

Computerphysik - SS09

Übungsblatt Nr. 5

1. **Hausaufgabe:** Berechnen Sie für die Taylor-Reihe

$$f(x) \simeq x - \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{3}x^3 - \frac{1}{4}x^4$$

die zugehörigen $[M, N](z)$ -Padé-Approximationen für

$$M, N = 0, 1, 2$$

und vergleichen Sie diese (in *gnuplot*) für $z \in [-1, 5]$ mit den Approximationen aus der Taylor-Entwicklung.

2. **Hausaufgabe:** Aus der formalen Potenzreihendarstellung des Integrals

$$\int_0^\infty \frac{e^{-u}}{1+uz} du = \sum_{n=0}^{\infty} n!(-z)^n$$

bestimme man die zugehörigen $[N, N](z)$ -Padé-Approximationen für

$$N = 0, 1, 2, 3$$

und berechne mit diesen Approximationen das Integral näherungsweise für $z \in [0, 10]$. Vergleichen Sie diese Ergebnisse mit den Werten aus den entsprechenden Partialsummen

$$\sum_{n=0}^{2N} n!(-z)^n .$$

3. Schreiben Sie eine Unterfunktion für den ϵ -Algorithmus und wenden Sie diesen auf die Taylor-Reihe aus Aufgabe 1 an (der Prototyp hierfür steht in *epsilon.h*). Mit Hilfe des ϵ -Algorithmus berechne man aus der Folge der Partialsummen aus Aufgabe 2 für höhere N das Integral.
4. Bestimmen Sie die ersten drei Nullstellen der Besselfunktion $J_0(x)$. Die Routine *bessj0.h* liefert die Werte von $J_0(x)$. Plotten Sie die Funktion und stellen Sie jeweils ein geeignetes Startintervall $[x_1, x_2]$ für die Nullstellensuche fest. Schreiben Sie dann unter Zuhilfenahme der Unterprogramme *zbrent.h* und *bessj0.h* ein Programm zur Bestimmung der Nullstelle mit vorgebarbarer Genauigkeit. Berechnen Sie die Nullstellen auch mit einem von Ihnen geschriebenen Unterprogramm, das die Regula falsi verwendet.

5. **Projekt "Bahnformen für Zentralpotentiale":**

Schreiben Sie zunächst ein Unterprogramm *POT* zur Berechnung der äquivalenten eindimensionalen Potentiale V_{eff} für folgende Zentralpotentialtypen:

a) Potenzpotentiale

$$V = ar^p ,$$

b) Yukawa-Potentiale

$$V = \frac{a}{r} e^{-\mu r} ,$$

c) Gauss'scher Potentialtopf

$$V = -V_0 e^{-br^2} .$$

Schreiben Sie dann ein Programm zur Bestimmung der Umkehrpunkte der äquivalenten eindimensionalen Potentiale bei vorgegebener Gesamtenergie E mit Hilfe des Programms *zbrent.h*. Eingabe: die Parameter des Zentralpotentials und der Wert für $l^2/2\mu$, die Energie E und zwei Werte r_1 und r_2 , die den Umkehrpunkt so einschließen, dass an den beiden Punkten $E - V_{eff}$ verschiedene Vorzeichen hat. Um diese Punkte herauszufinden, müssen die effektiven Potentiale natürlich erst geplottet werden.