

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

<b>1. Bevezetés</b>	<b>1</b>
<b>2. A dobozba zárt részecske homogén térben</b>	<b>1</b>
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. Véges $F$ eset . . . . .	5
2.2.4. Falak nélküli eset . . . . .	7
<b>3. Szemiklasszikus közelítés</b>	<b>9</b>
3.1. Szemiklasszikus energiaszintek . . . . .	9
3.2. Összehasonlítás az egzakt eredménnyel . . . . .	10
3.3. Airy függvények aszimptotikája . . . . .	11
<b>4. Homogén tér Green-függvénye</b>	<b>13</b>
4.1. Egzakt Green-függvény . . . . .	13
4.2. Állapotsűrűség . . . . .	15
4.3. Green-függvény perturbáció számítással . . . . .	17
<b>A. Szabad részecske gyorsuló koordinátarendszerben</b>	<b>19</b>
<b>B. Numerikus számítások</b>	<b>20</b>
B.1. Momentumok időfejlődése . . . . .	20
B.2. Hullámfüggvény időfejlődése . . . . .	20
B.2.1. 1D . . . . .	20
B.2.2. 2D . . . . .	20
<b>Hivatkozások</b>	<b>21</b>

## Ábrák jegyzéke

2.1. Airy-függvények . . . . .	4
2.2. Egzakt energiaszintek . . . . .	6
2.3. sajátállapotok . . . . .	7
3.1. Szemiklasszikus állapotszám . . . . .	10
4.1. Állapotsűrűség . . . . .	16
4.2. Állapotok száma . . . . .	17
4.3. Green-függvény perturbációs sorának konvergenciája . . . . .	19
B.1. Várható értékek és szórások időfejlődése . . . . .	20

## 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  $\psi_0$  esetén, viszont a (2.7) igen. Mivel  $\psi_{klm}$  szorzat alakú, nem kell a tripla integrált elvégezni, elég csak három egyszeres integrál szorzatát 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 egyszerű, 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 jelentős 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

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

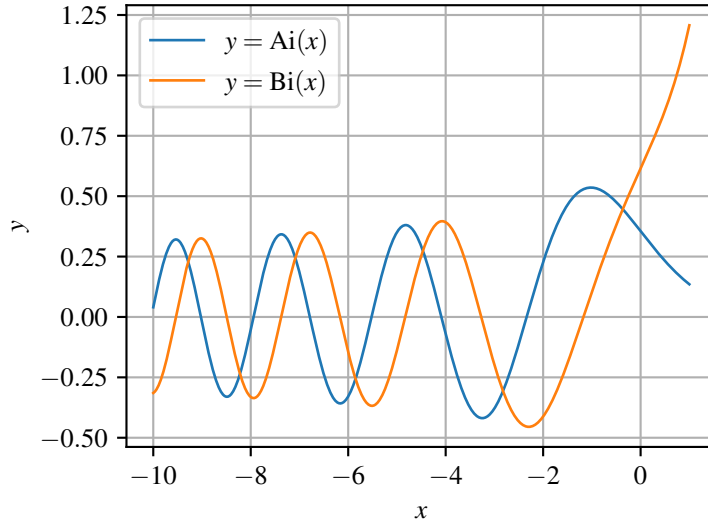
alakban keresve a megoldást a  $v(x)$ -re kapott egyenlet a Bessel-egyenlet, megint  $\nu^2 = \frac{1}{9}$ .

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

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

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

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



2.1. ábra.  $\text{Ai}(x)$  és  $\text{Bi}(x)$  grafikonja.

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

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

függvényt.

Az  $x \rightarrow \infty$  aszimptotikus alakok megkaphatóak a Bessel-függvények aszimptotikus alakjából:

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

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

$$\text{Ai}(x) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}x^{1/4}} e^{-\frac{2}{3}x^{3/2}} + \mathcal{O}(x^{-5/4}), \quad (2.25)$$

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

A  $\text{Ti}(x)$  definíciójába behelyettesítve (2.23) és (2.24) egyenleteket,

$$\text{Ti}(-x) = -\cot\left(\frac{2}{3}x^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right) + \mathcal{O}(x^{-5/4}). \quad (2.27)$$

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. Ezen egyenlet segítségével tetszőleges kötött állapot normája meghatározható, azonban az esetleges szórási állapotok normálásához a Dirac-delta függvénnyel kapcsolatos relációra lesz szükség [3] (3.108),

$$\frac{1}{\alpha^2} \int_{-\infty}^{\infty} \text{Ai}\left(\frac{x+a}{\alpha}\right) \text{Ai}\left(\frac{x+b}{\alpha}\right) dx = \delta(a-b) \quad (2.29)$$

A Green-függvény meghatározása közben felmerül a Wronski-determinánsa az Airy-függvényeknek, ez [4] (9.2.7) szerint

$$\mathcal{W}\{\text{Ai}(x), \text{Bi}(x)\} = \text{Ai}(x) \text{Bi}'(x) - \text{Bi}(x) \text{Ai}'(x) = \frac{1}{\pi}. \quad (2.30)$$

### 2.2.3. Véges $F$ eset

A (2.13) egyenlet (2.3) alakúra hozható a

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

$$y(x) = y(ax' - bE) \quad (2.32)$$

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

$$\frac{d^2 y(ax - bE)}{dx'^2} - (a^3 x - a^2 bE) y(ax - bE) = 0. \quad (2.33)$$

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

$$a = \sqrt[3]{\frac{2mF}{\hbar^2}}, \quad (2.34)$$

$$b = \sqrt[3]{\frac{2m}{\hbar^2 F^2}}. \quad (2.35)$$

Az egy dimenziós időfüggetlen Schrödinger-egyenlet megoldása

$$\psi(x) = c_1 \text{Ai}(ax - bE) + c_2 \text{Bi}(ax - bE), \quad (2.36)$$

melyet a határfeltételekhez kell illeszteni,

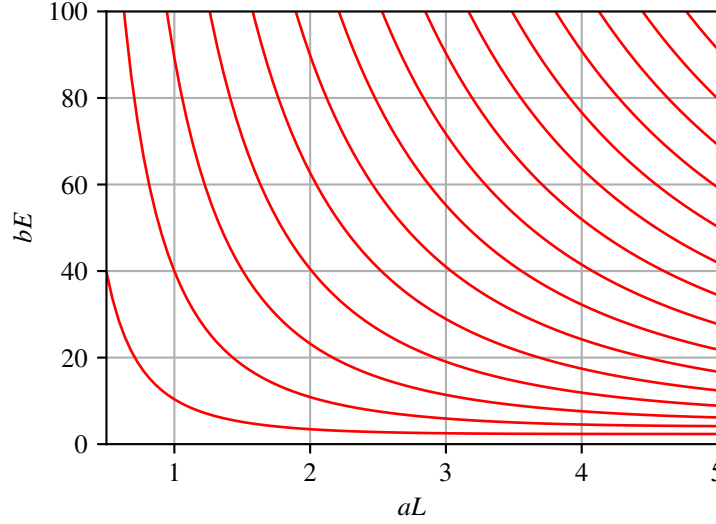
$$\psi(0) = \psi(L) = 0. \quad (2.37)$$

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,

$$0 = \psi(L) = \text{Bi}(-bE) \text{Ai}(aL - bE) - \text{Ai}(-bE) \text{Bi}(aL - bE). \quad (2.38)$$

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

$$\text{Ti}(aL - bE) - \text{Ti}(-bE) = 0. \quad (2.39)$$



2.2. 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. Eben a 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 2.2. ábra jól mutatja, később a Szemiklasszikus közelítés vizsgálata során részletesebben tárgyaljuk.

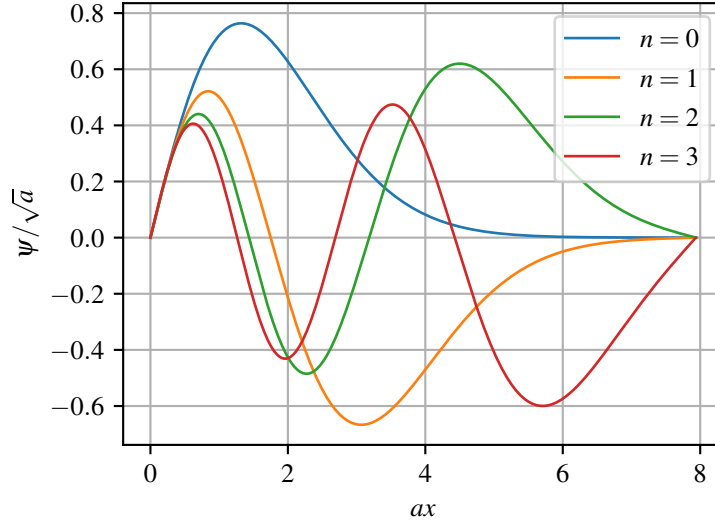
$$\psi_k(x) = \text{Bi}(-bE_k) \text{Ai}(ax - bE_k) - \text{Ai}(-bE_k) \text{Bi}(ax - bE_k) \quad (2.40)$$

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

mazható,

$$\begin{aligned}
N_k &= \int_0^L dx |\psi_k(x)|^2 \\
&= \left( x - \frac{bE_k}{a} \right) \psi_k(x)^2 - \frac{1}{a^3} \psi_k'(x)^2 \Big|_{x=0}^{x=L} \\
&= \frac{1}{a\pi^2} - \frac{1}{a} \left( \text{Bi}(-bE) \text{Ai}'(aL - bE) - \text{Ai}(-bE) \text{Bi}'(aL - bE) \right)^2.
\end{aligned} \tag{2.41}$$

A  $\psi_k$ -t tartalmazó tagok kiesnek a határokon, mert a határfeltételeknek megfelelően  $\psi_k = 0$   $x = 0$  és  $x = L$ -ben. A maradék tag  $x = 0$ -beli értéke  $\frac{1}{\pi^2}$  az Airy-függvények Wronski-determinánsa (2.30) miatt. A 2.3. ábra az első néhány sajátállapotot szemlélteti, 1-re normálva az  $N_k$  együttthatók segítségével.



2.3. ábra. Az első 4 energia sajátállapot  $aL = 8$  hosszúságú doboz esetén, 1-re normálva, azaz  $\frac{1}{\sqrt{N_n}}\psi_n(x)$  függvényeket ábrázolja. ( $n = 0, 1, 2, 3$ )

#### 2.2.4. Falak nélküli eset

Falak hiányában a Schrödinger-egyenlet továbbra is (2.3), azonban a határfeltételek különböznek. A fizikai kép az, hogy  $V(x) = Fx$  potenciál esetén az  $x \rightarrow \infty$ -ból nem jönnek részecskék, és nem is tartózkodnak ott. Ezek problémás állapotok lennének, végtelen energiával rendelkeznének. Tehát a szórásállapotokra vonatkozó feltétel, hogy

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \psi(x) = 0. \tag{2.42}$$

Mivel itt folytonos spektrumról van szó, az eddigi normálás helyett az állapotokat Dirac-deltára kell normálni. Ebben a feladatban az energia és energia sajátállapot között egy az egyhez megfeleltetés van, ellenben a jól ismert szabad részecske esetével. Ennek oka, hogy itt  $x \rightarrow \infty$ -ből nem jönnek részecskék. Ennek következtében az a sajátállapotokat  $|E\rangle$  egyértelműen jelöli. A (2.42) feltétel azt jelenti, hogy az Airy-függvények közül a  $\text{Bi}(ax - bE)$  nem szerepel a lineáris kombinációban, a megoldás tisztán az  $\text{Ai}(ax - bE)$  függvény lesz,

$$\langle x | E \rangle = N \text{Ai}(ax - bE). \quad (2.43)$$

A szórásállapotokra vonatkozó normálási feltétel

$$\langle E | E' \rangle = \delta(E - E'). \quad (2.44)$$

Ez alapján  $N$  meghatározható (2.29) azonosság felhasználásával,

$$\begin{aligned} \delta(E - E') &= N^2 \int_{-\infty}^{\infty} \text{Ai}(ax - bE) \text{Ai}(ax - bE') dx \\ &= N^2 \frac{1}{ab} \delta(E - E'). \end{aligned} \quad (2.45)$$

Ez alapján  $N = \sqrt{ab} = \sqrt[3]{\frac{2m}{\hbar^2 \sqrt{F}}}$ , és

$$\langle x | E \rangle = \psi_E(x) = \sqrt{ab} \text{Ai}(ax - bE). \quad (2.46)$$

A teljességi reláció is leellenőrizhető a (2.29) egyenlet alapján,

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dE |E\rangle \langle E| &= ab \int_{-\infty}^{\infty} dE \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \text{Ai}(ax - bE) \text{Ai}(ay - bE) |x\rangle \langle y| \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \delta(x - y) |x\rangle \langle y| \\ &= \hat{I}. \end{aligned} \quad (2.47)$$

A (2.45) egyenlet a  $\hat{H}$  operátor hermitikusságából következik, hiszen a hermitikus operátorok sajátállapotai ortogonálisak egymásra. A (2.47) teljességi reláció is arra utal, hogy az összes fizikai sajátállapotot megtaláltuk a csupán  $\text{Ai}(x)$  függvényt tartalmazó állapotok keresésével. Ha hiányozna valamely fizikai állapot, akkor nem

lehetne a megtalált sajátfüggvények lineáris kombinációjaként tetszőleges hullámfüggvényt előállítani, és így a teljességi reláció nem teljesülne.

Érdemes a fizikai intuícióval összevetni az Airy-függvény Fourier-transzformáltját. Az Airy-függvény Fourier transzformáltja

$$\int_{-\infty}^{\infty} \text{Ai}(x) e^{-ikx} dx = e^{ik^3/3}. \quad (2.48)$$

Ez azt jelenti, hogy az impulzus térben a hullámfüggvény

$$\psi_E(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi F\hbar}} \exp\left(i\left(\frac{1}{3}\left(\frac{p}{a\hbar}\right)^3 - \frac{pE}{F\hbar}\right)\right), \quad (2.49)$$

$$|\psi_E(p)|^2 = \frac{1}{2\pi F\hbar}. \quad (2.50)$$

Az impulzus hullámfüggvény amplitúdója nem függ az impulzustól! Ez nem meglepő, mert a klasszikus esetben az impulzus időfejlődése

$$p(t) = -Ft + p_0, \quad (2.51)$$

tehát minden részecske egy kis  $dp$  tartományban  $dp/F$  időt tölt, adott impulzushoz tartozó részecskesűrűség értéke független az impulzustól. Ennek a klasszikus fizika belüli megállapításnak a megfelelője, hogy  $|\psi_E(p)|^2$   $p$ -től független.

### 3. Szemiklasszikus közelítés

#### 3.1. Szemiklasszikus energiaszintek

A dobozba zárt részecske esetében két esetet kell vizsgálni a szemiklasszikus energiaszintek meghatározásához. Az első eset, amikor az energia  $E < FL$ , tehát a fordulópont a második fal elérése előtt van. Ebben az esetben a Maslov index  $\frac{3}{4}$  [5] (2.4.1 fejezet). Az  $x = 0$  fordulópontban a szemiklasszikus hullámfüggvény  $\frac{\pi}{4}$  fázist vesz fel, az  $x = E/F$  fordulópontban pedig  $\frac{\pi}{2}$  fázist vesz fel,

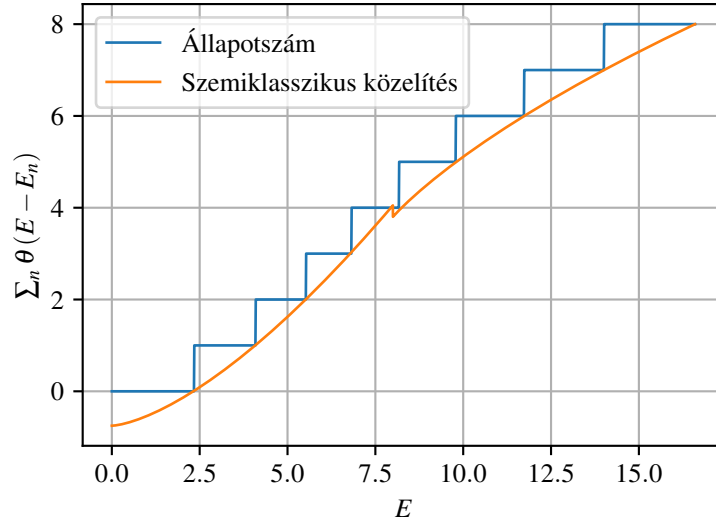
$$\left(n + \frac{3}{4}\right) h = \oint p dq = 2 \int_0^{E/F} \sqrt{2m(E - Fx)} dx = \frac{4\sqrt{2m}}{3F} E^{3/2}. \quad (3.1)$$

A második eset amikor  $E > FL$ , ekkor a fordulópontok 0-ban és  $L$ -ben vannak, és a Maslov index 1. Mind az  $x = 0$ , mind az  $x = L$  fordulópontban  $\frac{\pi}{2}$  fázis vesz fel a

szemiklasszikus hullámfüggvény,

$$(n+1)h = \oint p dq = 2 \int_0^L \sqrt{2m(E - Fx)} dx = \frac{4\sqrt{2m}}{3F} \left( E^{3/2} - (E - FL)^{3/2} \right). \quad (3.2)$$

Előfordulhat, hogy valamely  $n$ -re egyszerre van (3.1) és (3.2) egyszerre van megoldása, ahol  $E$  a megfelelő tartományba esik. Ez azt jelenti, hogy a szemiklasszikus közelítés hibáján belül nem lehet meghatározni, hogy a valódi energiszint  $FL$  felett, vagy alatt van. A 3.1. ábra szemlélteti a szemiklasszikus és egzakt állapotszámok viszonyát.



3.1. ábra. A szemiklasszikus és egzakt energiaszintek összevetése. A kék vonal az egzakt energiák által meghatározott állapotszám. A narancssárga vonal pedig a (3.1) és a (3.2) egyenletekből kifejezett  $n$  az energia függvényében,  $E$  és  $FL$  relációjának megfelelően.

### 3.2. Összehasonlítás az egzakt eredménnyel

A (2.39) egyenletet nagy  $bE$  illetve nagy  $bE - aL$  esetén a (2.27) közelítés alkalmazható,

$$\cot \left( \frac{2}{3} (bE - aL)^{3/2} - \frac{\pi}{4} \right) - \cot \left( \frac{2}{3} (bE)^{3/2} - \frac{\pi}{4} \right) = 0. \quad (3.3)$$

A  $\cot(x)$  függvény  $\pi$ -ben periodikus. Mivel a  $(0, \pi)$  intervallumban szigorúan monoton csökken, a (3.3) egyenletnek csak akkor van megoldása, ha a  $\cot(x)$  függvények

argumentumainak különbsége  $n\pi$ . Azaz

$$\frac{2}{3}(bE)^{3/2} - \frac{2}{3}(bE - aL)^{3/2} = n\pi. \quad (3.4)$$

Az  $a$  és  $b$  állandók behelyettesítésével ez az egyenlet ekvivalens a (3.2) egyenlettel. Az  $n$  értéke ugyan különbözik 1-gyel a két egyenletben, viszont mivel  $n$  egész, ugyan azokat az energiaszinteket határozzák meg. Ennek nem feltétlenül kéne így lennie, viszont ebben az esetben a szemiklasszikus illetve az Airy-függvények aszimptotikus alakjából kapott közelítések megegyeznek.

Amennyiben  $bE - aL$  negatív, a  $Ti(bE - aL)$  gyorsan lecseng, a (3.3) egyenlet bal oldalának első tagja elhanyagolható. Ennek a tagnak az elhanyagolásával a (3.1) egyenletet kapjuk vissza. Ez a képlet felel meg az  $L \rightarrow \infty$  határesetnek, ami a féltérben pattogó labdát írja le.

### 3.3. Airy függvények aszimptotikája

Klasszikus mechanikai megfontolások alapján meghatározhatóak az Airy-függvények aszimptotikus alakjai, a pontos fázistól eltekintve. Ez nem meglepő, mert a hullámfüggvény amplitúdója a megtalálási valószínűséggel van kapcsolatban. A hullámfüggvény lokális közelítése egy síkhullámmal, vagyis a fázis deriváltja az impulzussal van kapcsolatban. Így a klasszikus mechanika alapján lehet a hullámfüggvény amplitúdójára és fázisára következtetni.

A 2.2.4. fejezetben leírt rendszert vizsgáljuk,  $E = 0$  választásával, azaz a klasszikus esetben a fordulópont  $x = 0$ -ban van. Kvantum mechanika szerint a megtalálási valószínűség  $|\psi|$ -tel arányos, klasszikus mechanikában pedig a  $dx$  tartományon való áthaladás idejével,  $\frac{dx}{v}$ -vel arányos. Mivel a kérdéses állapot szórásállapot, nem normalizálható. Ezért a valószínűségeknek csak arányosságról beszélhetünk, egy részecske rendszerre vonatkozó valószínűségecsűrűségként nem értelmezhető. Egy lehetséges interpretáció a szórásállapotok esetében  $|\psi|^2$ -re, hogy nem kölcsönható részecske áramról van szó, és a részecskék sűrűsége  $|\psi|^2$ -tel arányos. A klasszikus esetben hasonló a helyzet, a  $\frac{dx}{v}$  a részecskesűrűséggel arányos. A két módon kapott részecskesűrűség egyenlőségének feltételezésével a hullámfüggvény amplitúdójának viselkedését kapjuk,

$$\frac{dx}{v} = \sqrt{-\frac{m}{2Fx}} dx \propto |\psi(x)|^2 dx, \quad (3.5)$$

a klasszikus mechanikából ismert energia megmaradás szerint. Átrendezve

$$\psi(x) \propto \frac{1}{\sqrt[4]{-x}}. \quad (3.6)$$

A hullámfüggvény fázisának meghatározása a de Broglie hullámhossz,  $p = \hbar k$ , és a klasszikus impulzus alapján történik. Abban az esetben, ha az amplitúdó ami közelítőleg megkapható az előző egyenletből, kicsit változik a de Broglie hullámhossz alatt,

$$\psi(x) \propto \exp\left(\pm i \int_{x_0}^x k(x') dx'\right), \quad (3.7)$$

Attól függően, hogy a részecske  $+x$  vagy  $-x$  irányban halad. A klasszikus energia megmaradás meghatározza az impulzust, ami alapján a de Broglie hullámszám

$$k = \frac{\sqrt{2mF}}{\hbar} \sqrt{-x}. \quad (3.8)$$

A  $k$  integrálja könnyen kiszámítható,

$$\int \frac{\sqrt{2mF}}{\hbar} \sqrt{-x} dx = \frac{2}{3} (-ax)^{3/2}. \quad (3.9)$$

A részecskeáram klasszikusan mindenhol 0, ebben a potenciálban minden részecske visszaesik. Ez a feltétel ekvivalens azzal a feltétellel, hogy  $\psi$  valós, azaz a (3.7) egyenletnek csak bizonyos kombinációi léphetnek fel. Ezt írja le az exponenciális függvény helyettesítése a szinusz függvénnyel, és a  $\phi_0$  fázistolás,

$$\psi(x) \propto \text{Ai}(ax) \approx \frac{1}{\sqrt[4]{-ax}} \sin\left(\frac{2}{3} (-ax)^{3/2} + \phi_0\right). \quad (3.10)$$

Ez az egyenlet kombinálja a fázisra és az amplitúdóra vonatkozó feltételeket, és egyezik a (2.23) és a (2.24) aszimptotikus alakokkal.

Pozitív  $x$  esetén a kinetikus energia negatív lenne, ami formálisan képzetes de Broglie hullámhossznak felel meg. Ezen formális összefüggés alapján az aszimptotikus alak polinomiális részét leszámítva az aszimptotikus alakok

$$\text{Ai}(x) \approx \exp\left(-\frac{2}{3}x^{3/2}\right), \quad (3.11)$$

$$\text{Bi}(x) \approx \exp\left(\frac{2}{3}x^{3/2}\right). \quad (3.12)$$

A polinomiális részt leszámítva ez egyezik a (2.25) és a (2.26) egyenletekkel.



## 4. Homogén tér Green-függvénye

A rezolvens operátor definíciója

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

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

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

### 4.1. Egzakt Green-függvény

A Green-függvény név indokolt: a teljességi reláció beszúrásával látható, hogy a kvantummechanikai Green-függvény megegyezik a differenciálegyenletek elméletéből ismert Green-függvénnyel.

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

azaz

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

A  $\langle x | (E - \hat{H}) | x' \rangle$  maggal vett konvolúció az  $E - \hat{H}$  operátor hatása, ezért

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

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

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

amely azt jelenti, hogy az  $x < y$  tartományban, illetve  $y < x$  tartományban a Green-függvény a homogén egyenlet megoldása. A homogén megoldások illesztését az eredeti differenciálegyenlet határfeltételei, valamint az  $x = y$  pontban a (4.6) egyenlet  $y$  körüli integrálásából kapott feltételek alapján lehet illeszteni. A doboz falára vonatkozó határfeltételek

$$G(x, y; E)|_{x=0} = 0, \quad (4.7)$$

$$G(x, y; E)|_{x=L} = 0. \quad (4.8)$$

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

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} G(x, y; E) \Big|_{x=y-\epsilon}^{x=y+\epsilon} = 0 \quad (4.9)$$

folytonossági feltételt adja. A jobb oldal integrálja  $(x-y)\theta(x-y) \Big|_{x=y-\epsilon}^{x=y+\epsilon}$ , 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  $\epsilon$  sugarú környezetében az  $\epsilon \rightarrow 0^+$  határesetben

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{\partial}{\partial x} G(x, y; E) \Big|_{x=y-\epsilon}^{x=y+\epsilon} = \frac{2m}{\hbar^2}. \quad (4.10)$$

Itt a jobb oldal integrálja  $\theta(x-y) \Big|_{x=y-\epsilon}^{x=y+\epsilon} = 1$  a határesetben. A bal oldalon az előzőhöz hasonló módon csak a derivált integrálja marad meg. Valós energiákra  $G(x, y; E) = G(y, x; E)^*$ . Ezt a szimmetria tulajdonságot fel lehet használni a Green-függvényre adott ansatz pontosítására az  $x < y$  és  $y < x$   $x$ - $y$  csere szimmetriájának megkövetelésével. Ez automatikusan kielégíti a (4.9) egyenletet. A tartomány peremén a homogén megoldás eltűnését megkövetelve a (4.7) és a (4.8) teljesül. Érdemes bevezetni a

$$u = ax - bE, \quad (4.11)$$

$$v = ay - bE \quad (4.12)$$

jelöléseket. A fent leírt három kritériumot teljesítő ansatz

$$G(x, y; E) = C_0(E) \times \begin{cases} (\text{Ai}(aL - bE) \text{Bi}(v) - \text{Bi}(aL - bE) \text{Ai}(v)) \times \\ (\text{Ai}(bE) \text{Bi}(u) - \text{Bi}(-bE) \text{Ai}(u)) & x \leq y \\ (\text{Ai}(aL - bE) \text{Bi}(u) - \text{Bi}(aL - bE) \text{Ai}(u)) \times \\ (\text{Ai}(bE) \text{Bi}(v) - \text{Bi}(-bE) \text{Ai}(v)) & x \geq y \end{cases}. \quad (4.13)$$

$$C_0 = \frac{a^2}{F} \frac{\pi}{\text{Ai}(-bE) \text{Bi}(aL - bE) - \text{Ai}(aL - bE) \text{Bi}(-bE)} \quad (4.14)$$

A rezolvens operátornak pólusai vannak a rendszer  $E_k$  sajátenergiáinál:

$$\hat{G}(E) = \sum_n \frac{|n\rangle \langle n|}{E_n - E} \quad (4.15)$$

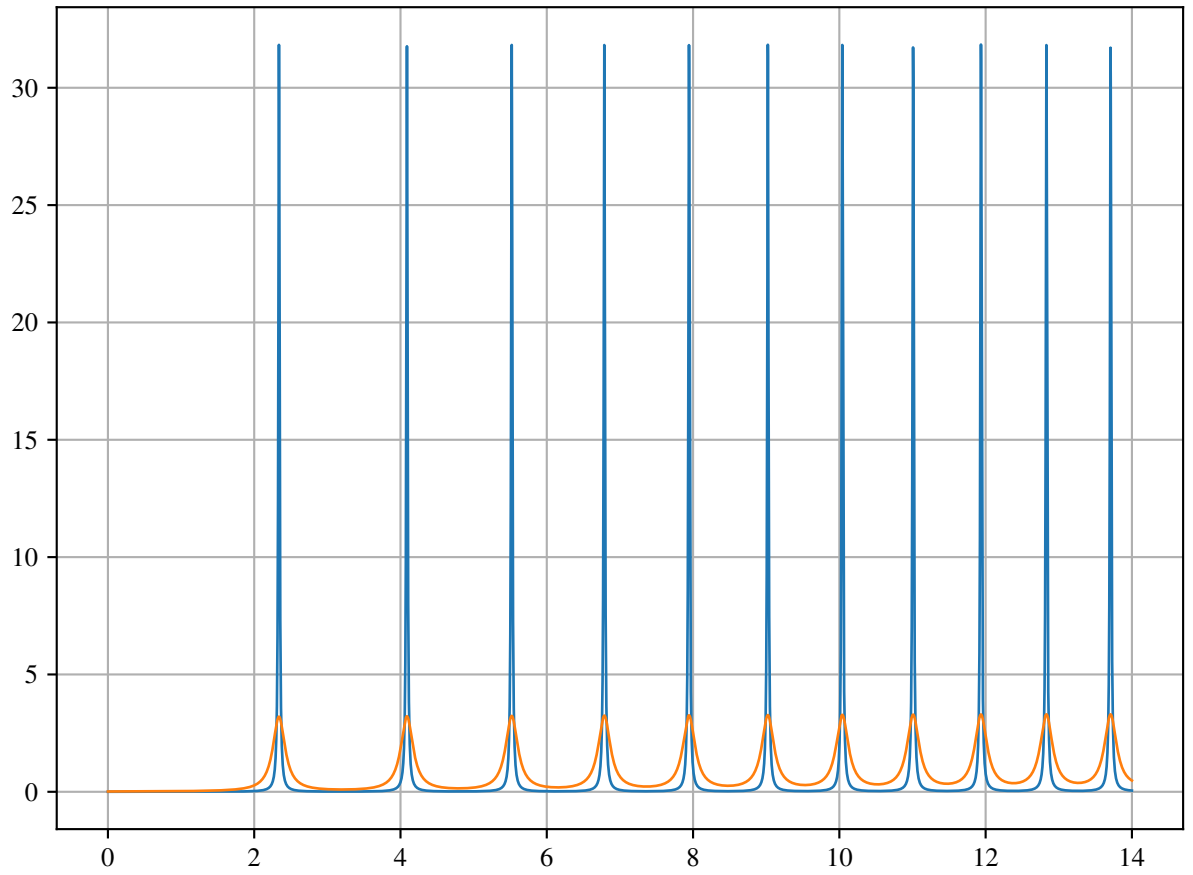
Így ha  $E$  kielégíti a 2.39. egyenletet, akkor a rezolvensnek és ezért a Green-függvénynek is pólusa kell hogy legyen. Ezt a  $C_1$  szingularitásán lehet a legkönnyebben belátni. Ha  $C_1$  szinguláris, az összes többi  $C$  együttható is, és így a Green-függvény is.

A 2.39. egyenlet szerint a  $\frac{C_3}{C_1}$  számlálójának és nevezőjének második tagjai egyenlők. Első tagjuk bármely  $E$  esetén egyenlő, így hányadosuk 1, valamint a 2.39. 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 4.15. egyenletből.

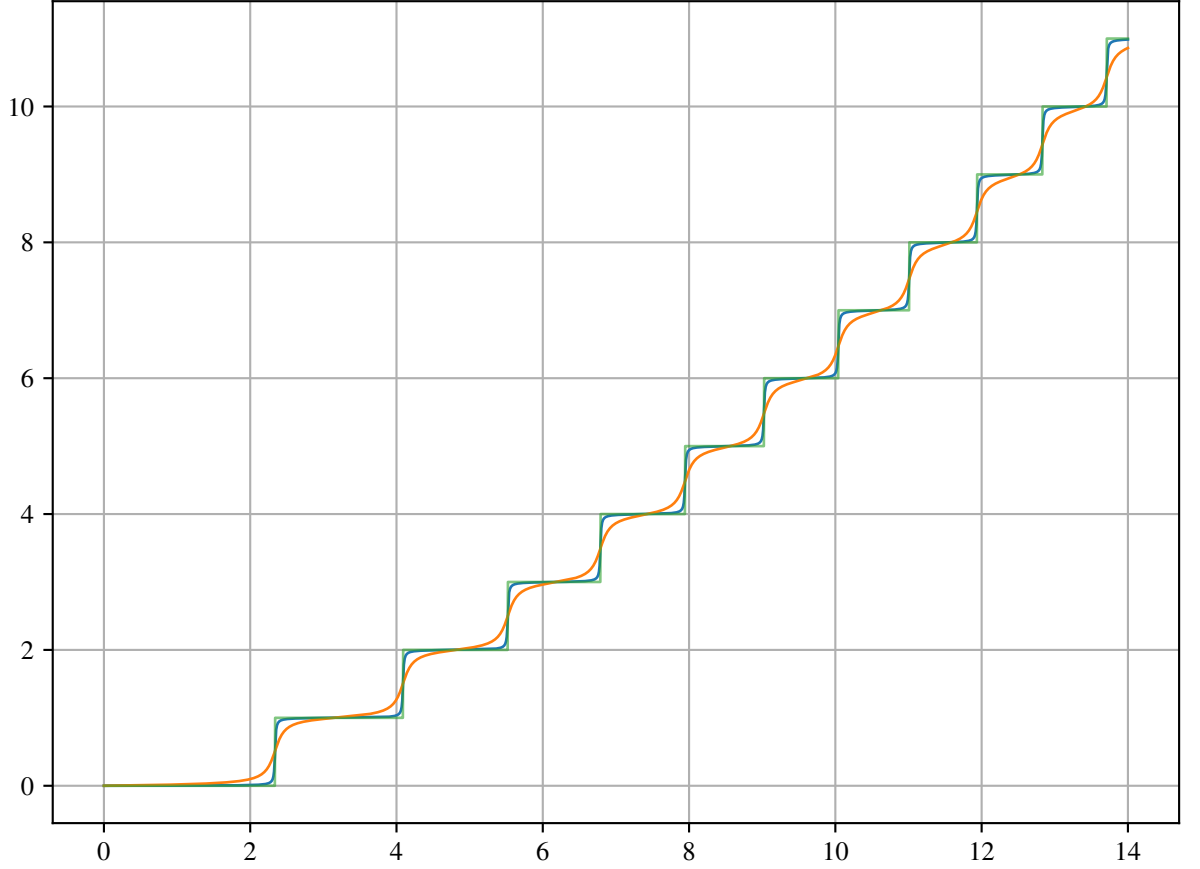
Egy érdekes matematikai eredmény, hogy a Green-függvényre vonatkozó differenciál egyenlet megoldásával elvégeztem a 4.15. egyenlet összegzését. Ez az összeg az Airy függvények szorzatának összege lenne, osztva  $E_k - E$ -vel és a megfelelő normalizációs faktoral, ami Airy függvények szorzatának 0 és  $L$  közötti integrálj, valamint  $E_k$ -t a 2.39. transzcendens egyenlet határozza meg. A Green-függvényre vonatkozó differenciálegyenlet nélkül az összeg elvégzése reménytelennek látszana.

## 4.2. Állapotsűrűség

$$\rho(E) = \frac{1}{\pi} \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \text{ImTr} \hat{G}(E + i\epsilon) \quad (4.16)$$



4.1. ábra. A 4.16. képlet alapján számolt állapotsűrűség. A kék függvényt  $\epsilon = 10^{-3}/b$ , a narancssárga görbét pedig  $\epsilon = 10^{-2}/b$  helyettesítéssel kaptuk. Látható, hogy  $\epsilon$  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  $\epsilon$  csökkentése a lépcsőfüggvényhez közelíti az integrált függvényt, ami egyezik az elvárásokkal.

### 4.3. Green-függvény perturbáció számítással

A perturbációszámításhoz a Hamilton operátort két részre bontom fel:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} \quad (4.17)$$

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.

$$\hat{G}^{-1}(E) + E = \hat{G}_0^{-1}(E) + E + \hat{V} \quad (4.18)$$

$$\hat{G}(E) = \hat{G}_0(E) - \hat{G}_0(E) \hat{V} \hat{G}(E) \quad (4.19)$$

Az alábbi módon definiálva  $\hat{G}_n(E)$  operátort, a 4.19. egyenlethez hasonló rekurziós összefüggés áll fent:

$$\hat{G}_n(E) = \hat{G}_0(E) \sum_{k=0}^n \left( -\hat{V} \hat{G}_0(E) \right)^k \quad (4.20)$$

$$\hat{G}_{n+1}(E) = \hat{G}_0(E) - \hat{G}_0(E) \hat{V} \hat{G}_n(E) \quad (4.21)$$

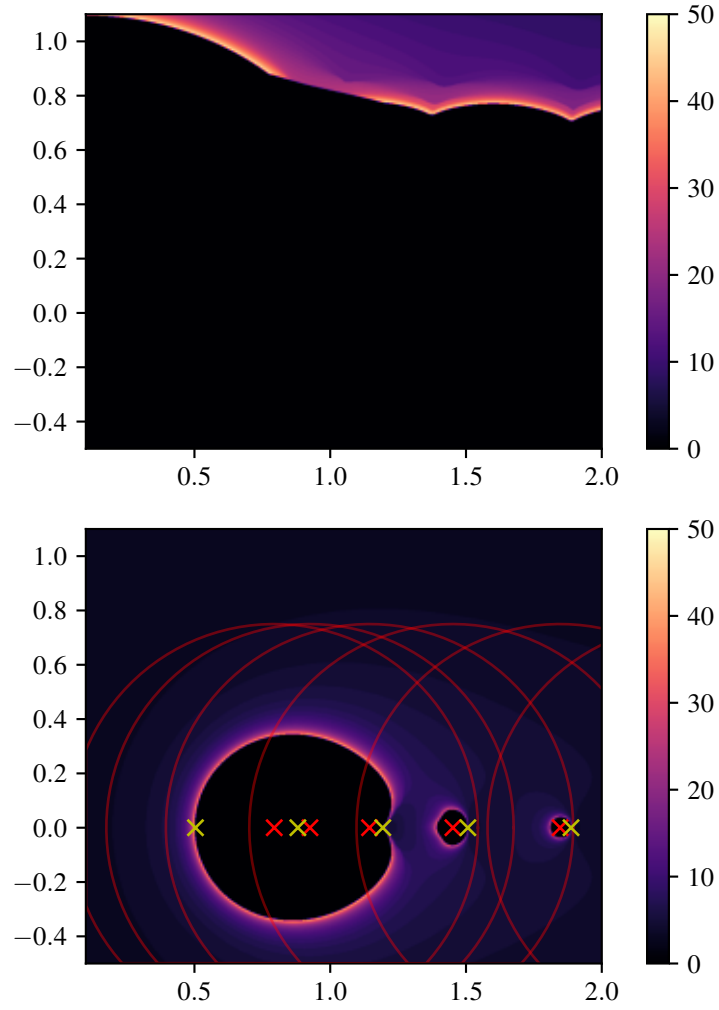
Ha  $\left\| \hat{V} \hat{G}_0(E) \right\| < 1$  akkor a  $\hat{G}_n$  sorozat konvergál, és kielégíti a 4.19. egyenletet. Ezért konvergencia esetén:

$$\hat{G}(E) = \hat{G}_0(E) \sum_{n=0}^{\infty} \left( -\hat{V} \hat{G}_0(E) \right)^n \quad (4.22)$$

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 ??-??, ?? és a ?? egyenletek alapján határozom meg.

$$G_0(x, y; E) = \begin{cases} -\frac{2m}{k\hbar^2} \frac{1}{\sin(kL)} \sin(k(y-L)) \sin(kx) & x \leq y \\ -\frac{2m}{k\hbar^2} \frac{1}{\sin(kL)} \sin(k(x-L)) \sin(ky) & x > y \end{cases} \quad (4.23)$$

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



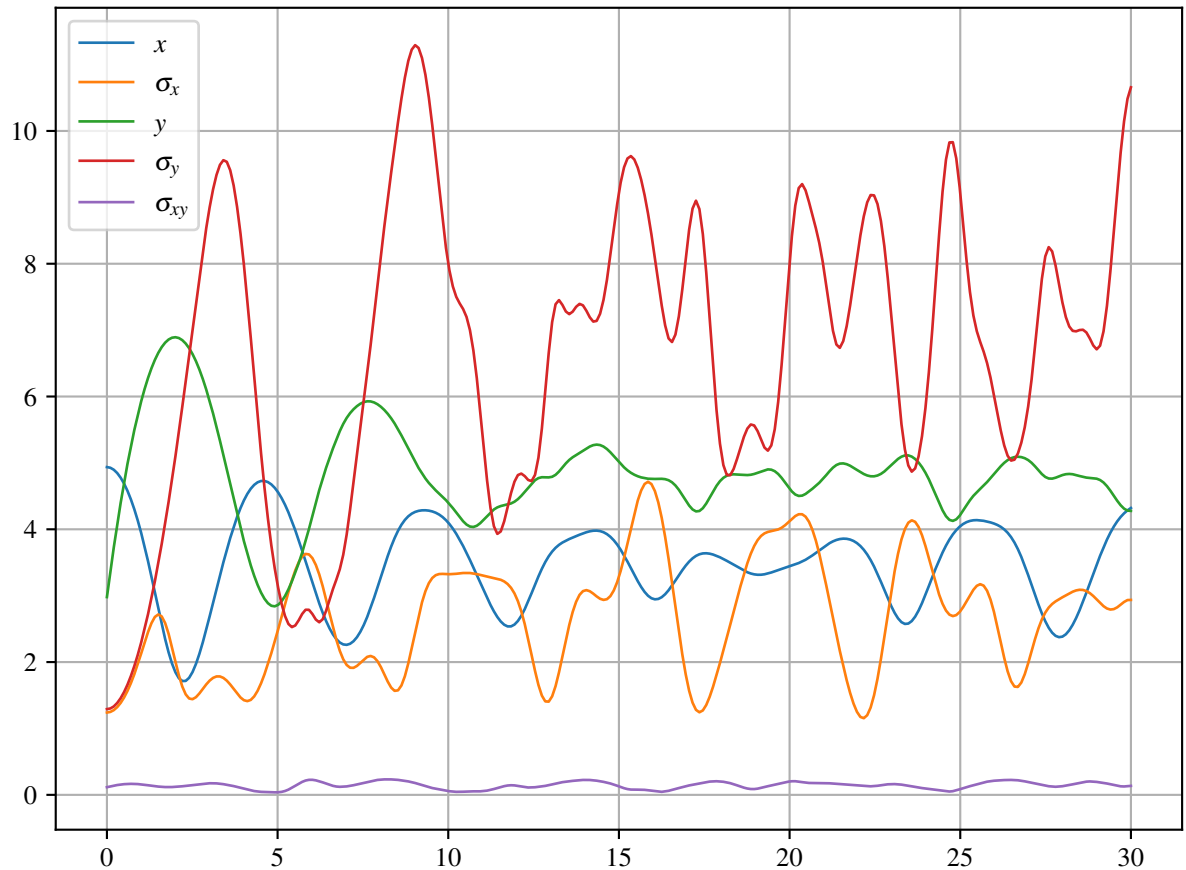
4.3. ábra. Ez az ábra a két perturbációs sor konvergenciáját hasonlítja össze a komplex energia síkon. A felső ábra a  $V = Fx$  perturbáló potenciálnak, míg az alsó a  $V = Fx - FL/2$  perturbáció szerinti sornak felel meg. A fekete tartományok divergenciát jelölnek, míg a többi szín a sorfejtés tagjainak csökkenési sebességét jellemzik, 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.

## A. Szabad részecske gyorsuló koordinátarendszerben

Pozitív  $x$  irányban

## B. Numerikus számítások

### B.1. Momentumok időfejlődése



B.1. ábra. Várható értékek és szórások időfejlődése

### B.2. Hullámfüggvény időfejlődése

#### B.2.1. 1D

#### B.2.2. 2D



## 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] Olivier Vallée and Manuel Soares. *Airy Functions and Applications to Physics*. Imperial College Press, London, second edition, 2010. ISBN 978-1-84816-548-9; 1-84816-548-X
- [4] *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.
- [5] Matthias Brack and Rajat Bhaduri. *Semiclassical Physics*. Addison-Wesley Publishing Company, Inc., 1997