

Universität Bielefeld

Fakultät für Chemie

Masterarbeit

Eine graphische Benutzeroberfläche für hochdimensionale Quantendynamiksimulationen

Bearbeiter:	Peter Protassow
Prüfer:	Prof. Dr. Uwe Manthe
Zweitprüfer:	Prof. Dr. Wolfgang Eisfeld
Abgabedatum:	28. Mai 2018



Hiermit versichere ich, die vorgelegte Masterarbeit selbstständig und ohne unzulässige Hilfe angefertigt zu haben. Die verwendeten Quellen und Hilfstexte sind vollständig angegeben und die Stellen der Arbeit, einschließlich Tabellen und Abbildungen, die anderen Werken im Sinn und Wortlaut entnommen wurden, als Entlehnung kenntlich gemacht. Die Bestimmungen der Bachelorprüfungsordnung sind mir bekannt. Die von mir vorgelegte Masterarbeit wurde in der Zeit vom 29. November 2017 bis 28. September 2017 im Arbeitskreis von Prof. Dr. Uwe Manthe an der Fakultät für Chemie der Universität Bielefeld unter der wissenschaftlichen Anleitung von Roman Ellerbrock durchgeführt.

Bielefeld, den 28. Mai 2018 .

.....
(*Peter Protassow*)

Danksagung

Danken möchte ich Prof. Dr. Uwe Manthe für die Möglichkeit dieses spannende MCT-DH - Projekt mitgestalten zu können. Ich bedanke mich insbesondere bei meinem Betreuer Roman Ellerbrock, dessen Vertrauen in meine Fähigkeiten, mir sehr geholfen hat. Natürlich bedanke ich mich auch bei der gesamten Arbeitsgruppe der theoretischen Chemie für die sehr angenehme Arbeitsatmosphäre. Schließlich danke ich auch meiner Freundin Ela, die sich mit mir gefreut hat, wenn ich erfolgreiche Masterarbeitstage hatte.

Inhaltsverzeichnis

Danksagung	III
1 Einleitung	1
2 Theorie	2
2.1 Einleitung	2
2.1.1 Absorption und Emission	2

1 Einleitung

In der Physik und theoretischen Chemie hat sich die MCTDH - Methode als effizienter Algorithmus zur Lösung der zeitabhängige Schrödingergleichung etabliert. Um mit der MCTDH - Methode arbeiten zu können, sind bisher fortgeschrittene Programmierkenntnissen Voraussetzung.

Um das Arbeiten mit der MCTDH - Methode auch anderen Wissenschaftlern mit wenig Programmiererfahrung zu ermöglichen, soll in dieser Arbeit eine grafische Oberfläche (GUI) implementiert werden. Es wurde existierender MCTDH - C++ Code gewrappt. Der gewrappte Code wurde für den Aufbau der GUI verwendet.

2 Theorie

2.1 Einleitung

In der theoretischen Chemie findet die MCTDH - Methode Verwendung, um quantendynamische Rechnungen zu erleichtern. Im Unterschied zu anderen quantendynamischen Methoden resultiert die Effizienz des MCTDH aus der zweischichtigen Darstellung dieser Methode. Anstelle die Wellenfunktion in einer zeitunabhängigen Basis zu entwickeln und die Zeitentwicklung durch zeitabhängige Entwicklungskoeffizienten zu beschreiben, wird die Wellenfunktion als ein Satz von zeitabhängigen Basisfunktionen dargestellt. Diese Basisfunktionen, die auch Einteilchenfunktionen genannt werden, können so gewählt werden, dass die Einteilchenfunktionen sich aus mehrdimensionalen Wellenfunktionen zusammensetzen, die wiederum als MCTDH - Wellenfunktion entwickelt werden. Durch die rekursive Anwendung der MCTDH - Methode auf seine Einteilchenfunktionen wird ein mehrlagiges MCTDH entwickelt, das quantendynamische Rechnungen von Systemen mit bis zu 1000 Freiheitsgraden ermöglicht. [Manthe, 2008 multilayer MCTDH approach]

$$F_s^2 = |\langle \psi_f | \psi_i \rangle|^2 \quad (2.1)$$

a

2.1.1 Absorption und Emission

$$k_{ET} \propto E^2 \propto \frac{\mu_D^2 \mu_A^2}{R_{DA}^6} \quad (2.2)$$

Gleichung 2.2 spiegelt die Abstandsabhängigkeit der Energietransferrate durch Coulombwechselwirkung wider.^[?]

Abbildung 2.1.1: Schematische Darstellung zweier Potentialkurven des elektronischen Grundzustandes und eines angeregten Zustandes mit den jeweiligen Vibrationszuständen. Absorption (blauer Pfeil) erfolgen bei gleicher Kerngeometrie.