n g z h

Naturforschende Gesellschaft in Zürich

Die Naturforschende Gesellschaft in Zürich überreicht

Nima Moshayedi

Neue Schule Zürich

den **Jugendpreis 2012**

für die Maturitätsarbeit

Numerische Auswertungen der zeitabhängigen Schrödingergleichung in einigen interessanten Potentialen

Prof. Dr. Martin Schwyzer
(Präsident)

Prof. Felix Stauffer
(Verantwortlicher Jugendpreis)

Naturforschende Gesellschaft in Zürich
www.ngzh.ch

Jugendpreis 2012 der Naturforschenden Gesellschaft in Zürich

Laudatio
für Nima Moshayedi

Numerische Auswertungen der zeitabhängigen Schrödingergleichung in einigen interessanten Potenzialen
Betreuer: Peter Senn, Raymond Angélil, Prasenjit Saha, Neue Schule Zürich

Die Bewegung von Elementarteilchen wie z.B. Elektronen lässt sich nicht wie diejenige kleiner Kügelchen beschreiben, indem die zeitliche Veränderung der Ortskoordinaten berechnet wird. Die sich in einem Atom befindenden Elektronen sind „verschmiert", man kann nur die Wahrscheinlichkeit angeben, mit der sie in einem bestimmten Raumvolumen beobachtet werden können. Diese Wahrscheinlichkeitsverteilung wird mathematisch beschrieben durch den Betrag des Quadrates einer Wellenfunktion, deren Werte an jeder Stelle komplexe Zahlen sind. Wie Wasser-, Schall- oder Radiowellen können sich Wellenfunktionen überlagern und sich dadurch verstärken oder sogar auslöschen. Die dynamische Gleichung, die die zeitliche Entwicklung der genannten Wellen beschreibt, ist bei Wasser- und Schallwellen das Newton'sche Bewegungsgesetz, bei Radiowellen sind die Maxwell'schen Grundgleichungen der Elektrodynamik und bei Wahrscheinlichkeitswellen ist es die Schrödingergleichung. Das Einzigartige der Schrödingergleichung ist, dass sie die zeitliche Entwicklung komplexwertiger Wahrscheinlichkeitswellen beschreibt, die sich z.B. im Falle eines Atoms mit N Eletronen in einem 3N-dimensionalen Raum befinden. Man kann sie also nur im einfachsten Fall des Wasserstoffatoms als 3-dimensionales Gebilde darstellen. All dies strapaziert die mathematischen Kenntnisse und die Vorstellungskraft der Physikstudenten, weshalb die Atomphysik meist erst ab dem 5. Semester gelehrt wird.

Nima Moshayedi liess sich dadurch nicht abschrecken und wollte möglichst klar verstehen, wie sich die Wellenfunktion benimmt. Er versuchte dies mit Hilfe eines Computerprogramms, das die Veränderung der Wellenfunktionen für ausgewählte Potenziale (d.h. Anordnungen von Elementarteilchen und Randbedingungen) in kurzen Zeitabständen berechnen kann, so dass ein Film entsteht. Er musste dafür zwei wichtige Probleme lösen. Erstens musste er sich mit der Fouriertransformation vertraut machen, um zeitabhängige Lösungen zu finden. Allgemein bekannt ist die Fourieranalyse, die zeigt, aus welchen reinen Tönnen z.B. der Klang einer Geige aufgebaut ist (Oberwellen). Zweitens musste er sicher sein, dass sein Computerprogramm korrekte Lösungen liefert. Für besonders einfache Potenziale wie rechteckige oder quadratische existieren exakte mathematische (sog. analytische) Lösungen. Nima Moshayedi testete die Genauigkeit seiner simulierten numerischen Lösungen mit diesen bekannten exakten Lösungen und konnte so die Numerik optimieren, bis die Übereinstimmung zufriedenstellend war.

Im Resultateteil zeigt Nima Moshayedi das Verhalten der Wellenfunktionen für interessante willkürliche Potenziale, die nur numerisch simuliert, aber nicht analytisch berechnet werden können. Er illustriert überzeugend, dass sich die Wahrscheinlichkeitsdichte vor allem auf die tiefsten Potenzialstellen (Täler) fokussiert, ähnlich wie sich auch Wasser an den tiefsten Stellen sammelt. Im Gegensatz zum Wasser kann ein kleiner Teil der Wahrscheinlichkeitsdichte aber über jeden Berg fliessen, was zum für die Quantenmechanik typischen Tunneleffekt führt. Beispiele für den Tunneleffekt sind der radioaktive Zerfall oder viele Anwendungen in der Halbleiter-Elektronik (Tunneldiode, etc.). Es wäre zu überlegen, ob auf der Grundlage dieser Arbeit ein Tool für Physikstudenten hergestellt werden könnte, mit dessen Hilfe diese mit einfachen aber willkürlichen Potenzialen spielen könnten. Dies wäre ein wertvoller Beitrag zum besseren Verständnis der Quantentheorie!

F. Gassmann

Dr. Fritz Gassmann, Paul Scherrer Institut, 5232 Villigen-PSI