

Jens-Peer Kuska

# Mathematica® und C in der modernen Theoretischen Physik

mit Schwerpunkt Quantenmechanik

Mit 97 Abbildungen, 12 Tabellen, 38 Übungen und einer CD-ROM mit vollständigen Quelltexten und kompilierten Programmen für Windows, Linux und Solaris (meist als Mathlink-Version für Mathematica und als Mathematica-unabhängige Version; C-Programme entsprechend dem ANSI-Standard, getestet mit Borland C 5.01 für Windows, Borland C 2.0 für OS/2, Watcom C 10.6, GNU C für OS/2 und Linux sowie dem Spareworks C-Compiler von SUN)



Springer

# Inhaltsverzeichnis

<b>1. Klassische Mechanik</b>	1
1.1 Lagrange-Gleichungen 2. Art	1
1.2 Hamilton-Gleichungen	16
Übungen	25
1.3 Numerische Lösung von Anfangswertproblemen	25
1.3.1 Diskretisierung	26
Übungen	33
1.3.2 Stabilität	34
Übung	36
1.3.3 Schrittweitensteuerung	37
Übung	38
1.3.4 Numerische Verfahren zur Lösung der Bewegungsgleichung Hamiltonscher Systeme	38
Übungen	60
1.3.5 Poincare-Schnitte	60
<b>2. Beispiele mechanischer Systeme</b>	71
2.1 Parametrisch erregtes Pendel	71
Übungen	82
2.2 Schwingende Atwood Maschine	82
2.2.1 Die gewöhnliche Atwood Maschine	88
2.2.2 Der integrable Fall für $\beta = 3$	90
2.2.3 Numerische Lösung der Bewegungsgleichungen	105
2.3 Zyklische Toda-Kette	114
2.3.1 Verbindung zum Henon-Heiles System	120
Übungen	121
2.4 Henon-Heiles-System	122
2.4.1 Das Potential des Henon-Heiles Systems	123
2.4.2 Die Bewegungsgleichungen	126
2.4.3 Numerische Lösung der Bewegungsgleichungen	127
2.4.4 Poincare-Schnitte des Henon-Heiles-Systems	135
Übungen	143
<b>3. Elektrostatik</b>	145
3.1 Äquipotentialflächen in drei Dimensionen	145
3.2 Feldlinien	166

<b>4. Quantenmechanik</b> .....	183
4.1 Bohr-Sommerfeld-Quantisierung für Molekülschwingungen ...	185
4.2 Eindimensionaler harmonischer Oszillator .....	198
Übungen .....	204
4.3 Numerische Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung .	205
4.3.1 Die eindimensionale zeitabhängige Schrödingergleichung .....	206
4.3.2 Die zweidimensionale zeitabhängige Schrödingergleichung .....	226
Übungen .....	242
4.4 Statische Lösung der zweidimensionalen Schrödingergleichung	242
4.4.1 Gleichungen für die Entwicklung nach Hermite Polynomen .....	242
4.4.2 Mathematica-Funktionen .....	245
4.4.3 Eigenwerte und Eigenfunktionen des Henon-Heiles-SystemsHenon-Heiles-System .....	250
Übungen .....	256
4.5 Bewegung im Zentralfeld .....	257
4.5.1 Winkelabhängigkeit .....	260
4.5.2 Radiale Abhängigkeit .....	264
4.5.3 Dreidimensionaler harmonischer Oszillator in Kugelkoordinaten .....	265
Übungen .....	269
4.5.4 Coulomb-Potential .....	270
Übungen .....	300
4.6 Das Coulomb-Feld in parabolischen Koordinaten .....	300
Übungen .....	313
4.7 Quasiklassische Bewegung im Coulomb-Potential .....	317
Übungen .....	331
4.8 Approximation der Lösung der Thomas-Fermi Gleichung ....	332
4.8.1 Ableitung der Thomas-Fermi Gleichung .....	337
4.8.2 Asymptotische Entwicklung .....	341
4.8.3 Reihenentwicklung .....	343
4.8.4 Pade-Approximation .....	345
Übungen .....	348
<b>Anhang</b> .....	349
Installation der <i>Mathematica-Pakete</i> .....	349
Installation der Binärdateien .....	349
Fehlerbeseitigung .....	351
<b>Literatur</b> .....	353
<b>Sachverzeichnis</b> .....	357