Szakdolgozat

Madarak kollektív leszállásának vizsgálata számítógépes szimulációval

Ferdinandy Bence

Fizika BSc., fizikus szakirány

III. évfolyam

Témavezetõk:

Dr. Vicsek Tamás

egyetemi tanár, az MTA rendes tagja

Kunál Bhattácháryá

tudományos segédmunkatárs

Eötvös Loránd Tudományegyetem

Biológiai Fizika Tanszék

2010

Kivonat

Kvantummechanikai iskolapélda a homogén térbe helyezett egydimenziós részecske. Ezt három dimenzióra kiterjesztve és két fal közé zárva keressük az energia sajátállapotokat. Annyi előrelátható, hogy a nyílt vagy félig nyílt esetekben használható, reguláris Airy függvény itt nem elegendő a megoldáshoz, ennyiben túlmegyünk a tankönyvi feladaton. Az aszimptotikus függvényalakok segítségével előállítjuk a magasan gerjesztett állapotok energiáit és hullámfüggvényeit, s ezeket összehasonlítjuk a közvetlenül a Bohr–Sommerfeld-módszerrel kapott eredménnyel. Numerikusan szemléltetjük fizikailag érdekes kezdőállapotok időfejlődését. Vizsgáljuk a rezolvenst és az állapotsűrűséget, továbbá a sokrészecske rendszerekre való általánosítás lehetőségét.

Egydimenziós, m tömegű, lineáris Fx potenciálban mozgó kvantumos részecskét zárjunk L hosszú, merev falú dobozba (ekvivalens a padló és mennyezet között függőlegesen pattogó kvantum labdával). A stacionárius Schrödinger-egyenletből kiindulva, a határfeltételek figyelembe vételével, írjuk fel az energia sajátértékeket meghatározó szekuláris egyenletet, melyet oldjunk meg numerikusan. Ábrázoljuk az alacsonyabb nívókat a doboz méretének változtatása mellett, és szemléltessük grafikusan a stacionárius hullámfüggvényeket. A szekuláris egyenletben fellépő függvények aszimptotikáinak ismeretében a magasabb nívókra próbáljunk egyszerűbb implicit formulát adni. Végezzük el a szemiklasszikus kvantálást is, hasonlítsuk össze az előző közelítő eredménnyel, és numerikusan néhány, az egzakt egyenletből kapott nívóval.

További kérdések: (a) Számítsuk ki a nívókat expliciten, kicsiny L-ek mellett. (b) Mely paraméterek mellett esik egybe FL éppen az alapállapoti energiával? (Ilyenkor a klasszikus labda éppen eléri a mennyezetet.) (c) Mutassuk meg, hogy e határesetnél kisebb L belméret mellett minden nívó FL fölé esik. (d) Írjuk fel a szemiklasszikus stacionárius hullámfüggvényeket, s grafikusan hasonlítsuk össze őket az egzaktakkal – mikor jó a közelítés? (e) Írjuk fel a kicsiny L melletti hullámfüggvényeket expliciten, ezeket szintén hasonlítsuk össze a valódiakkal.

-Miért nem Rodnik osztályba tartozik

-fx, fy = 0 külön tárgyalás

-program leírása

Köszönetnyilvánítás

Tartalomjegyzék

Ábrák jegyzéke

Táblázatok jegyzéke

1. Schrödinger

A probléma egy 1D doboba zárt résecske homogén erőtérben. $F(x) = -F$, azaz $V(x) = Fx$. Az egyenlethez tartozó határfeltételek, ha a doboz hossza L:

$$\phi\big|_0 = \phi\big|_L = 0 \tag{1.1}$$

A megoldandó időfüggetlen Schrödinger-egyenlet:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\phi}{dx^2} + Fx\phi = E\phi \tag{1.2}$$

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} - \frac{2mFx}{\hbar^2}\phi = -\frac{2mE}{\hbar^2}\phi \tag{1.3}$$

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} - \left(\frac{2mF}{\hbar^2}x - \frac{2mE}{\hbar^2}\right)\phi = 0 \tag{1.4}$$

Az Airy egyenlet ilyen alakra hozható a változó affin lineáris transzformációjával:

$$\frac{d^2y}{dx'^2} - x'y = 0 \tag{1.5}$$

$x' = ax - b$, azaz $\frac{d}{dx} = a\frac{d}{dx'}$:

$$\frac{d^2y}{dx^2} - \left(a^3x - a^2b\right)y = 0 \tag{1.6}$$

Az együtthatók összevetése alapján $a = \sqrt[3]{\frac{2mF}{\hbar^2}}$ és $b = \sqrt[3]{\frac{2m}{\hbar^2F^2}}E$. Így a Schrödinger-gyenlet megoldása:

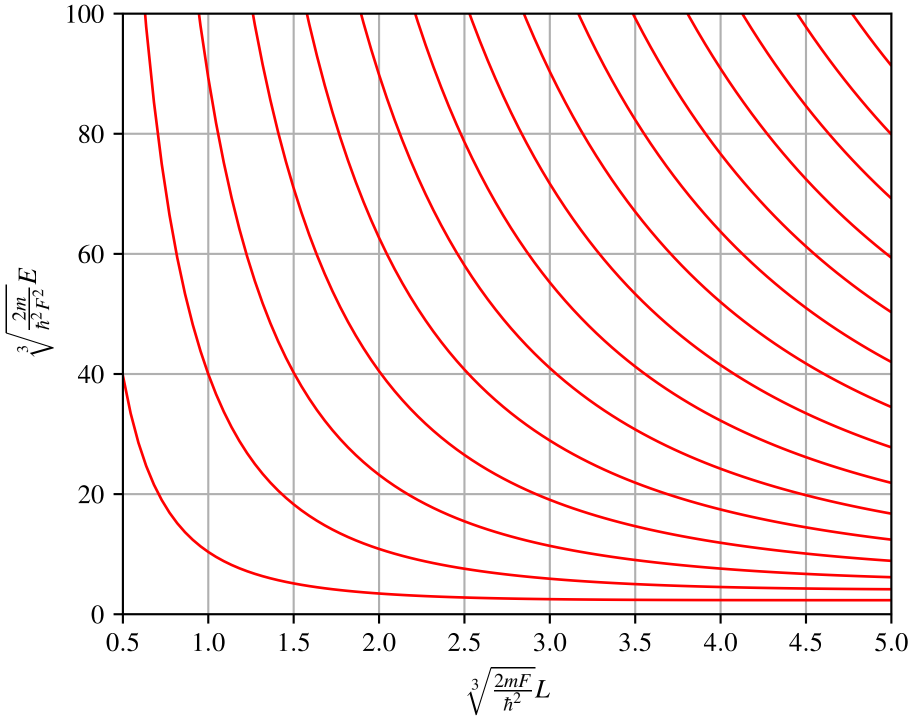
$$\phi(x) = y(x') = y\left(\sqrt[3]{\frac{2mF}{\hbar^2}}x - \sqrt[3]{\frac{2m}{\hbar^2F^2}}E\right) \tag{1.7}$$

, ahol $y(x) = \alpha\mathrm{Ai}(x) + \beta\mathrm{Bi}(x)$. A $\phi\big|_0 = 0$ feltételből következik, hogy $\phi \propto \mathrm{Bi}(-b)\,\mathrm{Ai}(ax-b) - \mathrm{Ai}(-b)\,\mathrm{Bi}(ax-b)$. A második határfeltétel pedig meghatározza a lehetséges energiákat. A feltétel:

$$\mathrm{Bi}(-b)\,\mathrm{Ai}(aL-b) - \mathrm{Ai}(-b)\,\mathrm{Bi}(aL-b) = 0 \tag{1.8}$$

$$\mathrm{Ti}(aL-b) - \mathrm{Ti}(-b) = 0 \tag{1.9}$$

$$\mathrm{Ti}\left(\sqrt[3]{\frac{2mF}{\hbar^2}}L - \sqrt[3]{\frac{2m}{\hbar^2F^2}}E\right) - \mathrm{Ti}\left(-\sqrt[3]{\frac{2m}{\hbar^2F^2}}E\right) = 0 \tag{1.10}$$



1.1. ábra. Energiaszintek L függvényében

Amikor $FL \ll \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}$, a potenciál jól közelíthető konstans potenciállal, mivel az alapállapot energiájához képest is elhanyagolható a lineáris potenciál eltérése a konstans potenciáltól. Eben a esetben $E \propto n^2$. $E \ll FL$ esetben az energiaszintek jó közelítéssel konstanssá válnak. Ennek az oka, hogy $\lim_{L\to\infty}\psi(x) = \alpha \mathrm{Ai}\left(ax - b\right)$, mert a $Bi(x)$ exponenciálisan növekszik nagy x-ek esetén. Ebben az eseten az energiaszinteket a $\mathrm{Ai}\left(-\sqrt[3]{\frac{2m}{\hbar^2F^2}}E\right) = 0$ egyenlet határozza meg. Ezeket az aszimptotikus viselkedéseket az 1.1. ábra jól mutatja.

TODO: link 1D videóról

2. Kvantumos közelítése

$x \to \infty$ aszimptotikus alak:

$$\mathrm{Ai}\left(-x\right) = \frac{1}{\sqrt{\pi}x^{1/4}}\cos\left(\frac{2}{3}x^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right) + \mathcal{O}\left(x^{-5/4}\right) \tag{2.1}$$

$$\mathrm{Bi}\left(-x\right) = -\frac{1}{\sqrt{\pi}x^{1/4}}\sin\left(\frac{2}{3}x^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right) + \mathcal{O}\left(x^{-5/4}\right) \tag{2.2}$$

$$\mathrm{Ti}\left(-x\right) = -\cot\left(\frac{2}{3}x^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right) + \mathcal{O}\left(x^{-5/4}\right) \tag{2.3}$$

Ezzel a közelítéssel az 1.9. egyenlet alakja:

$$\cot\left(\frac{2}{3}\left(b - aL\right)^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right) = \cot\left(\frac{2}{3}b^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right) \tag{2.4}$$

, azaz

$$\frac{2}{3}b^{3/2} - \frac{2}{3}\left(b - aL\right)^{3/2} = n\pi \tag{2.5}$$

. Az a és b behelyettesítésével az egyenlet

$$\frac{2\sqrt{2m}}{3F\hbar}\left(E^{3/2} - \left(E - FL\right)^{3/2}\right) = n\pi \tag{2.6}$$

Ez megegyezik a szemiklasszikus kvantálással kapott eredménnyel, ami azt jelenti, hogy a szemiklasszikus közelítés jól működik nagy energiáknál, hibája $\mathcal{O}\left(E^{-5/4}\right)$ nagyságrendű.

3. Szemiklasszikus

$$nh = \oint p\,dq = \tag{3.1}$$

$E/F < L$ esete:

$$2\int_0^{E/F}\sqrt{2m\left(E - Fx\right)}\,dx = -\frac{2}{3mF}\left(2m\left(E - Fx\right)\right)^{\frac{3}{2}}\Big|_0^{E/F} = \frac{4\sqrt{2m}E^{3/2}}{3F} \tag{3.2}$$

$$E_n = \left(\frac{3nhF}{4\sqrt{2m}}\right)^{2/3} \tag{3.3}$$

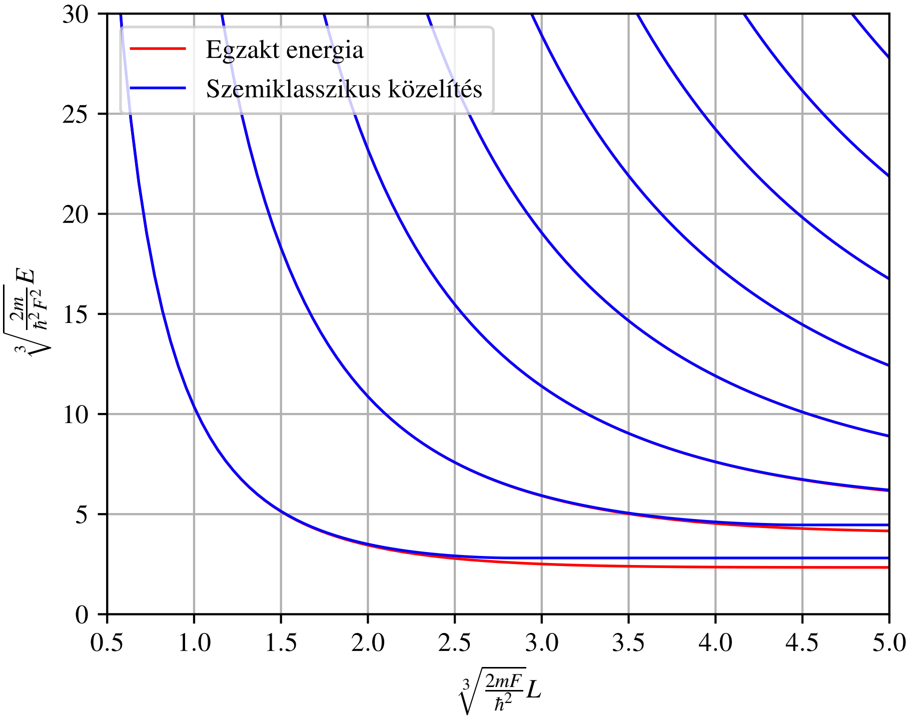
$E/F > L$ esete:

$$-\frac{2}{3mF}\left(2m\left(E - Fx\right)\right)^{\frac{3}{2}}\Big|_0^{L} = \frac{4\sqrt{2m}}{3F}\left(E^{3/2} - \left(E - FL\right)^{3/2}\right) = nh \tag{3.4}$$

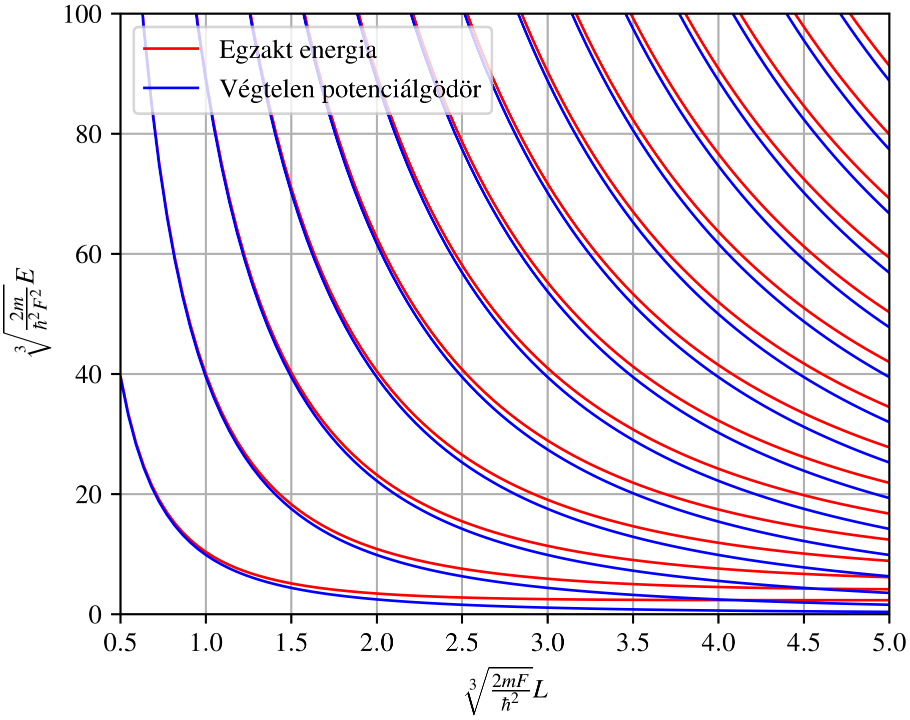
$E \gg FL$ esetén a különbség az $E^{3/2}$ függvény deriváltjának segítségével helyettesíthető:

$$nh \approx 2\sqrt{2m}E^{1/2}L \tag{3.5}$$

$$E_n \approx \frac{n^2h^2}{8mL^2} \tag{3.6}$$



3.1. ábra. Szemiklasszikus közelítés



3.2. ábra. Szemiklasszikus közelítés

4. Momentumok

5. Plafon érintés 1D

Azokat a parmaétereket keresem, ahol az alapállapot $E = FL$:

$$\mathrm{Ti}\left(\sqrt[3]{\frac{2mF}{\hbar^2}}L - \sqrt[3]{\frac{2m}{\hbar^2 F^2}}FL\right) - \mathrm{Ti}\left(-\sqrt[3]{\frac{2m}{\hbar^2 F^2}}FL\right) = 0 \tag{5.1}$$

, azaz

$$\mathrm{Ai}\left(-\sqrt[3]{\frac{2mF}{\hbar^2}}L\right) = 0 \tag{5.2}$$

. Az első gyöke az Airy függvénynek megadja azt az esetet, amikor az alapállapot energiája FL, és nem pedig valamelyik gerjesztett állapoté.

$$-a_1 = \sqrt[3]{\frac{2mF}{\hbar^2}}L \approx 2.338 \tag{5.3}$$

6. 3D doboz, ferde tér

A rendszer egy téglatest alakú dobozba zárt részecske. A doboz mérete L_x, L_y és L_z. A dobozban homogén erőtér hat a részecskére, azaz $\boldsymbol{F} = const$. A potenciál így $V(x,y,z) = -\boldsymbol{F}_x x - \boldsymbol{F}_y y - \boldsymbol{F}_z z$. Mivel az a potenciál lineáris x y és z-ben, a Schrödinger egyenlet szeparálható.

$$\psi_{klm}(x,y,z) = \phi_k(x')\,\phi_l(y')\,\phi_m(z') \tag{6.1}$$

Ahol $x' = \sqrt[3]{\frac{2m\boldsymbol{F}_x}{\hbar^2}}x - \sqrt[3]{\frac{2m}{\hbar^2\boldsymbol{F}_x^2}}E_k$, E_k pedig az 1 dimenziós probléma, Ti $\left(\sqrt[3]{\frac{2m\boldsymbol{F}_x}{\hbar^2}}L - \sqrt[3]{\frac{2m}{\hbar^2\boldsymbol{F}_x^2}}E\right) -$ Ti $\left(-\sqrt[3]{\frac{2m}{\hbar^2\boldsymbol{F}_x^2}}E\right) = 0$, k. $\phi_k(x')$ az 1D-s rész TODO:REFERENCIA hullámfüggvénye. y', z', valamint E_l és E_m hasonlóan vannak definiálva a hozzájuk tartozó 1 dimenziós probléma alapján. A 3D-s hullámfüggvényhez tartozó energia az 1D-s megoldásokhoz tartozó energiák összege.

$$E = E_k + E_l + E_m \tag{6.2}$$

Amennyiben valamelyik irányú komponense $\boldsymbol{F}$-nek 0, abban az esetben a hozzá tartozó 1D-s ppropléma a híres végtelen mély potenciálgödör, ahol

$$\phi_n = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{nx\pi}{L}\right) \tag{6.3}$$

valamint

$$E_n = \frac{\hbar^2 n^2}{2mL^2} \tag{6.4}$$

TODO: ÁBRA AZ EGYSZER FÜGGŐLEGES ESET ENERGIÁIRÓL, esetleg szintén L függvényében.

TODO: ábra 2D -quantum chaos in billiards-

TODO: 2D (3D?) videó link időfelődésről

7. Green függvény

A reolvens operátor definíciója

$$\hat{G}(E) = \frac{1}{\hat{H} - E} \tag{7.1}$$

és ezen operátorhoz tartozó két változós függvény a Green-függény.

$$G(x,y;E) = \langle x|\,G(E)\,|y\rangle \tag{7.2}$$

A Green-függvény név indokolt, és ennek a segítségével fogom meghatározni a Green-függvényeket konkrét esetben. A teljességi reláció beszúrásával látható, hogy a kvantummechanikai Green-függgény megegyezik a differenciálegyenletek elméletéből ismert Green-függvénnyel.

$$\left(\hat{H} - E\right) \hat{G}\left(E\right) = \hat{I} \tag{7.3}$$

$$\int \mathrm{d}x' \left\langle x\right| \left(\hat{H} - E\right) \left|x'\right\rangle \left\langle x'\right| \hat{G}\left(E\right) \left|y\right\rangle = \left\langle x\right| \hat{I} \left|y\right\rangle = \delta\left(x - y\right) \tag{7.4}$$

A $\left\langle x\right| \left(\hat{H} - E\right) \left|x'\right\rangle$ maggal vett konvolúció a $\hat{H} - E$ operátor hatása. Ezért

$$\left(\hat{H}_x - E\right) G\left(x, y; E\right) = \delta\left(x - y\right) \tag{7.5}$$

ami a differenciálegyenletek elméletéből ismert Green-függvény definíciója. Ebben a konkrét esetben

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + Fx - E\right) G\left(x, y; E\right) = \delta\left(x - y\right) \tag{7.6}$$

7.1. Egzakt Green-függvény

ami azt jelenti, hogy az $x < y$ tartományban

$$G\left(x, y; E\right) = C_1 \mathrm{Ai}\left(\sqrt[3]{\frac{2mF}{\hbar^2}}x - \sqrt[3]{\frac{2m}{\hbar^2 F^2}}E\right) + C_2 \mathrm{Bi}\left(\sqrt[3]{\frac{2mF}{\hbar^2}}x - \sqrt[3]{\frac{2m}{\hbar^2 F^2}}E\right) \tag{7.7}$$

illetve az $x > y$ tartományban

$$G\left(x, y; E\right) = C_3 \mathrm{Ai}\left(\sqrt[3]{\frac{2mF}{\hbar^2}}x - \sqrt[3]{\frac{2m}{\hbar^2 F^2}}E\right) + C_4 \mathrm{Bi}\left(\sqrt[3]{\frac{2mF}{\hbar^2}}x - \sqrt[3]{\frac{2m}{\hbar^2 F^2}}E\right) \tag{7.8}$$

, ahol a C együtthatók függhetnek y és E értékétől. A C együtthatók meghatározásához a doboz eredeti határfeltételeit $x = 0$ és $x = L$ pontban, valamint az $x = y$ pontban a 7.6. egyenlet y körüli integrálásából kapot feltételeket kell felhasználni. A doboz falára vonatkozó határfeltételek:

$$\left. G\left(x, y; E\right)\right|_{x=0} = 0 \tag{7.9}$$

$$\left. G\left(x, y; E\right)\right|_{x=L} = 0 \tag{7.10}$$

A 7.6. egyenlet $\int_{y-\epsilon}^{y+\epsilon} \mathrm{d}x' \int_{y}^{x'} \mathrm{d}x$ szerinti integrálja az $\epsilon \to 0^+$ határesetben:

$$\lim_{\epsilon \to 0^+} G\left(x, y; E\right)\Big|_{x=y-\epsilon}^{x=y+\epsilon} = 0 \tag{7.11}$$

A jobb oldal integrálja $(x-y)\,\theta\,(x-y)\big|_{x=y-\epsilon}^{x=y+\epsilon}$, ami a határesetben 0. Az $(Fx-E)\,G\,(x,y;E)$ integrálja is 0 a határesetben, mert az erdeti függvény is folytonos, így az integrálja is. A 7.6. egyenlet x szerinti integrálja y körüli ϵ sugarú környezetében az $\epsilon \to 0^+$ határesetben:

$$\lim_{\epsilon \to 0^+} \frac{\partial}{\partial x} G\left(x, y; E\right)\Bigg|_{x=y-\epsilon}^{x=y+\epsilon} = -\frac{2m}{\hbar^2} \tag{7.12}$$

Itt a jobb oldal integrálja $\theta\,(x-y)\big|_{x=y-\epsilon}^{x=y+\epsilon} = 1$ a határesetben. A bal oldalon az előzőhöz hasonló módon csak a derivált integrálja marad meg. A 7.7. és a 7.8. egyenlet behelyettesítése meghatározza a C együtthatókra vonatkozó egyenleteket:

$$\frac{C_2}{C_1} = -\mathrm{Ti}\left(-bE\right) \tag{7.13}$$

$$\frac{C_4}{C_3} = -\mathrm{Ti}\left(b\left(FL-E\right)\right) \tag{7.14}$$

$$\frac{C_3}{C_1} = \frac{\mathrm{Ti}\left(ay-bE\right) + \mathrm{Ti}\left(-bE\right)}{\mathrm{Ti}\left(ay-bE\right) + \mathrm{Ti}\left(b\left(FL-E\right)\right)} \tag{7.15}$$

TODO: b lecserélése bE-re az előző részekben.

$$C_1 = -\frac{2m}{a\hbar^2} \frac{1}{\left(\left(\frac{C_3}{C_1}-1\right)\mathrm{Ai}'\left(ay-bE\right) + \left(\frac{C_4}{C_3}\frac{C_3}{C_1} - \frac{C_2}{C_1}\right)\mathrm{Bi}'\left(ay-bE\right)\right)} \tag{7.16}$$

$$C_1 = -\frac{a^2}{F} \frac{1}{\left(\left(\frac{C_3}{C_1}-1\right)\mathrm{Ai}'\left(ay-bE\right) + \left(\frac{C_4}{C_3}\frac{C_3}{C_1} - \frac{C_2}{C_1}\right)\mathrm{Bi}'\left(ay-bE\right)\right)} \tag{7.17}$$

A 7.13-7.16, 7.7. és a 7.8. egyenletek explicit, analitikus módon előállítják a $G\left(x,y;E\right)$ Green-függvényt.

7.2. Green-függvény perturbáció számítással

A perturbációszámításhoz a Hamilton operátort két részre bontom fel:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} \tag{7.18}$$

A $\hat{H}_0$ operátorhoz tartozó rezolvens $\hat{G}_0\left(E\right)$. $\hat{H}$ és $\hat{H}_0$ kifejezhetőek a rezolvenseikkel. Ha a kifejezéseket behelyettesítjük a fenti egyenletbe, implicit egyenletet kapunk

$opG\left(E\right)$-re nézve, melyet fel lehet használni perturbációszámításra. Az egyenletet balról $\hat{G}_0^{-1}\left(E\right)$-vel, jobbról $\hat{G}^{-1}\left(E\right)$-vel szorzunk.

$$\hat{G}^{-1}\left(E\right)+E=\hat{G}_0^{-1}\left(E\right)+E+\hat{V} \tag{7.19}$$

$$\hat{G}\left(E\right)=\hat{G}_0\left(E\right)-\hat{G}_0\left(E\right)\hat{V}\hat{G}\left(E\right) \tag{7.20}$$

Az alábbi módon definiálva $\hat{G}_n\left(E\right)$ operátort, a 7.20. egyenlethez hasonló rekurziós összefüggés áll fent:

$$\hat{G}_n\left(E\right)=\hat{G}_0\left(E\right)\sum_{k=0}^{n}\left(-\hat{V}\hat{G}_0\left(E\right)\right)^k \tag{7.21}$$

$$\hat{G}_{n+1}\left(E\right)=\hat{G}_0\left(E\right)-\hat{G}_0\left(E\right)\hat{V}\hat{G}_n\left(E\right) \tag{7.22}$$

Ha $\left\|\hat{V}\hat{G}_0\left(E\right)\right\|<1$ akkor a $\hat{G}_n$ sorozat konvergál, és kielégíti a 7.20. egyenletet. Ezért konvergencia esetén:

$$\hat{G}\left(E\right)=\hat{G}_0\left(E\right)\sum_{n=0}^{\infty}\left(-\hat{V}\hat{G}_0\left(E\right)\right)^n \tag{7.23}$$

A perturbbálatlan operátornak a lineáris potenciál nélküli dobozba zárt részecske Hamilton operátorát választom, $\hat{H}_0=\frac{1}{2m}\hat{p}^2$, így a lineáris potenciál marad a perturbáció $\hat{V}=F\hat{x}$. A perturbálatlan $\hat{G}_0\left(E\right)$ Green-függvényt is a 7.13-7.16, 7.7. és a 7.8. egyenletek alapján határozom meg.

$$G_0\left(x,y;E\right)=\begin{cases}-\frac{2m}{k\hbar^2}\frac{1}{\sin(kL)}\sin\left(k\left(y-L\right)\right)\sin\left(kx\right) & x\leq y\\ -\frac{2m}{k\hbar^2}\frac{1}{\sin(kL)}\sin\left(k\left(x-L\right)\right)\sin\left(ky\right) & x>y\end{cases} \tag{7.24}$$

, ahol $k=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$. TODO: V=Fx => V = Fx - FL/2 gyorsabb és gyakoribb konvergeciáért TODO: plot konvergencia tartomány

8. Videó gyártás leírása