

SZAKDOLGOZAT

Falak közé zárt kvantum részecske homogén térben: "Schrödinger macskája dobozban"

KÜRTI ZOLTÁN

Fizika BSc., fizikus szakirány



Témavezetők:

DR. CSERTI JÓZSEF

egyetemi tanár

DR. GYÖRGYI GÉZA

egyetemi docens

Eötvös Loránd Tudományegyetem
Komplex Rendszerek Fizikája Tanszék

2021

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 grafikusán 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 alapállapot 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 grafikusán 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
- $f_x, f_y = 0$ külön tárgyalás
- program leírása

Köszönetnyilvánítás

Tartalomjegyzék

1. Bevezetés	1
2. Egy dimenziós eset	1
2.1. Kvantumos közelítése	3
2.2. Szemiklasszikus közelítés	3
2.3. Green függvény	5
2.3.1. Egzakt Green-függvény	6
2.3.2. Green-függvény perturbáció számítással	10
3. Kiterjesztés több dimenzióra	13
4. Numerikus számítások	14
4.1. Momentumok időfejlődése	14
4.2. Hullámfüggvény időfejlődése	14
4.2.1. 1D	14
4.2.2. 2D	14
5. Plafon érintés 1D	14

Ábrák jegyzéke

2.1. Egzakt energiaszintek	2
2.2. Szemiklasszikus energiaszintek	4
2.3. Végtelen potenciálgödör energiaszintjei	5
2.4. Állapotsűrűség	9
2.5. Állapotok száma	10
2.6. Green-függvény perturbációs sorának konvergenciája	12
4.1. Várható értékek és szórások időfejlődése	14

Táblázatok jegyzéke

1. Bevezetés

notin

2. Egy dimenziós eset

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

$$\phi|_0 = \phi|_L = 0 \quad (2.1)$$

A megoldandó időfüggetlen Schrödinger-egyenlet:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\phi}{dx^2} + Fx\phi = E\phi \quad (2.2)$$

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} - \frac{2mFx}{\hbar^2}\phi = -\frac{2mE}{\hbar^2}\phi \quad (2.3)$$

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} - \left(\frac{2mF}{\hbar^2}x - \frac{2mE}{\hbar^2} \right) \phi = 0 \quad (2.4)$$

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

$$\frac{d^2y}{dx'^2} - x'y = 0 \quad (2.5)$$

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

$$\frac{d^2y}{dx'^2} - (a^3x - a^2bE)y = 0 \quad (2.6)$$

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

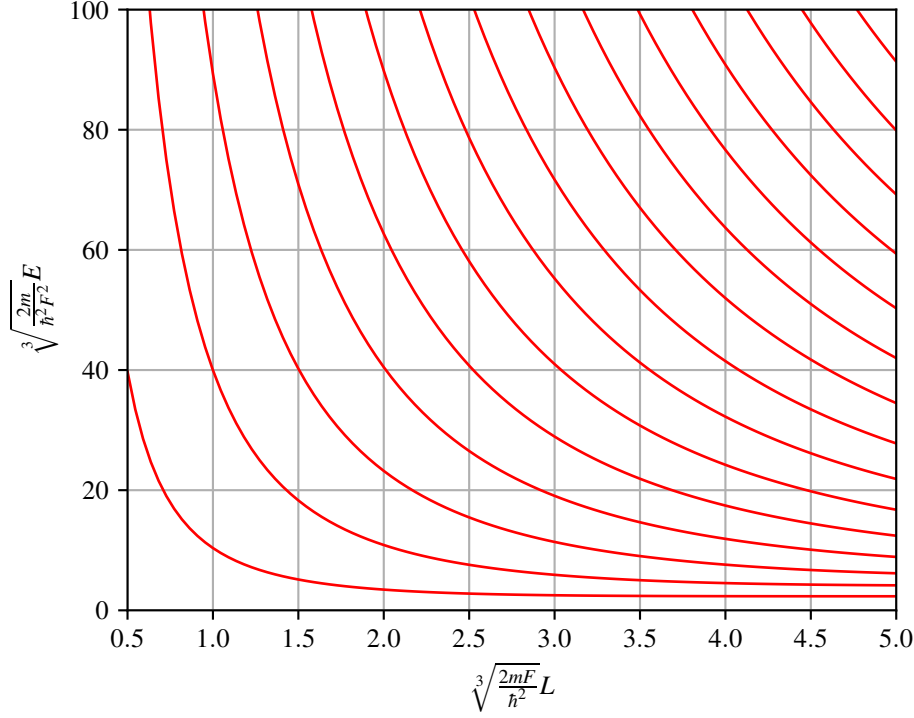
$$\phi(x) = y(x') = y\left(\sqrt[3]{\frac{2mF}{\hbar^2}}x - \sqrt[3]{\frac{2m}{\hbar^2 F^2}}E\right) \quad (2.7)$$

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

$$\text{Bi}(-bE) \text{Ai}(aL - bE) - \text{Ai}(-bE) \text{Bi}(aL - bE) = 0 \quad (2.8)$$

$$\text{Ti}aL - bE - \text{Ti}-bE = 0 \quad (2.9)$$

$$\text{Ti}\sqrt[3]{\frac{2mF}{\hbar^2}}L - \sqrt[3]{\frac{2m}{\hbar^2 F^2}}E - \text{Ti}-\sqrt[3]{\frac{2m}{\hbar^2 F^2}}E = 0 \quad (2.10)$$



2.1. ábra. Egzakt energia szintek, bE és aL közötti relációval ábrázolva. Az ábra jobb alsó sarkán látható, hogy $E \ll FL$ esetén az energiaszintek L -től függetlenek lesznek, mivel a félvégtelen tér belüli homogén tér energiaszintjeit közelítik.

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. Ebben az esetben $E \propto n^2$. $E \ll FL$ esetben az energiaszintek jó közelítéssel konstanssá válnak. Ennek az oka, hogy $\lim_{L \rightarrow \infty} \psi(x) = \alpha \text{Ai}(ax - b)$, mert a $\text{Bi}(x)$ exponenciálisan növekszik nagy x -ek esetén. Ebben az esetben az energiaszinteket a $\text{Ai}\left(-\sqrt[3]{\frac{2m}{\hbar^2 F^2}}E\right) = 0$ egyenlet határozza meg. Ezeket az aszimptotikus viselkedéseket a 2.1. ábra jól mutatja.

TODO: link 1D videóról

2.1. Kvantumos közelítése

$x \rightarrow \infty$ aszimptotikus alak:

$$\text{Ai}(-x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}x^{1/4}} \cos\left(\frac{2}{3}x^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right) + \mathcal{O}(x^{-5/4}) \quad (2.11)$$

$$\text{Bi}(-x) = -\frac{1}{\sqrt{\pi}x^{1/4}} \sin\left(\frac{2}{3}x^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right) + \mathcal{O}(x^{-5/4}) \quad (2.12)$$

$$\text{Ti}(-x) = -\cot\left(\frac{2}{3}x^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right) + \mathcal{O}(x^{-5/4}) \quad (2.13)$$

Ezzel a közelítéssel a 2.9. egyenlet alakja:

$$\cot\left(\frac{2}{3}(bE - aL)^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right) = \cot\left(\frac{2}{3}(bE)^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right) \quad (2.14)$$

, azaz

$$\frac{2}{3}(bE)^{3/2} - \frac{2}{3}(bE - aL)^{3/2} = n\pi \quad (2.15)$$

. Az a és b behelyettesítésével az egyenlet

$$\frac{2\sqrt{2m}}{3F\hbar} \left(E^{3/2} - (E - FL)^{3/2} \right) = n\pi \quad (2.16)$$

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

2.2. Szemiklasszikus közelítés

$$nh = \oint p dq = \quad (2.17)$$

$E/F < L$ esete:

$$2 \int_0^{E/F} \sqrt{2m(E - Fx)} dx = -\frac{2}{3mF} (2m(E - Fx))^{3/2} \Big|_0^{E/F} = \frac{4\sqrt{2m}E^{3/2}}{3F} \quad (2.18)$$

$$E_n = \left(\frac{3nhF}{4\sqrt{2m}} \right)^{2/3} \quad (2.19)$$

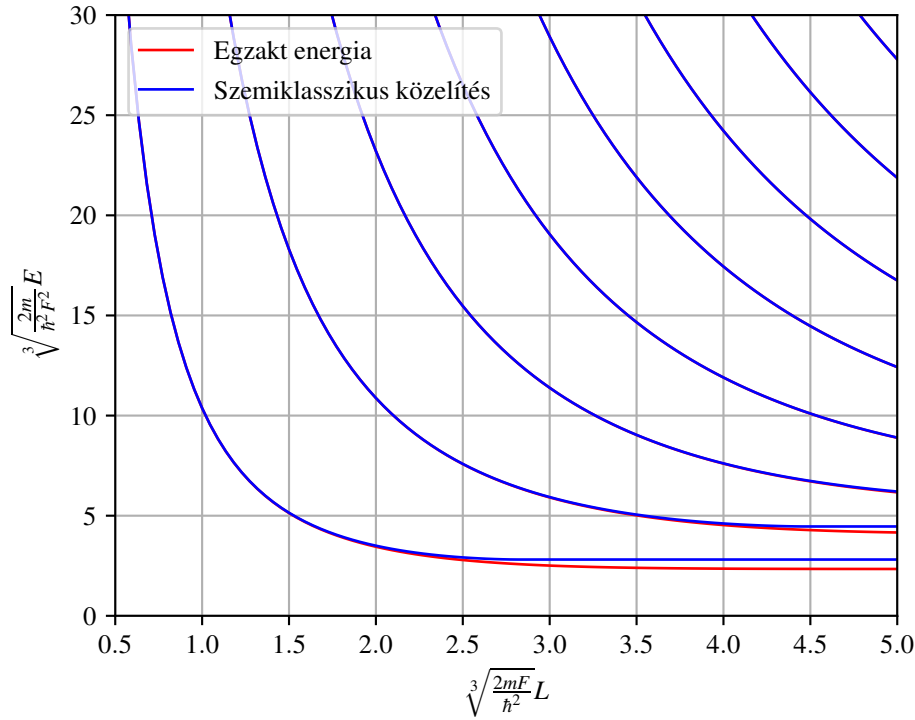
$E/F > L$ esete:

$$-\frac{2}{3mF} (2m(E - Fx))^{3/2} \Big|_0^L = \frac{4\sqrt{2m}}{3F} \left(E^{3/2} - (E - FL)^{3/2} \right) = nh \quad (2.20)$$

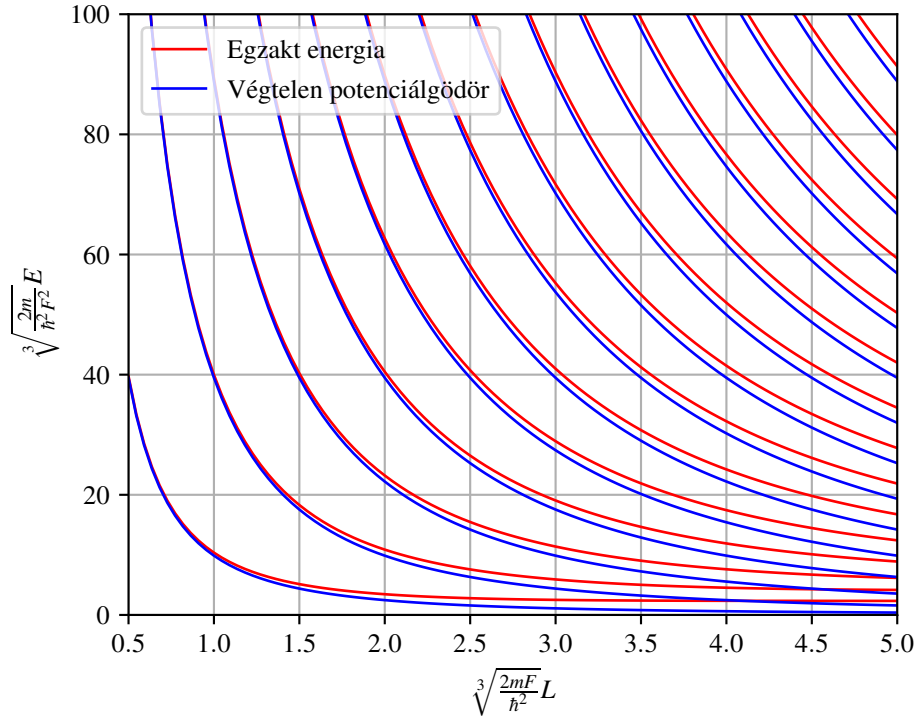
$E \gg FL$ esetén a különbség az $E^{3/2}$ függvény deriváltjának segítségével helyettesíthető:

$$nh \approx 2\sqrt{2m}E^{1/2}L \quad (2.21)$$

$$E_n \approx \frac{n^2 h^2}{8mL^2} \quad (2.22)$$



2.2. ábra. Az ábra a szemiklasszikus energiaszinteket hasonlítja össze az egzakt energiaszintekkel. Ez az ábra is a bE és aL közötti relációt ábrázolja. A szemiklasszikus közelítés nagy kvantumszámok illetve $E \gg FL$ esetén pontos. Utóbbi oka, hogy ebben az esetben a potenciál elhanyagolható, és a potenciál nélküli végtelen potenciálgödör energiaszintjeit pedig a szemiklasszikus közelítés egzaktul megadja.



2.3. ábra. Az ábrán a végtelen potenciálgödör és az egzakt energiaszintek összehasonlítása látható. Ez csak az $E \gg FL$ esetben jó közelítés, a szemiklasszikus energiaszintek jóval pontosabbak.

2.3. Green függvény

A rezolvens operátor definíciója

$$\hat{G}(E) = \frac{1}{\hat{H} - E} \quad (2.23)$$

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

$$G(x, y; E) = \langle x | \hat{G}(E) | y \rangle \quad (2.24)$$

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-függvény megegyezik a differenciálegyenletek elméletéből ismert Green-függvénnyel.

$$(\hat{H} - E) \hat{G}(E) = \hat{I} \quad (2.25)$$

$$\int dx' \langle x | (\hat{H} - E) | x' \rangle \langle x' | \hat{G}(E) | y \rangle = \langle x | \hat{I} | y \rangle = \delta(x - y) \quad (2.26)$$

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

$$(\hat{H}_x - E) G(x, y; E) = \delta(x - y) \quad (2.27)$$

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

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + Fx - E \right) G(x, y; E) = \delta(x - y) \quad (2.28)$$

2.3.1. Egzakt Green-függvény

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

$$G(x, y; E) = C_1 \text{Ai} \left(\sqrt[3]{\frac{2mF}{\hbar^2}} x - \sqrt[3]{\frac{2m}{\hbar^2 F^2}} E \right) + C_2 \text{Bi} \left(\sqrt[3]{\frac{2mF}{\hbar^2}} x - \sqrt[3]{\frac{2m}{\hbar^2 F^2}} E \right) \quad (2.29)$$

illetve az $x > y$ tartományban

$$G(x, y; E) = C_3 \text{Ai} \left(\sqrt[3]{\frac{2mF}{\hbar^2}} x - \sqrt[3]{\frac{2m}{\hbar^2 F^2}} E \right) + C_4 \text{Bi} \left(\sqrt[3]{\frac{2mF}{\hbar^2}} x - \sqrt[3]{\frac{2m}{\hbar^2 F^2}} E \right) \quad (2.30)$$

, 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 2.28. egyenlet y körüli integrálásából kapott feltételeket kell felhasználni. A doboz falára vonatkozó határfeltételek:

$$G(x, y; E)|_{x=0} = 0 \quad (2.31)$$

$$G(x, y; E)|_{x=L} = 0 \quad (2.32)$$

A 2.28. egyenlet $\int_{y-\epsilon}^{y+\epsilon} dx' \int_y^{x'} dx$ szerinti integrálja az $\epsilon \rightarrow 0^+$ határesetben:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} G(x, y; E)|_{x=y-\epsilon}^{x=y+\epsilon} = 0 \quad (2.33)$$

A jobb oldal integrálja $(x - y) \theta(x - y)|_{x=y-\epsilon}^{x=y+\epsilon}$, ami a határesetben 0. Az $(Fx - E) G(x, y; E)$ integrálja is 0 a határesetben, mert az eredeti függvény is folytonos, így az integrálja

is. A 2.28. egyenlet x szerinti integrálja y körüli ϵ sugarú környezetében az $\epsilon \rightarrow 0^+$ határesetben:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{\partial}{\partial x} G(x, y; E) \Big|_{x=y-\epsilon}^{x=y+\epsilon} = -\frac{2m}{\hbar^2} \quad (2.34)$$

Itt a jobb oldal integrálja $\theta(x-y)|_{x=y-\epsilon}^{x=y+\epsilon} = 1$ a határesetben. A bal oldalon az előzőhöz hasonló módon csak a derivált integrálja marad meg. A 2.29. és a 2.30. egyenlet behelyettesítése meghatározza a C együtthatókra vonatkozó egyenleteket:

$$\frac{C_2}{C_1} = -\text{Ti}(-bE) \quad (2.35)$$

$$\frac{C_4}{C_3} = -\text{Ti}(aL - bE) \quad (2.36)$$

$$\frac{C_3}{C_1} = \frac{\text{Ti}(ay - bE) - \text{Ti}(-bE)}{\text{Ti}(ay - bE) - \text{Ti}(aL - bE)} \quad (2.37)$$

TODO: b lecserélése bE -re az előző részekben.

$$C_1 = -\frac{2m}{a\hbar^2} \frac{1}{\left(\left(\frac{C_3}{C_1} - 1 \right) \text{Ai}'(ay - bE) + \left(\frac{C_4}{C_3} \frac{C_3}{C_1} - \frac{C_2}{C_1} \right) \text{Bi}'(ay - bE) \right)} \quad (2.38)$$

$$C_1 = -\frac{a^2}{F} \frac{1}{\left(\left(\frac{C_3}{C_1} - 1 \right) \text{Ai}'(ay - bE) + \left(\frac{C_4}{C_3} \frac{C_3}{C_1} - \frac{C_2}{C_1} \right) \text{Bi}'(ay - bE) \right)} \quad (2.39)$$

A 2.35-2.38, 2.29. és a 2.30. egyenletek explicit, analitikus módon előállítják a $G(x, y; E)$ Green-függvényt. Valós energiákra $G(x, y; E) = G(y, x; E)^*$. Ebből következik, hogy a Green-függvény $x < y$ eset y függése kiemelhető lesz, és megegyezik az $x > y$ eset x függésével. Ezek szerint $\text{Ai}(ay - bE) - \text{Ti}(aL - bE) \text{Bi}(ay - bE)$ kiemelhető a C_1 együtthatóból,

$$C_1 = \frac{a^2}{F} \frac{\text{Ai}(ay - bE) - \text{Ti}(aL - bE) \text{Bi}(ay - bE)}{(\text{Ti}(-bE) - \text{Ti}(aL - bE)) (\text{Bi}(-bE) \text{Ai}'(-bE) - \text{Ai}(-bE) \text{Bi}'(-bE))}. \quad (2.40)$$

Az algebrai átalakításokon túl fel kellett használni, hogy $\text{Ai}(ay - bE) \text{Bi}'(ay - bE) - \text{Bi}(ay - bE) \text{Ai}'(ay - bE)$ y -től független konstans tehát $y = 0$ helyettesíthető bele. Ez onnan látható, hogy y szerinti deriváltja 0,

$$\begin{aligned} & (\text{Ai}(ay - bE) \text{Bi}'(ay - bE) - \text{Bi}(ay - bE) \text{Ai}'(ay - bE))' \\ &= a \text{Ai}'(ay - bE) \text{Bi}'(ay - bE) + a \text{Ai}(ay - bE) \text{Bi}''(ay - bE) \\ &\quad - a \text{Bi}'(ay - bE) \text{Ai}'(ay - bE) - a \text{Bi}(ay - bE) \text{Ai}''(ay - bE) \\ &= a \text{Ai}(ay - bE) (ay - bE) \text{Bi}(ay - bE) - a \text{Bi}(ay - bE) (ay - bE) \text{Ai}(ay - bE) \\ &= 0. \end{aligned} \quad (2.41)$$

Ez után már az x - y szimmetriája jól látható a Green-függvénynek.

$$C_0 = \frac{a^2}{F} \frac{1}{(\text{Ti}(-bE) - \text{Ti}(aL - bE))(\text{Bi}(-bE) \text{Ai}'(-bE) - \text{Ai}(-bE) \text{Bi}'(-bE))} \quad (2.42)$$

bevezetésével a Green függvény egyszerűbb alakra hozható,

$$G_0(x, y; E) = C_0 \times \begin{cases} (\text{Ai}(ay - bE) - \text{Ti}(aL - bE) \text{Bi}(ay - bE)) \times \\ (\text{Ai}(ax - bE) - \text{Ti}(-bE) \text{Bi}(ax - bE)) & x \leq y \\ (\text{Ai}(ay - bE) - \text{Ti}(-bE) \text{Bi}(ay - bE)) \times \\ (\text{Ai}(ax - bE) - \text{Ti}(aL - bE) \text{Bi}(ax - bE)) & x > y \end{cases} \quad (2.43)$$

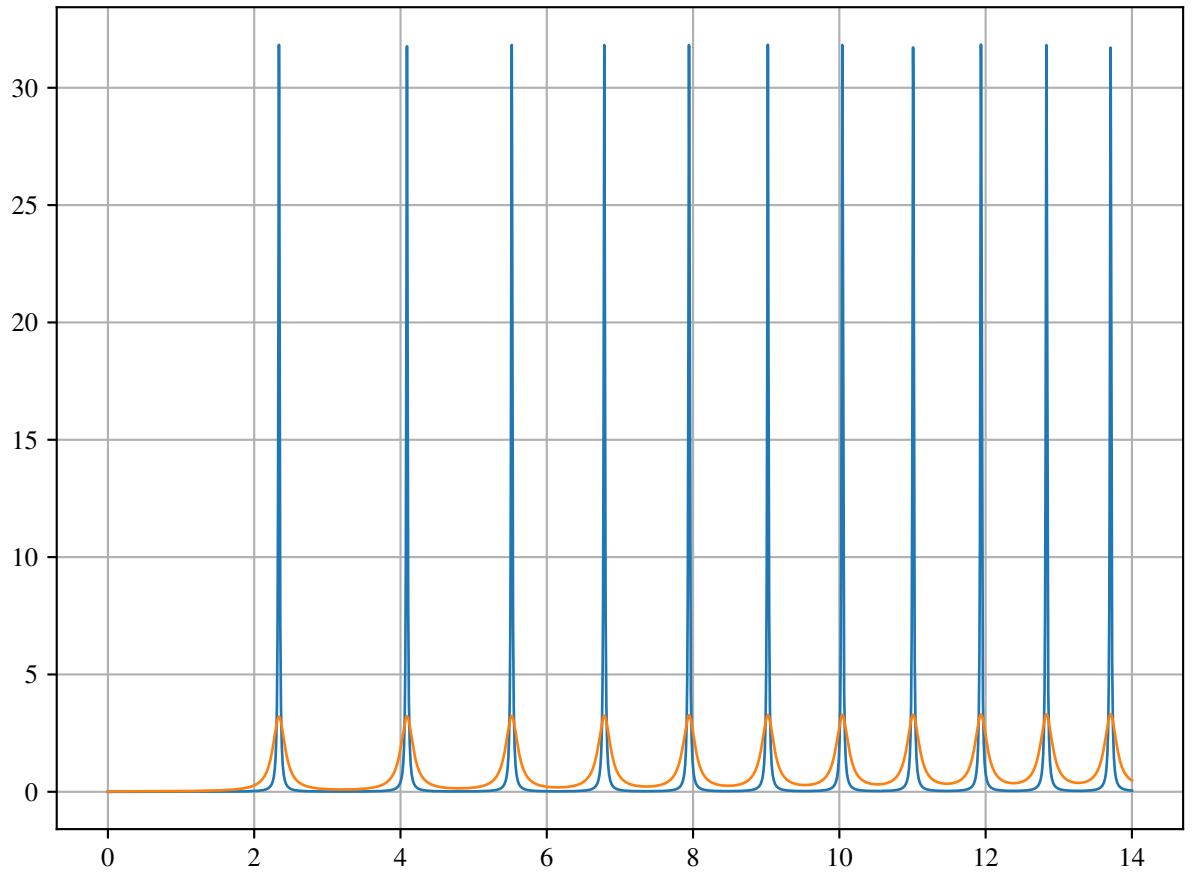
A rezolvens operátornak pólusai vannak a rendszer E_k sajátenergiáinál:

$$\hat{G}(E) = \sum_n \frac{|n\rangle \langle n|}{E_n - E} \quad (2.44)$$

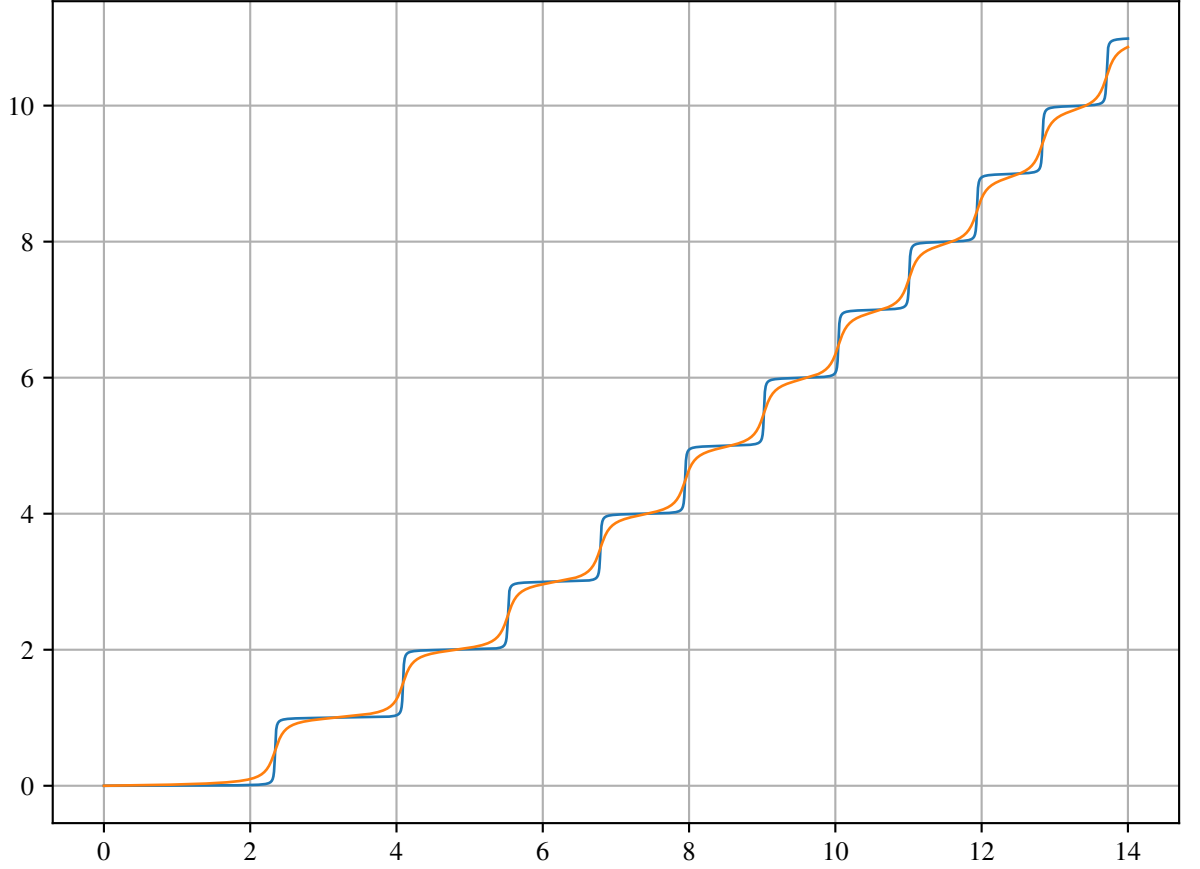
Így ha E kielégíti a 2.9. egyenletet, akkor a rezolvensnek és ezért a Green-függvénynek is pólusa kell hogy legyen. Ezt a C_1 szingularitásán lehet a legkönnyebben belátni. Ha C_1 szinguláris, az összes többi C együttható is, és így a Green-függvény is. A 2.9. egyenlet szerint a $\frac{C_3}{C_1}$ számlálójának és nevezőjének 3. tagjai egyenlőek. Első tagjuk bármely E esetén egyenlő, így hányadosuk 1, valamint a 2.9. egyenlet esetén $\frac{C_2}{C_1} = \frac{C_4}{C_3}$. Ezeknek a következtében mind $\frac{C_3}{C_1} - 1$, mind $\frac{C_4}{C_3} \frac{C_3}{C_1} - \frac{C_2}{C_1}$ 0-val egyenlő, így a C_1 -re vonatkozó kifejezés nevezője 0. Ezek a $\frac{1}{E_n - E}$ típusú pólusok a 2.44. egyenletből.

Egy érdekes matematikai eredmény, hogy a Green-függvényre vonatkozó differenciál egyenlet megoldásával elvégeztem a 2.44. egyenlet összegzését. Ez az összeg az Airy függvények szorzatának összege lenne, osztva $E_k - E$ -vel és a megfelelő normalizációs faktoral, ami Airy függvények szorzatának 0 és L közötti integrálj, valamint E_k -t a 2.9. transzcendens egyenlet határozza meg. A Green-függvényre vonatkozó differenciálegyenlet nélkül az összeg elvégzése reménytelennek látszana.

$$\rho(E) = \frac{1}{\pi} \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \text{ImTr} \hat{G}(E + i\epsilon) \quad (2.45)$$



2.4. ábra. A 2.45. képlet alapján számolt állapotsűrűség. A kék függvényt $\epsilon = 10^{-3}/b$, a narancssárga görbét pedig $\epsilon = 10^{-2}/b$ helyettesítéssel kaptuk. Látható, hogy ϵ csökkentésével a tüskék egyre keskenyebbek, és egyre magasabbak lesznek.



2.5. ábra. A 2.4. ábrán bemutatott függvények integrálja látható ezen az ábrán. Mind a két függvény ugrása közelítőleg 1, ami azt jelenti, hogy a 2.4. ábrán látható tüskék alatti terület jó közelítéssel 1. Az ϵ csökkentése a lépcsőfüggvényhez közelíti az integrált függvényt, ami egyezik az elvárásokkal.

2.3.2. Green-függvény perturbáció számítással

A perturbációszámításhoz a Hamilton operátort két részre bontom fel:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} \quad (2.46)$$

A \hat{H}_0 operátorhoz tartozó rezolvens $\hat{G}_0(E)$. \hat{H} és \hat{H}_0 kifejezhetőek a rezolvenseikkel. Ha a kifejezéseket behelyettesítjük a fenti egyenletbe, implicit egyenletet kapunk $opG(E)$ -re nézve, melyet fel lehet használni perturbációszámításra. Az egyenletet balról $\hat{G}_0^{-1}(E)$ -vel, jobbról $\hat{G}^{-1}(E)$ -vel szorzunk.

$$\hat{G}^{-1}(E) + E = \hat{G}_0^{-1}(E) + E + \hat{V} \quad (2.47)$$

$$\hat{G}(E) = \hat{G}_0(E) - \hat{G}_0(E) \hat{V} \hat{G}(E) \quad (2.48)$$

Az alábbi módon definiálva $\hat{G}_n(E)$ operátort, a 2.48. egyenlethez hasonló rekurziós összefüggés áll fent:

$$\hat{G}_n(E) = \hat{G}_0(E) \sum_{k=0}^n \left(-\hat{V} \hat{G}_0(E) \right)^k \quad (2.49)$$

$$\hat{G}_{n+1}(E) = \hat{G}_0(E) - \hat{G}_0(E) \hat{V} \hat{G}_n(E) \quad (2.50)$$

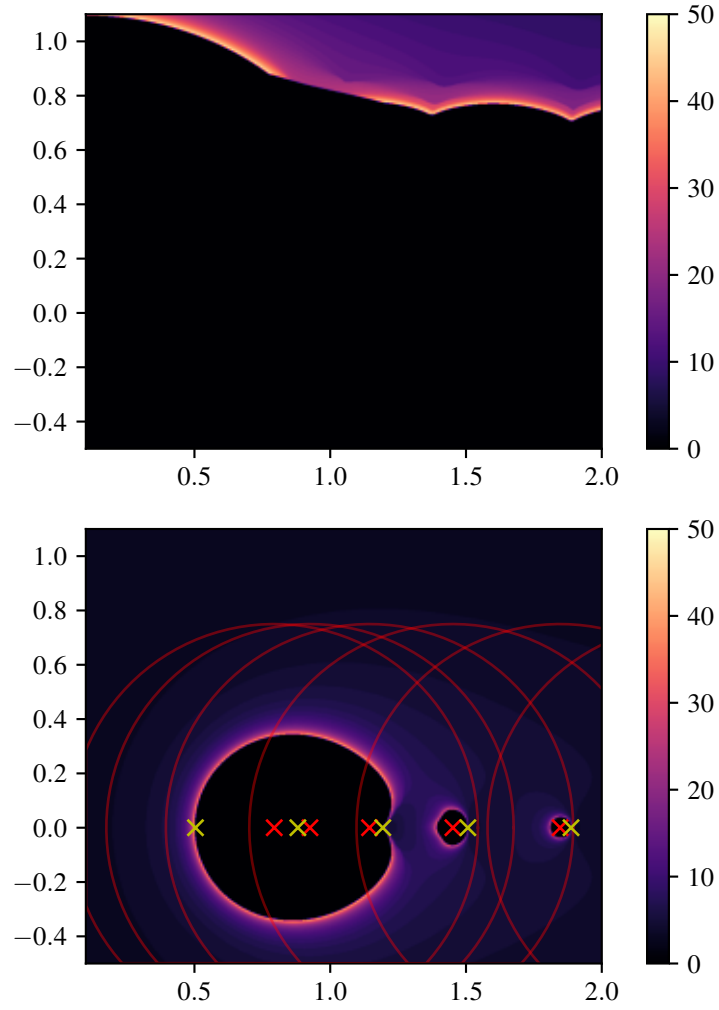
Ha $\left\| \hat{V} \hat{G}_0(E) \right\| < 1$ akkor a \hat{G}_n sorozat konvergál, és kielégíti a 2.48. egyenletet. Ezért konvergencia esetén:

$$\hat{G}(E) = \hat{G}_0(E) \sum_{n=0}^{\infty} \left(-\hat{V} \hat{G}_0(E) \right)^n \quad (2.51)$$

A perturbálatlan 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 $\hat{G}_0(E)$ Green-függvényt is a 2.35-2.38, 2.29. és a 2.30. egyenletek alapján határozom meg.

$$G_0(x, y; E) = \begin{cases} -\frac{2m}{k\hbar^2} \frac{1}{\sin(kL)} \sin(k(y-L)) \sin(kx) & x \leq y \\ -\frac{2m}{k\hbar^2} \frac{1}{\sin(kL)} \sin(k(x-L)) \sin(ky) & x > y \end{cases} \quad (2.52)$$

, ahol $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$.



2.6. ábra. Ez az ábra a két perturbációs sor konvergenciáját hasonlítja össze a komplex energia síkon. A felső ábra a $V = Fx$ perturbáló potenciálnak, míg az alsó a $V = Fx - FL/2$ perturbáció szerinti sornak felel meg. A fekete tartományok divergenciát jelölnek, míg a többi szín a sorfejtés tagjainak csökkenési sebességét jellemzi, a norma harmadolásához szükséges lépések számát megadva. A piros körökön kívüli tartomány a ?? formula által garantált konvergencia tartományát jelöli. A piros x-ek a \hat{G}_0 pólusait, a sárga x-ek pedig az egzakt \hat{G} operátor pólusait jelölik.

3. Kiterjesztés több dimenzióra

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 $\mathbf{F} = \text{const}$. A potenciál így $V(x, y, z) = -\mathbf{F}_x x - \mathbf{F}_y y - \mathbf{F}_z z$. Mivel az a potenciál lineáris x , y és z -ben, a Schrödinger egyenlet szeparálható.

$$\psi_{klm}(x, y, z) = \phi_k(x') \phi_l(y') \phi_m(z') \quad (3.1)$$

Ahol $x' = \sqrt{\frac{2m\mathbf{F}_x}{\hbar^2}} x - \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2 \mathbf{F}_x^2}} E_k$, E_k pedig az 1 dimenziós probléma, $\text{Ti} \sqrt{\frac{2m\mathbf{F}_x}{\hbar^2}} L - \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2 \mathbf{F}_x^2}} E - \text{Ti} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2 \mathbf{F}_x^2}} E = 0$, 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.

$$E = E_k + E_l + E_m \quad (3.2)$$

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

$$\phi_n = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{nx\pi}{L}\right) \quad (3.3)$$

valamint

$$E_n = \frac{\hbar^2 n^2}{2mL^2} \quad (3.4)$$

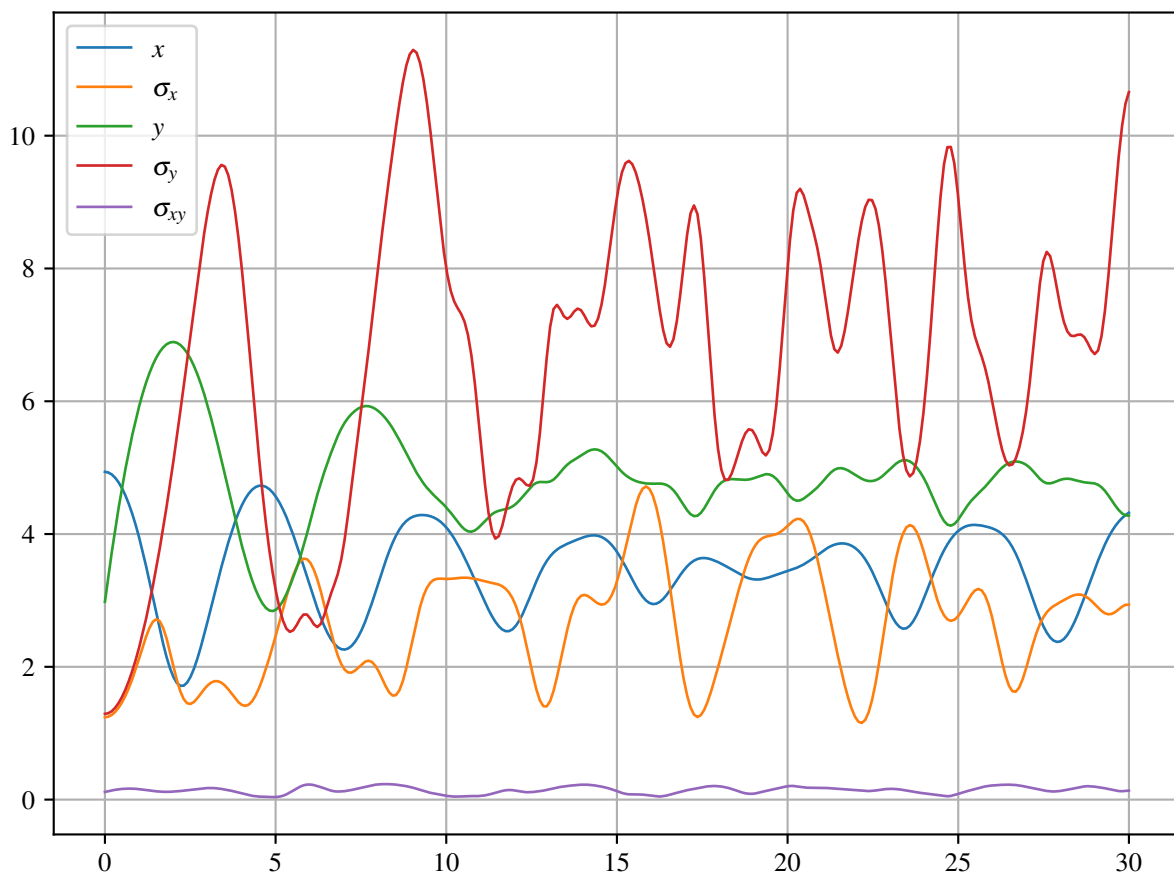
TODO: ÁBRA AZ EGYSZER FÜGGŐLEGES ESET ENERGIÁIRÓL, esetleg szintén L függvényében.

TODO: ábra 2D -quantum chaos in billiards-

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

4. Numerikus számítások

4.1. Momentumok időfejlődése



4.1. ábra. Várható értékek és szórások időfejlődése

4.2. Hullámfüggvény időfejlődése

4.2.1. 1D

4.2.2. 2D

5. Plafon érintés 1D

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

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

, azaz

$$\text{Ai} - \sqrt[3]{\frac{2mF}{\hbar^2}} L = 0 \quad (5.2)$$

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

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