

10. Übungsblatt zur Experimentalphysik III (PEP3, WS 17/18)

Abgabe am 08.01.2018 in der Vorlesung

Name(n):

Gruppe:

Punkte: ____/____/____

10.1 Fehlerteufel*in

Finden Sie 10 Fehler im kombinierten Vorlesungs-Aufschrieb (PEP3_zur_Fehlersuche.pdf, Link mit Hinweis auf diese Aufgabe in Moodle). Schreiben Sie Ihre Funde bitte auf ein separates Blatt.

10.2 Numerische Methoden (Wertung wie zwei Aufgaben)

In der Quantenmechanik lassen sich nur sehr wenige einfache Probleme analytisch lösen, weshalb numerische Methoden eine sehr große Rolle spielen. Außerdem erlauben sie, mit einem Problem zu 'spielen', indem man Parameter verändert und die Reaktion beobachtet. Im Idealfall befruchten sich numerische und analytische Methoden gegenseitig.

Wir wollen hier zwei Methoden für die Orts-/Impulsraumdarstellung kennen lernen. Die Diagonalisierung erlaubt es, die Energieeigenfunktionen für beliebige Potentiale zu erhalten und darüber hinaus auch Zeitentwicklungen zu bestimmen. Die sogenannte Split-Step Fourier-Methode erlaubt es, die zeitabhängige Schrödingergleichung ohne Diagonalisierung zu lösen und die Zeitentwicklung einer gegebenen Wellenfunktion zu bestimmen.

Wir beschränken uns auf eine Dimension x im Ort. Die Basis beider Methoden ist es, den Raum zu diskretisieren. Die Ortsraumdarstellung des quantenmechanischen Zustands wird auf der endlichen Anzahl von Stützstellen $x_1, x_2 \dots x_n$ ausgewertet und berechnet, das heißt die Darstellung des Zustands ist der Vektor (das numerische Array) $(\phi(x_1), \phi(x_2), \dots, \phi(x_n))^T$.

10.2.1 Diagonalisierung

Lineare quantenmechanische Operatoren werden auf Matrizen abgebildet. Die Anwendung eines Operators entspricht der Matrixmultiplikation. Wenn man eine Matrixdarstellung des Hamiltonoperators gefunden hat kann man diese im Idealfall numerisch diagonalisieren und bekommt als Ergebnis numerische Werte für eine endliche Anzahl von Energieeigenwerten und die Darstellung der zugehörigen Eigenfunktionen auf dem Gitter. Nun kann man einen beliebigen Anfangszustand als Superposition von Energieeigenfunktionen darstellen und damit die Zeitentwicklung erhalten. Wir beginnen mit der Darstellung des Ortsoperators. Dieser hat eine besonders einfache Form, da er aus einer Multiplikation jedes Eintrags des Zustandsvektors mit dem Wert x_j an dieser Stelle besteht. Er ist deshalb eine Diagonalmatrix:

$$\hat{x} \rightarrow \begin{pmatrix} x_1 & & & & \\ & x_2 & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & x_{n-1} & \\ & & & & x_n \end{pmatrix}$$

Für den Operator $\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$ ersetzen wir die Ableitung durch finite Differenzen (numerische Ableitung, hier: symmetrisch):

$$\left. \frac{d}{dx} f(x) \right|_{x=x_j} \approx \frac{f(x_j + \Delta x) - f(x_j - \Delta x)}{2\Delta x} = \frac{f(x_{j+1}) - f(x_{j-1}))}{2\Delta x}$$

mit $\Delta x = x_{j+1} - x_j = x_j - x_{j-1}$. Somit ergibt sich als Darstellung des Impulsoperators

$$\hat{p} \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{1}{2\Delta x} \begin{pmatrix} 0 & 1 & & & \\ -1 & 0 & 1 & & \\ & -1 & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & 0 & 1 \\ & & & -1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Für die Darstellung der kinetischen Energie $\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$ brauchen wir eine Darstellung der zweiten Ableitung:

$$\left. \frac{d^2}{dx^2} f(x) \right|_{x=x_j} \approx \frac{f(x_j + \Delta x) - 2f(x_j) + f(x_j - \Delta x))}{(\Delta x)^2} = \frac{f(x_{j+1}) - 2f(x_j) + f(x_{j-1}))}{(\Delta x)^2}$$

und damit

$$\frac{d^2}{dx^2} \rightarrow \frac{1}{(\Delta x)^2} \begin{pmatrix} -2 & 1 & & & \\ 1 & -2 & 1 & & \\ & 1 & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & -2 & 1 \\ & & & 1 & -2 \end{pmatrix}.$$

Typischerweise setzt man die erste und letzte Zeile zu Null, um Artefakte an den Rändern des Gitters zu vermeiden. In Moodle finden Sie ein python-Skript (LatticeDiag.py), in dem diese Matrizen implementiert sind und dazu benutzt werden, den Hamilton-Operator des harmonischen Oszillators darzustellen und zu diagonalisieren ($\hat{H} |n\rangle = E_n |n\rangle$, hier ist $|n\rangle$ ein Eigenvektor von (der Matrix) \hat{H}).

- Machen Sie sich mit dem Skript vertraut oder implementieren Sie die gleiche Funktionalität im Programmpaket Ihrer Wahl. Hier ist es besonders nützlich, sich an möglichst vielen Stellen die Matrizen und Vektoren (insbesondere die Eigenvektoren) anzeigen zu lassen oder zu plotten.
- Modifizieren Sie das Potential und studieren Sie das Spektrum der Eigenenergien und der zugehörigen Energieeigenfunktionen: Periodisches Potential, Doppelmulde, Kasten,... Werden Sie kreativ. Hier sollten Sie spielen. Wenn Sie sich nicht sicher sind, ob es sich bei Ihren Ergebnissen um Eigenschaften des Potentials handelt oder ob es numerische Fehler sind, versuchen Sie, die Parameter des Gitters zu verändern und beobachten die Resultate. Insbesondere Eigenfunktionen, die an den Rand des Gitters kommen sind mit Vorsicht zu genießen.
- Nehmen Sie Ihr Lieblingspotential und plotten Sie das Spektrum und die untersten vier Energieeigenzustände.
- Reproduzieren Sie die Zeitevolution von Aufgabe 7.3 mit den numerisch gefundenen Zuständen und Energien des harmonischen Oszillators. Jetzt können Sie auch ohne Probleme kompliziertere Überlagerungen studieren. Eine besondere Wahl sind sog. kohärente Zustände.

- e) Überlegen Sie sich, wie Sie einen beliebigen Anfangszustand in die Energieeigenfunktionen Ihres Lieblingspotentials zerlegen können und lösen Sie auf diese Art und Weise numerisch die Zeitentwicklung eines Wellenpakets in Ihrem Potential. Plotten Sie nach geeigneten Zeitschritten.

Lösung:

- b), c) In `LatticeDiag_Potentials.py` befinden sich in auskommentierter Form einige interessante Potentiale. Vom einkommentierten Potential wird der untere Teil des Spektrums geplottet und die Eigenfunktionen zum Durchschalten (Mit Pfeil nach rechts/links auf der Tastatur)
- d) Siehe `LatticeDiag_TimeEvoA7_3.py`
- e) Siehe `LatticeDiag_TimeEvoWavepacket.py`, bitte auch die Kommentare beachten. Das Wellenpaket fällt im Gravitationspotential (Gravitation zeigt in negative x -Richtung) auf einen Spiegel und wird mehrfach reflektiert. Dies hat experimentelle Relevanz für das sogenannte q-Bounce-Experiment mit kalten Neutronen, wo mit dieser Anordnung eine Präzisionsmessung der Gravitation auf kurzen Abständen durchgeführt wird, siehe beispielsweise <https://doi.org/10.1016/j.nima.2009.07.073> und <https://arxiv.org/abs/1512.09134>
-

10.2.2 Split-Step-Fourier

Informieren Sie sich selbständig über diese Methode. Eine beispielhafte einführende Quelle ist [dx.doi.org/10.13140/RG.2.1.1394.0965](https://doi.org/10.13140/RG.2.1.1394.0965)

Auch hier steht in Moodle ein python-Skript zur Verfügung: `SplitStepFourier.py`

- a) Beschreiben Sie die Methode und bereiten Sie sich darauf vor, sie in einem Kurzvortrag anhand des Quelltextes zu erklären. Selbstverständlich können Sie dafür auch Ihre eigene Implementierung verwenden.
- b) Setzen Sie ein Gaußsches Wellenpaket in den harmonischen Oszillator und beobachten die Dynamik. Für welche Anfangsbreite ist die Dynamik der Breite minimal? Was passiert für diese Anfangsbreite für $x_0 = 0$ und $x_0 \neq 0$ im Unterschied zur Dynamik mit größerer/kleinerer Breite?
- c) Beobachten Sie die freie Evolution eines Gaußschen Wellenpakets ohne Potential einmal mit mittlerer Anfangsgeschwindigkeit $v_0 = 0$, einmal mit $v_0 \neq 0$. Plotten Sie jeweils Betrag und Phase im Ortsraum und im Impuls-(Fourier-)Raum.

2 Pkt. Bonus: Studieren Sie ein Wellenpaket, das auf eine Potentialstufe zuläuft. Werten Sie quantitativ die Transmission/Reflexion als Funktion der Stufenhöhe und der Anfangsbreite/Anfangsgeschwindigkeit des Wellenpakets aus.

Wichtig: Die Skripte wurden mit python-3.6 erstellt, was nicht komplett abwärtskompatibel zu python-2.x ist. Im Zweifelsfall verwenden Sie bitte python-3.

Lösung:

- a) Hier soll nur eine formale Skizze der Methode gegeben werden. Weiteres erfahren Sie in der Übungsgruppe von der vortragenden Kommilitonin. Die Zeitentwicklung der Quantenmechanik lässt sich formal schreiben als

$$|\psi(t)\rangle = \exp(-i\hat{H}t/\hbar) |\psi(t=0)\rangle$$

Oder in Ortsdarstellung

$$\phi(x, t) = \exp(-i\hat{H}t/\hbar) \phi(x, t=0)$$

Angenommen \hat{H} wäre diagonal in der Ortsbasis (eine einfache Funktion des Ortes), dann wäre die Exponentialfunktion von \hat{H} leicht auszurechnen. Dies ist jedoch im Allgemeinen nicht der Fall. Wir betrachten

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$$

Davon hat der Potentialteil die gewünschte Eigenschaft, der Operator der kinetischen Energie ist jedoch diagonal im Impulsraum und nicht im Ortsraum. Weiterhin ist problematisch, dass

$$\exp((\hat{A} + \hat{B})t) \neq \exp(\hat{A}t) \exp(\hat{B}t)$$

falls $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$ (Stichwort: Baker-Campbell-Hausdorff-Formel). In unserem Fall wäre $\hat{A} = -(i/\hbar)\hat{p}^2/(2m)$ und $\hat{B} = -(i/\hbar)V(\hat{x})$ und $[\hat{x}, \hat{p}] \neq 0$. Ansonsten könnte der Potentialteil im Ortsraum angewandt werden und nach einer Fouriertransformation des Ergebnisses der kinetische Teil im Impulsraum. Der Trick der Split-Step-Fourier-Methode ist es, nur kleine Zeitschritte zu machen, sodass

$$\exp((\hat{A} + \hat{B})\Delta t) \approx \exp(\hat{A}\Delta t) \exp(\hat{B}\Delta t).$$

Der Fehler ist von der Ordnung Δt^2 , d.h. vernachlässigbar, falls Δt klein genug gewählt wird. Der Zeitschritt für die Split-Step-Fourier-Methode lautet nun

$$\phi(x, t + \Delta t) = \mathcal{F}^{-1} \left(\exp \left[\frac{\Delta t}{i\hbar} \frac{p^2}{2m} \right] \mathcal{F} \left(\exp \left[\frac{\Delta t}{i\hbar} V(x) \right] \phi(x, t) \right) \right),$$

wobei $\mathcal{F}(\cdot)$ die Fouriertrafo und $\mathcal{F}^{-1}(\cdot)$ die inverse Fouriertrafo symbolisiert.

- b) Dieser Teil war schon implementiert. Man stellt fest, dass das Wellenpaket periodisch seine Breite verändert. Dieses Verhalten wird minimal, wenn ein Wellenpaket der Form des Grundzustands mit Gaußsschem $\sigma = \sqrt{\hbar/(m\omega)}$ gewählt wird. Für diese Anfangsbreite bekommt man bei Auslenkung $x_0 \neq 0$ eine Oszillation der Position des Wellenpakets ohne signifikante Breitenmodulation. Dies entspricht einem sog. kohärenten Zustand. Wird es schmaler oder breiter gewählt ist der Oszillation der Position eine Dynamik der Breite überlagert.
- c) Siehe `SplitStepFourierFreeGauss.py`. Für $v_0 \neq 0$ ist $k_0 \neq 0$ zu setzen.

10.3 Exotische Atome

- a) Ein muonisches Wasserstoffatom besteht aus einem Proton und einem Muon μ^- . Die Wellenlänge des Übergangs von der $n = 2$ Schale zur $n = 1$ Schale ist 0.65 nm. Vergleichen Sie diesen Wert mit dem vom Wasserstoffatom und bestimmen Sie die Muon-Masse m_μ .
- b) Bestimmen Sie die Größe des muonischen Wasserstoffatoms. Nehmen Sie als Maß eine typische Größe der Grundzustandswellenfunktion. Vergleichen Sie mit 'gewöhnlichem' Wasserstoff.

- c) Positronium besteht aus einem Positron e^+ und einem Elektron e^- . Vergleichen Sie die Größe des Positroniums mit der von Wasserstoff.
- d) Bestimmen Sie die Ionisationsenergie von Positronium, muonischem Wasserstoff und elektronischem Wasserstoff, jeweils ausgehend vom Grundzustand.
- e) Bestimmen Sie die Wellenlänge der Lyman- α Linie der drei Systeme. Vergleichen Sie die Unterschiede zum Isotopenshift dieser Linie von Wasserstoff zu Deuterium.

Lösung:

- a) Die entsprechende Wellenlänge für Wasserstoff wurde bereits auf Blatt9 berechnet:

$$\lambda_H = \frac{2\pi\hbar c}{-R_H(\frac{1}{4} - 1)} \approx 122 \text{ nm}$$

Dabei sei R_H die (Wasserstoff-)Rydbergkonstante. Es gilt für den muonischen Wasserstoff

$$R_M = R_H \frac{\mu_M}{\mu_H} = \frac{2\pi\hbar c}{3\lambda_M/4}$$

und damit

$$\mu_M = \frac{2\pi\hbar c}{3\lambda_M/4} \frac{\mu_H}{R_H} = \mu_H \frac{\lambda_H}{\lambda_M} \approx 187 m_e$$

Daraus ergibt sich mit der Protonmasse die Masse des Muons zu

$$m_M = \frac{\mu_M m_p}{m_p - \mu_M} \approx 208 m_e$$

- b) Wir nehmen als typische Größenskala des Grundzustands das Maximum der radialen Wahrscheinlichkeitsdichte, das bei $a'_B \propto 1/\mu$ liegt. Für Wasserstoff ist $a'_B \approx 53 \text{ pm}$ und $\mu_H \approx m_e$. Damit erhält man

$$a'_B \Big|_M = a'_B \Big|_H \frac{\mu_H}{\mu_M} \approx a'_B \Big|_H \frac{m_e}{187 m_e} \approx 0.3 \text{ pm}$$

- c) Für Positronium ergibt sich $\mu_P = m_e/2$ und $a'_B \Big|_P \approx 0.1 \text{ nm}$, es ist also etwa doppelt so groß wie Wasserstoff.
- d) Die Ionisationsenergie vom Grundzustand aus entspricht gerade der negativen Rydberg-Energie des jeweiligen Systems, für Wasserstoff also $\approx 13.6 \text{ eV}$, für Positronium etwa die Hälfte ($\approx 6.8 \text{ eV}$) und für muonischen Wasserstoff $\approx 187 \cdot 13.6 \text{ eV} \approx 2.5 \text{ keV}$.
- e) Die Wellenlänge der Lyman- α Linie liegt für Wasserstoff bei 122 nm , bei muonischem Wasserstoff bei 0.65 nm und bei Positronium bei 243 nm . Die relative Änderung der Wellenlänge durch den Isotopenshift von Wasserstoff zu Deuterium ergibt sich zu $\mu_{ep}/\mu_{ed} - 1 \approx 3 \times 10^{-4}$, ist also viel kleiner als die Änderungen bei den exotischen Atomen.
-