1. Leírás

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 grafikusan 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 alapállapoti 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 grafikusan 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

-20-as képlet lépcsőfüggvény

-klasszikus út

-fx, fy $= 0$ külön tárgyalás

-program leírása

2. Schrödinger

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

$$\phi\big|_0 = \phi\big|_L = 0 \tag{1}$$

A megoldandó időfüggetlen Schrödinger-egyenlet:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\phi}{dx^2} + Fx\phi = E\phi \tag{2}$$

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} - \frac{2mFx}{\hbar^2}\phi = -\frac{2mE}{\hbar^2}\phi \tag{3}$$

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} - \left(\frac{2mF}{\hbar^2}x - \frac{2mE}{\hbar^2}\right)\phi = 0 \tag{4}$$

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

$$\frac{d^2y}{dx'^2} - x'y = 0 \tag{5}$$

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

$$\frac{d^2y}{dx^2} - \left(a^3x - a^2b\right)y = 0 \tag{6}$$

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

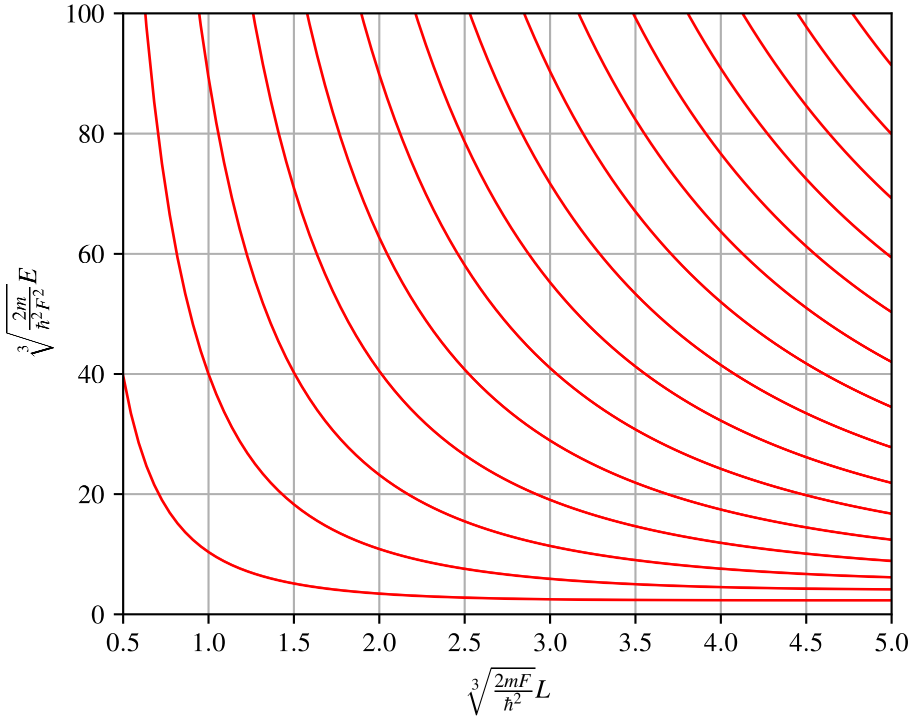
$$\phi(x) = y(x') = y\left(\sqrt[3]{\frac{2mF}{\hbar^2}}x - \sqrt[3]{\frac{2m}{\hbar^2F^2}}E\right) \tag{7}$$

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

$$\mathrm{Bi}\,(-b)\,\mathrm{Ai}\,(aL-b) - \mathrm{Ai}\,(-b)\,\mathrm{Bi}\,(aL-b) = 0 \tag{8}$$

$$\mathrm{Ti}\,(aL-b) - \mathrm{Ti}\,(-b) = 0 \tag{9}$$

$$\mathrm{Ti}\left(\sqrt[3]{\frac{2mF}{\hbar^2}}L - \sqrt[3]{\frac{2m}{\hbar^2F^2}}E\right) - \mathrm{Ti}\left(-\sqrt[3]{\frac{2m}{\hbar^2F^2}}E\right) = 0 \tag{10}$$



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 $\lim_{L\to\infty} \psi(x) = \alpha \mathrm{Ai}\left(ax - b\right)$, mert a $Bi(x)$ exponenciálisan növekszik nagy x-ek esetén. Ebben az eseten az energiaszinteket a $\mathrm{Ai}\left(-\sqrt[3]{\frac{2m}{\hbar^2 F^2}}E\right) = 0$ egyenlet határozza meg. Ezeket az aszimptotikus viselkedéseket az 1. ábra jól mutatja.

TODO: link 1D videóról

3. Kvantumos közelítése

$x \to \infty$ aszimptotikus alak:

$$\mathrm{Ai}\left(-x\right) = \frac{1}{\sqrt{\pi}x^{1/4}} \cos\left(\frac{2}{3}x^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right) + \mathcal{O}\left(x^{-5/4}\right) \tag{11}$$

$$\mathrm{Bi}\left(-x\right) = -\frac{1}{\sqrt{\pi}x^{1/4}} \sin\left(\frac{2}{3}x^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right) + \mathcal{O}\left(x^{-5/4}\right) \tag{12}$$

$$\mathrm{Ti}\left(-x\right) = -\cot\left(\frac{2}{3}x^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right) + \mathcal{O}\left(x^{-5/4}\right) \tag{13}$$

Ezzel a közelítéssel a 9. egyenlet alakja:

$$\cot\left(\frac{2}{3}(b-aL)^{3/2}-\frac{\pi}{4}\right)=\cot\left(\frac{2}{3}b^{3/2}-\frac{\pi}{4}\right) \tag{14}$$

, azaz

$$\frac{2}{3}b^{3/2}-\frac{2}{3}(b-aL)^{3/2}=n\pi \tag{15}$$

. Az a és b behelyettesítésével az egyenlet

$$\frac{2\sqrt{2m}}{3F\hbar}\left(E^{3/2}-(E-FL)^{3/2}\right)=n\pi \tag{16}$$

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

4. Szemiklasszikus

$$nh=\oint p\,dq= \tag{17}$$

$E/F<L$ esete:

$$2\int_0^{E/F}\sqrt{2m(E-Fx)}\,dx=-\frac{2}{3mF}\left(2m(E-Fx)\right)^{\frac{3}{2}}\Big|_0^{E/F}=\frac{4\sqrt{2m}E^{3/2}}{3F} \tag{18}$$

$$E_n=\left(\frac{3nhF}{4\sqrt{2m}}\right)^{2/3} \tag{19}$$

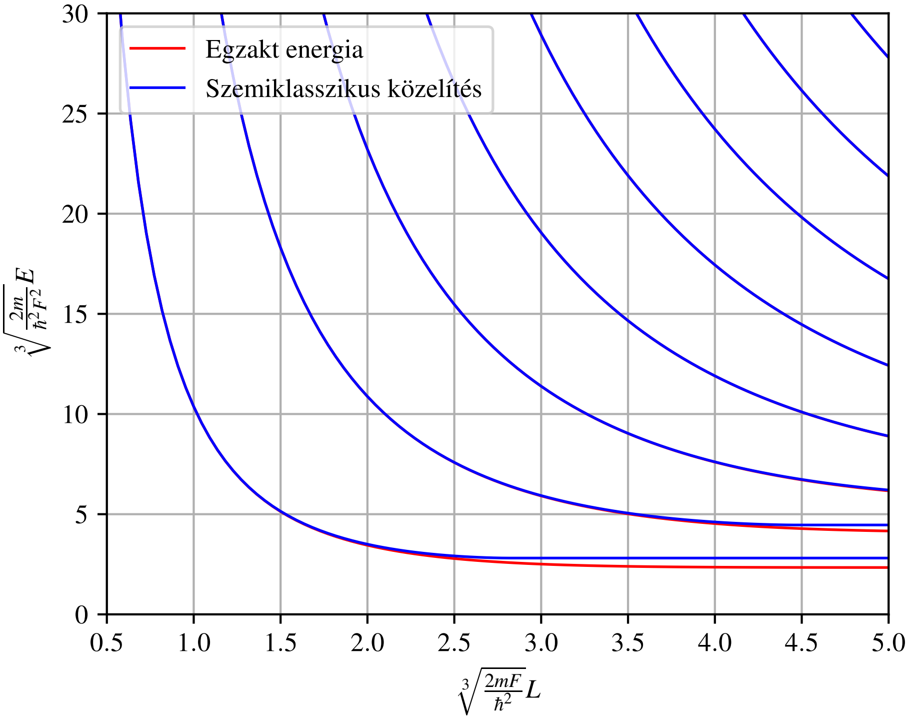
$E/F>L$ esete:

$$-\frac{2}{3mF}\left(2m(E-Fx)\right)^{\frac{3}{2}}\Big|_0^{L}=\frac{4\sqrt{2m}}{3F}\left(E^{3/2}-(E-FL)^{3/2}\right)=nh \tag{20}$$

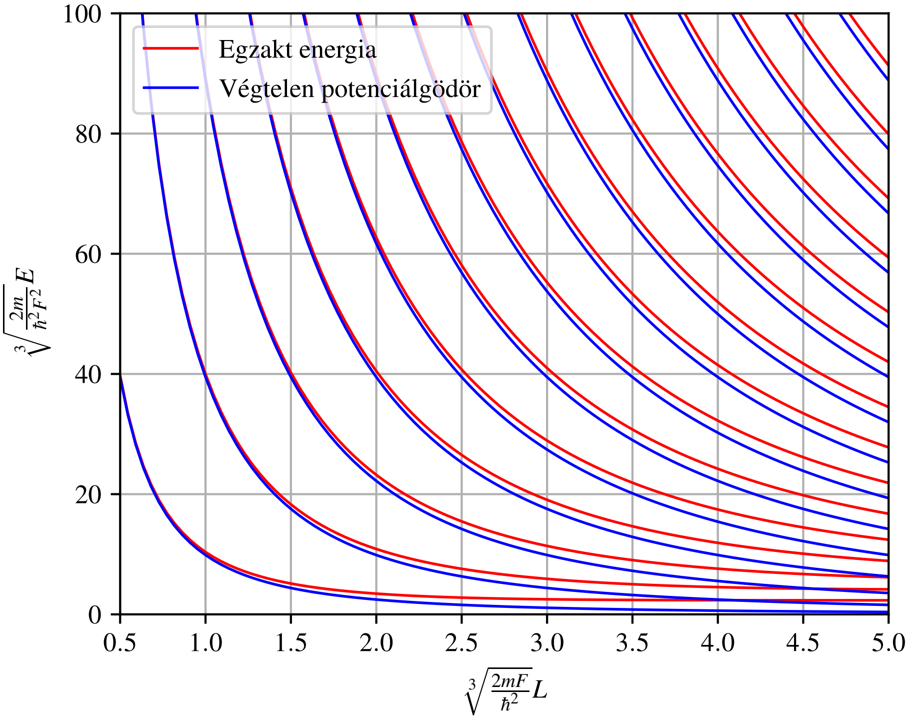
$E\gg FL$ esetén a különbség az $E^{3/2}$ függvény deriváltjának segítségével helyettesíthető:

$$nh\approx 2\sqrt{2m}E^{1/2}L \tag{21}$$

$$E_n\approx\frac{n^2h^2}{8mL^2} \tag{22}$$



2. ábra. Szemiklasszikus közelítés



3. ábra. Szemiklasszikus közelítés

5. Momentumok

6. Plafon érintés 1D

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

$$\mathrm{Ti}\left(\sqrt[3]{\frac{2mF}{\hbar^2}}L - \sqrt[3]{\frac{2m}{\hbar^2 F^2}}FL\right) - \mathrm{Ti}\left(-\sqrt[3]{\frac{2m}{\hbar^2 F^2}}FL\right) = 0 \tag{23}$$

, azaz

$$\mathrm{Ai}\left(-\sqrt[3]{\frac{2mF}{\hbar^2}}L\right) = 0 \tag{24}$$

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

$$-a_1 = \sqrt[3]{\frac{2mF}{\hbar^2}}L \approx 2.338 \tag{25}$$

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

$$\psi_{klm}(x,y,z) = \phi_k(x')\,\phi_l(y')\,\phi_m(z') \tag{26}$$

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

$$E = E_k + E_l + E_m \tag{27}$$

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

$$\phi_n = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{nx\pi}{L}\right) \tag{28}$$

valamint

$$E_n = \frac{\hbar^2 n^2}{2mL^2} \tag{29}$$

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

TODO: ábra 2D -quantum chaos in billiards-

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

8. Green függvény

A reolvens operátor definíciója

$$\hat{G}(E) = \frac{1}{\hat{H} - E} \tag{30}$$

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

$$G(x,y;E) = \langle x|\, G(E)\, |y\rangle \tag{31}$$

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-függény megegyezik a differenciálegyenletek elméletéből ismert Green-függvénnyel.

$$\left(\hat{H} - E\right)\hat{G}(E) = \hat{I} \tag{32}$$

$$\int \mathrm{d}x'\, \langle x|\left(\hat{H} - E\right)|x'\rangle\,\langle x'|\,\hat{G}(E)\,|y\rangle = \langle x|\,\hat{I}\,|y\rangle = \delta(x-y) \tag{33}$$

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

$$\left(\hat{H}_x - E\right)G(x,y;E) = \delta(x-y) \tag{34}$$

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

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+Fx-E\right)G\left(x,y;E\right)=\delta\left(x-y\right) \tag{35}$$

8.1. Egzakt Green-függvény

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

$$G\left(x,y;E\right)=C_1\mathrm{Ai}\left(\sqrt[3]{\frac{2mF}{\hbar^2}}x-\sqrt[3]{\frac{2m}{\hbar^2F^2}}E\right)+C_2\mathrm{Bi}\left(\sqrt[3]{\frac{2mF}{\hbar^2}}x-\sqrt[3]{\frac{2m}{\hbar^2F^2}}E\right) \tag{36}$$

illetve az $x>y$ tartományban

$$G\left(x,y;E\right)=C_3\mathrm{Ai}\left(\sqrt[3]{\frac{2mF}{\hbar^2}}x-\sqrt[3]{\frac{2m}{\hbar^2F^2}}E\right)+C_4\mathrm{Bi}\left(\sqrt[3]{\frac{2mF}{\hbar^2}}x-\sqrt[3]{\frac{2m}{\hbar^2F^2}}E\right) \tag{37}$$

, 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 35. egyenlet y körüli integrálásából kapot feltételeket kell felhasználni. A doboz falára vonatkozó határfeltételek:

$$G\left(x,y;E\right)\big|_{x=0}=0 \tag{38}$$

$$G\left(x,y;E\right)\big|_{x=L}=0 \tag{39}$$

A 35. egyenlet $\int_{y-\epsilon}^{y+\epsilon}\mathrm{d}x'\int_{y}^{x'}\mathrm{d}x$ szerinti integrálja az $\epsilon\to0^+$ határesetben:

$$\lim_{\epsilon\to0^+}G\left(x,y;E\right)\big|_{x=y-\epsilon}^{x=y+\epsilon}=0 \tag{40}$$

A jobb oldal integrálja $\left(x-y\right)\theta\left(x-y\right)\big|_{x=y-\epsilon}^{x=y+\epsilon}$, ami a határesetben 0. Az $\left(Fx-E\right)G\left(x,y;E\right)$ integrálja is 0 a határesetben, mert az erdeti függvény is folytonos, így az integrálja is. A 35. egyenlet x szerinti integrálja y körüli ϵ sugarú környezetében az $\epsilon\to0^+$ határesetben:

$$\lim_{\epsilon\to0^+}\frac{\partial}{\partial x}G\left(x,y;E\right)\bigg|_{x=y-\epsilon}^{x=y+\epsilon}=-\frac{2m}{\hbar^2} \tag{41}$$

Itt a jobb oldal integrálja $\theta\left(x-y\right)\big|_{x=y-\epsilon}^{x=y+\epsilon}=1$ a határesetben. A bal oldalon az előzőhöz hasonló módon csak a derivált integrálja marad meg. A 36. és a 37. egyenlet behelyettesítése meghatározza a C együtthatókra vonatkozó egyenleteket:

$$\frac{C_2}{C_1}=-\mathrm{Ti}\left(-bE\right) \tag{42}$$

$$\frac{C_4}{C_3}=-\mathrm{Ti}\left(b\left(FL-E\right)\right) \tag{43}$$

$$\frac{C_3}{C_1}=\frac{\mathrm{Ti}\left(ay-bE\right)+\mathrm{Ti}\left(-bE\right)}{\mathrm{Ti}\left(ay-bE\right)+\mathrm{Ti}\left(b\left(FL-E\right)\right)} \tag{44}$$

TODO: b lecserélése bE-re az előző részekben.

$$C_1 = -\frac{2m}{a\hbar^2}\frac{1}{\left(\left(\frac{C_3}{C_1}-1\right)\mathrm{Ai}'\left(ay-bE\right)+\left(\frac{C_4}{C_3}\frac{C_3}{C_1}-\frac{C_2}{C_1}\right)\mathrm{Bi}'\left(ay-bE\right)\right)} \tag{45}$$

$$C_1 = -\frac{a^2}{F}\frac{1}{\left(\left(\frac{C_3}{C_1}-1\right)\mathrm{Ai}'\left(ay-bE\right)+\left(\frac{C_4}{C_3}\frac{C_3}{C_1}-\frac{C_2}{C_1}\right)\mathrm{Bi}'\left(ay-bE\right)\right)} \tag{46}$$

A 42-45, 36. és a 37. egyenletek explicit, analitikus módon előállítják a $G\left(x,y;E\right)$ Green-függvényt.

8.2. Green-függvény perturbáció számítással

A perturbációszámításhoz a Hamilton operátort két részre bontom fel:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} \tag{47}$$

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

$$\hat{G}^{-1}\left(E\right)+E = \hat{G}_0^{-1}\left(E\right)+E+\hat{V} \tag{48}$$

$$\hat{G}\left(E\right) = \hat{G}_0\left(E\right)-\hat{G}_0\left(E\right)\hat{V}\hat{G}\left(E\right) \tag{49}$$

Az alábbi módon definiálva $\hat{G}_n\left(E\right)$ operátort, a 49. egyenlethez hasonló rekurziós összefüggés áll fent:

$$\hat{G}_n\left(E\right) = \hat{G}_0\left(E\right)\sum_{k=0}^{n}\left(-\hat{V}\hat{G}_0\left(E\right)\right)^k \tag{50}$$

$$\hat{G}_{n+1}\left(E\right) = \hat{G}_0\left(E\right)-\hat{G}_0\left(E\right)\hat{V}\hat{G}_n\left(E\right) \tag{51}$$

Ha $\left\|\hat{V}\hat{G}_0\left(E\right)\right\| < 1$ akkor a $\hat{G}_n$ sorozat konvergál, és kielégíti a 49. egyenletet. Ezért konvergencia esetén:

$$\hat{G}\left(E\right) = \hat{G}_0\left(E\right)\sum_{n=0}^{\infty}\left(-\hat{V}\hat{G}_0\left(E\right)\right)^n \tag{52}$$

A perturbbálatlan 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 $\hat{G}_0\left(E\right)$ Green-függvényt is a 42-45, 36. és a 37. egyenletek alapján határozom meg.

$$G_0\left(x,y;E\right) = \begin{cases} -\frac{2m}{k\hbar^2}\frac{1}{\sin(kL)}\sin\left(k\left(y-L\right)\right)\sin\left(kx\right) & x \le y \\ -\frac{2m}{k\hbar^2}\frac{1}{\sin(kL)}\sin\left(k\left(x-L\right)\right)\sin\left(ky\right) & x > y \end{cases} \tag{53}$$

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

9. Videó gyártás leírása