen, so können die Parameter

$$b_{e,2} = -b_{a,1} \qquad \varphi_{e,2} = \varphi_{a,1} + \pi \qquad (2.33)$$

dadurch beschrieben werden, und es ergibt sich schließlich

$$T_{12}(b_e, \varphi_e) = T_1(b_e, \varphi_e) + T_2(-b_{a,1}(b_e, \varphi_e), \varphi_{a,1}(b_e, \varphi_e) + \pi).$$

3 Klassische Modellsysteme

Nachdem im Kapitel 2 die klassische Zeitverzögerung eingeführt und allgemein diskutiert wurde, soll nun die Zeitverzögerungsfunktion $T(b_e, \varphi_e)$ sowie daraus folgend die Zeitverzögerungsverteilung $P(T)$ für zwei Modellsysteme betrachtet werden. Der Einfachheit halber werden die Parameter b_e und φ_e des einlaufenden freien Teils der Streutrajektorie nur als b und φ bezeichnet.

3.1 Harte Scheibe

Ein im Koordinatenursprung zentriertes hartes Scheibenpotential sei durch

$$V(\mathbf{q}) = \begin{cases} \infty & |\mathbf{q}| \leq r \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

beschrieben. Dieses Potential ist zentralsymmetrisch und deswegen dreimpulserhaltend; es gilt also $|b_e| = |b_a|$. Der kleinstmögliche Interaktionsradius $R_0 = r$ ergibt für alle Streutrajektorien eine Aufenthaltszeit $\tau(R_0) = 0$. Hiermit ist die Zeitverzögerung gemäß Gleichung (2.19)

$$T(b, \varphi) = -\frac{2\sqrt{r^2 - b^2}}{v}. \quad (3.1)$$

Die Zeitverzögerungsverteilung wird gemäß Gleichung (2.29) ermittelt. Zur Lösung von

$$P(T) = \frac{1}{2r} \cdot \int_{-r}^r db \delta\left(T + \frac{2}{v} \cdot \sqrt{r^2 - b^2}\right) \quad (3.2)$$

wird die Rechenregel

$$\delta(f(b)) = \sum_i \frac{\delta(b - b_i)}{|f'(b_i)|}$$

verwendet, wobei die Summation über alle einfachen Nullstellen $f(b_i) = 0$ erfolgt. Im Falle der Gleichung (3.2) hat

$$f(b) = T + \frac{2}{v} \cdot \sqrt{r^2 - b^2}, \quad f'(b) = \frac{-2b}{v \cdot \sqrt{r^2 - b^2}}$$

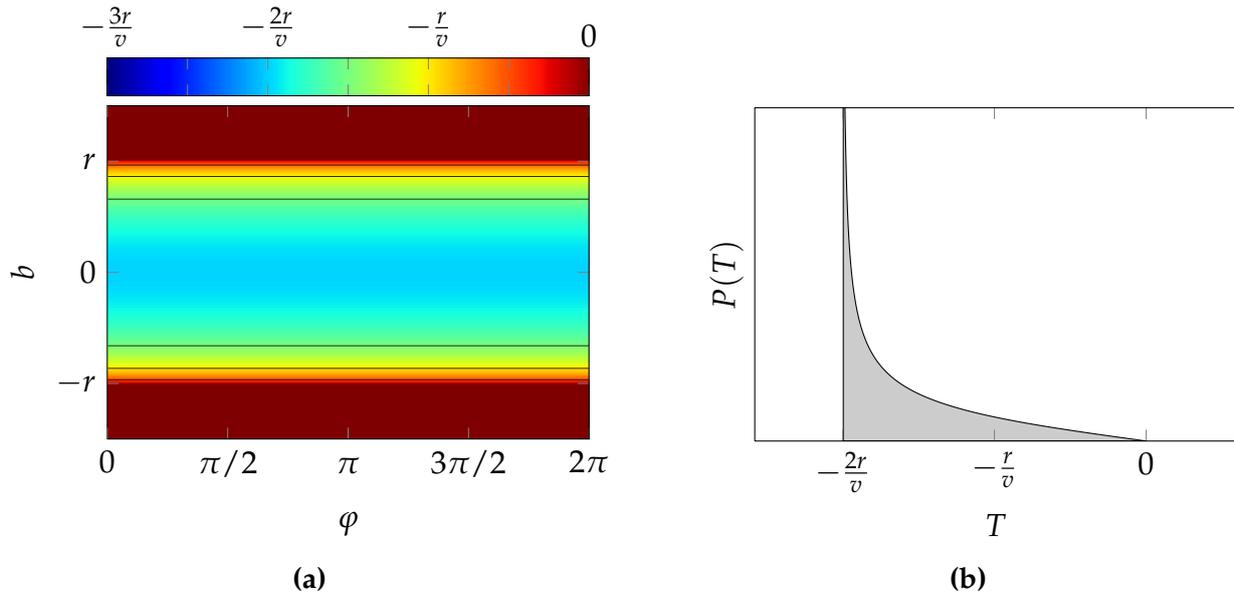


Abbildung 3.1: (a) Zeitverzögerungsfunktion und (b) -verteilung für eine zentrierte harte Scheibe mit dem Radius r . Die Darstellungsform und Farbskala in (a) entsprechen zum Zwecke der Vergleichbarkeit Abbildung 3.2.

mit $T \in [-2r/v, 0]$ die Nullstellen

$$b_{1/2} = \pm \sqrt{r^2 - \frac{T^2 \cdot v^2}{4}}, \quad |f'(b_{1/2})| = -\frac{4}{T \cdot v^2} \cdot \sqrt{r^2 - \frac{T^2 \cdot v^2}{4}}.$$

Eingesetzt in (3.2) ergibt sich

$$P(T) = \frac{1}{2r} \cdot \frac{-T \cdot v^2}{4\sqrt{r^2 - \frac{T^2 \cdot v^2}{4}}} \cdot \int_{-r}^r db [\delta(b - b_1) + \delta(b - b_2)]$$

bzw. nach Aufintegration

$$P(T) = \frac{-T \cdot v^2}{2r\sqrt{4r^2 - T^2 \cdot v^2}} \quad \text{für } -\frac{2r}{v} < T < 0. \quad (3.3)$$

Diese Verteilung hat eine Singularität bei $T = -2r/v$ aufgrund des verschwindenden Anstiegs der Zeitverzögerungsfunktion bei diesem Wert an der Stelle $b = 0$.

3.2 Verschobene harte Scheibe

Es soll untersucht werden, wie sich die Zeitverzögerungsverteilung ändert, wenn die Scheibe aus dem Koordinatenursprung verschoben wird. Der Mittelpunkt der Scheibe liege nun bei $\mathbf{q} = (s, 0)^T$. Dies entspricht gegenüber dem vorher diskutierten Fall einer Translation des Koordinatensystems um $(-s, 0)^T$. Die Gleichungen (2.31) und (2.32) gelten entsprechend. Die

Zeitverzögerung für die verschobene harte Scheibe ist

$$T'(b', \varphi_e) = -\frac{2}{v} \cdot \sqrt{r^2 - b^2} - \frac{s}{v} \cdot \cos \varphi_e - \frac{s}{v} \cdot \cos \varphi_a \quad \text{mit} \quad \varphi_a = \varphi_e + 2 \arcsin \frac{b}{r}.$$

Mit trigonometrischen Rechenregeln und der Identität $\cos(\arcsin x) = \sqrt{1 - x^2}$ folgt

$$\begin{aligned} T'(b', \varphi) &= -\frac{2}{v} \cdot \sqrt{r^2 - b^2} - \frac{s}{v} \cdot \left[\cos \varphi + \cos \left(\varphi + 2 \arcsin \frac{b}{r} \right) \right] \\ &= -\frac{2}{v} \cdot \sqrt{r^2 - b^2} - \frac{2s}{v} \cdot \cos \arcsin \frac{b}{r} \cdot \cos \left(\varphi + \arcsin \frac{b}{r} \right) \\ &= -\frac{2}{v} \cdot \sqrt{r^2 - b^2} \cdot \left[1 + \frac{s}{r} \cdot \cos \left(\varphi + \arcsin \frac{b}{r} \right) \right]. \end{aligned}$$

Hierin muss noch der Streuparameter b der zentrierten Scheibe ersetzt werden, welcher sich in Umkehrung von Gleichung (2.31) als

$$b = b' + s \cdot \sin \varphi$$

ergibt. Im Endresultat können dann die Striche an den Größen T' und b' weggelassen werden; eine Verwechslungsgefahr mit den entsprechenden Größen im System der Scheibe ist nicht mehr gegeben. Es ist

$$T(b, \varphi) = -\frac{2}{v} \cdot \sqrt{r^2 - (b + s \cdot \sin \varphi)^2} \cdot \left[1 + \frac{s}{r} \cdot \cos \left(\varphi + \arcsin \frac{b + s \cdot \sin \varphi}{r} \right) \right]. \quad (3.4)$$

Durch die Verschiebung s hat sich eine φ -Abhängigkeit ergeben. Somit erlaubt dieses einfache Beispielsystem, die Auswirkungen bestimmter analytischer Strukturen der Zeitverzögerungsfunktion auf die Zeitverzögerungsverteilung zu untersuchen. Bei der Anwendung von Gleichung (3.4) ist zu beachten, dass sie nur für Streutrajektorien gilt, bei denen eine Reflexion am Potential stattfindet. Dies ist für

$$|b + s \cdot \sin \varphi| \leq r \quad (3.5)$$

der Fall. Zur Vereinfachung der folgenden Ableitungen wird Gl. (3.4) durch die Definitionen

$$\bar{s} := \frac{s}{r}, \quad \bar{b} := \frac{b}{r}, \quad \bar{T}(\bar{b}, \varphi) := \frac{v}{r} \cdot T(\bar{b} \cdot r, \varphi)$$

einheitenlos gemacht. Die neue Darstellung ist

$$\bar{T}(\bar{b}, \varphi) = -2 \cdot \sqrt{1 - (\bar{b} + \bar{s} \cdot \sin \varphi)^2} \cdot \left[1 + \bar{s} \cdot \cos \left(\varphi + \arcsin (\bar{b} + \bar{s} \cdot \sin \varphi) \right) \right]. \quad (3.6)$$

Die rein analytische Ableitung einer Zeitverzögerungsverteilung wie im vorigen Abschnitt,

ausgehend von Gleichung (2.29), ist aufgrund der Komplexität von Gleichung (3.6) nicht praktikabel. Abb. 3.3a zeigt stattdessen eine numerisch ermittelte Verteilung. Die zugehörige Zeitverzögerungsfunktion selbst ist in Abb. 3.2 dargestellt. Für den gewählten Parameter $\bar{s} = 1/2$ sind die Zeitverzögerungen aller Streuereignisse noch negativ; dies ändert sich erst für $\bar{s} > 1$. In dunkelrot (entsprechend dem Wert $T = 0$) erscheinen alle Anfangsbedingungen, deren Streutrajektorien nicht mit dem Scheibenpotential interagieren.

In Abb. 3.2 erkennt man deutlich zwei stationäre Punkte, ein Minimum

$$\bar{T}(\bar{b} = 0, \varphi = 0) = -2 \cdot (1 + \bar{s}) = -3$$

und einen Sattelpunkt

$$\bar{T}(\bar{b} = 0, \varphi = \pi) = -2 \cdot (1 - \bar{s}) = -1.$$

Es soll gezeigt werden, dass die wesentliche Struktur der Zeitverzögerungsverteilung (Abb. 3.3a) aus diesen stationären Punkten resultiert.

3.2.1 Verhalten in der Umgebung von stationären Punkten

Die Umgebung eines Sattelpunktes (\bar{b}_s, φ_s) in \bar{T} muss in $P(\bar{T})$ eine logarithmische Singularität

$$P(\bar{T} \approx \bar{T}_s) = \frac{|\ln |\Delta\bar{T} - \bar{T}_s||}{2\pi R \cdot \sqrt{|\det \mathbf{H}(\bar{b}_s, \varphi_s)|}} + \text{const.} \quad (3.7)$$

liefern. Die Ableitung dieser Formel ist in Anhang A.1 ausführlich dargestellt.

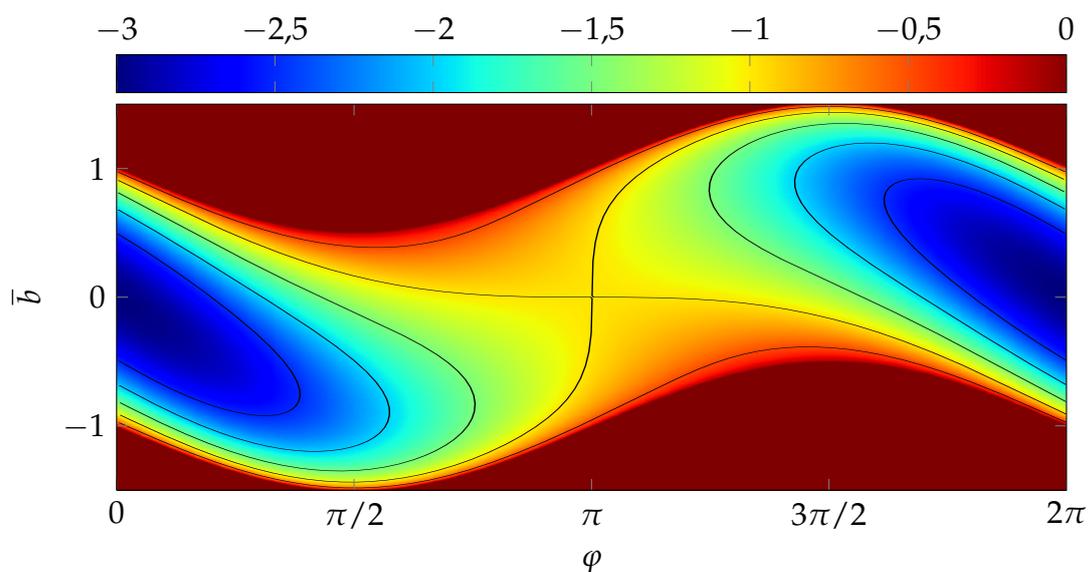


Abbildung 3.2: Struktur der Zeitverzögerungsfunktion \bar{T} für eine um $\bar{s} = 1/2$ verschobene harte Scheibe, mit Minimum bei $(\bar{b}, \varphi) = (0, 0) \equiv (0, 2\pi)$ und Sattelpunkt bei $(\bar{b}, \varphi) = (0, \pi)$

In der Tat befindet sich in Abb. 3.3a eine singularitätsartige Struktur bei $\bar{T}_s = -1$. Dass es sich um die von Gleichung (3.7) vorhergesagte logarithmische Singularität handelt, ist in Abb. 3.3b zu sehen. Das grau unterlegte Histogramm zeigt die numerisch ermittelte Zeitverzögerungsverteilung, von welcher der Anteil (3.7) mit $\det \mathbf{H} = 4\bar{s} \cdot (\bar{s} - 1)$ abgezogen wurde.

In Analogie zu (3.7) ergibt sich für ein Minimum in \bar{T} , wie es im Falle der verschobenen harten Scheibe bei $\bar{b} = \varphi = 0$ vorliegt (vgl. Abb. 3.2), ein Beitrag

$$P(\bar{T} \approx \bar{T}_m) = \frac{\Theta(\bar{T} - \bar{T}_m)}{2R \cdot \sqrt{\det \mathbf{H}}}. \quad (3.8)$$

Die Vorhersage einer Heaviside-Stufe wird von Abb. 3.3b bestätigt: Die numerisch ermittelte Verteilung stimmt sehr gut mit der theoretischen Stufenform für $\det \mathbf{H} = 4\bar{s} \cdot (\bar{s} + 1)$ überein.

Durch die Verschiebung aus dem Koordinatenursprung ist das Minimum bei $\bar{T}(b = 0)$, entsprechend dem hellblauen horizontalen Streifen in Abbildung 3.1a, in ein Paar aus Minimum und Sattelpunkt von $\bar{T}(\bar{b}, \varphi)$ übergegangen (Abb. 3.3b). Entsprechend ist die Polstelle bei $\bar{T} = -2$ in der neuen Verteilung ersetzt durch einen konstanten Verlauf um $\bar{T} = -3$ sowie eine logarithmische Singularität bei $\bar{T} = -1$.

Dieser Übergang betrifft kleine Streuparameter. Für die Beiträge aus großen Streuparametern ändert sich die Verteilung nicht wesentlich: Die rote Verteilung hat für $-1,5 \leq \bar{T} \leq 0$ ähnliche Werte wie die grau hinterlegte Verteilung.

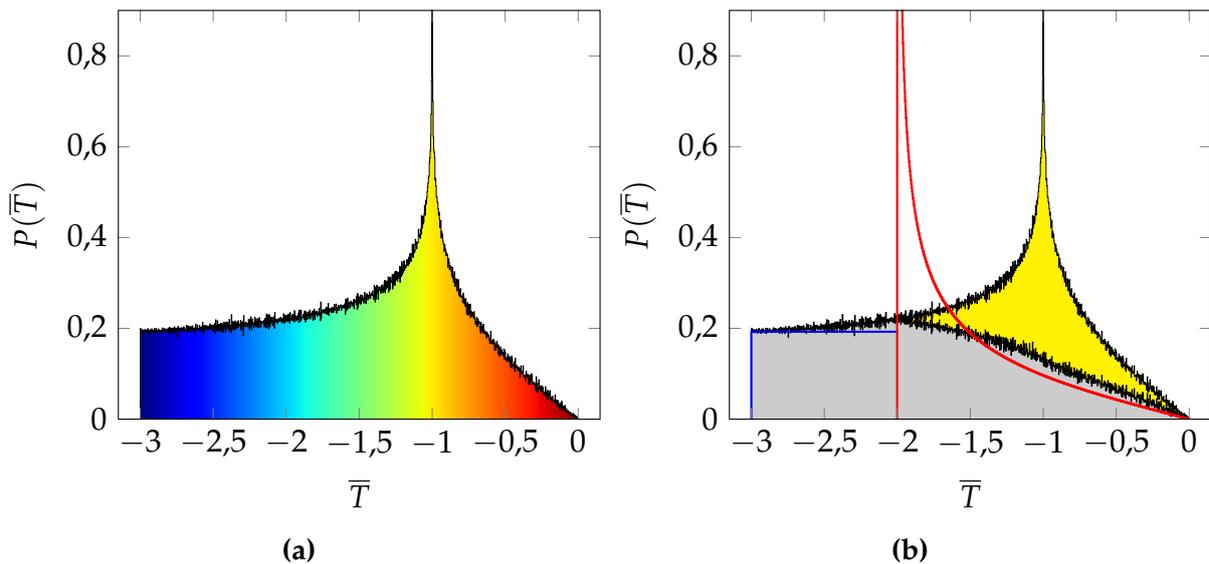


Abbildung 3.3: Zeitverzögerungsverteilung für eine um $\bar{s} = 1/2$ verschobene harte Scheibe, bestimmt aus 10^6 gleichverteilten Punkten im in Abb. 3.2 dargestellten Bereich (ausgenommen Werte $T = 0$; Färbung in Analogie zur Funktionsdarstellung); (b) In der Zeitverzögerungsverteilung ist der in Gleichung (3.7) vorhergesagte Beitrag der Sattelpunktumgebung (gelbe Fläche) sowie der Minimumumgebung (blaue Linie) hervorgehoben und zum Vergleich die Zeitverzögerungsverteilung der entsprechenden nicht verschobenen harten Scheibe (rote Linie) eingetragen.

3.3 Weiches Scheibenpaar

Bei der harten Scheibe entstehen die stationären Punkte durch eine Koordinatensystemtranslation. Es gibt aber auch Streusysteme, bei denen das Vorliegen eines stationären Punktes aus der Form des Streupotentials begründet werden kann. Ein einfacher Vertreter dieser Klasse von Systemen soll nun untersucht werden. Das Potential

$$V(\mathbf{q}) = \begin{cases} V_1 & |\mathbf{q} - \mathbf{q}_1| \leq r_1 \\ V_2 & |\mathbf{q} - \mathbf{q}_2| \leq r_2 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (3.9)$$

besteht aus zwei Scheiben $V_1 < 0$ und $V_2 > 0$. Im Gegensatz zur harten Scheibe der vorherigen Abschnitte sind diese Scheiben weich, was in diesem Zusammenhang bedeuten soll, dass Streuteilchen in die Scheiben eindringen können ($V_{1/2} \neq \infty$). Die Potentialfunktion ist am Übergang zwischen Äußerem und Innerem der Scheibe trotzdem unstetig.

Die Scheiben werden o. B. d. A. so entlang der x -Achse positioniert, dass der Koordinatenursprung gerade in der Mitte zwischen $\mathbf{q}_1 = (-s, 0)^T$ und $\mathbf{q}_2 = (+s, 0)^T$ mit $s > 0$ liegt.

3.3.1 Sattelpunkte

In dieser Konfiguration kann man anschaulich einen Sattelpunkt bei $b = 0$ und $\varphi = \pi$ erwarten, wie an der Abb. 3.4 erklärt werden kann. Die Anfangsbedingung der Sattelpunktstrajektorie (schwarz) kann einerseits so variiert werden, dass sie sich im Vergleich länger in der negativen Scheibe aufhält und kürzer in der positiven Scheibe (rote Trajektorie). In der negativen Scheibe ist die kinetische Energie größer; folglich passiert die rote Trajektorie das System insgesamt schneller und hat eine geringere Zeitverzögerung. Andere Trajektorien mit von der Sattelpunktstrajektorie infinitesimal abweichender Anfangsbedingung können sich analog kür-

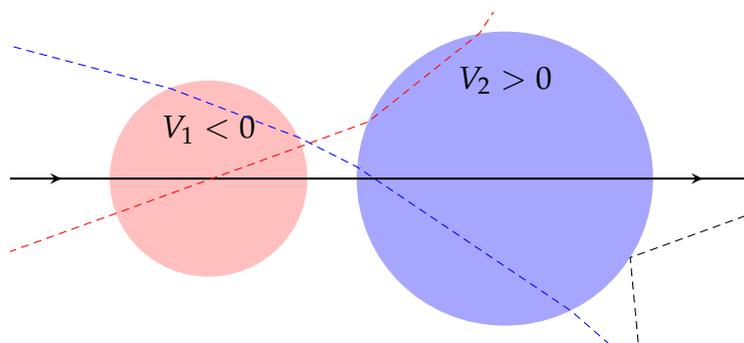


Abbildung 3.4: Weiches Scheibenpaar mit einer Sattelpunktstrajektorie ($b = 0, \varphi = \pi$; schwarz). Zusätzlich sind zwei infinitesimal abweichende Trajektorien mit geringerer (rot) und größerer Zeitverzögerung (blau) dargestellt, wobei die infinitesimalen Abweichungen δb und $\delta \varphi$ zu Illustrationszwecken stark überhöht sind. Die schwarz gestrichelte Trajektorie rechts unten zeigt beispielhaft eine Reflexion an der blauen Scheibe (vgl. Text).

zer in der negativen und länger in der positiven Scheibe aufhalten (blaue Trajektorie), was zu einer größeren Zeitverzögerung führt. Die analoge Argumentation lässt sich auch auf die umgekehrte Trajektorie ($b = \varphi = 0$) anwenden, sodass hier ein strukturell ähnlicher Sattelpunkt zu erwarten ist.

Eine Herleitung der Zeitverzögerungsfunktion im Bereich um die genannten Anfangsbedingungen, wie in Anhang B, ergibt, dass es sich (für alle möglichen Parameter des Systems) tatsächlich um stationäre Punkte mit indefiniter Hesse-Matrix, also um Sattelpunkte handelt. Dies ist auch aus der beispielhaften Darstellung von $T(b, \varphi)$ in Abb. 3.5 ersichtlich.

In dieser Grafik und im Folgenden wird mittels der Abkürzungen

$$\bar{s} := \frac{s}{r_1}, \quad \bar{b} := \frac{b}{r_1}, \quad R := \frac{r_2}{r_1}, \quad \bar{T}(\bar{b}, \varphi) := \frac{v}{r_1} \cdot T(\bar{b} \cdot r_1, \varphi)$$

wieder eine einheitenlose Darstellung der Zeitverzögerung gewählt. Wie bereits erwartet enthält die Zeitverzögerungsverteilung $P(\bar{T})$ in Abb. 3.6 einen Peak bei

$$\bar{T}(\bar{b} = 0, \varphi = 0) = \bar{T}(\bar{b} = 0, \varphi = \pi) =: \bar{T}_s$$

(vgl. die vergrößerte Darstellung in Abb. 3.7). Es stellt sich die Frage, ob es sich um eine logarithmische Singularität handelt, die durch die Sattelpunkte vollständig beschrieben ist.

Verglichen mit der verschobenen harten Scheibe ist die Struktur der Zeitverzögerungsfunktion für dieses System deutlich komplexer. $\bar{T}(\bar{b}, \varphi)$ unterteilt sich in mehrere Abschnitte, deren

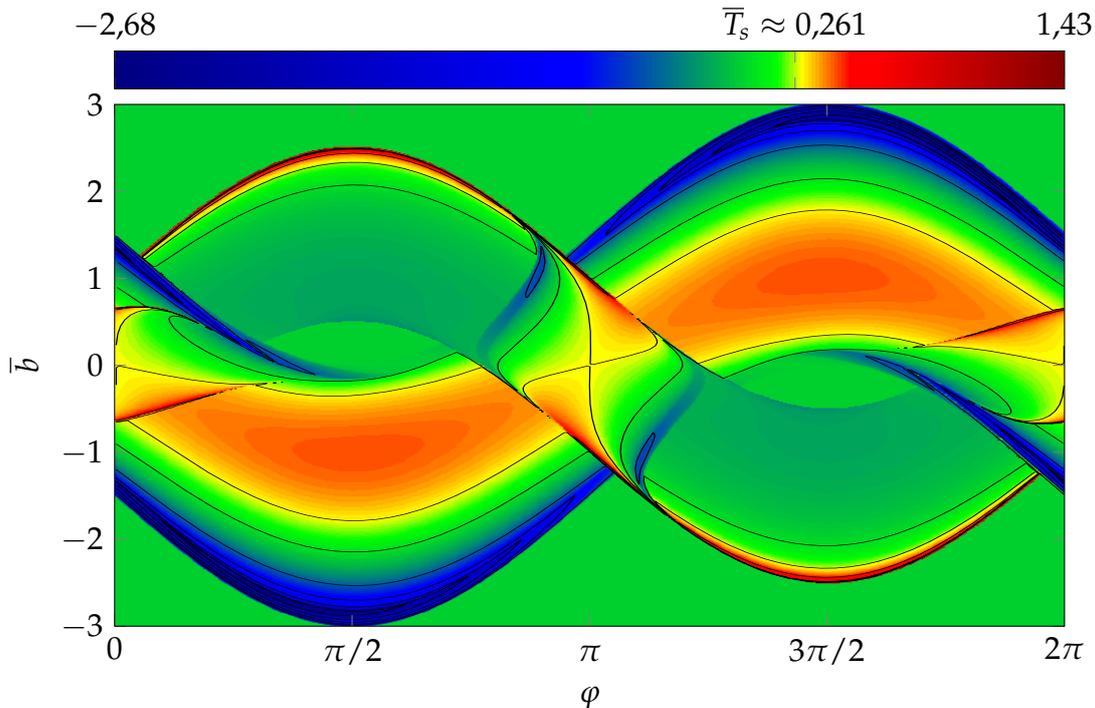


Abbildung 3.5: Struktur der Zeitverzögerungsfunktion \bar{T} für ein weiches Scheibenpaar mit $\bar{s} = R = 1,5$, $V_1 = -0,1 \cdot mv^2$, $V_2 = 0,2 \cdot mv^2$; Werte um \bar{T}_s sind gelb dargestellt.

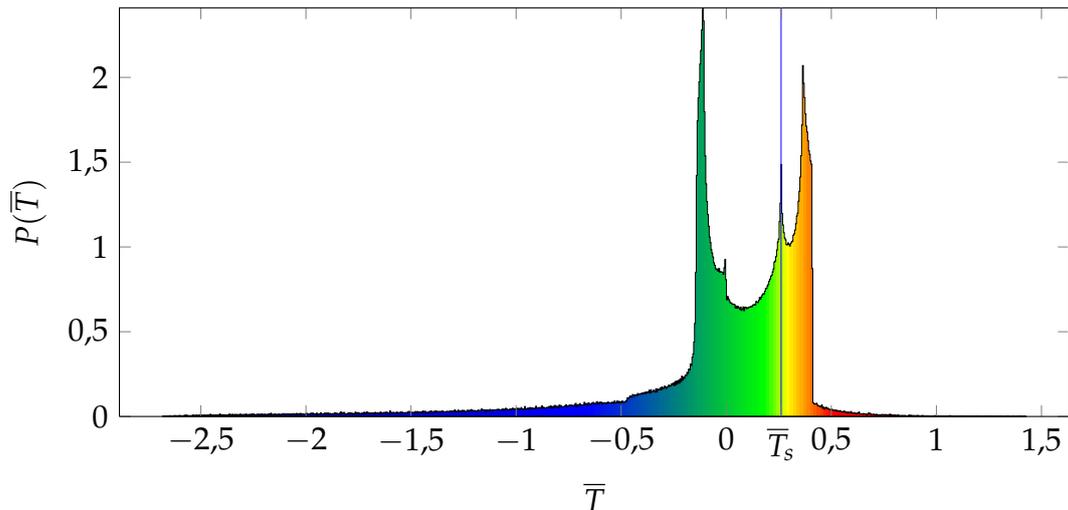


Abbildung 3.6: Zeitverzögerungsverteilung zu Abb. 3.5 mit identischer Färbung

zugehörige Streutrajektorien sich in der Besuchsreihenfolge der Scheibenpotentiale unterscheiden, bzw. darin, ob an der rechten Scheibe eine Reflexion auftritt, weil die kinetische Energie des Streuteilchens in Einfallsrichtung auf das Potential zu klein ist. Ein Beispiel für eine solche Trajektorie ist in Abb. 3.4 dargestellt.

Schließt man in der Menge der Anfangsbedingungen I , über die die Zeitverzögerungsverteilung erstellt wird (vgl. Gleichung (2.30)), die stetigen Bereiche um die beiden Sattelpunkte aus, so verschwindet der Peak um \bar{T}_s . Dieser Peak muss somit ausschließlich aus dem Verhalten der Funktion in der Nähe der Sattelpunkte resultieren. Allerdings ist ein analytisches Entfernen der logarithmischen Singularität auf der Grundlage einer theoretisch vorhergesagten Form (wie in Abb. 3.3b) nicht direkt möglich.

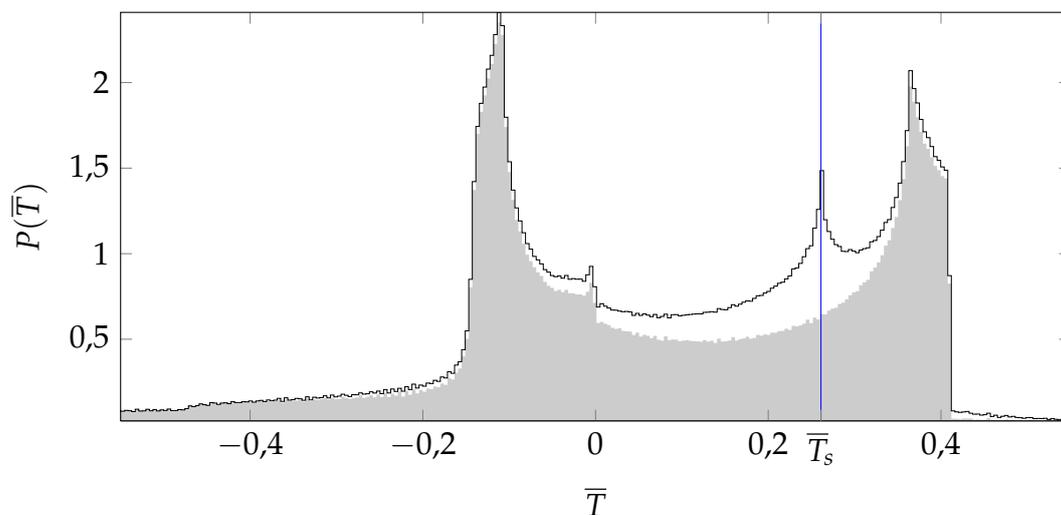


Abbildung 3.7: Vergrößerte Darstellung der Zeitverzögerungsverteilung (Abb. 3.6) um deren Häufungsbereich. Die graue Fläche entspricht der Verteilung, wenn die Beiträge der Umgebungen der Sattelpunkte $\bar{b} = 0$, $\varphi = 0/\pi$ nicht eingeschlossen werden.

Die Unstetigkeitslinien der Zeitverzögerungsfunktion in relativer Nähe der Sattelpunkte beeinflussen das Verhalten der Zeitverzögerungsverteilung zu stark; die Abweichung vom Modell eines in der Verteilung vollständig enthaltenen symmetrischen Sattelpunktes wird zu groß. Lediglich in einer kleinen Umgebung um die Singularität kann man noch erwarten, das theoretisch vorhergesagte Verhalten (A.7)

$$P(\bar{T}) = \frac{2 \cdot |\ln |\bar{T} - \bar{T}_s||}{A \cdot \sqrt{|\det \mathbf{H}|}} + \text{const.}$$

aufzufinden. Hierbei ist $A = (\bar{b}_{\max} - \bar{b}_{\min}) \cdot (\varphi_{\max} - \varphi_{\min})$ die Größe dieser kleinen Umgebung (wie in Gleichung (2.30)) und $\det \mathbf{H}$ die Hesse-Matrix¹ von $\bar{T}(\bar{b}_s, \varphi_s)$. Ein Übergang von \bar{T} zu

$$\delta\bar{T} := |\bar{T} - \bar{T}_s| \geq 0$$

liefert für $\delta\bar{T} < 1$

$$P(\delta\bar{T}) = \frac{-4 \cdot \ln \delta\bar{T}}{A \cdot \sqrt{|\det \mathbf{H}|}} + \text{const.} \quad (3.10)$$

mit einem zusätzlichen Faktor 2, weil durch den Variablenwechsel die beiden Flanken der Singularität übereinander gelegt wurden. In einer Auftragung von $P(\delta\bar{T})$ über $\delta\bar{T}$ mit logarithmischer Skala auf der Abszissenachse sollte sich also eine fallende Gerade ergeben [17].

Die Abbildungen 3.8 bestätigen die Annahme: Über zwei Größenordnungen passt der Verlauf von $P(\delta\bar{T})$ sehr gut zu der Vorhersage (3.10). Ab $\delta\bar{T} \approx 10^{-4}$ wird das Histogramm zunehmend von numerischen Abweichungen dominiert; im Mittel wird aber immer noch der erwartete Anstieg reproduziert. In den zwei oberen Teilabbildungen ist bei $\delta\bar{T} \approx 10^{-2}$ ein Knick zu beobachten, der jedoch ebenfalls ein numerisches Artefakt ist: Er resultiert aus der Wahl des \bar{b}/φ -Bereiches, und verschiebt sich bei anderer Wahl entsprechend.

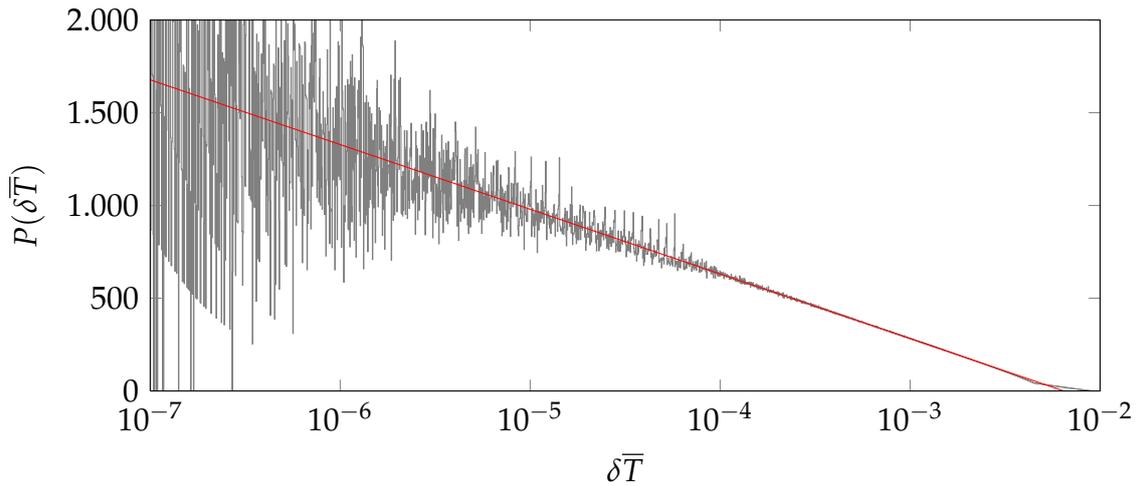
Auch in diesem System ist die logarithmische Singularität in $P(\bar{T})$ also allein auf Sattelpunkte in der Zeitverzögerungsfunktion zurückzuführen.

3.3.2 Extrempunkte

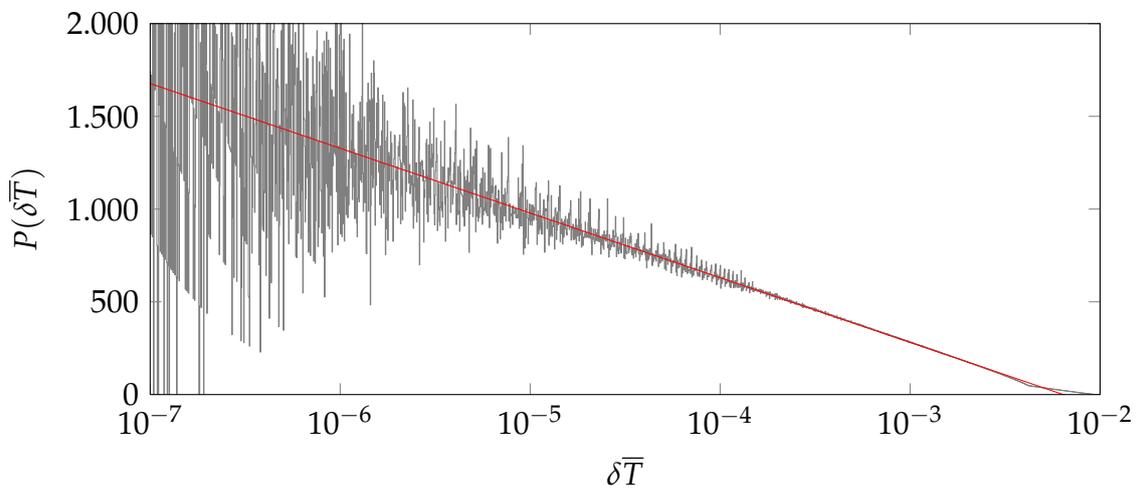
Die Funktion $\bar{T}(\bar{b}, \varphi)$ enthält noch zwei Maxima bei Punkten, deren Streutrajektorien nur die rechte Scheibe durchlaufen. Die Zeitverzögerungsfunktion ist in diesem Bereich gegeben durch

$$\bar{T}(\bar{b}, \varphi) = 2 \cdot \left[\frac{1}{\xi_2} \cdot \sqrt{R^2 - \frac{\bar{b}_2^2}{\xi_2^2}} - \sqrt{R^2 - \bar{b}_2^2} \right] + s \cdot \left[\cos(\varphi + \delta_2(\bar{b}_2)) - \cos \varphi \right]$$

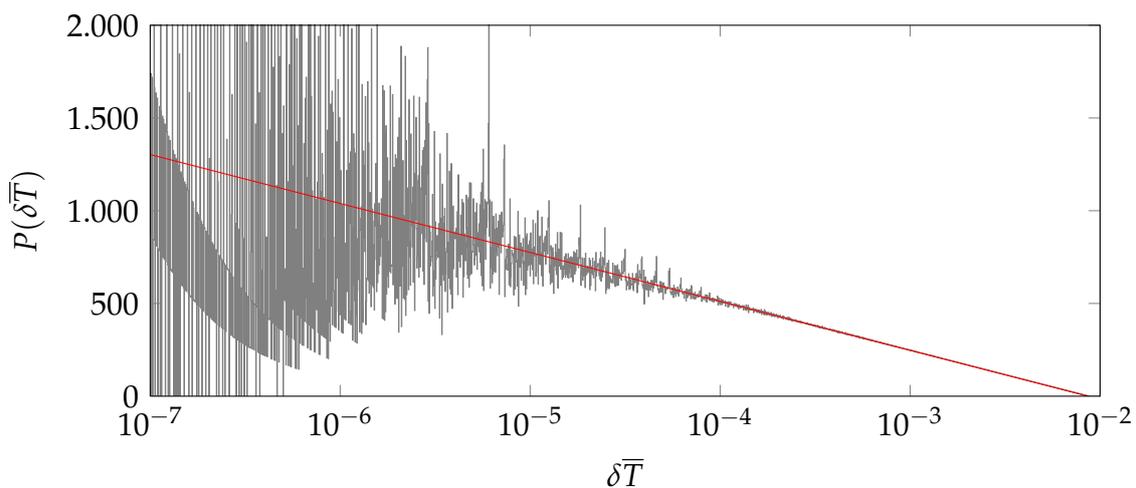
¹Der analytische Ausdruck für die Hesse-Matrix ist unnötig kompliziert und deshalb hier nicht dargestellt.



(a) Umgebung um den Sattelpunkt $\bar{b} = 0, \varphi = 0$ (System wie in Abb. 3.5)



(b) Umgebung um den Sattelpunkt $\bar{b} = 0, \varphi = \pi$ (System wie in Abb. 3.5)



(c) zum Vergleich: Umgebung um den Sattelpunkt für das verschobene Scheibensystem (Systemparameter wie in Abb. 3.2)

Abbildung 3.8: Zeitverzögerungsverteilung in der Nähe der Sattelpunktwerte. Die Verteilung ergibt sich jeweils aus $4 \cdot 10^6$ gleichverteilten Punkten in einem rechteckigen Gitter um den Sattelpunkt mit der Ausdehnung $\delta\bar{b} = 0,2$ und $\delta\varphi = \pi/18 = 10^\circ$. Der gemäß Gleichung (3.10) erwartete Anstieg der Kurve wird durch die roten Geraden dargestellt.

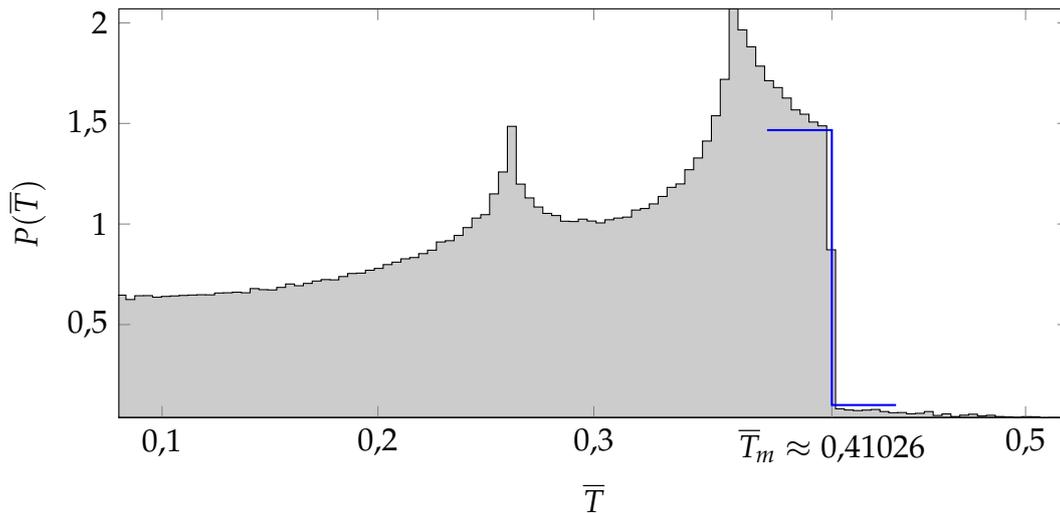


Abbildung 3.9: Beitrag der Maximumumgebungen zu $P(\bar{T})$ aus Abb. 3.6. Die blaue Kurve stellt die Höhe der theoretisch vorhergesagten Heaviside-Kante dar.

mit $\bar{b}_2 = \bar{b} + s \cdot \sin \varphi$ und $\delta_2(\bar{b}) = 2 \arcsin \frac{\bar{b}}{R} - 2 \arcsin \frac{\bar{b}}{R \cdot \xi_2}$ (vgl. Anhang B). Hieraus ergeben sich für das in Abb. 3.6 spezifizierte System durch numerische Maximierung die Extremstellen

$$\bar{b}_m \approx \pm 1,01668, \quad \varphi_m \approx \pi \pm 1,53045$$

mit $\bar{T}_m \approx 0,41026$. Abb. 3.9 zeigt, dass in $P(\bar{T})$ an dieser Stelle eine Heaviside-Kante mit der erwarteten Höhe gemäß Gleichung (A.9) auftritt.

Analog könnten sich prinzipiell auch Minima für Trajektorien ergeben, die nur die linke Scheibe durchlaufen. Allerdings liegen diese Minima außerhalb des \bar{b}/φ -Bereiches, für den Trajektorien nur die linke Scheibe durchlaufen. Die Minima werden also durch den Einfluss der rechten Scheibe ausgelöscht.

3.3.3 Zusammenfassung

Auch beim weichen Scheibenpaar treten sowohl Sattelpunkte als auch Extrempunkte in der Zeitverzögerungsfunktion auf. Die Zeitverzögerungsverteilung enthält die hieraus theoretisch vorhergesagten Strukturen. Insbesondere ist durch die Betrachtung des weichen Scheibenpaares gezeigt, dass logarithmische Singularitäten der Zeitverzögerungsverteilung sich nicht nur aus einfachen Koordinatentranslationen ergeben, sondern auch aus der Systemstruktur resultieren können.

4 Quantenmech. Zeitverzögerung

Um die Korrespondenz von klassischer und quantenmechanischer Zeitverzögerung prüfen zu können, werden in diesem Kapitel zunächst Möglichkeiten zur Quantisierung des klassischen Zeitverzögerungsbegriffes vorgestellt und außerdem praktische Fragestellungen bei der Auswertung der quantenmechanischen Zeitverzögerung geklärt.

4.1 Quantisierung der klassischen Definition

Eine Quantisierung des klassischen Zeitverzögerungsbegriffes mittels der im Kapitel 2 vorgestellten geometrischen Definitionen ist ohne Weiteres nicht möglich, da orts- und impulsbezogene Größen aufgrund der Heisenbergschen Unschärferelation nicht gleichzeitig gemessen werden können. So kann zum Beispiel in der Narnhofer-Zeitverzögerung (2.8)

$$T_N = \frac{\bar{\mathbf{q}}_e \cdot \mathbf{v}_e - \bar{\mathbf{q}}_a \cdot \mathbf{v}_a}{v^2}$$

nur entweder $\bar{\mathbf{q}}_{e/a}$ oder $\mathbf{v}_{e/a}$ bestimmt werden. Erschwerend kommt hier hinzu, dass die einlaufenden bzw. auslaufenden Anteile der quantenmechanischen Wellenfunktion nicht lokalisiert sind, sodass die in T_N eingehenden Größen meist gar nicht physikalisch sinnvoll bestimmt werden können. Es mag zwar möglich sein, z. B. den einlaufenden Streuzustand lokalisiert zu wählen, etwa als Gaußsches Wellenpaket. Durch die Interaktion mit dem Streupotential wird diese lokalisierte Struktur jedoch im Allgemeinen zerstört.

4.1.1 Definition über Aufenthaltszeit

Die einzige Ausnahme von den obigen Betrachtungen bildet die Definition der klassischen Zeitverzögerung mittels der Aufenthaltszeit im Interaktionsbereich. Wir wählen für die weitere Betrachtung die Formulierung (2.16)

$$T_{\text{cl}} = \lim_{R \rightarrow \infty} [\tau_{\text{cl}}(R) - \tau_{\text{cl},0,e}(R)], \quad (4.1)$$

wobei $\tau_{\text{cl},0,e}(R)$ die Aufenthaltszeit im Interaktionsbereich für ein Streuteilchen ist, das sich, ausgehend von derselben Anfangsbedingung, ohne Einfluss eines Streupotentials fortbewegt. Die Aufenthaltszeiten τ_{cl} erfordern keine Messung des Impulses, nur des Ortes, und sind daher

mit der Unschärferelation vereinbar. Dies gilt im Übrigen nicht für die modifizierte Formulierung mittels $\bar{\tau}_{\text{cl}}$ in Gleichung (2.22), da die Definition (2.20) von $\bar{\tau}_{e/a}$ eine Impulsabhängigkeit enthält. Zum Zwecke der Quantisierung von Gleichung (4.1) wird zunächst die Definition (2.14) der klassischen Aufenthaltszeit τ umformuliert zu

$$\tau_{\text{cl}}(R) = \int_{-\infty}^{\infty} dt \Theta(|\mathbf{q}(t)| < R). \quad (4.2)$$

Das Integral misst den Zeitbereich, in dem sich das Streuteilchen im Interaktionsbereich befindet. Ein quantenmechanisches Wellenpaket $\psi(\mathbf{q}, t)$ ist nicht exakt lokalisiert und kann sich gleichzeitig innerhalb und außerhalb des Interaktionsbereiches befinden. An die Stelle des Integranden tritt eine *Überlappfunktion* des Wellenpaketes mit dem Interaktionsbereich $I(R)$,

$$\tau_{\text{qm}}(R) := \int dt d_R(t) \quad \text{mit} \quad d_R(t) := \int_{I(R)} d^2q |\psi(\mathbf{q}, t)|^2. \quad (4.3)$$

Die Überlappfunktion $d_R(t)$ kann im Zustand $|\psi(t)\rangle$ als Erwartungswert des Projektionsoperators auf die Ortseigenzustände des Interaktionsbereiches

$$\hat{P}_{I(R)} = \int_{I(R)} d^2q |\mathbf{q}\rangle \langle \mathbf{q}|$$

aufgefasst werden. Die quantenmechanische Zeitverzögerungsfunktion lautet nun

$$T_{\text{qm}} = \lim_{R \rightarrow \infty} [\tau_{\text{qm}}(R) - \tau_{\text{qm},0,e}(R)]. \quad (4.4)$$

Die so definierte Zeitverzögerung T_{qm} kann, so wie T_{cl} in den vorangegangenen Kapiteln, durch $b \equiv b_e$ und $\varphi \equiv \varphi_e$ parametrisiert werden. Diese Parameter beschreiben eine Anfangsbedingung im Phasenraum, die durch ein lokalisiertes Wellenpaket $\psi(\mathbf{q}, t = 0)$ realisiert wird. Abhängig von der Form des Wellenpaketes können sich unterschiedliche Werte für T_{qm} ergeben. Allerdings ist aufgrund der Herleitung eine zumindest qualitative Korrespondenz von T_{cl} und T_{qm} zu erwarten, die Einflüsse der anfänglichen Form des Wellenpaketes dominieren sollte. Diese Korrespondenzannahme soll im Folgenden geprüft werden.

4.1.2 Wigner-Smith-Matrix

Neben der Aufenthaltszeitdefinition der Zeitverzögerung kann auch die Definition durch die reduzierte Wirkung quantisiert werden. Eine erste Darstellung bei Wigner [21] definiert die Zeitverzögerung in eindimensionalen Systemen,

$$T_{\text{qm}} = \hbar \cdot \frac{d\eta}{dE}, \quad (4.5)$$

als Energieableitung einer durch die Streuung verursachten Phasenverschiebung. Auf dieser Grundlage entwickelt Smith [22] eine allgemeine Definition der Zeitverzögerung als quantenmechanischen Operator (*Wigner-Smith-Matrix*)

$$\hat{Q} = \frac{\hbar}{i} \cdot \hat{S}^\dagger \cdot \frac{d\hat{S}}{dE} \quad (4.6)$$

mit der S-Matrix \hat{S} , die die Übergangswahrscheinlichkeit zwischen Zuständen durch die Streuung darstellt. [20] Allerdings ist in dieser Darstellung die Bedeutung des Erwartungswertes für Nicht-Eigenzustände unklar; nur für Eigenzustände kann mittels des Eigenwertes eine Zeitverzögerung zugewiesen werden. Somit gestalten sich Korrespondenzuntersuchungen zu $T_{cl}(b, \varphi)$ schwieriger. Da diese Untersuchungen ein Hauptinteresse dieser Arbeit sind, wird im Folgenden die zuvor dargestellte geometrische Definition verwendet.

4.1.3 Numerische Umsetzung

Die Integrationen in der Definition (4.3) der Aufenthaltszeit werden numerisch auf einen begrenzten Bereich im Ortsraum bzw. einen begrenzten Zeitbereich beschränkt. Weiter findet eine Diskretisierung mittels einem Zeitschritt δt sowie einem diskreten Ortsgitter mit der Gitterkonstante δx statt. Für ein Ortsgitter mit N Gitterpunkten pro Dimension, das für N_t Zeitschritte betrachtet wird, ergibt sich die Aufenthaltszeit

$$\tau_{qm}(R) = \delta t \cdot \sum_{i=1}^{N_t} d_R(t_i) \quad \text{mit } t_i = t_0 + i \cdot \delta t \quad (4.7a)$$

mit der Überlappfunktion

$$d_R(t) = \delta x^2 \cdot \sum_{\substack{j,k=1 \\ \mathbf{q}_{jk} \in I(R)}}^N |\psi(\mathbf{q}_{jk}, t)|^2, \quad (4.7b)$$

wobei $I(R)$ den zu Beginn von Kapitel 2 eingeführten Interaktionsbereich bezeichnet. Die praktischen Fragestellungen bei der Anwendung dieser Vorschrift werden nun erörtert.

4.2 Einheitenlose Formulierung

Für numerische Anwendungen müssen die in der zeitabhängigen Schrödingergleichung

$$i\hbar \cdot \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial t} = \hat{H} |\psi\rangle, \quad H(\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{p}}) = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{q}})$$

auftauchenden Größen einheitenlos gemacht werden. Es wird vorausgesetzt, dass alle freien Streuteilchen denselben Impuls und dieselbe Masse m haben.

Wir wählen eine typische Länge L , die im Allgemeinen aus der Form des Potentials folgt, und eine typische Energie E_0 , die das Doppelte der Energie eines freien Streuteilchens ist. Durch diese Wahl wird später erreicht, dass der Impuls eines freien Streuteilchens einheitenlos zu Eins wird. Einsetzen der einheitenlosen Größen $\bar{E} = E/E_0$, $\bar{V} = V/E_0$ und $\bar{\mathbf{q}} = \mathbf{q}/L$ und $\bar{\mathbf{p}} = \mathbf{p}/P$ in den Hamilton-Operator führt auf

$$\bar{H}(\hat{\bar{\mathbf{q}}}, \hat{\bar{\mathbf{p}}}) = \frac{\hat{\bar{\mathbf{p}}}^2}{2} \cdot \frac{P^2}{m \cdot E_0} + \bar{V}(\hat{\bar{\mathbf{q}}}) = \frac{\hat{\bar{\mathbf{p}}}^2}{2} + \bar{V}(\hat{\bar{\mathbf{q}}}).$$

Die einfache Struktur rechts wird durch die Wahl $P := \sqrt{m \cdot E_0}$ erreicht. Ein effektives Wirkungsquantum kann aus der Ortsdarstellung des Hamilton-Operators

$$H = -\frac{1}{2} \cdot \frac{\hbar^2}{m} \cdot \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{q}^2} + V(\mathbf{q})$$

abgeleitet werden. In einheitenlosen Größen ist

$$\bar{H} = -\frac{1}{2} \cdot \frac{\hbar^2}{mL^2 \cdot E_0} \cdot \frac{\partial^2}{\partial \bar{\mathbf{q}}^2} + \bar{V}(\bar{\mathbf{q}}) = -\frac{\hbar_{\text{eff}}^2}{2} \cdot \frac{\partial^2}{\partial \bar{\mathbf{q}}^2} + \bar{V}(\bar{\mathbf{q}})$$

aufgrund der passenden Wahl von

$$\hbar_{\text{eff}} := \frac{\hbar}{L \cdot \sqrt{m \cdot E_0}}.$$

Eine einheitenlose Zeit $\bar{t} = t/t^*$ folgt aus der zeitabhängigen Schrödingergleichung

$$i \cdot \frac{\hbar}{t^* \cdot E_0} \cdot \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial \bar{t}} = \hat{H} |\psi\rangle$$

$$i \cdot \hbar_{\text{eff}} \cdot \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial \bar{t}} \stackrel{!}{=} \hat{H} |\psi\rangle, \quad t^* := \frac{\hbar}{\hbar_{\text{eff}} \cdot E_0} = \sqrt{\frac{L^2 \cdot m}{E_0}}.$$

Insgesamt wurden durch die Umdefinitionen

$$\begin{aligned} \bar{H} &:= \frac{H}{E_0} & \bar{\mathbf{q}} &:= \frac{\mathbf{q}}{L} & \hbar_{\text{eff}} &:= \frac{\hbar}{L \cdot \sqrt{m \cdot E_0}} \\ \bar{V} &:= \frac{V}{E_0} & \bar{\mathbf{p}} &:= \frac{\mathbf{p}}{\sqrt{m \cdot E_0}} & \bar{t} &:= \frac{t \cdot \sqrt{E_0}}{L \cdot \sqrt{m}} \end{aligned}$$

die einheitenlosen Gleichungen

$$i\hbar_{\text{eff}} \cdot \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial \bar{t}} = \hat{H} |\psi\rangle \quad \bar{H}(\hat{\bar{\mathbf{q}}}, \hat{\bar{\mathbf{p}}}) = \frac{\hat{\bar{\mathbf{p}}}^2}{2} + \bar{V}(\hat{\bar{\mathbf{q}}})$$

entwickelt. Im weiteren Verlauf werden die einheitenlosen Gleichungen und Größen verwendet, ohne dass dies durch Überstreichung oder den Index an \hbar_{eff} explizit angezeigt wird.

4.3 Gegenüberstellung von Zeitentwicklungsmethoden

Da im Rahmen dieser Arbeit keine monoenergetischen, sondern lokalisierte Wellenpakete betrachtet werden, scheiden die meisten numerischen Zeitentwicklungsverfahren als nicht praktikabel aus. Zum Beispiel besteht eine einfache analytische Lösung darin, den Zustand $|\psi\rangle$ in Eigenfunktionen des Hamilton-Operators zu entwickeln. Der analytische Propagator

$$\hat{U}(\delta t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \cdot \hat{H} \cdot \delta t\right), \quad |\psi(t + \delta t)\rangle = \hat{U}(\delta t) |\psi(t)\rangle, \quad (4.8)$$

stellt dann pro Eigenfunktionsanteil nur eine Phasenschiebung dar. Dieses Verfahren lässt sich aber auf nicht monoenergetische Wellenpakete in offenen Streupotentialen nicht anwenden, da Eigenfunktionen unendlich vieler Energien beitragen. Selbst bei Diskretisierung der Energien zum Beispiel durch eine zusätzliche Randbedingung weit außerhalb des Interaktionsbereiches liegen für jede einzelne Energie sehr viele Eigenfunktionen vor. Diese können im Rahmen der verfügbaren Rechenzeit und Speicherkapazität nicht ermittelt werden.

Andere Verfahren, etwa das Euler-Verfahren und die Tschebyscheff-Methode, versuchen, die Exponentialfunktion in (4.8) durch ein Polynom zu approximieren [23]. Bei nicht monoenergetischen Wellenpaketen sind jedoch sehr viele Koeffizienten nötig, damit die verwendeten Polynome eine gute Approximation darstellen.

Stattdessen wird im Rahmen dieser Arbeit die Split-Operator-Methode [18] verwendet, bei der die Beiträge zum Propagator von kinetischer und potentieller Energie direkt als Phasenfaktoren auf das ortsdiskretisierte Wellenpaket bzw. dessen Fourier-Transformation im Impulsraum angewandt werden. In diesem Verfahren sind insbesondere die Fourier-Transformationen numerisch aufwändig; hierfür können jedoch existierende hochoptimierte Programmbibliotheken zur schnellen Fouriertransformation (FFT) [24, 25] verwendet werden.

Die Split-Operator-Methode wird eingesetzt, da sie besser auf größere Energiebereiche skaliert als andere Zeitentwicklungsmethoden. Es muss nur sichergestellt sein, dass die eingesetzten diskreten Orts- und Impulsgitter alle relevanten Energien auflösen können.

4.4 Split-Operator-Methode

Die Grundlage für die Split-Operator-Methode ist die Operatoridentität [26, S. 340]

$$e^{(\hat{A}+\hat{B})\cdot c} = e^{\hat{A}\cdot c} \cdot e^{\hat{B}\cdot c} + O(c^2). \quad (4.9)$$

Von dieser Operatoridentität existieren auch komplexere Darstellungen mit geringeren Fehlern; siehe hierzu Abschnitt 4.4.2. Die Konstante c ist im konkreten Fall proportional zum Zeitschritt δt ; der numerische Fehler durch das Verfahren geht also quadratisch mit δt . Gleichung (4.9) wird auf den Propagator (4.8) mit $\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$ angewandt. Es ergibt sich

$$\hat{U}(\delta t) = \exp[-i\zeta \cdot (V(\hat{\mathbf{q}}) + T(\hat{\mathbf{p}}))] \approx \exp[-i\zeta \cdot V(\hat{\mathbf{q}})] \cdot \exp[-i\zeta \cdot T(\hat{\mathbf{p}})],$$

wobei $\zeta \equiv \delta t/\hbar$ als Abkürzung verwendet wird. Der Propagator wird auf $|\psi_1\rangle = |\psi(t)\rangle$ angewandt, um den Zustand $|\psi_2\rangle = |\psi(t + \delta t)\rangle$ zu erhalten. Die Zustände werden in Ortsdarstellung gespeichert, da diese Darstellung für (4.7b) benötigt wird. Damit in

$$\psi_2(\mathbf{q}) = \langle \mathbf{q} | e^{-i\zeta \cdot V(\hat{\mathbf{q}})} \cdot e^{-i\zeta \cdot T(\hat{\mathbf{p}})} | \psi_1 \rangle \quad (4.10)$$

der Operator $T(\hat{\mathbf{p}})$ ausgewertet werden kann, muss durch passenden Einschub von Orts- und Impulsbasen wie in

$$\begin{aligned} \psi_2(\mathbf{q}) &= \langle \mathbf{q} | e^{-i\zeta \cdot V(\hat{\mathbf{q}})} \cdot \left[\int d^2 p \, |\mathbf{p}\rangle \langle \mathbf{p}| \right] \cdot e^{-i\zeta \cdot T(\hat{\mathbf{p}})} \cdot \left[\int d^2 q' \, |\mathbf{q}'\rangle \langle \mathbf{q}'| \right] | \psi_1 \rangle \\ &= e^{-i\zeta \cdot V(\mathbf{q})} \cdot \int d^2 p \, \langle \mathbf{q} | \mathbf{p} \rangle \cdot e^{-i\zeta \cdot T(\mathbf{p})} \cdot \int d^2 q' \, \langle \mathbf{p} | \mathbf{q}' \rangle \cdot \psi_1(\mathbf{q}') \end{aligned}$$

vorübergehend in Impulsdarstellung gewechselt werden. Unter Ausnutzung des bekannten Skalarproduktes zwischen Orts- und Impulseigenvektoren verbleibt

$$\psi_2(\mathbf{q}) = e^{-i\zeta \cdot V(\mathbf{q})} \cdot \int d^2 p \, \exp\left(\frac{i}{\hbar} \cdot \mathbf{q}\mathbf{p}\right) \cdot e^{-i\zeta \cdot T(\mathbf{p})} \cdot \int d^2 q' \, \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \cdot \mathbf{q}'\mathbf{p}\right) \cdot \psi_1(\mathbf{q}').$$

Der Basiswechsel kann durch diskrete Fourier-Transformationen dargestellt werden, indem die Diskretisierung des Ortes und des Impulses berücksichtigt wird. Dazu werden die Orte \mathbf{q} und Impulse \mathbf{p} gemäß

$$\begin{aligned} \mathbf{q} &\rightarrow \mathbf{q}_0 + \mathbf{l} \cdot \delta q & \mathbf{p} &\rightarrow \mathbf{p}_0 + \mathbf{k} \cdot \delta p \\ \int d^2 q &\rightarrow (\delta q)^2 \cdot \sum_{l_x, l_y=1}^N & \int d^2 p &\rightarrow (\delta p)^2 \cdot \sum_{k_x, k_y=1}^N \end{aligned}$$

durch Gitterindizes \mathbf{l} und \mathbf{k} ($l_x, l_y, k_x, k_y = 1, \dots, N$) ersetzt. In den Exponentialtermen $\sim \mathbf{q}\mathbf{p}$ bzw. $\sim \mathbf{q}'\mathbf{p}$ heben sich die Anteile $\sim \mathbf{q}_0$ gegenseitig weg,

$$\begin{aligned} \mathbf{q}\mathbf{p} &= \mathbf{q}_0\mathbf{p}_0 + \delta p \cdot \mathbf{q}_0\mathbf{k} + \delta q \cdot \mathbf{l}\mathbf{p}_0 + \delta q\delta p \cdot \mathbf{l}\mathbf{k}, \\ \mathbf{q}'\mathbf{p} &= \underbrace{\mathbf{q}_0\mathbf{p}_0 + \delta p \cdot \mathbf{q}_0\mathbf{k}}_{\text{fallen weg}} + \delta q \cdot \mathbf{l}'\mathbf{p}_0 + \delta q\delta p \cdot \mathbf{l}'\mathbf{k}. \end{aligned}$$

In der Zeitentwicklungsvorschrift

$$\begin{aligned} \psi_2(\mathbf{l}) = & (\delta q \delta p)^2 \cdot P_3(\mathbf{l}) \cdot \sum_{\mathbf{k}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \cdot \delta q \delta p \cdot \mathbf{l} \mathbf{k}\right) \cdot P_2(\mathbf{k}) \\ & \cdot \sum_{\mathbf{l}'} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \cdot \delta q \delta p \cdot \mathbf{l}' \mathbf{k}\right) \cdot P_1(\mathbf{l}') \cdot \psi_1(\mathbf{l}') \end{aligned} \quad (4.11)$$

verbleiben einerseits gemischt orts- und impulsabhängige Phasenfaktoren, die den Basiswechsel vermitteln. Andererseits erscheinen die Phasenfaktoren

$$\begin{aligned} P_3(\mathbf{l}) &= \exp\left[-i\zeta \cdot V(\mathbf{q}(\mathbf{l})) + \frac{i}{\hbar} \cdot \delta q \cdot \mathbf{l} \mathbf{p}_0\right] \\ P_2(\mathbf{k}) &= \exp\left[-i\zeta \cdot T(\mathbf{p}(\mathbf{k}))\right] \\ P_1(\mathbf{l}') &= \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \cdot \delta q \cdot \mathbf{l}' \mathbf{p}_0\right], \end{aligned}$$

die in jedem Zeitschritt an den Zustand multipliziert werden müssen, von diesem aber unabhängig sind. Sie können somit einmalig vorberechnet werden, sofern der Zeitschritt δt konstant bleibt. Um die Basiswechsel durch schnelle Fouriertransformationen (FFT) der Form

$$\begin{aligned} \mathcal{F}[f(\mathbf{l})](\mathbf{k}) &:= \sum_{\mathbf{l}} \exp\left(-\frac{2\pi i}{N} \cdot \mathbf{k} \mathbf{l}\right) \cdot f(\mathbf{l}) \\ \mathcal{F}^{-1}[g(\mathbf{k})](\mathbf{l}) &:= \sum_{\mathbf{k}} \exp\left(+\frac{2\pi i}{N} \cdot \mathbf{k} \mathbf{l}\right) \cdot g(\mathbf{k}) \end{aligned}$$

darstellen zu können, muss

$$\delta q \cdot \delta p = \frac{2\pi\hbar}{N} \quad (4.12)$$

gefordert werden. Dann können FFT und inverse FFT in (4.11) identifiziert werden, sodass sich die Zeitentwicklungsvorschrift zu

$$\psi_2(\mathbf{l}) = (\delta q \delta p)^2 \cdot P_3(\mathbf{l}) \cdot \mathcal{F}^{-1}\left[P_2(\mathbf{k}) \cdot \mathcal{F}[P_1(\mathbf{l}') \cdot \psi_1(\mathbf{l}')](\mathbf{k})\right](\mathbf{l}) \quad (4.13)$$

vereinfacht. Insgesamt besteht jeder Zeitschritt also aus fünf Teilschritten:

1. Multipliziere Wellenpaket mit Phasenfaktor P_1 .
2. Transformiere Wellenpaket mit FFT in Impulsraum.
3. Multipliziere Wellenpaket mit Phasenfaktor P_2 .
4. Transformiere Wellenpaket mit inverser FFT in Ortsraum.
5. Multipliziere Wellenpaket mit Phasenfaktor P_3 und Renormierungsfaktor $(\delta q \delta p)^2$.

4.4.1 Parameterwahl

Vor der Ausführung der Split-Operator-Methode steht die Wahl einiger freier Parameter des Problems. Neben dem Zeitschritt δt sind dies die Parameter \mathbf{q}_0 , \mathbf{p}_0 , δq , δp , N des Orts- und Impulsgitters.

Im konkreten Fall ist das Potential sowie durch R der das Potential umschließende Interaktionsbereich $I(R)$ gegeben. Orts- und Impulsgitter sind daher um Null zentriert zu wählen, mit den Grenzen

$$|q_{0,x}| = |q_{0,y}| =: q_{\max} = \frac{N-1}{2} \cdot \delta q, \quad |p_{0,x}| = |p_{0,y}| =: p_{\max} = \frac{N-1}{2} \cdot \delta p. \quad (4.14)$$

Freie Wellenpakete werden immer mit einem Impuls $|\mathbf{p}_0| = |\mathbf{v}_0| = 1$ gestartet. Außerhalb des Interaktionsbereiches ist $V(\mathbf{q} \notin I(R)) = V_0 = 0$. Aus dem minimalen Wert des Potentials $V_{\min} = \min_{\mathbf{q} \in I(R)} V(\mathbf{q})$ folgt eine erste Abschätzung für den darzustellenden Impulsbereich: Das Gitter sollte zumindest so groß gewählt sein, dass die Energie $E = p_0^2 + V_0$ eines freien Wellenpaketes auch bei dessen Eindringen in das Potential V_{\min} noch durch das Gitter darstellbar ist. Es ist also mindestens

$$p_{\max} = \sqrt{p_0^2 + 2 \cdot (V_0 - V_{\min})}. \quad (4.15)$$

Als zugehörige erste Abschätzung für q_{\max} kann der Interaktionsradius R genommen werden. Weiterhin ist zu berücksichtigen, dass die Wellenpakete aufgrund ihrer Lokalisierung eine Orts- und Impulsunschärfe haben. Als Anfangsbedingungen werden Gausssche Wellenpakete verwendet, deren analytische Darstellung eine Abschätzung erlaubt, wie weit die Gitter vergrößert werden müssen, um das Wellenpaket bis zu einer numerischen Genauigkeit

$$\varepsilon < |\psi(p)| = \sqrt[4]{\frac{1}{2\pi \cdot (\Delta p)^2}} \cdot \exp\left[-\frac{(p-p_0)^2}{4 \cdot (\Delta p)^2}\right] \quad \text{und analog für } q$$

darstellen zu können. Für ein Gaussches Wellenpaket gilt $\Delta x \cdot \Delta p = \hbar/2$. Wir wählen ein Paket mit symmetrischer Unschärfe in beiden Koordinaten, also $\Delta x = \Delta p = \sqrt{\hbar/2}$, und erhalten einen zusätzlichen Beitrag zu

$$p_{\max} = \sqrt{p_0^2 + 2 \cdot (V_0 - V_{\min})} + \sqrt{2\hbar \cdot \ln \frac{1}{\sqrt[4]{\pi\hbar} \cdot \varepsilon}}, \quad (4.16)$$

$$q_{\max} = R + \sqrt{2\hbar \cdot \ln \frac{1}{\sqrt[4]{\pi\hbar} \cdot \varepsilon}} + 1,5 \cdot R_{\min}. \quad (4.17)$$

Hierbei wird in q_{\max} noch ein zusätzlicher Anteil proportional zum kleinsten möglichen Interaktionsradius R_{\min} , effektiv also proportional zur Ausdehnung des Potentials, hinzugefügt. Dieser berücksichtigt die periodischen Randbedingungen, die die Fourier-basierte Split-Ope-

rator-Methode erzeugt: Trifft das Wellenpaket auf einen Rand des Ortsgitters, so passiert es diesen und erscheint am gegenüberliegenden Rand. Das Wellenpaket könnte auf diese Weise mehrmals den Interaktionsbereich betreten. Der zusätzliche Beitrag zu q_{\max} verzögert effektiv den Wiedereintritt des durch die Zeitentwicklung zerflossenen Wellenpaketes in den Interaktionsbereich (siehe hierzu auch Abschnitt 4.5).

Um nun die Gitterkonstanten δq und δp bzw. die Gittergröße N zu bestimmen, werden die Gleichungen (4.14) umgestellt und in (4.12) eingesetzt. Aus

$$\left(\frac{2 \cdot q_{\max}}{N-1}\right) \cdot \left(\frac{2 \cdot p_{\max}}{N-1}\right) = \frac{2\pi\hbar}{N} \quad (4.18)$$

ergibt sich dann mit der Näherung $N-1 \approx N$ eine einfache Lösung für

$$N = \left\lfloor \frac{2q_{\max} \cdot p_{\max}}{\pi\hbar} \right\rfloor = \left\lfloor \frac{4q_{\max} \cdot p_{\max}}{h} \right\rfloor. \quad (4.19)$$

Die zweite Form bietet sich an, wenn h^{-1} vorgegeben ist. Aufgrund der Näherung $N-1 \approx N$ und der Rundung ist das so ermittelte N nicht exakt zu allen anderen Größen kompatibel. Um diese Fehler zu beseitigen, empfiehlt es sich, entweder q_{\max} oder p_{\max} umzuskalieren, indem N in (4.18) eingesetzt wird und daraus eine Gittergrenze neu berechnet wird.

Diese Umskalierung erlaubt auch, das N für numerische Zwecke nochmals geringfügig anzupassen, denn FFT-Algorithmen funktionieren am effizientesten, wenn N in kleine Primfaktoren zerlegbar ist. Eine Darstellung von N durch das nächstgelegene $N' = 2^i \cdot 3^j \cdot 5^k$ ($i, j, k \in \mathbb{N}$) erzeugt i. A. nicht mehr als 2% Abweichung.

Die Gitterschrittweiten ergeben sich nun aus (4.14). Zuletzt muss noch der Zeitschritt abgeschätzt werden. In Analogie zum Abtasttheorem wird

$$\delta t = \frac{\delta q}{p_{\max}} \quad (4.20)$$

verwendet.

4.4.2 Zur Abschätzung des systematischen Fehlers

Wie oben angemerkt hat die Split-Operator-Methode aufgrund von (4.9) einen systematischen Fehler $O((\delta t)^2)$. Dieser Fehler kann auf $O((\delta t)^3)$ reduziert werden, indem statt (4.9)

$$e^{(\hat{A}+\hat{B}) \cdot c} = e^{\hat{B} \cdot c/2} \cdot e^{\hat{A} \cdot c} \cdot e^{\hat{B} \cdot c/2} + O(c^3) \quad (4.21)$$

zugrundegelegt wird [26, S. 340]. Die Anwendung dieser Identität auf den Propagator (4.8) liefert eine zu (4.10) alternative Zeitentwicklungsvorschrift von $|\psi_1\rangle$ zu

$$|\psi_2\rangle = e^{-i\tilde{\xi} \cdot V(\hat{\mathbf{q}})/2} \cdot e^{-i\tilde{\xi} \cdot T(\hat{\mathbf{p}})} \cdot e^{-i\tilde{\xi} \cdot V(\hat{\mathbf{q}})/2} |\psi_1\rangle.$$

Diese Definition ist strukturell äquivalent zu (4.10), wenn $|\psi_i\rangle$ durch $|\tilde{\psi}_i\rangle = e^{-i\zeta \cdot V(\hat{\mathbf{q}})/2} \cdot |\psi_i\rangle$ ersetzt wird; dann ist

$$|\tilde{\psi}_2\rangle = e^{-i\zeta \cdot V(\hat{\mathbf{q}})} \cdot e^{-i\zeta \cdot T(\hat{\mathbf{p}})} |\tilde{\psi}_1\rangle. \quad (4.22)$$

$|\tilde{\psi}_i\rangle$ und $|\psi_i\rangle$ unterscheiden sich voneinander nur durch eine ortslokale Phasenverschiebung, die in die Aufenthaltswahrscheinlichkeit $|\psi_i(\mathbf{q})|^2$ nicht eingeht. Da sich die relevanten Messgrößen, die Aufenthaltszeiten im Interaktionsradius, nur aus diesen Ortsaufenthaltswahrscheinlichkeiten ergeben, sind die Zeitschritte (4.10) und (4.22) formal äquivalent, weswegen auch (4.10) maximal einen systematischen Fehler von $O((\delta t)^3)$ verursachen kann. Von dieser Überlegung sind numerische Fehler unberührt; siehe hierzu insbesondere Abschnitt 4.6 und 5.3.

4.5 Unterdrückung der periodischen Randbedingung

Wie bereits angesprochen, führt die durch die Fourier-Transformationen entstehende periodische Randbedingung am Ortsgitter dazu, dass ein Wellenpaket, das den Interaktionsbereich verlassen hat, durch den Rand hindurch auf die andere Seite des Gitters gelangen und den Interaktionsbereich erneut betreten kann. Abb. 4.1a zeigt typische Verläufe der Überlappfunktion $d_R(t)$ für ein gestreutes Teilchen und das gemäß (4.4) zugehörige freie Teilchen.

Um diesen Effekt zu kompensieren, wird in der Nähe der Ränder des numerischen Gitters ein imaginäres *Unterdrückungspotential* hinzugefügt, das nach außen laufende Teile des Wellenpa-

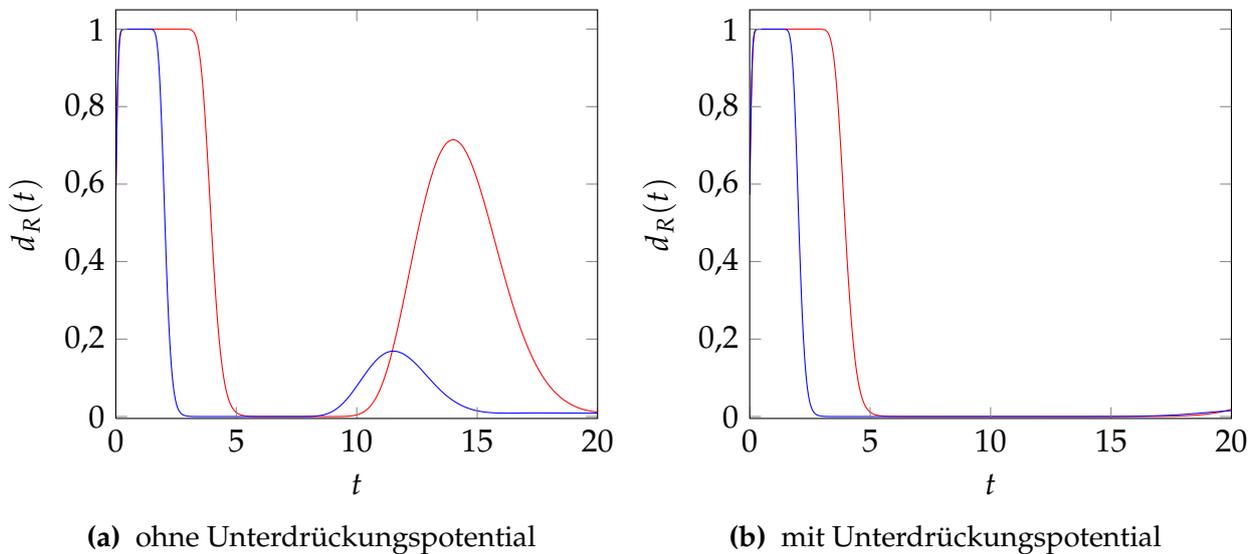


Abbildung 4.1: Typischer Verlauf des Überlapps $d_R(t)$ für ein an einem harten Streupotential gestreutes Teilchen (blau) und das zugehörige freie Teilchen (rot). Das eigentliche Streueignis findet bei $0 \leq t \leq 5$ statt; ab $t = 8$ haben die Teilchen die periodische Randbedingung passiert und betreten den Interaktionsbereich bei fehlender Unterdrückung erneut.

System: harte Scheibe (Radius $r = 1$) zentriert bei $\mathbf{q} = (0, 0)$, $R = 2$, $\hbar^{-1} = 10$
Anfangsbedingung: $b = 0$, $\varphi = 0$

ketes auslöscht. [23] Hier wird ein Woods-Saxon-förmiges Potential

$$V_s(\mathbf{q}) = \frac{-i \cdot c}{1 + e^{a \cdot [s(\mathbf{q}) - b]}}$$

verwendet, wobei $s(\mathbf{q})$ der Abstand des Punktes \mathbf{q} vom nächstgelegenen Gitterrand ist. Die Koeffizienten $a, b, c > 0$ werden so gewählt, dass das Potential im Interaktionsbereich betragsmäßig numerisch klein bleibt, jedoch breit und hoch genug ist, dass das Wellenpaket es nicht durch die periodische Randbedingung durchqueren kann.

4.6 Harte Potentiale

Im Rahmen dieser Arbeit wird die quantenmechanische Zeitverzögerung an einem harten Modellpotential berechnet. Ein hartes Potential im engeren Sinne ist eine Potentialfunktion mit der Bildmenge $\{0, \infty\}$. Das heißt, das Potential ist überall entweder null oder unendlich. Ein Beispiel ist das harte Scheibenpotential

$$V(\mathbf{q}) = \begin{cases} V_\infty = \infty & |\mathbf{q} - \mathbf{q}_0| \leq r \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

mit dem Zentrum \mathbf{q}_0 und dem Radius r . Das klassische Problem bei harten Potentialen besteht darin, dass insbesondere gekrümmte Randlinien des harten Bereiches auf einem diskreten Ortsgitter nur unzureichend wiedergegeben werden können [23, S. 52 ff.].

Dieses Problem wird in einer ersten Abschätzung für die in dieser Arbeit bearbeiteten Problemstellungen als nicht signifikant angesehen. Wird zum Beispiel die Zeitentwicklung für das obige harte Scheibenpotential mit $r = 1$ und $\mathbf{q}_0 = (0, 0)$ sowie dem Interaktionsradius $R = 2$ betrachtet, so wählt der in Abschnitt 4.4.1 beschriebene Algorithmus für $\hbar^{-1} = 10$ eine Ortsgitterschrittweite $\delta q \approx 0,024$. Die Scheibe überdeckt 83 Gitterpunkte pro Koordinatenrichtung und wird somit vom Gitter hinreichend gut aufgelöst. Zunächst nehmen wir an, dass andere Fehler, vor allem aus der Zeitdiskretisierung, im Allgemeinen einen größeren Einfluss haben werden als eine nicht hinreichende Gitterrepräsentation des Potentials. Diese Annahme wird in Abschnitt 5.3 überprüft.

In der Praxis hat sich jedoch ein ganz anderes Problem als signifikant erwiesen, welches kein allgemeines numerisches Problem ist, sondern spezifisch mit der Split-Operator-Methode zusammenhängt. Das Potential geht in die Propagationsvorschrift (4.13) über den Phasenfaktor

$$P_3(\mathbf{l}) \sim \exp \left[-i \frac{\delta t}{\hbar} \cdot V(\mathbf{q}(\mathbf{l})) \right]$$

ein, wobei δt und \hbar üblicherweise in derselben Größenordnung liegen. Für $\mathbf{q}(\mathbf{l})$ innerhalb des harten Potentialbereiches wird $V_\infty = \infty$ numerisch durch einen im Vergleich zur üblichen Ener-

gieskala sehr großen Wert modelliert, z. B. $V_\infty > 10^5$. Durch die Wahlfreiheit von V_∞ wird der mit V_∞ schnell oszillierende Term $P_3(\mathbf{1})$ im Wesentlichen zur Zufallszahl.

Die offensichtliche Lösung dieses Problems besteht darin, die Zeitskala δt so anzupassen, dass das Argument der Exponentialfunktion in P_3 immer deutlich unter 2π bleibt. Dies entspricht jedoch einer Verkleinerung von δt um mehrere Größenordnungen, was mit einem nicht zu rechtfertigenden numerischen Aufwand verbunden wäre.

Es gibt aber eine Alternative. Zunächst führen wir für $V(\mathbf{q}(\mathbf{1})) = V_\infty$ die Darstellung

$$\exp\left(-i\frac{\delta t}{\hbar} \cdot V_\infty\right) =: \exp(-i \cdot \gamma) \quad (4.23)$$

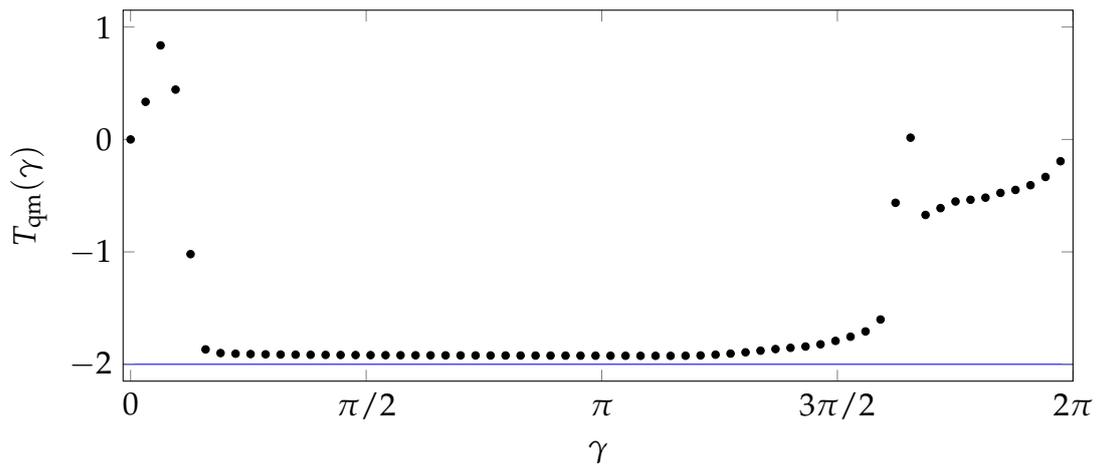
ein, wobei γ als *harter Phasenfaktor* bezeichnet wird. In Abb. 4.2a sieht man beispielhaft, wie die numerische Zeitverzögerung von γ abhängt. Das Streupotential ist eine im Koordinatenursprung zentrierte harte Scheibe mit dem Radius $r = 1$. Das Streuteilchen fliegt mit einem Streuparameter $b = 0$ ein, ist also auf den Mittelpunkt der Scheibe zentriert.

Die klassische Zeitverzögerung ergibt sich zu $T_{cl} = -2 \cdot r/v = -2$; für den quantenmechanischen Fall wird ein ähnliches Ergebnis erwartet. Zumindest muss die Zeitverzögerung negativ sein, weil das mit dem Potential interagierende Wellenpaket aufgrund der Reflexion am Potential den Interaktionsbereich früher verlässt als das zugehörige freie Wellenpaket (vgl. Abb. 4.1). Das erwartete Verhalten tritt nur für $0,5 \leq \gamma \leq 5$ ein. Für $\gamma \rightarrow 0$ bzw. $\gamma \rightarrow 2\pi$ steht T_{qm} aufgrund numerischer Fehler kaum noch in Bezug zum erwarteten Ergebnis. Zumindest für $\gamma = 0$ ist dies anschaulich: Der Beitrag des Potentials zum Phasenfaktor P_3 verschwindet dann, sodass das Streuteilchen das Potential nicht mehr wahrnehmen kann. Somit ist $T_{qm}(\gamma = 0) = 0$. Um die Split-Operator-Methode für harte Potentiale numerisch zu stabilisieren, muss möglichst automatisch ein günstiger harter Phasenfaktor γ ausgewählt werden.¹

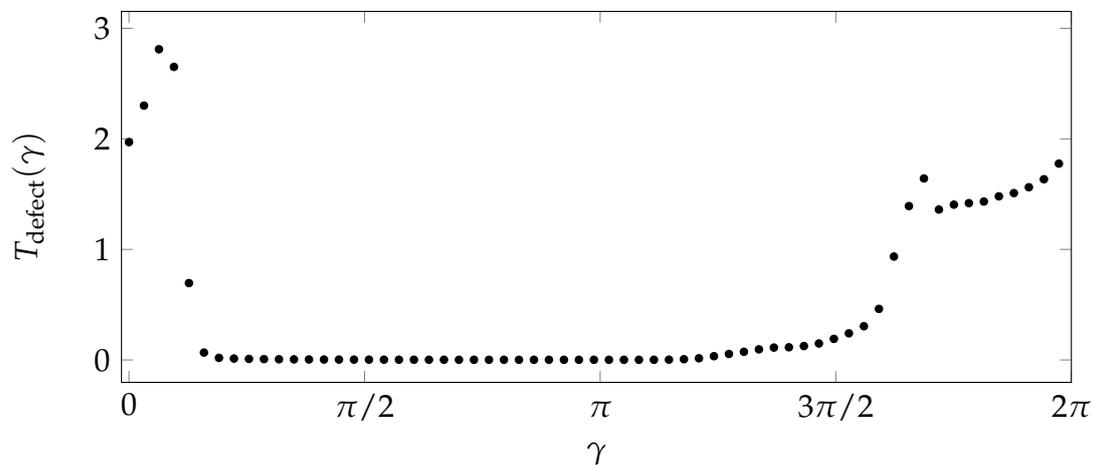
Eine Auswahlmethode basierend auf der numerisch ermittelten Zeitverzögerung in Abhängigkeit vom harten Phasenfaktor kommt nicht infrage. Erstens unterliegt die Funktion $T_{qm}(\gamma)$, wie in Abb. 4.2a ersichtlich, im Allgemeinen starken lokalen Fluktuationen und ist daher schlecht für numerische Suchalgorithmen z. B. für Extremstellen geeignet. Zweitens ist die Berechnung einer Zeitverzögerung ein für Kalibrationszwecke unnötig zeitaufwändiger Prozess.² Drittens existiert keine allgemeine Bewertungsmöglichkeit für die Güte eines bestimmten T_{qm} -Wertes: Der einzige Anhaltspunkt hierfür wäre die entsprechende klassische Zeitverzögerung T_{cl} , aber die Korrespondenz zwischen diesen beiden Größen ist gerade eine Hypothese, die in dieser Arbeit untersucht werden soll. Die Bewertung der numerischen Ergebnisse auf der Grundlage der klassisch-quantenmechanischen Korrespondenz würde also ein Zirkularargument darstellen. Zumindest das letzte Problem kann relativ einfach beseitigt werden, indem statt $T_{qm}(\gamma)$ eine angepasste Maßfunktion zur Bewertung der numerischen Ergebnisse herangezogen wird.

¹Dies setzt implizit die Existenz eines solchen γ voraus, was aber in Anbetracht der betrachteten Energien als überaus wahrscheinlich angesehen werden kann.

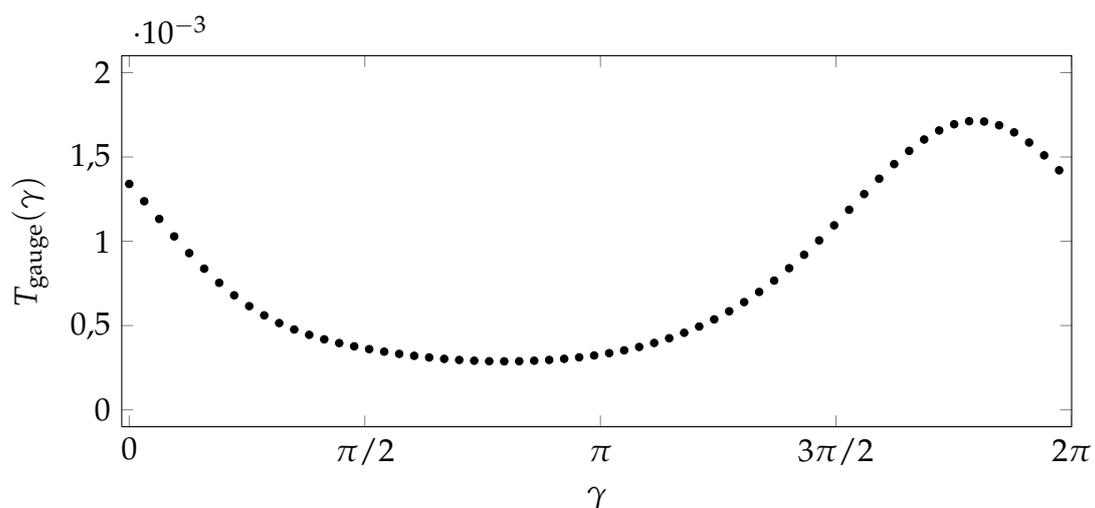
²Die Berechnung der in Abb. 4.2a dargestellten Datenreihe zum Beispiel hat auf einem leistungsfähigen aktuellen PC mehrere Stunden gedauert.



(a) numerisch ermittelte Zeitverzögerung für verschiedene γ ; erwartet wird $T_{\text{qm}} \approx T_{\text{cl}} = -2$ (blaue Linie)



(b) zeitintegrierter Defektüberlapp T_{defect} als Maß der Qualität des numerischen Ergebnisses



(c) Verlauf der Maßfunktion T_{gauge}

Abbildung 4.2: Einfluss des harten Phasenfaktors γ (Setup wie Abb. 4.1) auf Messgrößen, die einen Rückschluss auf die Qualität des numerischen Ergebnisses ermöglichen

Sei $V(\mathbf{q})$ ein hartes Potential, dessen harter Bereich gemäß

$$V(\mathbf{q}) = V_\infty \cdot \chi_{\mathcal{V}}(\mathbf{q}) = \begin{cases} V_\infty & \mathbf{q} \in \mathcal{V} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

durch die Menge $\mathcal{V} \subset \mathbb{R}^2$ beschrieben ist. Nun sei eine als *Defekt-Überlapp* d_{defect} bezeichnete Größe in Analogie zu (4.7) gegeben durch

$$d_{\text{defect}}(t, \gamma) = \delta x^2 \cdot \sum_{j,k=1}^N \chi_{\mathcal{V}}(\mathbf{q}_{jk}) \cdot |\psi(\mathbf{q}_{jk}, t)|^2.$$

Der zeitintegrierte Defekt-Überlapp

$$T_{\text{defect}}(\gamma) = \delta t \cdot \sum_{i=1}^{N_t} d_{\text{defect}}(t_i, \gamma)$$

ist eine positive Maßfunktion, die im exakten Falle Null werden sollte. Als optimale Näherung des Verfahrens an die Realität kann man also dasjenige γ^* ansehen, für das $T_{\text{defect}}(\gamma^*)$ minimal wird. Wie Abb. 4.2b zeigt, besteht eine starke Korrelation zwischen dem Verhalten von $T_{\text{qm}}(\gamma)$ und $T_{\text{defect}}(\gamma)$. Es bleibt aber die bereits an T_{qm} gestellte Kritik bestehen, dass die Berechnung für Kalibrationszwecke unnötig zeitaufwändig ist, und die Funktion aufgrund ihres sprunghaften Verlaufes für numerische Optimierungsverfahren ungeeignet ist.

Da der optimale Phasenfaktor γ^* ein Parameter des Integrationsverfahrens ist, liegt der Wunsch nahe, ein Bewertungsverfahren zu konstruieren, das von bestimmten Anfangsbedingungen unabhängig ist und einfach auf verschieden ausgeformte harte Potentiale adaptiert werden kann. Im Rahmen dieser Arbeit wird das folgende Verfahren verwendet: Anhand der Menge \mathcal{V} wird auf dem numerischen Ortsgitter ein physikalisch sinnloser Messzustand

$$\psi_{\text{gauge}}(\mathbf{q}_{jk}, t = 0) = 1 - \chi_{\mathcal{V}}(\mathbf{q}_{jk}) = \begin{cases} 0 & \mathbf{q}_{jk} \in \mathcal{V} \\ 1 & \text{sonst} \end{cases}$$

konstruiert. Dieser Zustand wird für einen bestimmten harten Phasenfaktor γ zeitentwickelt. Der entstehende Defekt-Überlapp wird für z. B. $N_t = 10$ Zeitschritte zu $T_{\text{gauge}}(\gamma)$ aufintegriert. Diese Funktion wird im Definitionsbereich $\gamma \in [0, 2\pi]$ einer numerischen Minimierung unterzogen, um γ^* näherungsweise zu bestimmen.

Die Maßfunktion T_{gauge} ist beispielhaft in Abb. 4.2c aufgetragen. Auffällig ist, dass $T_{\text{gauge}}(\gamma)$ im Unterschied zu den vorher betrachteten Größen eine glatte Funktion ist, sodass numerische Minimierungsalgorithmen angewandt werden können. Aufgrund der geringen Anzahl an Zeitschritten, die zur Berechnung eines T_{gauge} -Wertes benötigt wird, läuft die Minimumssuche in

vertretbarer Rechenzeit.³

Bei der Bestimmung von γ^* handelt es sich nur um eine Optimierung der numerischen Stabilität. Das Ergebnis aller Berechnungen muss davon unabhängig kritischer Betrachtung standhalten. Zum Beispiel ist es sinnvoll, auch bei Berechnungen der Zeitverzögerung den zeitintegrierten Defekt-Überlapp des Wellenpaketes zu bestimmen, da diese Größe oft ein gutes Maß für die Qualität des erhaltenen Zeitverzögerungswertes darstellt.

³Abb. 4.2c enthält 65 Datenpunkte, die in etwa zwanzig Sekunden berechnet werden. Die Minimumssuche benötigt etwa zehn Iterationen und somit etwa drei bis vier Sekunden. Für die zugehörige Zeitverzögerung rechnet der PC etwa zehn Minuten.

5 Quantenmechanische Modellsysteme

In diesem Kapitel wird das Modellsystem der verschobenen harten Scheibe behandelt. Die Auswertung des weichen Scheibenpaars hat sich als nicht praktikabel herausgestellt, da in der Zeitverzögerungsfunktion die Bereiche stetigen Verhaltens insbesondere um die Sattelpunkte vergleichsweise klein sind. Solche Strukturen lassen sich nur mit einem sehr kleinen effektiven Wirkungsquantum auflösen, was numerisch aufwändig ist.

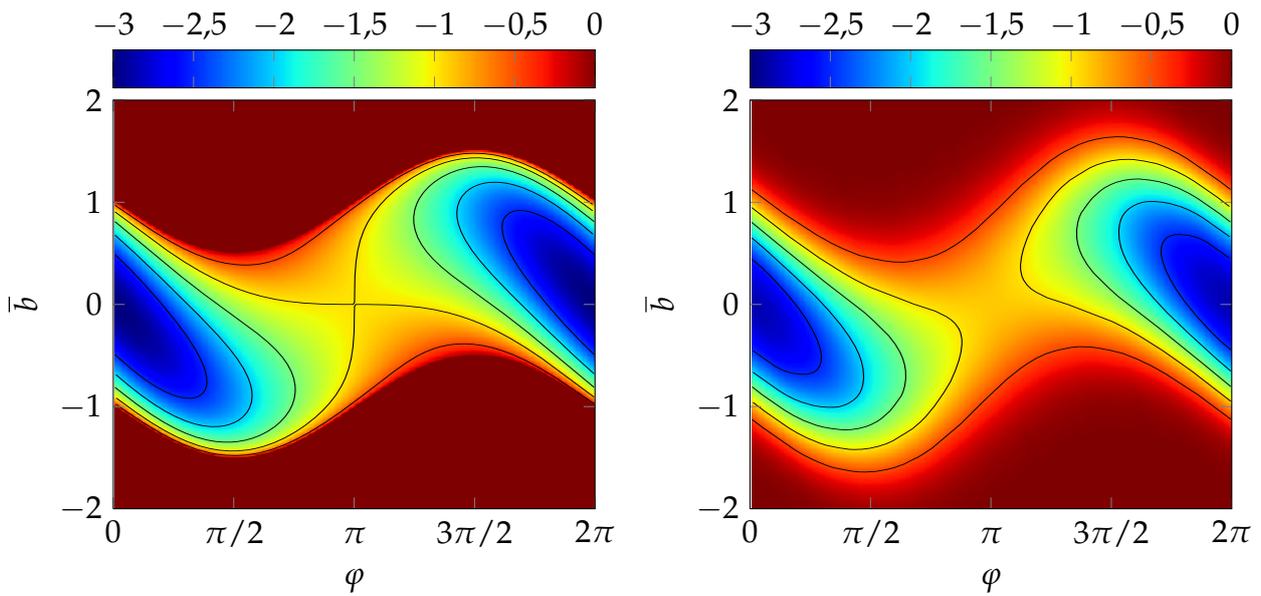
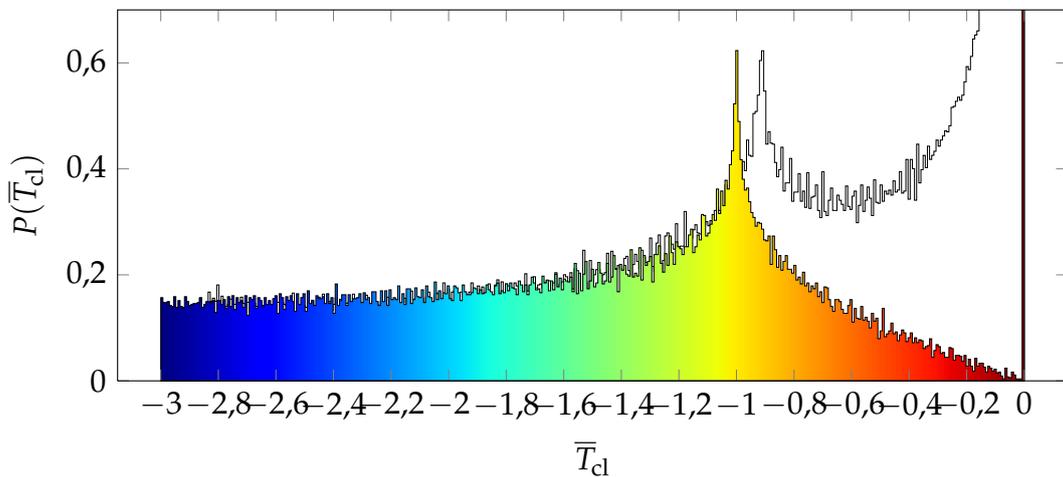
Für das Modellsystem der verschobenen harten Scheibe sei im Folgenden, wie schon in Abschnitt 3.2, der Parameter $\bar{s} = 1/2$ gewählt; außerdem ist das effektive Wirkungsquantum auf $h = 1/8$ gesetzt. Die einheitenlosen Bezeichnungen aus Abschnitt 3.2 werden ebenfalls übernommen. Die klassische und quantenmechanische Zeitverzögerungsfunktion bzw. -verteilung sind in Abb. 5.1 dargestellt. \bar{T}_{qm} reproduziert die grundlegende Struktur von \bar{T}_{cl} , insbesondere die Lage beider stationärer Punkte. Insbesondere in der Gegenüberstellung der $P(\bar{T})$ zeigen sich jedoch deutliche Unterschiede:

1. Der klassisch scharfe Übergang zwischen ungestreuten und gestreuten Trajektorien wird im quantenmechanischen Falle fließend. Entsprechend ist der (in Abb. 5.1c abgeschnittene) Delta-Peak von $P(\bar{T}_{\text{cl}})$ bei $\bar{T} = 0$ in $P(\bar{T}_{\text{qm}})$ deutlich verbreitert. Die Ursachen dieses Glättungseffektes sowie damit zusammenhängende Effekte sollen untersucht werden.
2. In $P(\bar{T}_{\text{qm}})$ sind die Minimumskante und der Sattelpunktspeak nach rechts verschoben. Resultiert dies aus dem oben genannten Glättungseffekt, oder liegen weitere Effekte zugrunde? In diesem Zusammenhang ist die vermutete Korrespondenz der beobachteten Verteilungsstrukturen zu den stationären Punkten von $\bar{T}_{\text{cl/qm}}$ zu überprüfen.

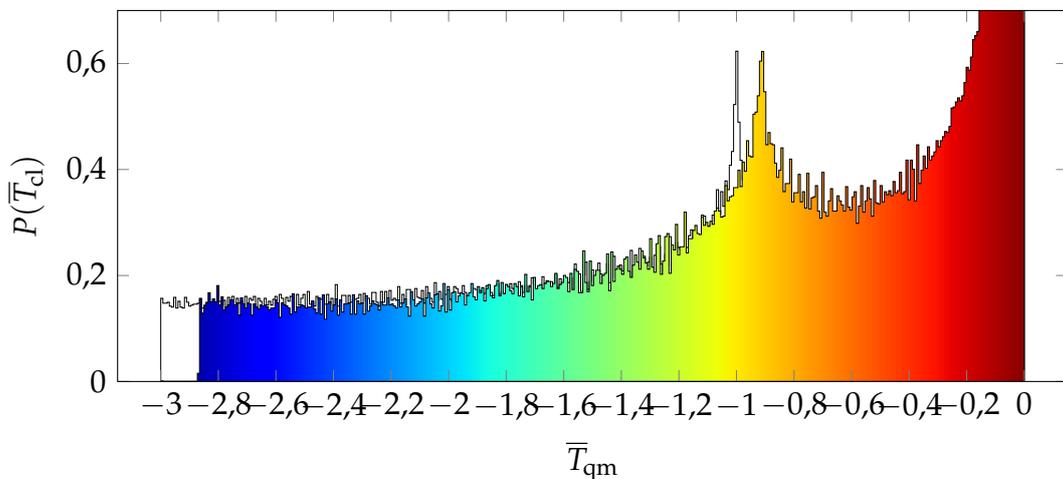
Im Zuge dieser Prüfung wird in diesem Abschnitt eine zentrale Frage sein, ob \bar{T}_{qm} das klassische Verhalten für $h \rightarrow 0$ reproduzieren kann, oder ob die sichtbaren Unterschiede aus den unterschiedlichen Berechnungsalgorithmen resultieren.

5.1 Stationäre Punkte

Wie bereits bekannt, enthält $P(\bar{T}_{\text{cl}})$ eine Heaviside-Kante bei $\bar{T} = -3$ aufgrund des Minimums in \bar{T}_{cl} . Diese Struktur wird von \bar{T}_{qm} reproduziert. Allerdings kann nicht wie im klassischen Falle die Höhe dieser Kante mit einer theoretischen Vorhersage verglichen werden, da keine analytische Form für \bar{T}_{qm} bekannt ist.

(a) Klassische Zeitverzögerung \bar{T}_{cl} (b) Quantenmechanische Zeitv. \bar{T}_{qm} 

(c) Klassische Zeitverzögerungsverteilung



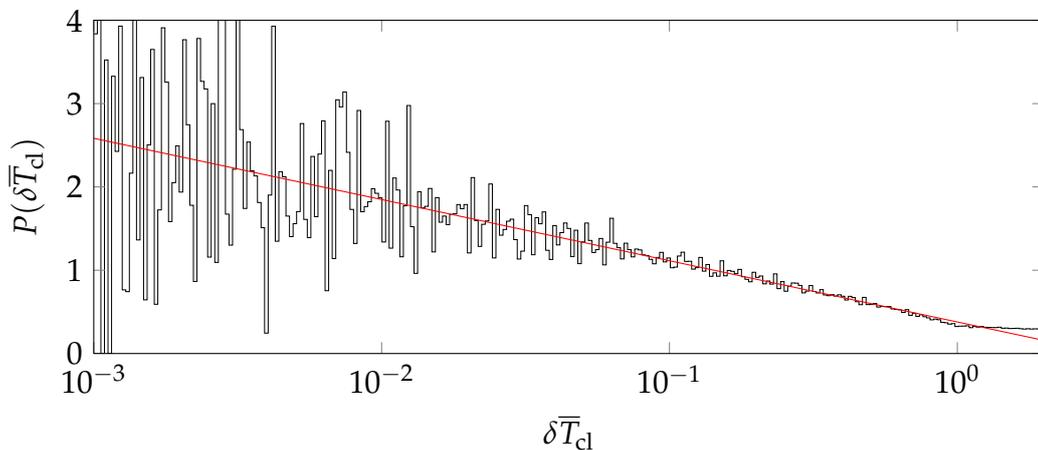
(d) Quantenmechanische Zeitverzögerungsverteilung

Abbildung 5.1: Vergleich der klassischen bzw. quantenmechanischen Zeitverzögerungsfunktion bzw. -verteilung für die verschobene harte Scheibe. In (c) und (d) ist die jeweils andere Verteilung im Hintergrund angedeutet.

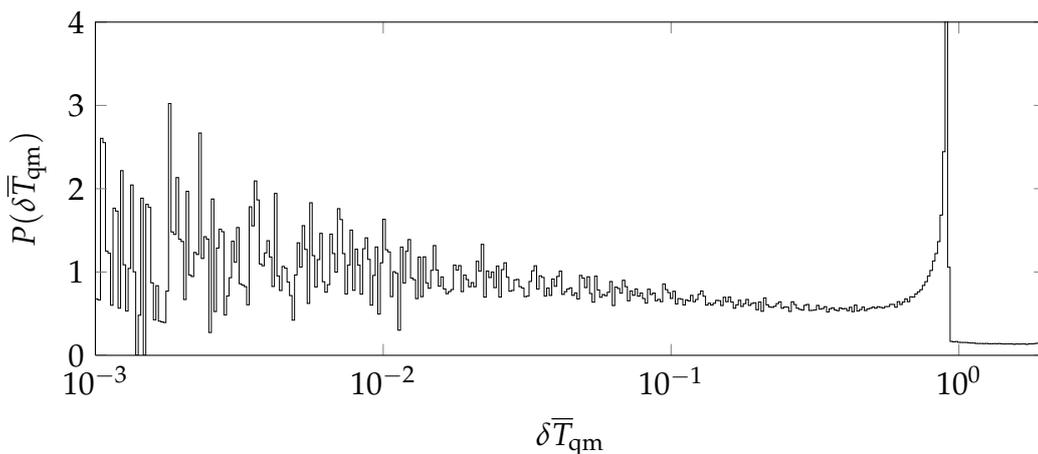
Offensichtlich liegt in \bar{T}_{qm} an derselben Stelle wie im klassischen Falle ein Sattelpunkt vor, wenn auch bei einem leicht anderen \bar{T} -Wert. Der Vergleich des entsprechenden Peaks in $P(\bar{T}_{\text{qm}})$ mit einer quantitativen theoretischen Vorhersage ist nicht möglich, weil die Funktion $\bar{T}_{\text{qm}}(b, \varphi)$ nicht analytisch bekannt ist. Es ist aber bekannt, dass es sich um eine logarithmische Singularität handeln müsste. Diese Peakform kann durch passende Auftragung überprüft werden (vgl. Abschnitt 3.3). Abb. 5.2 vergleicht die Peaks von $P(\bar{T}_{\text{cl}})$ und $P(\bar{T}_{\text{qm}})$. Auch im quantenmechanischen Falle liegt eine lineare Auftragung, also eine logarithmische Singularität vor.

5.2 Unschärfeeffekte

Die Heaviside-Kante und die logarithmische Singularität in \bar{T}_{qm} (Abb. 5.1d) sind gegenüber dem klassischen Fall leicht nach rechts verschoben. Eine mögliche Erklärung ist, dass dies ent-



(a) klassisch (rot: theoretisch vorhergesagter Anstieg)



(b) quantenmechanisch (kein erwarteter Anstieg bekannt)

Abbildung 5.2: Zeitverzögerungsverteilung in der Nähe des Sattelpunktes für die verschobene Scheibe: Diese Darstellung ist analog zu Abb. 3.8, verwendet allerdings eine nicht so umfangreiche Datenbasis (jeweils ca. 145 000 Punkte) und läuft daher über eine geringere Anzahl von Größenordnungen.

sprechend der Unschärferelation aus gewichteter Mittelung über die umliegenden Trajektorien resultiert. Die Koordinaten \bar{b} und φ bilden einen Phasenraum, denn \bar{b} entspricht dem zur Winkelkoordinate φ gehörigen Drehimpuls $L = p \cdot \bar{b}$ mit dem einheitenlosen Impuls $p = 1$. Somit lautet die Unschärferelation

$$\Delta \bar{b} \cdot \Delta \varphi \approx h,$$

wobei h das einheitenlose effektive Wirkungsquantum ist. Auf der linken Seite erscheint ein Phasenraumvolumen A_Γ . In Abb. 5.3 wird geprüft, ob der quantitative Unterschied zwischen \bar{T}_{cl} und \bar{T}_{qm} aus dieser Unschärfe resultieren kann.

Wenn diese Hypothese zutreffend wäre, müsste $\langle \bar{T}_{\text{cl}} \rangle$ für eine Umgebung der Größe $A_\Gamma = h$ um den stationären Punkt etwa gleich \bar{T}_{qm} am stationären Punkt sein. Dies ist nicht der Fall: Zwar steigt $\langle \bar{T}_{\text{cl}} \rangle$ mit A_Γ wie erwartet monoton an; allerdings ist der Anstieg wesentlich zu langsam, besonders im Falle des Sattelpunktes.

5.3 Numerische Ungenauigkeiten

Die quantitative Differenz zwischen \bar{T}_{cl} und \bar{T}_{qm} kann auch eine Folge numerischer Ungenauigkeiten sein. Eine Quantifizierung dieser Ungenauigkeiten ist nicht möglich, allerdings soll nun ihr qualitativer Einfluss auf das Ergebnis beleuchtet werden.

In Abb. 5.4a ist ein Beispielverlauf von \bar{T}_{qm} für verschiedene h dargestellt: Beim Übergang zum klassischen Grenzfall $h \rightarrow 0$ nähert sich \bar{T}_{qm} an den entsprechenden klassischen Zeitverzögerungswert an. Der leicht gestreute Kurvenverlauf deutet numerische Ungenauigkeiten an.

Für ein anderes System, ein hartes quadratförmiges Potential, kann die numerische Ungenauigkeit relativ einfach geschätzt werden. Das Potential sei im Koordinatenursprung zentriert und

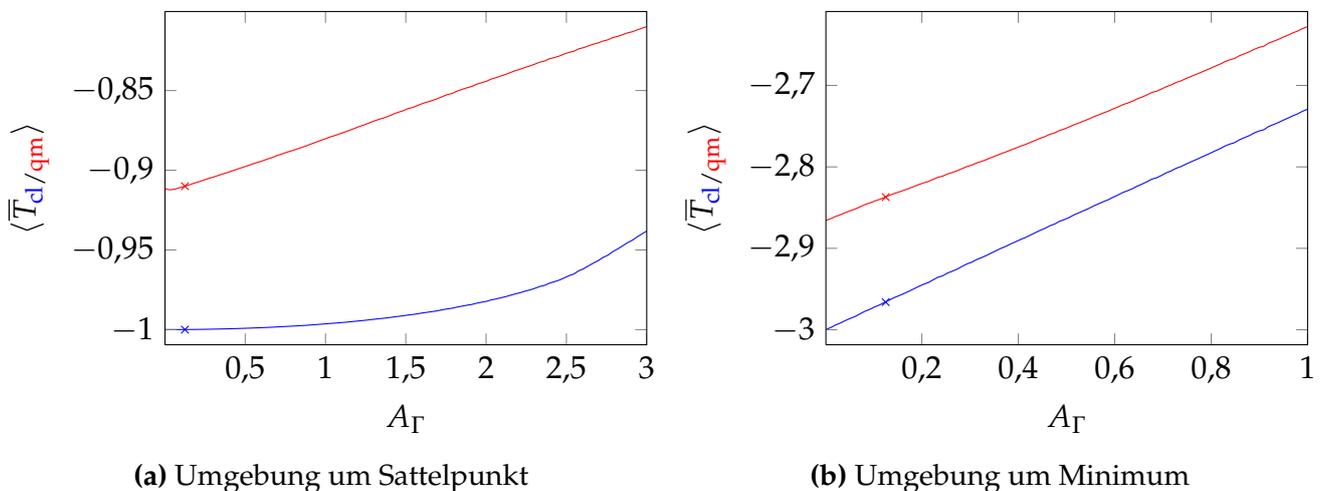


Abbildung 5.3: Verhalten des Mittelwertes der klassischen (blau) und quantenmechanischen (rot) Zeitverzögerungsfunktion in einer (kreisförmigen) symmetrischen Phasenraumumgebung um die stationären Punkte. Die Kreuze markieren $A_\Gamma = h$.

habe eine Kantenlänge s . Dann entspricht für die Streutrajektorie $b = \varphi = 0$ die einheitenlose klassische Zeitverzögerung gerade der negativen Passagelänge,

$$\bar{T}_{\text{cl}} = -s.$$

Das Rechteckpotential wird numerisch auf ein Ortsgitter mit der Gitterkonstante Δq abgebildet. Die Kantenlänge ist also nur bis auf $\Delta s = 2 \cdot \Delta q$ genau bestimmt. Der Faktor 2 stammt aus der Ungenauigkeit von beiden gegenüberliegenden Kanten, aus deren Positionsdifferenz man s erhält. Somit ist die numerische Ungenauigkeit

$$\Delta \bar{T}_{\text{cl}} = \Delta s = 2 \cdot \Delta q. \quad (5.1)$$

Ein weiterer Vorteil des Rechteckpotentials liegt darin, dass bei Auswertung für verschiedene h die Fehlerspanne weit abgedeckt wird: Für bestimmte h löst das Gitter das gesamte Potential entweder sehr gut oder sehr schlecht auf, und die Werte für \bar{T}_{qm} bewegen sich entsprechend in einem weiten Bereich innerhalb der erwarteten Fehlerspanne. Das Scheibenpotential hingegen wird von jedem Gitter an manchen Stellen gut, an anderen schlecht aufgelöst; somit ergeben sich immer mittlere Werte für die numerische Abweichung und eine insgesamt geringere wahrgenommene Fehlerspanne.

Dieser Effekt ist in Abb. 5.4b deutlich sichtbar: Obleich die Berechnungen bis auf die Potentialform ähnliche Parameter verwenden, streuen die Zeitverzögerungen für das Quadratpotential deutlich breiter. Die Streubreite stimmt sehr gut mit Gleichung (5.1) überein. Zum Beispiel ist im Protokoll der numerischen Berechnung für $h^{-1} = 8$ eine Gitterkonstante $\Delta q \approx 0,028$ vermerkt, entsprechend einer Ungenauigkeit $\Delta \bar{T}_{\text{cl}} \approx 0,056$. Dies ist in guter Näherung die Streubreite von \bar{T}_{qm} bei $h^{-1} = 8$ in der Abbildung.

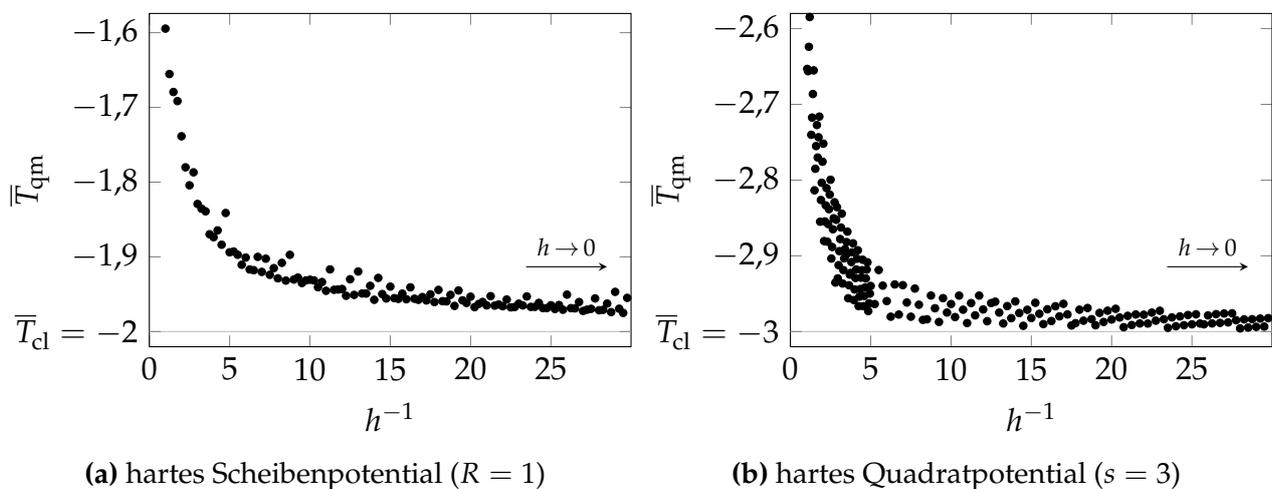


Abbildung 5.4: Quantenmechanische Zeitverzögerung für verschiedene effektive Wirkungsquanten h . Die Streusysteme sind jeweils im Koordinatenursprung zentriert; die Streutrajektorie ist $\bar{b} = \varphi = 0$.

Insbesondere für $h^{-1} > 10$ verläuft der Streubereich von \bar{T}_{qm} in Abb. 5.4b sehr dicht an \bar{T}_{cl} . Dies unterstützt die Hypothese, dass die Abweichungen zwischen klassischer und quantenmechanischer Zeitverzögerung rein numerischer Natur sind. Allerdings fehlt in diesem Falle eine schlüssige Begründung,

1. warum die numerische Abweichung nur in eine Richtung, zu höheren \bar{T}_{qm} , geht und
2. warum der Verlauf von \bar{T}_{qm} für $h^{-1} < 5$ deutlich von \bar{T}_{cl} abweicht. Berechnungen mit so kleinen effektiven Wirkungsquanten sind aber generell mit Vorsicht zu genießen, da die Gitterkonstanten der Orts- und Impulsgitter hier schon sehr groß werden (z. B. $\delta q \approx 0,11$ für $h^{-1} = 1$).

5.3.1 Skalierungsverhalten der numerischen Methoden

Die vorgestellte numerische Methode hat diverse Parameter, deren Skalierungsverhalten einen Aufschluss über die Genauigkeit des Verfahrens geben kann. Schon die quantenmechanische Zeitverzögerung, definiert wie in den Gleichungen (4.3) und (4.4), enthält den frei wählbaren Interaktionsradius R . Jedes R mit

$$V(\mathbf{q}) = 0 \quad \forall |\mathbf{q}| \geq R$$

ist zulässig. Im klassischen Falle kann sogar das kleinstmögliche

$$R_0 = \inf \left\{ |\mathbf{q}| : \mathbf{q} \in \mathbb{R}^2, V(\mathbf{q}) \neq 0 \right\}$$

gewählt werden, da das Verhalten des Streuteilchens zwischen der Grenze des Interaktionsbereiches und der Interaktion mit dem Streupotential trivial bekannt ist. Im quantenmechanischen Falle ist dies aufgrund der Ausdehnung des Wellenpaketes nicht gegeben und die Wahl

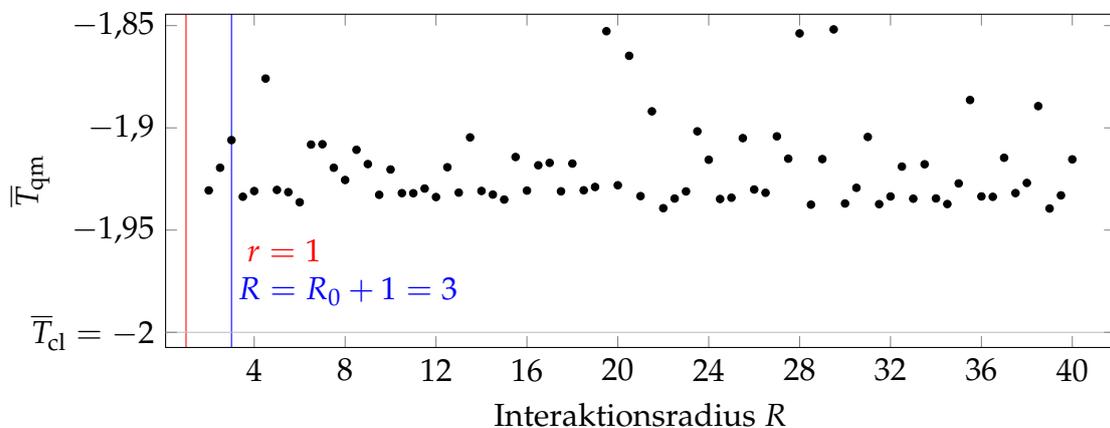


Abbildung 5.5: Quantenmechanische Zeitverzögerung für verschiedene Interaktionsradien R . Das Streupotential ist eine im Ursprung zentrierte harte Scheibe, deren Radius $r = 1$ im Bild rot markiert ist. Die Streutrajektorie ist $\vec{b} = \vec{\varphi} = 0$.

$R = R_0$ folglich nicht sinnvoll. In Abb. 5.5 ist dargestellt, wie \bar{T}_{qm} sich für verschiedene Interaktionsradien verhält. Bisher wurde $R = R_0 + 1$ gewählt; dieser Wert ist im Bild blau markiert. Der Verlauf von $\bar{T}_{\text{qm}}(R)$ ist nicht gerichtet, was auf numerische Ungenauigkeiten hindeutet. Warum große Abweichungen insbesondere bei $R \approx 20$ und $R \approx 30$ auftreten, konnte nicht geklärt werden.

Der Radius r des hier verwandten Scheibenpotentials ist ein weiterer numerischer Parameter: Er ist in allen Betrachtungen in diesem Kapitel einheitenlos bzgl. einer willkürlich wählbaren charakteristischen Länge L (vgl. Abschnitt 4.2). Wählt man für eine im Ursprung zentrierte harte Scheibe einen anderen Scheibenradius r , so erhält man eine neue klassische Zeitverzögerung (für die Streutrajektorie $\bar{b} = \varphi = 0$)

$$\bar{T}_{\text{cl}} = -r.$$

Diese Änderung ist aber allein auf die Umskalierung der einheitenlosen Größen zurückzuführen und enthält keine physikalische Information. Analog ist zu erwarten, dass \bar{T}_{qm} exakt proportional zum einheitenlosen Scheibenradius r ist. Somit muss im analytischen Fall insbesondere $\bar{T}_{\text{qm}}/\bar{T}_{\text{cl}}$ konstant sein. Abb. 5.6 zeigt, dass dies für die numerisch ermittelten Werte von $\bar{T}_{\text{qm}}(r)$ nicht der Fall ist. Alle Schwankungen des Verlaufes in diesem Bild müssen numerische Ungenauigkeiten sein, welche augenscheinlich insbesondere bei kleinen Scheibenradien ($r \lesssim 2$) groß sind.

Für ein gegebenes h^{-1} wählt der numerische Algorithmus immer (annähernd) dieselben Orts- und Impulsgitterschrittweiten. Aus numerischer Sicht ist der wesentliche Unterschied zwischen großen und kleinen Scheibenradien also, dass die Scheibe bei kleinen Radien durch weniger Gitterpunkte aufgelöst wird. Somit widerspricht Abb. 5.6 der im Abschnitt 4.6 formulierten Vermutung, dass Auflösungsfehler des Gitters vernachlässigt werden können. Tatsächlich muss für $r = 1$ der Beitrag zu $\Delta\bar{T}_{\text{qm}}$ aufgrund mangelnder Auflösung des Potentials durch das Gitter auf mindestens ein bis zwei Prozent geschätzt werden.

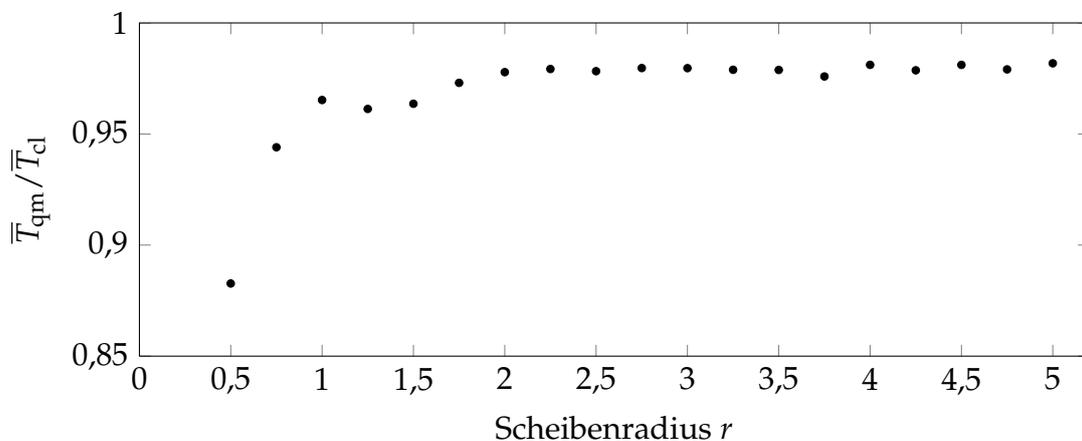


Abbildung 5.6: Quantenmechanische Zeitverzögerung für verschiedene Scheibenradien r einer im Ursprung zentrierten harten Scheibe. Die Streutrajektorie ist wieder $\bar{b} = \varphi = 0$.

5.4 Zusammenfassung der Ergebnisse

Die Korrespondenz der klassischen und der quantenmechanischen Zeitverzögerungsfunktion konnte in dem betrachteten Beispielsystem der verschobenen Scheibe qualitativ nachgewiesen werden. Eine quantitative Analyse konnte nicht durchgeführt werden, da das quantenmechanische Ergebnis mit hoher Wahrscheinlichkeit von nicht vernachlässigbaren numerischen Abweichungen beeinflusst wird.

Ob die Abweichungen der quantenmechanischen Zeitverzögerung \bar{T}_{qm} von \bar{T}_{cl} durch die Physik oder durch die Ungenauigkeiten des numerischen Verfahrens hervorgerufen werden, kann letztendlich nur geklärt werden, wenn entweder \bar{T}_{qm} zumindest für ein Modellsystem analytisch berechnet werden kann, oder wenn \bar{T}_{qm} zum Vergleich mit einem anderen numerischen Verfahren berechnet wird.

6 Zusammenfassung und Ausblick

In der vorliegenden Arbeit wird die Zeitverzögerung in einfachen Streusystemen als Funktion der Anfangsbedingungen der Streutrajektorie untersucht. Es wird gezeigt, dass verschiedene klassische Definitionen der Zeitverzögerung existieren, die für unterschiedliche Anwendungsfälle – analytisch wie numerisch – unterschiedlich gut geeignet sind. Durch Betrachtung eines einzelnen Scheibenpotentials, das einmal im Koordinatenursprung zentriert und einmal versetzt platziert ist, wird demonstriert, dass die Zeitverzögerung i. A. stark von der Wahl des Koordinatensystems abhängig ist.

Für die verwendeten Modellsysteme, bestehend aus abschnittsweise konstanten Scheibenpotentialen, kann die Zeitverzögerungsfunktion im klassischen Falle immer analytisch abgeleitet werden. Jedoch ist die analytische Formulierung der Zeitverzögerungsverteilung nur für ein einzelnes zentriertes Scheibenpotential möglich. Schon bei einer einfachen Verschiebung des Koordinatensystems wird die Zeitverzögerungsfunktion so kompliziert, dass eine analytische Ableitung der Verteilung nicht mehr sinnvoll möglich ist.

Das erste Ziel der Arbeit ist die Untersuchung stationärer Punkte der Zeitverzögerungsfunktion, insbesondere in Hinblick auf die resultierende Zeitverzögerungsverteilung. In den untersuchten Modellsystemen ergeben sich wie erwartet logarithmische Singularitäten aus Sattelpunkten und Heaviside-Kanten aus Extremstellen in der Zeitverzögerungsfunktion. Die Form und Position dieser Strukturen in den numerisch erhaltenen Zeitverzögerungsverteilungen entsprechen den analytischen Vorhersagen. Dies gilt sowohl in Systemen, in denen die stationären Punkte durch eine Koordinatentransformation erzeugt werden (verschobene harte Scheibe, Abschnitt 3.2) als auch, wenn die stationären Punkte aus der Struktur des Streupotentials resultieren (weiches Scheibenpaar, Abschnitt 3.3).

Im zweiten Teil der Arbeit wird die Korrespondenz der Zeitverzögerung sowie der beobachteten Strukturen in deren Verteilung beim Übergang zwischen klassischer und Quantenmechanik untersucht. Von den vielfältigen geometrischen Definitionen der klassischen Zeitverzögerung kann nur eine, die Definition mittels der Aufenthaltszeit im Interaktionsbereich, quantisiert werden. Andere geometrische Definitionen lassen sich nicht übertragen, weil die benötigten Größen nach dem Heisenbergschen Unschärfepinzipp nicht gleichzeitig gemessen werden können, oder weil die Definitionen auf der Vorstellung eindeutig definierter Streutrajektorien beruhen, welche für Wellenpakete i. A. nicht zutrifft.

Problematisch gestaltet sich die numerische Auswertung der quantenmechanischen Zeitverzögerung. Die Messung der Aufenthaltszeit erfordert eine komplette zeitliche Propagation des

Wellenpaketes mithilfe der Split-Operator-Methode, was selbst unter Benutzung der heutigen PC-Technik einen mitunter erheblichen Speicherplatz- und Rechenzeitaufwand bedeutet. Mithilfe der erhaltenen numerischen Ergebnisse kann die klassisch-quantenmechanische Korrespondenz für das verschobene harte Scheibenpotential qualitativ bestätigt werden. Eine quantitative Untersuchung gestaltet sich jedoch schwierig, weil die Resultate stark von numerischen Ungenauigkeiten beeinflusst sind. Insbesondere da nur eine numerische Berechnungsmethode für den quantenmechanischen Propagator verwendet wird, kann nicht abschließend geklärt werden, ob die beobachteten quantitativen Abweichungen zwischen klassischer und numerisch quantenmechanischer Zeitverzögerung physikalisch bedingt sind oder aus numerischen Ungenauigkeiten resultieren. Die durchgeführten Untersuchungen lassen aber einen starken Einfluss numerischer Ungenauigkeiten vermuten.

Es bietet sich daher an, die Ergebnisse dieser Arbeit mithilfe einer anderen numerischen Methode zu überprüfen. Zum Beispiel ist eine deutliche Quelle numerischer Ungenauigkeiten in dieser Untersuchung die schlechte Darstellung des hart berandeten Scheibenpotentials durch das diskrete Ortsgitter der Split-Operator-Methode. Dieser Fehler kann durch die Benutzung z. B. einer Finite-Elemente-Methode umgangen werden, weil diese besser an krummlinige Randwertprobleme angepasst werden kann.

Weiterhin ist ein Vergleich mit der zweiten, in dieser Arbeit nicht weiter behandelten quantenmechanischen Definition der Zeitverzögerung mittels der Wigner-Smith-Matrix von Interesse. Für die verschobene harte Scheibe kann die allgemein bekannte analytische Lösung der S-Matrix einer zentrierten harten Scheibe verwendet werden; für die enthaltenen Besselfunktionsterme sind Translationsformeln bekannt [27]. Selbst wenn man den Erwartungswert der Wigner-Smith-Matrix für ein gegebenes Wellenpaket nicht direkt als Zeitverzögerung dieses Zustandes interpretieren kann, sollte die Verteilung der Eigenwerte der Wigner-Smith-Matrix im Zusammenhang mit der hier betrachteten Zeitverzögerungsverteilung stehen und folglich dieselben Strukturen aufweisen.

Nachdem diese Arbeit also die gestellten Fragen zur klassischen Zeitverzögerung vollständig beantwortet hat, bietet die Quantenmechanik noch Raum für weitergehende analytische wie numerische Untersuchungen.

Anhang

A Verhalten der Verteilung einer Funktion in der Nähe stationärer Punkte

In Kapitel 3 werden die Auswirkungen der Topologie der Zeitverzögerungsfunktion auf die entsprechende Zeitverzögerungsverteilung (2.29) untersucht. Die entsprechenden Überlegungen sind aber nicht auf Zeitverzögerungsfunktionen beschränkt, und können deshalb im Folgenden allgemein abgeleitet werden.

Sei $f : I \subset \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ eine zweidimensionale Funktion mit beschränktem Definitionsbereich I . Die zugehörige Verteilung

$$P(f) = \frac{1}{A} \cdot \iint_I dx dy \delta(f - f(x, y)) \quad (\text{A.1})$$

ist durch die Fläche $A := |I|$ des Definitionsbereiches auf

$$\int df P(f) = 1$$

normiert.

A.1 Umgebung eines Sattelpunktes

In der Nähe eines Sattelpunktes (x_s, y_s) kann f als

$$f(x_s + \delta x, y_s + \delta y) = f_s + \frac{1}{2} \cdot \begin{pmatrix} \delta x \\ \delta y \end{pmatrix}^T \mathbf{H} \begin{pmatrix} \delta x \\ \delta y \end{pmatrix} \quad (\text{A.2})$$

genähert werden, wobei

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} \partial_{xx} f & \partial_{xy} f \\ \partial_{yx} f & \partial_{yy} f \end{pmatrix}_{(x_s, y_s)}$$

die Hesse-Matrix der zweiten Ableitungen am Sattelpunkt ist. Eben da es sich um einen Sattelpunkt handelt, muss diese Matrix indefinit sein. Sie hat also je einen positiven und einen

negativen Eigenwert ($\lambda_1 > 0$ und $\lambda_2 < 0$). Mithilfe dieser Eigenwerte kann \mathbf{H} diagonalisiert werden. In

$$f(x_1, x_2) = f_s + \frac{1}{2} \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = f_s + \frac{\lambda_1 \cdot x_1^2 + \lambda_2 \cdot x_2^2}{2} \quad (\text{A.3})$$

sind die Koordinaten δx und δy durch

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \mathbf{U} \begin{pmatrix} \delta x \\ \delta y \end{pmatrix}$$

ersetzt worden. Die Matrix \mathbf{U} folgt aus der Diagonalisierung gemäß

$$\begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix} = \mathbf{U} \mathbf{H} \mathbf{U}^+. \quad (\text{A.4})$$

Durch einen erneuten Koordinatenwechsel von $x_{1/2}$ zu

$$\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \begin{pmatrix} \sqrt{\lambda_1} & \sqrt{|\lambda_2|} \\ \sqrt{\lambda_1} & -\sqrt{|\lambda_2|} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$$

kann f in die Normalform

$$f(u, v) = f_s + u \cdot v \quad (\text{A.5})$$

gebracht werden, denn

$$u \cdot v = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \left(\sqrt{\lambda_1} \cdot x_1 + \sqrt{|\lambda_2|} \cdot x_2 \right) \cdot \left(\sqrt{\lambda_1} \cdot x_1 - \sqrt{|\lambda_2|} \cdot x_2 \right) = \frac{\lambda_1 \cdot x_1^2 - |\lambda_2| \cdot x_2^2}{2}.$$

Nun soll der Beitrag des durch Gleichung (A.2) bzw. (A.3) beschreibbaren Teils von f zur Verteilung $g(f)$ beschrieben werden. In dem zweifachen Integral über $dx_1 dx_2$ liefert der Wechsel zu $dx_1 dx_2$ keinen Beitrag, da die Transformation \mathbf{U} unitär, also flächenerhaltend, ist. Der Übergang zu $du dv$ ergibt einen Beitrag

$$\left| \det \frac{\partial(u, v)}{\partial(x_1, x_2)} \right|^{-1} = \left(\frac{1}{2} \cdot \left| -2 \cdot \sqrt{|\lambda_1 \cdot \lambda_2|} \right| \right)^{-1} = \frac{1}{\sqrt{|\lambda_1 \cdot \lambda_2|}} = \frac{1}{\sqrt{|\det \mathbf{H}|}}.$$

Der gesuchte Beitrag zur Zeitverzögerungsverteilung (2.29) ist also

$$P_{\varepsilon_1, \varepsilon_2}(f_s + \Delta f) = \frac{1}{A \cdot \sqrt{|\det \mathbf{H}|}} \cdot \int_{-\varepsilon_1}^{+\varepsilon_1} du \int_{-\varepsilon_2}^{+\varepsilon_2} dv \delta(\Delta f - u \cdot v). \quad (\text{A.6})$$

Hierin beschreiben ε_1 und ε_2 die Größe des durch (A.2) bzw. (A.5) approximierbaren Bereiches der Zeitverzögerungsfunktion. Aufgrund der Symmetrie der δ -Funktion reicht es, $\Delta f > 0$ sowie $u, v > 0$ zu betrachten. In

$$\begin{aligned} P_{\varepsilon_1, \varepsilon_2}(f_s \pm \Delta f) &= \frac{2}{A \cdot \sqrt{|\det \mathbf{H}|}} \cdot \int_0^{\varepsilon_1} du \int_0^{\varepsilon_2} dv \delta(\Delta f - u \cdot v) \\ &= \frac{2}{A \cdot \sqrt{|\det \mathbf{H}|}} \cdot \int_0^{\varepsilon_1} \frac{du}{u} \int_0^{\varepsilon_2} dv \delta\left(v - \frac{\Delta f}{u}\right) \\ &= \frac{2}{A \cdot \sqrt{|\det \mathbf{H}|}} \cdot \int_0^{\varepsilon_1} \frac{du}{u} \cdot \Theta\left(\varepsilon_2 - \frac{\Delta f}{u}\right) \end{aligned}$$

wird zunächst mit den üblichen Rechenregeln für die δ -Funktion eines der Integrale eliminiert. Die entstehende Heaviside-Funktion führt effektiv zu einer Einschränkung der Intervallgrenzen im zweiten Integral.

$$\begin{aligned} P_{\varepsilon_1, \varepsilon_2}(f_s \pm \Delta f) &= \frac{2}{A \cdot \sqrt{|\det \mathbf{H}|}} \cdot \int_0^{\varepsilon_1} \frac{du}{u} \cdot \Theta\left(u - \frac{\Delta f}{\varepsilon_2}\right) \\ &= \frac{2}{A \cdot \sqrt{|\det \mathbf{H}|}} \cdot [\ln \varepsilon_1 - \ln \max\{\varepsilon_1, \Delta f / \varepsilon_2\}] \\ &= \frac{2}{A \cdot \sqrt{|\det \mathbf{H}|}} \cdot \Theta(\varepsilon_1 \cdot \varepsilon_2 - \Delta f) \cdot [\ln(\varepsilon_1 \cdot \varepsilon_2) - \ln \Delta f] \end{aligned}$$

Für $\Delta f \rightarrow 0$ verschwindet die Heaviside-Funktion. Es verbleibt ein Beitrag

$$P(f) = \frac{2 \cdot |\ln |f - f_s||}{A \cdot \sqrt{|\det \mathbf{H}|}} + \text{const.} \quad (\text{A.7})$$

Ein Sattelpunkt in der Zeitverzögerungsfunktion führt also in der Zeitverzögerungsverteilung zu einer logarithmischen Singularität.

A.2 Umgebung eines Extremums

Die anfänglichen Überlegungen aus dem vorherigen Abschnitt, bis zur Gleichung (A.4) lassen sich ohne Änderung auch auf Extrema anwenden. Im Falle eines Extremums sind aber beide $\lambda_{1/2}$ gleichzeitig positiv (Minimum) oder negativ (Maximum). O. B. d. A. wird nun ein Minimum betrachtet. In diesem Falle lautet die letzte Koordinatentransformation

$$\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \begin{pmatrix} \sqrt{\lambda_1} & 0 \\ 0 & \sqrt{\lambda_2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$$

und es folgt sofort die Normalform

$$f(u, v) = f_m + u^2 + v^2. \quad (\text{A.8})$$

Diese Koordinatentransformation liefert im Integral in $P(f)$ den Beitrag

$$\left| \det \frac{\partial(u, v)}{\partial(x_1, x_2)} \right|^{-1} = \left(\frac{1}{2} \cdot \sqrt{\lambda_1 \cdot \lambda_2} \right)^{-1} = \frac{2}{\sqrt{\det \mathbf{H}}}.$$

In Analogie zu Gleichung (A.6) würde sich

$$P_{\varepsilon_1, \varepsilon_2}(f_m + \Delta f) = \frac{2}{A \cdot \sqrt{\det \mathbf{H}}} \cdot \int_{-\varepsilon_1}^{+\varepsilon_1} du \int_{-\varepsilon_2}^{+\varepsilon_2} dv \delta(\Delta f - u^2 - v^2)$$

ergeben. Allerdings ist es in diesem Falle sinnvoller, u und v in Polarkoordinaten

$$\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \varrho \cdot \begin{pmatrix} \cos \alpha \\ \sin \alpha \end{pmatrix}$$

umzuschreiben. Dann ist

$$\begin{aligned} P_{\varepsilon}(f_m + \Delta f) &= \frac{2}{A \cdot \sqrt{\det \mathbf{H}}} \cdot \int_0^{2\pi} d\alpha \int_0^{\varepsilon} d\varrho \varrho \cdot \delta(\Delta f - \varrho^2) \\ &= \frac{2\pi}{A \cdot \sqrt{\det \mathbf{H}}} \cdot \int_0^{\varepsilon} d(\varrho^2) \delta(\Delta f - \varrho^2) \\ &= \frac{2\pi \cdot \Theta(\Delta f) \cdot \Theta(\varepsilon - \Delta f)}{A \cdot \sqrt{\det \mathbf{H}}}. \end{aligned}$$

Die erste Heaviside-Funktion besagt: Da f_m der Minimalwert ist, muss Δf positiv sein. Die zweite Heaviside-Funktion kann für $\Delta f \rightarrow 0$ vernachlässigt werden. In der Nähe des Minimums ergibt sich also das Verhalten

$$P(f) = \frac{2\pi \cdot \Theta(f - f_m)}{A \cdot \sqrt{\det \mathbf{H}}}. \quad (\text{A.9})$$

Für Maxima gilt entsprechend

$$P(f) = \frac{2\pi \cdot \Theta(f_m - f)}{A \cdot \sqrt{|\det \mathbf{H}|}}. \quad (\text{A.10})$$

Ein Extremum in der Zeitverzögerungsfunktion führt also in der Zeitverzögerungsverteilung zu einer Heaviside-Stufe.

B Zeitverzögerung für das weiche Scheibenpaar

Im Abschnitt 3.3 wird das weiche Scheibenpaar als Streusystem eingeführt, und insbesondere die Zeitverzögerung von Trajektorien um $(b, \varphi) = (0, \pi)$ betrachtet. (Hier und im Folgenden werden b_e und φ_e nur als b und φ bezeichnet.) Um die Zeitverzögerungsfunktion dieses Systems zu ermitteln, wird zunächst die Zeitverzögerungsfunktion einer einzelnen weichen Scheibe mit dem Radius r_0 und der Potentialhöhe V_0 betrachtet. Das Potential sei dabei im Koordinatenursprung zentriert.

Beim Eintritt in die Scheibe verändert sich die kinetische Energie des Teilchens. Aus dem Energieerhaltungssatz folgt

$$v' = \sqrt{v^2 - \frac{2V_0}{m}} = v \cdot \xi_0, \quad \xi_0 := \sqrt{1 - \frac{2V_0}{m \cdot v^2}} \quad (\text{B.11})$$

für die Geschwindigkeit innerhalb der Scheibe. Der Faktor ξ_0 ist ein Maß für die Potentialhöhe im Verhältnis zur freien kinetischen Energie des Streuteilchens. Aus der Erhaltung des Drehimpulses $L = mv \cdot b$ folgt der Streuparameter

$$b' = b \cdot \frac{v}{v'} = \frac{b}{\xi_0} \quad (\text{B.12})$$

innerhalb der Scheibe. Mit der Passagelänge $s = 2 \cdot \sqrt{r_0^2 - b'^2}$ der Trajektorie durch die Scheibe ist die Zeitverzögerung der einzelnen weichen Scheibe (Index sd) gemäß (2.19)

$$T_{\text{sd}}(b, \varphi) = \frac{s'}{v'} - \frac{2 \cdot \sqrt{r_0^2 - b^2}}{v} = \frac{2}{v} \cdot \left[\frac{1}{\xi_0} \cdot \sqrt{r_0^2 - \frac{b^2}{\xi_0^2}} - \sqrt{r_0^2 - b^2} \right]. \quad (\text{B.13})$$

Zur Anwendung der Verkettungsregeln aus Abschnitt 2.4 wird weiterhin die Streufunktion $(b_{a,\text{sd}}, \varphi_{a,\text{sd}})(b, \varphi)$ benötigt. Der Streuparameter wechselt durch die Streuung das Vorzeichen,

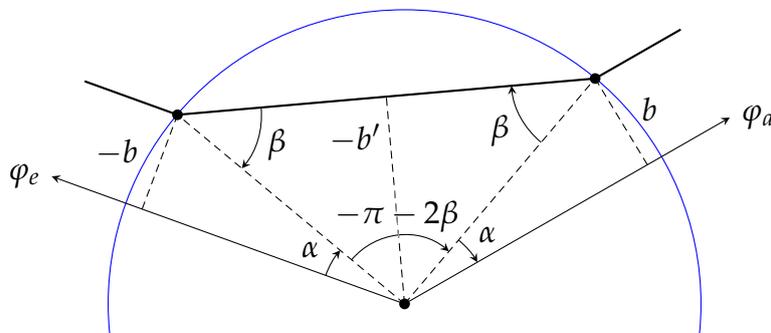


Abbildung B.1: Zur Ableitung von Zeitverzögerung etc. der weichen Scheibe werden die Winkel α und β sowie die weitere Hilfsgröße b' eingeführt. Die Vorzeichen der abgetragenen Streuparameter b entsprechen der Orientierung der b -Achsen in Abb. 2.7. Das Vorzeichen von b' folgt hier dem von b ; beachte $b_a = -b_e = -b$.

da die b -Achsen auf gegenüberliegenden Seiten des Streubereiches umgekehrt orientiert sind (vgl. Abb. 2.7). Der Winkel $\varphi_{a,sd}$ ergibt sich gemäß Abb. B.1 als

$$\varphi_{a,sd} = \varphi - \pi + 2\alpha - 2\beta$$

mit $\sin \alpha = b/r_0$ und $\sin \beta = b'/r_0$. Insgesamt ist

$$\varphi_{a,sd}(b, \varphi) = \varphi - \pi + \delta_0(b), \quad \delta_0(b) := 2 \arcsin \frac{b}{r_0} - 2 \arcsin \left(\frac{b}{r_0 \cdot \xi_0} \right). \quad (\text{B.14})$$

Nun wird das in Abschnitt 3.3 beschriebene weiche Scheibenpaar betrachtet. Jede Scheibe hat einen Radius $r_{1/2}$ und eine Potentialhöhe $V_{1/2}$; die Abkürzungen $\xi_{1/2}$ und $\delta_{1/2}(b)$ werden in Analogie zu (B.11) und (B.14) definiert. Es werden Trajektorien betrachtet, die erst die erste Scheibe und dann die zweite Scheibe treffen. (Die Ableitungen für alle anderen Besuchsreihenfolgen ergeben sich analog.)

Der Streuparameter b der einfallenden Trajektorie muss zunächst in das System der ersten Scheibe transformiert werden (vgl. Abschnitt 2.4).

$$b_{e,1} = b - s \cdot \sin \varphi \quad (\text{B.15})$$

Die Anwendung der Streufunktion $(b_{a,1}, \varphi_{a,1})(b, \varphi)$ liefert

$$b_{a,1} = -(b - s \cdot \sin \varphi), \quad (\text{B.16a})$$

$$\varphi_{a,1} = \varphi - \pi + \delta_1(b - s \cdot \sin \varphi). \quad (\text{B.16b})$$

Diese Parameter müssen gemäß Gleichung (2.33) wieder in einfallende Parameter überführt und außerdem für die nächste Streuung in das System der zweiten Scheibe transformiert werden.

$$b_{e,2} = b - s \cdot \sin \varphi + 2s \cdot \sin [\varphi + \delta_1(b - s \cdot \sin \varphi)] \quad (\text{B.17a})$$

$$\varphi_{e,2} = \varphi + \delta_1(b - s \cdot \sin \varphi) \quad (\text{B.17b})$$

Nachdem $b_{e,1/2}$ und $\varphi_{e,1/2}$ vorliegen, kann die Verkettungsregel angewandt werden und beide Teilzeitverzögerungen zu

$$T(b, \varphi) = \frac{2}{v} \cdot \left[\frac{1}{\xi_1} \cdot \sqrt{r_1^2 - \frac{b_{e,1}^2}{\xi_1^2}} + \frac{1}{\xi_2} \cdot \sqrt{r_2^2 - \frac{b_{e,2}^2}{\xi_2^2}} - \sqrt{r_1^2 - b_{e,1}^2} - \sqrt{r_2^2 - b_{e,2}^2} \right] \quad (\text{B.18})$$

$$+ \frac{s}{v} \cdot \left[\cos \varphi - 2 \cos \varphi_{e,2} + \cos(\varphi_{e,2} + \delta_2(b_{e,2})) \right] \quad (\text{B.19})$$

summiert werden. Die zweite Zeile enthält die Beiträge zur Zeitverzögerung aufgrund der Transformationen in die Koordinatensysteme der Scheiben gemäß Gleichung (2.32).

Gültigkeitsbereich des Ergebnisses

In dieser Rechnung wurde vorausgesetzt, dass die Streutrajektorie erst die erste und dann die zweite Scheibe passiert. Somit kann Gleichung (B.18) nicht für alle b und φ gelten. Eine erste Gültigkeitsbedingung lässt sich sofort aus (B.18) ablesen: Der in $\varphi_{a,1}$ vorkommende δ_1 -Term enthält Arkussinus-Funktionen. Deren Argumente müssen betragsmäßig kleiner als Eins sein, also

$$\left| \frac{b - s \cdot \sin \varphi}{r_1} \right| \leq 1, \quad \left| \frac{b - s \cdot \sin \varphi}{r_1 \cdot \zeta_1} \right| \leq 1.$$

Die erste Bedingung kann als

$$|b - s \cdot \sin \varphi| \leq r_1 \tag{B.20}$$

umgeschrieben werden und bedeutet einfach, dass die Trajektorie die erste Scheibe trifft. Die zweite Bedingung ist wegen $V_1 < 0$ und somit $\zeta_1 > 1$ sofort erfüllt, wenn (B.20) erfüllt ist.

Für $V > 0$ ist die zweite Ungleichung aber eine stärkere Bedingung als das bloße Treffen der Scheibe. In diesem Falle reicht bei hinreichend großem Streuparameter die kinetische Energie senkrecht zur Scheibenoberfläche nicht aus, um die Potentialbarriere zu überwinden. Es entsteht eine *Totalreflexion*.

Für die zweite Scheibe muss genau diese Totalreflexion noch ausgeschlossen werden, sowie das Treffen der Scheibe sichergestellt werden. Hierzu wird der in $\varphi_{a,2}$ vorkommende δ_2 -Term genutzt, dessen Wohldefiniertheit auf die Bedingung

$$\left| b - s \cdot \sin \varphi + 2s \cdot \sin [\varphi + \delta_1(b - s \cdot \sin \varphi)] \right| \leq r_2 \cdot \zeta_2 \tag{B.21}$$

führt.

Abbildungsverzeichnis

1.1	Trajektorien im Draht mit senkrechtem Magnetfeld	2
1.2	Passagezeitverteilung für das Drahtsystem	3
2.1	Definition des Interaktionsbereiches	5
2.2	Definition der eigentlichen Zeitverzögerung	7
2.3	Retardierte Orte einer Streutrajektorie	8
2.4	Skizze zum Gleichheitsbeweis von eigentlicher und Narnhofer-Zeitverzögerung	9
2.5	Aufenthaltszeit eines freien Teilchens	11
2.6	Verschiedene Ein- und Austrittszeitdefinitionen	12
2.7	b/φ -Parametrisierung freier Trajektorien	14
2.8	ϕ/ψ -Parametrisierung freier Trajektorien	15
2.9	Verhalten der Zeitverzögerung unter Translationen	17
3.1	Zeitverzögerung der zentrierten harten Scheibe	20
3.2	Zeitverzögerungsfunktion einer verschobenen harten Scheibe	22
3.3	Zeitverzögerungsverteilung einer verschobenen harten Scheibe	23
3.4	Übersicht über ein Weiches-Scheibenpaar-System	24
3.5	Zeitverzögerungsfunktion für ein weiches Scheibenpaar	25
3.6	Zeitverzögerungsverteilung für ein weiches Scheibenpaar	26
3.7	Beitrag zu $P(\bar{T})$ der Sattelpunktumgebung	26
3.8	Zeitverzögerungsverteilung in der Umgebung der Sattelpunktwerte	28
3.9	Beitrag zu $P(\bar{T})$ der Maximumumgebungen	29
4.1	Typischer Verlauf des Überlapps $d_R(t)$	40
4.2	Einfluss des harten Phasenfaktors	43
5.1	Zeitverzögerungsfunktion der verschobenen harten Scheibe	48
5.2	Zeitverzögerungsverteilung in der Umgebung der Sattelpunktwerte	49
5.3	Mittleres Verhalten der Zeitverzögerung um die stationären Punkte	50
5.4	Abhängigkeit der qm. Zeitverzögerung vom effektiven Wirkungsquantum	51
5.5	Abhängigkeit der qm. Zeitverzögerung vom Interaktionsradius	52
5.6	Abhängigkeit der qm. Zeitverzögerung vom einheitenlosen Scheibenradius	53
B.1	Streuung an der weichen Scheibe	61

Literaturverzeichnis

- [1] D. Halliday, R. Resnick und J. Walker: *Physik*, WILEY-VCH, Weinheim, (2009), Kap. 43-45.
- [2] W. Nolting: *Grundkurs Theoretische Physik: Band 1*, Springer-Verlag, Berlin, (2006), Kap. 3.
- [3] W. Nolting: *Grundkurs Theoretische Physik: Band 5/2*, Springer-Verlag, Berlin, (2006), Kap. 9.
- [4] K. Bethge und U. E. Schröder: *Elementarteilchen und ihre Wechselwirkungen*, WILEY-VCH, Weinheim, (2006), Kap. 2.
- [5] C. A. A. de Carvalho und H. M. Nussenzweig: *Time delay*, *Physics Reports* **364** (2002) 2 Seiten 83 – 174.
- [6] M. de Bianchi: *Time-delay of classical and quantum scattering processes: a conceptual overview and a general definition*, *Central European Journal of Physics* (2011) Seiten 1–37.
- [7] E. Doron, U. Smilansky und A. Frenkel: *Experimental demonstration of chaotic scattering of microwaves*, *Phys. Rev. Lett.* **65** (Dec 1990) Seiten 3072–3075.
- [8] U. Smilansky: in: *Les Houches 1989 Session LII, Chaos and Quantum Physics* (Hg. M. J. Giamboni, A. Voros und J. Zinn-Justin), Seite 371. North-Holland, Amsterdam, (1991).
- [9] B. Eckhardt: *Irregular scattering*, *Physica D* **33** (1988) 1–3 Seiten 89 – 98.
- [10] E. Ott und T. Tel: *Chaotic scattering: An introduction*, *Chaos* **3** (1993) 4 Seiten 417 – 426.
- [11] G. Troll und U. Smilansky: *A simple model for chaotic scattering: I. Classical theory*, *Physica D* **35** (1989) 1–2 Seiten 34 – 64.
- [12] P. Gaspard und S. A. Rice: *Exact quantization of the scattering from a classically chaotic repeller*, *J. Chem. Phys.* **90** (1989) 4 Seiten 2255–2262.
- [13] B. Huckestein, R. Ketzmerick und C. H. Lewenkopf: *Quantum Transport through Ballistic Cavities: Soft vs Hard Quantum Chaos*, *Phys. Rev. Lett.* **84** (Jun 2000) Seiten 5504–5507.
- [14] L. E. Reichl: *The Transition to Chaos*, Springer-Verlag, New York, (2004).
- [15] C. Jung, C. Mejia-Monasterio und T. H. Seligman: *Quantum and classical echoes in scattering systems described by simple Smale horseshoes*, *Europhys. Lett.* **55** (2001) 5 Seiten 616.

-
- [16] H. Lee, C. Jung und L. E. Reichl: *Scattering echoes in a waveguide with a ripple cavity*, Phys. Rev. B **73** (May 2006) Seiten 195315.
- [17] M. Prusty und H. Schanz: *Self-Pulsed Electron Transmission through a Finite Waveguide in a Transversal Magnetic Field*, Phys. Rev. Lett. **98** (Apr 2007) 17 Seiten 176804.
- [18] M. D. Feit, J. A. Fleck, Jr. und A. Steiger: *Solution of the Schrödinger equation by a spectral method*, J. Comput. Phys. **47** (Febr. 1982) Seiten 412 – 433.
- [19] H. Narnhofer: *Another definition for time delay*, Phys. Rev. D **22** (Nov 1980) 10 Seiten 2387–2390.
- [20] P. Gaspard: *Chaos, Scattering and Statistical Mechanics*, Nr. 9 in Cambridge Nonlinear Science Series, Cambridge University Press, Cambridge, United Kingdom, (1998).
- [21] E. P. Wigner: *Lower Limit for the Energy Derivative of the Scattering Phase Shift*, Phys. Rev. **98** (Apr 1955) Seiten 145–147.
- [22] F. T. Smith: *Lifetime Matrix in Collision Theory*, Phys. Rev. **118** (Apr 1960) 1 Seiten 349–356.
- [23] N. Hlubek: *Zeitentwicklung in chaotischen Quantensystemen*, Diplomarbeit, Technische Universität Dresden, Fachrichtung Physik, (2006).
- [24] M. Frigo und S. Johnson: *The Design and Implementation of FFTW3*, Proceedings of the IEEE **93** (Feb. 2005) 2 Seiten 216 –231.
- [25] NVIDIA Corporation: *CUDA 3.2 CUFFT Library*, (Aug. 2010).
- [26] J. E. Bayfield: *Quantum evolution – An Introduction to Time-Dependent Quantum Mechanics*, John Wiley & Sons, Inc., New York, USA, (1999).
- [27] H. Schanz: Persönliche Unterredung, 2012.

Danksagung

Zuerst gilt mein Dank Prof. Dr. Roland Ketzmerick für die Aufnahme in seine Arbeitsgruppe und die Auswahl des Themas, sowie Prof. Dr. Holger Schanz für die kompetente und stets freundliche Beratung auch über große räumliche Distanzen. In Bezug auf die Arbeit möchte ich mich desweiteren insbesondere bei Dr. Steffen Löck für seine umfassende stilistische Beratung bedanken.

In der Arbeitsgruppe Computational Physics konnte ich mit vielen außergewöhnlichen Menschen zusammenarbeiten. Martin Richter sei für eine lehrreiche und fröhliche Zeit im gemeinsamen Büro gedankt. Auch die Geduld von Falk Haßler und die anregenden Gespräche mit Dr. Matthias Michler und allen anderen werde ich in guter Erinnerung behalten.

Da diese Zeilen nicht nur das Ende meiner Arbeit, sondern das Ende meines Studiums und damit eines bedeutenden Lebensabschnittes markieren, gilt mein Dank auch meiner Familie und meinen Freunden, die mich in diesen Jahren auf unterschiedlichste Weise unterstützt haben.

Erklärung

Hiermit erkläre ich, dass ich diese Arbeit im Rahmen der Betreuung im Institut für Theoretische Physik ohne unzulässige Hilfe Dritter verfasst und alle Quellen als solche gekennzeichnet habe.

Stefan Majewsky
Dresden, Februar 2012