

**Harald Führer**

**Numerische Berechnung der  
Energieeigenwerte und Eigenfunktionen  
in Potentialen und Supersymmetrischen  
Potentialen**

**Diplomarbeit**

# BEI GRIN MACHT SICH IHR WISSEN BEZAHLT



- Wir veröffentlichen Ihre Hausarbeit, Bachelor- und Masterarbeit
- Ihr eigenes eBook und Buch - weltweit in allen wichtigen Shops
- Verdienen Sie an jedem Verkauf

Jetzt bei [www.GRIN.com](http://www.GRIN.com) hochladen  
und kostenlos publizieren



Numerische Berechnung der Energieeigenwerte und  
Eigenfunktionen in Potentialen und Supersymmetrischen  
Potentialen

Diplomarbeit

Fachhochschule Vorarlberg  
Studiengang: Technisches Produktionsmanagement

vorgelegt von: Führer Harald

**Dornbirn, Juni 2005**

## Kurzfassung

Anfang des letzten Jahrhunderts steckte die Physik in einer Krise. Die klassische Physik war im Grossen und Ganzen schon bewiesen und in der Praxis angewandt. Allerdings ergaben sich bei gewissen Experimenten und Forschungen zum Teil gravierende Unstimmigkeiten mit der klassischen Mechanik.

In der Welt der kleinsten Teilchen, der Elektronen, herrschen andere Gesetze als in der Welt der makroskopischen Körper. Ein Elektron verhält sich nicht wie ein aus dem Alltagsleben bekanntes Teilchen, sondern hat sowohl Wellen-, als auch Teilchencharakter.

Die Quantentheorie beschreibt den physikalischen Zustand eines Teilchens durch eine Differentialgleichung, die nach dem Physiker und Nobelpreisträger Erwin Schrödinger benannt ist. Abhängig von der Komplexität einer gegebenen Potentialfunktion ist diese Differentialgleichung analytisch schwer oder gar nicht mehr lösbar.

Die vorliegende Diplomarbeit beschäftigt sich mit der Quantenphysik an sich und der numerischen Berechnung der Eigenfunktionen und Eigenwerte von beliebigen Potentialfunktionen. Die Berechnung ist mit einem am Computer programmierten, ereignisgesteuerten und mit einer Benutzeroberfläche ausgestatteten Programm möglich, ebenso wie automatische Plotfunktionen. Im weiteren Teil der Arbeit wird dann zu Supersymmetrischen Potentialen und deren numerischer Behandlung mit programmtechnischer Umsetzung für genauere Analysen übergegangen.

## **Abstract**

At the beginning of the last century, the science of physics was facing a crisis. Although matters of classical physics were more or less scientifically proven and applied in practice, the results of certain experiments achieved through physics showed great deviations from the results achieved through classical mechanics.

Engineering principles applicable to the smallest microscopic particles are not the same as those principles applicable to macroscopic particles. An electron does not act in the same way as an ordinary particle known from every day life mainly because an electron is identified by its wave and particle-dualism.

Quantum theory describes the physical condition of a particle by using a differential equation set up by the physicist and Nobel prize winner Erwin Schrödinger. Depending on the complexity of the potential function, the solution of this differential equation by analytical means is either very difficult or not possible at all.

This thesis approaches design engineering from the perspective of quantum physics with the main focus on numeric design engineering of eigenfunctions and eigenvalues of any potential function. Numeric design engineering is achieved by means of a computer controlled program equipped with a user interface for automatic plotting of curves. Finally, supersymmetric potentials and their numeric handling are dealt with as well. This thesis also concentrates on how to get more precise analyses by using computer programs.

## **Danksagung**

An dieser Stelle möchte ich allen danken, die durch ihre fachliche und persönliche Unterstützung zum Gelingen dieser Diplomarbeit beigetragen haben.

Insbesondere Dr. Dipl. Ing. techn. Peter Pichler danke ich, der nicht nur die Grundidee zu dieser Arbeit lieferte, sondern mir auch immer hilfreich und mit viel Know-how zur Seite stand.

Vielen Dank auch an meine Freundin Birgit, die mir beim Korrekturlesen geholfen hat und mich auch moralisch unterstützte.

Gewidmet ist die Arbeit meinen Eltern, die mich immer selbstlos unterstützt und mir das Studium erst ermöglicht haben.

# Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Grundlagen	2
2.1	Numerische Verfahren zum Lösen von Differentialgleichungen	2
2.1.1	Allgemein	2
2.1.2	Streckenzugverfahren von Euler	2
2.1.3	Runge-Kutta	3
2.2	Numerisches Verfahren zur Differentiation	8
2.3	Numerisches Verfahren zur Integration	11
3	Schrödinger-Gleichung	16
3.1	Allgemein	16
3.2	Der Teilchen Welle Dualismus	16
3.2.1	Doppelspaltversuch mit klassischem Teilchen	16
3.2.2	Doppelspaltversuch mit klassischen Wellen	17
3.2.3	Doppelspaltversuch mit Elektronen	18
3.2.4	Interpretation der Doppelspaltexperimente	19
3.3	Das mathematische Gerüst der Quantentheorie	20
3.3.1	Das im unendlich hohen Potentialtopf eingespernte Teilchen	20
3.3.2	Die Schrödinger-Gleichung	26
3.3.3	Interpretation der Wellenfunktion	29
4	Numerische Berechnung von Energieeigenwerten und Funktionen	33
4.1	Stetigkeitsbedingungen an den Potentialwänden	34
4.2	Unendlich hoher Potentialtopf	36
4.2.1	Analytische Lösung	37
4.2.2	Numerische Lösung	40
4.3	Potentialfunktion $x^2$ (quantenmechanischer Oszillator)	44
4.3.1	Analytische Lösung	44
4.3.2	Numerische Lösung	51
4.4	Potentialfunktion $-\frac{1}{\cosh(x)^2} + 1$	55
5	Supersymmetrische Potentiale	57
5.1	Allgemein	57

5.2	Mathematische Behandlung der Supersymmetrischen Potentiale-----	57
5.2.1	Supersymmetrisches Potential im unendlich hohen Potentialtopf-----	58
5.2.2	Supersymmetrisches Potential zum Doppeltopfpotential -----	61
5.2.3	Aufsuchen der Energieeigenwerte aus höhergradigen Supersymmetrischen Potentialen -----	62
	Resümee und Ausblick-----	65
	Literaturverzeichnis -----	67
	Anhang -----	68



## Darstellungsverzeichnis

Darst. 2-1 numerische Differentiation einer Sinusfunktion .....	10
Darst. 2-2 Zerlegung der Fläche in $2n$ einfache Streifen. ....	11
Darst. 2-3 Berechnung des ersten Doppelstreifens .....	12
Darst. 3-1 Doppelspaltversuch mit klassischem Teilchen.....	16
Darst. 3-2 Doppelspaltversuch mit klassischen Wellen .....	17
Darst. 3-3 Doppelspaltversuch mit Elektronen.....	18
Darst. 3-4 Elektroneneintritt durch eine Blende .....	30
Darst. 3-5 Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte eines Elektrons im Intervall $x$ bis $x+dx$ .	30
Darst. 4-1 Potentialstufe.....	34
Darst. 4-2 Endlicher Potentialsprung .....	34
Darst. 4-3 Kräftefreier, pendelnder Massepunkt mit zugehöriger potentieller Energie $U(x)$ .....	36
Darst. 4-4 Bild links: Eigenfunktion des Elektrons zum Eigenwert=1 im unendlich hohen Potentialtopf Bild rechts: Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte des Elektrons zum Eigenwert=1 im unendlich hohen Potentialtopf.....	39
Darst. 4-5 Bild links: Eigenfunktion des Elektrons zum Eigenwert=4 im unendlich hohen Potentialtopf Bild rechts: Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte des Elektrons zum Eigenwert=4 im unendlich hohen Potentialtopf.....	40
Darst. 4-6 Bild links: Eigenfunktion des Elektrons zum Eigenwert=9 im unendlich hohen Potentialtopf Bild rechts: Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte des Elektrons zum Eigenwert=9 im unendlich hohen Potentialtopf.....	40
Darst. 4-7 Eingabemaske zur numerischen Berechnung der Energieeigenwerte und Eigenfunktionen in symmetrischen Potentiale .....	41
Darst. 4-8 Bild links: Eigenfunktion des Elektrons zum Eigenwert=1 (rote Linie) im unendlich hohen Potentialtopf Bild rechts: Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte des Elektrons zum Eigenwert=1 (rote Linie) im unendlich hohen Potentialtopf.....	42
Darst. 4-9 Bild links: Eigenfunktion des Elektrons zum Eigenwert=2 (rote Linie) im unendlich hohen Potentialtopf Bild rechts: Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte des Elektrons zum Eigenwert=2 (rote Linie) im unendlich hohen Potentialtopf.....	42
Darst. 4-10 Bild links: Eigenfunktion des Elektrons zum Eigenwert=3 (rote Linie) im unendlich hohen Potentialtopf Bild rechts: Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte des Elektrons zum Eigenwert=3 (rote Linie) im unendlich hohen Potentialtopf.....	43
Darst. 4-11 relative Fehlerwerte bei numerischer Berechnung.....	43
Darst. 4-12 lineares harmonisches Pendel mit der Masse $m$ .....	44
Darst. 4-13 potentielle Energie $U(x)$ des harmonischen Oszillators.....	46

Darst. 4-14 Energieeigenwerte und zugehörige Eigenfunktionen des harmonischen Oszillators .....	50
Darst. 4-15 Harmonischer Oszillator u. Übergang zum klassischen Fall .....	51
Darst. 4-16 Potentialfunktion $x^2$ .....	52
Darst. 4-17 Bild links: Eigenfunktion des Elektrons zum Eigenwert=1 (rote Linie) im unendlich hohen Potentialtopf Bild rechts: Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte des Elektrons zum Eigenwert=1 (rote Linie) im quadratischen Potential .....	52
Darst. 4-18 Bild links: Eigenfunktion des Elektrons zum Eigenwert=2 (rote Linie) im unendlich hohen Potentialtopf Bild rechts: Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte des Elektrons zum Eigenwert=2 (rote Linie) im quadratischen Potential .....	52
Darst. 4-19 Bild links: Eigenfunktion des Elektrons zum Eigenwert=3 (rote Linie) im unendlich hohen Potentialtopf Bild rechts: Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte des Elektrons zum Eigenwert=3 (rote Linie) im quadratischen Potential .....	53
Darst. 4-20 Bild links: Eigenfunktion des Elektrons zum Eigenwert=4 (rote Linie) im unendlich hohen Potentialtopf Bild rechts: Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte des Elektrons zum Eigenwert=4 (rote Linie) im quadratischen Potential .....	53
Darst. 4-21 relative Fehlerwerte bei numerischer Berechnung .....	54
Darst. 4-22 Potentialfunktion $-\frac{1}{\cosh(x)^2} + 1$ .....	55
Darst. 4-23 Eigenfunktion im $-\frac{1}{\cosh(x)^2} + 1$ Potential .....	56
Darst. 5-1 $\psi_0$ .....	58
Darst. 5-2 $\psi'_0$ ; $\frac{\psi'_0}{\psi_0}$ .....	59
Darst. 5-3 $\frac{d}{dx} \left( \frac{\psi'_0}{\psi_0} \right)$ ; $0 - 2 * \frac{d}{dx} \left( \frac{\psi'_0}{\psi_0} \right)$ .....	59
Darst. 5-4 exaktes Supersymmetrisches Potential $V_+(x) = \frac{2}{\sin^2(x)}$ .....	60
Darst. 5-5 relative Fehlerwerte bei numerischer Berechnung im Supersymmetrischen Potential .....	60
Darst. 5-6 Potentialfunktion: $\frac{-2 * ((4 * 15 + 3) * \cosh^2(x) - 15)}{(15 + \cosh^2(x))^2} + 2.06719$ .....	61
Darst. 5-7 Supersymmetrisches Potential: $\left[ \frac{-2 * ((4 * 15 + 3) * \cosh^2(x) - 15)}{(15 + \cosh^2(x))^2} + 2.06719 \right] - 2 * \frac{d}{dx} \left( \frac{\psi'_0}{\psi_0} \right)$ .....	61
Darst. 5-8 Erste Wellenfunktion $\psi(x)$ bei Energieniveau $E = 1$ .....	63
Darst. 5-9 Potential $V_+ = \frac{2}{x^2} + x^2 + 2$ .....	64

---

*„Wenn in einer Sintflut alle wissenschaftlichen Kenntnisse zerstört würden und nur ein Satz an die nächste Generation weitergereicht würde, welche Aussage würde dann die größte Aussage in den wenigsten Worten enthalten? Ich bin überzeugt, dass dies die Atomhypothese (oder welchen Namen sie auch immer hat) wäre“ (Feynman, R. P: Vorlesungen über Physik. Bd. 1, Teil 1 München 1974, S. 1-2.)*

## 1 Einleitung

Anfang des letzten Jahrhunderts steckte die Physik in einer Krise. Die klassische Physik war im Grossen und Ganzen schon bewiesen und in der Praxis angewandt. Allerdings ergaben sich bei gewissen Experimenten und Forschungen zum Teil gravierende Unstimmigkeiten mit der klassischen Mechanik. Ein konkretes Beispiel ist zum Beispiel die Wärmestrahlung, die mit klassischen Konzepten nicht zu erklären war. Der deutsche Physiker Max Planck stellte dabei die revolutionierende Annahme einer Energiequantelung auf. Sie war für ihn zwar nicht streng beweisbar, klärte aber quantitativ korrekt den experimentellen Befund und muss als Geburtsstunde der modernen Physik angesehen werden.

Im Mittelpunkt dieser Diplomarbeit steht dabei die Schrödinger-Gleichung, die nach dem österreichischen Physiker und Nobelpreisträger Erwin Schrödinger benannt, die zentrale Bewegungsgleichung der Quantenmechanik darstellt. Sie tritt an die Stelle der klassischen Newtonschen Bewegungsgleichungen.<sup>1</sup> Damit bei der in der Schrödinger-Gleichung auftretenden Potentialfunktion  $V(x)$  auch komplexere Ausdrücke berechnet werden können, bedient man sich numerischer Lösungsmethoden. Interessant hierbei ist auch die programmtechnische Umsetzung zur Erzielung der Eigenwerte und Eigenfunktionen dieser Differentialgleichung, um die Möglichkeiten der numerischen Mathematik auszuloten.

---

<sup>1</sup> Vgl. Nolting, Wolfgang: Grundkurs: Theoretische Physik. 3. Auflage. Ulmen: Zimmerman - Neufang 1996, S. 1