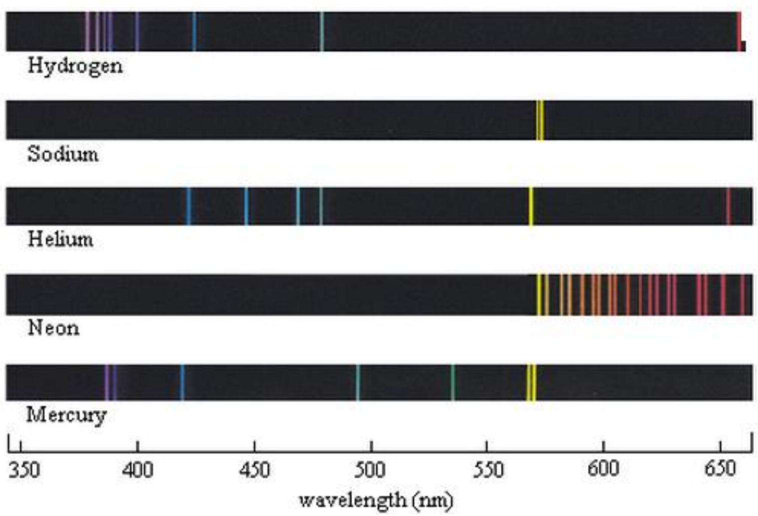
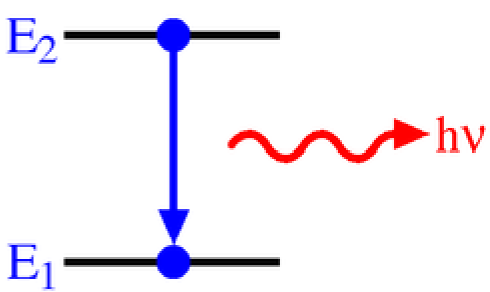
Előzmények

- Klasszikus fizikában a fizikai mennyiségek folytonos függvények, pl.: $\underline{r}(t)$,$E(t)$
- De: kísérletek szerint mikrovilágban egyes fizikai mennyiségek diszkrétek. pl.:





Matematikai háttér 1

- Egy adott Fizikai rendszerhez hozzárendelünk egy szeparábilis Hilbert-teret.

$$\left(\mathcal{H}\ ,\ \langle .|.\rangle\right),\quad \exists\varphi_i\in\mathcal{H}, i\in\mathbb{N},\ \left\langle\varphi_i\middle|\varphi_j\right\rangle=\delta_{ij},\ \overline{L\left(\varphi_1,\varphi_2,\ldots\right)}=\mathcal{H}$$

- A fizikai rendszer lehetséges Ψ állapotai a Hilbert-tér „sugarai”.

$$\Psi\in\mathcal{H},\quad \left\langle\Psi\middle|\Psi\right\rangle=1$$

Matematikai háttér 2

- A fizikai mennyiségek a Hilbert-téren értelmezett, lineáris önadjungált operátorok.

$$\hat{F}:\mathcal{H}\to\mathcal{H}, \quad \left\langle \hat{F}u \middle| v \right\rangle = \left\langle u \middle| \hat{F}v \right\rangle \ \forall u,v\in\mathcal{H}$$

$$\Rightarrow \hat{F}v=\lambda v,\ \ v\neq \underline{0},\ \ \lambda\in\mathbb{R}$$

- Ha a fizikai rendszer $\Psi\in\mathcal{H}$ állapotban van, akkor az $\hat{F}$ fizikai mennyiség várható értékére:

$$\left\langle \hat{F} \right\rangle = \left\langle \Psi \middle| \hat{F}\Psi \right\rangle \in\mathbb{R}$$

Matematikai háttér 3

- Számunkra fontos: az energia operátor sajátértékeinek meghatározása, azaz az időfüggetlen Schrödinger-egyenlet megoldása:

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

- Ehhez a problémát mátrix-sajátérték egyenletre vezetjük vissza:

$$\{\varphi_i\}_{i=1}^{\infty}, \ \langle \varphi_i | \varphi_j \rangle = \delta_{ij} \quad O.N.B.$$

Matematikai háttér 4

$$\psi = \sum_{i=1}^{\infty} c_i \varphi_i \approx \sum_{i=1}^{N} c_i \varphi_i \ , \quad c_i \in \mathbb{C}$$

$$\hat{H} \sum_{i=1}^{N} c_i \varphi_i = E \sum_{i=1}^{N} c_i \varphi_i \Rightarrow \sum_{i=1}^{N} c_i \hat{H} \varphi_i = E \sum_{i=1}^{N} c_i \varphi_i \qquad \Big| \left\langle \varphi_j \middle| . \right\rangle$$

$$\sum_{i=1}^{N} c_i \left\langle \varphi_j \middle| \hat{H} \varphi_i \right\rangle = E \sum_{i=1}^{N} c_i \left\langle \varphi_j \middle| \varphi_i \right\rangle = E \sum_{i=1}^{N} c_i \delta_{ji} = E c_j$$

$$\sum_{i=1}^{N} H_{ji} c_i = E c_j \Rightarrow \mathbf{Hc} = E\mathbf{c},$$

$$\mathbf{c} \in \mathbb{C}^N, \mathbf{H} \in \mathbb{C}^{NxN}, H_{ji} = \left\langle \varphi_j \middle| \hat{H} \varphi_i \right\rangle = \overline{H_{ij}}$$ (+ Variációs elv)

A Hilbert-tér Scrödinger-reprezentációban

- n darab részecskére 3n változós probléma:

$$\mathcal{H} = L^2\left(\mathbb{R}^{3n}\right)$$

$$u, v \in L^2\left(\mathbb{R}^{3n}\right), \quad \langle u | v \rangle = \int_{\mathbb{R}^{3n}} \bar{u} v \, dx_1 dy_1 dz_1 ... dx_n dy_n dz_n$$

$$\hat{H} = -\sum_{i=1}^{n} \frac{\hbar^2}{2m_i} \Delta_i + V(x_1, y_1, z_1 ..., x_n, y_n, z_n), \; \Delta_i = \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_i^2}$$

$$\hat{H}\psi = E\psi, \quad \psi(x_1, y_1, z_1 ..., x_n, y_n, z_n) \in L^2\left(\mathbb{R}^{3n}\right)$$

Egyszerű példa

- 1 darab részecske centrális erőtérben

$$\mathcal{H} = L^2\left(\mathbb{R}^3\right)$$

$$u,v \in L^2\left(\mathbb{R}^3\right), \quad \langle u | v \rangle = \int\limits_{\mathbb{R}^{3n}} \bar{u}v\; dxdydz$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(x^2+y^2+z^2), \;\; \Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

$$\hat{H}\psi = E\psi, \quad \psi(x,y,z) \in L^2\left[\mathbb{R}^{3n}\right]$$

Egyszerű példa

- Áttérés gömbi polár koordinátákra, stb...

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(r \quad \Delta f = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial f}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2 \sin\varphi}\frac{\partial}{\partial \varphi}\left(\sin\varphi\frac{\partial f}{\partial \varphi}\right) + \frac{1}{r^2 \sin^2\varphi}\frac{\partial^2 f}{\partial \theta^2}.$$

$$\hat{H}\psi = E\psi, \quad \psi(r,\vartheta,\varphi) = R(r)Y(\vartheta,\varphi),$$

$$r \in \mathbb{R}^+, \vartheta \in [0,\pi], \varphi \in [0,2\pi]$$

$$\ldots$$

$$\hat{H}^{(l)}\chi = E^{(l)}\chi, \quad \chi(r) = r \cdot R(r), \quad \chi \in L^2\left(\mathbb{R}^+\right)$$

$$\hat{H}^{(l)} = -\frac{1}{2}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{2r^2} + V(r), \; l \in \mathbb{N}, \; m = \hbar = 1$$

1D probléma megoldása

$$\hat{H}^{(l)}\chi = E\chi \;\rightarrow\; \mathbf{Hc} = E\mathbf{c},$$

$$H_{ij} = \left\langle \varphi_i \middle| \hat{H}^{(l)}\varphi_j \right\rangle = \int_0^\infty \bar{\varphi}_i(r)\left(-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{2r^2} + V(r)\right)\varphi_j(r)dr$$

- Itt hasznos a Mathematica-t.
- A bázist általában ortogonális polinomok segítségével választjuk.
- Érdekes: pontatlan mátrixelemek, pontos sajátértékek…

Rezonancia állapotok

- Precíz matek: Lásd. ajánlott irodalom
- Gyakorlati szempont, Schrödinger-reprezentációban:

$$\hat{H}\psi^{rez} = E^{rez}\psi^{rez}, \quad \psi \notin L^2, \quad \psi(r \to \infty) \sim e^{i\alpha r} e^{\beta r}, \alpha \in \mathbb{R}, \beta > 0$$

$$E^{rez} \in \mathbb{C}$$

$$\hat{S}\hat{H}\hat{S}^{-1}\hat{S}\psi^{rez} = E^{rez}\hat{S}\psi^{rez}, \ \Phi = \hat{S}\psi^{rez}$$

$$\hat{S}\hat{H}\hat{S}^{-1}\Phi = E^{rez}\Phi, \ \Phi \in L^2 \quad \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \quad \mathbf{Hc} = E^{rez}\mathbf{c}, \quad H_{ij} = \left\langle \varphi_i \middle| \hat{S}\hat{H}\hat{S}^{-1}\varphi_j \right\rangle$$

Komplex koordináta módszer

Pl.:

$$\hat{S}_\theta f\left(r\right) = f\left(re^{i\theta}\right), \quad \hat{S}_\theta^{-1} f\left(r\right) = f\left(re^{-i\theta}\right)$$

$$\psi\left(r \to \infty\right) \sim e^{i\alpha r} e^{\beta r} \to \hat{S}_\theta \psi\left(r \to \infty\right) \sim e^{i\alpha r e^{i\theta}} e^{\beta r e^{i\theta}}$$

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{2r^2} + V\left(r\right) \quad \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \quad \hat{S}_\theta \hat{H} \hat{S}_\theta^{-1} = -e^{-2i\theta}\frac{1}{2}\frac{d^2}{dr^2} + e^{-2i\theta}\frac{l(l+1)}{2r^2} + V\left(re^{i\theta}\right)$$

$$\mathbf{H} \in \mathbb{C}^{NxN}, \quad H_{ij} = H_{ji}$$

Köszönöm

- Köszönöm a figyelmet!
- Ajánlott irodalom:

<u>A kvantummechanika matematikája:</u>

*A. Bohm, H. Uncu and S. Komy, Rep. Math. Phys., **64** , 5 (2009)*

*A.Bohm, Rep. Math. Phys., **67** , 279 (2011)*

A course in Modern Mathematical Physics, P. Szekeres, Cambidge University Press 2004.

Methods of Modern Mathematical Physics, Volume 4, Analysis of Operators
M. Reed, B. Simon, Academic Press Inc. 1972.

<u>Pontatlan mátrixelemek, pontos sajátértékek:</u>

V. Szalay, T. Szidarovszky, G. Czakó and A. G. Császár, J. Math. Chem. (2012) 50:636–651

Maybe one by one? A possible iterative solution

$\tilde{E}^{(1)} \rightarrow$ Initial guess for exact eigenvalue

$$\left(H-\tilde{E}^{(1)}\right)^{+}\left(H-\tilde{E}^{(1)}\right)\Psi^{(1)}=\lambda_{\min}^{(1)}\Psi^{(1)} \quad ,0\le\lambda_{\min}^{(1)}\in\mathbb{R}$$

$$\tilde{E}^{(2)}=\left\langle\Psi^{(1)}\middle|H\Psi^{(1)}\right\rangle$$

$$\left(H-\tilde{E}^{(2)}\right)^{+}\left(H-\tilde{E}^{(2)}\right)\Psi^{(2)}=\lambda_{\min}^{(2)}\Psi^{(2)} \quad ,0\le\lambda_{\min}^{(2)}\in\mathbb{R}$$

$$\tilde{E}^{(3)}=\left\langle\Psi^{(2)}\middle|H\Psi^{(2)}\right\rangle$$

$$\ldots$$

$"\lim_{n\to\infty}\tilde{E}^{(n)}=E_{egzakt}"$ aki legközelebb volt $\tilde{E}^{(1)}$ –hez (+ ha elég közel volt)