

Tallinna Reaalkool

**Osakeste liikumine ühedimensionaalsetes
tsentraalsümmeetrilistes astmefunktsioonilistes
potentsiaaliväljades**

Uurimistöö

Kaarel Hänni

11. A

Juhendajad: Toomas Reimann, Kristjan Kongas, Oleg Koshik

Tallinn 2016

Sisukord

Sisukord.....	2
Sissejuhatus	4
1. Ühikud, tähised	6
1.1 Ühikud.....	6
1.2 Tähised	6
2. Potentsiaaliväljades võnkumise teoreetiline kirjeldamine ning võnkeperioodide avaldamine	8
2.1 Vaadeldavad potentsiaalid.....	8
2.2 Võnkumise klassikalis-mehaaniline käsitlus.....	8
2.2.1 Hamiltoniani meetod	8
2.2.2 Hamiltoniani meetodi rakendamine võnkeperioodi leidmiseks – diferentsiaalvõrrandiline käsitlus.....	9
2.2.3 Hamiltoniani meetodi rakendamine võnkeperioodi leidmiseks – Integraaliline käsitlus.....	9
2.2.4 Kirjeldataud meetodite rakendamine astmefunktsioonilistele potentsiaalidele	10
2.3 Võnkumise kvantmehaaniline käsitlus	13
2.3.1 Lainepakett	13
2.3.2 Schrödingeri pilt.....	14
2.3.3 Tüüpiline lahendusmeetod	14
2.3.4 Diferentsiaalvõrrandiga omaolekute leidmine	15
2.3.5 Operaatorite meetod harmoonilise võnkumise jaoks	15
2.3.6 Vabadusastmed.....	17
2.3.7 Ehrenfesti teoreem ja vastavusprintsip.....	18
3. Võnkumise simuleerimine, andmetöötlus ja –analüüs	19
3.1 Simulaatori programmeerimine.....	19
3.1.1 Simulatsiooni tehniline kirjeldus.....	19
3.1.2 Simulatsioonis kasutatud algoritm	19
3.1.3 Ääretingimused ja difusioon	20

3.1.4 Simulatsiooni testjuhud	20
3.2 Simuleerimistulemused	21
3.2.1 Visualiseerimismeetodi kirjeldus	21
3.2.2 Tulemused	21
3.3 Järeldused	25
3.3.1 Tulemuste usaldusväärsus	25
3.3.2 Hüpoteesi paikapidavus	25
Kokkuvõte	26
Kasutatud materjalid	28
Lisa 1. Täielikud andmekogumid	29
Lisa 2. Näide lainepaketi arengust	30
Lisa 3. Programmi üks versioon	31
Resümee	41
Abstract: The movement of particles in centrosymmetric one-dimensional power function potentials	42

Sissejuhatus

Füüsikas on harmoonilise ostsillaatori potentsiaalis (potentsiaalne energia sõltub võrdeliselt kauguse ruudust) liikumine ehk harmooniline võnkumine tähtis ja põhjalikult nii klassikaliselt (jõud, Langrangiani, Hamiltoniani meetodid) kui ka kvantmehaaniliselt (klassikaline kvantmehaanika, kvantväljateooria) uuritud protsess. Ameerika teoreetiline füüsik ja Harvardi professor Sidney Coleman ütles: „*The career of a young theoretical physicist consists of treating the harmonic oscillator in ever-increasing levels of abstraction.*“ [Tong 2006] Suur osa harmoonilise potentsiaali tähtsusest tuleneb sellest, et just selline potentsiaal on tüüpiliselt potentsiaalimiinimumi ümber, sest seal on definitsioonikohaselt potentsiaali esimene tuletis null ja oluline on teine tuletis (kui see just null pole, mis on pigem erandjuht), mis annabki vastava Tayloriga jada välja kirjutades harmoonilist potentsiaali iseloomustava matemaatilise võrrandi.

Astmefunktsioonilistest potentsiaalidest on peale harmoonilise võnkumise levinud ka Coulombi potentsiaal (potentsiaal on pöördvõrdeline kaugusega), mille simuleerimine on aga vähemalt ühedimensionaalsel juhul keerukam, sest potentsiaal omandab lõpliku kaugusega piirkonnas (sümmeetriakeskme läheduses) lõpmatuid väärtuseid. Samas on huvitav vaadelda ka teisi astmesõltuvuslikke potentsiaale, sest mõnedel erandjuhtudel võivad need siiski esineda, näiteks annavad teisi, küll jällegi eelnimetatud põhjusel halvema simuleeritavusega negatiivse astendajaga astmefunktsioonilisi potentsiaale dipoolide ja muude n -poolide elektriväljad. Teistsuguste füüsikaseaduste (potentsiaali ja jõu omavaheliste sõltuvuste) puhul võiksid tähtsust omada ka teised positiivse astendajaga potentsiaalid. Osakestefüüsikast võib leida eksponentsiaalse potentsiaaliga mudeli (Yukawa potential) [Martin, Shaw 2008: 20], mis on tegelikult avaldatav ka lõpmatu polünoomina, kuid ka selline potentsiaal on pigem haruldus.

Simuleerimisel tekkivate lõpmatuste probleemi võiks küll mingil määral lahendada kahe- või kolmedimensionaalsete liikumiste vaatlemine, sest seal ei pea klassikaliselt potentsiaalis liikuv osake ilmingimata koordinaatide alguspunkti läbima (ning vastavalt loeb ka

kvantmehaanilisel vaatlusel sealne potentsiaal vähe, selle võib asendada mingi suure, ent lõpliku potentsiaaliga), aga kahjuks võtaks sellistes potentsiaalides liikumise sama täpne (sama resolutsiooniga) simuleerimine töö autori arvuti jaoks liialt palju aega.

Käesolev töö kirjeldabki osakeste liikumist potentsiaaliväljades, mida autori arvuti võimaldab piisavalt hästi simuleerida, need on positiivse astendajaga astmefunktsioonilised sümmeetrilised ühedimensionaalsed potentsiaaliväljad. Töö täpsem eesmärk on töötada välja üldmeetod vaadeldavate potentsiaalide kirjeldamiseks ning seda kasutades leida osakeste (lainepakettide) võnkeperioodid kvantmehaanilise ja klassikalis-mehaanilise mudeli järgi ning neid kvantitatiivselt võrrelda. See tähendab, et vaadeldakse kahe erineva meetodiga saadud võnkeperioodi jagatise muutumist. Klassikaline võnkeperiood tuletatakse teoreetiliselt liikumisvõrranditest, kvantmehaanilise juhu uurimiseks on autor kirjutanud simulaatori, mis lahendab Schrödingeri võrrandit ja leiab osakese võnkeperioodi kvantmehaanilise analoogi.

Uurimistöö üks hüpotees on, et üldiselt energia (väljakonstandi ja algpositsiooni) kasvamisel läheneb vaadeldav ajaperioodide suhe 1-le, mis tähendab, et klassikaline ja kvantmehaaniline võnkeperiood lähenevad üksteisele, mida saab põhjendada üldisemalt vastavusprintsipi ja täpsemalt Ehrenfesti teoreemiga, seda on kirjeldatud töö osas 2.3.7.

Varasemates töödes on põhjalikult uuritud harmoonilist potentsiaali, ent teiste vaadeldavate potentsiaalide kohta kvantmehaanilisi ega üldiseid võnkeperioode leidvaid uurimusi pole töö autor leidnud. Lisaks on välja töötatud üldised meetodid potentsiaalide analüüsimiseks (Hamiltoniani meetod), mida autor töös ka kasutab.

Uurimistöö on jaotatud kolme ossa, kus esimeses osas on töö mõistmise hõlbustamiseks toodud töös kasutatavad ühikud ning tähised. Töö teises osas on kirjeldatud vaadeldavates potentsiaalides võnkumist teoreetiliselt, sealhulgas leitud avaldis klassikalise võnkeperioodi jaoks ning kirjeldatud simulaatori toimimiseks vajalikku kvantmehaanikat. Töö kolmandas osas on analüüsitud simulaatori toimimist ning simulatsiooni tulemusi.

Suur tänu uurimistöö juhendajatele Toomas Reimannile, Kristjan Kongasele ja Oleg Koshikule, kelle nõu oli mõneski küsimuses abiks.

1. Ühikud, tähised

1.1 Ühikud

Käesolevas töös on kasutatud naturaalseid ühikuid, mis tähendab, et valguse kiirus c ja redutseeritud Plancki konstant \hbar on ühikuta suurused ning $c=\hbar=1$, seega mõõdetakse aega meetrites, osakese impulss on võrdne lainevektoriga ja energia on võrdne nurksagedusega.

1.2 Tähised

Töös kasutatakse üldiselt füüsikas levinuid tähiseid, järgnevalt on esitatud kirjalikus osas kasutatud tähistate nimekiri. Ainus vähem levinud tähis on k väljakonstandi jaoks harmoonilise võnkumise potentsiaali puhul, seal on k tavaliselt Hooke'i seadusest pärinev kordaja, aga käesolevas töös on mugavuse ja teiste potentsiaaliväljadega samasuguse käsitluse tarbeks võetud k Hooke'i seaduse kordajast 2 korda väiksemaks. Kvantmehaaniliste operaatorite tähistamisel on kasutatud Massachusetts Institute of Technology 804. kursuses kasutatud tähiseid [Adams, Zwiebach 2013].

E_k – kineetiline energia

E_p – potentsiaalne energia

H/\hat{H} – klassikaline/kvantmehaaniline Hamiltoniaan

k – väljakonstant

l – naturaalarv

m – mass

n – naturaalarv ja potentsiaalivälja aste

p – impulss/impulsioperaator või selle analoog

t – ajakoordinaat

T – võnkeperiood

V – potentsiaal

ω – nurksagedus

x – ruumikoordinaat/asukohaoperaator

x_0 – algkoordinaat

x_{\max} – maksimaalne x -koordinaadi väärtus

σ – standardhälve

Ψ – lainefunktsioon

Φ – operaatori omafunktsioon ehk omavektor ehk omaolekuline lainefunktsioon
(*eigenfunction*)

2. Potentsiaaliväljades võnkumise teoreetiline kirjeldamine ning võnkeperioodide avaldamine

2.1 Vaadeldavad potentsiaalid

Töös vaadeldakse osakeste liikumist astmefunktsioonilistes ühedimensionaalsetes sümmeetrilistes potentsiaaliväljades ehk potentsiaalides $V(x) = k \cdot |x|^n$. Sellistest potentsiaalidest omab suuremat füüsikalist tähtsust harmooniline potentsiaal $V(x) = k \cdot |x|^2 = k \cdot x^2$, mis on väga levinud, palju uuritud ning millel on kasulikke omadusi, mis lubavad seda kasutada ka praktilises osas programmi töökölblikkuse kontrollimiseks.

2.2 Võnkumise klassikalis-mehaaniline käsitus

2.2.1 Hamiltoniani meetod

Klassikaliselt võib osakese liikumist potentsiaaliväljas kirjeldada Hamiltoni võrranditega [Weisstein 2016b]

$$\dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p}$$

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial x}$$

kus H on süsteemi Hamiltoniaan. Kui x on Cartesiuse ruumikoordinaat ning p sellele vastav impulss, siis

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

Seega, teades x ja p väärtuseid antud hetkel ning Hamiltoniaani (mis sõltub ainult x -st ja p -st), saab alati arvutada x ja p muutumist.

2.2.2 Hamiltoniani meetodi rakendamine võnkeperioodi leidmiseks – diferentsiaalvõrrandiline käsitlus

Osa 2.2.1 põhjal saab välja kirjutada

$$m \frac{d^2x}{dt^2} = \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial x} = -\frac{\partial V}{\partial x}$$

$$m \frac{d^2x}{dt^2} = -\frac{\partial V}{\partial x}$$

Potentsiaal V on funktsioon x -st, seega on ka $\frac{\partial V}{\partial x}$ funktsioon x -st ja teadaoleva V korral saab siit diferentsiaalvõrrandi, mille lahendamisel saab liikumisvõrrandi $x(t)$, mille periood on ka otsitav liikumisperiood. Antud juhul võib liikumisperioodi leidmiseks määrata ka aja x -i kahe järjestikuse ekstreemumi puhul ning perioodi saamiseks selle kahega korrutada, sest liikumine on kummaski suunas samasugune (osakese erinevates suundades liikumist eristab igas punktis ainult kiiruse suund).

2.2.3 Hamiltoniani meetodi rakendamine võnkeperioodi leidmiseks – Integraaliline käsitlus

Hamiltoniaani väärtus on konstantne, sest see on alati lihtsalt potentsiaalse ja kineetilise energia summa ehk koguenergia. Nii saab arvutada kineetilise energia

$$E_k = H - E_p = H - V(x)$$

millest omakorda saab kiiruse

$$\frac{mv^2}{2} = E_k = H - V(x)$$

$$v(x) = \sqrt{\frac{2(H - V(x))}{m}}$$

Vaadeldavad potentsiaalid on sümmeetrilised $x=0$ suhtes, mis tähendab, et

$$V(x) = V(-x)$$

siit ka

$$|v(x)| = |v(-x)|$$

Seega on liikumine sümmeetriline $x=0$ suhtes ning ajaperiood on punktist $x=0$ ekstreemumini liikumise ajast neli korda suurem. Ekstreemumi definitsiooni järgi

$$0 = \frac{dx}{dt} = v$$

Kineetiline energia on ekstreemumis x_{max} seega 0 ja kogu energia on potentsiaalne, siis

$$H = V(x_{max})$$

Perioodi T saab eelneva põhjal avaldada järgnevalt

$$\begin{aligned} T &= 4 \int_0^{\frac{T}{4}} dt = 4 \int_0^{x_{max}} \frac{dx}{v(x)} = 4 \int_0^{x_{max}} \frac{dx}{\sqrt{\frac{2(H - V(x))}{m}}} = 4 \int_0^{x_{max}} dx \sqrt{\frac{m}{2(H - V(x))}} = \\ &= 4 \int_0^{x_{max}} dx \sqrt{\frac{m}{2(V(x_{max}) - V(x))}} = 2\sqrt{2m} \int_0^{x_{max}} dx \sqrt{\frac{1}{V(x_{max}) - V(x)}} \end{aligned}$$

Selle integraal ei pruugi aga olla eriti lihtne funktsioon, sest

$$\lim_{x \rightarrow x_{max}} \sqrt{\frac{1}{V(x_{max}) - V(x)}} = \infty$$

2.2.4 Kirjeldatud meetodite rakendamine astmefunktsioonilistele potentsiaalidele

Diferentsiaalvõrrandilise käsitleusega sai diferentsiaalvõrrandi

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = -\frac{\partial V}{\partial x}$$

Asetades sisse potentsiaali $V(x) = k|x|^n$, saab

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = - \frac{\partial (k|x|^n)}{\partial x} = -\delta(x)kn|x|^{n-1},$$

kus $\delta(x)$ on signumfunktsioon, mis on defineeritud järgnevalt

$$\delta(x) = \begin{cases} -1, & x < 0 \\ 0, & x = 0 \\ 1, & x > 0 \end{cases}$$

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = -\delta(x)kn|x|^{n-1}$$

$$\frac{d^2 x}{dt^2} = -\delta(x) \frac{kn}{m} |x|^{n-1}$$

Paarisarvulise potentsiaalivälja astme n puhul on ülemise võrduse parem pool sama, kui jätta ära $\delta(x)$ ja absoluutväärtuse võtmine, sest tekkivad märgid taanduvad omavahel välja

$$\frac{d^2 x}{dt^2} = -\delta(x) \frac{kn}{m} |x|^{n-1} = -\frac{kn}{m} x^{n-1}$$

Sellisel diferentsiaalvõrrandil üldkujuline lihtsasti arvutatav lahendfunktsioon puudub, nimelt annavad paarisarvulised potentsiaalivälja astmed Gaussi hüpergeomeetrilist funktsioonisi sisaldava avaldise, mille üldjuhul välja arvutamine nõuab keerulise lõpmatu summa väärtuse leidmist ning isegi, kui see lihtsustuks tänu mingi parameetri sobilikule väärtusele, siis oleks paaritute n -ide puhul ikkagi tarvis lahendada signumfunktsiooni sisaldav diferentsiaalvõrrand, mis raskendaks protsessi veelgi. Samas on see hõlpsasti lahenduv $n=1$ (konstantne jõud) ja $n=2$ (harmooniline potentsiaal) puhul, aga nende lahendite väljakirjutamine ei osutu töö seisukohalt oluliseks, sest integraaliline käsitus on vaadeldavate potentsiaalide korral juba üldjuhul võnkeperioodi leidmisel edukas.

Integraalilise käsitlusega saab

$$\begin{aligned} T &= 2\sqrt{2m} \int_0^{x_{\max}} dx \sqrt{\frac{1}{V(x_{\max}) - V(x)}} = 2\sqrt{2m} \int_0^{x_{\max}} dx \sqrt{\frac{1}{k(x_{\max}^n - x^n)}} = \\ &= 2\sqrt{2m} \int_0^{x_{\max}} dx \sqrt{\frac{1}{k(x_{\max}^n - x^n)}} = 2\sqrt{\frac{2m}{kx_{\max}^n}} \int_0^{x_{\max}} dx \sqrt{\frac{1}{1 - \frac{x^n}{x_{\max}^n}}} \end{aligned}$$

Nüüd saab teha muutujavahetuse

$$y = \frac{x}{x_{\max}}$$

siis

$$dx = x_{\max} dy$$

ja integraali saab avaldada kujul

$$T = 2 \sqrt{\frac{2m}{kx_{\max}^n}} \int_0^{x_{\max}} dx \sqrt{\frac{1}{1 - \frac{x^n}{x_{\max}^n}}} = 2 \sqrt{\frac{2m}{kx_{\max}^{n-2}}} \int_0^1 dy \sqrt{\frac{1}{1 - y^n}}$$

Integreerides saab

$$\int dy \sqrt{\frac{1}{1 - y^n}} = y {}_2F_1\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{n}; 1 + \frac{1}{n}; y^n\right)$$

Viimast integraali on soovi korral kerge põhjendada, viies mõlemad pooled tagasi diferentsiaalvõrrandilisele kujule. ${}_2F_1$ on Gaussi hüpergeomeetiline funktsioon, mille avaldamine pole sugugi triviaalne, sest see on defineeritud järgnevalt [Weisstein 2016c]:

$${}_2F_1(a, b; c; z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(a)_k (b)_k z^k}{(c)_k k!}$$

Siin $(a)_k$ tähistab tõusvat Pochhammeri funktsiooni [Weisstein 2016e].

Avaldamine muutub aga praegusel juhul võimalikuks, sest kehtib Gaussi teoreem [Weisstein 2016a]

$${}_2F_1(a, b; c; 1) = \frac{\Gamma(c)\Gamma(c-a-b)}{\Gamma(c-a)\Gamma(c-b)}$$

Siin $\Gamma(x)$ on gammafunktsioon [Gourdon, Sebah 2002].

Praegusel juhul

$$\int_0^1 dy \sqrt{\frac{1}{1-y^n}} = {}_2F_1\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{n}; 1 + \frac{1}{n}; 1^n\right) - {}_2F_1\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{n}; 1 + \frac{1}{n}; 0^n\right) = {}_2F_1\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{n}; 1 + \frac{1}{n}; 1\right)$$

$$= \frac{\Gamma\left(1 + \frac{1}{n}\right) \Gamma\left(1 + \frac{1}{n} - \frac{1}{2} - \frac{1}{n}\right)}{\Gamma\left(1 + \frac{1}{n} - \frac{1}{2}\right) \Gamma\left(1 + \frac{1}{n} - \frac{1}{n}\right)} = \frac{\Gamma\left(1 + \frac{1}{n}\right) \Gamma\left(\frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{n}\right) \Gamma(1)} = \frac{\sqrt{\pi} \Gamma\left(\frac{1}{n}\right)}{n \Gamma\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{n}\right)}$$

Perioodi avaldisiks saab

$$T = 2 \sqrt{\frac{2m}{kx_{max}^{n-2}}} \int_0^1 dy \sqrt{\frac{1}{1-y^n}} = 2 \sqrt{\frac{2m}{kx_{max}^{n-2}}} \frac{\sqrt{\pi} \Gamma\left(\frac{1}{n}\right)}{n \Gamma\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{n}\right)} = 2 \sqrt{\frac{2m\pi}{kx_{max}^{n-2}}} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{n}\right)}{n \Gamma\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{n}\right)}$$

$$T = 2 \sqrt{\frac{2m\pi}{kx_{max}^{n-2}}} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{n}\right)}{n \Gamma\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{n}\right)}$$

2.3 Võnkumise kvantmehaaniline käsitlus

2.3.1 Lainepakett

Kvantmehaanikas kirjeldab osakest selle lainefunktsioon, osakese asetamine kindlasse asukohta tähendaks, et lainefunktsioon on asukohaoperaatori omaolek ehk Diraci deltafunktsioon koordinaadist, ent siis oleks osakese impulsi määramatus lõpmatu, mis pole soovitatav, sest klassikalises analoogis on algpositsioonis seisev osake. Samuti peaks kindla kiiruse puhul osake olema impulsi omaolekus, mis pole ka soovitatav, sest siis on osakese positsiooni määramatus lõputu. Lainefunktsiooni ja operaatorite definitsioonidest saab tuletada määramatusprintsipi [Gottlieb, Pleiffer 2013]

$$\Delta p_x \Delta x \geq \frac{1}{2}$$

Kui lainefunktsioon on Gaussi jaotus [Weisstein 2016d]

$$\psi = c e^{\frac{-x^2}{2\sigma^2}}$$

kus σ on standardhälve ja c on normaliseerimiskonstant, siis

$$\Delta p_x \Delta x = \frac{1}{2}$$

Seetõttu kutsutakse Gaussi-jaotuselist lainefunktsiooni minimaalse määramatusega lainefunktsiooniks ning seda kasutatakse tüüpiliselt osakese kvantmehaanilise lähendusena. Gaussi-jaotuselist lainefunktsiooni kutsutakse ka lainepaketiks.

2.3.2 Schrödingeri pilt

Siin ja edaspidi tähistavad x ja p impulsi ja asukoha väärtuste asemel neile vastavaid operaatoreid. Schrödingeri pildis jäävad operaatorid samaks ja lainefunktsioon muutub ajas, seda Schrödingeri võrrandi järgi [Adams, Zwiebach 2013]

$$i \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi$$

kus kvantmehaaniline Hamiltoniaan \hat{H} on energia kvantiseerimisel saadud lineaarne operaator ja ühtlasi lainefunktsiooni ajatranslatsiooniopeatori generaator. See on defineeritud järgnevalt:

$$\hat{H} = V(x) + \frac{p^2}{2m} = V(x) - \frac{1}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

2.3.3 Tüüpiline lahendusmeetod

Klassikalises kvantmehaanikas on võrrandi analüütilise lahendamise tavaline meetod Hamiltoniaani omafunktsioonide leidmine ehk selle potentsiaali omaväärtusprobleemi lahendamine ning nende kasutamine lainefunktsiooni arengu arvutamiseks. Kõikvõimalikud lainefunktsioonid saab avaldada suvalisele füüsikalisele suurusele vastava operaatori omafunktsioonide lineaarkombinatsioonidena, kus igale omafunktsioonile vastav kordaja on selle omafunktsiooni ja uuritava lainefunktsiooni skalaarkorrutis. Samas arenevad Hamiltoniaani omaolekud Schrödingeri võrrandi järgi faasiga läbi korrutudes, mis annab kätte avaldise süsteemi edasise arengu jaoks, sest Schrödingeri võrrand on lineaarne osatuletistega diferentsiaalvõrrand (sest \hat{H} on lineaarne operaator) ja seega on suvalise lainefunktsiooni

areng avaldatav vastavate kordajatega omafunktsioonidele vastavate diferentsiaalvõrrandite summana.

2.3.4 Diferentsiaalvõrrandiga omaolekute leidmine

Iga potentsiaali puhul ei pruugi aga omaolekute leidmine olla eriti lihtne, mis kehtib ka peaaegu kõigi antud töös vaadeldavate potentsiaalide jaoks. Omaolekuid saab leida nende definitsioonile vastava diferentsiaalvõrrandi lahendamisel.

$$\hat{H}\Phi = V(x)\Phi - \frac{1}{2m} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} = H\Phi$$

Siin H on definitsiooni kohaselt Hamiltoniaani omaväärtus omafunktsiooni Φ jaoks.

Diferentsiaalvõrrandi võib ümber kirjutada kujule

$$(H - V(x))\Phi + \frac{1}{2m} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} = 0$$

Selle lahenduvus sõltub aga suuresti potentsiaalist, siinsete juhtude puhul $V(x) = k \cdot |x|^n$

$$(H - k|x|^n)\Phi + \frac{1}{2m} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} = 0$$

See aga lahendub lihtsasti ainult üksikute n -de puhul (näiteks $n=0$), juba $n=1$ puhul on lahendfunktsioonid keerukad, $n=2$ puhul on lahendfunktsioonid Hermite'i polünoomid, mida saab küll ka diferentsiaalvõrrandi abil leida, ent see jääks selle töö eesmärgist liialt kaugele.

2.3.5 Operaatorite meetod harmoonilise võnkumise jaoks

Mõned omafunktsioonid on erandlikult leitavad ka teistsuguste meetoditega, olulisemaid sääraseid on füüsikas kaks: impulssmomendi omafunktsioonid ja harmoonilise potentsiaali omafunktsioonid [Susskind 2013]. Harmoonilise potentsiaali Hamiltoniaan on

$$\hat{H} = kx^2 + \frac{p^2}{2m}$$

Harmoonilise võnkumise puhul on levinud defineerida klassikalise juhu järgi

$$\omega = \sqrt{\left(\frac{2k}{m}\right)}$$

Nüüd saab ümber kirjutada ka Hamiltoniaani

$$\hat{H} = kx^2 + \frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2}m\omega^2x^2 + \frac{p^2}{2m}$$

Selle saab tegurdada nii

$$\hat{H} = \frac{1}{2}m\omega^2x^2 + \frac{p^2}{2m} = (a^\dagger a + \frac{1}{2})\omega$$

Operaatorid a ja a^\dagger on defineeritud järgnevalt:

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2}}\left(x + \frac{i}{m\omega}p\right)$$

$$a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2}}\left(x - \frac{i}{m\omega}p\right)$$

a^\dagger on a kaasoperaator. Defineeritakse uus operaator

$$N = a^\dagger a$$

Lui $|l\rangle$ tähistab vähimast energiatasemest lugemist alustades omaolekut järjekorranumbriga $l + 1$, siis kehtivad järgmised kasulikud omadused:

$$[a, a^\dagger] = 1$$

$$[N, a^\dagger] = a^\dagger$$

$$[N, a] = -a$$

$$N|l\rangle = l|l\rangle$$

$$\hat{H}|l\rangle = \omega\left(l + \frac{1}{2}\right)|l\rangle$$

$$a^+|l\rangle = \sqrt{l+1}|l+1\rangle$$

$$a|l\rangle = \sqrt{l}|l-1\rangle$$

Neist omadustest tuleneb, et igast energia omaolekust saab liikuda lõpmatult energiavahega w üles ning alla kuni nullvektorini, jõudes igal korral energia uue omaolekuni, moodustades nii omaolekute redeli. Siis on a ja a^+ seda redelit mööda liikumise operaatorid. See tulemus on väga oluline nii klassikalises kvantmehaanikas kui ka kvantväljateoorias.

Kahjuks pole leitud, et selline meetod annaks tulemusi teiste astmepotentsiaalide puhul, sest samasugust kommutaatoralgebrat ei teki (sarnaselt Hamiltoniaani tegurdades on tegurite omadused teistsugused, näiteks $n=4$ puhul jääb säärast tegurdades vabaliikme $\frac{1}{2}$ asemel teiseks liikmeks hoopis positsioonioperaatori kordne). $V = kx^2$ korral võimaldab säärast algebra tekke see, et impulsi ja positsiooni aste on sama, sest siis jääb ka nende operaatorite kommutaatoriga liikmesse x aste ja p aste samaks, mis annab kommutaatorile kompleksarvulise väärtuse.

2.3.6 Vabadusastmed

Kõnealuses töös vaadeldavate juhtude viis vabadusastet on järgmised: potentsiaalivälja aste n , väljakonstant k , lainepaketi algne asukoht x_0 , lainepaketi laius (Gaussi jaotuse standardhälve) σ ja osakese mass m . Tegelikult saab aga kõik juhud läbi vaadata ka kõiki vabadusastmeid analüüsivalt. Näiteks ei pea läbi vaatama massi vabadusastet, sest korrutades massi suvalise konstandi a -ga läbi ja jagades väljakonstandi sama konstandiga jääb perioodide suhe konstantseks, sest nii klassikaline kui ka kvantmehaaniline võnkeperiood jaguvad täpselt a -ga (tuleb Schrödingeri ja Hamiltoni võrrandite vaatlusest) ja seega saab suvalise massi pealt üle minna kindla massi peale ning seal vastava väljakonstandiga perioodide suhte leida.

Samuti ei pea läbi vaatama lainepaketi laiuse vabadusastet, sest suvalise laiusega lainepaketi saab perioodide suhet konstantseks jättes viia kindla laiuse peale. Olgu uus laius b korda algsest suurem. Kui korrutada ka asukoht b -ga läbi ning väljakonstant b^n -iga läbi jagada, jääb perioodide suhe samaks. Mõlemad vaadeldud vabadusastmetevahelised sümmeetriad on tegelikult lihtsalt ühikuvahetused (vastavalt massi- ja pikkusühikuvahetused). Kokkuvõttes

võib seega läbi vaadata ainult lainepaketi algse asukoha, väljakonstandi ja välja astme vabadusastmed ning tegelikult on sellega kõik juhud analüüsitud.

2.3.7 Ehrenfesti teoreem ja vastavusprintsii

Ehrenfesti teoreem väidab, et suvalise potentsiaali ja lainefunktsiooni korral

$$m \frac{d\langle x \rangle}{dt} = \langle p \rangle$$

ja

$$\frac{d\langle p \rangle}{dt} = - \left\langle \frac{\partial V(x)}{\partial x} \right\rangle$$

Kandilised sulud tähistavad siin vastava suuruse keskväärtuseid. Tasub tähele panna, et kui teises võrrandis oleks $-\left\langle \frac{\partial V(x)}{\partial x} \right\rangle$ asemel $-\frac{\partial V(\langle x \rangle)}{\partial x}$, areneks kvantmehaanilised keskväärtused täpselt Newtoni liikumisvõrrandite järgi. Seega, mida väiksem on $\left\langle \frac{\partial V(x)}{\partial x} \right\rangle$ ja $\frac{\partial V(\langle x \rangle)}{\partial x}$ erinevus, seda lähemal on kvantmehaaniline võnkeperiood klassikalisele. Võnkeperioodide läheduse määramiseks vaadatakse nende jagatist; seetõttu peaks ka siin võrreldavate liikmete jaoks kasutama nende jagatist, mis on pigem ühele lähemal, kui tegu on suurema potentsiaaliga piirkondadega, sest eeldusel, et erinevus on oma olemuselt pigem absoluutne, omab see suurema arvuga läbi jagamisel väiksemat tähtsust.

Sama tulemuseni jõuaks, kasutades otse Bohri vastavusprintsii, mis väidab, et energia kasvades lähenevad kvantmehaanilised tulemused klassikalistele. Seega peaks ootama tulemusi, kus väljakonstandi ja algpositsiooni kasvamisel võnkeperioodide suhe läheneb ühele.

3. Võnkumise simuleerimine, andmetöötlus ja –analüüs

3.1 Simulaatori programmeerimine

3.1.1 Simulatsiooni tehniline kirjeldus

Simulatsioon on kirjutatud programmeerimiskeeles C++, kasutades enamasti programmeerimiskeskonda Microsoft Visual Studio 2013, kuigi programm peaks jooksuma ka teistel levinud C++ programmeerimiskeskondades. Simulatsioon on kirjutatud üpris modulaarselt, mis tähendab, et seda on vajadusel kerge ka teistsuguste algsete lainefunktsioonide, potentsiaaliväljade, resolutsioonide või mõõtmisvahemikega kasutada.

Lisaks on programmi kompileerimisel kasutusel O2-optimeerimine, mis teeb programmi märkimisväärselt (suurusjärg 10 korda) kiiremaks – sel juhul läheb ühtede algtingimustega võnkeperioodi leidmiseks umbes 10 sekundit.

3.1.2 Simulatsioonis kasutatud algoritm

Simulatsioon simuleerib osakese liikumist ühes dimensioonis antud potentsiaaliväljas, kusjuures simulatsiooni potentsiaali saab hõlpsasti muuta. Simulatsioonis on positsioonitelg jaotatud väikesteks lõikudeks, igale lõigule on määratud oma lainefunktsiooni väärtus (reaal- ja imaginaarosa).

Simulatsioon põhineb lihtsalt Schrödingeri võrrandi Euleri meetodil ajas edasi arvutamisel, teisi tulelisi arvutatakse lokaalsete lainefunktsiooni väärtuste kaudu, mis võib küll tekitada kõrgsageduslikke suvalisi võnkumisi, ent seda parandab sisseprogrammeeritud difusioon, millest räägib töö osa 3.1.3. Võnkeperiood leitakse asukoha keskväärtuse sümmeetriakeskme ($x=0$) läbimise aegade võrdlemise järgi.

3.1.3 Ääritingimused ja difusioon

Simulaatoril peavad tahes-tahtmata olema piirid, sest simulatsioon peab jooksma lõplikus ajas, kuigi tegelikkuses on osakese lainefunktsioon kõigis ruumipunktides defineeritud. Simulatsiooni ääritingimused tekitasid selle algversioonis kõrgsageduslikke laineid, sest ääres hakkasid teised tuletised eksponentsiaalselt kasvama ning tekkivad lainetused löid ka lainepaketi segamini (tekkisid suured ja väga erinevad impulsid). Seda sai parandada difusiooni programmi lisamisega, mis tähendab, et lainepaketti tehakse igal simulatsioonisammul ka veidi siledamaks (lainefunktsiooni väärtuseid ühtlustatakse kõrvalolevatega).

Difusioonikonstandi väärtus on seatud selliselt, et Schrödingeri võrrandi lahendamist see märkimisväärselt ei sega, aga samas ei lase eelmainitud kõrgsageduslikel lainetel kasvama hakata. Difusioonikonstandi suurendamisega saaks laiendada ka simulatsiooni tööpiirkonda (analüüsitavaid väljakonstandi ja algpositsiooni väärtuseid), aga sellega läheks ka võnkeperioodid endises simuleeritavas alas veidi ebatäpsemaks, sest difusioon mõjutaks seda liialt palju, mistõttu on valitud praegu vaadeldavad piirkonnad.

3.1.4 Simulatsiooni testjuhud

Kontrollimaks simulatsiooni töökindlust, saab läbi vaadata lihtsaimale vaadeldavale potentsiaalile ehk harmoonilise võnkumise potentsiaalile leitavad tulemused ning võrrelda neid teoreetiliselt oodatavatega. Massi muutmisel peaks võnkeperiood muutuma võrdeliselt ruutjuurega massist, väljakonstandi muutmisel peaks periood muutuma umbes pöördvõrdeliselt ruutjuurega väljakonstandist, algse asukoha või lainepaketi laiuse muutmisel peaks kõik muutused olema väikesed võrreldes teiste töös mõõdetavate muutustega. Harmoonilise potentsiaali puhul peaks võnkeperioodiks tulema alati

$$T = \frac{2\pi}{\omega} = 2\pi \sqrt{\frac{m}{2k}}$$

Viimast väidet kinnitab see, et nagu on kirjeldatud uurimistöö osas 2.3.5, on kõigi omavektorite energiad $E = \omega \left(l + \frac{1}{2} \right)$ ja need on aja $t = \frac{2\pi}{\omega}$ pärast pööranud faasi $e^{iEt} = e^{i \frac{(2l+1)}{2} \omega \frac{2\pi}{\omega}} = e^{i(2l+1)\pi} = -1$ võrra ehk aja t pärast on situatsioon füüsikaliselt sama.

3.2 Simuleerimistulemused

3.2.1 Visualiseerimismeetodi kirjeldus

Praegu on iga n jaoks vaatluse all kaks pidevat vabadusastet, nendeks on väljakonstant ja algpositsioon, sest mass on seatud konstantseks 0,1 massiühiku (näiteks 1 kg, aga ühik ei oma erilist tähtsust) peale ja lainepaketi laius 0,1 pikkusühiku (1 m) peale. Igale n -le vastava graafiku täpseks kujutamiseks oleks seega tarvis kas kolmedimensionaalset graafikut, mida oleks keeruline töösse lisada, või palju kahedimensionaalseid graafikuid, aga seda saab üpris hästi teha ka ruudustikuna, kus iga ruudu koordinaadid näitavad parameetreid (väljakonstant ja algpositsioon) ning ruudu tumedus näitab neile parameetritele vastavat võnkeperioodide suhet (kvantmehaaniline periood jagatud klassikalisega). Hall tähistab siin ühte, heledam tähistab väiksemat ja tumedam suuremat suhet. Ühte tähistav hallitoon on näidatud joonisel 1.

Joonistel näitab horisontaalkoordinaat algpositsiooni (kasvab vasakult paremale) ning vertikaalkoordinaat väljakonstanti (kasvab ülevalt alla). Algpositsiooni vaadeldud ja joonisele märgitud piirkond on 0,08 kuni 0,4 pikkusühikut (meetrit), uus võnkeperiood on arvutatud iga 0,08 ühiku tagant, mis annab kokku 50 erinevat väärtust. Väljakonstandi vaadeldud piirkond on 2000 kuni 100000 vastavat ühikut (näiteks $1 \frac{\text{kg}}{\text{m}}$), selle sammuks on 2000, mis annab ka kokku 50 erinevat väärtust. Kokku tuleb väärtuseid $50^2 = 2500$, neid saabki kujutada 50x50 ruudustikul. Ruudustikud on tehtud andmete põhjal, mis on toodud lisas 1.



Joonis 1. Perioodide suhtele 1 vastav hall

Allikas: Autori andmed

3.2.2 Tulemused

Potentsiaalivälja, kus $n=1$, kirjeldaval joonisel 2 on näha vähemalt kaks kohta, kus perioodide jagatis muutub järsult ning selle muutumine on üle joonise ka kummaski muutujas mitte-monotoonne. See näitab, et programmil on probleeme selles potentsiaalis liikumise simuleerimisega ning et tulemused pole usaldusväärsed. Arvatavasti tekivad probleemid

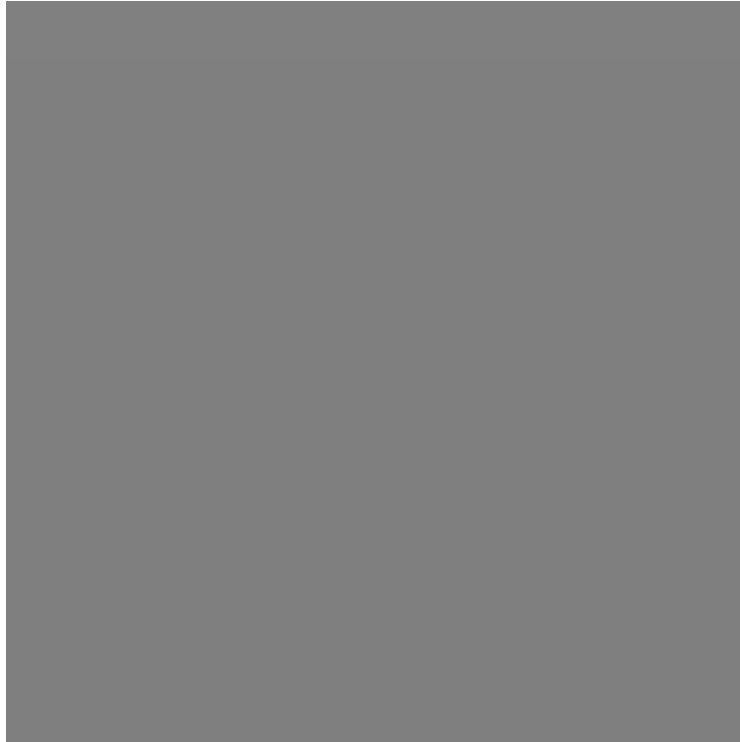
sellest, et vahel jääb potentsiaali sümmeetriakeskpunkti potentsiaali tuletise järsust muutumisest (k pealt $-k$ peale) tulenevate efektide tõttu (näiteks lainepaketi osaline tagasipeegeldumine) üks või enam lainepaketi tegelikku võnkeperioodi lugemata. Sellisele veale viitab see, et kui lainepakett on lähemal, mõjutab keskpunktis olev potentsiaali ebasujuvus tulemusi rohkem ning siis avalduvad ka järsud muutused tulemustes sagedamini. Seega on mõistlik $n=1$ puhul saadud tulemused vaatluse alt kõrvale jätta, sest on selgelt ebafüüsikalised. On võimalik, et seda saaks parandada, tehes keskele sujuva potentsiaaliga lähenduse ning vähendades simulatsiooni resolutsiooni, ent see nõuaks juba rohkem arvutusvõimsust.



Joonis 2. Perioodide suhted $n=1$ puhul

Allikas: Autori andmed

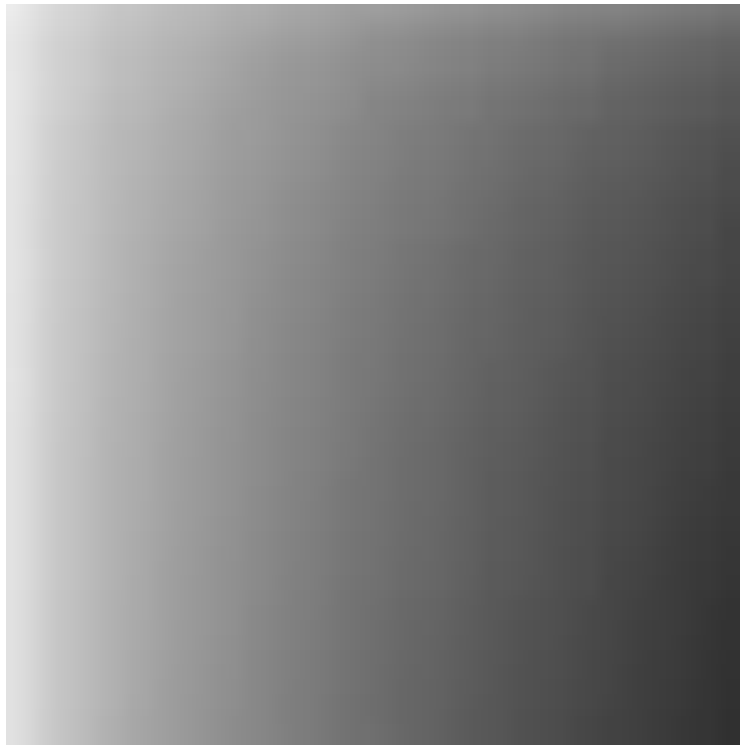
Potentsiaaliväli, kus $n=2$, tähendab harmoonilise võnkumise potentsiaali, kus vastavalt töö osale 3.1.4 peaks olema kõikjal võnkeperioodid samad ehk nende suhe peaks olema 1. Joonisel 3 on kõikjal värv pea eristamatu perioodide suhtele 1 vastav hallist, seega vastavad siin tulemused oodatule.



Joonis 3. Perioodide suhted $n=2$ puhul

Allikas: Autori andmed

Potentsiaalides, mille $n=3$ ja $n=4$, simuleerimisel on potentsiaalide jagatis mõlemat vabadusastet mööda monotoonselt kasvav, mis viitab sellele, et simulatsioon töötab õigesti. Samas on joonistelt 4 ja 5 näha, et algpositsiooni ja väljakonstandi suhe jõuab nende kasvamisel üheni, ent hakkab siis taas kasvama, mis on vastuolus hüpoteesiga.



Joonis 4. Perioodide suhted $n=3$ puhul

Allikas: Autori andmed



Joonis 5. Perioodide suhted $n=4$ puhul

Allikas: Autori andmed

3.3 Järeldused

3.3.1 Tulemuste usaldusväärsus

Käesolevas töös on simulatsiooni ebatäpsuse peamised põhjustajad difusioon, lõplikult väikesed asukoha- ja ajaresolutsioonid ja lõplik asukohakoordinaadi telg (mittetäiuslikud ääritingimused), millest on praktiliselt võimatu täiuslikult vabaneda, aga saab analüüsida tulemuste õigsust. $n=1$ kirjeldamisel leitu on murettekitav, sest tulemused pole sugugi füüsilised ning näitavad, et simulatsioon ei toimi selle potentsiaali puhul õigesti.

Ometi on $n=2$ korral tulemused üllatava täpsusega õiged ning simulatsioon täidab suure täpsusega käesoleva töö osas 3.1.4 määratud testid, mis viitavad tugevalt selle töökorras olemisele. $n=3$ ja $n=4$ puhul viitab kõige pidevus, lainepaketi sujuv liikumine ning võnkeperioodi kvalitatiivselt õige muutumine ikkagi simulatsiooni töökorras olemisele ning annab vaatamata $n=1$ tulemustele ülejäänud tulemustele üpris suure (aga siiski mitte täieliku) usaldusväärsuse.

3.3.2 Hüpoteesi paikapidavus

Saadud tulemused viitavad sellele, et hüpotees klassikalise ja kvantmehaanilise perioodi jagatise kohta vaadeldavates potentsiaalides täielikult ei kehti, $n=3$ ja $n=4$ puhul läheb energia kasvamisel perioodide suhe pärast ühte jõudmist taas sellest kaugemale. Tulemuste vastuolu hüpoteesiga tuleneb arvatavasti sellest, et tegelikult pole erinevus võnkeperioodides absoluutne, vaid kasvab koos võnkeperioodi kasvuga. Ka vastavuspintsiiip pole tulemuste järgi siin tegelikult kasutatav, mis on arvatavasti põhjustatud sellest, et see kehtib, kui energia on suur, mis tegelikult tähendab, et energia on palju suurem potentsiaalsest energiast, aga praegusel juhul kasvab energia koos keskmise potentsiaalse energiaga ning see ei luba vastavuspintsiiipi otse kasutada.

Kokkuvõte

Uurimistöö täitis oma eesmärgi võrrelda kvantmehaanilist ja klassikalist võnkeperioodi, sest töötati välja meetodid klassikaliselt ja kvantmehaaniliselt astmefunktsioonilistes potentsiaaliväljades võnkumise kirjeldamiseks. Teoreetiliselt leiti Hamiltoniani meetodit kasutades, et klassikalist võnkeperioodi kirjeldab järgmine avaldis

$$T = 2 \sqrt{\frac{2m\pi}{kx_{max}^{n-2}}} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{n}\right)}{n\Gamma\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{n}\right)}$$

ning simuleeriti võnkumist kvantmehaanilise mudeli järgi, kust leiti võnkeperioodi analoogid. Simulatsioon osutus vähemalt $n=1$ puhul ekslikuks, kuigi töötas väga hästi $n=2$ korral. See seab ka ülejäänud simulatsiooni tulemused kahtluse alla, ent kuigi selliste protsesside simuleerimine on igal juhul veidi ebatäpne, on leitu ikkagi pigem usaldusväärne, sest ülejäänud andmed ei sisaldanud järske hüppeid ning sest simulaator täidab $n=2$ korral seatud üpris rangeid tingimusi.

Lisaks tõestati, et simulatsioonis on kõigi võimalike võnkeperioodide suhete leidmise seisukohalt tarvis läbi vaadata ainult osakese algpositsiooni ning väljakonstandi vabadusastmed, kõik teiste vabadusastmete väärtused on kättesaadavad lihtsate ühikuvahetustega.

Uurimistöö hüpotees ei leidnud kinnitust. Simulatsioon näitas, et tegelikkuses võnkeperioodide suhe energia kasvamisel vaadeldavas piirkonnas ühele alati ei lähene.

Edaspidi tasuks uurida sama teemat, aga teistsuguste ääritingimustega, resolutsioonidega ja mõõtepiirkondadega, et kinnitada või ümber lükata siinseid tulemusi ning näidata käitumist laiemas piirkonnas. Lisaks võiks uurida ka võnkeperioodide suhte muutumist ülejäänud vabadusastmetest sõltuvalt, mida saaks tegelikult teha käesoleva töö andmetega, sest põhimõtteliselt oleks kõikidele vabadusastmete väärtustele vastavad perioodide suhted

leitavad praeguste vabadusastmete läbivaatlusel saadutest, kuigi käesoleva töö mõõtepiirkond seab piirid ka töös kogutud andmete ülejäänud vabadusaastmeid kirjeldavaks infoks teisendamisele.

Peale selle võiks edasi uurida veel sama teemat teiste potentsiaalide kohta, võiks laiendada uurimist kõrgema astmega potentsiaalidele ja leida üldiseid potentsiaalidevahelisi seoseid perioodide suhtes, lisaks võiks uurida näiteks negatiivse astendajaga astmefunktsioonilisi või eksponentsiaalseid potentsiaale. Sama uurimuse võiks viia üle kahte, kolme või enamasse dimensiooni, kuigi selle jaoks oleks tarvis märkimisväärselt paremaid simulaatoreid. Võiks vaadelda ka ajas muutuvaid potentsiaaliväljasid või arvestada relativistlike efektidega.

Kasutatud materjalid

Adams, A., Evans, M., Zwiebach, B. (2013) 8.04 Quantum Physics I. Massachusetts Institute of Technology: MIT OpenCourseWare. Loetud: <http://ocw.mit.edu>, 19.03.2016.

Gottlieb, M. A., Pleiffer, R. (2013) Feynman Lectures. Loetud: http://www.feynmanlectures.caltech.edu/I_37.html, 22. 03.2016

Gourdon, X., Sebah, P. (2002) Introduction to the Gamma Function. Loetud: <http://www.csie.ntu.edu.tw/~b89089/link/gammaFunction.pdf>, 17.03.2016.

Martin, B. R., Shaw, G. (2008) Particle Physics. West Sussex: Wiley.

Susskind, L. (2013) Advanced Quantum Mechanics. The Theoretical Minimum. Loetud: <http://theoreticalminimum.com/courses/advanced-quantum-mechanics/2013/fall>, 21.03.2016

Talliaferro, K. (2010) Quantum Harmonic Oscillator with Ladder Operators. Loetud: <https://www.ma.utexas.edu/users/ktaliaferro/pdfs/quantuml.pdf>, 20.03.2016

Tong, D. (2006) Lectures on Quantum Field Theory. Loetud: <http://www.damtp.cam.ac.uk/user/tong/qft.html>, 01.03.2016.

Weisstein, E. W. (2016) Gauss's Hypergeometric Theorem. Wolfram MathWorld. <http://mathworld.wolfram.com/GausssHypergeometricTheorem.html>, 22.03.2016.

Weisstein, E. W. (2016) Hamilton's Equations. Wolfram MathWorld. Loetud: <http://mathworld.wolfram.com/HamiltonsEquations.html>, 01.03.2016.

Weisstein, E. W. (2016) Hypergeometric Functions. Wolfram MathWorld. Loetud: <http://functions.wolfram.com/HypergeometricFunctions/Hypergeometric2F1/>, 22.03.2016

Weisstein, E. W. (2016) Normal Distribution. Wolfram MathWorld. Loetud: <http://mathworld.wolfram.com/NormalDistribution.html>, 01.03.2016.

Weisstein, E. W. (2016) Pochhammer Symbol. Wolfram MathWorld. Loetud: <http://mathworld.wolfram.com/PochhammerSymbol.html>, 23.03.2016

Lisa 1. Täielikud andmekogumid

50x50 andmetabelid ei mahu töösse mõistlikus formaadis ära, mistõttu on toodud Google Drive'i lingid, kust andmetabelid on soovi korral kättesaadavad.

n=1:

<https://docs.google.com/spreadsheets/d/11VznQyoTrHpd7PXL4ymRh-A3cywwKcefLokJQ1m9EDQ/edit?usp=sharing>

n=2:

https://docs.google.com/spreadsheets/d/1GZJ_46yTSdHTIFAUXiSYGccdWA8D8PDyMBc_BgTq_aM/edit?usp=sharing

n=3:

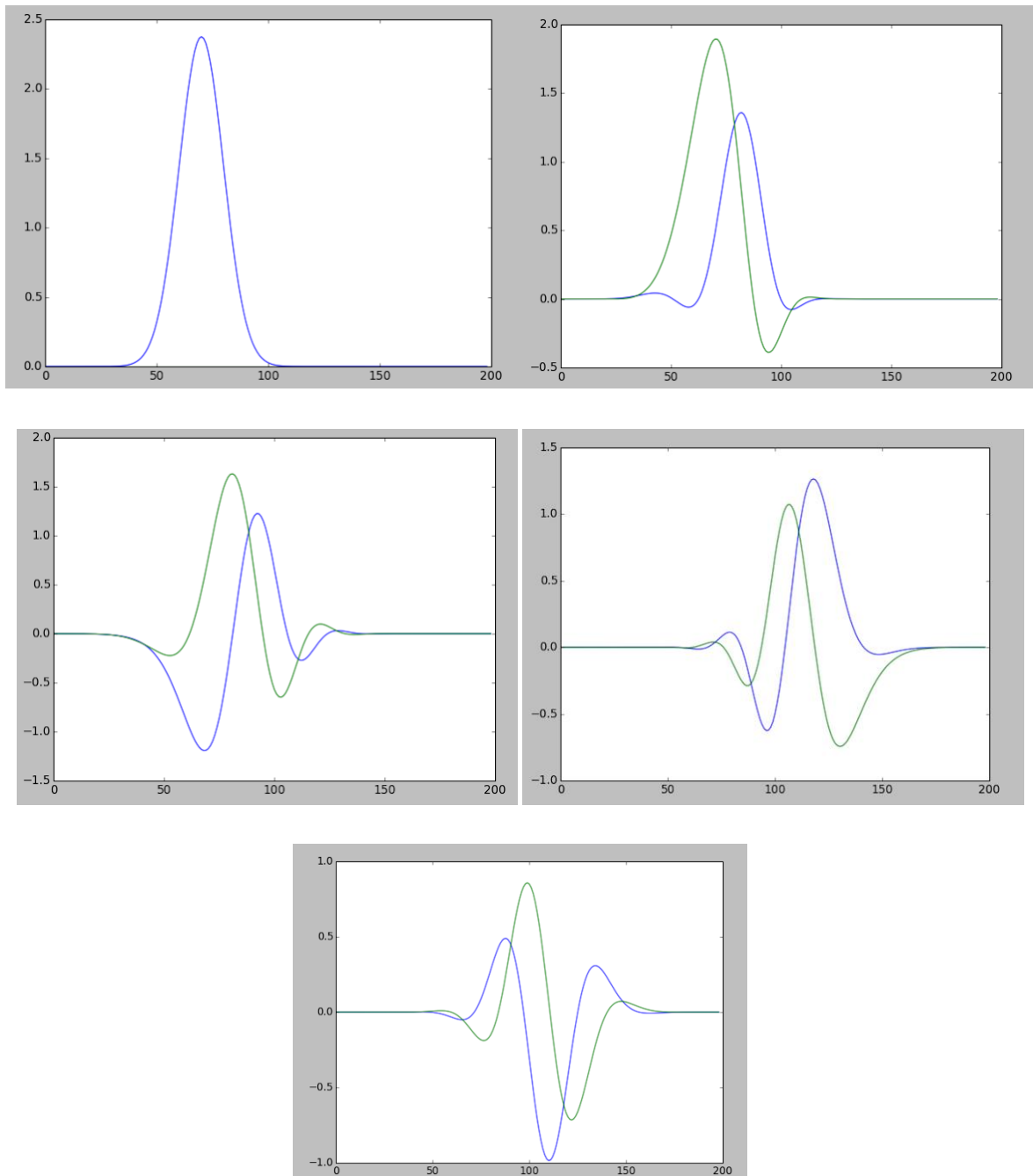
<https://docs.google.com/spreadsheets/d/1lpuwmoYUGNo2OqEUTEEmXp84YKDdtW7AFuPrAF3ucH4/edit?usp=sharing>

n=4:

https://docs.google.com/spreadsheets/d/1VERiuQLxcgNMg6WgAdZXBmyP_o0xLpv4g1ME7hAJtpY/edit?usp=sharing

Lisa 2. Näide lainepaketi arengust

On toodud programmi varasema versiooniga tehtud pildiseeria lainepaketi arengust $n=2$ korral. Siin tähistab sinine joon lainefunktsiooni reaalosa ja roheline joon imaginaaros, horisontaalteljel on asukoht ja vertikaalteljel lainefunktsiooni väärtus. Graafikud on tehtud ajahetkedel (esitatud järjekorras) 0, 1, 2, 5 ja 10 ajaühikut pärast simulatsiooni algust.



Joonis 6. Lainefunktsiooni areng

Allikas: Autori andmed

Lisa 3. Programmi üks versioon

See versioon programmist genereerib ühe töös kasutatud pildi. Töö käigus olid kasutusel mitmed versioonid sellest, ent tuumik (klass „Wavefunction“) oli kõigis versioonides üpris ühesugune.

```
#include <iostream>

#include <vector>

#include <cmath>

#include <fstream>

#include <string>

#include <sstream>

#include <algorithm>

using namespace std;

void csv_out(const string & fname, const vector< vector<double> > & vec)

{

    ofstream ppm(fname.data());

    for (int i = 0; i < ((int)vec[0].size()) - 1; ++i){

        ppm << i << ",";

        for (int j = 0; j < ((int)vec.size()) - 1; ++j)

            ppm << vec[j][i] << ",";

        ppm << vec.back()[i] << ";" << endl;

    }

    cout << "written " << fname << endl;

}
```

```

class Wavefunction
{
private:
    double fieldp;

    double mass = 0.1;

    double xsize = 1.0;

    double resodx = 0.01;

    double initialpos;

    double stddeviation=0.1;

    double time;

    double resodt = 1e-6;

    double diff = 0.15 / (mass * 2.0);

    double fieldc;

    vector<double> zeros;

    vector<double> xvec;

    vector<double> xpositionvec;

    vector< vector<double> > WFvec;

public:
    vector< vector<double> > firstder(vector< vector<double> > fvec)
    {
        vector<double> realfirstders;

        vector<double> imagfirstders;

        for (unsigned i = 1; i < fvec[0].size() - 1; i++)
        {
            realfirstders.push_back((fvec[0][i + 1] - fvec[0][i - 1]) / 2 / resodx);

            imagfirstders.push_back((fvec[1][i + 1] - fvec[1][i - 1]) / 2 / resodx);

        }

        vector< vector<double> > firstders;
    }

```



```

        firstders.push_back(realfirstders);

        firstders.push_back(imagfirstders);

        return firstders;

    }

    vector< vector<double> > secondder()

    {

        vector< vector<double> > secondderivs(2);

        for (unsigned i = 1; i < WFvec[0].size() - 1; i++)

        {

            secondderivs[0].push_back((WFvec[0][i + 1] - 2 * WFvec[0][i] + WFvec[0][i - 1]) / resodx /
resodx);

            secondderivs[1].push_back((WFvec[1][i + 1] - 2 * WFvec[1][i] + WFvec[1][i - 1]) / resodx /
resodx);

        }

        secondderivs[0].push_back(0);

        secondderivs[1].push_back(0);

        secondderivs[0].insert(secondderivs[0].begin(), 0);

        secondderivs[1].insert(secondderivs[1].begin(), 0);

        return secondderivs;

    }

    double totalprob()

    {

        double sumtemp = 0;

        for (unsigned i = 0; i < WFvec[0].size(); i++)

        {

            sumtemp += resodx*(WFvec[0][i] * WFvec[0][i] + WFvec[1][i] * WFvec[1][i]);

        }

        return sumtemp;

    }

```

```

}

void normalize()

{
    double totprob = totalprob();

    for (unsigned i = 0; i < WFvec[0].size(); i++)
    {
        WFvec[0][i] = WFvec[0][i] / sqrt(totprob);

        WFvec[1][i] = WFvec[1][i] / sqrt(totprob);
    }
}

Wavefunction(double k, double inpos, double fieldpo)
{
    fieldp = fieldpo;

    fieldc = k;

    initialpos = inpos;

    time = 0;

    vector<double> wfreals;

    vector<double> wfimags;

    WFvec.push_back(wfreals);

    WFvec.push_back(wfimags);

    double completed = -xsize;

    while (completed <= xsize)
    {
        xpositionvec.push_back(completed);

        completed = completed + resodx;
    }

    double xcon;

    for (unsigned i = 0; i < xpositionvec.size(); i++)

```

```

        {

            xcon = xpositionvec[i];

            double nextphi = pow(2.7182818284, (initialpos - xcon)*(xcon - initialpos) / 2 / stddeviation /
stddeviation);

            WFvec[0].push_back(nextphi);

            WFvec[1].push_back(0.0);

        }

        normalize();

    }

    double xexpvalue()

    {

        double xtempsum = 0;

        for (unsigned i = 0; i < xpositionvec.size(); i++)

        {

            xtempsum += resodx*xpositionvec[i] * (WFvec[0][i] * WFvec[0][i] + WFvec[1][i] *
WFvec[1][i]);

        }

        return xtempsum;

    }

    double pexpvalue()

    {

        double ptempsum = 0;

        vector< vector<double> > firstderivs = firstder(WFvec);

        for (unsigned i = 1; i < (xpositionvec.size() - 1); i++)

        {

            ptempsum += resodx*(WFvec[0][i] * (firstderivs[0][i - 1] + firstderivs[0][i]) / 2 + WFvec[1][i]
* (firstderivs[1][i - 1] + firstderivs[1][i]) / 2);

        }

        return ptempsum;

```

```

    }

void smallevolution() //including field definition, atm p=2

{

    static int n = 0;

    //cout << n << endl;

    vector< vector<double> > sderivs = seconddder();

    /*

    if (!(n % 1000)){

        stringstream ss;

        string fname;

        ss << "correct" << n << ".csv";

        ss >> fname;

        csv_out(fname, WFvec);

    }

    */

    ++n;

    //ppm_out(sderivs[1]);

    double sq = 0;

    for (unsigned i = 0; i < xpositionvec.size(); i++)

    {

        WFvec[0][i] += resodt*((-abs(fieldc*pow(xpositionvec[i], fieldp)))*WFvec[1][i] + sderivs[1][i]

/ 2 / mass);

        WFvec[0][i] += resodt*diff*sderivs[0][i];

        WFvec[1][i] += resodt*(abs((fieldc*pow(xpositionvec[i], fieldp)))*WFvec[0][i] - sderivs[0][i] /

2 / mass);

        WFvec[1][i] += resodt*diff*sderivs[1][i];

        sq += WFvec[0][i] * WFvec[0][i] + WFvec[1][i] * WFvec[1][i];

    }

}

```

```

WFvec[0][0] = WFvec[1][0] = WFvec[0].back() = WFvec[1].back() = 0;

time += resodt;

//cout << n << " " << sq << endl;

}

void evolution(double t)
{
    for (unsigned i = 0; i < t / resodt; i++)
    {
        smallevolution();
    }
}

void real_print_out()
{
    ofstream frou("C:\\Users\\Kaarel\\Desktop\\c++\\wfreal.txt");

    for (unsigned i = 0; i < xpositionvec.size(); i++)
    {
        frou << WFvec[0][i] << ",";
    }
}

void imag_print_out()
{
    ofstream fiout("C:\\Users\\Kaarel\\Desktop\\c++\\wfimag.txt");

    for (unsigned i = 0; i < xpositionvec.size(); i++)
    {
        fiout << WFvec[1][i] << ",";
    }
}

void tot_print_out()

```

```

{

ofstream fout("C:\\Users\\KaareI\\Desktop\\c++\\wftot.txt");

for (unsigned i = 0; i < xpositionvec.size(); i++)

{

    ftout << WFvec[0][i] * WFvec[0][i] + WFvec[1][i] * WFvec[1][i] << ",";

}

}

double findperiod()

{

    int i = 0;

    bool listcounter = 0;

    double xvalue = xexpvalue();

    xvec.push_back(xvalue);

    xvec.push_back(xvalue);

    double t = 0;

    int nper = 2; //no of periods

    while (i < (nper+1))

    {

        for (int z = 0; z < 1; ++z){

            smallevolution();

            //cout << "t: " << t << endl;

            t += resodt;

        }

        double totalprobab = totalprob();

        //cout << totalprobab << endl;

        //system("pause");

        double xvalue = xexpvalue();

        xvec[listcounter] = xvalue;

```

```

        if ((xvec[listcounter] < 0) && (xvec[!listcounter] >= 0))
        {
            i += 1;

            zeros.push_back(time);
        }

        listcounter = !listcounter;
    }

    double period = (zeros[nper] - zeros[0]) / nper;

    return period;
}

};

void gen_ppm(string fname, double p)
{
    ofstream datappm(fname);

    int alpha = 1;

    int beta = 1;

    int alpha_max = 50, beta_max = 50;

    datappm << "P2" << endl << beta_max << " " << alpha_max << endl << 255 << endl;

    while (alpha<=alpha_max)
    {
        double fconstant = 100000.0 * alpha / alpha_max;

        beta = 1;

        while (beta<=beta_max)
        {
            double initipos = 0.4*beta / beta_max;

            Wavefunction wavepacket(fconstant, initipos, p);

```

```

        double peri = wavepacket.findperiod();

        double peric = 2 * sqrt(2 * 0.1*3.14159265 / fconstant / pow(initipos, p - 2))*tgamma(1.0 / p) /
p / tgamma(0.5 + 1.0 / p);

        double perid = peri / peric;

        datappm << max((int) (255.0 - 0.5 * perid * 256.0), 0) << " ";

        cout << fname << ": " << alpha << ", " << beta << " -> " << peri << " / " << peric << endl;

        beta += 1;

    }

    alpha += 1;

    datappm << endl;

}

}

int main()

{

    gen_ppm("data1_0.15.50res.ppm", 1);

    //gen_ppm("data2_0.15.50res.ppm", 2);

    //gen_ppm("data3_0.15.50res.ppm", 3);

    //gen_ppm("data4_0.15.50res.ppm", 4);


    int s = system("pause");

    (void) s; // et kompilaator ei annaks lolli warningut

    return 0;

}

```


Resümee

Astmefunktsioonilisse ühedimensionaalsesse potentsiaalivälja paigutatud osake hakkab seal võnkuma. Sellise võnkumise võnkeperiood on võimalik eri mudelite põhjal leida. Käesolevas töös on leitud võnkeperiood klassikalis-mehaaniliselt ja kvantmehaaniliselt ning vaadeldud nende suhte muutumist erinevate pidevate ja diskreetsete tingimuste muutumisel. Võnkeperioodide suhe sõltub vaadeldavatel juhtudel viiest vabadusastmest: potentsiaalivälja väljakonstant, kauguse aste väljas, osakese mass ja algpositsioon ning kvantmehaanilise juhu puhul ka osakese lainefunktsiooni standardhälve.

Uurimistöös kirjeldatakse osakese liikumist vaadeldavates potentsiaaliväljades ning leitakse teoreetiliselt osakese võnkeperiood klassikalisel juhul. Kvantmehaanilise võnkeperioodi leidmiseks on töö autor programmeerinud simulaatori, mis lahendab Euleri meetodil Schrödingeri võrrandit ajas edasi ning leiab võnkeperioodi asukoha keskväärtuse liikumise järgi. Töös näidatakse, et simulaatoriga peab kõigi võnkeperioodide suhete leidmiseks läbi vaatama ainult kolm vabadusastet: väljakonstandi, kauguse astme väljas ja osakese algasukoha.

Simulatsiooni õigesti töötamist kontrolliti harmoonilise võnkumise potentsiaalile tehtud testidega, mille see täitis, kuid ühe vaadeldud astmevälja puhul andis simulaator siiski füüsikaliselt valesid tulemusi, mis tulenesid arvatavasti välja ebatavalisest iseloomust ning programmi võimetusest sellega arvestada. Simulatsiooni ebatäpsust võivad küll põhjustada paljud faktorid, ent harmoonilise potentsiaali puhul edukalt sooritatud testid annavad päris suure kindluse, et simulatsioon töötab ka kõrgemate astmenäitajatega potentsiaaliväljade puhul.

Uurimistöös leiti, et edukalt simuleeritud väljades vaadeldud piirkonnas võnkeperioodid küll muutuvad kahes pidevas vabadusastmes monotoonselt, aga ei lähene tingimata ühele, mis võib esmapilgul näida vastavusprintsibiiga vastuolus olevat, kuid pole seda siiski, sest vastavusprintsip eeldab suuri energiasid võrreldes potentsiaalidega, aga siinsetel juhtudel kasvab potentsiaalne energia koos koguenergiaga.

Abstract: The movement of particles in centrosymmetric one-dimensional power function potentials

A particle placed in a power function one-dimensional potential will start oscillating, it is possible to find the time period of such oscillations. In the present paper this period is found with classical and quantum mechanical models and the ratio of these is observed while changing different continuous and discrete conditions. In the aforementioned cases this ratio is dependent on five degrees of freedom: the coefficient of the potential, the power in the potential to which the distance is raised, the mass and the initial position of the particle and the width of the wave packet in the quantum mechanical case.

In this study the movement of a particle is described in the potentials under observation and the time period in the classical potential is found theoretically. For finding the quantum mechanical period, the author of the study has created a simulator which solves Schrödinger equation using Euler's method and finds the period from the movement of the position expectation value. In the study it is shown that to find all possible ratios of periods, it is only necessary to look through the values of three degrees of freedom: the coefficient of the potential, the power in the potential to which the distance is raised and the initial position of the particle.

The simulation was tested with conditions placed onto the time periods produced in the harmonic oscillator potential which it managed to fulfill, but in the case of one of the observed potentials the simulator nevertheless gave wrong results which were most likely caused by the inability of the simulation to cope with the distinct nature of that potential. Although many factors can give rise to imprecision in the simulation, the successful tests on the harmonic oscillator potential show that the simulation is most probably also right on potentials with higher powers of distance.

In the study it was found that in properly simulated fields in the examined ranges the time period ratios do change monotonically, but do not necessarily converge to one which might at first glance seem to contradict Bohr's correspondence principle, but really does not since the correspondence principle assumes large energies in comparison with the potential which is not the case in this study.