

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. A dobozba zárt részecske homogén térben	1
2.1. Három dimenzióban	1
2.2. Egy dimenzióban	2
2.2.1. $F = 0$ eset	2
2.2.2. Airy függvények	3
2.2.3. Kitekintés: szabad részecske gyorsuló koordinátarendszerben .	4
2.2.4. Véges F eset	4
3. Szemiklasszikus közelítés	7
3.1. Összehasonlítás az egzakt eredménnyel	9
4. Homogén tér Green-függvénye	10
4.0.1. Egzakt Green-függvény	11
4.0.2. Green-függvény perturbáció számítással	15
5. Numerikus számítások	18
5.1. Momentumok időfejlődése	18
5.2. Hullámfüggvény időfejlődése	18
5.2.1. 1D	18
5.2.2. 2D	18
Hivatkozások	20

Ábrák jegyzéke

2.1. Egzakt energiaszintek	6
3.1. Szemiklasszikus energiaszintek	8
3.2. Végtelen potenciálgödör energiaszintjei	9
4.1. Állapotsűrűség	14
4.2. Állapotok száma	15
4.3. Green-függvény perturbációs sorának konvergenciája	17
5.1. Várható értékek és szórások időfejlődése	18

Táblázatok jegyzéke

1. Bevezetés

2. A dobozba zárt részecske homogén térben

2.1. Három dimenzióban

A rendszer egy téglatest alakú dobozba zárt részecske. A doboz mérete L_x , L_y és L_z . A dobozban homogén erőter hat a részecskére, azaz $\mathbf{F} = \text{const}$. A potenciál így $V(x, y, z) = -F_x x - F_y y - F_z z$. A rendszer időfüggő Schrödinger-egyenlete

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, y, z, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(x, y, z, t) + V(x, y, z) \psi(x, y, z, t). \quad (2.1)$$

Az egyenlet kezdőfeltétele egy kezdeti állapot t_0 -ban, $\psi(x, y, z, t_0) = \psi_0(x, y, z)$, az egyenlet határfeltételei pedig a hullámfüggvény határokon való eltűnése, $0 = \psi|_{x=0} = \psi|_{x=L_x} = \psi|_{y=0} = \psi|_{y=L_y} = \psi|_{z=0} = \psi|_{z=L_z}$. Mivel ez a potenciál lineáris x , y és z -ben, a Schrödinger-egyenlet szeparálható a

$$\psi_{klm}(x, y, z, t) = e^{-\frac{iE_{klm}t}{\hbar}} \psi_k^{(x)}(x) \psi_l^{(y)}(y) \psi_m^{(z)}(z) \quad (2.2)$$

próbafüggvénnyel. A $\psi_n^{(i)}$ ($i = x, y, z$) függvényekre így az egy dimenziós stacionárius Schrödinger-egyenlet vonatkozik. A $\psi^{(x)}$ -re vonatkozó egyenlet

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_k^{(x)}(x)}{dx^2} + F_x x \psi_k^{(x)}(x) = E_k^{(x)} \psi_k^{(x)}(x), \quad (2.3)$$

a határfeltételek $0 = \psi_k^{(x)}|_{x=0} = \psi_k^{(x)}|_{x=L_x}$. $\psi_l^{(y)}$ és $\psi_m^{(z)}$ -re vonatkozó egyenletek hasonlóak. Az E_{klm} energia a három egy dimenziós stacionárius Schrödinger-egyenlet sajátenergiáinak összege,

$$E_{klm} = E_k^{(x)} + E_l^{(y)} + E_m^{(z)}. \quad (2.4)$$

A (2.1) egyenlet általános megoldása a (2.2) próbafüggvények kezdőfeltételhez illesztett lineáris kombinációja,

$$\psi(x, y, z, t) = \sum_{klm} C_{klm} \psi_{klm}(x, y, z, t). \quad (2.5)$$

C_{klm} együtthatók meghatározásához a szokásos hely reprezentáció beli skalárszorozást kell használni,

$$C_{klm} = \frac{1}{N_{klm}} \int_0^{L_x} dx \int_0^{L_y} dy \int_0^{L_z} dz \psi_{klm}(x, y, z, t=0)^* \psi_0(x, y, z), \quad (2.6)$$

$$N_{klm} = \int_0^{L_x} dx \int_0^{L_y} dy \int_0^{L_z} dz |\psi_{klm}(x, y, z, t = 0)|^2. \quad (2.7)$$

A (2.6) egyenlet nem egyszerűsíthető tovább általános ψ_0 esetén, viszont a (2.7) igen. Mivel ψ_{klm} szorzat alakú, nem kell a tripla integrált elvégezni, hanem csak három egyszeres integrál szorzatát kell kiszámítani. Ez numerikus számításokban jelentős.

$$N_{klm} = N_k^{(x)} N_l^{(y)} N_m^{(z)}, \quad (2.8)$$

ahol az egyes N tagok az egy dimenziós sajátfüggvények normájaként vannak definiálva.

$$N_k^{(x)} = \int_0^{L_x} dx \left| \psi_k^{(x)}(x) \right|^2, \quad (2.9)$$

$N_l^{(y)}$ -re és $N_m^{(z)}$ -re hasonló képletek vonatkoznak.

2.2. Egy dimenzióban

Az egy dimenziós probléma tárgyalásának két esete van aszerint, hogy \mathbf{F} megfelelő komponense 0-e. Amennyiben a komponens 0, a feladat a szabad részecske utáni legegyszerűbb probléma megoldása: a végtelen potenciálgödör. Amennyiben \mathbf{F} komponense nem 0, a megoldandó egyenlet az Airy-egyenletre [1] hasonlít, és az Airy függvények rövid vizsgálata után az energia sajátfüggvényeket megadjuk az Airy függvények kombinációjaként.

2.2.1. $F = 0$ eset

Az $F = 0$ eset megoldása egyszer, az egyik legalapvetőbb példa egyszerű kvantummechanikai rendszerekre. A sajátfüggvények

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right), \quad (2.10)$$

($n = 1, 2, \dots$), a normálási faktorok

$$N_n = 1. \quad (2.11)$$

Minden sajátfüggvény egyre normált szinusz függvény, melyek $n - 1$ helyen veszik fel a 0 értéket $x = 0$ és $x = L$ között. Sajátenergiáik

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2}. \quad (2.12)$$

Ezek az energiaszintek hasznosak lesznek a numerikus számításokban az $F \neq 0$ eseten is.

2.2.2. Airy függvények

Az Airy egyenlet

$$\frac{d^2 y}{dx^2} - xy = 0, \quad (2.13)$$

ennek az egyenletnek a megfelelő kezdőfeltételekhez illesztett megoldásai az úgynevezett Airy-függvények, $\text{Ai}(x)$ és $\text{Bi}(x)$.

Az Airy-függvények szorosan kapcsolódnak a Bessel-függvényekhez. Ez elentős mind az aszimptotikus alakjuk meghatározásához, mind a függvények numerikus kiértékeléséhez. A megoldást

$$y(x) = x^{\frac{1}{2}} v \left(\frac{2}{3} x^{\frac{3}{2}} \right) \quad (2.14)$$

alakban keresve a $x \geq 0$ tartományban a $v(x)$ -re vonatkozó egyenlet a módosított Bessel-egyenlet $t = \frac{2}{3} x^{\frac{3}{2}}$ bevezetésével.

$$t^2 \frac{d^2 v(t)}{dt^2} + t \frac{dv(t)}{dt} - \left(t^2 + \frac{1}{9} \right) v(t) = 0 \quad (2.15)$$

Leolvasható, hogy $\nu^2 = \frac{1}{9}$, azaz a $v(x)$ -re vonatkozó egyenlet megoldásai az $I_{\frac{1}{3}}(x)$ és $I_{-\frac{1}{3}}(x)$ módosított Bessel-függvények lineáris kombinációi. A két hagyományosan választott lineáris kombinációk a következők:

$$\text{Ai}(x) = \frac{\sqrt{x}}{3} \left(I_{-\frac{1}{3}} \left(\frac{2}{3} x^{\frac{3}{2}} \right) - I_{\frac{1}{3}} \left(\frac{2}{3} x^{\frac{3}{2}} \right) \right) \quad (2.16)$$

$$\text{Bi}(x) = \sqrt{\frac{x}{3}} \left(I_{-\frac{1}{3}} \left(\frac{2}{3} x^{\frac{3}{2}} \right) + I_{\frac{1}{3}} \left(\frac{2}{3} x^{\frac{3}{2}} \right) \right). \quad (2.17)$$

$x \leq 0$ tartományban

$$y(x) = (-x)^{\frac{1}{2}} v \left(\frac{2}{3} (-x)^{\frac{3}{2}} \right) \quad (2.18)$$

alakban keresve a megoldást a $v(x)$ -re kapott egyenlet a Bessel-egyenlet, megint $\nu^2 = \frac{1}{9}$.

$$t^2 \frac{d^2 v(t)}{dt^2} + t \frac{dv(t)}{dt} + \left(t^2 - \frac{1}{9} \right) v(t) = 0 \quad (2.19)$$

Az $x = 0$ pontban megkövetelt analitikusságnak megfelelően $x \geq 0$ esetén

$$\text{Ai}(-x) = \frac{\sqrt{x}}{3} \left(J_{-\frac{1}{3}} \left(\frac{2}{3} x^{\frac{3}{2}} \right) - J_{\frac{1}{3}} \left(\frac{2}{3} x^{\frac{3}{2}} \right) \right) \quad (2.20)$$

$$\text{Bi}(-x) = \sqrt{\frac{x}{3}} \left(J_{-\frac{1}{3}} \left(\frac{2}{3} x^{\frac{3}{2}} \right) + J_{\frac{1}{3}} \left(\frac{2}{3} x^{\frac{3}{2}} \right) \right), \quad (2.21)$$

ahol $J_\nu(x)$ a Bessel-függvények. Érdemes definiálni a

$$\text{Ti}(x) = \frac{\text{Ai}(x)}{\text{Bi}(x)} \quad (2.22)$$

függvényt.

$x \rightarrow \infty$ aszimptotikus alak:

$$\text{Ai}(-x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}x^{1/4}} \cos\left(\frac{2}{3}x^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right) + \mathcal{O}(x^{-5/4}) \quad (2.23)$$

$$\text{Bi}(-x) = -\frac{1}{\sqrt{\pi}x^{1/4}} \sin\left(\frac{2}{3}x^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right) + \mathcal{O}(x^{-5/4}) \quad (2.24)$$

$$\text{Ti}(-x) = -\cot\left(\frac{2}{3}x^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right) + \mathcal{O}(x^{-5/4}) \quad (2.25)$$

$$\text{Ai}(x) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}x^{1/4}} e^{-\frac{2}{3}x^{3/2}} + \mathcal{O}(x^{-5/4}) \quad (2.26)$$

$$\text{Bi}(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}x^{1/4}} e^{\frac{2}{3}x^{3/2}} + \mathcal{O}(x^{-5/4}) \quad (2.27)$$

Az állapotok normájának kiszámításához szükség van az Airy-függvények szorzatának integráljára. [2] (A.16) szerint

$$\int y^2 dx = xy^2 - y'^2, \quad (2.28)$$

ahol y az Airy egyenlet tetszőleges megoldása.

A Green-függvény meghatározása közben felmerül a Wronski-determinánsa az Airy-függvényeknek, ez [3] (9.2.7) szerint

$$\mathcal{W}\{\text{Ai}(x), \text{Bi}(x)\} = \text{Ai}(x)\text{Bi}'(x) - \text{Bi}(x)\text{Ai}'(x) = \frac{1}{\pi} \quad (2.29)$$

2.2.3. Kitekintés: szabad részecske gyorsuló koordinátarendszerben

2.2.4. Véges F eset

A (2.13) egyenlet (2.3) alakúra hozható a

$$x = ax' - bE, \quad (2.30)$$

$$y(x) = y(ax' - bE) \quad (2.31)$$

helyettesítésekkel. A helyettesítés után $\frac{d}{dx} = \frac{1}{a} \frac{d}{dx'}$, és a (2.13) alakja

$$\frac{d^2 y(ax - bE)}{dx'^2} - (a^3 x - a^2 bE) y(ax - bE) = 0. \quad (2.32)$$

Ezt az egyenletet összevetve (2.3) egyenlettel a és b értéke leolvasható,

$$a = \sqrt[3]{\frac{2mF}{\hbar^2}}, \quad (2.33)$$

$$b = \sqrt[3]{\frac{2m}{\hbar^2 F^2}}. \quad (2.34)$$

Az egy dimenziós időfüggetlen Schrödinger-egyenlet megoldása

$$\psi(x) = c_1 \text{Ai}(ax - bE) + c_2 \text{Bi}(ax - bE), \quad (2.35)$$

melyet a határfeltételekhez kell illeszteni,

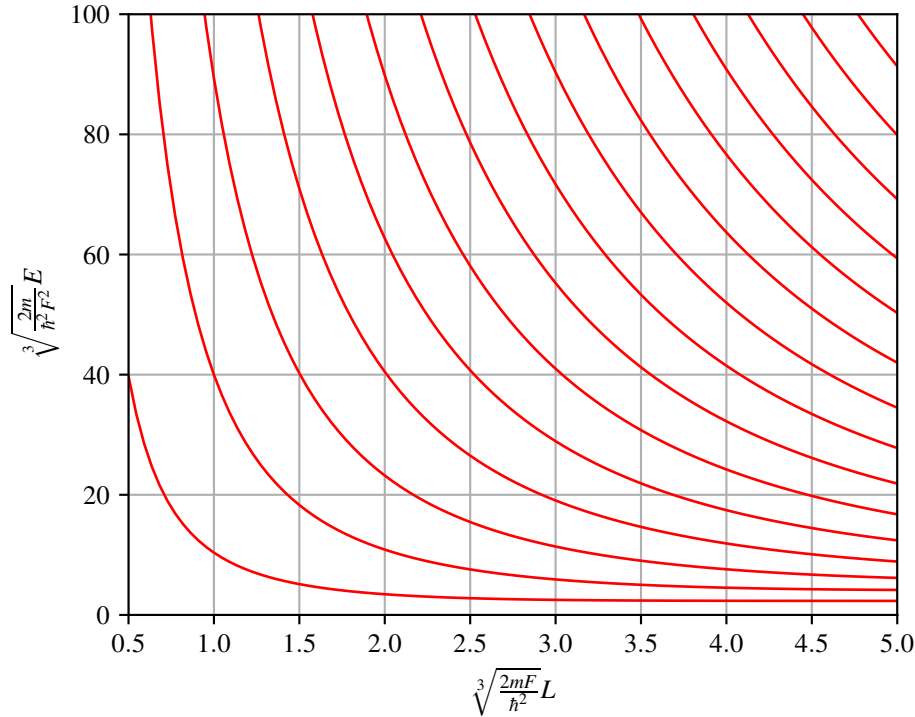
$$\psi(0) = \psi(L) = 0. \quad (2.36)$$

A $\psi(0) = 0$ feltételből következik, hogy $\psi \propto \text{Bi}(-bE)\text{Ai}(ax - bE) - \text{Ai}(-bE)\text{Bi}(ax - bE)$. A második határfeltétel pedig meghatározza a lehetséges energiákat,

$$0 = \psi(L) = \text{Bi}(-bE)\text{Ai}(aL - bE) - \text{Ai}(-bE)\text{Bi}(aL - bE). \quad (2.37)$$

Felhasználva a $\text{Ti}(x)$ függvényt, az egyenlet kompakt és jól közelíthető alakra hozható,

$$\text{Ti}(aL - bE) - \text{Ti}(-bE) = 0. \quad (2.38)$$



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 $\text{Ai}(-bE) = 0$ egyenlet határozza meg. Ezeket az aszimptotikus viselkedéseket a 2.1. ábra jól mutatja, később a Szemiklasszikus közelítés vizsgálata során részletesebben tárgyaljuk.

$$\psi_k(x) = \text{Bi}(-bE_k) \text{Ai}(ax - bE_k) - \text{Ai}(-bE_k) \text{Bi}(ax - bE_k) \quad (2.39)$$

sajátállapotokhoz tartozó normálás analitikusan meghatározható. Mivel ψ_k sajátállapotok valós értékűek, $|\psi_k(x)|^2 = \psi_k(x)^2$, így a (2.28) egyenlet közvetlenül alkal-

mazható,

$$N_k = \int_0^L dx |\psi_k(x)|^2 = \left(x - \frac{bE}{a} \right) \psi_k(x)^2 - \frac{1}{a^3} \psi'_k(x)^2 \Big|_0^L = \quad (2.40)$$

3. Szemiklasszikus közelítés

$$nh = \oint p dq = \quad (3.1)$$

$E/F < L$ esete:

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

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

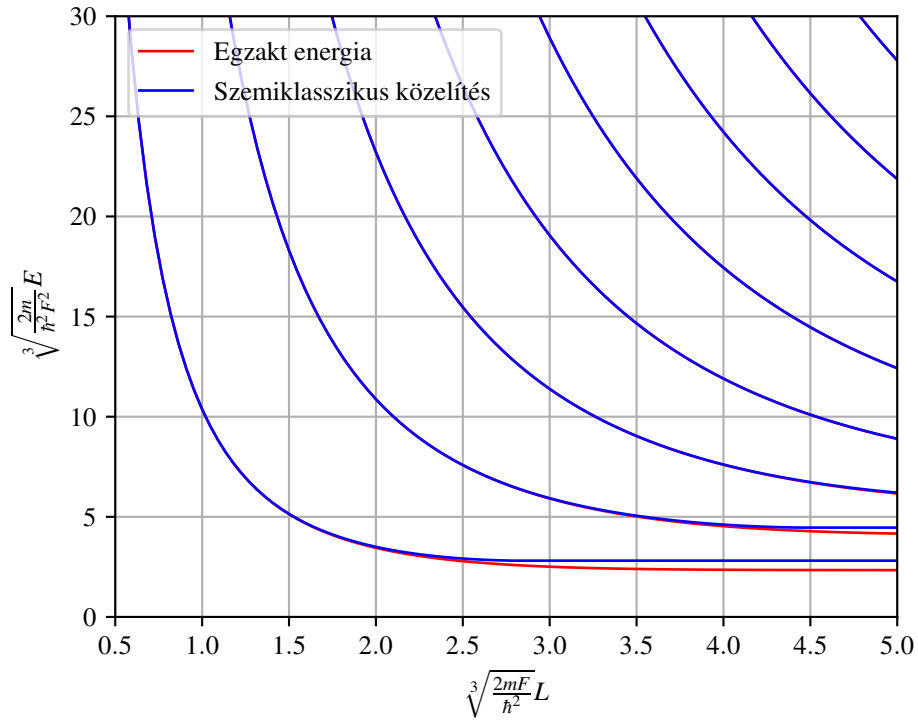
$E/F > L$ esete:

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

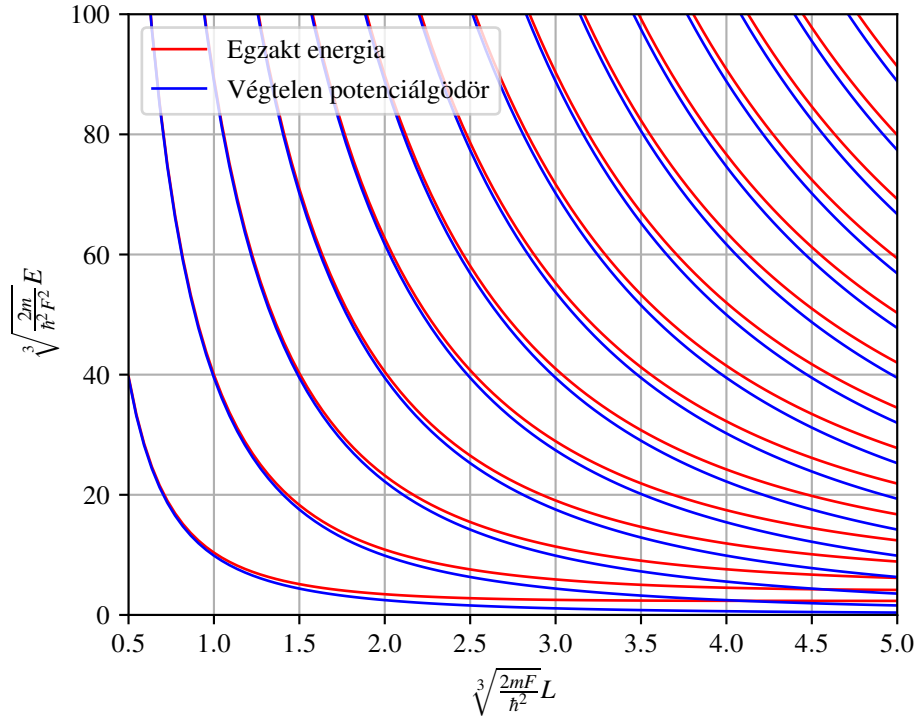
$E \gg FL$ esetén a különbség az $E^{3/2}$ függvény deriváltjának segítségével helyettesíthető:

$$nh \approx 2\sqrt{2m}E^{1/2}L \quad (3.5)$$

$$E_n \approx \frac{n^2 h^2}{8mL^2} \quad (3.6)$$



3.1. 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.



3.2. 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.

3.1. Összehasonlítás az egzakt eredménnyel

$x \rightarrow \infty$ aszimptotikus alak:

$$\text{Ai}(-x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}x^{1/4}} \cos\left(\frac{2}{3}x^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right) + \mathcal{O}(x^{-5/4}) \quad (3.7)$$

$$\text{Bi}(-x) = -\frac{1}{\sqrt{\pi}x^{1/4}} \sin\left(\frac{2}{3}x^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right) + \mathcal{O}(x^{-5/4}) \quad (3.8)$$

$$\text{Ti}(-x) = -\cot\left(\frac{2}{3}x^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right) + \mathcal{O}(x^{-5/4}) \quad (3.9)$$

Ezzel a közelítéssel a 2.38. egyenlet alakja:

$$\cot\left(\frac{2}{3}(bE - aL)^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right) = \cot\left(\frac{2}{3}(bE)^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right) \quad (3.10)$$

, azaz

$$\frac{2}{3}(bE)^{3/2} - \frac{2}{3}(bE - aL)^{3/2} = n\pi \quad (3.11)$$

. Az a és b behelyettesítésével az egyenlet

$$\frac{2\sqrt{2m}}{3F\hbar} \left(E^{3/2} - (E - FL)^{3/2} \right) = n\pi \quad (3.12)$$

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.

4. Homogén tér Green-függvénye

A rezolvens operátor definíciója

$$\hat{G}(E) = \frac{1}{\hat{H} - E} \quad (4.1)$$

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

$$G(x, y; E) = \langle x | \hat{G}(E) | y \rangle \quad (4.2)$$

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-függvény megegyezik a differenciálegyenletek elméletéből ismert Green-függvénnyel.

$$(\hat{H} - E) \hat{G}(E) = \hat{I} \quad (4.3)$$

$$\int dx' \langle x | (\hat{H} - E) | x' \rangle \langle x' | \hat{G}(E) | y \rangle = \langle x | \hat{I} | y \rangle = \delta(x - y) \quad (4.4)$$

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

$$(\hat{H}_x - E) G(x, y; E) = \delta(x - y) \quad (4.5)$$

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

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + Fx - E \right) G(x, y; E) = \delta(x - y) \quad (4.6)$$

4.0.1. Egzakt Green-függvény

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

$$G(x, y; E) = C_1 \text{Ai} \left(\sqrt[3]{\frac{2mF}{\hbar^2}} x - \sqrt[3]{\frac{2m}{\hbar^2 F^2}} E \right) + C_2 \text{Bi} \left(\sqrt[3]{\frac{2mF}{\hbar^2}} x - \sqrt[3]{\frac{2m}{\hbar^2 F^2}} E \right) \quad (4.7)$$

illetve az $x > y$ tartományban

$$G(x, y; E) = C_3 \text{Ai} \left(\sqrt[3]{\frac{2mF}{\hbar^2}} x - \sqrt[3]{\frac{2m}{\hbar^2 F^2}} E \right) + C_4 \text{Bi} \left(\sqrt[3]{\frac{2mF}{\hbar^2}} x - \sqrt[3]{\frac{2m}{\hbar^2 F^2}} E \right) \quad (4.8)$$

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

$$G(x, y; E)|_{x=0} = 0 \quad (4.9)$$

$$G(x, y; E)|_{x=L} = 0 \quad (4.10)$$

A 4.6. egyenlet $\int_{y-\epsilon}^{y+\epsilon} dx' \int_y^{x'} dx$ szerinti integrálja az $\epsilon \rightarrow 0^+$ határesetben:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} G(x, y; E)|_{x=y-\epsilon}^{x=y+\epsilon} = 0 \quad (4.11)$$

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

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{\partial}{\partial x} G(x, y; E) \Big|_{x=y-\epsilon}^{x=y+\epsilon} = -\frac{2m}{\hbar^2} \quad (4.12)$$

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 4.7. és a 4.8. egyenlet behelyettesítése meghatározza a C együtthatókra vonatkozó egyenleteket:

$$\frac{C_2}{C_1} = -\text{Ti}(-bE) \quad (4.13)$$

$$\frac{C_4}{C_3} = -\text{Ti}(aL - bE) \quad (4.14)$$

$$\frac{C_3}{C_1} = \frac{\text{Ti}(ay - bE) - \text{Ti}(-bE)}{\text{Ti}(ay - bE) - \text{Ti}(aL - bE)} \quad (4.15)$$

TODO: b lecserélése bE -re az előző részekben.

$$C_1 = -\frac{2m}{a\hbar^2} \frac{1}{\left(\left(\frac{C_3}{C_1} - 1\right) \text{Ai}'(ay - bE) + \left(\frac{C_4 C_3}{C_3 C_1} - \frac{C_2}{C_1}\right) \text{Bi}'(ay - bE)\right)} \quad (4.16)$$

$$C_1 = -\frac{a^2}{F} \frac{1}{\left(\left(\frac{C_3}{C_1} - 1\right) \text{Ai}'(ay - bE) + \left(\frac{C_4 C_3}{C_3 C_1} - \frac{C_2}{C_1}\right) \text{Bi}'(ay - bE)\right)} \quad (4.17)$$

A 4.13-4.16, 4.7. és a 4.8. 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,

$$C_1 = \frac{a^2}{F} \frac{\text{Ai}(ay - bE) - \text{Ti}(aL - bE) \text{Bi}(ay - bE)}{(\text{Ti}(-bE) - \text{Ti}(aL - bE)) (\text{Bi}(-bE) \text{Ai}'(-bE) - \text{Ai}(-bE) \text{Bi}'(-bE))}. \quad (4.18)$$

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,

$$\begin{aligned} & (\text{Ai}(ay - bE) \text{Bi}'(ay - bE) - \text{Bi}(ay - bE) \text{Ai}'(ay - bE))' \\ &= a \text{Ai}'(ay - bE) \text{Bi}'(ay - bE) + a \text{Ai}(ay - bE) \text{Bi}''(ay - bE) \\ &\quad - a \text{Bi}'(ay - bE) \text{Ai}'(ay - bE) - a \text{Bi}(ay - bE) \text{Ai}''(ay - bE) \\ &= a \text{Ai}(ay - bE) (ay - bE) \text{Bi}(ay - bE) - a \text{Bi}(ay - bE) (ay - bE) \text{Ai}(ay - bE) \\ &= 0. \end{aligned} \quad (4.19)$$

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

$$C_0 = \frac{a^2}{F} \frac{1}{(\text{Ti}(-bE) - \text{Ti}(aL - bE)) (\text{Bi}(-bE) \text{Ai}'(-bE) - \text{Ai}(-bE) \text{Bi}'(-bE))} \quad (4.20)$$

bevezetésével a Green függvény egyszerűbb alakra hozható,

$$G(x, y; E) = C_0 \times \begin{cases} (\text{Ai}(ay - bE) - \text{Ti}(aL - bE) \text{Bi}(ay - bE)) \times \\ \quad (\text{Ai}(ax - bE) - \text{Ti}(-bE) \text{Bi}(ax - bE)) & x \leq y \\ (\text{Ai}(ay - bE) - \text{Ti}(-bE) \text{Bi}(ay - bE)) \times \\ \quad (\text{Ai}(ax - bE) - \text{Ti}(aL - bE) \text{Bi}(ax - bE)) & x > y \end{cases} \quad (4.21)$$

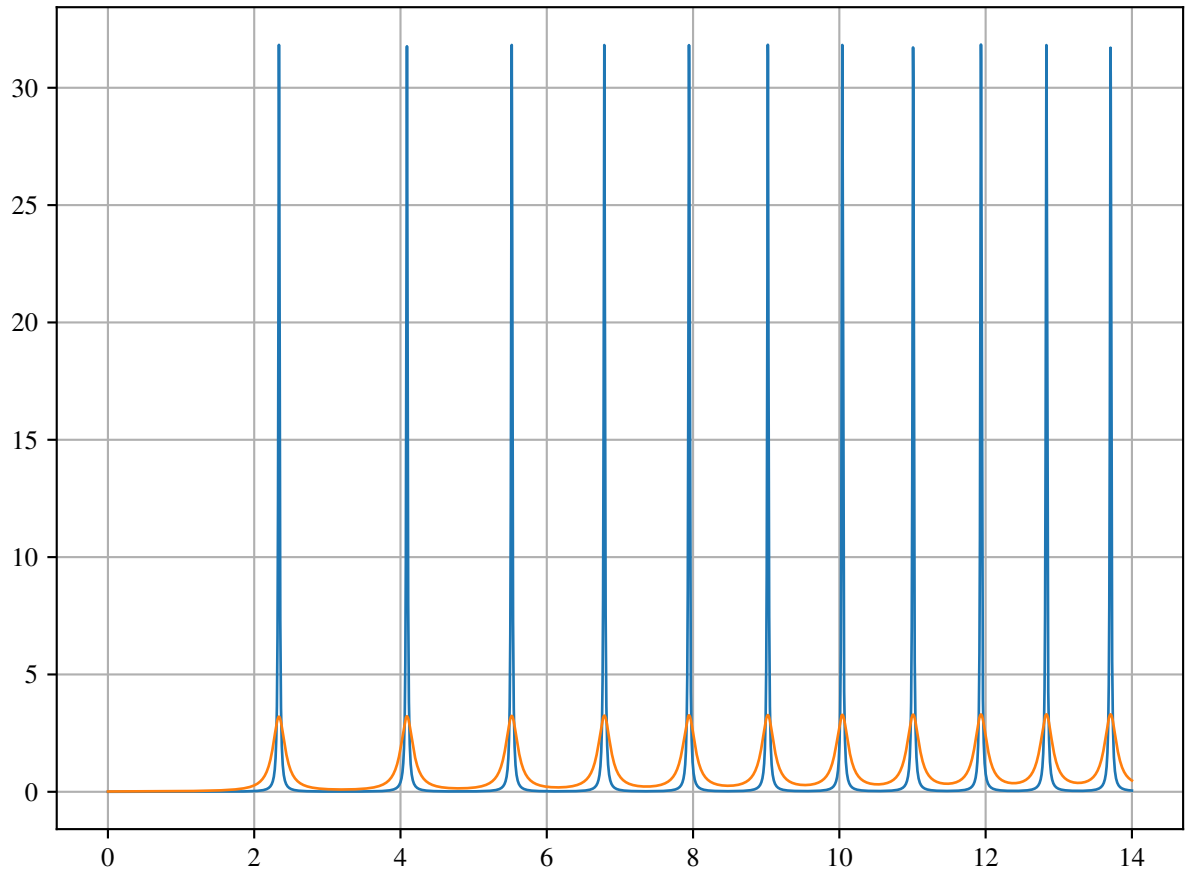
A rezolvens operátornak pólusai vannak a rendszer E_k sajátenergiáinál:

$$\hat{G}(E) = \sum_n \frac{|n\rangle \langle n|}{E_n - E} \quad (4.22)$$

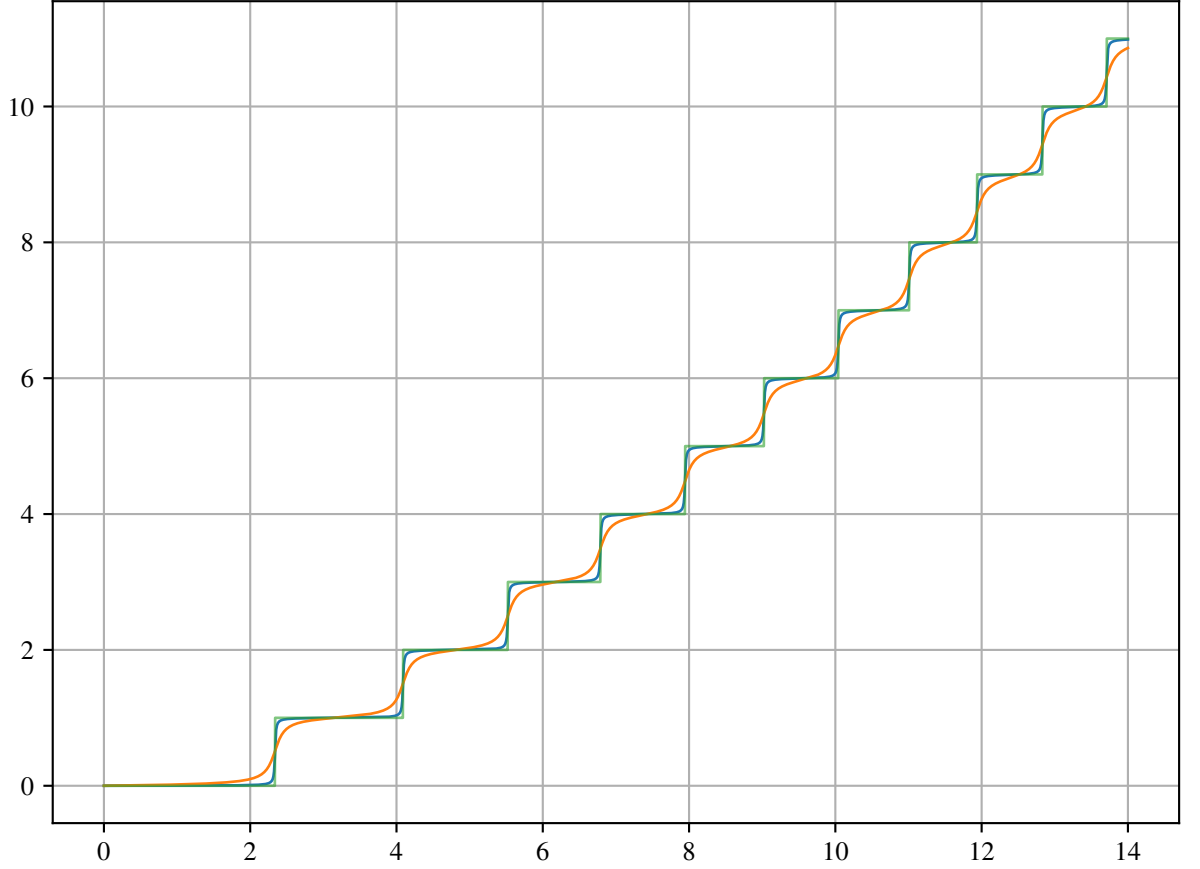
Így ha E kielégíti a 2.38. egyenletet, akkor a rezolvensnek és ezért a Green-függvénynek is pólusa kell hogy legyen. Ezt a C_1 szingularitásán lehet a legkönnyebben belátni. Ha C_1 szinguláris, az összes többi C együttható is, és így a Green-függvény is. A 2.38. egyenlet szerint a $\frac{C_3}{C_1}$ számlálójának és nevezőének átsodok tagjai egyenlők. Első tagjuk bármely E esetén egyenlő, így hányadosuk 1, valamint a 2.38. 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 4.22. egyenletből.

Egy érdekes matematikai eredmény, hogy a Green-függvényre vonatkozó differenciál egyenlet megoldásával elvégeztem a 4.22. 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 2.38. transzcendens egyenlet határozza meg. A Green-függvényre vonatkozó differenciálegyenlet nélkül az összeg elvégzése reménytelennek látszana.

$$\rho(E) = \frac{1}{\pi} \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \text{ImTr} \hat{G}(E + i\epsilon) \quad (4.23)$$



4.1. ábra. A 4.23. 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.



4.2. ábra. A 4.1. ábrán bemutatott függvények integrálja látható ezen az ábrán. Mind a két függvény ugrása közelítőleg 1, ami azt jelenti, hogy a 4.1. ábrán látható tüskék alatti terület jó közelítéssel 1. Az ϵ csökkentése a lépcsőfüggvényhez közelíti az integrált függvényt, ami egyezik az elvárásokkal.

4.0.2. Green-függvény perturbáció számítással

A perturbációszámításhoz a Hamilton operátort két részre bontom fel:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} \quad (4.24)$$

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.

$$\hat{G}^{-1}(E) + E = \hat{G}_0^{-1}(E) + E + \hat{V} \quad (4.25)$$

$$\hat{G}(E) = \hat{G}_0(E) - \hat{G}_0(E) \hat{V} \hat{G}(E) \quad (4.26)$$

Az alábbi módon definiálva $\hat{G}_n(E)$ operátort, a 4.26. egyenlethez hasonló rekurziós összefüggés áll fent:

$$\hat{G}_n(E) = \hat{G}_0(E) \sum_{k=0}^n \left(-\hat{V} \hat{G}_0(E) \right)^k \quad (4.27)$$

$$\hat{G}_{n+1}(E) = \hat{G}_0(E) - \hat{G}_0(E) \hat{V} \hat{G}_n(E) \quad (4.28)$$

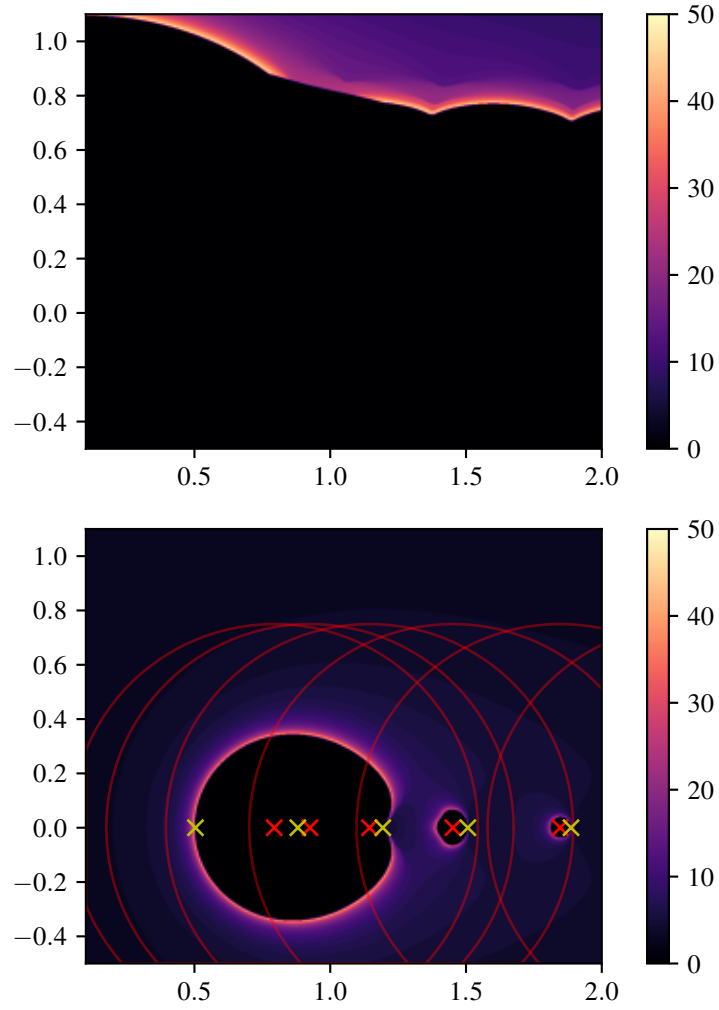
Ha $\left\| \hat{V} \hat{G}_0(E) \right\| < 1$ akkor a \hat{G}_n sorozat konvergál, és kielégíti a 4.26. egyenletet. Ezért konvergencia esetén:

$$\hat{G}(E) = \hat{G}_0(E) \sum_{n=0}^{\infty} \left(-\hat{V} \hat{G}_0(E) \right)^n \quad (4.29)$$

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 4.13-4.16, 4.7. és a 4.8. egyenletek alapján határozom meg.

$$G_0(x, y; E) = \begin{cases} -\frac{2m}{k\hbar^2} \frac{1}{\sin(kL)} \sin(k(y-L)) \sin(kx) & x \leq y \\ -\frac{2m}{k\hbar^2} \frac{1}{\sin(kL)} \sin(k(x-L)) \sin(ky) & x > y \end{cases} \quad (4.30)$$

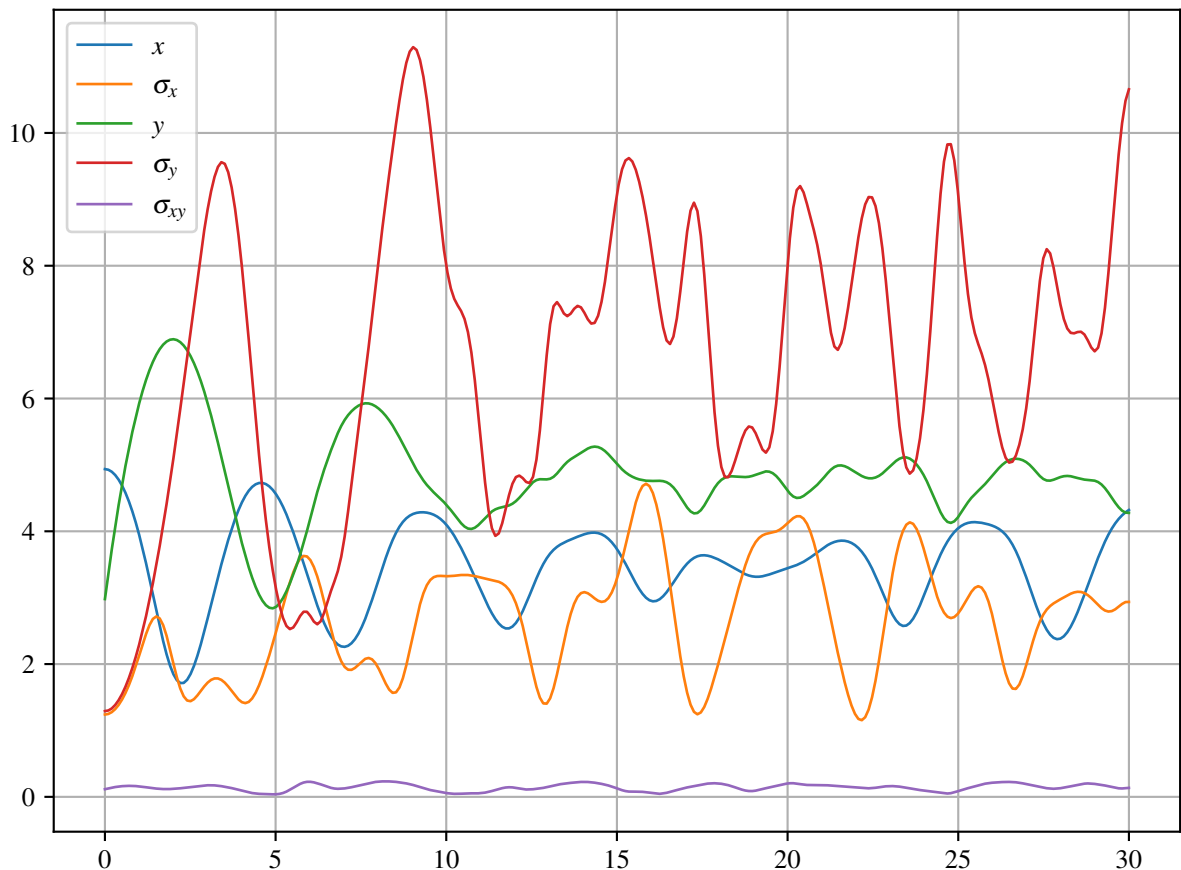
, ahol $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$.



4.3. 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.

5. Numerikus számítások

5.1. Momentumok időfejlődése



5.1. ábra. Várható értékek és szórások időfejlődése

5.2. Hullámfüggvény időfejlődése

5.2.1. 1D

5.2.2. 2D

Azokat a paramétereket 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.

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

Hivatkozások

- [1] Richard Beals and Roderick Wong. *Special Functions: A Graduate Text*. Cambridge Studies in Advanced Mathematics. Cambridge University Press, 2010
- [2] J R Albright. *Integrals of products of airy functions*. Journal of Physics A: Mathematical and General, 10(4):485–490, 1977
- [3] *NIST Digital Library of Mathematical Functions*. <http://dlmf.nist.gov/>, Release 1.1.1 of 2021-03-15. F. W. J. Olver, A. B. Olde Daalhuis, D. W. Lozier, B. I. Schneider, R. F. Boisvert, C. W. Clark, B. R. Miller, B. V. Saunders, H. S. Cohl, and M. A. McClain, eds.