

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. Véges F eset	5
2.2.4. Falak nélküli eset	7
3. Szemiklasszikus közelítés	9
3.1. Szemiklasszikus energiaszintek	9
3.1.1. Összehasonlítás az egzakt eredménnyel	9
3.2. Airy függvények aszimptotikája	9
4. Homogén tér Green-függvénye	9
4.1. Egzakt Green-függvény	10
4.2. Állapotsűrűség	12
4.3. Green-függvény perturbáció számítással	13
A. Szabad részecske gyorsuló koordinátarendszerben	15
B. Numerikus számítások	16
B.1. Momentumok időfejlődése	16
B.2. Hullámfüggvény időfejlődése	16
B.2.1. 1D	16
B.2.2. 2D	16
Hivatkozások	17

Ábrák jegyzéke

2.1. Airy-függvények	4
2.2. Egzakt energiaszintek	6
2.3. sajátállapotok	7
4.1. Állapotsűrűség	12
4.2. Állapotok száma	13
4.3. Green-függvény perturbációs sorának konvergenciája	15
B.1. Várható értékek és szórások időfejlődése	16

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, 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 $F \neq 0$ esetén 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

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

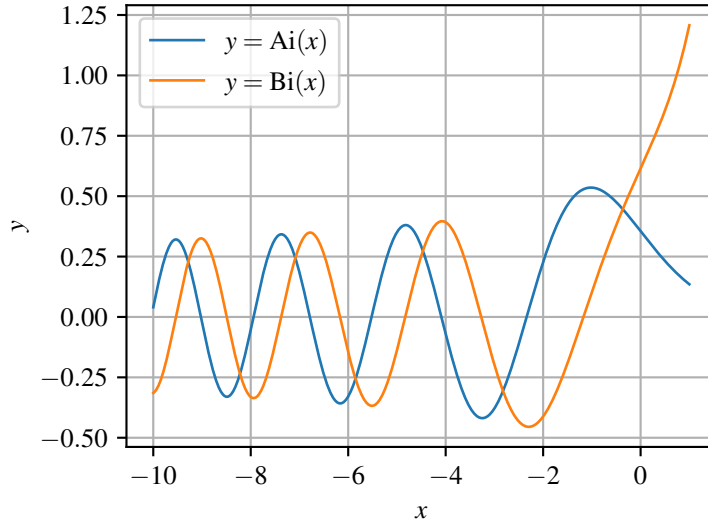
alakban keresve a megoldást a $v(x)$ -re kapott egyenlet a Bessel-egyenlet, megint $\nu^2 = \frac{1}{9}$.

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

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.

$x \rightarrow \infty$ 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. 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. Végess 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,

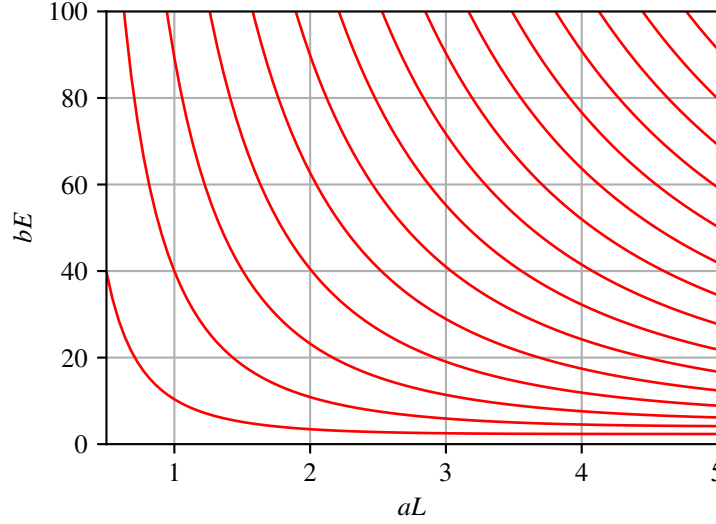
$$\psi(0) = \psi(L) = 0. \quad (2.37)$$

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.

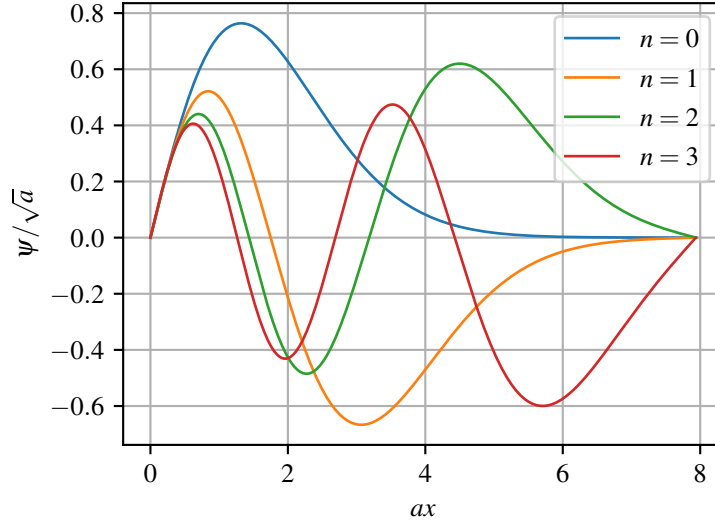
$$\psi_k(x) = \text{Bi}(-bE_k) \text{Ai}(ax - bE_k) - \text{Ai}(-bE_k) \text{Bi}(ax - bE_k) \quad (2.40)$$

sajátállapotokhoz tartozó normálás analitikusan meghatározható. Mivel ψ_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 ψ_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,

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

3. Szemiklasszikus közelítés

3.1. Szemiklasszikus energiaszintek

3.1.1. Összehasonlítás az egzakt eredménnyel

$x \rightarrow \infty$ aszimptotikus alak:

$$\text{Ai}(-x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}x^{1/4}} \cos\left(\frac{2}{3}x^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right) + \mathcal{O}(x^{-5/4}) \quad (3.1)$$

$$\text{Bi}(-x) = -\frac{1}{\sqrt{\pi}x^{1/4}} \sin\left(\frac{2}{3}x^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right) + \mathcal{O}(x^{-5/4}) \quad (3.2)$$

$$\text{Ti}(-x) = -\cot\left(\frac{2}{3}x^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right) + \mathcal{O}(x^{-5/4}) \quad (3.3)$$

Ezzel a közelítéssel a 2.39. egyenlet alakja:

$$\cot\left(\frac{2}{3}(bE - aL)^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right) = \cot\left(\frac{2}{3}(bE)^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right) \quad (3.4)$$

, azaz

$$\frac{2}{3}(bE)^{3/2} - \frac{2}{3}(bE - aL)^{3/2} = n\pi \quad (3.5)$$

. Az a és b behelyettesítésével az egyenlet

$$\frac{2\sqrt{2m}}{3F\hbar} \left(E^{3/2} - (E - FL)^{3/2} \right) = n\pi \quad (3.6)$$

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.

3.2. Airy függvények aszimptotikája

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

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

folytonossági feltételt adja. 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

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

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. 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

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

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

A rezolvens operátornak pólusai vannak a rendszer E_k sajátenergiáinál:

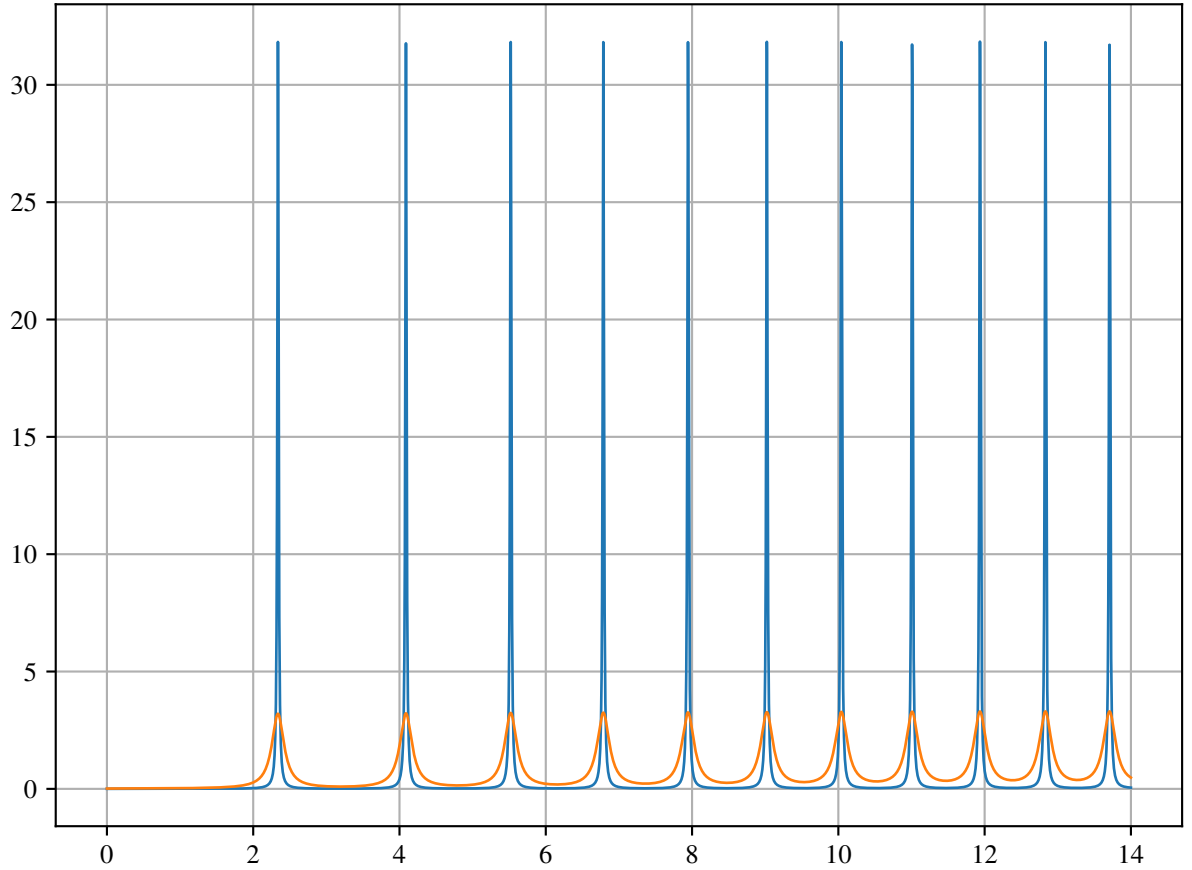
$$\hat{G}(E) = \sum_n \frac{|n\rangle \langle n|}{E_n - E} \quad (4.15)$$

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 3. tagjai egyenlőek. 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.

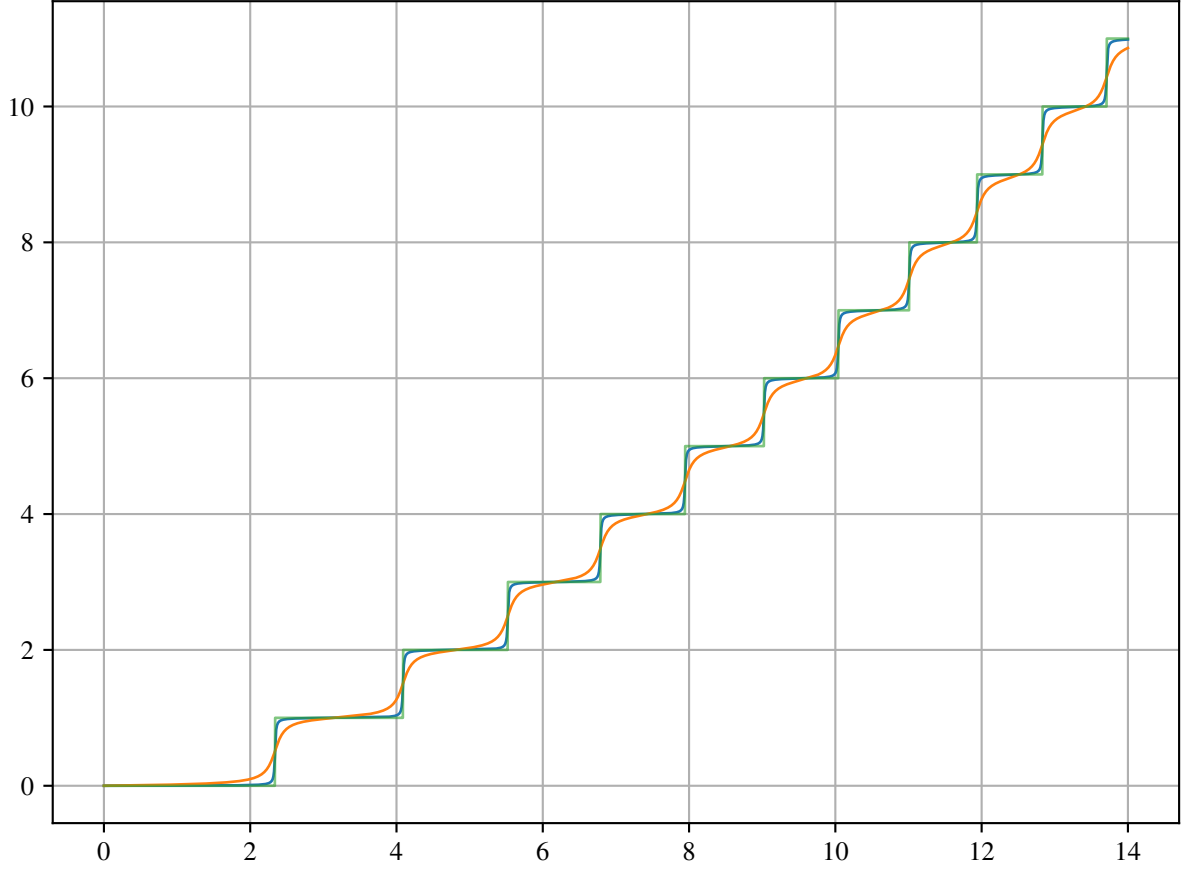
Egy érdekes matematikai eredmény, hogy a Green-függvényre vonatkozó differenciál egyenlet megoldásával elvégeztem a 4.15. egyenlet összegzését. Ez az összeg az Airy függvények szorzatának összege lenne, osztva $E_k - E$ -vel és a megfelelő normalizációs faktoral, ami Airy függvények szorzatának 0 és 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 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.

4.3. 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:

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

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

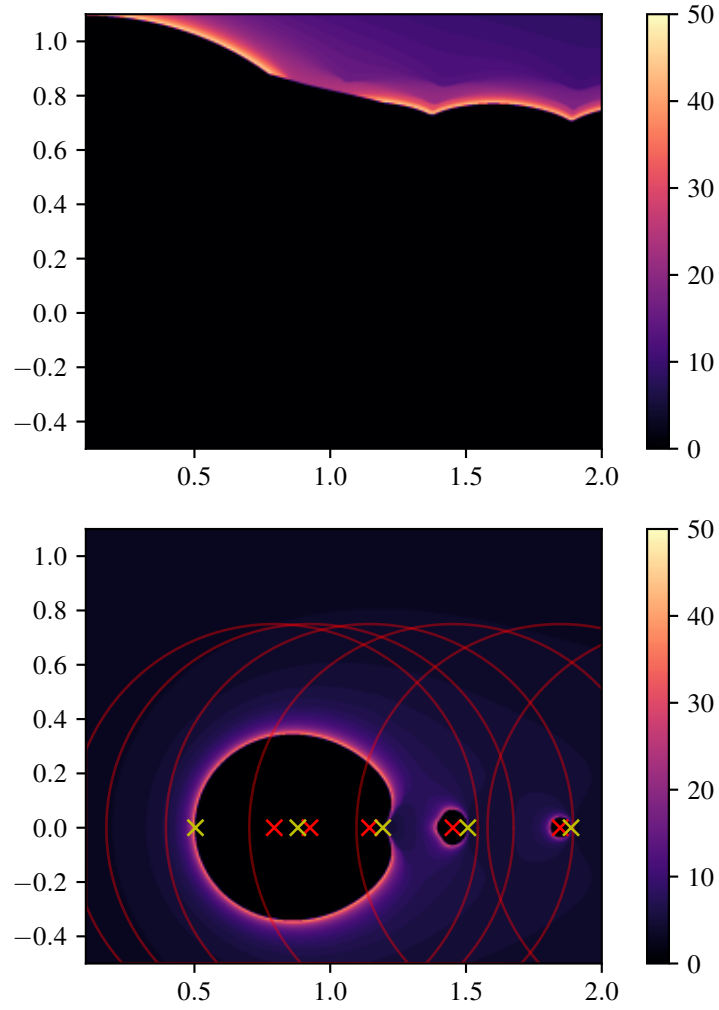
Ha $\left\| \hat{V} \hat{G}_0(E) \right\| < 1$ akkor a \hat{G}_n sorozat konvergál, és kielégíti a 4.19. egyenletet. Ezért konvergencia esetén:

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

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



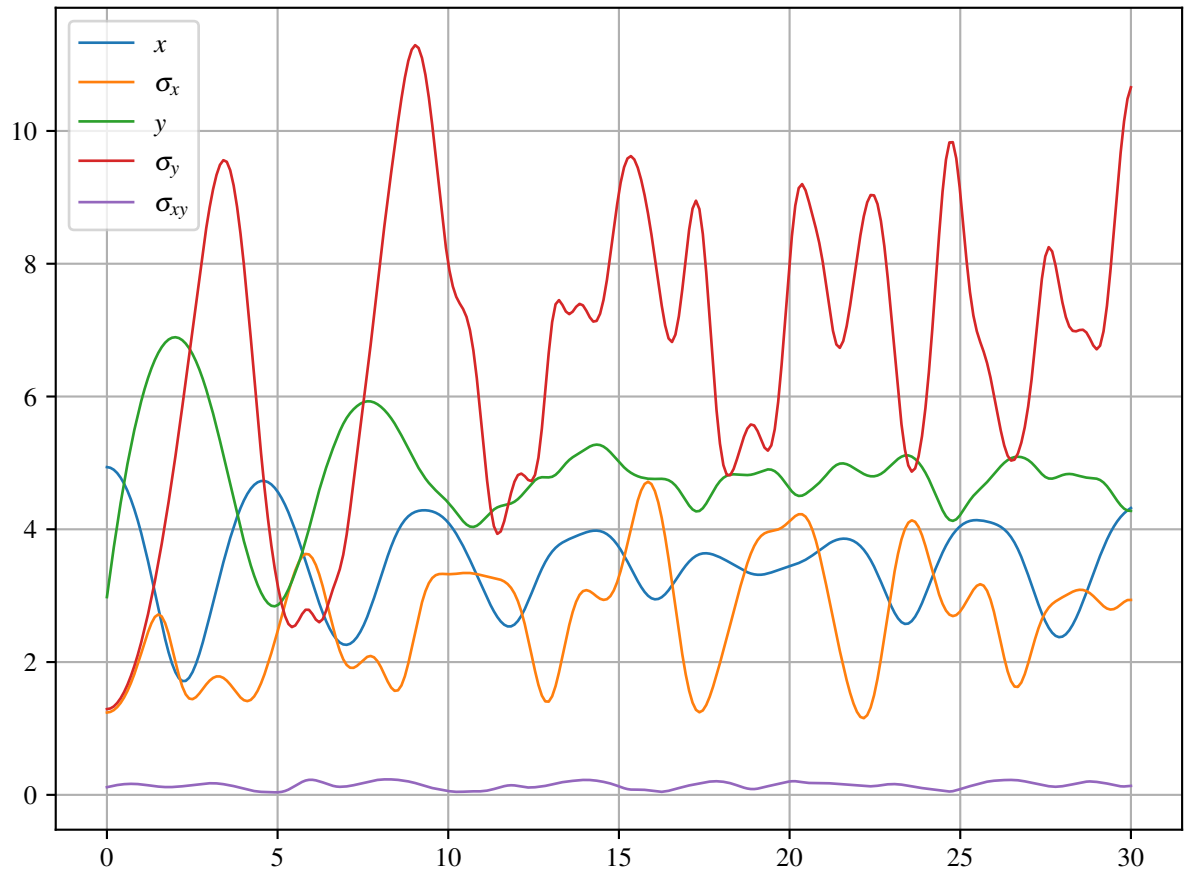
4.3. ábra. Ez az ábra a két perturbációs sor konvergenciáját hasonlítja össze a komplex energia síkon. A felső ábra a $V = Fx$ perturbáló potenciálnak, míg az alsó a $V = Fx - FL/2$ perturbáció szerinti sornak felel meg. A fekete tartományok divergenciát jelölnek, míg a többi szín a sorfejtés tagjainak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