Rechnernutzung in der Physik

Institut für Experimentelle Teilchenphysik
Institut für Theoretische Teilchenphysik
Interfakultatives Institut für Anwendungen der Informatik

Dr. Th. Kuhr, Prof. Dr. M. Steinhauser, Prof. Dr. U. Husemann
Mildenberger / Hoff / Hermann / Heck
`http://comp.physik.kit.edu`

WS2012/13 – Blatt 07
Prog: Di, 04.12.2012 / Ausarb: Fr, 07.12.2012

Aufgabe 16: Kommutatoren in der Quantenmechanik **Programmtestat**

In der Quantenmechanik werden Messgrößen wie Ort $\vec{x}$, Zeit t, Impuls $\vec{p}$, Energie E usw. nicht mehr als blose Zahlen, sondern als Operatoren aufgefasst. Eine wichtige Eigenschaft von Operatoren ist, dass diese im Allgemeinen nicht miteinander vertauschen $O_1O_2 \neq O_2O_1$ (sie erfüllen also kein Kommutativgesetz unter Multiplikation). Diese Eigenschaft wird durch den Kommutator $[O_1, O_2]$ angegeben, der über $[O_1, O_2] = O_1O_2 - O_2O_1$ definiert ist.
Die Operatoren $\vec{X}$ und $\vec{P}$ erfüllen folgende grundlegenden Gleichungen:

$$[X_i, X_j] = [P_i, P_j] = 0 \quad \text{und} \quad [X_i, P_j] = i\hbar\delta_{ij}. \tag{1-2}$$

Weiterhin gelten für Operatoren die allgemeinen Zusammenhänge (wobei c eine gewöhnliche, kommutierende Zahl sei):

$$\begin{array}{ccc} [c, O] = 0, & [O, O] = 0, & [O_1 + O_2, O_3] = [O_1, O_3] + [O_2, O_3], \\ [c\,O_1, O_2] = c\,[O_1, O_2], & [O_1, O_2] = -[O_2, O_1], & [O_1O_2, O_3] = O_1[O_2, O_3] + [O_1, O_3]O_2. \end{array} \tag{3-8}$$

(a) Implementieren Sie in `Mathematica` mittels der Gleichungen (1-2) und (3-8) die Möglichkeit, Kommutatoren beliebiger Polynome in $\vec{X}$, $\vec{P}$ und nicht-operatorwertiger Symbole zu berechnen. Das Ergebnis sollte keine Kommutatoren mehr enthalten und vereinfacht werden. Werten Sie in dieser Weise die Polynome $[X^2, P^2]$, $[P, (1 + X)^3]$ und $[X + P, X + P]$ aus.

(b) Verifizieren Sie die Drehimpulsalgebra (die Kommutatorrelationen des quantenmechanischen Drehimpulses $\vec{L} = \vec{X} \times \vec{P}$, bzw. $L_i = \epsilon_{ijk}X_jP_k$):

$$[L_i, L_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}L_k, \quad \text{und} \quad [\vec{L}^2, L_i] = 0.$$

(c) Verifizieren Sie die Jacobi-Identität:

$$[A, [B, C]] + [B, [C, A]] + [C, [A, B]] = 0.$$

Anleitung und Hinweise:

Schreiben Sie innerhalb Ihres Programmes den Kommutator als Funktion `comm[A,B]` für die Sie keinerlei Definitionen setzen (das erlaubt eine leichter nachzuvollziehende Auswertung). Übergeben Sie Ausdrücke mit Kommutatoren stattdessen an eine Funktion `calcComm`, welche die notwendigen Umformungen mithilfe von Ersetzungsregeln vornimmt.
Zunächst sollten Sie eine Routine schreiben, die feststellt, ob ein Ausdruck Operatoren enthält oder nicht (diese können einfach über Einträge in einer globalen Liste als solche identifiziert werden).
Neben der Container-Funktion `comm` benötigen Sie außerdem eine Funktion `mul[A, B, ...]`, die

nicht-kommutative Multiplikation symbolisiert. Die grundlegenden Eigenschaften dieser Multiplikation (normale Multiplikation für nicht-operatorwertige Symbole) sollen ebenfalls über Ersetzungsregeln implementiert werden.
Eine Strategie, Ausdrücke auf möglichst einfache Form zu bringen, ist:

1. Anwendung der allgemeinen Kommutator-Eigenschaften (3-8),
2. Benutzung der kanonischen Kommutator-Relationen (1-2),
3. Ausnutzung von Eigenschaften der nicht-kommutativen Multiplikation,
4. Wiederholung der Schritte 1 - 3 solange bis keine weitere Umformung mehr vorgenommen werden kann.

Folgende `Mathematica`-Befehle können in dieser Aufgabe hilfreich sein: `KroneckerDelta`, `FreeQ`, `MemberQ`, `Apply` (`@@`), `Map` (`/@`) und `Select`. Weiterhin sind die entsprechenden `Mathematica` Dokumentationsseiten, bzw. Abschnitte aus den Einführungs-Notebooks zu Pattern-Matching hier von großem Nutzen.

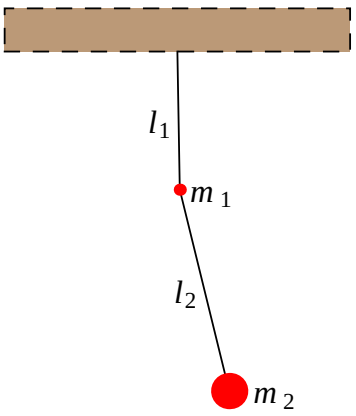
Aufgabe 17: Doppelpendel **freiwillig**

Betrachten Sie ein (mathematisches) Doppelpendel mit Massen m_1 und m_2 und Fadenlängen l_1 und l_2 (siehe Skizze). Die unabhängigen Variablen sind die Auslenkwinkel ϕ_1 und ϕ_2, die folgendem System von gekoppelten Differentialgleichungen zweiter Ordnung gehorchen:

$$(m_1+m_2)\left[l_1^2\ddot{\phi}_1 + g l_1 \sin(\phi_1)\right] + m_2 l_1 l_2 \left[\ddot{\phi}_2 \cos(\phi_1-\phi_2) + (\dot{\phi}_2)^2 \sin(\phi_1-\phi_2)\right] = 0, \quad (1)$$

$$m_2 l_2 \left[l_2\ddot{\phi}_2 + l_1\ddot{\phi}_1 \cos(\phi_1-\phi_2) - l_1(\dot{\phi}_1)^2 \sin(\phi_1-\phi_2) + g\sin(\phi_2)\right] = 0. \quad (2)$$

Wählen Sie der Einfachheit halber $g = 1$, $l_1 = 2$ und $l_2 = 3$.



(a) Lösen Sie die Differentialgleichungen für die Anfangsbedingungen $\phi_1(0) = \phi_1^0$, $\phi_2(0) = \phi_2^0$, $\dot{\phi}_1(0) = 0$ und $\dot{\phi}_2(0) = 0$ mit Hilfe des Befehls `NDSolve`. Stellen Sie die Lösungen $\phi_1(t)$ und $\phi_2(t)$ für t zwischen 0 und 60 graphisch dar.
Wählen Sie dabei verschiedene Werte für ϕ_1^0 und ϕ_2^0 und betrachten Sie u.a. die Grenzfälle großer und kleiner Werte von m_1/m_2.

(b) Stellen Sie Ihre Lösung auch in Form eines animierten Pendels graphisch dar. Sie können sich dabei an dem entsprechenden Vorlesungsbeispiel orientieren.

(c) Wie sehen die Differentialgleichungen in (1) und (2) im Grenzfall kleiner Winkel ϕ_1 und ϕ_2 aus? Untersuchen Sie „experimentell“, für welche numerischen Werte von ϕ_1^0 und ϕ_2^0 die Approximation gut ist. Schauen Sie sich dabei sowohl $\phi_1(t)$ und $\phi_2(t)$ als auch die Animation für die exakte Lösung und die Approximation an.

Hinweis: Folgende zusätzliche `Mathematica`-Befehle erweisen sich in dieser Aufgabe als nützlich: `D`, `NDSolve`, `Evaluate`, `Line`, `Point`, `Text` und `Animate`.