Naturwissenschaft

Harald Führer

Numerische Berechnung der Energieeigenwerte und Eigenfunktionen in Potentialen und Supersymmetrischen Potentialen

Diplomarbeit

Examicus

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

Darstellungsverzeichnis

„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 München1974, 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.[1] 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.

[1] Vgl. Nolting, Wolfgang: Grundkurs: Theoretische Physik. 3. Auflage. Ulmen: Zimmerman - Neufang 1996 ,S. 1