

# Inhaltsverzeichnis

|          |                                                               |           |
|----------|---------------------------------------------------------------|-----------|
| <b>1</b> | <b>Einleitung</b>                                             | <b>5</b>  |
| <b>2</b> | <b>Quanten-Molekular-Dynamik</b>                              | <b>7</b>  |
| 2.1      | Einführung . . . . .                                          | 7         |
| 2.2      | Herleitung der Bewegungsgleichungen . . . . .                 | 7         |
| 2.3      | Erhaltungsgrößen . . . . .                                    | 9         |
| <b>3</b> | <b>Ansätze für die Wellenfunktion</b>                         | <b>10</b> |
| 3.1      | Gaußsche Wellenpakete . . . . .                               | 10        |
| 3.2      | Wasserstoffähnliche Wellenpakete . . . . .                    | 15        |
| 3.3      | Superpositionsansatz . . . . .                                | 19        |
| <b>4</b> | <b>Vielteilchensysteme</b>                                    | <b>28</b> |
| 4.1      | Bewegungsgleichungen . . . . .                                | 28        |
| 4.2      | Die Breite der Wellenpakete . . . . .                         | 30        |
| 4.3      | Numerische Realisierung . . . . .                             | 33        |
| 4.4      | Mean-Field-Ansatz . . . . .                                   | 35        |
| 4.5      | Antisymmetrisierung der Wellenpakete . . . . .                | 40        |
| 4.6      | Beschreibung von $H_2$ -Molekülen . . . . .                   | 41        |
| <b>5</b> | <b>Thermodynamische Eigenschaften des Vielteilchensystems</b> | <b>47</b> |
| 5.1      | Plasmaparameter . . . . .                                     | 47        |
| 5.2      | Wellenpakete mit variabler Breite . . . . .                   | 48        |
| 5.3      | Wellenpakete mit fixierter Breite . . . . .                   | 52        |
| <b>6</b> | <b>Simulationen im chemischen Bild</b>                        | <b>54</b> |
| 6.1      | Beschreibung des Verfahrens . . . . .                         | 54        |
| 6.2      | Theorie des idealen Plasmas . . . . .                         | 55        |
| 6.3      | Ergebnisse dieser Simulationen . . . . .                      | 57        |
| 6.4      | Ionisations- und Rekombinationsprozesse . . . . .             | 61        |
| <b>7</b> | <b>Zusammenfassung</b>                                        | <b>65</b> |