

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 Anfangwertproblemen   | 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<br>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 |