

## MITOCW | DE Student Video: Quantum Time Evolution Using the Split Operator Fourier Transform Algorithm

---

Sie haben wahrscheinlich schon alle von der Quanten [??] gehört und den Problemen, die es gibt.

Von dem Problem vor allem und bestehenden Phänomenen, die sie beschreibt.

Zum Beispiel wissen wir, dass Quantenobjekte, wie Elektronen, durch Wände, durch Potenzialbarrieren gehen können.

Katzen hingegen können nicht tunneln.

Im Folgenden möchte ich einen Algorithmus vorstellen, der uns erlaubt, diese Phänomene, diese Zeitentwicklung von Phänomenen zu beschreiben.

Das ist nämlich das Split Operator Fourier Transform Algorithmus.

Ich mache das mit der Zeitentwicklung, besonders von quantenmechanischen Objekten, auch für Materialwissenschaftler von Bedeutung ist, wenn Sie, zum Beispiel, Spektroskopie betreiben wollen.

Aber auch, wenn man im Laufe von dieser Haltung dieses Algorithmus und auch beim Anwendungsalgorithmus, viele Konzepte sehen kann, die immer wiederkehrend sind in der computational chemistry.

Das heißt, wie ich einen Algorithmus herleite.

Wir werden auch gleich erfahren, wie ich das nutze, um monocolor Algorithmen herzuleiten, zum Beispiel, Velocity Valley.

Und ich werde auch zeigen, wie man einen Algorithmus überwachen kann.

Und wie man die Lücker ein bisschen beeinflussen kann und dabei auch die Quanten... die heisenbergsche Unschärferelation ???

und in Form des Tunneleffekts.

Und wir starten unsere Reise bei dem Fundament, der Schrödingergleichung.

Die sieht aus wie folgt: Das sagt, wenn ich meinen Zustand ableite nach der Zeit, ist es das gleiche, wenn ich ein Hamilton auf meinen Zustand anwende.

Und wenn ich das dann integriere, für ein Hamilton, das nicht von der Zeit abhängt, komme ich bei dieser Gleichung heraus.

Die besagt, wenn ich diese Exponentialfunktion mit meinem Hamilton mit drin auf meinem Zustand beim Zeitpunkt  $t$  gleich 0 anwende, komme ich an Zeitpunkt  $t$  wieder raus.

Das heißt, das ist ein Propagator unserer Wellenfunktion von Zeitpunkt  $t$  gleich 0, zum Zeitpunkt  $t$  propagiert.

Der Hamilton, der hier drin steigt, hat zwei verschiedene Teile.

Falls Sie es nicht schon wissen, nämlich ein kinetischen Teil und einen potenziellen Teil.

Kinetischer Impuls hängt mit Potenzial zusammen, das wir auf das System werfen.

Zum Beispiel, könnten wir, eine Katze auf eine Rutsche setzen.

Dann dieses Potenzial, hier könnten wir auch ein harmonisches Potenzial anlegen, was eine Parabel, zum Beispiel, ist.

Wir nutzen jetzt dieses Wissen, um unseren Algorithmus herzuleiten und fangen zunächst an unseren Algorithmen, unseren Propagator umzuschreiben.

Wir machen das, indem wir uns überlegen, dass es egal ist, ob wir, oder, das egal sein könnte, ob wir unsere Katze in einen großen Schritt für Zeitpunkt  $t$  rechnen oder, ob wir das in kleinen Schritten machen.

Das heißt, wir könnten uns vorstellen, dass wir unsere Katze in kleinen Schritten, langsam zum Zeitpunkt  $t$  anstoßen.

Das schreiben wir wie folgt, das heißt, wir machen hier im Prinzip  $N$ -Mal hintereinander Schritte der Größe  $\epsilon$ .

Jetzt kann man sich überlegen, hilft uns das was?

Die Antwort ist leider nein.

Es hilft uns kein bisschen weiter, da wir immer noch nicht wissen, wie wir das hier ausrechnen sollen im Allgemeinfeld.

Man könnte sich überlegen, ob es hilft, das Problem aufzuteilen.

Das heißt, wir schauen uns zunächst Potenzial an, dann den Puls.

Allerdings würde man zu einer solchen Schreibweise vielleicht kommen wollen.

Allerdings ist diese nicht im Allgemeinen zulässig, da der Operator nicht im Allgemeinen kumuliert und das heißt, wir können nicht es wieder herrollen, in welcher Reihenfolge wir diese zwei Operatoren anwenden.

Allerdings kommen wir um dieses Problem herum, wenn wir Trotters Wissen anwenden und Trotters Wissen sagt uns, okay, wenn wir jetzt einen Operator, zum Beispiel, wie folgt schreibt: Wir haben unseren Propagator, wir haben hier unser Potenzial  $H_2$ , propagiert nur einen halben Zeitschritt lang, denn hier ist Potenzial wieder einen halben Zeitschritt propagiert und hier unser Kinetik-Teil.

Wenn wir das einfach N-Mal machen und dabei N gegen Unendlich gehen lassen.

Das heißt, unendlich kleine Zeitschritte nehmen, ist das Ganze exakt.

Jetzt sind wir im Prinzip schon am Ziel.

Wir müssen das Ganze nur ein bisschen weniger abstrakt machen.

Wir machen das, indem wir unseren Zustand auf die Koordinatenbasis projizieren.

Das heißt, wir wollen unseren Zustand in der Koordinatenbasis darstellen können.

Das machen wir, indem wir einfach unsere ursprüngliche Schreibweise, Propagator auf  $\Psi_0$  angewandt, hier dann auf ein  $x_t$  projizieren und, wenn wir dann ein bisschen Algebra machen, kommen wir zu dieser Formel hier, die unser Kern ist.

Nämlich, das wir hier im Prinzip die Schreibweise wiederfinden, die wir auch hier oben haben.

Ich propagiere mein Potenzial einen halben Schritt, dann propagiere ich meinen Impuls einen ganzen Schritt und meine Kinetik einen ganzen Schritt, dann propagiere ich mein Potenzial wieder einen halben Schritt.

Das interessante ist aber, was diese Teilchen machen.

Die sagen mir nämlich, dass ich hier in der Ortsdarstellung starte.

Das habe ich ja hier da stehen.

Wenn ich  $\psi$  auf  $x_0$  projiziere, komme ich bei  $\psi(x_0)$  bei dem Zeitpunkt  $t=0$  raus.

Das propagiere ich jetzt im Potenzial und mache dann eine Fourier-Transformation in einen Impulsraum.

In einem Impulsraum kann ich dann einfach meinen Kinetik-Teil ausrechnen, hier steht ja ein  $p$  drin, und wenn ich das gemacht habe, kann ich wieder in meinen Ortsraum projizieren, wo ich wieder einfach mein Potenzial

ausrechnen kann.

Wo ich ein  $x$  drinstehen habe.

Das ist der Kern des Algorithmus, der wie folgt aussieht: Ich starte mit meinem Objekt in der Ortsdarstellung, nutze ein Gitter, da ich ja nicht eine kontinuierliche Variable propagieren kann.

Das spielt ja auch eine Rolle in einer Diskussion.

Dann propagiere ich es in den Impuls, transformiere es in einen Impulsraum, der nicht so bekannt ist, wie zum Beispiel, der Ortsraum.

Wir könnten uns vorstellen, dass die Katze blau ist in einem Impulsraum.

Wenn wir eine Darstellung dafür haben wollen, propagieren dann unsere Kinetik, transformieren zurück in den Ortsraum und können dann wieder einen halben Schritt im Potenzial gehen.

Machen wir das Ganze mal im echten Beispiel.

Zum Beispiel an freien Teilchen.

Wir wenden also kein Potenzial an, sondern schauen ein Wellenpaket an und schauen uns an, wie es sich mit der Zeit entwickelt.

Das mache ich hier für zwei Beispiele.

Nämlich für die zwei verschiedenen Massen.

Und was wir hier sehen, ist, das obere Beispiel, was das leichtere Teilchen ist, versucht, sich im Raum auszubreiten.

Wohingegen das schwerere Teilchen lokalisiert bleibt.

Man kann darin eine Allegorie zur Unschärferelation sehen.

Nämlich, dass wir bei klassischen, schweren Teilchen nicht mit einer Diakosierung [??] kämpfen müssen.

Wohingegen, wenn wir Quantenexperimente machen, schon damit kämpfen müssen.

Wenn wir jetzt das Teilchen noch schwerer machen würden, ich nehme mal eine Massendifferenz von 100, wäre der Effekt natürlich noch viel ausgeprägter.

Wir werden am Ende, hier oben, überall im Raum die gleiche Wahrscheinlichkeit haben, das Teilchen zu finden.

Wohingegen es unendlich viel länger dauern wird, das im anderen Fall zu sehen.

Machen wir das ganze ein bisschen komplexer.

Wir wenden hier eine Potenzialbarriere an.

Wir haben in beiden Fällen hier nämlich eine Wand und wir haben ein Wellenpaket mit zwei verschiedenen Höhen an der Wand und schauen uns an, was passiert.

In beiden Fällen propagieren wir jetzt unser Wellenpaket und dann kommt es an die Wand und in dem einen Fall, oben, wird es reflektiert und in dem anderen Fall, unten, geht es einfach durch.

Und das ist der Fall, da unsere Wand, im ersten Fall Millionen-mal höher ist, als im zweiten Fall und dabei sehen wir, dass der Tunneleffekt auf der Höhe der Potenzialbarriere abhängt.

Das heißt, auch ein Quantenobjekt kann durch beliebig hohe Wände durchtunneln.

Und was wir jetzt eigentlich hier sehen, sind Interferenzeffekte, wo ich dann Wellenpakete sehe, die sich dann aufgespaltet haben hier treffen und dann irgendwann ihr Interferenzmuster bilden.

Machen wir das noch etwas komplexer.

Lassen Sie uns zu zwei Potenzialbarrieren gehen.

Auch hier starten wir wieder mit einem Wellenpaket und schauen uns an, wie es sich entwickelt.

Hier spaltet es sich auf und dann trifft es eine Wand.

Hier zunächst die rechte, wird dann teilweise reflektiert und teilweise kann es durchgehen.

Genauso an der linken Wand, da beide Barrieren gleich hoch sind.

Und dann werden wir wieder Interferenzeffekte sehen können.

Allerdings sehen wir auch hier, dass die Energie ein bisschen verrückt spielt, sodass man sich fragen könnte, können wir es besser machen?

Ein erster Versuch wäre, dass der [??].

Das heißt, wir gehen kleinere Schritte in unserer Zeitentwicklung.

Man kann das machen.

Hier habe ich es für 0,05 gemacht und einmal 0,005.

Das eine dauert 4 Minuten das auszurechnen, für dieses eindimensionale Beispiel.

Das andere schon 1,9 Stunden und wir sehen viel Aufwand überhalb bringt nichts.

Der ursprüngliche Zeitschritt war schon gut genug für das Problem.

Dann die nächste Stellschraube.

Wir könnten ja ein Gitter machen, indem das etwas feiner ist.

Das muss man jetzt schon über Nacht rechnen.

Da das fine grid schon so viele Punkte hat, dass da unmöglich wird, das einfach mal kurz zu rechnen.

Und vergleichen wir das mal mit unserer ursprünglichen Simulation.

Wir schauen einfach mal, wie dann die Energie ist, wenn wir am gleichen Zeitpunkt ankommen, der hier, mit grauen Balken markiert ist.

Und das ist ungefähr jetzt der Fall.

Und wir sehen, dass wir hier dann doch deutlich bessere Energie, als im ursprünglichen Beispiel haben.

Das heißt, wahrscheinlich könnten wir hier mit einem besseren Gitter deutlich weiter kommen.

Man kann es in der Praxis auch so machen.

In der Praxis kann man auch, zum Beispiel, adaptive Gitter anwenden, die in manchen Gebieten feiner sind als in anderen Gebieten, um da ein bisschen das [??] von der Rechenleistung her.

Wir sehen auch hier, dass wir schnell an eine Barriere kommen, wo wir es nicht mehr ausrechnen können.

Das wäre noch ein anderes Beispiel.

Was Sie jetzt gesehen haben in diesem Video, ist, wie wir einen Algorithmus herleiten können, wo wir genau wissen, wo wir die Näherung einführen.

Das war nämlich die Trotter-Näherung und man kann dabei auch herleiten, wie groß der Fourier ist.

Und wir können diese Trotter-Näherung, dann auch im späteren Beispiel verwenden, um zum Beispiel, [??] herzuleiten.

Wir haben dadurch dann auch die Unschärferelation uns ein bisschen anschauen können, wir haben uns den Tunneleffekt anschauen können und wir haben gesehen, wie wir die Konvergenz bewerten können, nämlich durch Normalisierung und Energieerhaltung und wir haben am Ende auch gesehen, welchen Effekt die Gittergröße und Zeitschritte haben.

Hier haben wir ein schönes Beispiel vom Zeitschritt, wenn das für eine einzige Potenzialbarriere ist.

Wir haben es auch für ein [??] von 0,005 gegen 0,001 gemacht und wir sehen, dass der kleine Zeitschritt deutlich bessere Energieerhaltung zeigt, als der große Zeitschritt.

Ich hoffe, ich konnte jetzt hier einen kleinen Einblick in die Quantendynamik geben und wie man Zeitentwicklungen berechnen könnte, wie man Algorithmen entwickelt und wie man auch damit Phänomene besser verstehen kann.