

DATENVERARBEITUNG FÜR TPH II

LVA Nr. 138.074

Methoden zur numerischen Lösung
gewöhnlicher Differentialgleichungen

Teil 2

H. Leeb



Gegenstand dieser Vorlesung und den beiden zugehörigen Übungseinheiten sind die grundlegenden Verfahren zur numerischen Lösung von gewöhnlichen Differentialgleichungen.

- (1) Einschrittverfahren für Differentialgleichungen 1. Ordnung
- (2) Konsistenz und Konvergenz von Lösungsalgorithmen
- (3) Runge-Kutta-Verfahren
- (4) Rundungsfehler
- (5) Das Numerov-Verfahren
- (6) Mehrschrittverfahren (Korrektor- und Prediktorverfahren)
- (7) Extrapolationsverfahren

Anwendungen:

- Das Pendel (Übung 1)
- Bindungszustände in einem Zentralpotential (Übung 2)
- Streulösungen der radialen Schrödingergleichung (Übung 2)
- Transmission und Reflexion am eindimensionalen Potentialwall (Übung 2)

Explizites Einschrittverfahren:

Aus der Kenntnis der Lösung $y^h(x_i)$ läßt sich direkt der Wert an der nächsten Stützstelle $y^h(x_{i+1})$ berechnen [x_i, x_{i+1} sind Stützstellen, $h=x_{i+1}-x_i$ Schrittweite]

$$y^h(x_{i+1}) = y^h(x_i) + h \Phi(x_i, y^h(x_i); h) \text{ mit } y^h(x_0) = y_a$$

Die Funktion $\Phi(x, y; h)$ ist charakteristisch für das verwendete Einschrittverfahren

VORTEIL:

Die numerische Lösung im Intervall $[a, b]$ erfolgt auf einem Gitter von Stützpunkten x_i , $i=0, 1, \dots, N$ mit $x_0=a$, $x_N=b$, welche bei einem Einschrittverfahren nicht notwendigerweise äquidistant sein müssen. Die Schrittweite ist h bzw. $h_i=x_{i+1}-x_i$

Probleme der Quantenmechanik erfordern die Lösung der Schrödingergleichung

Beispiel: Schrödingergleichung in einer Dimension $\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right\} \psi(x) = E \psi(x)$ und Randbedingungen

$$\left\{ \frac{d^2}{dx^2} + \underbrace{\frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x))}_{w(x)} \right\} \psi(x) = 0$$

Gewöhnliche Differentialgleichung zweiter Ordnung

$$\psi''(x) + w(x) \psi(x) = 0$$

und Randbedingungen

Im Prinzip kann man diese Differentialgleichung durch ein Runge-Kutta-Verfahren lösen. Meist verwendet man für die Lösung das Numerov Verfahren

Bekannt auch unter Fox-Goodwin-Verfahren

Man betrachtet die Differentialgleichung $u''(x) + w(x)u(x) = 0$

Äquidistante Stützstellen: $x_j = x_{\min} + j\Delta$ mit $j = 0, 1, 2, \dots, N$ und $u(x_j) = u_j$

Darstellung der zweiten Ableitung mittels Taylorreihe:

$$u_{n\pm 1} = u_n \pm \Delta u'_n + \frac{1}{2} \Delta^2 u''_n \pm \frac{1}{6} \Delta^3 u'''_n + \frac{1}{24} \Delta^4 u_n^{(iv)} \pm \frac{1}{120} \Delta^5 u_n^{(v)} + O(\Delta^6)$$

Summation führt zu

$$u''_n = \frac{u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}}{\Delta^2} - \frac{\Delta^2}{12} u_n^{(iv)} + O(\Delta^4)$$

Darstellung der vierten Ableitung mittels Differentialgleichung:

$$u_n^{(iv)} = -(wu)'' = -\frac{w_{n+1}u_{n+1} - 2w_n u_n + w_{n-1}u_{n-1}}{\Delta^2} + O(\Delta^2)$$

Zusammenfassung aller Terme

$$u_n'' = \frac{u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}}{\Delta^2} - \frac{\Delta^2}{12} \left((-1) \frac{w_{n+1}u_{n+1} - 2w_nu_n + w_{n-1}u_{n-1}}{\Delta^2} \right) + O(\Delta^4) = -w_nu_n$$

Zweischrittformel $\left(1 + \frac{\Delta^2}{12}w_{n+1}\right)u_{n+1} - \left(2 - 10\frac{\Delta^2}{12}w_n\right)u_n + \left(1 + \frac{\Delta^2}{12}w_{n-1}\right)u_{n-1} = 0$

Algorithmus für praktische Rechnung

$$Q_{n+1} = 12u_n - 10Q_n - Q_{n-1} \quad \text{mit} \quad Q_n = \left(1 + \frac{\Delta^2}{12}w_n\right)u_n$$

Die Kenntnis der Lösung bei zwei Funktionswerten (Rand- oder Anfangsbedingung) ist für eine eindeutige Bestimmung von u erforderlich

Anfangs-/Randwertproblem: $u_0=a, u_1=b$ $\xrightarrow{\quad\quad\quad} u_0$
 $\xrightarrow{\quad\quad\quad} u_1$

$$Q_0 = \left(1 + \frac{\Delta^2}{12} w_0\right) u_0, \quad Q_1 = \left(1 + \frac{\Delta^2}{12} w_1\right) u_1$$

$$Q_2 = 12u_1 - 10Q_1 - Q_0$$

$$u_2 = \frac{Q_2}{\left(1 + \frac{\Delta^2}{12} w_2\right)} \xrightarrow{\quad\quad\quad} u_2$$

$$Q_3 = 12u_2 - 10Q_2 - Q_1$$

\vdots
 \vdots

$$Q_{n+1} = 12u_n - 10Q_n - Q_{n-1}$$

$$u_{n+1} = \frac{Q_{n+1}}{\left(1 + \frac{\Delta^2}{12} w_{n+1}\right)} \xrightarrow{\quad\quad\quad} u_{n+1}$$

\vdots

Hinweis: Für $u'' + wu = 0$ lässt sich in der RB $u_n=0$ oft die Linearität ausnützen.

Numerov Verfahren ist spezieller Algorithmus für gewöhnliche Differential-Gleichungen zweiter Ordnung → keine einfache Erweiterung von Einschritt V.

Nachstehend die Entwicklung von Algorithmen, die als Erweiterung von Einschrittverfahren angesehen werden können.

In einem Mehrschrittverfahren zur Lösung des Anfangswertproblems

$$y' = f(x, y) \text{ mit } y(x_0) = y_a$$

Wird zu $r > 1$ gegebenen Näherungswerten η_k für $y(x_k)$ $k=j, j+1, \dots, j+r-1$ ein neuer Näherungswert für η_{j+r} für $y(x_{j+r})$ berechnet.

$$y' = f(x, y) \Rightarrow \int_{x_{p-j}}^{x_{p+k}} dt f(t, y(t)) = y(x_{p+k}) - y(x_{p-j})$$

Man ersetzt $f(x, y)$ durch ein Polynom, welches an äquidistanten Stützstellen $x_j = x_0 + jh$ die Funktion $f(x, y)$ wiedergibt.

$$y(x_{p+k}) - y(x_{p-j}) = \sum_{i=0}^q f(x_{p-i}, y_{p-i}) \int_{x_{p-j}}^{x_{p+k}} dx L_i(x) \text{ mit } L_i(x) = \prod_{\ell=0, \ell \neq i}^q \frac{(x - x_{p-\ell})}{(x_{p-i} - x_{p-\ell})}$$

Mehrschrittverfahren

$$\eta_{p+k} = \eta_{p-j} + h \sum_{i=0}^q \beta_{qi} f_{p-i}$$

$$\beta_{qi} = \frac{1}{h} \int_{x_{p-j}}^{x_{p+k}} dx L_i(x) = \int_{-j}^k ds \prod_{\ell=0, \ell \neq i}^q \frac{(\ell + s)}{(\ell - i)} \text{ für } i = 0, 1, 2, \dots, q$$

Verfahren von Adams-Bashforth:

$k=1, j=0, q=0,1,2,\dots$

$$\eta_{p+1} = \eta_p + h[\beta_{q0}f_p + \beta_{q1}f_{p-1} + \dots + \beta_{qq}f_{p-q}]$$

$$\beta_{qi} = \int_0^1 ds \prod_{\ell=0, \ell \neq i}^q \frac{(\ell + s)}{(\ell - i)} \quad \text{für } i = 0,1,2,\dots,q$$

Verfahren von Nyström:

$k=1, j=1, q=0,1,2,\dots$

$$\eta_{p+1} = \eta_{p-1} + h[\beta_{q0}f_p + \beta_{q1}f_{p-1} + \dots + \beta_{qq}f_{p-q}]$$

$$\beta_{qi} = \int_{-1}^1 ds \prod_{\ell=0, \ell \neq i}^q \frac{(\ell + s)}{(\ell - i)} \quad \text{für } i = 0,1,2,\dots,q$$

$\beta_{qi} \setminus i$	0	1	2	3	4
β_{0i}	1				
$2\beta_{1i}$	3	-1			
$12\beta_{2i}$	23	-16	5		
$24\beta_{3i}$	55	-59	37	-9	
$720\beta_{4i}$	1901	-2774	2616	-1274	251

Beide Verfahren erlauben unabhängig von der Funktion $f(x,y)$ die explizite Berechnung des nächsten Schritts
 → **Prediktorverfahren**

Verfahren von Adams-Moulton:

$k=0, j=1, q=0,1,2,\dots$

$$\eta_p = \eta_{p-1} + h [\beta_{q0} f_p + \beta_{q1} f_{p-1} + \dots + \beta_{qq} f_{p-q}]$$

$$\beta_{qi} = \int_{-1}^0 ds \prod_{\ell=0, \ell \neq i}^q \frac{(\ell + s)}{(\ell - i)} \quad \text{für } i = 0, 1, 2, \dots, q$$

Verfahren von Milne-Thompson:

$k=0, j=2, q=0,1,2,\dots$

$$\eta_p = \eta_{p-2} + h [\beta_{q0} f_p + \beta_{q1} f_{p-1} + \dots + \beta_{qq} f_{p-q}]$$

$$\beta_{qi} = \int_{-2}^0 ds \prod_{\ell=0, \ell \neq i}^q \frac{(\ell + s)}{(\ell - i)} \quad \text{für } i = 0, 1, 2, \dots, q$$

$\beta_{qi} \setminus i$	0	1	2	3	4
β_{0i}	1				
$2\beta_{1i}$	1	1			
$12\beta_{2i}$	5	8	-1		
$24\beta_{3i}$	9	19	-5	1	
$720\beta_{4i}$	251	646	-264	106	-19

Beide Verfahren erlauben für eine allgemeine Funktion $f(x,y)$ keine explizite Berechnung des nächsten Schritts

→ **Korrektorverfahren**

Allgemeine Form eines r-Schrittverfahren:

$$\eta_{j+r} + a_{r-1}\eta_{j+r-1} + \cdots + a_0\eta_j = hF(x_j, \eta_{j+r}, \eta_{j+r-1}, \dots, \eta_j; h; f)$$

Bisher besprochen: Lineare Mehrschrittverfahren

F hängt linear von f ab

$$F(x_j; \eta_{j+r}, \eta_{j+r-1}, \dots, \eta_j; h; f) = b_r f(x_{j+r}, \eta_{j+r}) + \cdots + b_0 f(x_j, \eta_j)$$

Beispiel: $r=q+1$ -Schrittverfahren von Adams-Bashforth

$$a_q = -1, \quad a_{q-1} = \cdots = a_0 = 0 \quad b_{q+1} = 0$$

$$b_{q-1} = \beta_{qi} = \int_0^1 ds \prod_{\ell=0, \ell \neq i}^q \frac{\ell + s}{\ell - i}$$

Analog zum Einschrittverfahren: Definition des **lokalen Diskretisierungsfehlers**

$$\tau(x, y; h) = \frac{1}{h} \left\{ z(x + rh) - \left[hF(x; z(x + rh), \dots, z(x); h; f) - \sum_{i=0}^{r-1} a_i z(x + ih) \right] \right\}$$

Konsistenz eines Mehrschrittverfahrens

Mehrschrittverfahren konsistent, falls $\forall f \in F_1(a, b)$ eine Funktion $\sigma(h)$ existiert mit $\lim_{h \rightarrow 0} \sigma(h) = 0$, sodass

$$|\tau(x, y; h)| \leq \sigma(h) \quad \forall x \in [a, b]$$

Verfahren p-ter Ordnung, falls für $f \in F_p(a, b)$ gilt $\sigma(h) = O(h^p)$

Analog zum Einschrittverfahren: Definition des **globalen Diskretisierungsfehlers**

$$e(x, \varepsilon; h) = \underbrace{\eta(x, \varepsilon; h)}_{\text{Numerische Lösung}} - \overbrace{y(x)}^{\text{exakte Lösung}}$$

Fehler an den r Stützstellen

$$\varepsilon_i = \eta_i - y(x_i)$$

Konvergenz eines Mehrschrittverfahrens

Mehrschrittverfahren heißt konvergent, falls

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \eta(x, \varepsilon; h_n) = y(x), \quad h_n = \frac{x - x_0}{n} \quad \text{mit } n = 1, 2, \dots$$

Falls für alle $x \in [a, b]$, $f \in F_1(a, b)$ und $\forall \varepsilon(z, h)$ für welche $\rho(h)$ existiert, die Beziehung gilt

$$|\varepsilon(z, h)| \leq \rho(h) \quad \forall z \in R_h, \quad \lim_{h \rightarrow 0} \rho(h) = 0.$$

Grundlage: asymptotische Entwicklung des globalen Diskretisierungsfehlers

Beispiel: Anfangswertproblem: $y' = f(x, y)$ mit $y(x_0) = y_0$ und $x_0 \in [a, b]$

Numerischer Algorithmus zur Integration der Differential- gleichung	$\eta(x_0; h) = y_0$
	$\eta(x_0 + h; h) = y_0 + h f(x_0, y_0)$
	\vdots
	$\eta(x + h; h) = \eta(x - h; h) + 2h f(x, \eta(x; h))$
	\vdots

Der Algorithmus führt zu folgender Näherung $\eta(x; h)$ der exakten Lösung $y(x)$:

$$\eta(x; h) = y(x) + \sum_{k=1}^N h^{2k} [u_k(x) + (-1^{x/h}) v_k(x)] + E_{2N+2}(x; h)$$

Fehler: $e(x; h) = \eta(x; h) - y(x) = h^2 [u_1(x) + (-1^{x/h}) v_1(x)] + O(h^4)$

↑
Oszillation mit $n=x/h$

Graggsche Funktion:
$$S(x; h) = \frac{1}{4} [\eta(x-h; h) + 2\eta(x; h) + \eta(x+h; h)]$$

Einsetzen des
Algorithmus
liefert

$$\begin{aligned} S(x; h) &= \frac{1}{2} \{y(x) + \frac{1}{2} [y(x+h) + y(x-h)]\} + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N h^{2k} \{u_k(x) + \frac{1}{2} [u_k(x+h) + u_k(x-h)]\} \\ &= (-1)^{x/h} \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N h^{2k} \{v_k(x) - \frac{1}{2} [v_k(x+h) + v_k(x-h)]\} + O(h^{2N+2}) \end{aligned}$$

Entwickeln von
 $y(x \pm h), u_k(x \pm h),$
 $u_k(x \pm h)$ liefert

$$S(x; h) = y(x) + h^2 \underbrace{\left[u_1(x) + \frac{1}{2} \frac{d^2 y}{dx^2} \Big|_x \right]}_{\uparrow} + \sum_{k=2}^N h^{2k} [\tilde{u}_k(x) + (-1)^{x/h} \tilde{v}_k(x)] + O(h^{2N+2})$$

Der führende Term der Entwicklung
enthält keinen oszillierenden Faktor

Gesucht: Lösung von $y'=f(x,y)$ an der Stelle $\bar{x}=x_0+H$

Algorithmus:

Rekursion für

$$\begin{aligned} h &= H/n & \eta_0 &= y_0 \\ x_1 &= x_0 + h & \eta_1 &= y_0 + hf(x, \eta_0) \\ \vdots & & \vdots & \\ x_{j+1} &= x_j + h & \eta_{j+1} &= \eta_{j-1} + 2hf(x_j, \eta_j) \text{ für } j = 1, 2, \dots, n-1 \end{aligned}$$

Bildung der Graggschen Funktion: $S(\bar{x}; h) = \frac{1}{2} [\eta_n + \eta_{n-1} + hf(\bar{x} = x_n, \eta_n)]$

Durchführung:

Berechnen von $S(\bar{x}; h_i)$ für eine Folge von Schrittweiten $h_i = H/n_i$ mit $n_i = 2, 4, 6, \dots$

$$S(\bar{x}; h) = y(\bar{x}) + a_1 h^2 + \dots + a_k h^{2k}$$

Anwendung des Neville Algorithmus für Extrapolation auf $h=0$ liefert

Einschrittverfahren

Vorteil: optimierte variable Schrittweite

Nachteil: starre Ordnung, hoher Aufwand

Mehrschrittverfahren

Vorteil: bei linearen Problemen, geringerer Aufwand

Nachteil: starre Ordnung, feste Schrittweite, erste Schritte mit Einschrittverfahren

Extrapolationsverfahren

Vorteil: keine feste Ordnung, hohe Genauigkeit mit geringem Aufwand, einfach für komplexe Probleme

Nachteil: bei einfachen Problemen wirken sich Vorteile nicht aus

Mikroskopische Systeme werden im Rahmen der Quantenmechanik durch die Wellenfunktion beschrieben, welche sich als Lösung der Schrödingergleichung unter vorgegebenen Anfangs- bzw. Randbedingungen ergibt. Zur numerischen Lösung versucht man die Dimension des Problems durch geeignete Entwicklungen (z.B. Partialwellenentwicklung) zu reduzieren.

Typische Fragestellungen der Quantenmechanik sind:

- (1) Bindungszustände der radialen Schrödingergleichung
- (2) Streulösung der radialen Schrödingergleichung
- (3) Reflexion und Transmission am Potentialwall

Viele Fragestellungen in quantenmechanischen Problemen erfordern die Lösung der Schrödingergleichung.

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right\} \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r})$$

Für zentralsymmetrische Probleme $V(\vec{r}) = V(r)$

Partialwellenentwicklung

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{u_{\ell}(r)}{r} P_{\ell}(\cos \theta)$$

Radiale Schrödingergleichung

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + V(r) \right\} u_{\ell}(r) = E u_{\ell}(r)$$

Anwendungsbeispiele:

Berechnung von Bindungszuständen

Bindungszustände im H-Atom

Bindungszustände von Neutronen im Gravitationsfeld

Berechnung von Streuzuständen

Streuung von Neutronen an einem Kernpotential – Levinson-Theorem

Die radiale Schrödingergleichung hat eine Singularität bei $r=0$

Fuchssche Klasse: für $r \rightarrow 0$ gilt $u_\ell(r) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n r^{\alpha+n} = a_0 r^\alpha + a_1 r^\alpha + a_2 r^{\alpha+2} + \dots$

Einsetzen des verallgemeinerten Potenzreihenansatz führt auf

$$\sum_{n=0}^{\infty} \left\{ (\alpha+n)(\alpha+n-1)a_n r^{\alpha+n-2} - \ell(\ell+1)a_n r^{\alpha+n-2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(r))a_n r^{\alpha+n} \right\} = 0$$

Koeffizientenvergleich für $n=0$ führt auf Bestimmungsgleichung für α

$$\alpha(\alpha-1) - \ell(\ell+1) = 0 \Rightarrow \alpha = \frac{1}{2} \pm \left(\ell + \frac{1}{2}\right)$$

Differentialgleichung mit
Singularität bei $r=0$

$$u_\ell(r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} \begin{cases} a_0 r^{\ell+1} & \text{reguläre Lösung} \\ a_0 r^{-\ell} & \text{irreguläre Lösungen} \end{cases}$$

Anfangswertproblem für regulären Lösung: $u_\ell(r=0)=0, u_\ell(r=\Delta r)=g \neq 0 \quad \Delta r > 0$

Anfangswertproblem für irreguläre Lösung: $u_\ell(r=R_1)=g_1, u_\ell(r=R_2)=g_2 \quad \Delta r < 0$

Man betrachtet die Differentialgleichung $u''(x) + w(x)u(x) = 0$

$$x \rightarrow r, u(x) \rightarrow u_\ell(r) \text{ und } w(x) \rightarrow w(r) = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(r)) - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}$$

Äquidistante Stützstellen: $x_j = x_{\min} + j\Delta$ mit $j = 0, 1, 2, \dots, N$ und $u(x_j) = u_j$

$$\text{Zweischrittformel} \quad \left(1 + \frac{\Delta^2}{12} w_{n+1}\right) u_{n+1} - \left(2 - 10 \frac{\Delta^2}{12} w_n\right) u_n + \left(1 + \frac{\Delta^2}{12} w_{n-1}\right) u_{n-1} = 0$$

Algorithmus für praktische Rechnung

$$Q_{n+1} = 12u_n - 10Q_n - Q_{n-1} \quad \text{mit} \quad Q_n = \left(1 + \frac{\Delta^2}{12} w_n\right) u_n$$

Die Kenntnis der Lösung bei zwei Funktionswerten (Rand- oder Anfangsbedingung) ist für eine eindeutige Bestimmung von u erforderlich

Bei einer regulären Lösung ist $u_0=0$. Damit wird in den meisten Fällen $Q_0=0$. Aufgrund der Singularität im Zentrifugalwall der radialen Schrödinger-gleichung kann es aber zu endlichen Werten kommen.

$$u(r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} a_0 r^{\ell+1} \Rightarrow w_0 u_0 = \left(\frac{2m}{\hbar^2} (E - V(r=0)) - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right) a_0 r^{\ell+1} = -\ell(\ell+1) a_0 r^{\ell-1}$$

$$\Rightarrow Q_0 = \begin{cases} 0 & \text{für } \ell = 0, 2, 3, \dots \\ -\frac{\Delta^2}{12} 2a_0 = -\frac{1}{6} u(r=\Delta) & \text{für } \ell = 1 \text{ mit } u(r=\Delta) = a_0 \Delta^2 \end{cases}$$

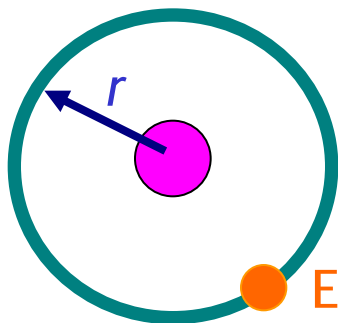
$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] + V(r) \right\} u(r) = E u(r)$$

Wellenfunktion $u(r)$
Energie E

Umformung

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \underbrace{k^2 + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}}_{w(r)} - U(r) \right] u(r) = 0 \quad \text{mit} \quad k^2 = \frac{2m_e}{\hbar^2} E$$

Beispiel: H-Atom



Elektron

Coulombpotential

$$V(r) = -\frac{Z\alpha_f \hbar c}{r}$$

Z	Ordnungszahl, Zahl der Protonen
$\alpha_f = 1./137.035989$	Feinstrukturzahl
$\hbar c = 197.327053 \text{ eVnm}$	
$m_e c^2 = 0.51099906 \text{ MeV}$	Ruhemasse des Elektrons

Die numerische Lösung physikalischer Probleme sollte mit angepassten Einheiten erfolgen.

$$\rho = \frac{r}{a_0} \quad \text{mit Bohrradius} \quad a_0 = \frac{\hbar c}{\alpha_f m_e c^2} = 0,05291772 \text{ nm}$$

Transformation der Differentialgleichung führt auf

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} + \underbrace{\varepsilon - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} + \frac{2Z}{\rho}}_{\tilde{w}(\rho)} \right] \tilde{u}(\rho) = 0$$

Dimensionslose Form der Differentialgleichung

Die Energie ist in Einheiten der Bohrenergie E_0 gegeben

$$\varepsilon = \frac{E}{E_0} \quad \text{mit} \quad E_0 = \frac{1}{2} m_e c^2 \alpha_f^2 = 13.59829 \text{ eV}$$

Eine charakteristische Eigenschaft von Bindungszuständen ist, dass sie quadrat-integrierbar sind, d.h. $\int_0^\infty d\rho |\tilde{u}(\rho; \varepsilon)|^2 = C$ mit $0 \leq C < \infty$

Bedingung an Bindungswellenfunktion im Asymptotischen:

Damit dieses Integral endlich bleibt, muss die Lösung für asymptotische r -Werte verschwinden, d.h. wir suchen Lösungen mit der Eigenschaft

$$\tilde{u}(\rho) \xrightarrow{\rho \rightarrow \infty} C \exp(-\sqrt{-\varepsilon} \rho) \quad \text{mit } \varepsilon < 0$$

Bedingung an Bindungswellenfunktion im Ursprung:

Der Bindungszustand muss aber gleichzeitig auch eine reguläre Lösung sein, d.h. der Wert von $\tilde{u}(\rho; \varepsilon)$ muss am Ursprung verschwinden.



Beide Bedingungen können gleichzeitig nur für diskrete ε -Werte erfüllt werden, welche numerisch durch mehrmalige gezielte Versuche (**Einfach-Schießverfahren**) iterativ bestimmt werden.

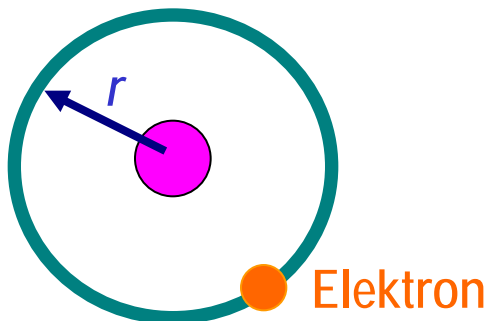
$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] + V(r) \right\} u(r) = E u(r)$$

Wellenfunktion $u(r)$
Energie E

Umformung

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \underbrace{k^2 + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}}_{w(r)} - U(r) \right] u(r) = 0 \quad \text{mit} \quad k^2 = \frac{2m_e}{\hbar^2} E$$

Beispiel: H-Atom



Coulombpotential

$$V(r) = -\frac{Z\alpha_f \hbar c}{r}$$

Z	Ordnungszahl, Zahl der Protonen
$\alpha_f = 1./137.035989$	Feinstrukturzahl
$\hbar c = 197.327053 \text{ eVnm}$	
$m_e c^2 = 0.51099906 \text{ MeV}$	Ruhemasse des Elektrons

Eigenschaften der radialen Schrödingergleichung - Reguläre Lösung

In physikalischen Problemen sind wir meist an regulären Lösungen interessiert, d.s. Lösungen mit endlicher Wahrscheinlichkeitsdichte bei $r = 0$.

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} + \varepsilon - \underbrace{\frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2}}_{\tilde{w}(\rho)} + \frac{2Z}{\rho} \right] \tilde{u}(\rho) = 0$$

Differentialgleichung mit Singularität bei $r=0$ $\Rightarrow \tilde{u}(\rho) \xrightarrow{\rho \rightarrow 0} \begin{cases} c_0 \rho^{\ell+1} & \text{reguläre Lösung} \\ d_0 \rho^{-\ell} & \text{irreguläre Lösung} \end{cases}$

Für die numerische Bestimmung der regulären Lösung muss man folgende Startwerte für den Numerov Algorithmus festlegen:

$$\tilde{u}_0 = 0 \quad \text{und} \quad \tilde{u}_1 = g \neq 0$$

Bindungszustände sind durch diskrete Energieeigenwerte charakterisiert, welche man iterativ bestimmen muss.

Start der Nullstellenbestimmung: Wahl von $\varepsilon < 0$ und Berechnung von

$$\tilde{u}(\rho_N) = \tilde{u}_N = \exp(-\sqrt{-\varepsilon}\rho_N) \quad \text{und} \quad \tilde{u}(\rho_{N-1}) = \tilde{u}_{N-1} = \exp(-\sqrt{-\varepsilon}\rho_{N-1})$$

$$\text{bzw. } \tilde{u}_m = \left[n_\ell(i\sqrt{-\varepsilon}\rho_m) - i j_\ell(i\sqrt{-\varepsilon}\rho_m) \right] \text{ mit } m = N, N-1$$

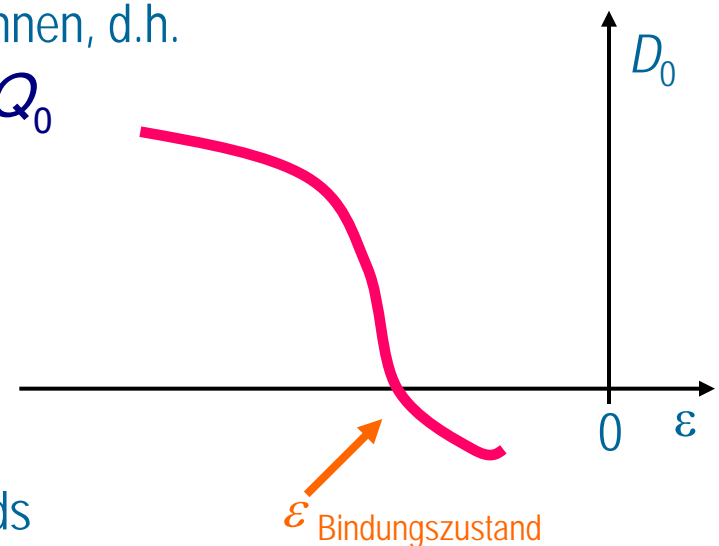
Lösen der Differentialgleichung: von außen nach innen, d.h.

$$Q_{N-2}, \tilde{u}_{N-2}, Q_{N-3}, \tilde{u}_{N-3}, \dots, Q_1, \tilde{u}_1, Q_0$$

Berechnung von D_0 :


$$D_0(\varepsilon, \ell) = Q_0(\varepsilon, \ell) + \frac{\tilde{u}_1}{6} \delta_{\ell 1}$$

Bestimmung der Nullstelle von D_0 : Die Nullstelle D_0 bestimmt die Energie des Bindungszustands



Die asymptotische Form der radialen Wellenfunktion für Streulösungen ist bei vorgegebener Bahndrehimpulsquantenzahl und potentialen endlicher Reichweite

$$u_\ell(r, k) \underset{r \rightarrow \infty}{=} A \left[\cos(\delta_\ell) \hat{j}_\ell(kr) - \sin(\delta_\ell) \hat{n}_\ell(kr) \right] \underset{r \rightarrow \infty}{=} A \sin(kr + \delta_\ell)$$



sphärische Besselfunktion
 Riccati-Form $\hat{j}_\ell(kr) \underset{r \rightarrow \infty}{=} kr j_\ell(kr) = \sin\left(kr - \ell \frac{\pi}{2}\right)$

Streuphase

sphärische Besselfunktion
 Riccati-Form $\hat{n}_\ell(kr) \underset{r \rightarrow \infty}{=} kr n_\ell(kr) = -\cos\left(kr - \ell \frac{\pi}{2}\right)$

Man integriert numerisch die Wellenfunktion $r=0$ ausgehend über $h, 2h, \dots$ bis r_1 bzw. r_2 und erhält numerisch die Werte $u_1 = u(r_1, k)$ bzw. $u_2 = u(r_2, k)$. Die Streuphase erhält man durch Vergleich mit der asymptotischen Form von $u(r, k)$:

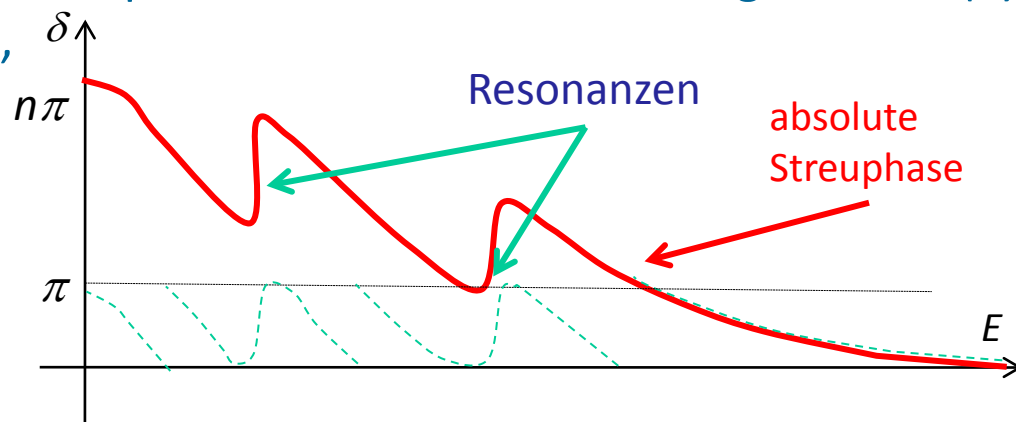
$$\frac{u_1}{u_2} = \frac{\hat{j}_\ell(kr_1) - \tan(\delta_\ell) \hat{n}_\ell(kr_1)}{\hat{j}_\ell(kr_2) - \tan(\delta_\ell) \hat{n}_\ell(kr_2)} \Rightarrow \tan(\delta_\ell) = \frac{u_1 \hat{j}_\ell(kr_2) - u_2 \hat{j}_\ell(kr_1)}{u_1 \hat{n}_\ell(kr_2) - u_2 \hat{n}_\ell(kr_1)}$$

Levinson Theorem:

Für eine gegebene Partialwelle nimmt die absolute Streuphase $\delta(E)$ bei der Energie $E=0$ den Wert $\delta(0)=n\pi$ an, wobei n die Anzahl der Bindungszustände des Potentials in der Partialwelle ist. Bei Existenz eines halbgebundenen Zustands (Bindungszustand bei $E=0$) nimmt die Streuphase den Wert $\delta(0)=(n+0.5)\pi$ an.

Die numerische Rechnung bestimmt die Streuphase δ modulo π . Unter der absoluten Streuphase versteht man die stetige Kurve $\delta(E)$ zwischen $E=0$ und E unendlich, wobei $\delta \rightarrow 0$ für $E \rightarrow$ unendlich

Numerisch bestimmte Streuphase



Wir betrachten ein Teilchen der Masse m , welches sich in einem Potential $V(x)$ bewegt

$$\left\{ \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right\} \psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t)$$

Hamilton Operator
explizit zeitunabhängig



Energie E ist eine
Erhaltungsgröße



Betrachtung stationärer Zustände

$$\psi(x, t) = u(x) e^{-i \frac{E}{\hbar} t}$$

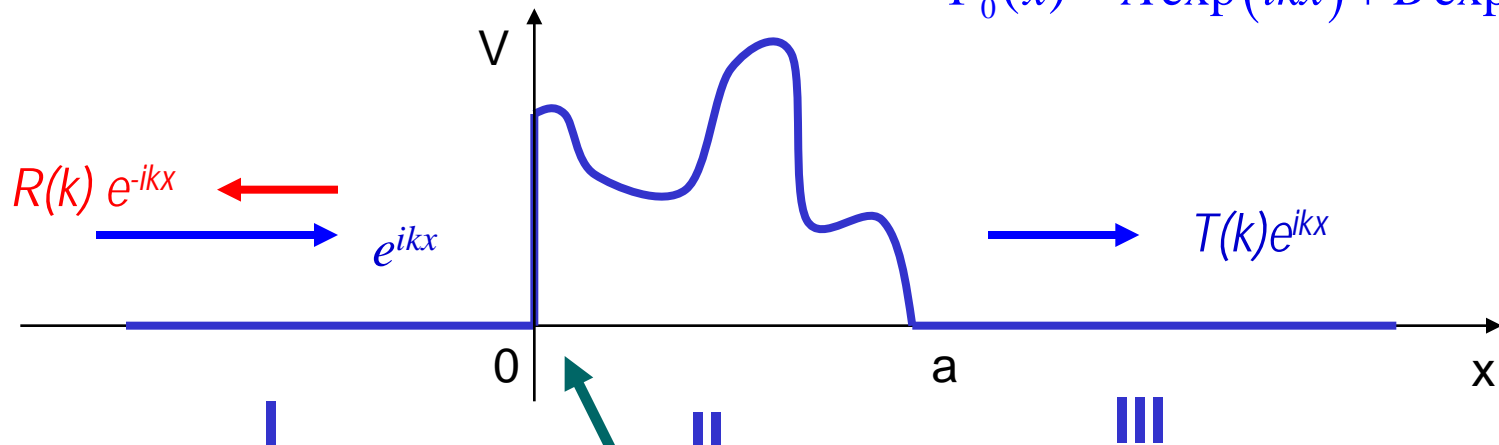
$$\left\{ \frac{d^2}{dx^2} + k^2 - U(x) \right\} u(x) = 0 \quad \text{mit} \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad U(x) = \frac{2m}{\hbar^2} V(x)$$

Das eindimensionale Streupproblem

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + \underbrace{k^2 - U(x)}_{w(x)} \right] \Psi(k, x) = 0$$

Allgemeine Lösung für $U=0$

$$\Psi_0(x) = A \exp(ikx) + B \exp(-ikx)$$



Ψ und Ψ' sind stetig

$$\Psi_I(x) = \exp(ikx) + R(k) \exp(-ikx)$$

$$\Psi_{III}(x) = T(k) \exp(ikx)$$

Berechnung von $R(k)$ und $T(k)$

Um $R(k)$ und $T(k)$ für einen Strahl einfallend von links numerisch zu bestimmen, müssen folgende Schritte durchgeführt werden.

1. Man startet im Bereich III ($x > a$), in welchem man $u(x)$ bis auf eine Konstante kennt, setzt man an: $\tilde{u}(x) = e^{ikx}$
2. Man löst die Schrödingergleichung numerisch von $x > a$ bis $x < 0$ mit dem Ansatz von 1.
3. Im Bereich I ($x < 0$) hat die Lösung die analytische Form

$$\tilde{u}(x) = \underbrace{\frac{1}{T(k)}}_{\alpha(k)} e^{ikx} + \underbrace{\frac{R(k)}{T(k)}}_{\beta(k)} e^{-ikx}$$

Durch Vergleich der numerischen mit der analytischen Form lassen sich $R(k)$ und $T(k)$ bestimmen.

Berechnung von $R(k)$ und $T(k)$

Man drückt die numerische Lösung an zwei Stützstellen $x_1, x_2 < 0$ durch die analytische Form aus,

$$\tilde{u}(x_1) = \tilde{u}_1 = \frac{1}{T(k)} e^{ikx_1} + \frac{R(k)}{T(k)} e^{-ikx_1}$$

$$\tilde{u}(x_2) = \tilde{u}_2 = \frac{1}{T(k)} e^{ikx_2} + \frac{R(k)}{T(k)} e^{-ikx_2}$$

Aus diesem Gleichungssystem kann man den Reflexions- und den Transmissionkoeffizienten berechnen.

$$R(k) = -\frac{e^{ikx_1} \tilde{u}_2 - e^{ikx_2} \tilde{u}_1}{e^{-ikx_1} \tilde{u}_2 - e^{-ikx_2} \tilde{u}_1}$$

$$T(k) = \frac{1}{\tilde{u}_1} \left[e^{ikx_1} + R(k) e^{-ikx_1} \right]$$

$$r(q) = |R(k)|^2 \quad \text{Reflektivität}$$

Aufbau eines Reflektometers (Röntgenstrahlung, Neutronen)

