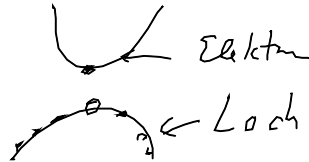


11.4 Lösung der Schrödingergl. über finite Differenzen  
z. B. für Exziton Trien

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

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

$$\oplus \rightarrow \ominus$$

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

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

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).

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

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

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



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

↑  
Relativ Bewegung zwischen Elektron und Loch

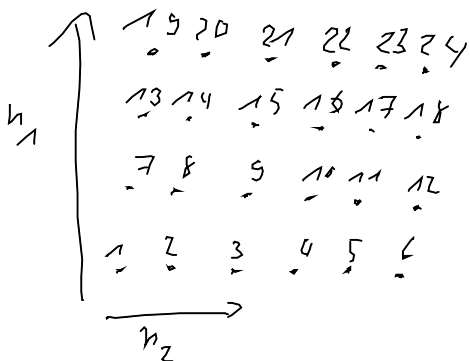
Nehmen wir an, wir möchten eine der beiden Gleichungen lösen.

Nur wie werden PDE gelöst mit kont. Funktionen.

- 1) Heute sehr häufig, verwendetes Verfahren Finite Elemente (sehr effektiv, da mit Problem angepassten inneren Sitter)
- 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 einem Index  $i$  in einem Array ein Gitterpunkt zu bekommen  $r[i]$ , an dem sich ein 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 Site

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

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

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

Was passiert z.B. mit  $-\frac{\hbar^2}{2m_r} \Delta_r$  oder  $-\frac{\hbar^2}{2m_k} \nabla_{r_n} \cdot \nabla_{r_k}$

auf einer Site?

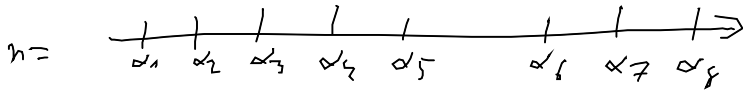
Finite Differenz

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

Fornberg, Mathematics of computation 51 (1984),  
655 - 706 (1988)

Was ist die grundlegendste Idee?

Nehmen wir an wir haben Site:



Das sind die entsprechenden 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:

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

$\uparrow$   
 Aus dem Gitter

Grad Approximation  $h = h_0, h_1, \dots, N$

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 Fließkommazellen bei höheren Grad ein mögliches Problem (Austauschen von positiven und negativen Beträgen)

Wie bestimmt man  $\delta_{m,\nu}^m$  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	$\infty$					1				
1	2				$-\frac{1}{2}$	0	$\frac{1}{2}$			
	4			$\frac{1}{12}$	$-\frac{2}{3}$	0	$\frac{2}{3}$	$-\frac{1}{12}$		
					$\vdots$					$-\frac{1}{h}$

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

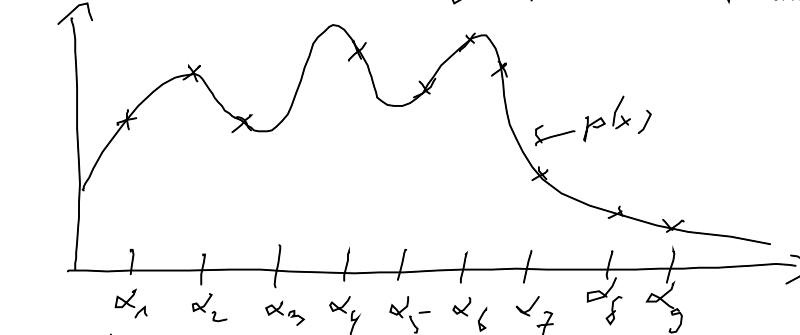
usw...

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), Legendre (1795))

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

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

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  $\delta$  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  $\delta_{n,v}$ .

Zurück zum Problem

Laplace

Der Term war

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

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

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

bzw.

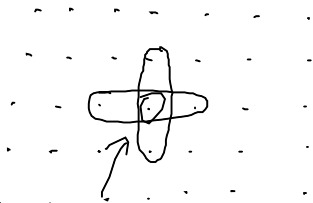
$$\partial_{y_r}^2 \psi(x[n_1], y[n_2])$$

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

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

$$i[n_1, n_2] = n_1 + n_2 \cdot \uparrow \begin{array}{l} \text{Anzahl der Punkte} \\ \text{in einer Dimension} \end{array}$$

Rechenzeit



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