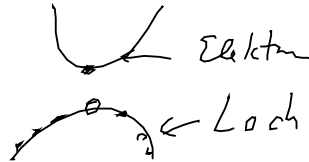


11.4 Lösung der Schrödingergl. über finite Differenzen
z. B. für Exzitonen Trien

Physikalisches Beispiel für PDEs

Halbleiter z.B. Quantenwell



Elektron-Loch paar. wird z.B. optisch erzeugt



Coulomb WW führt zu Exziton
 ein gebundener Zustand wie beim H-Atom

Effektiv läßt sich das Exziton
 im Halbleiter beschreiben

$$\Psi(\underline{r}, \underline{R}) = \Psi_{rel}(\underline{r}) \chi(\underline{R})$$

$$\underline{r} = \underline{r}_e - \underline{r}_h$$

$$\oplus \rightarrow \ominus$$

$$\underline{R} = \frac{m_e \underline{r}_e + m_h \underline{r}_h}{M}$$

dabei ist \underline{r} die Relativkoordinate
 und \underline{R} die Schwerpunktskoordinate.

Analog Schrödingergl gibt es die Wanniergleichung
 für den Relativkoordinaten Anteil der Wellenfunktion.
 (Wichtig, Elektron und Loch zählende effektive
 Massen, nicht wie bei Proton und Elektron).

$$\frac{1}{m_r} = \frac{1}{m_e} + \frac{1}{m_h}$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_r} \Delta_r + V_{eh}(\underline{r}) \right) \varphi(\underline{r}) = E \varphi(\underline{r})$$

Freie Bewegung des Teilchens \uparrow Coulomb WW, modifiziert durch Nanostruktur

Wenn das System abtint ist, gibt auch die Möglichkeit ein Trion zu finden, auch dort gibt es relativ mit Schwerpunkt koordinat



$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_1} \Delta_{r_1} - \frac{\hbar^2}{2m_2} \Delta_{r_2} - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{r_1} \cdot \nabla_{r_2} + V_{ab}(r_1) + V_{ab}(r_2) + V_{ee}(r_1 - r_2) \right) \psi(r_1, r_2) = E \psi(r_1, r_2)$$

↑
Relativ Bewegung zwischen Elektron und Loch

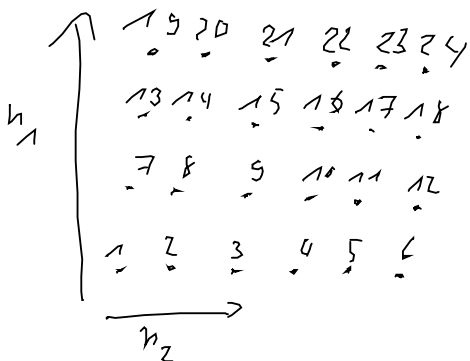
Nehmen wir an, wir möchten eine der beiden Gleichungen lösen.

Nur wie werden PDE gelöst mit kont. Funktionen.

- 1) Heute sehr häufig, verwendetes Verfahren Finite Elemente (sehr effektiv, da mit Problem angepassten inpassen Sitze)
- 2) Finite Differenzen, sehr einfach zu wahren werden.
 - ↙ nicht unbedingt effektiv für große System

Hier Beispielstrategie für Finite Differenz!

Auf einem Gitter z.B. in 2D immer für ein Teilchen:



Wir brauchen die Abbildung um aus ein index i in ein Array ein Gitterpunkt zu bekommen $r[i]$, an Stelle in 2D Koordinat $r[n_1, n_2]$ oder $i[n_1, n_2]$

Darstellung des Vektors $|\psi\rangle$

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \psi(r[0]) \\ \psi(r[1]) \\ \vdots \\ \psi(r[n]) \end{pmatrix} =: \underline{\psi}$$

↑
Position in Gitter

Nur endlich viele
mögliche!
(Das hat Konsequenz)

So sucht Matrix H_m für unser Problem

$$\underline{H}_m \cdot \underline{\psi} = E \underline{\psi}$$

Beispiel für alle Typen von Termen, wie Implementieren wir die?

Funktion im Hamiltonoperator

$$V_{eh}(r) \psi(r) \rightarrow \begin{pmatrix} V_{eh}(r[0]) & & & \\ & \diamond & & \\ & & \ddots & \\ & & & \diamond \\ & \diamond & & & \\ & & & & & V_{eh}(r[n]) \end{pmatrix} \cdot \underline{\psi}$$

Also das was wir einfügen, nur auf der Diagonal-
Differentialoperator

Was passiert z.B. mit $-\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta_r$ oder $-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_r^2 \cdot \nabla_k$

auf einem Gitter?

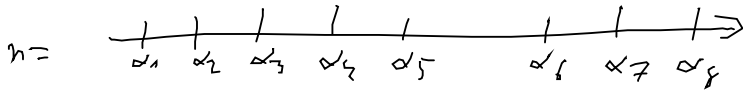
Finite Differenz

(gute Übersicht: Acta Numerica, 203 - 267 (1994)
Fornberg, Sloan)

Fornberg, Mathematics of computation 51 (1989),
655 - 706 (1988)

Was ist die grundlegende Idee?

Nehmen wir an wir haben Gitter:



Das sind die entscheidenden Stellen für unser Gitterpunkt, diese müssen nicht equidistant sein.

Wir wollen, die m -te Ableitung, der Funktion auf dem Gitter mit Hilfe der diskrete Werte auf dem Gitter:

$$\frac{d^m f}{dx^m} \Big|_{x=x_0} \approx \sum_{\nu=0}^{n-1} \delta_{h,\nu} f(x_\nu), \quad m = 0, 1, \dots, M$$

\uparrow
 Aus dem Gitter

Grad Approximation $h = h, 2h, \dots, N$

Wie wählen wir den Grad der Approximation?

Große Faustregel: Höherer Grad größerer Diskretion möglich

\Rightarrow wenig Speicher für die Vektoren der Lage N_2

Aber mehr Speicher für die Matrix $N_2 \times n$ (für jede Dimension)

Weiterhin sind Sprinkletts Problem der Fließkommazahlen bei höheren Grad ein mögliches Problem (Austauschen von positiven und negativen Beträgen)

Wie bestimmt man $\delta_{h,\nu}^m$ Koeffizient?

a) Tabelliert für verschiedene Situation, z.B. Symmetrischem "Stencil" x -Koordinate

Grad der Ableitung	Ordnung	-4	-3	-2	-1	0	1	2	3	4
0	∞					1				
1	2				$-\frac{1}{2}$	0	$\frac{1}{2}$			
	4			$\frac{1}{12}$	$-\frac{2}{3}$	0	$\frac{2}{3}$	$-\frac{1}{12}$		
					\vdots					$-\frac{1}{h}$

$$\begin{array}{c|cccccccccc}
 & 8 & \frac{1}{280} & -\frac{4}{105} & \frac{1}{5} & -\frac{4}{5} & 0 & \frac{4}{5} & -\frac{1}{5} & \frac{4}{105} & -\frac{1}{280} \\
 \hline
 2 & 2 & & & & 1 & -2 & 1 & & & \\
 & 4 & & & -\frac{1}{12} & \frac{4}{3} & -\frac{5}{2} & \frac{4}{3} & -\frac{1}{12} & & \\
 & & & & & \dots & & & & & \\
 \hline
 & & & & & & & & & & \frac{1}{h^2} \\
 & & & & & & & & & & \uparrow
 \end{array}$$

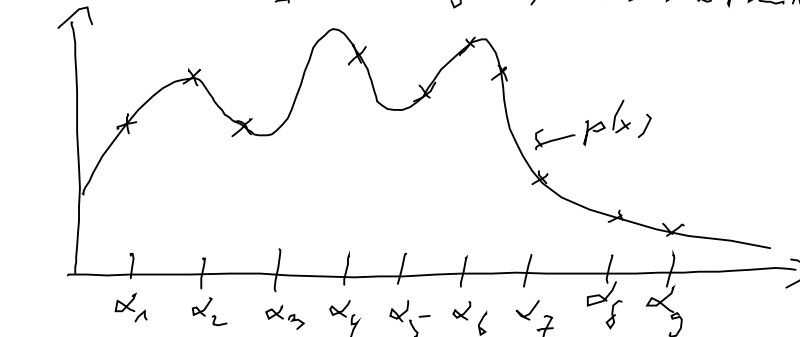
usw...

b) Es gibt Hermitesche Formate für symmetrische, Hermites (Formen) mit der höchsten Ordnung, beschränkt werden können.

Dispersions

Wie werden die Koeffizienten berechnet z.B.?

Idee: finde Polynom, dass die Punkte interpoliert.



Das ist es schon: Lagrange interpolations Polynom (Lagrange (1795), Euler (1783), Weierstrass (1879))

$$p(x) = \sum_{\nu=0}^n F_{n,\nu}(x) f(\alpha_\nu)$$

$$F_{n,\nu}(x) := \frac{w_n(x)}{w_n'(\alpha_\nu) (x - \alpha_\nu)} \quad \text{mit } w_n(x) = \prod_{k=0}^n (x - \alpha_k)$$

Das $F_{n,\nu}(x)$ ist das Polynom der Ordnung n , dass 1 bei $x = \alpha_\nu$ ist und 0 bei $x = \alpha_k$ ($k \neq \nu$).

Zur Erinnerung $\left. \frac{d^m f}{dx^m} \right|_{x=\alpha_\nu} = \sum_{\nu=0}^n \delta_{n,\nu}^m f(\alpha_\nu)$,

Das entsprechende Ergebnis für die Gewichte δ ist dann:

$$\delta_{n,\nu}^m = \left[\frac{d^m}{dx^m} F_{n,\nu}(x) \right]_{x=\alpha_\nu}$$

(durch Vgl der Verteilung $\psi(x, y)$)
 Entscheidendes Verfahren für iterative Berechnung $\delta_{n, \nu}$.

Zurück zum Problem

Laplace

Der Term war

$$-\frac{\hbar^2}{2m_r} \Delta_r = -\frac{\hbar^2}{2m_r} (\partial_{x_r}^2 + \partial_{y_r}^2) \quad h_2 \left\{ \begin{array}{c} \xrightarrow{h_1} \\ \dots \\ \dots \\ \dots \end{array} \right.$$

$$\partial_{x_r}^2 \psi(x[n_1], y[n_2])$$

$$\rightarrow \sum_{\nu=0}^n \delta_{n, \nu}^2 \psi(x[n_1 + \nu - \frac{n}{2}], y[n_2])$$

bzw.

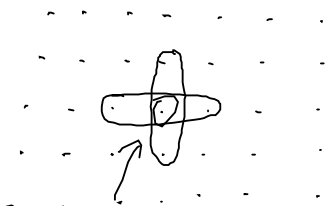
$$\partial_{y_r}^2 \psi(x[n_1], y[n_2])$$

$$\rightarrow \sum_{\nu=0}^n \delta_{n, \nu}^2 \psi(x[n_1], y[n_2 + \nu - \frac{n}{2}])$$

Beispiel: $\partial_x^2 \psi(x[n_1]) \approx \psi(x[n_1-1]) - 2\psi(x[n_1]) + \psi(x[n_1+1])$

Gibt es Konsequenzen aus diesem Zugriffsverhalten für die Vektorisierung?

Sichter



Die Form der benachbarten Punkte nennt man Stencil

Naive Bereich des Vektorindex

$$i[n_1, n_2] = n_1 + n_2 \cdot \uparrow$$

Anzahl der Punkte in einer Dimension

Rechenzeit



Problem Absatz in Vektoren oder Speicher ist N (kann sehr groß sein!)