

SZAKDOLGOZAT

Schrödinger macskája dobozban: falak közé zárt részecske kvantumállapotai homogén külső térben

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. Schrödinger	1
2. Kvantumos közelítése	2
3. Szemiklasszikus	3
4. Momentumok	5
5. Plafon érintés 1D	5
6. 3D doboz, ferde tér	6
7. Green függvény	6
7.1. Egzakt Green-függvény	7
7.2. Green-függvény perturbáció számítással	8
8. Videó gyártás leírása	9

Ábrák jegyzéke

1.1. Energiaszintek L függvényében	2
3.1. Szemiklasszikus közelítés	4
3.2. Szemiklasszikus közelítés	5

Táblázatok jegyzéke

1. Schrödinger

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

$$\phi|_0 = \phi|_L = 0 \quad (1.1)$$

A megoldandó időfüggetlen Schrödinger-egyenlet:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\phi}{dx^2} + Fx\phi = E\phi \quad (1.2)$$

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} - \frac{2mFx}{\hbar^2}\phi = -\frac{2mE}{\hbar^2}\phi \quad (1.3)$$

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} - \left(\frac{2mF}{\hbar^2}x - \frac{2mE}{\hbar^2} \right) \phi = 0 \quad (1.4)$$

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

$$\frac{d^2y}{dx'^2} - x'y = 0 \quad (1.5)$$

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

$$\frac{d^2y}{dx'^2} - (a^3x - a^2b)y = 0 \quad (1.6)$$

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

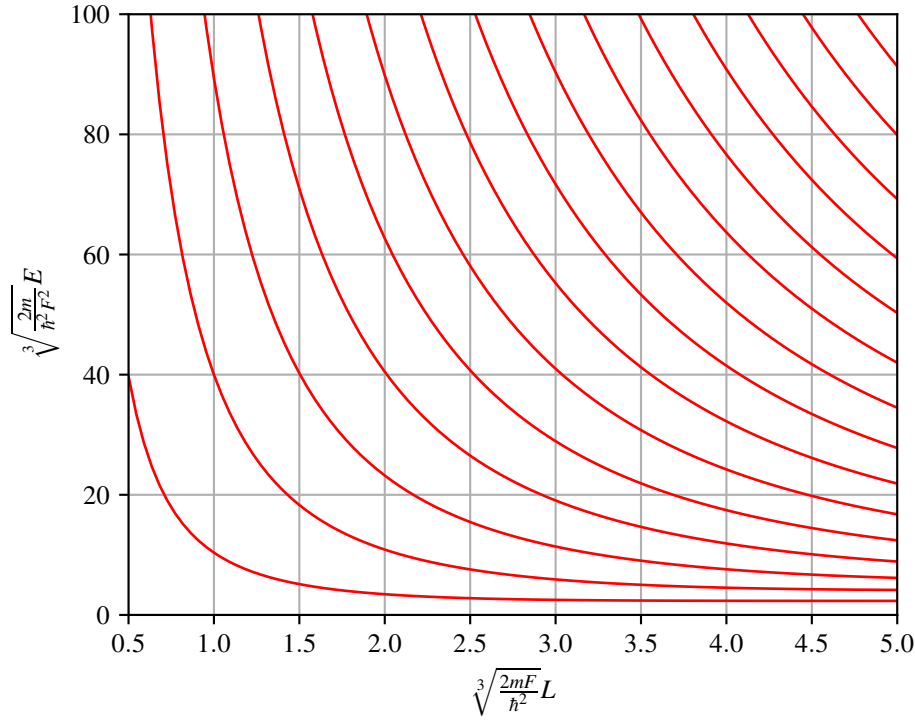
$$\phi(x) = y(x') = y\left(\sqrt[3]{\frac{2mF}{\hbar^2}}x - \sqrt[3]{\frac{2m}{\hbar^2 F^2}}E\right) \quad (1.7)$$

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

$$\text{Bi}(-b) \text{Ai}(aL - b) - \text{Ai}(-b) \text{Bi}(aL - b) = 0 \quad (1.8)$$

$$\text{Ti}(aL - b) - \text{Ti}(-b) = 0 \quad (1.9)$$

$$\text{Ti}\left(\sqrt[3]{\frac{2mF}{\hbar^2}}L - \sqrt[3]{\frac{2m}{\hbar^2 F^2}}E\right) - \text{Ti}\left(-\sqrt[3]{\frac{2m}{\hbar^2 F^2}}E\right) = 0 \quad (1.10)$$



1.1. ábra. Energiaszintek L függvényében

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 $\text{Ai}\left(-\sqrt[3]{\frac{2m}{\hbar^2 F^2}} E\right) = 0$ egyenlet határozza meg. Ezeket az aszimptotikus viselkedéseket az 1.1. ábra jól mutatja.

TODO: link 1D videóról

2. Kvantumos közelítése

$x \rightarrow \infty$ aszimptotikus alak:

$$\text{Ai}(-x) = \frac{1}{\sqrt{\pi} x^{1/4}} \cos\left(\frac{2}{3} x^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right) + \mathcal{O}(x^{-5/4}) \quad (2.1)$$

$$\text{Bi}(-x) = -\frac{1}{\sqrt{\pi} x^{1/4}} \sin\left(\frac{2}{3} x^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right) + \mathcal{O}(x^{-5/4}) \quad (2.2)$$

$$\text{Ti}(-x) = -\cot\left(\frac{2}{3}x^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right) + \mathcal{O}(x^{-5/4}) \quad (2.3)$$

Ezzel a közelítéssel az 1.9. egyenlet alakja:

$$\cot\left(\frac{2}{3}(b - aL)^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right) = \cot\left(\frac{2}{3}b^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right) \quad (2.4)$$

, azaz

$$\frac{2}{3}b^{3/2} - \frac{2}{3}(b - aL)^{3/2} = n\pi \quad (2.5)$$

. Az a és b behelyettesítésével az egyenlet

$$\frac{2\sqrt{2m}}{3F\hbar} \left(E^{3/2} - (E - FL)^{3/2}\right) = n\pi \quad (2.6)$$

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. Szemiklasszikus

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

$E/F < L$ esete:

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

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

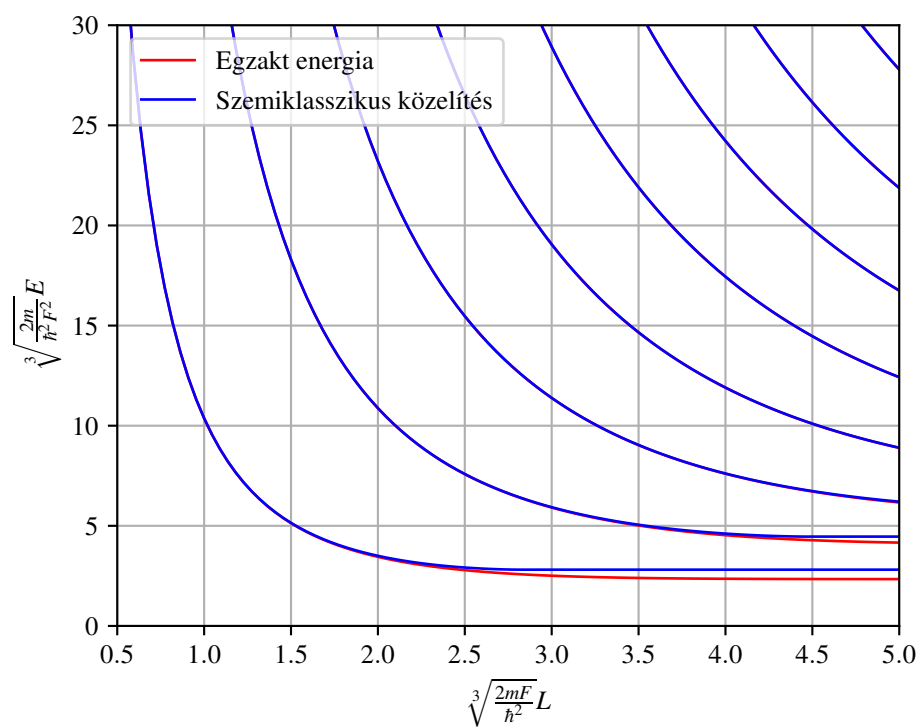
$E/F > L$ esete:

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

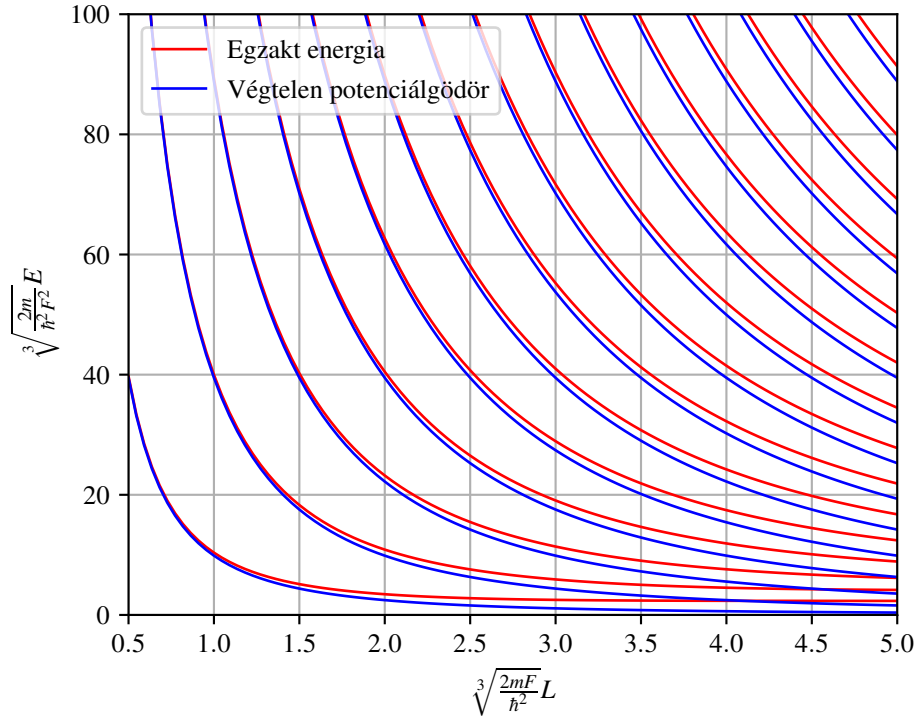
$E \gg FL$ esetén a különbség az $E^{3/2}$ függvény deriváltjának segítségével helyettesíthető:

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

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



3.1. ábra. Szemiklasszikus közelítés



3.2. ábra. Szemiklasszikus közelítés

4. Momentumok

5. Plafon érintés 1D

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

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

, azaz

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

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

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

6. 3D doboz, ferde tér

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.

$$\psi_{klm}(x, y, z) = \phi_k(x') \phi_l(y') \phi_m(z') \quad (6.1)$$

Ahol $x' = \sqrt[3]{\frac{2m\mathbf{F}_x}{\hbar^2}} x - \sqrt[3]{\frac{2m}{\hbar^2 \mathbf{F}_x^2}} E_k$, E_k pedig az 1 dimenziós probléma, $\text{Ti} \left(\sqrt[3]{\frac{2m\mathbf{F}_x}{\hbar^2}} L - \sqrt[3]{\frac{2m}{\hbar^2 \mathbf{F}_x^2}} E \right) - \text{Ti} \left(-\sqrt[3]{\frac{2m}{\hbar^2 \mathbf{F}_x^2}} E \right) = 0$, 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.

$$E = E_k + E_l + E_m \quad (6.2)$$

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

$$\phi_n = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \quad (6.3)$$

valamint

$$E_n = \frac{\hbar^2 n^2}{2mL^2} \quad (6.4)$$

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

TODO: ábra 2D -quantum chaos in billiards-

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

7. Green függvény

A resolvens operátor definíciója

$$\hat{G}(E) = \frac{1}{\hat{H} - E} \quad (7.1)$$

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

$$G(x, y; E) = \langle x | G(E) | y \rangle \quad (7.2)$$

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.

$$(\hat{H} - E) \hat{G}(E) = \hat{I} \quad (7.3)$$

$$\int dx' \langle x | (\hat{H} - E) | x' \rangle \langle x' | \hat{G}(E) | y \rangle = \langle x | \hat{I} | y \rangle = \delta(x - y) \quad (7.4)$$

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

$$(\hat{H}_x - E) G(x, y; E) = \delta(x - y) \quad (7.5)$$

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

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + Fx - E \right) G(x, y; E) = \delta(x - y) \quad (7.6)$$

7.1. Egzakt Green-függvény

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

$$G(x, y; E) = C_1 \text{Ai} \left(\sqrt[3]{\frac{2mF}{\hbar^2}} x - \sqrt[3]{\frac{2m}{\hbar^2 F^2}} E \right) + C_2 \text{Bi} \left(\sqrt[3]{\frac{2mF}{\hbar^2}} x - \sqrt[3]{\frac{2m}{\hbar^2 F^2}} E \right) \quad (7.7)$$

illetve az $x > y$ tartományban

$$G(x, y; E) = C_3 \text{Ai} \left(\sqrt[3]{\frac{2mF}{\hbar^2}} x - \sqrt[3]{\frac{2m}{\hbar^2 F^2}} E \right) + C_4 \text{Bi} \left(\sqrt[3]{\frac{2mF}{\hbar^2}} x - \sqrt[3]{\frac{2m}{\hbar^2 F^2}} E \right) \quad (7.8)$$

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

$$G(x, y; E)|_{x=0} = 0 \quad (7.9)$$

$$G(x, y; E)|_{x=L} = 0 \quad (7.10)$$

A 7.6. egyenlet $\int_{y-\epsilon}^{y+\epsilon} dx' \int_y^{x'} dx$ szerinti integrálja az $\epsilon \rightarrow 0^+$ határesetben:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} G(x, y; E) \Big|_{x=y-\epsilon}^{x=y+\epsilon} = 0 \quad (7.11)$$

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

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{\partial}{\partial x} G(x, y; E) \Big|_{x=y-\epsilon}^{x=y+\epsilon} = -\frac{2m}{\hbar^2} \quad (7.12)$$

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 7.7. és a 7.8. egyenlet behelyettesítése meghatározza a C együtthatókra vonatkozó egyenleteket:

$$\frac{C_2}{C_1} = -\text{Ti}(-bE) \quad (7.13)$$

$$\frac{C_4}{C_3} = -\text{Ti}(b(FL - E)) \quad (7.14)$$

$$\frac{C_3}{C_1} = \frac{\text{Ti}(ay - bE) + \text{Ti}(-bE)}{\text{Ti}(ay - bE) + \text{Ti}(b(FL - E))} \quad (7.15)$$

TODO: b lecserélése bE -re az előző részekben.

$$C_1 = -\frac{2m}{a\hbar^2} \frac{1}{\left(\left(\frac{C_3}{C_1} - 1 \right) \text{Ai}'(ay - bE) + \left(\frac{C_4}{C_3} \frac{C_3}{C_1} - \frac{C_2}{C_1} \right) \text{Bi}'(ay - bE) \right)} \quad (7.16)$$

$$C_1 = -\frac{a^2}{F} \frac{1}{\left(\left(\frac{C_3}{C_1} - 1 \right) \text{Ai}'(ay - bE) + \left(\frac{C_4}{C_3} \frac{C_3}{C_1} - \frac{C_2}{C_1} \right) \text{Bi}'(ay - bE) \right)} \quad (7.17)$$

A 7.13-7.16, 7.7. és a 7.8. egyenletek explicit, analitikus módon előállítják a $G(x, y; E)$ Green-függvényt.

7.2. Green-függvény perturbáció számítással

A perturbációs számításhoz a Hamilton operátort két részre bontom fel:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} \quad (7.18)$$

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 perturbációs számításra. Az egyenletet balról $\hat{G}_0^{-1}(E)$ -vel, jobbról $\hat{G}^{-1}(E)$ -vel szorzunk.

$$\hat{G}^{-1}(E) + E = \hat{G}_0^{-1}(E) + E + \hat{V} \quad (7.19)$$

$$\hat{G}(E) = \hat{G}_0(E) - \hat{G}_0(E) \hat{V} \hat{G}(E) \quad (7.20)$$

Az alábbi módon definiálva $\hat{G}_n(E)$ operátort, a 7.20. egyenlethez hasonló rekurziós összefüggés áll fent:

$$\hat{G}_n(E) = \hat{G}_0(E) \sum_{k=0}^n \left(-\hat{V} \hat{G}_0(E) \right)^k \quad (7.21)$$

$$\hat{G}_{n+1}(E) = \hat{G}_0(E) - \hat{G}_0(E) \hat{V} \hat{G}_n(E) \quad (7.22)$$

Ha $\left\| \hat{V} \hat{G}_0(E) \right\| < 1$ akkor a \hat{G}_n sorozat konvergál, és kielégíti a 7.20. egyenletet. Ezért konvergencia esetén:

$$\hat{G}(E) = \hat{G}_0(E) \sum_{n=0}^{\infty} \left(-\hat{V} \hat{G}_0(E) \right)^n \quad (7.23)$$

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 7.13-7.16, 7.7. és a 7.8. egyenletek alapján határozom meg.

$$G_0(x, y; E) = \begin{cases} -\frac{2m}{k\hbar^2} \frac{1}{\sin(kL)} \sin(k(y-L)) \sin(kx) & x \leq y \\ -\frac{2m}{k\hbar^2} \frac{1}{\sin(kL)} \sin(k(x-L)) \sin(ky) & x > y \end{cases} \quad (7.24)$$

, ahol $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$. TODO: $V=Fx \Rightarrow V = Fx - FL/2$ gyorsabb és gyakoribb konvergenciáért TODO: plot konvergencia tartomány

8. Videó gyártás leírása