

Informatik für Nanowissenschaftler

Projekt A2: Periodische Abfolge von Potentialtöpfen

Jan Kowalczyk und Rasmus Curt Raschke

Universität Hamburg
Fakultät für Mathematik, Informatik und Naturwissenschaften
Department Physik

15. Februar 2023



Gliederung

- 1 Theorie
- 2 Programmierung
- 3 Auswertung
- 4 (Methodik der Vorlesung)

Theorie

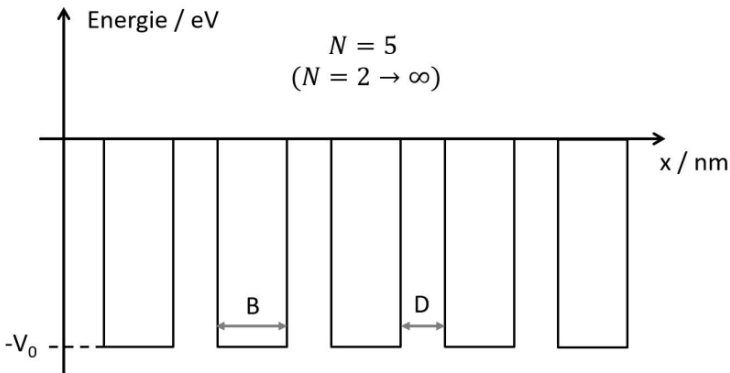
- 1 Theorie
 - Physikalisches Problem
 - Methodik

- 2 Programmierung

- 3 Auswertung

- 4 (Methodik der Vorlesung)

Physikalisches Problem



Endliche Abfolge von N Potentialtöpfen.

Methodik

- Grundlage: zeitunabhängige SGL

Methodik

- Grundlage: zeitunabhängige SGL
 - SGL mit zeitinvariantem Potential

Methodik

- Grundlage: zeitunabhängige SGL
 - SGL mit zeitinvariantem Potential
 - Separation der Variablen

Methodik

- Grundlage: zeitunabhängige SGL
 - SGL mit zeitinvariantem Potential
 - Separation der Variablen
 - Betrachtung stationärer Zustände

Methodik

- Grundlage: zeitunabhängige SGL
 - SGL mit zeitinvariantem Potential
 - Separation der Variablen
 - Betrachtung stationärer Zustände
- ODE-Solver

Methodik

- Grundlage: zeitunabhängige SGL
 - SGL mit zeitinvariantem Potential
 - Separation der Variablen
 - Betrachtung stationärer Zustände
- ODE-Solver
 - *Numerov*-Verfahren löst getrennte SGL

Methodik

- Grundlage: zeitunabhängige SGL
 - SGL mit zeitinvariantem Potential
 - Separation der Variablen
 - Betrachtung stationärer Zustände
- ODE-Solver
 - *Numerov*-Verfahren löst getrennte SGL
 - Vorzeichenwechsel findet Nullstellen

Methodik

- Grundlage: zeitunabhängige SGL
 - SGL mit zeitinvariantem Potential
 - Separation der Variablen
 - Betrachtung stationärer Zustände
- ODE-Solver
 - *Numerov*-Verfahren löst getrennte SGL
 - Vorzeichenwechsel findet Nullstellen
 - *Newton-Raphson* präzisiert

Methodik

- Grundlage: zeitunabhängige SGL
 - SGL mit zeitinvariantem Potential
 - Separation der Variablen
 - Betrachtung stationärer Zustände
- ODE-Solver
 - *Numerov*-Verfahren löst getrennte SGL
 - Vorzeichenwechsel findet Nullstellen
 - *Newton-Raphson* präzisiert
- → Konvergenzverfahren

Methodik

- Grundlage: zeitunabhängige SGL
 - SGL mit zeitinvariantem Potential
 - Separation der Variablen
 - Betrachtung stationärer Zustände
- ODE-Solver
 - *Numerov*-Verfahren löst getrennte SGL
 - Vorzeichenwechsel findet Nullstellen
 - *Newton-Raphson* präzisiert
- → Konvergenzverfahren
- I/O durch GUI

Programmierung

1 Theorie

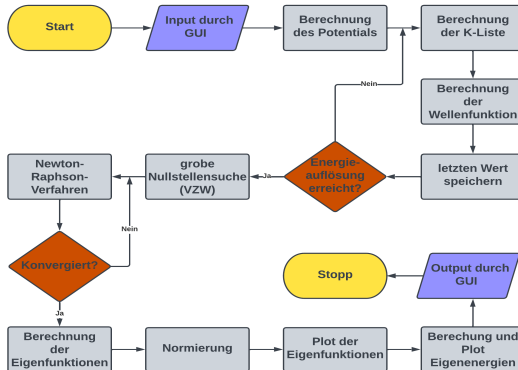
2 **Programmierung**

- Programmarchitektur
- Numerisches Eigenwertproblem
- Darstellung
- GUI

3 Auswertung

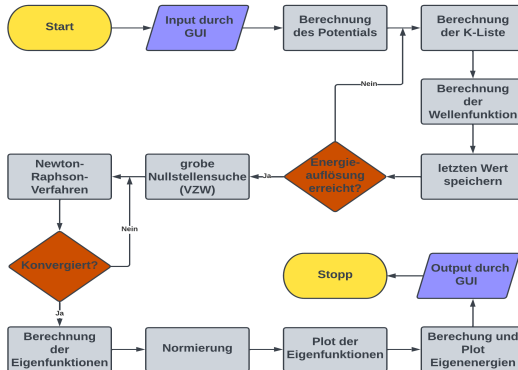
4 (Methodik der Vorlesung)

Programmarchitektur



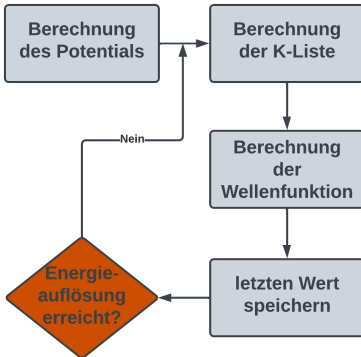
- numerischer Teil mit *NumPy*-Docstrings versehen

Programmarchitektur



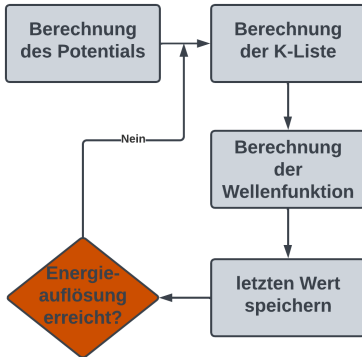
- numerischer Teil mit *NumPy*-Docstrings versehen
- Versionskontrolle mit Git/GitHub

Numerisches Eigenwertproblem



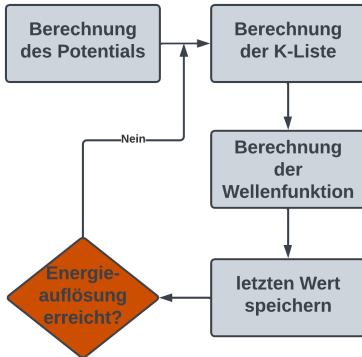
- Potential automatisch symmetrisiert

Numerisches Eigenwertproblem



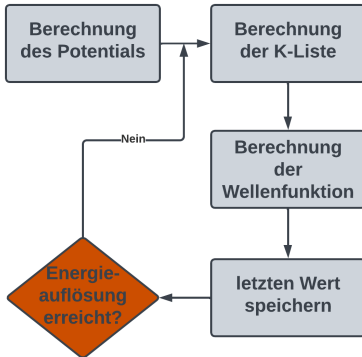
- Potential automatisch symmetrisiert
- *counter* speichert Auflösung

Numerisches Eigenwertproblem



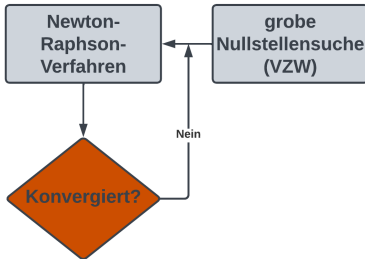
- Potential automatisch symmetrisiert
- *counter* speichert Auflösung
- Wfn. für E-Spektrum errechnen

Numerisches Eigenwertproblem



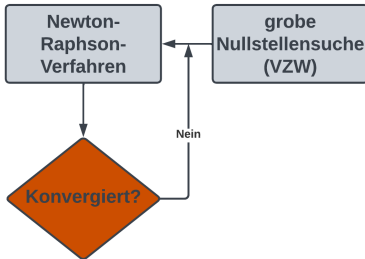
- Potential automatisch symmetrisiert
- *counter* speichert Auflösung
- Wfn. für E-Spektrum errechnen
- rechten Randwert speichern

Numerisches Eigenwertproblem



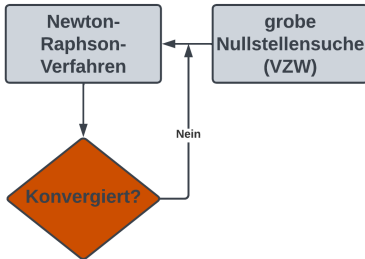
- grobe Nullstellensuche: nur Vorzeichenwechsel, Startpunkt NR-Methode

Numerisches Eigenwertproblem



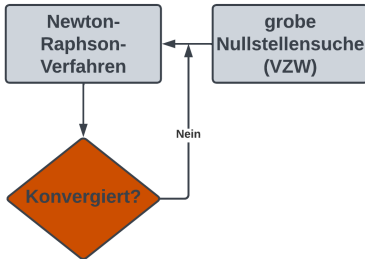
- grobe Nullstellensuche: nur Vorzeichenwechsel, Startpunkt NR-Methode
- NR-Methode präzisiert Nullstellen

Numerisches Eigenwertproblem



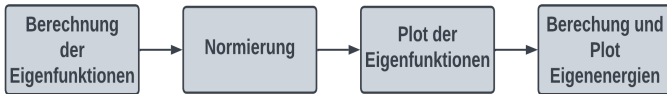
- grobe Nullstellensuche: nur Vorzeichenwechsel, Startpunkt NR-Methode
- NR-Methode präzisiert Nullstellen
- Konvergenzbedingung: Differenz der Iterationen

Numerisches Eigenwertproblem



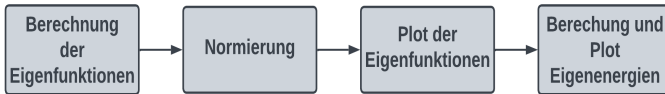
- grobe Nullstellensuche: nur Vorzeichenwechsel, Startpunkt NR-Methode
- NR-Methode präzisiert Nullstellen
- Konvergenzbedingung: Differenz der Iterationen
- Genauigkeiten der Methoden getrennt

Darstellung



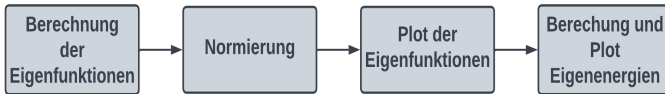
- Eigenfunktionen aus konvergierten Eigenwerten

Darstellung



- Eigenfunktionen aus konvergierten Eigenwerten
- Bandstruktur errechnen

Darstellung



- Eigenfunktionen aus konvergierten Eigenwerten
- Bandstruktur errechnen
- numerisch sehr aufwendig

GUI

- ① Grundaufbau
- ② Schwierigkeiten
- ③ Lösungen
- ④ Code

GUI: Grundaufbau

```
import tkinter as tk

window = tk.Tk()

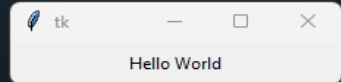
frame_Hello = tk.Frame(master=window, bd=5)

label_Hello = tk.Label(master=frame_Hello, text="Hello World", width=30)

label_Hello.pack(side=tk.LEFT)

frame_Hello.pack()

window.mainloop()
```



● Window

GUI: Grundaufbau

```
import tkinter as tk

window = tk.Tk()

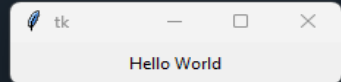
frame_Hello = tk.Frame(master=window, bd=5)

label_Hello = tk.Label(master=frame_Hello, text="Hello World", width=30)

label_Hello.pack(side=tk.LEFT)

frame_Hello.pack()

window.mainloop()
```



- Window
- Labels

GUI: Grundaufbau

```
import tkinter as tk

window = tk.Tk()

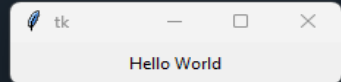
frame_Hello = tk.Frame(master=window, bd=5)

label_Hello = tk.Label(master=frame_Hello, text="Hello World", width=30)

label_Hello.pack(side=tk.LEFT)

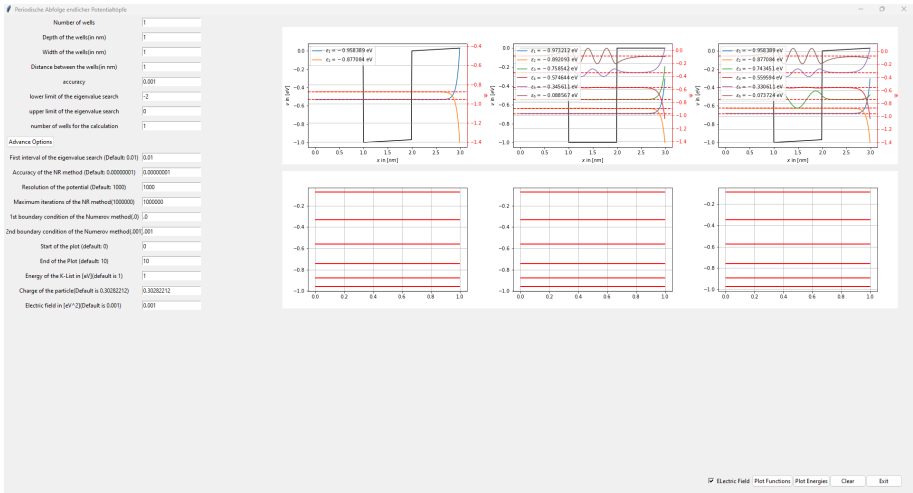
frame_Hello.pack()

window.mainloop()
```



- Window
- Labels
- Knöpfe

GUI: Grundaufbau



GUI: Schwierigkeiten

- Entwickleroptionen

GUI: Schwierigkeiten

- Entwickloptionen
- Entfernen der Entwickloptionen

GUI: Schwierigkeiten

- Entwickloptionen
- Entfernen der Entwickloptionen
- Platzierung der Graphen

GUI: Schwierigkeiten

- Entwickloptionen
- Entfernen der Entwickloptionen
- Platzierung der Graphen
- Lösungen:

GUI: Schwierigkeiten

- Entwickloptionen
- Entfernen der Entwickloptionen
- Platzierung der Graphen
- Lösungen:
 - durch Knopfdruck und Variable veränderbar

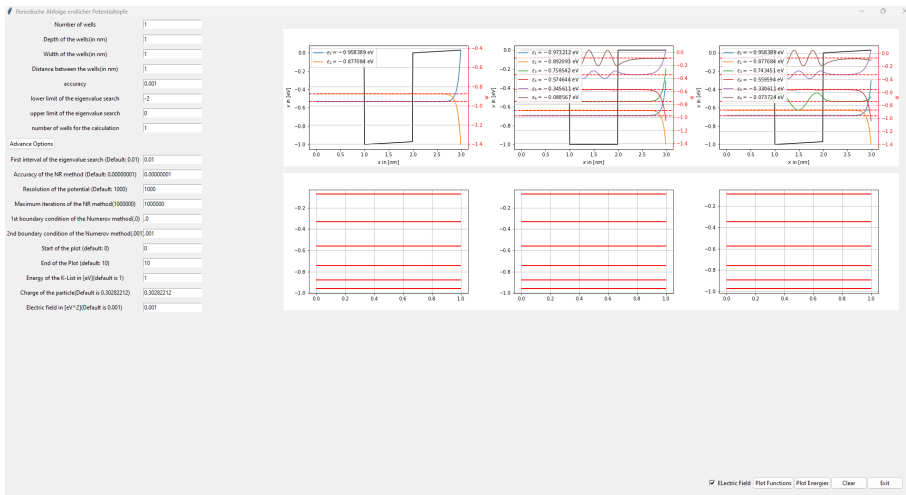
GUI: Schwierigkeiten

- Entwickloptionen
- Entfernen der Entwickloptionen
- Platzierung der Graphen
- Lösungen:
 - durch Knopfdruck und Variable veränderbar
 - Variablen manuell definieren

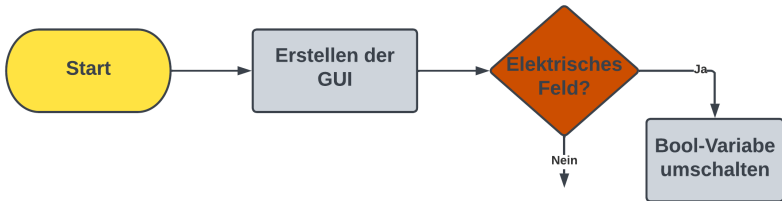
GUI: Schwierigkeiten

- Entwickloptionen
- Entfernen der Entwickloptionen
- Platzierung der Graphen
- Lösungen:
 - durch Knopfdruck und Variable veränderbar
 - Variablen manuell definieren
 - Graphen nicht anreihen, sondern platzieren

GUI

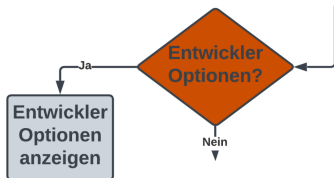


GUI: Architektur



Entscheidung über E-Feld

GUI: Architektur



Periodische Abfolge endlicher Potentialtöpfe

Number of wells

Depth of the wells(in nm)

Width of the wells(in nm)

Distance between the wells(in nm)

accuracy

lower limit of the eigenvalue search

upper limit of the eigenvalue search

number of wells for the calculation

Advance Options

Periodische Abfolge endlicher Potentialtöpfe

Number of wells

Depth of the wells(in nm)

Width of the wells(in nm)

Distance between the wells(in nm)

accuracy

lower limit of the eigenvalue search

upper limit of the eigenvalue search

number of wells for the calculation

Advance Options

First interval of the eigenvalue search (Default: 0.01)

Accuracy of the NR method (Default: 0.00000001)

Resolution of the potential (Default: 1000)

Maximum iterations of the NR method(1000000)

1st boundary condition of the Numerov method(0)

2nd boundary condition of the Numerov method(.001)

Start of the plot (default: 0)

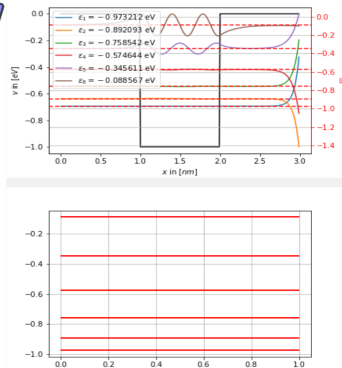
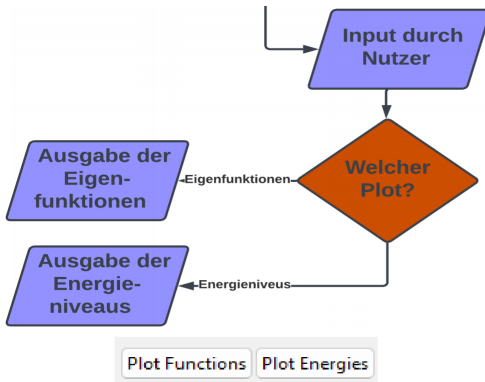
End of the Plot (default: 10)

Energy of the K-List in [eV](default is 1)

Charge of the particle(Default is 0.30282212)

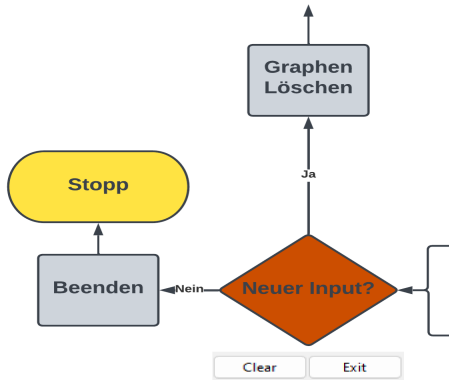
Electric field in [eV^2](Default is 0.001)

GUI: Architektur



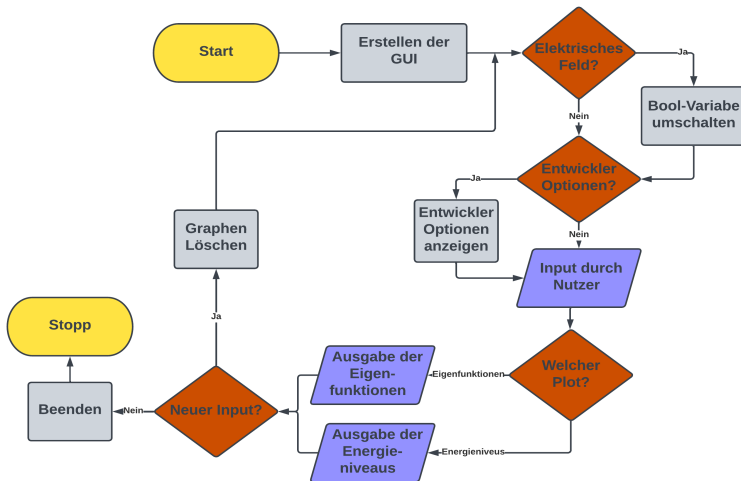
Energien oder Funktionen

GUI: Architektur



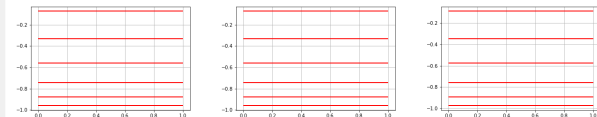
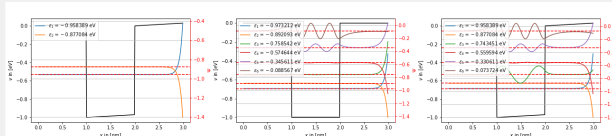
Beenden oder weitere Inputs

GUI: Architektur



Periodische Abfolge endlicher Potentialhöfe

Number of wells	1
Depth of the wells(in nm)	1
Width of the wells(in nm)	1
Distance between the wells (in nm)	1
accuracy	0.001
lower limit of the eigenvalue search	-2
upper limit of the eigenvalue search	0
number of wells for the calculation	1
Advance Options	
First interval of the eigenvalue search (Default: 0.01)	0.01
Accuracy of the NR method (Default: 0.000000001)	0.000000001
Resolution of the potential (Default: 1000)	1000
Maximum iterations of the NRl method(1000000)	1000000
1st boundary condition of the Numerov method(0)	0
2nd boundary condition of the Numerov method(0)	0
Start of the plot (default: 0)	0
End of the Plot (default: 10)	10
Energy of the K-List in (eV)(default is 1)	1
Charge of the particle(Default is 0.30282212)	0.30282212
Electric field in $\text{V}/\text{\AA}$ (Default is 0.001)	0.001

☒ Electric field ☐ Plot Functions ☐ Plot Energies

Auswertung

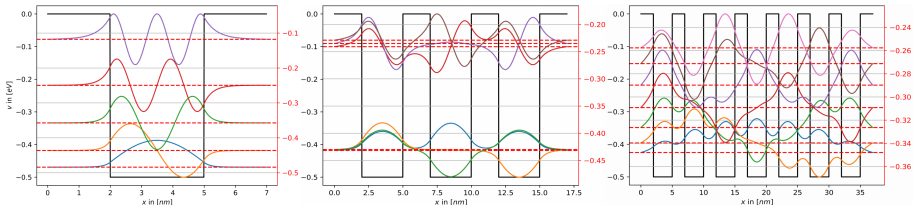
1 Theorie

2 Programmierung

3 Auswertung

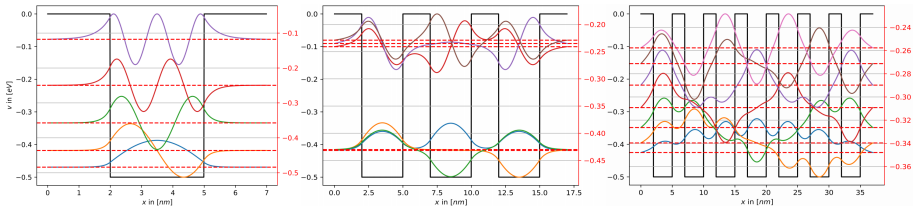
- Einteilung der Wellenfunktion
- Übergang zu zwei Kästen
- Einfluss der Kastenbreite
- Austauschwechselwirkung
- Kastenzahl und Bandstruktur: Silber-Nanokristalle
- Das *Bloch*-Theorem
- *Kronig-Penney*-Modell
- Elektrische Felder
- Literatur

Einteilung der Wellenfunktion



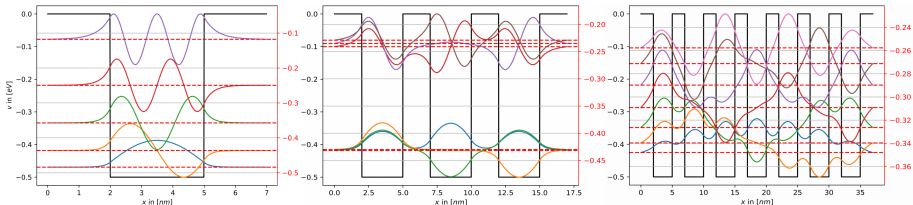
- Wfn. entsprechend Kastenanzahl n charakterisierbar:

Einteilung der Wellenfunktion



- Wfn. entsprechend Kastenanzahl n charakterisierbar:
 - $n = 1$: Eigenzustände des endlichen Potentialtopfes

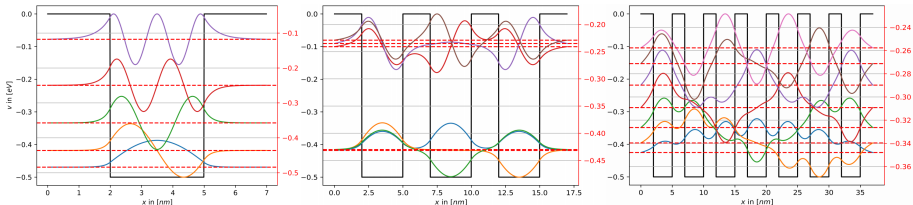
Einteilung der Wellenfunktion



- Wfn. entsprechend Kastenanzahl n charakterisierbar:

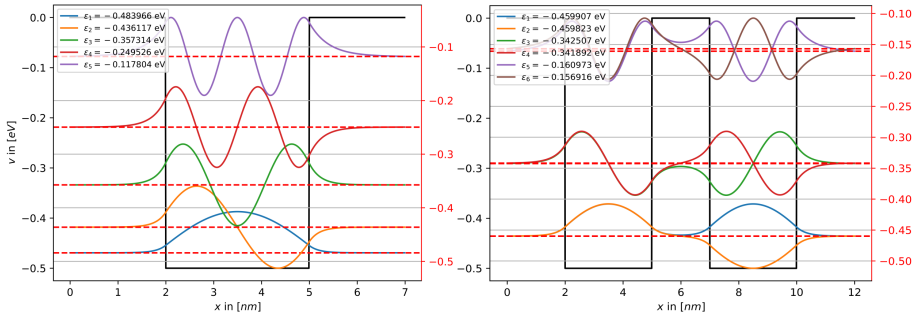
- $n = 1$: Eigenzustände des endlichen Potentialtopfes
- $1 < n < 7$: Aufspaltung in Bänder

Einteilung der Wellenfunktion



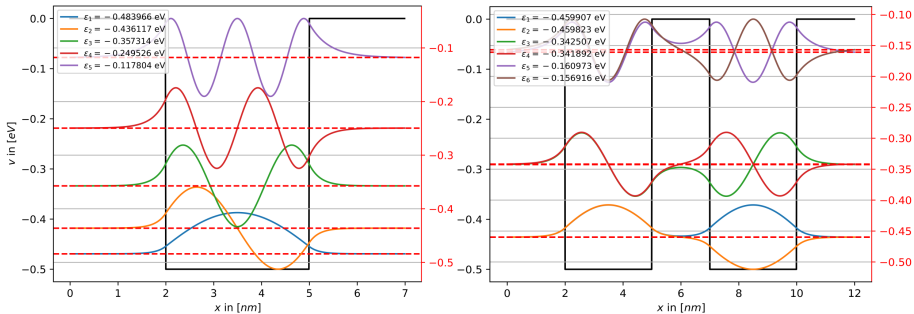
- Wfn. entsprechend Kastenanzahl n charakterisierbar:
 - $n = 1$: Eigenzustände des endlichen Potentialtopfes
 - $1 < n < 7$: Aufspaltung in Bänder
 - $6 < n$: Wfn. spürt Potentiale nicht mehr effektiv → Fall 1 mit Störung

Übergang zu zwei Kästen



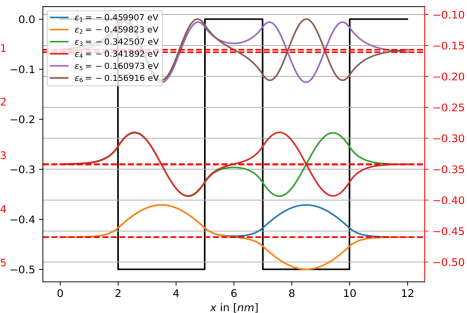
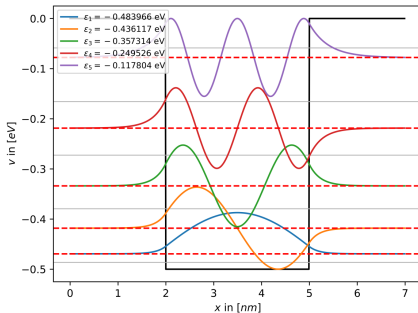
- Eigenenergien sinken ab

Übergang zu zwei Kästen



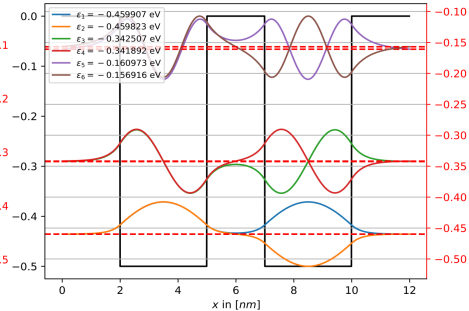
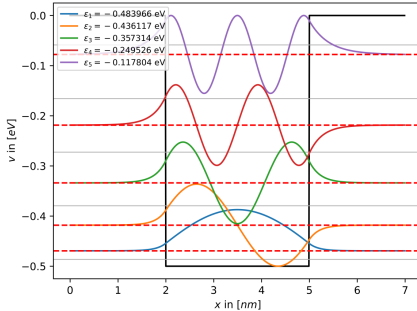
- Eigenenergien sinken ab
- Bandstrukturen erkennbar

Übergang zu zwei Kästen



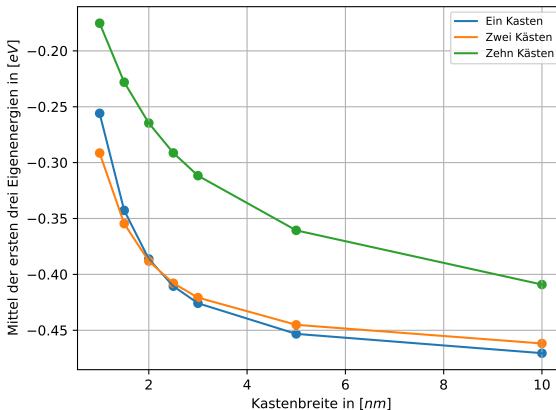
- Eigenenergien sinken ab
- Bandstrukturen erkennbar
- Band-Wfn. Linearkombination des einfachen Kastens

Übergang zu zwei Kästen



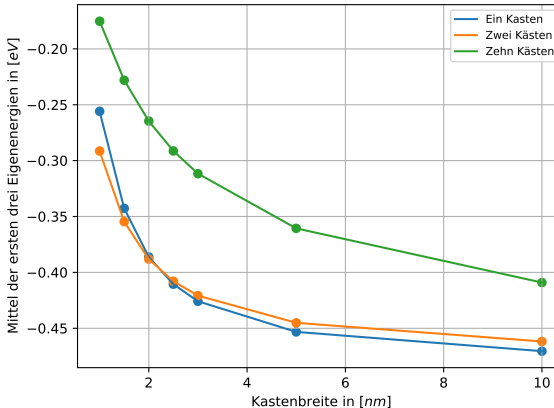
- Eigenenergien sinken ab
- Bandstrukturen erkennbar
- Band-Wfn. Linearkombination des einfachen Kastens
- Knotenanzahl invariant gegenüber n

Einfluss der Kastenbreite



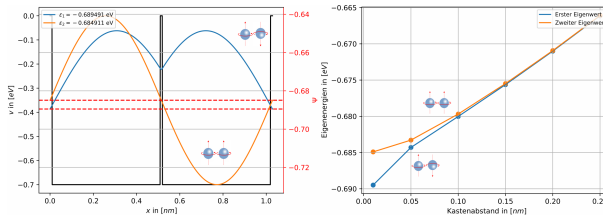
- Eigenenergien sinken mit Kastenbreite

Einfluss der Kastenbreite



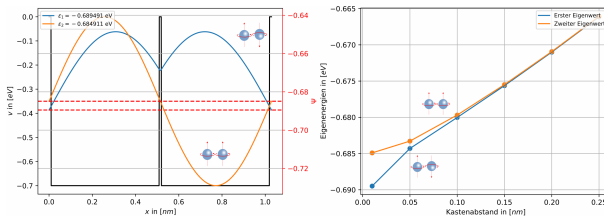
- Eigenenergien sinken mit Kastenbreite
- Abnahme annähernd exponentiell

Austauschwechselwirkung



$$\bullet \Delta\epsilon_{12} \propto \mathcal{J}_{12}^{ex}$$

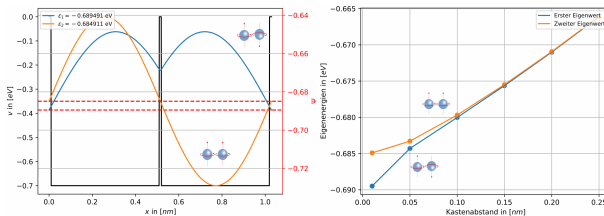
Austauschwechselwirkung



- $\Delta\epsilon_{12} \propto \mathcal{J}_{12}^{ex}$

- $\epsilon_1 \sim |\uparrow\downarrow\rangle$

Austauschwechselwirkung

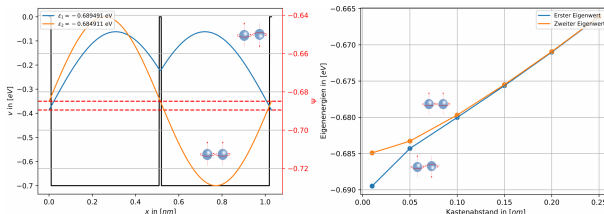


- $\Delta\epsilon_{12} \propto \mathcal{J}_{12}^{ex}$

- $\epsilon_1 \sim |\uparrow\downarrow\rangle$

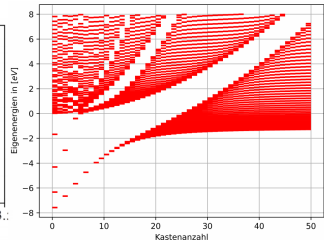
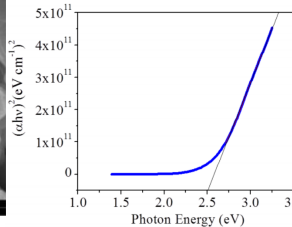
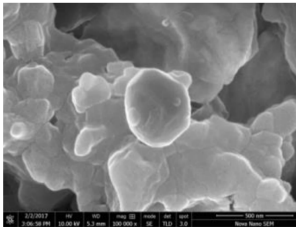
- $\epsilon_2 \sim |\uparrow\uparrow\rangle$

Austauschwechselwirkung



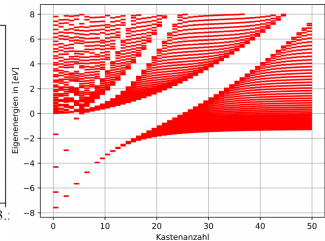
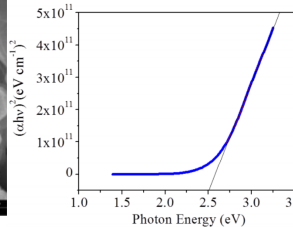
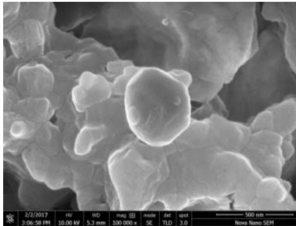
- $\Delta\epsilon_{12} \propto \mathcal{J}_{12}^{ex}$
- $\epsilon_1 \sim |\uparrow\downarrow\rangle$
- $\epsilon_2 \sim |\uparrow\uparrow\rangle$
- antiferromagnetische Wechselwirkung

Kastenzahl und Bandstruktur: Silber-Nanokristalle



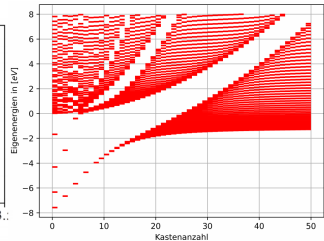
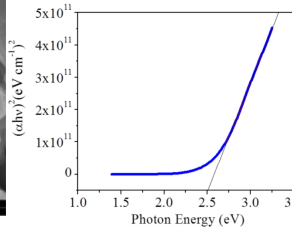
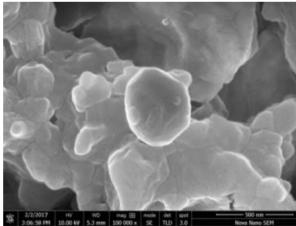
- Simulation der Bandlücke erfolgreich

Kastenzahl und Bandstruktur: Silber-Nanokristalle



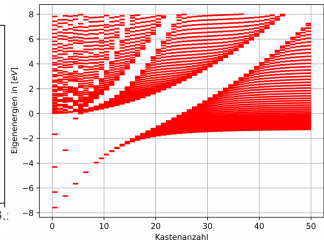
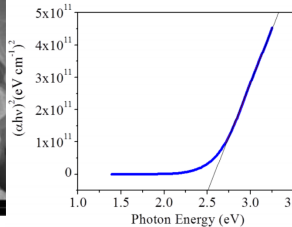
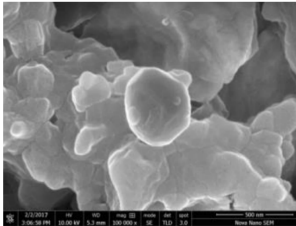
- Simulation der Bandlücke erfolgreich
- *confinement*-Effekt erkennbar

Kastenzahl und Bandstruktur: Silber-Nanokristalle



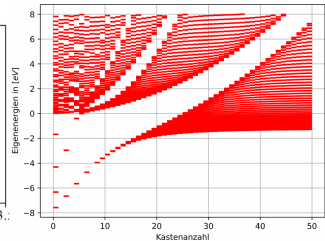
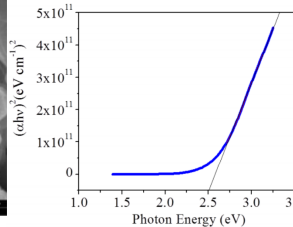
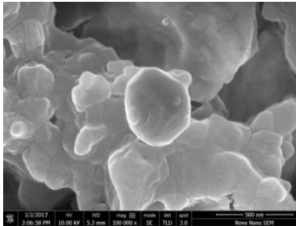
- Simulation der Bandlücke erfolgreich
- *confinement*-Effekt erkennbar
- $E_{\text{exp}} = 2.51 \text{ eV}$

Kastenzahl und Bandstruktur: Silber-Nanokristalle



- Simulation der Bandlücke erfolgreich
- *confinement*-Effekt erkennbar
- $E_{\text{exp}} = 2.51 \text{ eV}$
- $E_{\text{theo}} = 2.63 \text{ eV}$ für $n = 10$

Kastenzahl und Bandstruktur: Silber-Nanokristalle



- Simulation der Bandlücke erfolgreich
- *confinement*-Effekt erkennbar
- $E_{\text{exp}} = 2.51 \text{ eV}$
- $E_{\text{theo}} = 2.63 \text{ eV}$ für $n = 10$
- $\Delta E_{\%} = 5\%$

Das *Bloch*-Theorem

Definition: periodisches Gitter, gitterperiodische Funktion

Es sei:

$$V(x) = V(x + a) \quad (1)$$

Dann ist:

$$u(x) = u(x + a) \quad (2)$$

eine zugehörige gitterperiodische Funktion.

Das *Bloch*-Theorem

Definition: periodisches Gitter, gitterperiodische Funktion

Es sei:

$$V(x) = V(x + a) \quad (1)$$

Dann ist:

$$u(x) = u(x + a) \quad (2)$$

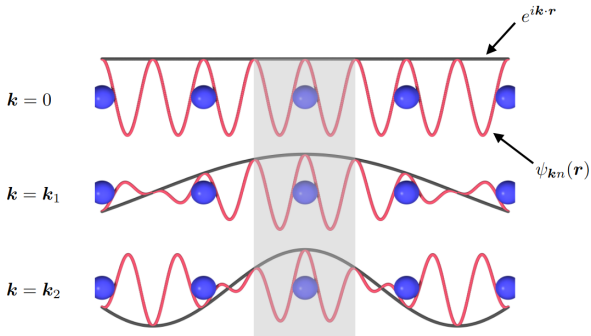
eine zugehörige gitterperiodische Funktion.

Satz: *Bloch*-Theorem

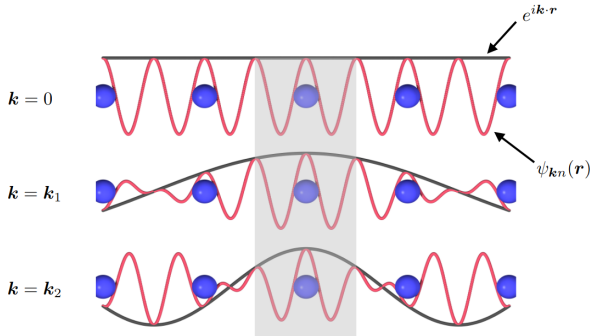
Die Basis der Eigenzustände von Kristallelektronen ist gegeben durch:

$$\psi_k(x) = \exp(ikx) u_k(x) \quad (3)$$

Kronig-Penney-Modell

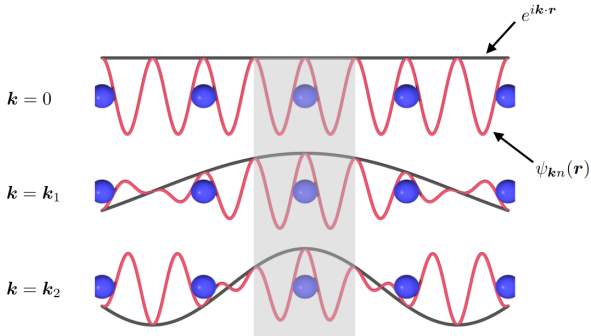


- numerische Wfn. entsprechen *Kronig-Penney*-Modell



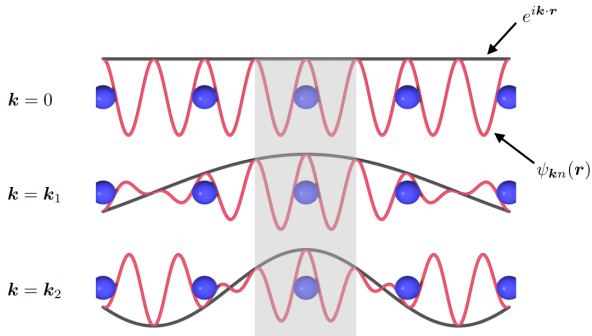
- numerische Wfn. entsprechen *Kronig-Penney*-Modell
- vernachlässigt *Coulomb*-Potentiale

Kronig-Penney-Modell



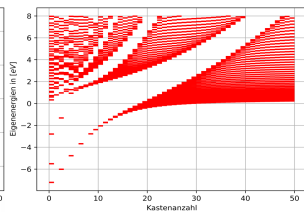
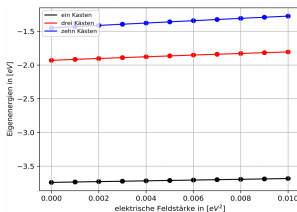
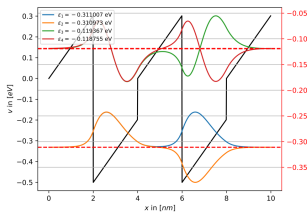
- numerische Wfn. entsprechen *Kronig-Penney*-Modell
- vernachlässigt *Coulomb*-Potentiale
- vernachlässigt *Fermi-Dirac*-Statistik

Kronig-Penney-Modell



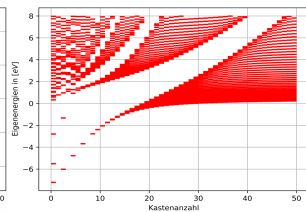
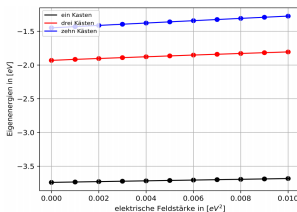
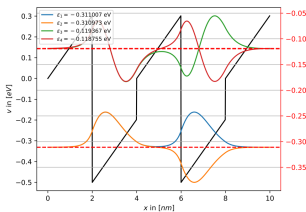
- numerische Wfn. entsprechen *Kronig-Penney*-Modell
- vernachlässigt *Coulomb*-Potentiale
- vernachlässigt *Fermi-Dirac*-Statistik
- gut geeignet z.B. für *Quantum Dots*

Elektrische Felder



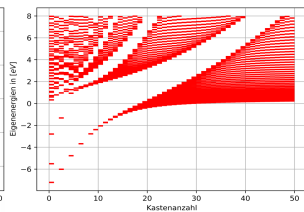
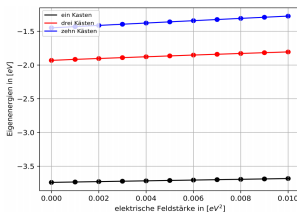
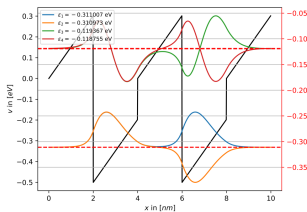
- Wfn. weiterhin Bloch-artig, aber asymmetrisch in Topf

Elektrische Felder



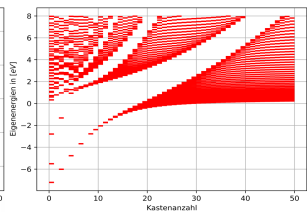
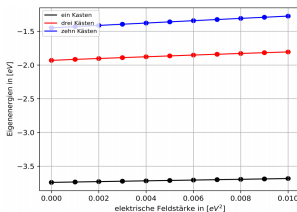
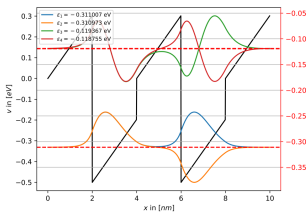
- Wfn. weiterhin Bloch-artig, aber asymmetrisch in Topf
- *Franz-Keldysh*-Effekt erkennbar: Wfn. außerhalb Kastengrenzen verstärkt

Elektrische Felder







- Wfn. weiterhin Bloch-artig, aber asymmetrisch in Topf
- *Franz-Keldysh*-Effekt erkennbar: Wfn. außerhalb Kastengrenzen verstärkt
- Eigenwerte steigen mit Feldstärke

Elektrische Felder



- Wfn. weiterhin Bloch-artig, aber asymmetrisch in Topf
- *Franz-Keldysh*-Effekt erkennbar: Wfn. außerhalb Kastengrenzen verstärkt
- Eigenwerte steigen mit Feldstärke
- Valenzband insgesamt angehoben, Bandlücke identisch

Literatur I

-  DAVIES, JOHN H.: *The Physics of Low-dimensional Semiconductors*.
Cambridge University Press, New York, 1. Auflage , 2005.
-  FLÜGGE, SIEGFRIED: *Rechenmethoden der Quantentheorie*.
Springer, Berlin [u. a.], 6. Auflage , 1999.
-  KHALID, M. ET AL.: *Structural, morphological and optical investigation of silver nanoparticles synthesized by sol-gel auto-combustion method*.
Digest Journal of Nanomaterials and Biostructures, 13(3):679–683, 2018.
-  LANDAU, RUBIN H. UND PÁEZ, MANUEL J. UND BORDEIANU CRISTIAN C.: *Computational Physics*.
Wiley-VCH, Weinheim, 3. Auflage , 2015.

Literatur II



LUTZ, M.: *Programming Python*.

O'Reilly, Sebastopol, 4. Auflage , 2011.



MAYER-KUCKUK, T.: *Atomphysik*.

Springer, Wiesbaden, 5. Auflage , 1997.

(Methodik der Vorlesung)

- 1 Theorie
- 2 Programmierung
- 3 Auswertung
- 4 (Methodik der Vorlesung)
 - Schrödingergleichung
 - Numerik

Schrödingergleichung

Definition: Allgemeine Form der SGL

$$i\hbar\psi(r, t) = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta + V(r, t) \right\} \psi(r, t). \quad (4)$$

Schrödingergleichung

Definition: Allgemeine Form der SGL

$$i\hbar\psi(r, t) = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta + V(r, t) \right\} \psi(r, t). \quad (4)$$

Satz: Separabilität der SGL

Sei $V(r, t) \equiv V(x)$, dann:

$$\psi(x, t) = u(x) \cdot f(t) \quad (5)$$

Schrödingergleichung

Satz: allgemeine Form des Raumteils

$$u''(x) + \frac{2m_e}{\hbar^2} \{C - V(x)\} u(x) = 0 \quad (6)$$

$$\iff u''(x) + k^2 u(x) = 0 \quad (7)$$

- allg. Form einer ODE 2. Ordnung

Schrödingergleichung

Satz: allgemeine Form des Raumteils

$$u''(x) + \frac{2m_e}{\hbar^2} \{C - V(x)\} u(x) = 0 \quad (6)$$

$$\iff u''(x) + k^2 u(x) = 0 \quad (7)$$

- allg. Form einer ODE 2. Ordnung
- k hat Form einer Wellenzahl $k = \frac{p^2}{\hbar^2}$

Schrödingergleichung

Satz: allgemeine Form des Raumteils

$$u''(x) + \frac{2m_e}{\hbar^2} \{C - V(x)\} u(x) = 0 \quad (6)$$

$$\iff u''(x) + k^2 u(x) = 0 \quad (7)$$

- allg. Form einer ODE 2. Ordnung
- k hat Form einer Wellenzahl $k = \frac{p^2}{\hbar^2}$
- für kinetische Energie gilt $T = \frac{p^2}{2m_e}$

Schrödingergleichung

Satz: allgemeine Form des Raumteils

$$u''(x) + \frac{2m_e}{\hbar^2} \{C - V(x)\} u(x) = 0 \quad (6)$$

$$\iff u''(x) + k^2 u(x) = 0 \quad (7)$$

- allg. Form einer ODE 2. Ordnung
- k hat Form einer Wellenzahl $k = \frac{p^2}{\hbar^2}$
- für kinetische Energie gilt $T = \frac{p^2}{2m_e}$
- mit $\frac{p^2}{2m_e} = C - V_0$ folgt $C = T + V_0 = E$

Numerik

Definition: Numerov-Verfahren

Mit Schrittweite h ist i -te Iteration gegeben durch:

$$u_i = \frac{2u_{i-1} \left(1 - \frac{5}{12}h^2 K_{i-1}\right) - u_{i-2} \left(1 + \frac{1}{12}h^2 K_{i-2}\right)}{1 + \frac{1}{12}h^2 K_i} \quad (8)$$

- löst ODE 2. Ordnung

Numerik

Definition: Numerov-Verfahren

Mit Schrittweite h ist i -te Iteration gegeben durch:

$$u_i = \frac{2u_{i-1} \left(1 - \frac{5}{12}h^2 K_{i-1}\right) - u_{i-2} \left(1 + \frac{1}{12}h^2 K_{i-2}\right)}{1 + \frac{1}{12}h^2 K_i} \quad (8)$$

- löst ODE 2. Ordnung
- zwei Startwerte u_0 und u_1 müssen gegeben sein

Numerik

Definition: Numerov-Verfahren

Mit Schrittweite h ist i -te Iteration gegeben durch:

$$u_i = \frac{2u_{i-1} \left(1 - \frac{5}{12}h^2 K_{i-1}\right) - u_{i-2} \left(1 + \frac{1}{12}h^2 K_{i-2}\right)}{1 + \frac{1}{12}h^2 K_i} \quad (8)$$

- löst ODE 2. Ordnung
- zwei Startwerte u_0 und u_1 müssen gegeben sein
- K-Liste muss errechnet werden → externes Potential

Numerik

Definition: Numerov-Verfahren

Mit Schrittweite h ist i -te Iteration gegeben durch:

$$u_i = \frac{2u_{i-1} \left(1 - \frac{5}{12}h^2 K_{i-1}\right) - u_{i-2} \left(1 + \frac{1}{12}h^2 K_{i-2}\right)}{1 + \frac{1}{12}h^2 K_i} \quad (8)$$

- löst ODE 2. Ordnung
- zwei Startwerte u_0 und u_1 müssen gegeben sein
- K-Liste muss errechnet werden → externes Potential
- rechtssetigen Randwert durch Nullstellensuche in u erzwingen
→ Schießverfahren

Numerik

Definition: Newton-Raphson-Verfahren

Die i -te Iteration ist gegeben durch:

$$x_n = x_{n-1} - \frac{u(x_{n-1})}{u'(x_{n-1})} \quad (9)$$

mit dem Differenzenquotienten:

$$u'(x) = \frac{u(x + \Delta x) - u(x)}{\Delta x} \quad (10)$$

- ermöglicht hochgenaue Nullstellensuche

Numerik

Definition: Newton-Raphson-Verfahren

Die i -te Iteration ist gegeben durch:

$$x_n = x_{n-1} - \frac{u(x_{n-1})}{u'(x_{n-1})} \quad (9)$$

mit dem Differenzenquotienten:

$$u'(x) = \frac{u(x + \Delta x) - u(x)}{\Delta x} \quad (10)$$

- ermöglicht hochgenaue Nullstellensuche
- braucht vorgeschaltete grobe Nullstellensuche