

FDIT219uj Kvantumrendszerek időfüggésének numerikus vizsgálata

Leírás:

A kurzus a nemrelativisztikus kvantumrendszerek időfüggő dinamikájának numerikus vizsgálatát tárgyalja, különös tekintettel a Schrödinger-egyenlet megoldására, diagonalizációs és integrálási módszerekre, valamint többkomponensű rendszerek reprezentációjára.

Tematika:

Az időfüggő Schrödinger-egyenlet (time dependent Schrödinger equation: TDSE) alapvető tulajdonságai, az állapot normájának megmaradása, az időfejllesztő operátor.

A TDSE kifejtése bázisban, a dinamika, mint csatolt differenciálegyenlet-rendszerhez kapcsolódó kezdetiérték-probléma.

Zárt kvantumrendszerek: A dinamika felírása az időfüggetlen Hamilton-operátor diagonalizálásának segítségével.

Numerikus diagonalizációs módszerek.

Általános, esetlegesen időfüggő gerjesztést is tartalmazó eset: A bázisban felírt TDSE megoldása numerikus integrálással, a leggyakrabban használt integráló eljárások, kompromisszum a pontosság és a futási idő között, lépésköz adaptáció. Többrészt kvantumrendszerek esetén a tenzorszorzattér reprezentálása.

Példák: kétnívós rendszerek klasszikus, időfüggő térben, a térbeli mozgás dinamikája, mint parciális differenciálegyenlet és a vonatkozó numerikus megoldási módszerek. A gerjesztett, ionizálódó H-atom tárgyalása.

Kitekintés: a sűrűségfukcionál-elmélet alapjai.

Irodalom:

Wolfgang Schweizer: *Numerical Quantum Dynamics*, Springer, 2002. ISBN: 978-0-306-47617-7

Paolo Giannozzi: *Numerical Methods in Quantum Mechanics* by (Lecture Notes at the University of Udine, <https://www.fisica.uniud.it/~giannozz/Corsi/MQ/LectureNotes/mq.pdf>)

William H. Press, Saul A. Teukolsky, William T. Vetterling, and Brian P. Flannery: *Numerical Recipes in C: The Art of Scientific Computing*, 2nd Edition. Cambridge University Press, 1992. ISBN 978-0-521-43108-8.