

Friedrich-Schiller-Universität Jena

Physikalisch-Astronomische Fakultät

Theoretisch-Physikalisches Institut

AG Quantum Field Theory



Bachelorarbeit

Anwendung der SLAC-Ableitung auf
quantenmechanische Systeme

Eingereicht am 28. September 2012 von Daniel Ullmann
geboren am 14. September 1989 in Karl-Marx-Stadt

1. Gutachter: Prof. Dr. Andreas Wipf
2. Gutachter: Dr. Björn Wellegehausen

Selbstständigkeitserklärung

Hiermit erkläre ich, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig und nur unter Verwendung der genannten Quellen angefertigt habe.

Jena, 28. September 2012

Daniel Ullmann

Bibliothekserklärung

Seitens des Verfassers bestehen keine Einwände, die vorliegende Bachelorarbeit für die öffentliche Nutzung in der Thüringer Universitäts- und Landesbibliothek zur Verfügung zu stellen.

Jena, 28. September 2012

Daniel Ullmann

Danksagung

Ich bedanke mich bei Prof. Dr. Andreas Wipf, der es mir ermöglicht hat, an diesem sehr interessanten Thema zu arbeiten. Speziell danke ich Ihm für seine Geduld und die sehr anregenden Gespräche.

Natürlich möchte ich meiner Familie und meinen Freunden danken, ohne deren seelische Unterstützung diese Arbeit nicht möglich gewesen wäre.

Inhaltsverzeichnis

1	Vorwort	1
2	Physikalische Grundlagen	1
2.1	Der Zweidimensionale anharmonische isotrope Oszillator	1
2.2	Zentralsymmetrische Potentiale in drei Dimensionen	1
2.2.1	Der anharmonische isotrope Oszillator	2
2.2.2	Das Wasserstoffatom	2
2.3	Die SLAC-Ableitung	3
3	Erweiterung der SLAC-Ableitung auf zwei Raumdimensionen	5
4	Erweiterung der SLAC-Ableitung auf drei Dimensionen	7
5	Die radiale SLAC-Ableitung	8
6	Der anharmonische isotrope Oszillator in zwei Dimensionen: Numerische Behandlung	10
6.1	Umsetzung	10
6.2	Ergebnisse	11
7	Der dreidimensionale isotrope anharmonische Oszillator: Numerische Behandlung	13
7.1	Umsetzung	13
7.2	Ergebnisse	13
8	Das Wasserstoffatom: Numerische Behandlung	15
8.1	Umsetzung	15
8.2	Ergebnisse	16
9	Zusammenfassung und Ausblick	17
A	Abbildungsverzeichnis	19
B	Tabellenverzeichnis	19
C	Anhang	20

1 Vorwort

Oft muss man zur Lösung von quantenmechanischen Systemen das analytische Gebiet der Mathematik verlassen und bedient sich einer numerischen Lösung, um das Spektrum eines Hamiltonians zu ermitteln. Gewöhnlicherweise kommt dann eine lokale diskrete Formulierung der Ableitung zum Einsatz. Dabei stellt der SLAC-Algorithmus eine wesentlich genauere Methode zur Lösung quantenmechanischer Eigenwertprobleme dar, weil damit eine Repräsentation der Ableitung vorliegt, die alle Gitterpunkte einbezieht. Im Folgenden wird die auf zwei und drei kartesischen Raumdimensionen an Hand des anharmonischen Oszillators behandelt und mit dem Schießverfahren verglichen. Zum Abschluss wird die auf dreidimensionale Radialprobleme undefinierte SLAC-Ableitung am Wasserstoffatom vorgestellt.

2 Physikalische Grundlagen

2.1 Der Zweidimensionale anharmonische isotrope Oszillator

Die zweidimensionale Schrödingergleichung dieses Problems lautet in Polarkoordinaten

$$\hat{H}\psi(\rho, \phi) = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} - \frac{\hat{l}_z^2}{\hbar^2 \rho^2} \right) \psi(\rho, \phi) + V(\rho)\psi(\rho, \phi) = E\psi(\rho, \phi), \quad V(\rho) = \frac{m\omega^2}{2}\rho^2 + \lambda\rho^4.$$

Durch einen Separationsansatz trennt man nun den Radial- und Winkelanteil der Eigenfunktionen¹. Da der Drehimpulsoperator senkrecht zur Ebene mit dem Hamiltonoperator kommutiert, können gemeinsame Energieeigenwerte gefunden werden. Das ermöglicht die Identifikation des Operators mit seinen Eigenwerten l_z . Führt man die dimensionslose Raumkoordinate $x = \frac{\sqrt{m\omega}}{\hbar}\rho$ ein, findet man die Bestimmungsgleichung für die Energieeigenwerte:

$$\left(-\frac{d^2}{dx^2} - \frac{1}{x} \frac{d}{dx} + \frac{l_z^2}{x^2} + x^2 + \lambda' x^4 \right) R(x) = \frac{2E}{\hbar\omega} R(x), \quad \lambda' = \frac{2\lambda\hbar}{m^2\omega^3}. \quad (1)$$

Die Betrachtung des asymptotischen Verhaltens am radialen Nullpunkt zeigt eine Abhängigkeit

$$R \propto x^{|l_z|}. \quad (2)$$

Die Ausführungen sollen an dieser Stelle reichen, da die dargestellten Überlegungen für eine numerische Behandlung genügen. Erwähnt werden sollten aber noch die Energieeigenwerte des ungestörten, analytisch lösbaren Problems:

$$E_{n,l} = \hbar\omega(2n + |l_z| + 1), \quad n \in \mathbb{N}_0, l_z \in \mathbb{Z}. \quad (3)$$

2.2 Zentralsymmetrische Potentiale in drei Dimensionen

Im Folgenden soll die Schrödingergleichung für dreidimensionale rotationssymmetrische Potentiale in Auszügen betrachtet werden. Für genauere Betrachtungen sind [2] und [3] sehr zu empfehlen.

Der Ausgangspunkt für die Betrachtung ist die Schrödingergleichung

$$\hat{H}\psi(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\vec{r}) + V(r)\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}). \quad (4)$$

Nach Transformation der Schrödinger Gl. 4 in Kugelkoordinaten und Separation der Eigenfunktionen in einen Winkel- und Radialanteil bleibt die Lösung der radialen Differentialgleichung zur Bestimmung der Eigenenergien über. Die winkelabhängigen Teile des Laplace-Operators können mit dem Drehimpulsoperator und der mit ihm verknüpften Drehimpulsquantenzahl identifiziert werden (Vgl. Gl. 5).

$$E\psi_r(r) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \psi_r(r) \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} \psi_r(r) \right] + V(r)\psi_r(r) \quad (5)$$

Mit dem Ansatz $\psi_r(r) = \frac{R(r)}{r}$ unterdrückt man die erste Ableitung, wodurch die berühmte eindimensionale

¹Es wird [1] gefolgt.

Radialgleichung mit modifiziertem Potential entsteht.

$$ER(r) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) + V(r) \right] R(r) := \left[\frac{\hat{p}_r^2}{2m} + V'(r) \right] R(r) \quad (6)$$

Den l -abhängigen Term des Potentials V' nennt man Zentrifugalbarriere. Für das Wasserstoffatom wird in Kernnähe der eigentliche Potentialterm vernachlässigbar, wodurch das Elektron vom Kern abgestoßen wird. Er ist dafür verantwortlich, dass höhere Orbitale eine geringere Aufenthaltswahrscheinlichkeit am Kern haben. Resultierend ist das Elektron weniger stark gebunden, wodurch Streulösungen mit Energien $E > 0$ möglich werden.

2.2.1 Der anharmonische isotrope Oszillator

Mit dem Potential $V(r) = \frac{m\omega^2}{2}r^2 + \lambda r^4$ des anharmonisch isotropen Oszillators bietet es sich an, die einheitenfreie Ortskoordinate $x = \frac{r}{x_0} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}r$ einzuführen. Es resultiert die dimensionslose Radialgleichung des anharmonischen Oszillators

$$\left(-\frac{d^2}{dx^2} + \frac{l(l+1)}{x^2} + x^2 + \lambda' x^4 \right) R(x) = \frac{2E}{\hbar\omega} R(x) := \epsilon R(x), \quad \lambda' = \frac{2\hbar\lambda}{m^2\omega^3}. \quad (7)$$

Zum Vergleich späterer numerischer Behandlungen die Eigenwerte des ungestörten Problems:

$$E_n = \hbar\omega \left(2n + l + \frac{3}{2} \right), \quad n \in \mathbb{N}_0, \quad l \in \mathbb{N}_0. \quad (8)$$

Zu beachten ist, dass die Quantenzahl des Drehimpulsbetrags nicht durch die Quantenzahl n eingeschränkt ist, wie es beim Wasserstoffatom vorliegt. Andernfalls wäre eine Unstimmigkeit im Vergleich zur kartesischen Lösung des Problems die Folge. Für eine genaue Herleitung sei auf [4] verwiesen.

2.2.2 Das Wasserstoffatom

Beim Wasserstoffatom hat das Potential die Form

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}.$$

Mit der Einführung einer dimensionslosen Ortskoordinate, welche in Bohrschen Radien a_B gemessen wird, nimmt Gl. 6 folgende übersichtliche Gestalt an:

$$\left[-\frac{d^2}{dx^2} + \frac{l(l+1)}{x^2} - \frac{2}{x} \right] R(x) = \frac{E}{E_a} R(x) := \mathcal{E} R(x), \quad (9)$$

mit $x = \frac{r}{a_B}$, $a_B = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2}$ und $\mathcal{E} = \frac{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2}{m_e e^2}$. Dabei sind:

- m_e die Elektronenmasse
- ϵ_0 die elektrische Feldkonstante
- e die Elektronenladung
- \hbar das reduzierte plancksche Wirkungsquantum.

Diese Darstellung der Radialgleichung ist für die Eigenwertsuche mit dem Computer prädestiniert, da alle Größen dimensionslos, aber in anschaulichen Einheiten gemessen werden.

Die analytisch bestimmbaren Energieeigenwerte

$$E = -\frac{\mathcal{E}}{n^2}, \quad n \in \mathbb{N} \quad (10)$$

werden in [2] ausführlich hergeleitet.

2.3 Die SLAC-Ableitung

Im Folgenden wird sich dem Ausgangspunkt der Arbeit gewidmet. Die Grundlage der Methode wurde bereits in [5], [6] und [7] vorgestellt. Vollständigkeitshalber wird noch einmal kommentierend darauf eingegangen. Um sich im Vergleich zum diskreten Differenzenoperator einen Vorteil zu schaffen, liegt dem SLAC-Algorithmus die Fouriertransformation zu Grunde. Für Potentiale der Form

$$\lim_{|x|=\infty} V(x) \rightarrow \infty$$

kann der physikalische Sachverhalt auf ein Raumintervall I heruntergebrochen werden, solange die numerischen Parameter L und N geschickt gewählt werden. Die erwähnten Parameter diskretisieren den Raum und bestimmen somit die Genauigkeit der Simulation. Die Länge des Intervalls I muss sehr viel größer als 1 sein, um auch weniger lokalisierte Wellenfunktionen aufzulösen und einen großen Abstand zum unphysikalischen Bereich des Randes zu erhalten.

$$I = [a, a + L].$$

Handelt es sich um gebundene Zustände $E < V(x)$, sorgt das exponentielle Abklingen der Eigenzustände für einen vernachlässigbaren Randfehler. Diskretisiert man nun den Ortsraum mit dem Stützstellenabstand $h = \frac{L}{N}$, sodass

$$x_k = a + kh, \quad k = 1, 2, \dots, N,$$

folgt als Konsequenz der Anforderung an L , dass eine große Anzahl Stützstellen N notwendig ist, um auch kurze Wellenlängen abtasten zu können. Durch Nutzung des Modells der periodischen Randbedingungen beschreiben nun die Stellen x_k und x_{k+N} den gleichen Ort. Die eindimensionalen Wellenfunktionen $\psi(x)$ werden nun durch Vektoren $\psi(x_k) = \psi_k$ mit N komplexen Einträgen approximiert. Folglich geht der Hilbertraum über in \mathbb{C}^N mit dem Skalarprodukt

$$(\chi, \phi) = \sum_{k=1}^N \chi_k^* \phi_k, \quad \{\chi\}, \{\phi\} \in \mathbb{C}.$$

Somit ergibt sich der Erwartungswert für den Ortsoperator \hat{x} zur Wellenfunktion ψ

$$\langle \hat{x} \rangle = \langle \psi | \hat{x} | \psi \rangle = \sum_k x_k |\psi|^2 = \sum_{k,k'} \psi_k^* x_{kk'} \psi_{k'}.$$

Die Darstellung des Ortsoperators im Ortsraum ist also diagonal.

Um einen Ausdruck für den Impulsoperator zu erhalten ist eine Vorbetrachtung nötig. Die diskrete Fouriertransformierte von ψ_k ist durch Gl. 11 gegeben.

$$\tilde{\psi}(p_l) = \tilde{\psi}_l = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=1}^N \psi_k e^{-ip_l x_k}, \quad p_l = \frac{2\pi}{L}(l - \alpha), \quad l = 1, 2, \dots, N \quad (11)$$

Hier wurde der freie Parameter α eingeführt, um später eine ganzzahlige Wahl derart treffen zu können, dass das Gitter des Impulsraums symmetrisch um den Ursprung liegt. Allgemein kann α zum Einarbeiten der Randbedingungen genutzt werden. In diesem Fall wurde verlangt, dass die Ortsaufenthaltswahrscheinlichkeit symmetrisch zum Ursprung liegt. Um vom Impulsraum wieder in den Ortsraum zu transformieren nutzt man

$$\psi_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{l=1}^N \tilde{\psi}_l e^{ip_l x_k}, \quad x_k = a + kh, \quad k = 1, 2, \dots, N. \quad (12)$$

Da die Wirkung des Impulsoperators im Impulsraum als Produkt der Impulskoordinate mit der Wahrscheinlichkeit übergeht, kann man für den Erwartungswert einer Funktion $f(\hat{p})$ des Impulsoperators zur Wellenfunktion ψ schreiben

$$\begin{aligned} \langle f(\hat{p}) \rangle &= \sum_l f(p_l) |\tilde{\psi}_l|^2 \stackrel{11}{=} \frac{1}{N} \sum_l \sum_{kk'} f(p_l) \psi_k^* \psi_{k'} e^{ip_l(x_k - x_{k'})} \\ &:= \sum_{kk'} \psi_k F(p)_{kk'} \psi_{k'} \quad \text{mit} \quad F(p)_{kk'} = \frac{1}{N} \sum_l f(p_l) e^{ip_l(x_k - x_{k'})}. \end{aligned}$$

Man erhält die Darstellung des Impulsoperators im Ortsraum. Wie zu erwarten ist dieser nicht diagonal. Mit der Erzeugendenfunktion

$$Z(x) = \frac{1}{N} \sum_{l=1}^N e^{ip_l x} = e^{i\pi\beta x} \frac{\sin(\frac{\pi}{h}x)}{N \sin(\frac{\pi}{L}x)}, \quad \beta = N + 1 - 2\alpha, \quad Z(0) = 1$$

erhält man die Matrixelemente einer Funktion des Impulsoperators durch Ableiten:

$$f(p)_{kk'} = f\left(-i \frac{d}{dx}\right) Z(x) \Big|_{x=h(k-k')}.$$

Es ist zu erwähnen, dass man die Diagonalelemente $k = k'$ durch eine Taylorentwicklung um $k - k' = 0$ erhält, da die Erzeugendenfunktion für diese Stellen singuläre Terme aufweist.

Insbesondere erhält man

$$\begin{aligned} p_{kk'} &= \frac{\pi\beta}{L} && \text{für} \quad k = k' \\ &= \frac{\pi}{iL} (-1)^{k-k'} \frac{e^{i\frac{\pi}{N}\beta(k-k')}}{\sin(\frac{\pi}{N})(k-k')} && \text{für} \quad k \neq k' \end{aligned} \quad (13)$$

$$\begin{aligned} p_{kk'}^2 &= \frac{\pi^2}{L^2} \frac{N^2 + 3\beta^2 - 1}{3} && \text{für} \quad k = k' \\ &= \frac{2\pi^2}{L^2} (-1)^{k-k'} \frac{\cos(\frac{\pi}{N}(k-k')) - i\beta \sin(\frac{\pi}{N}(k-k'))}{\sin^2(\frac{\pi}{N}(k-k'))} e^{i\frac{\pi}{N}(k-k')} && \text{für} \quad k \neq k'. \end{aligned}$$

Der eingeführte Parameter α ermöglicht nun die Vereinfachung der Gleichungen, wodurch diese aber spezieller werden. Für eine ungerade Stützstellenanzahl N bleibt die Symmetrie der Fouriertransformation durch eine Wahl $\alpha = \frac{N+1}{2}$ bestehen.

Resultierend:

$$\begin{aligned}
p_{kk'} &= 0 && \text{für } k = k' \\
&= \frac{\pi}{iL} \frac{(-1)^{k-k'}}{\sin(\frac{\pi}{N}(k-k'))} && \text{für } k \neq k'
\end{aligned} \tag{14}$$

$$\begin{aligned}
p_{kk'}^2 &= \frac{\pi^2}{L^2} \frac{N^2 - 1}{3} && \text{für } k = k' \\
&= \frac{2\pi^2}{L^2} (-1)^{k-k'} \frac{\cos(\frac{\pi}{N}(k-k'))}{\sin^2(\frac{\pi}{N}(k-k'))} && \text{für } k \neq k'.
\end{aligned}$$

Für eine gerade Stützstellenanzahl fällt die Wahl auf $\alpha = \frac{N}{2}$, wodurch die positive Halbachse des Impulsraums mit einer Stützstelle mehr bestückt ist. Dieser Symmetriebruch äußert sich nach der Fouriertransformation durch komplexe Anteile des Impulsoperators. Die Einführung eines geradzahigen Gitters ohne Nullposition des Ortsraums wäre eine Lösung dafür, da α ganzzahlig gewählt werden muss, damit der Exponent der Eigenfunktionen des Impulsoperators periodisch bleibt. Für ausschließlich periodische Randbedingungen und geradzahige Stützstellenanzahl findet man nun

$$\begin{aligned}
p_{kk'} &= \frac{\pi}{L} && \text{für } k = k' \\
&= \frac{\pi}{iL} (-1)^{k-k'} \frac{e^{i\frac{\pi}{N}(k-k')}}{\sin(\frac{\pi}{N}(k-k'))} && \text{für } k \neq k'
\end{aligned} \tag{15}$$

$$\begin{aligned}
p_{kk'}^2 &= \frac{\pi^2}{L^2} \frac{N^2 + 2}{3} && \text{für } k = k' \\
&= \frac{2\pi^2}{L^2} \frac{(-1)^{k-k'}}{\sin^2(\frac{\pi}{N}(k-k'))} && \text{für } k \neq k'.
\end{aligned}$$

Die Impulsmatrizen hängen also lediglich von der Indextdifferenz $k - k'$ ab, wodurch sie eine Toeplitzform aufweisen. Das Quadrat des Impulsoperators ist somit wegen seiner Hermitizität allein durch die erste Zeile charakterisiert, was man durch in `Matlab` implementierte Routinen ausnutzen kann.

3 Erweiterung der SLAC-Ableitung auf zwei Raumdimensionen

Um die Wirkung des SLAC-Algorithmus zu hinterblicken, nutzen wir eine andere Darstellung des in Gl. 14 gefundenen Ausdrucks². Betrachtet man die komplette Matrix von \hat{p} , so lässt sich leicht verifizieren, dass Gl. 16 äquivalent ist.

$$\partial_{SLAC} = \frac{\pi}{L} \sum_{k=1}^{N-1} d_k (\hat{A}^k - \hat{B}^k) \quad \text{mit } d_k = \frac{(-1)^{k+1}}{2 \sin(\frac{\pi}{N}k)} \tag{16}$$

\hat{A} und \hat{B} sind $N \times N$ -Matrizen, die den Schiebeoperatoren zugeordnet werden. Dabei bewirkt \hat{A} ein Hochschieben der Vektorelemente, sodass das k -te Element den $(k + 1)$ -ten Platz einnimmt. Entsprechend der

²Aus privater Kommunikation mit Prof. Wipf

periodischen Randbedingungen geht das erste Vektorelement in das letzte über. \hat{B} wirkt analog nach unten schiebend.

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & 0 & 1 & & \vdots \\ & & & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & 1 & \\ 1 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{B} = \begin{pmatrix} 0 & \cdots & & 0 & 1 \\ 1 & 0 & \cdots & & 0 \\ 0 & 1 & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & & 0 \\ 0 & \cdots & & 1 & 0 \end{pmatrix} = \hat{A}^T \quad (17)$$

\hat{A} und \hat{B} erfüllen

$$\hat{A}^N = \hat{B}^N = \mathbb{I}, \quad \hat{A}\hat{B}\hat{A} = \hat{A}, \quad \hat{B}\hat{A}\hat{B} = \hat{B}, \quad \hat{A}^k = \hat{B}^{N-k} \quad \hat{B}^k = \hat{A}^{N-k}$$

Die SLAC-Matrix ∂_{SLAC} misst somit die Änderung des Funktionswertes bezüglich aller Gitterpunkte und wichtet diese mit den Koeffizienten d_k . Zur Berechnung der Änderung eines Funktionswertes werden folglich alle Gitterpunkte einbezogen, worin der Unterschied dieser Methode zu lokalen Matrizen, wie z.B. der Differenzenmethode, liegt.

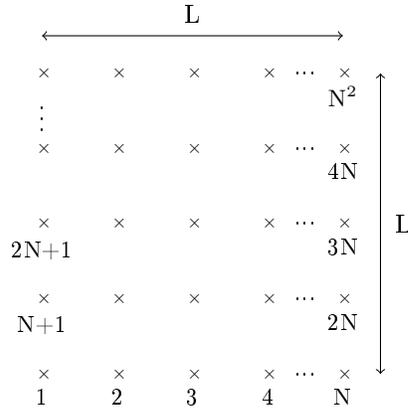


Abbildung 1: Wahl der Raumdiskretisierung

Für die Erweiterung auf zwei Raumdimensionen wurde eine Nummerierung der Gitterpunkte gemäß Abb. 1 vorgenommen, wobei ein quadratisches Gitter mit N Stützstellen pro Raumrichtung zweckmäßig erscheint. Die Dimension der Matrizen erhöht sich infolgedessen auf $N^2 \times N^2$. Die Wirkung der Ableitung in x-Richtung muss sich nun auf N einzelne x-Abschnitte erstrecken. Mit diesem Wissen können wir neue Schiebeoperatoren \hat{A}' und \hat{B}' definieren:

$$\hat{A}' = \begin{pmatrix} \hat{A} & \hat{0}_N & \hat{0}_N & \cdots & \hat{0}_N \\ \hat{0}_N & \hat{A} & \hat{0}_N & \cdots & \hat{0}_N \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \hat{0}_N \\ \hat{0}_N & \cdots & \cdots & \hat{0}_N & \hat{A} \end{pmatrix}, \quad \hat{B}' = (\hat{A}')^T.$$

Für die y-Ableitung sollen nun die Operatoren \hat{C}' und \hat{D}' jedes Vektorelement um eine Stelle in y-Richtung verschieben. Betrachtet man den k -ten Punkt des zweidimensionalen Gitters (gemäß Nummerierung) sieht man leicht ein, dass der in 2-Richtung nächste Punkt die Nummer $k + N$ hat. Diese Wirkung bewerkstelligen die Operatoren \hat{C}' und \hat{D}' , wobei der erste hoch- und der zweite herunterschiebt.

$$\hat{C}' = \begin{pmatrix} \hat{0}_N & \mathbb{1}_N & \hat{0}_N & \cdots & \hat{0}_N \\ \hat{0}_N & \ddots & \mathbb{1}_N & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \hat{0}_N \\ \hat{0}_N & & \ddots & \ddots & \mathbb{1}_N \\ \mathbb{1}_N & \hat{0}_N & \cdots & \cdots & \hat{0}_N \end{pmatrix}, \quad \hat{D}' = (\hat{C}')^T$$

Mit diesen Darstellungen ergibt sich

$$\begin{aligned} \partial_{SLAC\hat{x}} &= \frac{\pi}{L} \sum_{k=1}^{N-1} d_k (\hat{A}'^k - \hat{B}'^k) & \text{mit } d_k &= \frac{(-1)^{k+1}}{2 \sin(\frac{\pi}{N}k)} \\ \partial_{SLAC\hat{y}} &= \frac{\pi}{L} \sum_{k=1}^{N-1} d_k (\hat{C}'^k - \hat{D}'^k) \end{aligned}$$

Die Gestalt der Operatoren \hat{A}' und \hat{B}' offenbart, dass die bereits gefundene Matrixdarstellung für $\hat{p}_{kk'}$ aus Gl. 13 lediglich N -mal auf die Hauptdiagonale der zweidimensionalen x-Ableitungsmatrix aufgeprägt ist, sodass eine Blockmatrix vorliegt. Die Ableitungsmatrix der 2-Richtung besteht aus den gleichen Elementen, jedoch findet man diese in der gleichen Reihenfolge an anderen Stellen:

$$\hat{p}_2^x = \text{diag}(\hat{p}_{kk'}), \quad \hat{p}_2^y = \text{Toeplitz}(\hat{p}_{(k-1)N+1,1}), \quad k, k' = 1, \dots, N \quad (18)$$

mit $\hat{p}_{kk'}$ aus Gl. 15. Aus Gründen der Übersichtlichkeit wurde hier die formale Bezeichnung Toeplitz(x) gewählt. Dabei ist die durch die erste Zeile x und erste Spalte x^\dagger definierte Toeplitzmatrix zu verstehen.

4 Erweiterung der SLAC-Ableitung auf drei Dimensionen

Analoge Überlegungen zu Kapitel 3 führen zu der dreidimensionalen Darstellung der Schiebematrizen. Die Nummerierung der N^3 Punkte erfolgt nun x-y-Ebenen-weise. Das heißt, man schichtet N x-y-Ebenen übereinander, wobei pro Ebene einer der N z-Werte die dritte Dimension bestimmt. Die neuen Matrizen sind in den Gl. 19, 20 und 21 abgebildet.

$$\hat{A}'' = \begin{pmatrix} \hat{A}' & \hat{0}_{N^2} & \hat{0}_{N^2} & \cdots & \hat{0}_{N^2} \\ \hat{0}_{N^2} & \hat{A}' & \hat{0}_{N^2} & \cdots & \hat{0}_{N^2} \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \hat{0}_{N^2} \\ \hat{0}_{N^2} & \cdots & \cdots & \hat{0}_{N^2} & \hat{A}' \end{pmatrix}, \quad \hat{B}'' = (\hat{A}'')^T \quad (19)$$

$$\hat{C}'' = \begin{pmatrix} \hat{C}' & \hat{0}_{N^2} & \hat{0}_{N^2} & \cdots & \hat{0}_{N^2} \\ \hat{0}_{N^2} & \hat{C}' & \hat{0}_{N^2} & \cdots & \hat{0}_{N^2} \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \hat{0}_{N^2} \\ \hat{0}_{N^2} & \cdots & \cdots & \hat{0}_{N^2} & \hat{C}' \end{pmatrix}, \quad \hat{D}'' = (\hat{C}'')^T \quad (20)$$

$$\hat{E}'' = \begin{pmatrix} \hat{0}_{N^2} & \mathbb{1}_{N^2} & \hat{0}_{N^2} & \cdots & \hat{0}_{N^2} \\ \hat{0}_{N^2} & \ddots & \mathbb{1}_{N^2} & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \hat{0}_{N^2} \\ \hat{0}_{N^2} & & \ddots & \ddots & \mathbb{1}_{N^2} \\ \mathbb{1}_{N^2} & \hat{0}_{N^2} & \cdots & \cdots & \hat{0}_{N^2} \end{pmatrix}, \quad \hat{F}'' = (\hat{E}'')^T \quad (21)$$

Die Impulsmatrizen der jeweiligen Koordinate sind dementsprechend

$$\hat{p}_3^x = \text{diag}(p_2^x), \quad \hat{p}_3^y = \text{diag}(p_2^y), \quad \hat{p}_3^z = \text{Toeplitz}(\hat{p}_{(k-1)N^2+1,1}), \quad k, k' = 1, \dots, N \quad (22)$$

mit $p_{kk'}$ aus Gl. 15, sowie p_2^x und p_2^y aus Gl. 18.

5 Die radiale SLAC-Ableitung

Mit der in Abb. 2 gezeigten Raumdiskretisierung $r_k = hk = \frac{R}{N}k$ ($k = 1, \dots, N$) ergibt sich die Fouriertransformation aus Gl. 23. Diese entspricht einer dreidimensionalen Hankeltransformation mit Funktionen³ $\psi, \tilde{\psi} \in L^2$.

$$\Psi_k = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{l=1}^N \tilde{\Psi}_l \sin(r_k p_l) \quad \tilde{\Psi}_l = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{k=1}^N \Psi_k \sin(r_k p_l) \quad (23)$$

Die Einarbeitung der Randbedingung $\Psi_k|_{k=N} \stackrel{\forall l}{=} 0$ ergeben die diskreten Werte $p_l = \frac{\pi}{R}l$ ($l = 1, \dots, N$) der Impulsachse, welche den Eigenwerten der Impulsmatrix entsprechen.

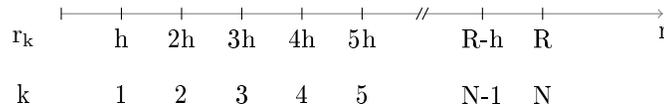


Abbildung 2: Wahl der Raumdiskretisierung

Analog zu Kapitel 5 suchen wir nun eine Darstellung des Impulsoperators im Ortsraum.

³Darauf muss geachtet werden, wenn ein Hamiltonoperator mit dieser Methode diagonalisiert werden soll. Vgl. radiale Wellenfunktion des Wasserstoffatoms.

Das gelingt mit dem Ansatz

$$\begin{aligned}
\langle f(\hat{p}) \rangle &= \sum_{l=1}^N f(p_l) |\tilde{\Psi}_l|^2 \\
&= \frac{2}{N} \sum_{k,k'=1}^N \sum_{l=1}^N f(p_l) \Psi_k^* \Psi_{k'} \sin(p_l r_k) \sin(p_l r_{k'}) \\
&\stackrel{23}{=} \frac{1}{2N} \sum_{k,k'=1}^N \sum_{l=1}^N f(p_l) \Psi_k^* \Psi_{k'} \left(e^{ip_l x^-} + e^{-ip_l x^-} - e^{ip_l x^+} - e^{-ip_l x^+} \right) \quad , x^\pm = r_k \pm r_{k'}.
\end{aligned}$$

Für gerade bzw. ungerade Funktionen des Impulsoperators ergibt sich die allgemeine Erzeugendenfunktion

$$Z(x) = \frac{1}{2N} \sum_{l=0}^N f(p_l) (e^{ip_l x} \pm e^{-ip_l x}). \quad (24)$$

Wie man sieht, kann man bei Vernachlässigung von $f(p_l)$ Potenzen von p_l durch Ableiten erzeugen. Für ungerade bzw. gerade Potenzen von \hat{p} ergibt sich

$$Z_1(x) = \frac{1}{2N} \sum_{l=1}^N (e^{ip_l x} - e^{-ip_l x}) = \frac{i}{N} \frac{\sin(\frac{\pi}{2R}(N+1)x)}{\sin(\frac{\pi}{2R}x)} \sin\left(\frac{\pi}{2R}Nx\right)$$

$$Z_2(x) = \frac{1}{2N} \sum_{l=1}^N (e^{ip_l x} + e^{-ip_l x}) = \frac{1}{N} \frac{\sin(\frac{\pi}{2R}Nx)}{\sin(\frac{\pi}{2R}x)} \cos\left(\frac{\pi}{2R}x(N+1)\right)$$

Das Resultat liegt in Gestalt der Differenz einer Hankel- von einer Töplitzmatrix vor. Da somit bei verschiedenen Elementen Singularitäten auftreten, wurde eine gesonderte Fallunterscheidung unternommen. Im folgenden bezeichnet $\Delta_\pm = k \pm k'$.

$$\hat{p}_{kk'}^2 = \frac{\pi^2 (2N^2 + 3N + 1)}{R^2 \cdot 6} \quad \text{für } \Delta_- = 0 \quad \text{und} \quad \Delta_+ = 2N$$

$$= (-1)^{\Delta_\pm} \frac{\pi^2}{2R^2} \left[N + \frac{1}{\sin^2(\frac{\pi}{2N}\Delta_\pm)} \right] \quad \Delta_- \neq 0 \quad \text{und} \quad \Delta_+ \neq 2N$$

$$\hat{p}_{kk'} = \frac{\pi}{2R}(N+1) \quad \text{für } \Delta_- = 0 \quad \text{und} \quad \Delta_+ = 2N$$

$$= \frac{\pi}{2RN} \left[(-1)^{\Delta_\pm} N - \frac{\delta_{\Delta_\pm \text{ odd}}}{\sin^2(\frac{\pi}{2N}\Delta_\pm)} \right] \quad \Delta_- \neq 0 \quad \text{und} \quad \Delta_+ \neq 2N$$

Hierbei wurde symbolisch

$$\begin{aligned}\delta_{\Delta_{\pm}\text{odd}} &= 1 \quad \text{für ungerade } \Delta_{\pm} \\ &= 0 \quad \text{für gerade } \Delta_{\pm}\end{aligned}$$

bezeichnet. Schlussendlich wird der Impulsoperator aus der Differenz der mit Δ_- und Δ_+ indizierten Matrix gebildet.

$$\hat{p}^n = \hat{p}^n(\Delta_-) - \hat{p}^n(\Delta_+) \quad n = 1, 2$$

6 Der anharmonische isotrope Oszillator in zwei Dimensionen: Numerische Behandlung

6.1 Umsetzung

Mit den vertrauten dimensionslosen Koordinaten aus Kapitel 2.1 wurde die Bestimmungsdifferentialgleichung der Energieeigenwerte

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} + \frac{d^2}{dy^2} + x^2 + y^2 + \lambda'(x^2 + y^2)^2 \right) R(x, y) = \frac{2E}{\hbar\omega} R(x, y)$$

herangezogen. Der SLAC-Algorithmus setze die Geometrie des Gitters und berechne die Matrizen der Operatoren. Die `Matlab/Octave`-Routine `eig` diagonalisiert den Hamiltonoperator und gibt die Eigenwerte aus. Die Umsetzung von $x^2 + y^2 = r^2$ sei an dieser Stelle noch erwähnt. Gemäß der Geometrie und Nummerierung aus Abb. 1 und der Wahl des Raumbgitters mit $x_k = -L/2 + h(k - 1/2)$ erzeugt die Diskretisierung den Nullpunkt selbstständig im Zentrum⁴. Somit muss lediglich für jeden Punkt das Quadrat des Ordinaten- und Abszissenwertes addiert werden. Mit symmetrischem Gitter $x_k = y_k$ ist

$$(\vec{r}^2) = (x_1 + x_1, x_1 + x_2, \dots, x_N + x_1, x_1 + x_2, x_2 + x_2, \dots, \dots, x_N + x_{N-1}, x_N + x_N)$$

der Stützstellenvektor des Quadratradius'.

Für das Schießverfahren wird die `Octave`-Routine `lsode` implementiert. Diese löst Anfangswertprobleme für Systeme Differentialgleichungen erster Ordnung unter Angabe des Startwertes der zu bestimmenden Funktion und ihrer Ableitung am ersten Punkt. Damit der Solver das Anfangswertproblem des Schießverfahrens lösen kann, muss die Differentialgleichung 1 auf zwei Differentialgleichungen erster Ordnung reduziert werden. Seien nun $q_1 = R$ und $q_2 = R'$ (R' bezeichnet die Ableitung bezüglich x). Mit Hilfe dieser Substitutionen erhält man die getrennten DGLn 25.

$$\begin{aligned}q_1' &= q_2 \\ q_1' &= F(x)q_1 - \frac{1}{x}q_2, & F(x) &= \frac{l_z^2}{x^2} + x^2 + \lambda'x^4 - \frac{2E}{\hbar\omega}\end{aligned} \quad (25)$$

Die Lösung des Differentialgleichungssystems für $q_1 = R$ ist die gesuchte Lösung für das Schießverfahren. Um die Singularität am Ursprung zu umgehen, beginnt man einen halben Stützstellenabstand davon entfernt zu

⁴Für eine gerade Stützstellenanzahl gibt diese Wahl für x_k keinen Nullpunkt, sondern die ursprungsnähesten Punkte $x_{\pm} = \pm h/2$.

integrieren. Der Startwert für R' ergibt sich aus der Betrachtung des asymptotischen Verhaltens 2 mit dem Stützstellenabstand h zu

$$R'_0 = \frac{h}{2} |l_z|.$$

6.2 Ergebnisse

Tabelle 1 zeigt die numerisch gewonnenen Energieeigenwerte mit der SLAC-Ableitung bei der Wahl von 51 Stützstellen und einem dimensionslosen Raumintervall $L = 10$. Vergleichsweise wurde das Schießverfahren mit dem in Octave bereitgestellten Isode-Solver bemüht (Vgl. Tab.2). Dabei fanden die Parameter $L=5$, $N=5001$ Verwendung.

λ'	0	0,1	0,2	0,3	0,5	1
E_0	2,000000	2,168597	2,300376	2,411921	2,598440	2,952050
E_1	4,000000	4,477600	4,828681	5,117647	5,590024	6,462906
E_2	6,000000	6,908332	7,544645	8,058356	8,885828	10,390627
E_3		7,039708	7,753283	8,324116	9,236784	10,882436
E_4	8,000000	9,447359	10422142	11,197941	12,434514	14,658513
E_5		9,686542	10,790853	11,660119	13,034096	15,482771

Tabelle 1: Die ersten sechs Energieniveaus verschiedener Kopplungskonstanten, SLAC-Ableitung
Energien in Einheiten von $\frac{1}{2}\hbar\omega$

λ'	0	0,1	0,2	0,3	0,5	1
E_0	1,999980	2,168671	2,300389	2,411939	2,598460	2,951964
E_1	3,999997	4,477596	4,828675	5,117641	5,590017	6,462895
E_2	5,999941	6,908332	7,544645	8,058357	8,885828	10,390627
E_3		7,039724	7,753340	8,324029	9,236601	10,881995
E_4	7,999997	9,447359	10422142	11,197941	12,434514	14,658514
E_5		9,686534	10,790841	11,660106	13,034077	15,482742

Tabelle 2: Die ersten sechs Energieniveaus verschiedener Kopplungskonstanten, Schießverfahren
Energien in Einheiten von $\frac{1}{2}\hbar\omega$

Beide Verfahren liefern die gleichen Ergebnisse mit Abweichungen ab der vierten Nachkommastelle, obwohl das Schießverfahren eine grob einhundertmal feinere Schrittweite nutzt. Die Bestätigung der Richtigkeit der Werte geht aus dem Test für den harmonischen Oszillator mit $\lambda' = 0$ hervor. Vergleicht man die Eigenwerte mit den analytisch bestimmten aus Gl. 3, ergibt sich ein maximaler relativer Fehler des SLAC-Algorithmus zu

$$f_{rel} = 3 \cdot 10^{-6}$$

für die ersten acht Eigenwerte. Abb. 3 zeigt schematisch die Aufhebung der Entartung. Wie man sieht wächst die Energieverschiebung mit der Energie des ungestörten Problems. Betrachtet man einen Zustand des harmonischen Oszillators mit der Entartung m , so bricht diese unter Störeinfluss auf. Dabei erfahren die m Energieniveaus eine positive Verschiebung, wobei die Zustände mit der größten Radialquantenzahl⁵ am stärksten erhöht werden.

⁵in diesem Kontext gleichbedeutend mit der kleinsten Drehimpulsquantenzahl

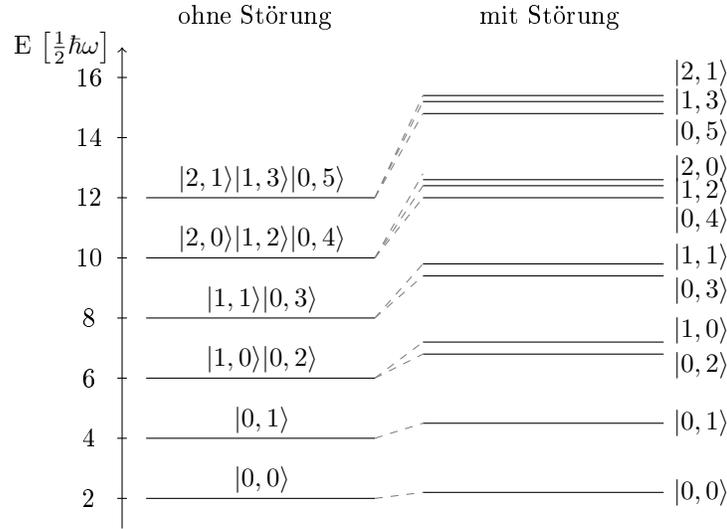


Abbildung 3: Energieniveauschema, Maßstabsgerecht nach $\lambda' = 0, 1$

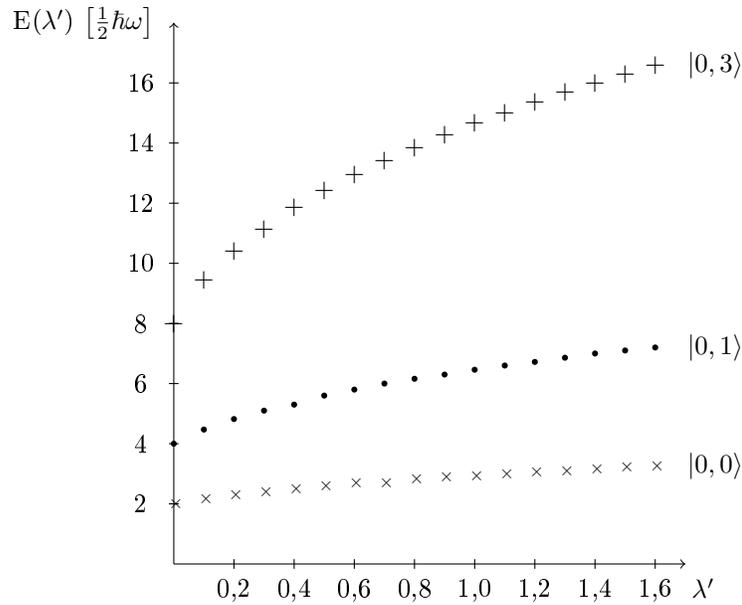


Abbildung 4: Energieerhöhung in Abhängigkeit der Kopplungskonstante

Trägt man die Energie des Zustands $|n, l\rangle$ in Abhängigkeit der Kopplungskonstante auf, so zeigt sich der Verlauf aus Abb. 4. Die Vermutung liegt nahe, dass die Energiekorrektur für den harmonischen Oszillator ein Polynom der Quantenzahlen n und l ist. Diese Vermutung könnte in einer weiterführenden Arbeit geprüft werden.

7 Der dreidimensionale isotrope anharmonische Oszillator: Numerische Behandlung

7.1 Umsetzung

Der dreidimensionale anharmonische Oszillator wurde mit dem radialen und karthesischen SLAC-Algorithmus untersucht. Als Vergleichsmessung wurde ein Schießverfahren mit Numerov-Integration in `Matlab/Octave` implementiert, welches ausgehend von [8] für die dreidimensionale Behandlung abgeändert wurde. Die wesentlichen Änderungen sind die Einführung der Drehimpulsquantenzahl l , sowie die Erweiterung des Potentials, das extern aus der Datei `pot3d.m` bezogen wird. Außerdem wurden die Startwerte der Wellenfunktion `wfu` angepasst.

7.2 Ergebnisse

In den Tabellen 3, 4 und 5 sind die drei verwendeten Methoden für verschiedene Kopplungskonstanten λ' im Vergleich dargestellt. Folgende Parameter wurden für die Messungen verwendet:

- SLAC karthesisch: $L=10$, $N=17$
- SLAC radial: $L=10$, $N=201$
- Schießverfahren: $L=5$, $N=5001$.

Die Ergebnisse der SLAC-Methoden wurden bei Entartungen gemittelt.

	Schießverfahren	SLAC karthesisch	SLAC radial
E_0	3,000000	3,000000	3,000000
E_1	5,000000	5,000000	4,999977
E_2	7,000000	7,000000	7,000000
E_3	9,000000	9,000009	8,999972
E_4	11,000000	11,000001	11,000000
E_5	13,000000	13,000023	12,999967

Tabelle 3: Die ersten sechs Energieniveaus im Vergleich, harmonischer Oszillator

	Schießverfahren	SLAC karthesisch	SLAC radial
E_0	3,306872	3,306872	3,306872
E_1	5,678682	5,678682	5,678647
E_2	8,165006	8,165006	8,165006
E_3	8,352678	8,352677	8,352678
E_4	10,754200	10,754201	10,754200
E_5	11,040886	11,040889	11,040776

Tabelle 4: Die ersten sechs Energieniveaus im Vergleich, $\lambda' = 0,1$

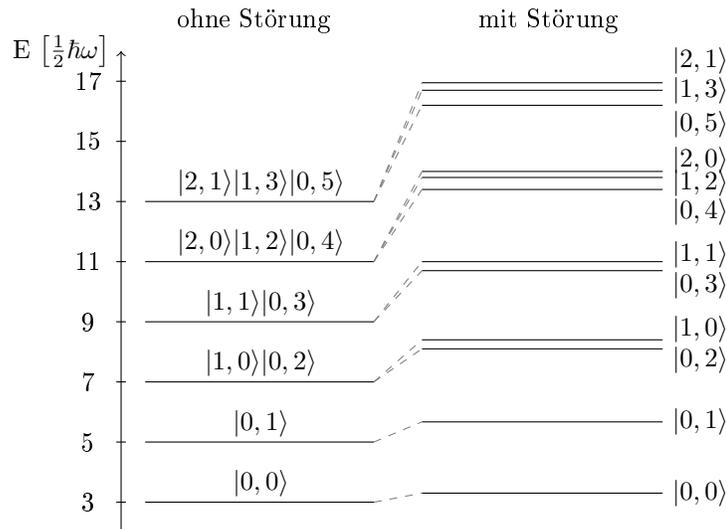
	Schießverfahren	SLAC karthesisch	SLAC radial
E_0	4.051932	4.051937	4.051932
E_1	7.203653	7.203690	7.203580
E_2	10.630971	10,630913	10.630971
E_3	11.115154	11.114834	11.115154
E_4	14.292631	14,291370	14.292631
E_5	14.994087	14.990063	14.993827

Tabelle 5: Die ersten sechs Energieniveaus im Vergleich, $\lambda' = 0, 5$

Den Algorithmus auf drei Raumdimensionen zu erweitern ermöglicht eine Vielzahl neuer Anwendungen. Durch das Rechnen mit $N^3 \times N^3$ -Matrizen wird allerdings eine große Speicherkapazität benötigt, weswegen die Anzahl Stützstellen pro Dimension nicht hoch angesetzt werden können. Trotzdem erhält man für gerademal 17 Stützstellen Ergebnisse, die sehr nah an denen der anderen Methoden liegen. Für einen herkömmlichen Privat-Computer müssen jedoch mehrere Minuten Rechenzeit eingeplant werden.

Bei dem radialen SLAC-Algorithmus scheint die Drehimpulsquantenzahl $l = 1$ im modifizierten Potential für Ungenauigkeit zu sorgen, wodurch die Methode weniger präzise wird, als das Schießverfahren (Vgl. ungeradzahlige Energien E_n in Tab. 3). Für eine Wahl $l \neq 1$ kommen wiederum viel genauere Ergebnisse zu Stande. Der Zentrifugalterm verlangt mit seinem Beitrag proportional zu $1/r^2$ eine sehr feine Abtastung. Folglich muss bei konstantem Raumintervall eine große Stützstellenanzahl bereitgestellt werden. Tatsächlich erreicht man bei 501 Stützstellen Ergebnisse für $l = 1$, die wesentlich näher an den analytischen Werten liegen. Durch die effiziente Matrizenberechnung von `Matlab/Octave` sind derlei Stützstellenanzahlen absolut im Rahmen des Möglichen. Die Rechenzeit liegt im Sekundenbereich.

Ein anderer Vorteil der radialen Berechnung gegenüber der karthesischen ist natürlich, dass Aussagen über die Aufhebung der Entartung bezüglich des Winkelanteils getroffen werden können. Abb. 6 zeigt die Energieaufspaltung der Zustände $|n, l\rangle$ im Vergleich zum harmonischen Oszillator. Durch die Störung wird die Entartung der möglichen Kombinationen n, l aufgehoben. Es kommt zu einer Aufspaltung der Eigenenergien, wobei diese nicht äquidistant ist und sich mit der Energie erhöht. Wie im zweidimensionalen Fall verringert sich die Energiedifferenz zweier Zustände die ungestört den gleichen Eigenwert einnehmen, für niedrigere Drehimpulsquantenzahlen l , bzw. höhere Radialquantenzahlen n .

Abbildung 5: Aufspaltung der Energieniveaus, Maßstabsgerecht nach $\lambda' = 0, 1$

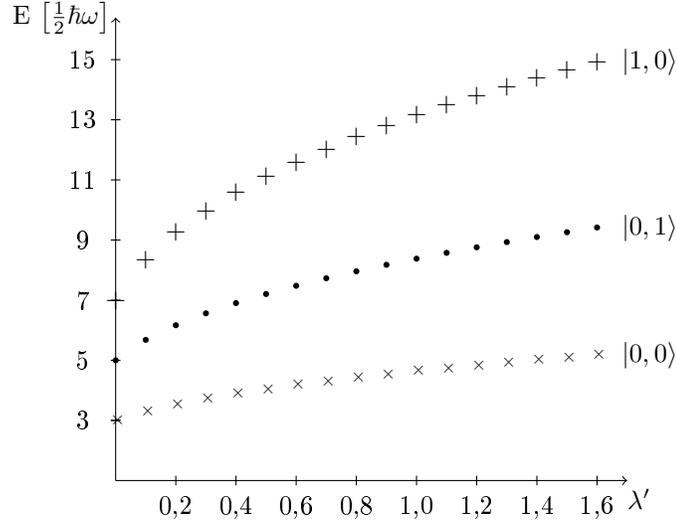


Abbildung 6: Energieerhöhung in Abhängigkeit der Kopplungskonstante

Das Verhalten der Energie über der Kopplungskonstante ähnelt wieder stark dem des zweidimensionalen Falles.

8 Das Wasserstoffatom: Numerische Behandlung

8.1 Umsetzung

Für die Behandlung des Wasserstoffatoms wurde Gl. 9 herangezogen und mit der radialen SLAC-Ableitung berechnet. Dabei stellt das Coulomb-Potential eine Herausforderung dar, da es wegen der Singularität am Ursprung Probleme bereitet. Zwar kann der Ursprung umgangen werden, indem man das Gitter eine Stützstellenweite entfernt ansetzt, der so entstandene Informationsverlust führt aber zu Ungenauigkeit. Speziell der Grundzustand des H-Atoms leidet unter diesem Manöver, so wird doch ein wichtiger Teil seiner Wellenfunktion missachtet. Auch die Ausdehnung der Ortswellenfunktion erschwert die Simulation des Problems, da diese im Raum stark ausgebreitet sind. Dadurch wird ein großes Raumintervall nötig, bei dem für gleich bleibende Schrittweite die Stützstellenanzahl steigen muss. Resultierend werden die Operatormatrizen riesig und die Speicherkapazität wird auf die Probe gestellt.

Für das Schießverfahren wurde erneut der Code aus [8] angepasst. Die Forderung nach Normierbarkeit am Ursprung gibt die erste Randbedingung⁶ vor: Die Wellenfunktion am Ursprung verschwindet. Da bei dem Schießverfahren keinerlei Interesse an der Normierung der Eigenfunktion liegt, sondern am Phasenverhalten und dem Abfallen auf Null vor Abschluss des Raumintervalls, kann der Wellenfunktion an einer beliebigen Stelle ein beliebiger Funktionswert zugeordnet werden. Als zuverlässig erwies sich die Wahl von

$$\psi_0 = 0 \quad \psi_1 = h \cdot 1000^{-2l}.$$

Die Wahl für ψ_1 ist rein willkürlich, normiert die berechnete Wellenfunktion aber auch für wachsende Drehimpulsquantenzahlen so, dass die Resultate darstellbar sind.

⁶Nachzulesen in [9], Seiten 150 ff

Weiterhin findet man in [9]⁷, dass für das Potential folgende Fallunterscheidung zu verwenden ist, da am Ursprung sonst $\frac{0}{\infty}$ vorliegen würde:

$$V(x) = \begin{cases} \frac{l(l+1)}{x^2 - \frac{2}{x}} = 0 & \text{für } l=0,1 \\ = -2 & \text{sonst.} \end{cases}$$

8.2 Ergebnisse

Für die in Tab. 6 bestimmten Werte wurde Für den SLAC-Algorithmus ein Raumintervall von $R=60$ und $N=1200$ Stützstellen verwandt. Das Schießverfahren lief mit $R=60$ und 60001 Stützstellen. Auf den ersten Blick scheinen die Resultate die SLAC-Methode ernüchternd. Da aber ein Kompromiss zwischen Genauigkeit und Anzahl der Eigenwerte gefunden werden muss, kommt es zu diesen Werten. Werden jedoch die Parameter dem zu ermittelnden Eigenwert angepasst, so sind Verbesserungen möglich. Beispielsweise erhöht sich die Genauigkeit des Grundniveaus um Größenordnungen, wenn eine Wahl von $R = 10$ und $N = 800$ getroffen wird. Aber auch dieser Aspekt hat wieder Schattenseiten. Da die Eigenfunktionen des H-Atoms sich zum Teil überlappen, kommt es vor, dass bei einer geeigneten Wahl von Parametern für einen Eigenwert $|n\rangle$ die Wellenfunktion eines anderen Zustandes $|n'\rangle$ innerhalb des Raumintervalls noch nicht auf Null abgefallen ist. In diesem Fall sorgen Randeffekte an der Grenze zum 'verbotenen Bereich' dafür, dass falsche Eigenwerte berechnet werden.

	E ₀	E ₁	E ₂	E ₃
Schießverfahren	-0,999999	-0,250000	-0,111111	-0,062501
SLAC radial	-0.998411	-0.249801	-0.111052	-0.062471

Tabelle 6: Die ersten Energieniveaus im Vergleich

Nun soll noch das Konvergenzverhalten des radialen SLAC-Verfahrens am Beispiel des Wasserstoffatoms getestet werden. Dazu wurde bei festem Raumintervall $R = 50$ die Stützstellenzahl im Bereich $N_1 = 50$ und $N_2 = 2500$ für den dritten angeregten und den Grundzustand variiert (Vgl. Abb 7). Für diese Werte wurde der Fehler

$$\Delta = \frac{E_{konv} - E_n(N)}{E_{konv}}$$

bestimmt und über der Stützstellenanzahl aufgetragen. Man erkennt, dass der Grundzustand stets einen mehr als doppelt so großen Fehler aufweist. Das bestätigt das stärkere Auftreten von Randeffekten im Grundniveau. Abgesehen von der Grundzustandsenergie kann im Fall des Wasserstoffatoms l -Entartung ausgenutzt werden und vorsätzlich Messungen bei einer Drehimpulsquantenzahl ungleich Null machen. Die Wellenfunktionen der s -Orbitale haben mindestens eines ihrer Maxima nahe dem Ursprung, welches mit der gewählten Raumdiskretisierung übergangen wird.

⁷Seiten 155 ff

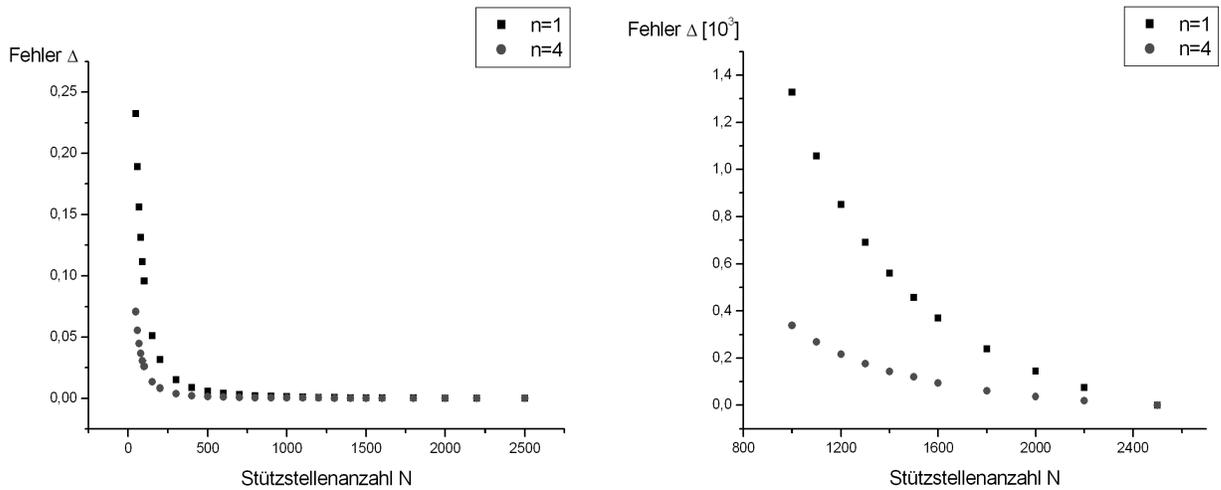


Abbildung 7: Konvergenzverhalten des radialen SLAC-Algorithmus

9 Zusammenfassung und Ausblick

Es wurde gezeigt, dass die Verallgemeinerung der SLAC-Ableitung auf zwei und drei Raumdimensionen durchaus praktikabel ist, da das Spektrum eines Hamiltonoperators schnell gefunden werden kann, ohne eine Energie raten zu müssen. Von großem Vorteil ist auch, dass mit einer Messung viele Energien gefunden werden können. Dazu müssen die Stützstellenanzahl und das Raumintervall günstig gewählt werden, um die Wellenfunktionen ausreichend abtasten zu können. Die numerischen Resultate glänzten durch Übereinstimmung der durch das Schießverfahren ermittelten Werte.

Wählt man den Stützstellenabstand klein genug, dass sich die erste Ortskoordinate dem Ursprung nähert, zeigt auch die radiale Formulierung des Matrixalgorithmus' numerische Übereinstimmung mit den analytischen und den Ergebnissen des Vergleichsverfahrens. Weiterblickend könnten mit dieser Herangehensweise eine Vielzahl weiterer Probleme, wie die Simulation von Mehrelektronensystemen, vorgenommen werden.

Literatur

- [1] V. Zelevinsky: *Quantum Physics: Volume 1: From Basics to Symmetries and Perturbations*. Deutsche Nationalbibliothek (2011).
- [2] A. Wipf: *Quantenmechanik I* (2006).
- [3] J. Basdevant, J.-L. & Dalibard: *Quantum Mechanics*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg (2002).
- [4] I. Sandev, T & Petreska: *Selection Rules For Two-Dimensional Harmonic Oscillator*. Bulletin of the Chemists and Technologists of Macedonia **Vol. 24, No. 2**, 143 ff (2005).
- [5] A. Wipf: *Quantenmechanik I* (2006). Kapitel 6.7.2: Matrizenmechanik auf dem Computer.
- [6] S. Wolff, U.& Schaefer: *Computational Physics II* (2008).
- [7] A. . W. U. Förster, J. & Saenz: *Matrix algorithm for solving Schrödinger equations with position-dependent mass or complex optical potentials*. Phys. Rev. E 86 (2012).
- [8] A. Wipf: *Quantenmechanik I, S.134 ff* (2006).
- [9] G. . L. W. Schmid, E.W. & Spitz: *Physikalische Simulation mit dem Personalcomputer*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg (1993).

A Abbildungsverzeichnis

1	Wahl der Raumdiskretisierung	6
2	Wahl der Raumdiskretisierung	8
3	Energieniveauschema, Maßstabsgerecht nach $\lambda' = 0,1$	12
4	Energieerhöhung in Abhängigkeit der Kopplungskonstante	12
5	Aufspaltung der Energieniveaus, Maßstabsgerecht nach $\lambda' = 0,1$	14
6	Energieerhöhung in Abhängigkeit der Kopplungskonstante	15
7	Konvergenzverhalten des radialen SLAC-Algorithmus	17

B Tabellenverzeichnis

1	Die ersten sechs Energieniveaus verschiedener Kopplungskonstanten, SLAC-Ableitung Energien in Einheiten von $\frac{1}{2}\hbar\omega$	11
2	Die ersten sechs Energieniveaus verschiedener Kopplungskonstanten, Schießverfahren Energien in Einheiten von $\frac{1}{2}\hbar\omega$	11
3	Die ersten sechs Energieniveaus im Vergleich, harmonischer Oszillator	13
4	Die ersten sechs Energieniveaus im Vergleich, $\lambda' = 0,1$	13
5	Die ersten sechs Energieniveaus im Vergleich, $\lambda' = 0,5$	14
6	Die ersten Energieniveaus im Vergleich	16

C Anhang

Zweidimensionaler anharmonischer isotroper Oszillator: SLAC-Ableitung

```
#Diskretisierung des Intervalls [-L/2,L/2] in N Interevalle
#und Berechnung der Hamiltonmatrix Hr für den zweidimensionalen
#anharmonischen Oszillator  $x^2 + y^2 + \text{lam}*(x^2 + y^2)^2$ 
#Aufruf slac(L,N,lam)
```

```
function [ ] = slac2( L,N,lam )
```

```
slac2dat=fopen("slac2.dat","w","native");
```

```
fid = fopen('slac2.txt','wt');
fprintf(fid,'L=%d,N=%d,lam=%f\n',L,N,lam);
```

```
format long
```

```
vor1=(pi/L);
vor2=(pi/N);
h=L/N;
ks=1:1:N-1;
kl=[ks,N];
t=vor2*ks;
vor3=2*vor1*vor1;
```

```
if (rem(N,2))==1
%---X-ABL---ungerade
t1=vor1*(-1).^ks./sin(vor2*ks);
dx=toeplitz([0,t1],[0,-t1]);
H11=-dx*dx;
for k=1:N
    H1((k-1)*N+1:k*N,(k-1)*N+1:k*N)=H11;
end
```

```
%---Y-ABL---ungerade
t2=zeros(N^2,1);
t2(ks.*N+1)=vor1*(-1).^ks./sin(pi*ks/N);
dy=toeplitz(t2,-t2);
H2=-dy*dy;
```

```
else
%---X-ABL---gerade
s=sin(t);
ss=s.*s;
t1=vor3*(-1).^ks./ss;
H11=toeplitz([0,t1],[0,t1])+vor3*(N*N+2)/6*eye(N);
HH1=cell(1,N);HH1(:)=H11;H1=blkdiag(HH1{:});
```

```

%---Y-ABL---gerade
ty1=zeros(N^2,1);
ty1(ks.*N+1,1)=2*(-1).^(ks)*vor1^2./(sin(ks*vor2)).^2;
ty1(1,1)=vor1^2*(N^2+2)/3;
H2=toeplitz(ty1,ty1);
end

%---QUARTISCHER-ISOTROPER-ANHARMONISCHER-OSZI---%
x=-L/2+h*(kl-1/2);
xx=x.*x;

eins(1:N,1)=1;
for k=1:N
    r1((k-1)*N+1:k*N,1)=xx;
    r2((k-1)*N+1:k*N,1)=xx(k)*eins;
end

rq=(r1+r2).*(1+lam*(r1+r2));
Hr=(H1+H2+diag(rq));
v=sort(eig(Hr))

for l=1:N^2
fprintf(fid,'%d,%8.15f\n',l,v(l));
endfor

fclose(fid);

end

```

Zweidimensionaler anharmonischer isotroper Oszillator: Schießverfahren

```
#Diskretisieren des Intervalls [h,L+h] in N Teilintervalle
#Lösung des DGL Systems mit lsode in externem File solver
#Wiederholung bis dE=0
#Aufruf: schiess2d
function [] = schiess2d
h=input('Schrittweite');
global En;
global l;
global lam;
l=input('Drehimpulsquantenzahl');
lam=input('Kopplungskonstante');
En=input('Energie');

#---Raumdiskretisierung
ILaenge=5.0;
N=ceil(ILaenge/h+1);
zero=zeros(N,1);
format long
x=linspace(h,ILaenge+h,N)';

RB=[h/2,abs(l)*h/2];

do
Q=lsode('solver',RB,x);

plot(x,Q(:,1),x,zero)
dE=input('Energieänderung');
En=En+dE;En
t=(dE==0);
until t==1
endfunction

function solver = solver(Q,x)
global En
global l
global lam
solver = [Q(2),-1./x*Q(2)+(x.^2+lam*x^4-En+l^2*x.^-2)*Q(1)];
end
```

Dreidimensionaler anharmonischer isotropier Oszillator: radiale SLAC-Ableitung

```
#Diskretisierung des Intervalls [h,R] in N-1 Interevalle
#und Berechnung der Hamiltonmatrix H für den dreidimensionalen
#anharmonischen Oszillator in Kugelkoordinaten
#  $r^2 + \text{lam} \cdot r^4 + l(l+1)/r^2$ 
#mit  $l(l+1)/r^2 - 2/r$ 
#Aufruf roszi3d(R,N,l,lam)
function roszi3d (R,N,l,lam)

slac2dat=fopen("slac2.dat","w","native");
fid = fopen('roszi3d.txt','wt');
fprintf(fid,'R=%d,N=%d,l=%f,lam=%f\n',R,N,l,lam);
format long
h=R/N;
a=pi/R;
dia1=a^2/6*(2*N^2+3*N+1);
dia2=a/2*(N+1);

#---2.Ableitung

k1=1:N-1;
k2=2:N+1;
k3=N+1:2*N-1;
t1=a^2/2*(-1).^k1.*(N+1./sin(pi/2/N*k1).^2);
t2=a^2/2*(-1).^k2.*(N+1./sin(pi/2/N*k2).^2);
t3=a^2/2*(-1).^k3.*(N+1./sin(pi/2/N*k3).^2);
H1=toeplitz([dia1,t1],[dia1,t1]);
H2=hankel([t2],[t3,dia1]);

#---1.Ableitung

d1=a/(2*N)*(N*(-1).^k1-sin(pi/2*k1).^2./sin(pi/(2*N)*k1).^2);
d2=a/(2*N)*(N*(-1).^k2-sin(pi/2*k2).^2./sin(pi/(2*N)*k2).^2);
d3=a/(2*N)*(N*(-1).^k3-sin(pi/2*k3).^2./sin(pi/(2*N)*k3).^2);
dr1=toeplitz([dia2,d1],[dia2,d1]);
dr2=hankel(d2,[d3,dia2]);

#---Hamiltonian
k=1:N;
r=k*h;
V=diag(r.^2)+l*(l+1)*diag(r.^-2)+lam*diag(r.^4);

H=(H1-H2)+V;
[vek,v]=eig(H);
v=diag(v)
```

```
for l=1:N
fprintf(fid,'%d,%8.15f\n',l,v(l));
endfor

fclose(fid);

endfunction
```

Dreidimensionaler anharmonischer isotropier Oszillator: karthetische SLAC-Ableitung

```
#Diskretisierung des Intervalls [-L/2,L/2] in N Interevalle
#und Berechnung der Hamiltonmatrix Hr für den dreidimensionalen
#anharmonischen Oszillator  $x^2 + y^2 + z^2 + \text{lam}*(x^2 + y^2 + z^2)^2$ 
#Aufruf slac(L,N,lam)
```

```
function slac3 (L,N,lam)
```

```
slac2dat=fopen("slac3.dat","w","native");
```

```
fid = fopen('slac3.txt','wt');
fprintf(fid,'L=%d,N=%d,lam=%f\n',L,N,lam);
```

```
format long
tic
```

```
vor1=pi/L;
vor2=(pi/N);
h=L/N;
ks=1:1:N-1;
k1=[ks,N];
t=vor2*ks;
vor3=2*vor1*vor1;
```

```
if (rem(N,2))==1
%---X-ABL---ungerade
t1=vor1*(-1).^ks./sin(t);
dx=toeplitz([0,t1],[0,-t1]);
H11=-dx*dx;
```

```
HH1=cell(1,N^2);HH1(:)=H11;H1=blkdiag(HH1{:});
```

```
%---Y-ABL---ungerade
t2=zeros(N^2,1);
t2(ks.*N+1,1)=vor1*(-1).^ks./sin(t);
dy=toeplitz(t2,-t2);
H22=-dy*dy;
```

```
HH2=cell(1,N);HH2(:)=H22;H2=blkdiag(HH2{:});
```

```
%---Z-ABL---ungerade
tz=zeros(N^3,1);
tz(ks*N^2+1,1)=(-1).^ks*vor1./sin(t);
dz=toeplitz(tz,-tz);
H3=-dz*dz;
```

```

else
%---X-ABL---gerade
s=sin(t);
ss=s.*s;
t1=vor3*(-1).^ks./ss;
H11=toeplitz([0,t1],[0,t1])+vor3*(N*N+2)/6*eye(N);

HH1=cell(1,N^2);HH1(:)=H11;H1=blkdiag(HH1{:});

%---Y-ABL---gerade
ty1=zeros(N^2,1);
ty1(ks.*N+1,1)=vor3*(-1).^(ks)./ss;
ty1(1,1)=vor3*(N^2+2)/6;
H22=toeplitz(ty1,ty1);

HH2=cell(1,N);HH2(:)=H22;H2=blkdiag(HH2{:});

%---Z-ABL---gerade
tz=zeros(N^3,1);
tz(ks*N^2+1,1)=vor3*(-1).^ks./ss;
tz(1,1)=vor3*(N^2+2)/6;
H3=toeplitz(tz,tz);

endif

%---ANHARMONISCHER-ISOTROPER-OSZILLATOR---
x=-L/2+h*(kl-1/2);
xx=x.*x;

eins(1:N,1)=1;
zwei(1:N^2,1)=1;

for k=1:N
    r11((k-1)*N+1:k*N,1)=xx;
    r22((k-1)*N+1:k*N,1)=xx(k)*eins;
    r3((k-1)*N^2+1:k*N^2,1)=xx(k)*zwei;
end

for k=1:N
    r2((k-1)*N^2+1:k*N^2,1)=r22;
    r1((k-1)*N^2+1:k*N^2,1)=r11;
endfor

rq=(r1+r2+r3).*(1+lam*(r1+r2+r3));
Hr=(H1+H2+H3+diag(rq));

```

```
vr=sort(eig(Hr));
v=vr

toc

for l=1:N^3
fprintf(fid,'%d,%8.15f\n',l,v(l));
endfor

fclose(fid);

endfunction
```

Dreidimensionaler anharmonischer isotropier Oszillator: Schießverfahren

```
#Schießverfahren für anharmonischen Oszillator
#Ruft die Funktion pot.3d auf. Es werden die Schrittweite ,die Kopplung lambda
#und Startenergie abgefragt .
# Es wird mit dem Numerov-Verfahren von 0 bis 5 integriert .

function schiess3d

format long

h=input(" Schrittweite ( typisch 0.001) " ) ;
l=input("Drehimpulsquantenzahl" ) ;
lam=input(" gebe lambda ein " ) ;
ILaenge =5.0;
n=ceil(ILaenge/h+1);
wfu=zeros(1,n);
wfu(1)=0;wfu(2)=h/1000^(2*l);
zero=zeros(1,n);
x=linspace(0,ILaenge,n);
h1=h*h/12;
h2=5*h*h/6;
fh=pot3d(1,lam,x);
ch=1-h1*fh; bh=shift ( ch ,+1 ) ; ah=2+h2* fh ;
E=input(" Energie eingeben ");
do
c=h1*E+shift(ch,-1);
a=ah-h2*E;
a=a./c;
b=bh+h1*E;
b=b./c ;
for k=2:n-1
wfu(k+1)=a(k).*wfu(k)-b(k).*wfu( k-1);
endfor
d1=5*ones (1 , length (wfu ) ) ; d2=min(wfu , d1 ) ; d3=max( d2,-d1 ) ;
plot (x',d3,x,zero) ;
dE=input ( 'Aenderung von E' );
E=E+dE;
E;
t=(dE==0);
E
until ( t==1)
endfunction
```

Wasserstoffatom: radiale SLAC-Ableitung

```
#Diskretisierung des Intervalls [h,R] in N Interevalle
#und Berechnung der Hamiltonmatrix H für das Wasserstoffatom
#mit  $l(l+1)/r^2 - 2/r$ 
#Aufruf rslac(r,N,l)
```

```
function rslac (R,N,l)
```

```
slac2dat=fopen("rslac.dat","w","native");
fid = fopen('rslac.txt','wt');
fprintf(fid,'R=%d,N=%d,l=%d\n',R,N,l);
```

```
h=R/N;
a=pi/R;
dia1=a^2/6*(2*N^2+3*N+1);
dia2=a/2*(N+1);
```

```
#---2.Ableitung
```

```
k1=1:N-1;
k2=2:N+1;
k3=N+1:2*N-1;
t1=a^2/2*(-1).^k1.*(N+1./sin(pi/2/N*k1).^2);
t2=a^2/2*(-1).^k2.*(N+1./sin(pi/2/N*k2).^2);
t3=a^2/2*(-1).^k3.*(N+1./sin(pi/2/N*k3).^2);
H1=toeplitz([dia1,t1],[dia1,t1]);
H2=hankel([t2],[t3,dia1]);
```

```
#---1.Ableitung
```

```
d1=a/(2*N)*(N*(-1).^k1-sin(pi/2*k1).^2./sin(pi/(2*N)*k1).^2);
d2=a/(2*N)*(N*(-1).^k2-sin(pi/2*k2).^2./sin(pi/(2*N)*k2).^2);
d3=a/(2*N)*(N*(-1).^k3-sin(pi/2*k3).^2./sin(pi/(2*N)*k3).^2);
dr1=toeplitz([dia2,d1],[dia2,d1]);
dr2=hankel(d2,[d3,dia2]);
```

```
#---Hamiltonian
```

```
k=1:N;
r=k*h;
V=l*(l+1)*diag(r.^-2)-2*diag(r.^-1);
```

```
H=(H1-H2)+V;
```

```
[vek,v1]=eig(H);
```

```
v=diag(v1)
```

```
for l=1:N  
fprintf(fid,'%d,%8.15f\n',l,v(l));  
endfor
```

```
fclose(fid);
```

```
endfunction
```

Wasserstoffatom: Schießverfahren

```
#Schießverfahren für das Wasserstoffatom
#ruft Funktion potH.m. Es werden die Schrittweite,
# die Drehimpulsquantenzahl l, und anfängliche Energie abgefragt.
# Es wird mit dem Numerov-Verfahren von 0 bis 60 integriert .

function schiessH

h=input(" Schrittweite ( typisch 0.001) " ) ;
l=input('Drehimpulsquantenzahl');
ILaenge =60.0;
n=ceil(ILaenge/h+1);
wfu=zeros(1,n);
wfu(1)=0;wfu(2)=h/1000^(2*l);
zero=zeros(n,1);
x=linspace(0,ILaenge,n);
h1=h*h/12;
h2=5*h*h/6;
fh=potH(l,x);
ch=1-h1* fh ; bh=shift ( ch ,+1 ) ; ah=2+h2* fh ;
E=input(" Energie eingeben ");
do
c=h1*E+shift(ch,-1);
a=ah-h2*E;
a=a./c;
b=bh+h1*E;
b=b./c ;
for k=2:n-1
wfu(k+1)=a(k).*wfu(k)-b(k).*wfu( k-1);
endfor
d1=5*ones (1 , length (wfu ) ) ; d2=min(wfu , d1 ) ; d3=max( d2,-d1 ) ;
plot (x',d3,x,zero);
dE=input ( 'Aenderung von E' );
E=E+dE;
E;
t=(dE==0);
E
until ( t==1)
endfunction
```