

ÜBUNG 2- Beispiel a: Neutronen im Gravitationsfeld

Hintergrund: – Erst vor wenigen Jahren gelang es H. Abele und Mitarbeitern am ILL (Frankreich) die Messung der niedrigsten Bindungszustände von Neutronen über einem Spiegel im Gravitationsfeld der Erde. Diese Quantenzustände von ultrakalten Neutronen sind von großem Interesse, da sich auf dieser Basis neue hochpräzise Messmethoden entwickeln lassen. Man verwende die folgenden Werte der Konstanten

Erdbeschleunigung $g=9,80665 \text{ m/s}^2$
 $c=2.99792458 \cdot 10^8 \text{ m s}^{-1}$

$\hbar c = 197.327053(59) \text{ eV nm}$
 Masse des Neutrons $m_n c^2 = 939.56563 \text{ MeV}$

Problemstellung: – Berechnen Sie die normierten Bindungszustände ultrakalter Neutronen über einem Spiegel im Gravitationsfeld der Erde. Die zugehörige Schrödinger-Gleichung hat die Form

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_n} \frac{d^2}{dz^2} + V(z) \right\} u_n(z) = E_n u_n(z) \quad \text{mit} \quad V(z) = \begin{cases} mg(z - z_0) \Theta(z - z_0) & z > z_0 \\ +\infty & z < z_0 \end{cases}.$$

Dabei ist $\Theta(z)$ die Heavy-side Funktion.

Aufgaben: – Führen Sie folgende Aufgaben durch:

- (1) Wählen Sie geeignete Längen- und Energiedimensionen und schreiben Sie die Schrödinger-Gleichung in diesen Variablen an.
- (2) Schreiben Sie ein Programm/Programmteil zur Lösung der entsprechend skalierten Schrödinger-Gleichung auf der Basis des Numerov Algorithmus. Der Programmteil soll eine einfache Variation der Energie, Integration von außen und Ausgabe von Q_0 ermöglichen.
- (3) Schreiben Sie einen Programmteil zur Bestimmung von Bindungszuständen mittels Einfach-Schießverfahren.
- (4) Bestimmen Sie die Energien und normierten Wellenfunktionen der ersten vier Bindungszustände der Neutronen im Gravitationsfeld über einem Spiegel. Zeichnen Sie diese Bindungswellenfunktionen.
- (5) Verifizieren Sie die Orthonormalität der Bindungszustände.

Hinweise:

Für die Normierung und die Verifikation der Orthogonalität der Bindungswellenfunktionen soll die Simpsonregel verwendet werden.

ÜBUNG 2 – Beispiel b: Wasserstoffatom

Hintergrund – Die Konzepte der Quantenmechanik wurden parallel mit der Erforschung atomarer Systeme entwickelt. Das Wasserstoffatom und sein Energiespektrum spielte daher eine besondere Rolle und wird auch heute noch in der Ausbildung als Beispielfall für quantenmechanische Bindungszustände verwendet.

Problemstellung – Berechnen Sie die Bindungszustände und die entsprechenden Bindungsenergien eines Elektrons im Wasserstoffatom ($Z=1$) für die Hauptquantenzahlen $N=1,2,3$. Verifizieren Sie die Orthogonalität der Eigenzustände. Die zugehörige radiale Schrödingergleichung hat die Form

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] - \frac{Z\alpha_f \hbar c}{r} \right\} u_{n\ell}(r) = E_N u_{n\ell}(r) \quad \text{mit der reduzierten Masse } \mu = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p}.$$

Dabei sind $N = n + \ell + 1$ die Hauptquantenzahl, n die radiale Quantenzahl und ℓ die Bahndrehimpulsquantenzahl. Folgende Werte sollen für die physikalischen Größen verwendet werden

$$\hbar c = 197.327053(59) \text{ eV nm} \quad c = 2.99792458 \times 10^8 \text{ ms}^{-1}$$

$$\alpha_f = 1/137.0359895(61) \quad m_e c^2 = 0.51099906(15) \text{ MeV} \quad m_p c^2 = 938.27231(28) \text{ MeV}$$

Aufgaben - Führen Sie folgende Schritte durch:

- (1) Skalieren Sie die entsprechende radiale Schrödingergleichung auf Problem-angepasste Einheiten (z.B. dass die Grundzustandsenergie im skalierten Problem $E_0(N=1)=1$ ist).
- (2) Schreiben Sie ein Programm/Programmteil zur Lösung der entsprechend skalierten Schrödingergleichung auf der Basis des Numerov Algorithmus. Der Programmteil soll eine einfache Variation der Energie, Integration von außen und Ausgabe von Q_0 ermöglichen.
- (3) Schreiben Sie einen Programmteil zur Bestimmung von Bindungszuständen mittels Einfach-Schießverfahren.
- (4) Bestimmen Sie alle Bindungszustände des H-Atoms für $N=1, 2, 3$ mittels Einfach-Schießverfahren. Normieren Sie diese Bindungswellenfunktionen und zeichnen Sie diese mit gnuplot.
- (5) Verifizieren Sie die Orthogonalität der Bindungszustände.

Hinweise:

Die Normierung und die Verifikation der Orthogonalität der Bindungswellenfunktion kann mittels Simpsonregel ausgeführt werden.

ÜBUNG 2 – Beispiel c: Verifikation des Levinson Theorems bei s-Wellen Neutronenstreuung

Hintergrund – Die Berechnung von Streuphasen ist ein Standardproblem in Atom-, Kern- und Teilchenphysik. Die Berechnung der Streuwellenfunktion ist die Basis für fast alle weiterführenden Reaktionsrechnungen. Die Streuphase ist eine wichtige Spektralinformation, welche für die Berechnung der elastischen Wirkungsquerschnitte, aber auch Compoundkernreaktionen benötigt wird. Insbesondere die Neutron-Kernstreuung ist für die Astrophysik aber auch für die Nukleartechnologien von großer Bedeutung.

Problemstellung – Verifizieren Sie das Levinson-Theorem für $\ell = 0$ für ein reelles Neutron-Kernpotential. Das Levinson-Theorem besagt, dass der Wert der absoluten Phasenverschiebung bei der Energie $E=0$ der Größe $N\pi$ entspricht, wobei N die Anzahl der Bindungszustände bei gleichem ℓ in diesem Potential ist. Das Potential hat dabei die Form

$$V(r) = -V_0 \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{r - R}{a}\right)}$$

mit $V_0=40,0$ MeV, $R=1,2 A^{1/3}$ fm, $a=0,55$ fm und $A=40$. Die sphärischen Bessel- und Neumannfunktionen für $\ell = 0$ haben die Form (Riccati-Form)

Sphärische Besselfunktion: $\hat{j}_0(x) = \sin(x)$

Spärische Neumannfunktion: $\hat{n}_0(x) = -\cos(x)$

Aufgaben – Führen Sie die folgenden Aufgaben durch:

- (1) Legen Sie die in der numerischen Lösung verwendeten Einheiten fest.
- (2) Schreiben Sie ein Programm/Programmteil zur Lösung der entsprechend skalierten Schrödingergleichung auf der Basis des Numerov Algorithmus. Der Programmteil soll die Integration der Schrödingergleichung sowohl von innen als auch von außen ermöglichen. Überdies soll er eine einfache Variation der Energie und die Ausgabe von Q_0 erlauben.
- (3) Bestimmen Sie die Phasenverschiebung als Funktion der Energie E aus den erhaltenen Streulösungen für die s-Wellen.
- (4) Bestimmen Sie die absolute Streuphase und zeichnen Sie diese mittels gnuplot.
- (5) Bestimmen Sie die Zahl der Bindungszustände im Potential bei $\ell = 0$ und verifizieren Sie das Levinson Theorem für die s-Phasenverschiebung

Hinweis:

Für die absolute Phasenverschiebung als Funktion von E gilt, dass die Phasenverschiebung zwischen $0 < E < \infty$ stetig ist und für $E \rightarrow \infty$ verschwindet.