

Numerische Potentialmatrixberechnung

bisher: analytische Potentialmodelle

$$\frac{1}{2} m \omega^2 x^2 + c_3 x^3 + c_4 x^4$$

$$D \cdot (1 - e^{-\alpha(r-r_e)})^2$$

→ Potentialmatrixelemente $\langle \psi_n | V | \psi_m \rangle$
können analytisch (oder mittels
Reihenentwicklung) berechnet werden

realistischere Anwendungen:

komplizierte Potentialfunktionen,
bei denen eine analytische
Berechnung der Potentialmatrix
nicht durchgeführt werden kann

⇒ numerische Berechnung der Integrale

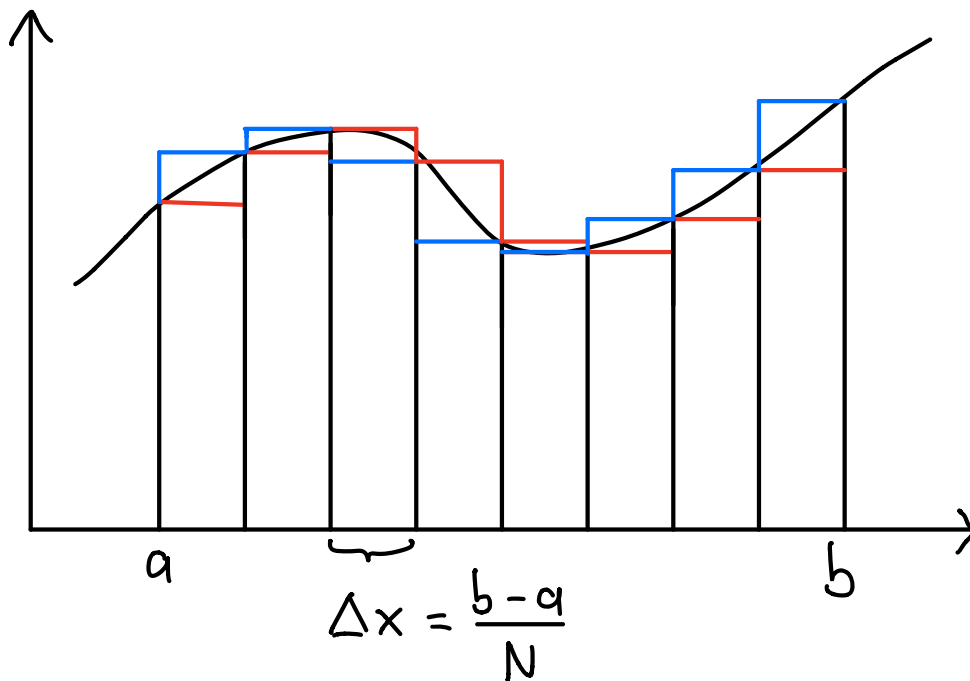
$$\langle \psi_n | V | \psi_m \rangle = \int dx \psi_n(x)^* V(x) \psi_m(x)$$

„Quadratur“

Einfache Diskretisierung entsprechend der Riemannschen Integraldefinition

$$\int_a^b dx f(x) = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=1}^N f\left(a + n \frac{b-a}{N}\right) \cdot \frac{b-a}{N}$$

$$= \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=0}^{N-1} f\left(a + n \frac{b-a}{N}\right) \cdot \frac{b-a}{N}$$



N -Punkt-Näherung für das Integral, z.B.

$$I_N = \sum_{n=0}^{N-1} f\left(a + n \frac{b-a}{N}\right) \cdot \frac{b-a}{N} = \sum_{n=0}^{N-1} f(x_n^{(N)}) \cdot \Delta x^{(N)}$$

$\underbrace{\hspace{10em}}_{= x_n^{(N)}} \quad \underbrace{\hspace{2em}}_{= \Delta x^{(N)}}$

kann einfach numerisch berechnet werden. Dann muß eine Konvergenzstudie den Wert für $N \rightarrow \infty$ bestimmen.

Beispiel: Matrixelemente für die Teilchen im Kasten-Basis

$$\langle \psi_n | V | \psi_m \rangle = \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} dx \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(n\pi \frac{x-x_{\min}}{L}\right) \cdot V(x) \cdot \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(m\pi \frac{x-x_{\min}}{L}\right)$$

N-Punkt-Näherung für $\langle \psi_n | V | \psi_m \rangle$:

$$I_N(n, m) = \frac{L}{N} \cdot \sum_{j=0}^{N-1} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(n\pi \frac{x_j^{(N)} - x_{\min}}{L}\right) \cdot V(x_j^{(N)}) \cdot \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(m\pi \frac{x_j^{(N)} - x_{\min}}{L}\right)$$

$$\text{mit } x_j^{(N)} = x_{\min} + \frac{L}{N} \cdot j$$

$$\frac{x_j^{(N)} - x_{\min}}{L} = \frac{j}{N} \Rightarrow$$

$$I_N(n, m) = \frac{2}{N} \cdot \sum_{j=0}^{N-1} \sin\left(\frac{n \cdot j}{N} \cdot \pi\right) \sin\left(\frac{m \cdot j}{N} \cdot \pi\right) \cdot V\left(x_{\min} + \frac{L}{N} \cdot j\right)$$

kann für beliebiges $V(x)$ einfach numerisch berechnet werden

$I_N(n, m)$ konvergiert für $N \rightarrow \infty$ gegen die exakten Integralwerte:

$$\langle \psi_n | V | \psi_m \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} I_N(n, m)$$

Nebenbemerkung:

Komplexere Verfahren mit nicht-äquidistanten Stützstellen (\rightarrow Gauß-Quadratur) existieren und konvergieren unter Umständen schneller, nicht aber für das hier betrachtete Beispiel.

Wie viele Quadraturpunkte N sind notwendig, um die Matrixelemente $\langle \psi_n | V | \psi_m \rangle$ für eine gegebene Basisgröße $n, m \leq n_{\max}$ ausreichend genau zu berechnen?

- Da die Funktionen ψ_n mit zunehmendem n eine immer komplexere Struktur zeigen, muß N mit steigendem n_{\max} immer größer gewählt werden.

- Für das einfachste Potential $V(x) = \text{const.}$ gilt für jede orthonormale Basis $\{\psi_n\}$:

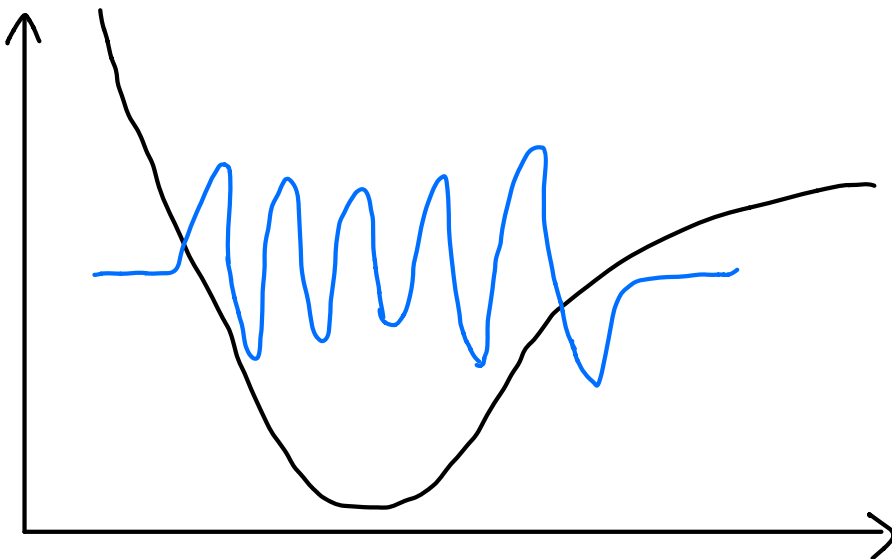
$$\langle \psi_n | V | \psi_m \rangle = \text{const.} \cdot \langle \psi_n | \psi_m \rangle = \text{const.} \cdot \delta_{nm}$$

Diese Orthonormalitätsbeziehung sollte auch durch die numerische Integration korrekt wiedergegeben werden:

$$\sum_{j=0}^{N-1} \psi_n(x_j^{(N)})^* \psi_m(x_j^{(N)}) = \delta_{nm}, \quad n, m \leq n_{\max}$$

Lineare Algebra: Gleichungssystem nur erfüllbar, wenn $N \geq n_{\max}$

- Typischerweise ist das Potential weniger strukturiert als die Wellenfunktion



\Rightarrow Sind n_{\max} Funktionen zur Darstellung der Wellenfunktion ausreichend, so erlaubt die gleiche Anzahl Quadraturpunkte eine ausreichend genaue Integralberechnung. Damit ist $n_{\max} = N$ typischerweise eine gute Wahl.

Konvergiert man n_{\max} und wählt $N = n_{\max}$, so konvergiert die Quadratur automatisch mit, auch wenn mehr Quadraturpunkte als Basisfunktionen erforderlich wären.