# Angaben zur 4. Übung aus WP am 29./30.3.2022

### Beispiele

• Fourieranalyse von Tonaufnahmen: Sie finden im Ordner sound Soundfiles, die mit einer Taktrate von 22.05 kHz aufgenommen wurden. Die Amplitude als Funktion der Zeit wurde in Form ganzzahliger Werte in einer Spalte gespeichert. Berechnen Sie die Fouriertransformation der aufgezeichneten Daten und stellen Sie das Betrags-Quadrat der Fourierkoeffzienten als Funktion der Frequenz dar (achten Sie auf die korrekte Skalierung!).

#### Sie finden soundfiles

- einer "reinen" Sinuswelle (sin1000.dat) und eines Rechtecksignals (rect.dat).
  Mithilfe dieser Dateien können Sie Ihne Skalierung testen.
- der Schallübertragung durch Luft von einer Frequenzrampe (trans.dat) und von weißem Rauschen (trans\_noise.dat), um die Frequenzabhängigkeit der Sende-/Aufnahmequalität der verwendeten Geräte zu zeigen,
- der Transmission durch eine Röhre (tube5k.dat und tube\_noise.dat. Verwenden Sie diese Daten, um die Länge der Röhre abzuschätzen (die Anpassung kann mit gnuplot durchgeführt werden).
- Lösung der Schrödingergleichung, spektrale Ableitung: Propagieren Sie ein gauss'sches Wellenpaket in der Zeit für ein Elektron am Ort  $\langle x(t_0) \rangle = 0$  mit minimaler Unschärfe und Impuls  $\langle k \rangle = k_0 = 1$  a.u. (atomare Einheiten  $e = \hbar = m_e = 1$ ),

$$|\psi(x,0)\rangle \propto e^{-\frac{x^2}{2}} e^{ik_0 x}, \qquad (1)$$

durch Anwendung der spektralen Ableitung. Vergleichen Sie Ihr Ergebnis mit der analytischen Lösung,

$$|\psi(x,t)\rangle \propto (1+it)^{-1/4} e^{-\frac{(x-k_0t)^2}{2(1+it)}} e^{i(k_0x-k_0^2t/2)}$$
. (2)

Stellen Sie die berechnete Aufenthaltswahrscheinlichkeit zu den Zeitpunkten t=5, 10 und 20 a.u. als gnuplot-Graphik dar.

#### Hinweise:

- Fortran: compilieren Sie Ihr Programm mittels gfortran -o... myprog.F95
  -I/usr/include -lfftw3 (-I → Ordner mit include-files)
- 2. Finden Sie heraus, wie FFTW die Komponenten der Fouriertransformierten abspeichert (welches Element des output-Arrays ist welchem k-Wert zugeordnet?).
- 3. Finden Sie den korrekten grid-Abstand im k-Raum.
- 4. Experimentieren Sie ein wenig, um geeignete Größen für  $\Delta x$ , die Anzahl der Gridpunkte N (nicht zu groß!), ... zu finden. Überlegen Sie sich dazu, wie schnell sich das Wellenpaket verbreitert und welchen Bereich von k-Werten Sie abdecken müssen, um Aliasing zu vermeiden.

## Anleitung

Während der Übung ist ein kurzes Protokoll anzufertigen und als PROTOKOLL.txt im Verzeichnis des jeweiligen Übungstages abzuspeichern. Das Protokoll soll eine einfache ASCII-Text-Datei sein.

Das Protokoll muss folgendes enthalten:

- 1. Datum, Übungsnummer, Gruppennummer, Name(n) der mitwirkenden StudentInnen
- 2. Benötigter Zeitaufwand für die gestellten Aufgaben (ungefähr)
- 3. Namen der erstellten Programme (KEINE Listings), Bilder, ... Die erstellten Dateien sollen sich ebenfalls im Übungsverzeichnis befinden, sonst muss der Pfad ebenfalls angegeben sein.
- 4. Kurze Antwort auf eventuell gestellte Fragen.
- 5. Eventuelle Probleme oder Besonderheiten, falls diese aufgetreten sind.
- 6. Sollten Sie eine Rückmeldung zu Ihren Programmen durch die Tutoren wünschen, schreiben Sie das ebenfalls in PROTOKOLL.txt.