

# JavaPsi

## Zur Quantenmechanik am Computer

Marcel Schmittfull

April 2003

### Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>2</b>
<b>2</b>	<b>Grundlagen der Quantenmechanik</b>	<b>2</b>
2.1	Superposition von Zuständen . . . . .	2
2.2	Indeterminismus und Wahrscheinlichkeitsinterpretation . . . . .	3
2.3	Heisenbergsche Unschärferelation . . . . .	3
2.4	Modell von Dirac . . . . .	4
<b>3</b>	<b>Lösen der Schrödinger-Gleichung</b>	<b>4</b>
3.1	Eindimensionaler zeitunabhängiger Fall . . . . .	4
3.1.1	Numerov-Algorithmus . . . . .	5
3.1.2	Numerische Bestimmung der Eigenwerte . . . . .	6
3.1.3	Freies Teilchen . . . . .	7
3.1.4	Teilchen im Potentialkasten . . . . .	8
3.1.5	Harmonischer Oszillator . . . . .	8
3.2	Eindimensionaler zeitabhängiger Fall . . . . .	9
3.2.1	Algorithmus . . . . .	9
3.2.2	Potentialkasten . . . . .	10
3.2.3	Potentialbarriere und Tunneleffekt . . . . .	10
3.2.4	Harmonischer Oszillator . . . . .	11
3.3	Dreidimensionaler zeitunabhängiger Fall . . . . .	11
<b>4</b>	<b>Implementierung</b>	<b>13</b>
4.1	Wahl der Programmiersprache . . . . .	13
4.2	Verwendete Pakete . . . . .	13
4.3	Parametereingabe und Benutzerführung . . . . .	14
<b>5</b>	<b>Entwicklungsstatus und Download</b>	<b>14</b>
<b>6</b>	<b>Ausblick</b>	<b>14</b>
<b>7</b>	<b>Danksagung</b>	<b>15</b>

## 1 Einleitung

Das Ziel der vorliegenden Arbeit ist es, Vorgänge und Phänomene in der Quantenmechanik am Computer in Form von Java Applets<sup>1</sup> zu simulieren. Bei der Entwicklung der Programme wurde sehr auf möglichst hohe Flexibilität und trotzdem möglichst einfache und klare Bedienung geachtet. Zudem stellte die Effizienz der Algorithmen ein wichtiges Kriterium dar.

Zwar existieren bereits recht viele Programme zur Quantenmechanik. Doch gibt es immer noch eine Fülle an Ideen, die bisher noch nicht realisiert wurden. So findet sich z.B. eine Vielzahl an Programmen, die die Wellenfunktion eines Teilchens mit Hilfe der SCHRÖDINGER-Gleichung darstellen. Jedoch ist die Möglichkeit, das Potential  $V(x)$  interaktiv zu bestimmen, nur sehr selten gegeben. Falls ein solcher interaktiver Eingang einmal gegeben ist, dann ist er von mathematischer Form, d.h. das Potential muss in Form einer mathematischen Gleichung eingegeben werden. Da dies sehr umständlich bzw. unter Umständen überhaupt nicht oder nur mit großem Aufwand möglich ist, wurde in dieser Arbeit unter anderem ein Programm entwickelt, in dem das Potential direkt mit der Maus beliebig variierbar ist. Hiermit lassen sich eine Menge quantenmechanischer Vorgänge sehr schnell und leicht verständlich am Computer nachvollziehen.

Zusätzlich wurde versucht, auch zeitabhängige und mehrdimensionale Probleme zu simulieren. Die Simulation derartiger Probleme gestaltet sich nämlich recht schwierig und ist in nur sehr wenigen Programmen zu finden.

## 2 Grundlagen der Quantenmechanik

Da sich mit der klassischen Mechanik das Verhalten von kleinen Teilchen, wie beispielsweise Elektronen oder Photonen, nicht beschreiben lässt, wurde Anfang des 20. Jahrhunderts die Quantenmechanik entwickelt. In diesem Abschnitt soll kurz auf die grundlegenden physikalischen Hintergründe dieser Theorie eingegangen werden.

### 2.1 Superposition von Zuständen

Ein zentrales Konzept der Quantenmechanik stellt der sogenannte *Zustand* eines Teilchens dar. Im Gegensatz zur klassischen Mechanik können aber nicht alle Größen eines Zustands beliebig genau erfasst werden. Beispielsweise lassen sich der Impuls und der Ort eines Teilchens nicht gleichzeitig genau bestimmen. Teilchen können sich in einer *Superposition*, d.h. Überlagerung, mehrerer Zustände befinden. Interessant ist, dass diese verschiedenen Zustände eines Teilchens miteinander wechselwirken, wodurch es zum Beispiel zu den beim Doppelspaltversuch beobachteten Interferenzen kommt. Selbst wenn nur ein einzelnes Teilchen durch den Doppelspalt fliegt, sind die Interferenzen zu beobachten. Das Teilchen befindet sich also in einem Superpositionszustand, der die Wege durch beide Spalten umfasst.

Wenn sich nun ein Teilchen in einem Zustand  $Z$  befindet, der eine Superposition zweier Zustände  $A$  und  $B$  darstellt, so ist zu beobachten, dass die Resultate  $z$ , die sich aus einer Messung der Variablen  $V$  im Zustand  $Z$  ergeben, keineswegs „Mischungen“ aus den Resultaten  $a$  und  $b$  sind, die  $A$  und  $B$  alleine für sich<sup>2</sup> bei einer Messung von  $V$  liefern würden, sondern dass sie (die Resultate  $z$ ) vielmehr immer entweder ganz  $a$  oder ganz  $b$  sind. Das Teilchen „springt“ also bei einer Messung von  $V$  im Zustand  $Z$  in entweder den Zustand  $A$  oder  $B$ . Die Zustände  $A$  und  $B$ , oder allgemein alle Zustände, in die ein Teilchen springen kann, werden *Eigenzustände* genannt. Die Messresultate  $a$  und  $b$  bzw. allgemein alle bei einer Messung von  $V$  erlaubten Resultate bezeichnet man als *Eigenwerte* der Variablen  $V$ .

<sup>1</sup>Java Applets sind in der Programmiersprache Java geschriebene Programme, die sich direkt in einem Browser öffnen lassen.

<sup>2</sup>D.h. ohne Superposition.

## 2.2 Indeterminismus und Wahrscheinlichkeitsinterpretation

Dadurch, dass es keine Misch-Ergebnisse von  $a$  und  $b$  gibt, sondern immer genau  $a$  oder  $b$ , ist es nicht möglich, mit absoluter Sicherheit vorherzusagen, welches Resultat eine Messung der Variablen  $V$  im Zustand  $Z$  bei einem bestimmten Versuchsaufbau ergeben wird. Es lässt sich lediglich „manchmal  $a$  und manchmal  $b$ “ mit Sicherheit sagen. Auf Grund dieses Ergebnisses müssen wir den Determinismus, d.h. die Auffassung, dass alles vorbestimmt ist, aufgeben! Ob das Resultat  $z$  nun  $a$  oder  $b$  ist, lässt sich lediglich mit einer bestimmten *Wahrscheinlichkeit* angeben. So kann beispielsweise der Aufenthaltsort eines Elektrons in einem Atom für jeden Zeitpunkt nicht mehr explizit, sondern nur anhand einer *Wahrscheinlichkeitsdichte*  $P(x)$  angegeben werden. Diese Wahrscheinlichkeitsdichte ist der *BORNschen Wahrscheinlichkeitsinterpretation* zufolge das Absolutquadrat einer Wahrscheinlichkeitsamplitude – der *Wellenfunktion*  $\psi(x)$ :

$$P(x) = |\psi(x)|^2. \quad (2.1)$$

Mit Hilfe der Wellenfunktion  $\psi(x)$  lassen sich also Aussagen über die Wahrscheinlichkeitsdichte des Ortes  $x$  und somit auch über den wahrscheinlichsten Aufenthaltsort treffen. Interessanterweise ist die Wellenfunktion  $\psi(x)$  von weniger Variablen abhängig als die klassische Bahn eines Teilchens in der klassischen Mechanik. In der *SCHRÖDINGERSchen Ortsdarstellung* beispielsweise hängt die Wellenfunktion lediglich von der Ortskoordinate und der Zeit ab, nicht aber von Impulskoordinaten.

Die Wahrscheinlichkeiten  $|\psi(x)|^2$  müssen noch einer einschränkenden Bedingung genügen. Betrachtet man nämlich den gesamten existierenden Bereich  $x = -\infty$  bis  $x = \infty$  bzw. den gesamten erlaubten<sup>3</sup> Bereich  $x = x_0$  bis  $x = x_1$ , so erhält man die *Normierungsbedingung*, dass die Summe aller „Einzelwahrscheinlichkeiten“ den Wert 1 annehmen muss,

$$\int_{x_0}^{x_1} P(x) dx = 1. \quad (2.2)$$

Um diese Normierungsbedingung zu erfüllen, wurde an die Programme, die in den nächsten Abschnitten beschrieben werden, ein kurzer Algorithmus angehängt, der nach der eigentlichen Berechnung der Wellenfunktion die Wellenfunktion normiert.

## 2.3 Heisenbergsche Unschärferelation

Wie bei der Definition von Zuständen in Abschnitt 2.1 bereits erwähnt, spricht man nur dann von einem physikalischen Zustand, wenn kein Wert bzw. keine Eigenschaft gegen ein geltendes Gesetz verstößt. Das wohl bekannteste unter diesen Gesetzen ist die *HEISENBERGsche Unschärferelation*. Sie sagt aus, dass die Information über den Ort  $x$  eines Teilchens umso ungenauer sein muss, je genauer die Information über den Impuls  $p$  dieses Teilchens ist, und umgekehrt, dass die Information über den Impuls  $p$  eines Teilchens umso ungenauer sein muss, je genauer die Information über den Ort  $x$  dieses Teilchens ist. D.h. also, dass die Genauigkeit  $\Delta x$  der Information des Ortes indirekt proportional zur Genauigkeit  $\Delta p$  der Information des Impulses ist oder<sup>4</sup>

$$\Delta x \Delta p \geq \hbar/2 \quad (\hbar = \frac{h}{2\pi} \approx 1,055 \cdot 10^{-34} \text{ J s}) \quad (2.3)$$

mit  $\hbar$  als universeller Konstanten. Der Übergang von der Quantenmechanik in die klassische Mechanik ergibt sich durch die Vereinfachung  $\Delta x \Delta p = 0$ . D.h. die Quantenmechanik stellt eine Verallgemeinerung der klassischen Mechanik dar.

<sup>3</sup>Häufig ist durch Randbedingungen bekannt, in welchem Bereich die Ergebnisse unerlaubt sind.

<sup>4</sup> $\Delta x \Delta p$  ist nicht *gleich* einer universellen Konstanten  $\hbar/2$ , sondern *größer-gleich*, weil  $\Delta x$  und  $\Delta p$  in der Praxis oft noch wesentlich ungenauer ermittelt werden können als in der Theorie.

## 2.4 Modell von Dirac

Wie bereits in Abschnitt 2.1 erwähnt wechselwirken Zustände in einer Superposition miteinander. P. A. M. DIRAC [1] hat nun ein äußerst erfolgreiches und sehr interessantes mathematisches Modell entwickelt, um diese Wechselwirkungen zu beschreiben. Auf dieses Modell soll hier nur kurz eingegangen werden.

Ein Zustand wird durch einen Vektor im HILBERT-Raum, d.h. in einem Raum mit unendlich vielen Dimensionen, dargestellt. Diese Vektoren nannte DIRAC *Kets*<sup>5</sup> und bezeichnete sie mit z.B.  $|Z\rangle$ . Alle Eigenschaften eines Zustands, nach denen wir fragen dürfen, müssen im Ket enthalten sein.<sup>6</sup> Nun gibt es zu allen Vektoren sogenannte duale Vektoren. DIRAC nannte die zu den Kets dualen Vektoren *Bras* und bezeichnete sie mit z.B.  $\langle Z|$ . Bras können als eine Art Gegenteil von Kets betrachtet werden. Observablen werden im DIRAC Modell durch *lineare Operatoren* ausgedrückt. In dem Fall

$$\alpha|Z\rangle = a|Z\rangle, \quad (2.4)$$

wobei  $|Z\rangle$  einen Ket,  $\alpha$  einen linearen Operator und  $a$  eine Zahl darstellt, steht der lineare Operator  $\alpha$  lediglich für eine Multiplikation mit der Zahl  $a$ . Wenn man sich nun die Kets wieder als Vektoren vorstellt, ändert  $\alpha$  lediglich den Betrag bzw. die Länge des Kets  $|Z\rangle$ , nicht aber die Richtung. Wenn Gleichung (2.4) zutrifft, wird  $a$  *Eigenwert* des linearen Operators  $\alpha$  bzw. der zu  $\alpha$  gehörigen Observablen genannt.  $|Z\rangle$  wird in diesem Fall als *Eigenket* und  $\langle Z|$  als *Eigenbra* des linearen Operators bzw. der Observablen bezeichnet. Die zum Eigenket  $|Z\rangle$  bzw. zum Eigenbra  $\langle Z|$  gehörige Wellenfunktion wird *Eigenfunktion* genannt. Der zu  $|Z\rangle$  bzw.  $\langle Z|$  gehörige Zustand ist ein Eigenzustand, vgl. Abschnitt 2.1.

DIRAC hat nun einige „Rechenregeln“ hergeleitet und definiert, mit denen sich das in Experimenten beobachtete Wechselwirken mehrerer Zustände bzw. Kets und Bras sehr gut beschreiben lässt. Diese Rechenregeln stellen die Basis des DIRAC Modells dar, für dessen ausführliche Beschreibung auf [1] verwiesen sei.

## 3 Lösen der Schrödinger-Gleichung

### 3.1 Eindimensionaler zeitunabhängiger Fall

Um die Bewegung von Teilchen in der Quantenmechanik darzustellen, muss die Wellenfunktion  $\psi(x)$  berechnet werden. ERWIN SCHRÖDINGER schlug 1926 die nach ihm benannte SCHRÖDINGER-Gleichung vor. Im eindimensionalen zeitunabhängigen Fall lautet sie

$$\underbrace{\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right)}_H \psi(x) = E \psi(x), \quad (3.1)$$

wobei  $m$  die Teilchenmasse und  $V(x)$  das Potential darstellt. Der zur Gesamtenergie  $E$  gehörige lineare Operator wird mit  $H$  bezeichnet und in Analogie zur klassischen Mechanik häufig auch HAMILTON-Operator genannt.

Im Grunde ist die SCHRÖDINGER-Gleichung lediglich ein „Rezept“, mit dem sich durch Experimente beobachtete Vorgänge sehr erfolgreich beschreiben lassen. Das Rezept sagt aus, dass die Gesamtenergie  $E$  immer gleich der Summe der kinetischen Energie  $\frac{p^2}{2m}$  und der potentiellen Energie  $V(x)$  sein muss – es ist also das quantenmechanische Analogon zum Energieerhaltungssatz der klassischen Mechanik. Zwar lässt sich dieses Rezept aus den Gesetzen der

<sup>5</sup>Die Namen Bra und Ket entstanden aus engl. *bracket* (Klammer).

<sup>6</sup>Vgl. Definition von *Zustand*, siehe Abschnitt 2.1.

klassischen Wellenoptik erahnen<sup>7</sup>. Jedoch lässt es sich – gleichsam dem Energieerhaltungssatz der klassischen Mechanik – nicht vollständig herleiten.

Weil sich Gleichung (3.1) lediglich für ein paar wenige spezielle Potentiale  $V(x)$  analytisch lösen lässt, wird im folgenden hauptsächlich auf numerische Lösungsmethoden eingegangen werden, die die SCHRÖDINGER-Gleichung für beliebige Potentiale  $V(x)$  lösen können.

### 3.1.1 Numerov-Algorithmus

Die eindimensionale stationäre SCHRÖDINGER-Gleichung (3.1) ließe sich ohne großen Aufwand einfach mit der RUNGE-KUTTA-Methode lösen.<sup>8</sup> Ein jedoch besonders auf die SCHRÖDINGER-Gleichung abgestimmtes numerisches Verfahren stellt der sogenannte NUMEROV- oder FOX-GOODWIN-Algorithmus dar, der sich durch sehr gute Genauigkeit und dennoch äußerst hohe Effizienz auszeichnet. Auf Grund dieser Vorteile wurde in dem Programm dieser NUMEROV-Algorithmus zur Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung verwendet. Er kann wie folgt hergeleitet werden.

Es soll eine zweigliedrige Iteration bzw. Rekursion gefunden werden, die ausgehend von zwei Startwerten  $\psi(x-h)$  und  $\psi(x)$  alle weiteren Werte  $\psi(x+h)$  der gesuchten Funktion  $\psi$  liefert.<sup>9</sup> Um die Normierungsbedingung (2.2) zu erfüllen, muss die Wellenfunktion  $\psi(x)$  bei  $x \rightarrow \pm\infty$  asymptotisch auf 0 zulaufen. Dies wird sicher gestellt, indem das vom Benutzer zu bestimmende Potential in einen unendlich hohen Potentialkasten gesetzt wird. Die am Rand des Ausgabefensters befindlichen Ränder des Potentialkastens seien an den Punkten  $x = -x_r$  und  $x = x_r$ . In diesen Punkten läuft  $\psi(x)$  asymptotisch auf 0 zu, weil  $V(\pm x_r) \rightarrow \infty$ . Dadurch erhalten wir bereits den ersten benötigten Startwert  $\psi(\pm x_r) = 0$ . Der zweite Startwert  $\psi(\pm x_r \mp h)$  ist beliebig auf Grund der am Ende der Berechnung durchgeführten Normalisierung der Wellenfunktion  $\psi(x)$  bzw. Wahrscheinlichkeitsfunktion  $|\psi(x)|^2$ . Um nun die gesuchte Rekursion zu erhalten, wird zunächst die SCHRÖDINGER-Gleichung (3.1) umgeformt zu

$$\psi''(x) + F(x)\psi(x) = 0 \quad \text{mit } F(x) = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x)), \quad (3.2)$$

wobei  $\psi''(x)$  die zweite Ableitung von  $\psi(x)$  darstellt. Nun wird die Wellenfunktion  $\psi(x \pm h)$  mit  $h$  als Schrittweite in der Umgebung von  $x$  in eine Taylor-Reihe nach  $h$  entwickelt:

$$\begin{aligned} \psi(x+h) &= \psi(x) + h\psi'(x) + \frac{h^2}{2}\psi''(x) + \frac{h^3}{6}\psi'''(x) + \frac{h^4}{24}\psi''''(x) + \dots, \\ \psi(x-h) &= \psi(x) - h\psi'(x) + \frac{h^2}{2}\psi''(x) - \frac{h^3}{6}\psi'''(x) + \frac{h^4}{24}\psi''''(x) + \dots. \end{aligned}$$

Für die Summe  $\psi(x+h) + \psi(x-h)$  ergibt sich

$$\psi(x+h) + \psi(x-h) = 2\psi(x) + h^2\psi''(x) + \frac{h^4}{12}\psi''''(x) + O(h^6)$$

und somit

$$\psi(x+h) = -\psi(x-h) + 2\psi(x) + h^2\psi''(x) + \frac{h^4}{12}\psi''''(x) + O(h^6). \quad (3.3)$$

Auffällig ist hierbei, dass die Terme mit  $\psi'(x)$  und  $\psi'''(x)$  wegfallen. Da  $\psi''(x)$  aus Gleichung (3.2) bekannt ist, muss nur noch ein Ausdruck für  $\psi''''(x)$  gefunden werden. Gleichung (3.3) liefert

$$\psi''(x) = \frac{\psi(x+h) - 2\psi(x) + \psi(x-h)}{h^2} - \frac{h^2}{12}\psi''''(x) + O(h^4). \quad (3.4)$$

<sup>7</sup>Für derartige Wege zur Erschließung der SCHRÖDINGER-Gleichung sei auf nahezu alle Lehrbücher der Quantenmechanik verwiesen, z.B. [6] S. 15f.

<sup>8</sup>In einer früheren Version des Programms wurde die SCHRÖDINGER-Gleichung (3.1) mit der RUNGE-KUTTA-Methode 5. Ordnung gelöst. Die Ausgaben waren aber die Genauigkeit betreffend leider nicht zufriedenstellend.

<sup>9</sup> $h$  ist hier nicht das PLANCKsche Wirkungsquantum, sondern die Schrittweite.

Durch die Zweipunkte-Differenzformel für die zweite Ableitung<sup>10</sup> ergibt sich

$$\psi''(x) = \frac{\psi(x+h) - 2\psi(x) + \psi(x-h)}{h^2} + O(h^2). \quad (3.5)$$

Da in Gleichung (3.3) der Term mit  $\psi''''(x)$  einen Faktor  $h^4$  enthält, erhält man mit Gleichung (3.5), deren Fehlerordnung  $h^2$  ist, insgesamt einen Fehler von der Ordnung  $h^6$ , was die vorherige Fehlerordnung nicht verschlechtert. Aus den Gleichungen (3.2) und (3.5) folgt

$$\begin{aligned} \psi''''(x) &= \frac{d^2}{dx^2} \left( -F(x)\psi(x) \right) \\ &= - \frac{F(x+h)\psi(x+h) - 2F(x)\psi(x) + F(x-h)\psi(x-h)}{h^2} + O(h^2). \end{aligned} \quad (3.6)$$

Durch Einsetzen der erhaltenen Ergebnisse in Gleichung (3.3) ergibt sich die zweigliedrige Iteration bzw. Rekursion

$$\psi(x+h) = \frac{\psi(x)[2 - \frac{5h^2}{6}F(x)] - \psi(x-h)[1 + \frac{h^2}{12}F(x-h)]}{1 + \frac{h^2}{12}F(x+h)} \quad (3.7)$$

Diese Formel lässt sich nun als Rekursion (Wiederaufruf) oder Iteration (Schleife) realisieren. Wegen der wesentlich höheren Effizienz einer Iteration gegenüber einer Rekursion wird in dem Programm eine Iteration verwendet.

### 3.1.2 Numerische Bestimmung der Eigenwerte

Wir haben jetzt also mit dem NUMEROV-Algorithmus einen Algorithmus gefunden, der es ermöglicht, die Wellenfunktion  $\psi(x)$  für eine beliebige Energie  $E$  und ein beliebiges Potential  $V(x)$  zu bestimmen. Die erhaltene Wellenfunktion  $\psi(x)$  genügt der Randbedingung  $\psi(\pm x_r) = 0$  jedoch meistens nur zur Hälfte. Je nach Wahl der Startwerte geht entweder  $\psi(-x_r)$  oder  $\psi(x_r)$  gegen  $\pm\infty$ . Die Wellenfunktion  $\psi(x)$  genügt nur dann vollständig der Randbedingung  $\psi(\pm x_r) = 0$ , wenn es sich bei der gewählten Energie  $E$  um einen Eigenwert  $E_n$  der Energie handelt. Das Problem, diese Eigenwerte zu finden, wird in der Literatur als „Two Point Boundary Value Problem“ bezeichnet. Wegen der hohen Geschwindigkeit des NUMEROV-Algorithmus eignet sich für das Auffinden der Energie-Eigenwerte der SCHRÖDINGER-Gleichung besonders die *Shooting-Methode*<sup>11</sup>.

Die Funktionsweise der Shooting-Methode ist wie folgt. Wenn die Startwerte an der unteren Grenze der Wellenfunktion gewählt wurden, also  $\psi(-x_r) = 0$  und  $\psi(-x_r+h) =$  beliebig, muss die Energie  $E$  so lange „ausprobiert“ werden, d.h. es müssen so viele „Probeschüsse“ abgefeuert werden, bis  $\psi(x)$  für große  $x$  asymptotisch gegen 0 geht. Bei einem Fehlschuss verschwindet  $\psi(x)$  für große  $x$  nach  $+\infty$  oder  $-\infty$ . Betrachtet man nun  $\psi(x)$  für große  $x$  bei verschiedenen Energien  $E$ , so fällt auf, dass um einen Energie-Eigenwert  $E_n$  ein Vorzeichenwechsel in  $\psi(x)$  für große  $x$  auftritt. Da dieser Vorzeichenwechsel gleichzeitig eine Veränderung der Knotenzahl  $n$  von  $\psi(x)$  bedeutet, lässt sich durch Abzählen der Vorzeichenwechsel in  $\psi(x)$  zu jedem Versuchswert  $E$  die Knotenzahl  $n$  feststellen. Nach dem sogenannten Knotensatz steigt nun mit der Anzahl der Knoten der Wellenfunktion  $\psi(x)$  die Energie  $E$ . Jede Eigenfunktion  $\psi_n(x)$  besitzt genau *einen* Knoten mehr als ihre vorhergehende Eigenfunktion  $\psi_{n-1}(x)$ . Demnach muss zunächst nach zwei Energie-Werten  $E$  gesucht<sup>12</sup> werden, deren Knotenzahlen sich um genau 1 unterscheiden. Zwischen diesen beiden Energie-Werten befindet sich jetzt genau *ein* Energie-Eigenwert  $E_n$ , der durch das Bisektionsverfahren beliebig genau angenähert werden kann. Durch wiederholtes Anwenden dieser Methode lassen sich alle gewünschten Energie-Eigenwerte  $E_n$  finden.

<sup>10</sup>Siehe zum Beispiel STÖCKER, HORST: *Taschenbuch mathematischer Formeln und moderner Verfahren*. Frankfurt am Main, 1992. S. 433.

<sup>11</sup>Siehe z.B. [4] S. 757ff.

<sup>12</sup>Beispielsweise mit dem Bisektionsverfahren.

### 3.1.3 Freies Teilchen

Um die Ausgaben des NUMEROV-Algorithmus und der Shooting-Methode prüfen zu können, soll hier auf den Spezialfall des freien Teilchens eingegangen werden, weil hier Wellenfunktionen und Energieeigenwerte analytisch lösbar sind.

Für ein freies Teilchen lautet das Potential  $V(x) = 0$  für alle  $x$ . Aus Gleichung (3.1) ergibt sich

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = E \psi(x). \quad (3.8)$$

Die Gesamtenergie  $E$  wird zu

$$E = V + E_{kin} = E_{kin} = \frac{p^2}{2m},$$

wobei  $m$  die Masse und  $p$  den Impuls des Teilchens darstellt. Unter Annahme von  $p = \hbar k$  in allen Punkten  $x$  erhält man mit  $k$  als Wellenzahl

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (3.9)$$

Aus Gleichung (3.8) folgt somit

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + k^2 \psi(x) = 0. \quad (3.10)$$

Die Lösungen dieser Gleichung sind  $e^{ikx}$  und  $e^{-ikx}$ . Beachtenswerterweise erfüllen diese Lösungen nicht die Normierungsbedingung (2.2), weil

$$|\psi(x)|^2 = \psi^*(x)\psi(x) = e^{-ikx} \cdot e^{ikx} = 1 \quad (3.11)$$

für alle  $x$  gilt. Die Wahrscheinlichkeit, dass sich das Teilchen im Punkt  $x$  befindet, ist für alle  $x$  gleich, nämlich 1. D.h. der Ort des Teilchens ist völlig unbestimmt, also  $\Delta x \rightarrow \infty$ . Wegen der HEISENBERGSchen Unschärferelation (2.3) muss der Impuls  $p$  nun exakt bestimmbar sein, also  $\Delta p \rightarrow 0$ . Dies stimmt mit der in Gleichung (3.9) gemachten Bedingung  $p = \hbar k$  überein.

Dennoch gibt es einige Möglichkeiten, die Normierungsbedingung (2.2) trotz Gleichung (3.11) zu erfüllen. Eine Lösungsmöglichkeit des Problems ist die von DIRAC in [1] S. 58ff. eingeführte  $\delta$ -Funktion:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx = 1$$

$$\delta(x) = 0 \quad \text{für } x \neq 0. \quad (3.12)$$

Da die  $\delta$ -Funktion jedoch keine wirkliche mathematische *Funktion* ist<sup>13</sup>, ist es nicht abwegig auf eine andere Lösung des Problems (3.11) zurückzugreifen. Um der Normierungsbedingung (2.2) zu genügen, wird eine Linearkombination der beiden Lösungen  $e^{ikx}$  und  $e^{-ikx}$  gebildet:

$$\psi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}, \quad (3.13)$$

wobei  $A$  und  $B$  aus den jeweiligen Randbedingungen bestimmt werden müssen. Damit nun in den Programmen immer bestimmte Randbedingungen vorhanden sind, wird das vom Benutzer zu bestimmende Potential in ein hohes umgebendes äußeres Potential, also in einen Potentialkasten, gesetzt. Folglich ist das Teilchen jetzt nicht mehr völlig, sondern nur noch in einem bestimmten Bereich frei. Auf Grund des angesprochenen Problems  $\Delta x \rightarrow \infty$  bei einem völlig freien Teilchen, ist diese Einschränkung jedoch unumgänglich<sup>14</sup>.

<sup>13</sup>Bei einer Funktion muss jedem  $x$ -Wert ein bestimmter  $y$ -Wert zugeordnet sein.

<sup>14</sup>Beim NUMEROV-Algorithmus, siehe Abschnitt 3.1.1, war diese Einschränkung ebenfalls erforderlich.

### 3.1.4 Teilchen im Potentialkasten

Wenn man das freie Teilchen in ein Potential mit zwei unendlich hohen Wänden an den Rändern setzt, d.h.

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } 0 \leq x \leq a \\ \infty & \text{sonst,} \end{cases} \quad (3.14)$$

lassen sich aus der Randbedingung  $\psi(0) = \psi(a) = 0$  die Koeffizienten  $A$  und  $B$  in Gleichung (3.13) bestimmen. Die normierte Wellenfunktion  $\psi_n(x)$  lautet dann<sup>15</sup>

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi}{a} x \quad (n = 1, 2, 3, \dots). \quad (3.15)$$

Diese Lösung ist mit der Ausgabe des NUMEROV-Algorithmus, siehe Abb. 1, sicherlich gut vereinbar. Für die Gesamtenergie  $E$  des Teilchens folgt aus Gleichung (3.9)

$$E = E_{kin} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \equiv E_n. \quad (3.16)$$

Wegen  $n = 1, 2, 3, \dots$  erhält man für die Energie  $E_n$  nur ganz bestimmte Werte  $E_1, 4E_1, 9E_1, \dots$ . Man sagt auch, die Energie ist *quantisiert* oder *diskret*<sup>16</sup>. Diese Quantisierung der Energie  $E$  lässt sich dadurch erklären, dass nur bestimmte Werte  $E_n$  die SCHRÖDINGER-Gleichung

$$H|E_n\rangle = E_n|E_n\rangle$$

erfüllen, so dass Eigenzustände  $|E_n\rangle$  existieren. Würde die Zahl bzw. der HAMILTON-Operator  $H$  nämlich die Richtung des  $|E_n\rangle$ -Eigenkets verändern, so würde es sich bei  $|E_n\rangle$  nicht mehr um Eigenzustände handeln (vgl. Definition von „Eigenzustand“, Abschnitt 2.1 und 2.4).

### 3.1.5 Harmonischer Oszillator

Ein Teilchen in einem Potential  $V(x) = \frac{1}{2}kx^2$ , d.h. im Potential eines harmonischen Oszillators, stellt auf Grund seiner bedeutenden Rolle in der Molekülphysik ein sehr wichtiges Beispiel dar. Aus der SCHRÖDINGER-Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + \frac{1}{2}kx^2 \psi(x) = E \psi(x) \quad (3.17)$$

lässt sich mit  $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$ ,  $\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x$  und  $n = 1, 2, 3, \dots$  die normierte Wellenfunktion  $\psi_n(x)$  herleiten<sup>17</sup>.

$$\psi_n(\xi) = (n! 2^n \sqrt{\pi})^{-1/2} H_n(\xi) e^{-\xi^2/2}, \quad (3.18)$$

wenn  $H_n(\xi)$  die Hermite-Polynome  $n$ -ten Grades darstellen. Für die Energie-Eigenwerte  $E_n$  erhält man

$$E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right). \quad (3.19)$$

Wegen  $n = 1, 2, 3, \dots$  sind die  $E_n$  also äquidistant. Genau selbiges Ergebnis ist auch in Abb. 2 als Ausgabe des NUMEROV-Algorithmus und der Shooting-Methode zu sehen.

Bemerkenswert ist, dass die minimale mögliche Energie  $E_0$ , die auch *Nullpunktenergie* genannt wird und deren zugehöriger Eigenzustand als *Grundzustand* bezeichnet wird, nicht wie im klassischen Fall 0, sondern  $\frac{1}{2}\hbar\omega$  ist (vgl. Abb. 2). Dieses zunächst verwirrende Ergebnis

<sup>15</sup>Die Herleitung befindet sich in nahezu jedem Lehrbuch zur Quantenmechanik, z.B. [2] oder [6].

<sup>16</sup>Im Gegensatz hierzu ist die Energie des freien Teilchens (siehe Abschnitt 3.1.3) *kontinuierlich*.

<sup>17</sup>Auch hier befinden sich die Herleitungen in nahezu allen Lehrbüchern zur Quantenmechanik.



lässt sich mit der HEISENBERGSchen Unschärferelation (2.3) begründen. Die klassische Minimalenergie ist 0 und befindet sich an dem Punkt  $x$ , an dem sowohl die potentielle Energie  $V$ , als auch die kinetische Energie  $E_{kin}$  0 ist. In diesem Punkt  $x$  sind also der Ort  $x$  (der Punkt an dem  $V(x) = 0$ ) und der Impuls  $p = 0$  (wegen  $E_{kin} = 0$ ) gleichzeitig und mit Sicherheit bekannt, also  $\Delta x = \Delta p = 0$ . Dies widerspricht jedoch der HEISENBERGSchen Unschärferelation, denn  $\Delta x \Delta p \geq \hbar/2 \neq 0$ . Da nur dann von einem Eigenzustand gesprochen wird, wenn dieser Zustand gegenüber allen geltenden Gesetzen – also auch gegenüber der HEISENBERGSchen Unschärferelation – konsistent ist, kann die Energie  $E = V(x) = 0$  keinen Energie-Eigenwert darstellen. Hieraus folgt, dass die kleinste messbare Energie, d.h. die Nullpunktenergie, größer als 0 sein muss.

Ein weiterer sehr interessanter Effekt lässt sich an der Wellenfunktion in Abb. 2 festmachen. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit  $|\psi(x)|^2$  ist nämlich auch dann noch von 0 verschieden, wenn die Gesamtenergie  $E$  kleiner ist als die potentielle Energie  $V(x)$ . Dieses zunächst sehr verblüffende Ergebnis, das sich nicht mit der klassischen Mechanik vereinen lässt, wird von der Wellennatur der SCHRÖDINGER-Gleichung hervorgerufen. Auf ähnliche Art und Weise kommt es bei Potentialbarrieren zum sogenannten Tunnel-Effekt, siehe Abschnitt 3.2.3.

## 3.2 Eindimensionaler zeitabhängiger Fall

### 3.2.1 Algorithmus

Die Lösung der eindimensionalen zeitabhängigen SCHRÖDINGER-Gleichung ist recht kompliziert. Es soll hier nur ein einfacher Algorithmus beschrieben<sup>18</sup> werden, der von *Goldberg*, *Schey* und *Schwartz* vorgeschlagen wurde. Die gesuchte Wellenfunktion  $\Psi(x, t)$  wird in einem Gitter dargestellt:

$$\begin{aligned} x &= j\epsilon, \quad j = 0, 1, \dots, J, & \Psi(x, t) &\cong \Psi_j^n. \\ t &= n\delta, \quad n = 0, 1, \dots, \end{aligned} \quad (3.20)$$

Gesucht ist nun eine Iteration, mit der ausgehend vom Startverlauf  $\Psi_j^0$  und vom zeitabhängigen Potential  $V_j^n$  oder zeitunabhängigen Potential  $V_j$  die gesamte Wellenfunktion  $\Psi_j^n$  gefunden werden kann:

$$\left. \begin{aligned} 1. \quad e_1 &= 2 + 2\epsilon^2 V_1 - \frac{4i\epsilon^2}{\delta}, \\ e_j &= 2 + 2\epsilon^2 V_j - \frac{4i\epsilon^2}{\delta} - \frac{1}{e_{j-1}} \quad \text{für } j = 2, 3, \dots, J. \\ 2. \quad \Omega_j^n &= -\Psi_{j+1}^n + \left( \frac{4i\epsilon^2}{\delta} + 2\epsilon^2 V_j + 2 \right) \Psi_j^n - \Psi_{j-1}^n \quad \text{für } j = 0, 1, \dots, J. \\ 3. \quad f_1^n &= \Omega_1^n \quad \text{und} \quad f_j^n = \Omega_j^n + \frac{f_{j-1}^n}{e_{j-1}} \quad \text{für } j = 2, 3, \dots, J. \\ 4. \quad \Psi_{J-1}^{n+1} &= -\frac{f_{J-1}^n}{e_{J-1}}, \\ \Psi_j^{n+1} &= \frac{\Psi_{j+1}^{n+1} - f_j^n}{e_j} \quad \text{für } j = J-2, J-3, \dots, 1. \end{aligned} \right| \quad n++$$

Da es sich bei der Wellenfunktion  $\Psi_j^n$  bzw.  $\Psi(x, t)$  um eine komplexe Funktion handelt, ist es sinnvoll über die Darstellung einer solchen komplexen Funktion nachzudenken. Eine sehr interessante Diskussion zu diesem Thema befindet sich in [7] Kapitel 1. Neben der getrennten Darstellung von Real- und Imaginärteil wird dort v.a. auf eine Methode eingegangen, in welcher jeder Phase einer komplexen Zahl eine bestimmte Farbe zugeordnet wird und gleichzeitig die Sättigung mit wachsendem Betrag der komplexen Zahl abnimmt, vgl. Abb. 3. Dieser Farbcode wurde in das Programm implementiert, so dass nun der Betrag  $|\Psi(x, t)|$  der komplexen

<sup>18</sup>Für eine Herleitung sei auf [5] S. 103ff verwiesen.

Wellenfunktion auf die  $y$ -Achse angetragen und zusätzlich ein vertikaler Balken mit der Farbe der jeweiligen Phase von  $y = 0$  nach  $y = |\Psi(x, t)|$  gezeichnet wird.

Die zeitliche Entwicklung der Wellenfunktion  $\Psi(x, t)$  wird in dem Programm sowohl als Animation, in der die Zeit  $t$  inkrementiert wird, als auch als zweidimensionale Funktion  $\Psi(x, t)$  in einem dreidimensionalen Koordinatensystem dargestellt. Die Animation dient dazu, anschaulich zu zeigen, dass sich die zeitabhängige Wellenfunktion bewegt und dass sie auf bestimmte Potentialgegebenheiten sofort reagiert. Die Darstellung der Wellenfunktion in einem dreidimensionalen Koordinatensystem mit Zeitachse lässt zusätzlich sehr genaue Untersuchungen des Verhaltens und der Reaktionen der Wellenfunktion zu, da es möglich ist, an jede beliebige Stelle im zeitlichen Verlauf heranzuzoomen, um den Verlauf der Wellenfunktion genau zu betrachten.

### 3.2.2 Potentialkasten

Betrachten wir zunächst wieder den Potentialkasten, vgl. Abschnitt 3.1.4. Die Anfangswellenfunktion  $\Psi(x, 0)$  (Abb. 4a) sei ein Gaußsches Wellenpaket

$$\Psi(x, 0) = \exp \left[ ikx - \frac{(x - x_0)^2}{2b_0^2} \right], \quad (3.21)$$

wobei  $k$  für die Wellenzahl,  $x_0$  für die Anfangsposition und  $b_0$  für die Anfangsbreite steht. Inkrementiert man nun die Zeit  $t$ , so ist zu beobachten, dass sich das Wellenpaket mit der Geschwindigkeit  $v = \hbar k/m$  zur Seite bewegt (Abb. 4b und Abb. 4e). Zudem ist an dem zeitlichen Verlauf ersichtlich, dass sich die Breite des Wellenpakets – wie in den Lehrbüchern zur Quantenmechanik beschrieben – mit wachsender Zeit vergrößert (ebenfalls Abb. 4b und Abb. 4e). Auf Grund der Randbedingung  $\Psi(0, t) = \Psi(a, t) = 0$  an den Wänden des Potentialkastens wird das Wellenpaket an den Randpunkten  $x = 0$  und  $x = a$  wieder nach innen reflektiert (Abb. 4c und Abb. 4e). Diese Reflexionen an beiden Wänden führen zunächst zu wilden Interferenzen, bis sich nach einer Zeit  $T$  wieder das Anfangswellenpaket (3.21) herstellt (Abb. 4d). Die wilden Interferenzen des Wellenpakets interferieren also periodisch nach einer Zeit  $T$  destruktiv.<sup>19</sup> Bereits zu den Zeitpunkten  $T/2$  oder  $T/4$  sind ebenfalls einfache, d.h. nicht wild interferierende, Wellenfunktionen zu beobachten.

### 3.2.3 Potentialbarriere und Tunneleffekt

Trifft ein Wellenpaket (3.21) auf eine Potentialbarriere

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{für } |x| < a \\ 0 & \text{sonst,} \end{cases} \quad (3.22)$$

so zeigt sich, dass sich das Wellenpaket in einen nach links weiterlaufenden reflektierten und einen nach rechts weiterlaufenden transmittierten Teil aufspaltet (Abb. 5a und Abb. 5b). Um nun den Reflexionskoeffizienten  $R$  und den Transmissionskoeffizienten  $D$  untersuchen zu können, wurde ein kleiner Algorithmus in das Programm implementiert, der es ermöglicht,  $R$  oder  $D$  in Abhängigkeit von beispielsweise Teilchenenergie  $E$ , Barrierenhöhe  $V_0$  oder Barrierenbreite  $a$  auszugeben. In Abb. 5c ist die Funktion  $D(E, V_0)$  gezeigt. Wie zu sehen ist, nimmt der Transmissionskoeffizient  $D$  wie erwartet bei steigender Höhe  $V_0$  etwa linear ab, während bei steigender Energie der Transmissionskoeffizient  $D$  näherungsweise wie die Wurzelfunktion zunimmt.

<sup>19</sup>Eine ausführliche analytische Erklärung dieser Periodizität befindet sich in [3] S. 146ff.

Interessant ist nun, dass der Transmissionskoeffizient  $D$  selbst dann noch größer 0 ist, wenn das Wellenpaket mit einer Energie  $E < V_0$  auf die Barriere zuläuft! D.h. die Wahrscheinlichkeit, dass das Teilchen die Barriere bei  $E < V_0$  durchqueren kann, ist größer 0 — das Teilchen kann die Potentialbarriere also mit einer von 0 verschiedenen Wahrscheinlichkeit *tunneln*. Dieser sogenannte *Tunnel-Effekt* findet bei der Beschreibung vieler realer Vorgänge, beispielsweise des  $\alpha$ -Zerfalls oder der Kaltmission, Verwendung.<sup>20</sup>

### 3.2.4 Harmonischer Oszillator

Wie an den Abbildungen 6a bis 6c zu sehen ist, oszilliert ein Wellenpaket (3.21) im Potential eines harmonischen Oszillators (vgl. Abschnitt 3.1.5) immer wiederkehrend von links nach rechts und von rechts nach links. Es zeigt sich also, dass die Bewegung des Teilchens in diesem Fall der klassischen Bewegung sehr nahe kommt.

Ein interessanter Effekt tritt auf, wenn der Betrag der Anfangswellenfunktion  $|\Psi(x, 0)|$  einer Eigenwellenfunktion  $\psi_n(x)$ , vgl. Abschnitt 3.1, gleich ist. Dann nämlich ist zu beobachten, dass  $|\Psi(x, t)|$  zu jeder Zeit  $t$  unverändert groß ist und sich lediglich die Phase von  $\Psi(x, t)$  ändert! Diese Besonderheit lässt sich mit Hilfe des DIRAC-Modells, vgl. Abschnitt 2.4, erklären. Weil die zu  $\psi_n(x)$  gehörigen Energie-Eigenwerte  $E_n$  alle Eigenwerte des HAMILTON-Operators darstellen, sind die Energiewerte  $E_n$  bzw. die Wellenfunktionen  $\psi_n(x)$  alle Werte, die wir messen können. Nehmen wir an, das Teilchen befinde sich zunächst in einem beliebigen Zustand, der durch beispielsweise ein Gaußsches Wellenpaket beschrieben wird. Das Teilchen bzw. dessen Wellenpaket wird sich so lange wie in den Abbildungen 6a bis 6c beschrieben bewegen, bis es durch die Störung einer Messung in einen – d.h. in den zum gemessenen Energie-Eigenwert  $E_n$  gehörigen – Eigenzustand  $|E_n\rangle$  „springt“ (Zitat [1] S. 36). Befindet sich das Teilchen in einem Eigenzustand  $|E_n\rangle$ , so bedeutet das, dass jede Messung der Energie den zu  $|E_n\rangle$  gehörigen Eigenwert  $E_n$  liefert. Wenn also ein Teilchen auf Grund einer Messung in einen Eigenzustand  $|E_n\rangle$  „gesprungen“ ist, dann wird jede weitere Messung immer denselben Energie-Eigenwert  $E_n$  liefern. Folglich handelt es sich bei  $|\Psi(x, 0)| = \psi_n(x)$  um einen *kohärenten Zustand*, d.h. bei fortlaufender Zeit  $t$  verändert sich lediglich die Phase, nicht aber der Betrag der Wellenfunktion.

**Abb. 1:** *Potentialkasten* (Abschnitt 3.1.4). Oben Potential mit Energie-Eigenwerten, unten Wellenfunktion.

**Abb. 2:** *Harmonischer Oszillator* (Abschnitt 3.1.5). Die Energie-Eigenwerte sind äquidistant, vgl. Gleichung (3.19).

**Abb. 3:** *Farbcode* für komplexe Zahlen (Abschnitt 3.2.1).

**Abb. 4a:** *Zeitlicher Verlauf* eines Wellenpakets im *Potentialkasten* (Abschnitt 3.2.2).

**Abb. 4b:** Das Wellenpaket zerfließt.

**Abb. 4c:** Reflexion an den Wänden.

**Abb. 4d:** Anfangszustand wiederhergestellt.

**Abb. 4e:**  $\Psi(x, t)$  als 3D-Plot. Die Ortsachse verläuft nach rechts, die Zeitachse nach hinten.

**Abb. 5a:** Wellenpaket im *Barrierepotential*. Aufspaltung in Reflexion und Transmission.

**Abb. 5b:** 3D-Plot von  $\Psi(x, t)$ . Die Ortsachse verläuft nach rechts, die Zeitachse nach hinten.

**Abb. 5c:** Funktion  $D(E, h)$ .

**Abb. 6a:** *Harmonischer Oszillator*. Wellenpaket auf ist auf der linken Seite.

**Abb. 6b:** Wellenpaket befindet sich rechts. Nun wird das Wellenpaket wieder nach links laufen, hierauf wieder nach rechts, usw... .

**Abb. 6c:** 3D-Plot von  $\Psi(x, t)$ . Die Ortsachse verläuft nach rechts, die Zeitachse nach hinten bzw. oben.

<sup>20</sup>Siehe beispielsweise [2] S. 98ff.

### 3.3 Dreidimensionaler zeitunabhängiger Fall

Die Lösung mehrdimensionaler stationärer Probleme gestaltet sich sehr schwierig. Analytische Lösungen existieren nur für Potentiale mit sehr hohen Symmetrieeigenschaften. Für *rotationssymmetrische* Potentiale  $V(\mathbf{r}) = V(r)$  lässt sich die SCHRÖDINGER-Gleichung

$$\underbrace{\left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(r)\right)}_H \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (3.23)$$

aber recht gut numerisch lösen.<sup>21</sup> Die Wellenfunktion  $\psi(\mathbf{r})$  setzt sich aus den Kugelflächenfunktionen  $Y_{l,m}(\Theta, \varphi)$ , die durch eine Rekursionsformel (vgl. [5] S. 43f) berechnet werden können, und der Radialwellenfunktion  $\psi_{rad_{n,l}}(r)$  zusammen

$$\psi(\mathbf{r}) = Y_{l,m}(\Theta, \varphi) \frac{\psi_{rad_{n,l}}(r)}{r}. \quad (3.24)$$

Mit der Skalierung  $\frac{\hbar^2}{m} = 1$  lässt sich  $\psi_{rad}(r)$  durch Reduktion von (3.23) auf ein eindimensionales Problem wieder mit dem NUMEROV-Algorithmus aus Abschnitt 3.1.1 lösen:

$$\frac{d^2}{dr^2} \psi_{rad}(r) + \underbrace{\left(2(E - V(r)) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right)}_{F(r)} \psi_{rad}(r) = 0. \quad (3.25)$$

Auf die Ausgaben dieser Methode kann auf Grund von Schwierigkeiten bei der Implementierung zum jetzigen Zeitpunkt leider noch nicht eingegangen werden. Bis Mitte Mai sollte eine Behebung des Problems jedoch gut möglich sein.

## 4 Implementierung

In diesem Abschnitt soll nun auf die konkrete Implementierung der in Abschnitt 3 besprochenen Verfahren eingegangen werden.

### 4.1 Wahl der Programmiersprache

Die Programme wurden in der Programmiersprache *Java*, die mit C++ die zur Zeit weltweit am weitesten verbreitete Programmiersprache ist, realisiert. Es ist der Trend zu beobachten, dass immer mehr Menschen Java lernen und dass Java C++ als am häufigsten verwendete Programmiersprache womöglich bald ablösen wird<sup>22</sup>. Die wichtigsten Vorteile von Java sind:

- Die Sprache ist äußerst objektorientiert aufgebaut. Der Compiler „zwingt“ den Entwickler nahezu zu objektorientierter Programmierung. Objektorientierte Programmierung hat sich in den letzten Jahren als äußerst erfolgreich erwiesen.
- Die Programme sind plattformunabhängig.
- Es kann auf eine sehr umfangreiche Klassenbibliothek zurückgegriffen werden, die auf jedem System, auf dem Java installiert ist, verfügbar ist.
- Es lassen sich ohne allzu großen Aufwand anspruchsvolle interaktive grafische Benutzeroberflächen erstellen.

Konkret wurden sogenannte *Java Applets* programmiert, deren wichtigster Vorteil darin besteht, dass sie direkt in Webseiten integriert werden können, wodurch eine Installation entfällt.

<sup>21</sup>Eine genaue Beschreibung befindet sich in [5] S. 50ff.

<sup>22</sup>Manche behaupten, dies sei schon heute der Fall.

## 4.2 Verwendete Pakete

Um die Programmierung der Applets zu verkürzen, wurde auf einige Pakete zurückgegriffen. So werden die Ausgaben dreidimensionaler Funktionen, welche ja in den Abschnitten 3.2 und 3.3 benötigt werden, von den Paketen `Java3D`<sup>23</sup> und `VisAD`<sup>24</sup> übernommen. Diese inzwischen recht weit entwickelten Pakete zeichnen sich v.a. durch Plattformunabhängigkeit und durch sehr hohe Flexibilität aus. So können die dreidimensionalen Ausgaben in Echtzeit vom Benutzer berechnet werden. Sehr nützlich ist auch, dass Zoomen, Drehen und Verschieben (jeweils direkt mit der Maus) automatisch unterstützt wird. Die Abbildungen 4e, 5b und 6c stellen einige von `Java3D` und `VisAD` erzeugten Beispiele dar.

Zusätzlich wird ein Paket zum Rechnen mit komplexen Zahlen für die in den Abschnitten 3.2.1 und 3.3<sup>25</sup> beschriebenen Algorithmen benötigt. Hierzu wurde auf das Paket `JavaSci`<sup>26</sup> zurückgegriffen, weil es eine sehr umfangreiche Auswahl an weiteren mathematischen Hilfsmitteln enthält, die evtl. für eine Weiterentwicklung des Projektes notwendig sein könnten.

## 4.3 Parametereingabe und Benutzerführung

Bei der Implementierung der Programme wurde auf sehr hohe Flexibilität Wert gelegt, d.h. nahezu alle für die Berechnungen benötigten Parameter sind vom Anwender in Echtzeit regelbar. Damit das Programm dennoch nicht unübersichtlich wird, wurde es in eine sehr anwenderfreundliche grafische Benutzeroberfläche von Paul Falstad mit dessen freundlicher Genehmigung eingebettet. Die Parameter lassen sich somit mit Schiebereglern, Eingabefeldern oder Drop-Down-Listen steuern. Zusätzlich können viele Parameter direkt in der Anzeigefläche des Programms mit der Maus – z.B. durch Ziehen oder Klicken – bestimmt werden.

Für das Programm ist v.a. auch ein didaktischer Nutzen angedacht. Hilfetexte sollen nicht wie meist üblich ausschließlich in separaten Fenstern oder Dateien abrufbar sein, sondern sie sollen vielmehr direkt während des Ausführens des Programms angezeigt werden. Hierbei wird nicht eine große Menge Text auf ein Mal angezeigt, sondern es werden Textabschnitte aus nur wenigen Zeilen durchlaufen. Diese kleinen Textstücke sollen den Anwender Schritt für Schritt durch das Programm führen und die physikalischen Hintergründe an den Kenntnisstand des Anwenders angepasst erläutern. Sehr viel Wert soll dabei auf eine hohe Interaktivität gelegt werden, beispielsweise durch eine große Auswahl an verschiedenen Touren, die gewählt werden können, oder durch ausführliche Anleitungen, mit welchen der Benutzer verschiedene Situationen und Effekte *selbst* „zusammenbauen“ kann. Um so beispielsweise zu zeigen, dass ein Teil eines Wellenpakets mit  $E < V_0$  (vgl. Abschnitt 3.2.3) die Potentialbarriere überwinden kann, wird der Anwender, z.B. ein Schüler, nicht einfach vor einen statischen Ausdruck des Transmissionskoeffizienten gesetzt, sondern ihm wird eine step-by-step Anleitung angeboten, nach der er die Potentialbarriere selbst zeichnen kann, das Wellenpaket selbst bestimmen und auf die Barriere losschicken kann und die Bewegung *seines* Wellenpakets auf *seiner* Potentialbarriere selbst beobachten kann.

# 5 Entwicklungsstatus und Download

## Entwicklungsstatus

Zum jetzigen Zeitpunkt, d.h. Mitte April 2003, sind die in den obigen Abschnitten beschriebenen Programme erst als Beta-Versionen realisiert. In den nächsten Wochen sollen die Pro-

<sup>23</sup>SUN MICROSYSTEMS, INC.: *Java3D*. <http://java.sun.com/products/java-media/3D/>.

<sup>24</sup>HIBBARD, BILL ET AL.: *VisAD Java component library for interactive analysis and visualization of numerical data*. <http://www.ssec.wisc.edu/~billh/visad.html>

<sup>25</sup>Die Komplexität wird hier von den Kugelflächenfunktionen  $Y_{l,m}(\Theta, \varphi)$ , siehe [5] S. 41ff., verursacht.

<sup>26</sup>HALE, MARK ET AL.: *JavaSci – A science API for Java*. <http://jsci.sourceforge.net/>.

gramme aber so schnell wie möglich fertiggestellt werden.

## Download

Die Programme können von der Internetseite <http://javapsi.sourceforge.net/> heruntergeladen werden. Diese Seite enthält außerdem noch weitere Informationen zum aktuellen Entwicklungsstatus, sowie eventuell Screenshots der aktuellsten Versionen.

## 6 Ausblick

Zur Zeit konzentriert sich die Arbeit darauf, die in Abschnitt 3 beschriebenen Verfahren vollständig in Java Applets zu verwirklichen. Später wäre es beispielsweise möglich, verschiedene Ansätze zur physikalischen Funktionsweise eines Quantencomputers<sup>27</sup> mit Java Applets zu visualisieren. Zwar existieren schon Programme, die Quantencomputer *simulieren*, aber Programme, die Quantencomputer *visualisieren*, finden sich kaum. Während Simulationen von Quantencomputern dem Testen von Algorithmen für Quantencomputer dienen, ließe sich mit Visualisierungen von Quantencomputern unter Umständen die physikalische Funktionsweise optimieren. Genau hierin liegt die Herausforderung, denn Algorithmen für Quantencomputer existieren schon seit geraumer Zeit — die praktische Verwirklichung eines Quantencomputers steckt jedoch noch in den Kinderschuhen.

Eine weiterer Gedanke ist, das in Abschnitt 2.4 vorgestellte DIRAC-Modell zu visualisieren. Eine derartige Veranschaulichung am Computer existiert meines Wissens noch nicht. Das größte Problem bei der Darstellung des DIRAC-Modells stellt wahrscheinlich der HILBERT-Raum dar, den man sich ja nicht vorstellen kann. Trotzdem wäre es sicher sehr interessant, Möglichkeiten zu finden, mit denen das DIRAC-Modell visualisiert werden könnte.

Langfristig ist auch eine Behandlung von Mehrteilchensystemen denkbar. Mit statistischen Hilfsmitteln lassen sich Wechselwirkungen zwischen mehreren Teilchen nämlich recht gut am Computer simulieren.

## 7 Danksagung

Mein Dank gilt allen, die mich bei diesem Projekt unterstützt haben. Ganz besonders bin ich Paul Falstad, Andreas Greiner, Martin Kamp, Wolfgang Kinzel, Siegfried Krewald, Thomas Michelitsch und Nathan Urban für die interessanten und hilfreichen Erklärungen und Diskussionen dankbar. Auch dem Rotary-Club Nürnberg-Erlangen sei für das Computer-Sponsoring gedankt, ohne das dieses Projekt nicht möglich gewesen wäre. Nicht zuletzt danke ich Christoph Groth für den Tipp, Linux, Emacs, und  $\text{\LaTeX}$  zu verwenden, sowie Michael Besthorn, Ulrike Burkard und Martin Kamp für das Korrekturlesen.

## Literatur

- [1] DIRAC, PAUL A. M.: *The Principles of Quantum Mechanics*. Oxford, 1988.
- [2] GASIOROWICZ, STEPHEN: *Quantenphysik*. München, 1989.
- [3] KINZEL, WOLFGANG ET AL.: *Physics by Computer*. Heidelberg, 1998.
- [4] PRESS, WILLIAM H. ET AL.: *Numerical Recipes in C*. Cambridge, 2002.

---

<sup>27</sup>Sehr interessant zu diesem Thema ist Kapitel 7 (S. 277ff) in NIELSEN, MICHAEL A.: *Quantum computation and quantum information*. Cambridge, 2001.

- [5] SCHNAKENBERG, JÜRGEN: *Algorithmen in der Quantentheorie und Statistischen Physik*. Ulmen, 1995.
- [6] SCHWABL, FRANZ: *Quantenmechanik*. Berlin, 2002.
- [7] THALLER, BERND: *Visual Quantum Mechanics*. New York, 2000.