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 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

-fx, fy = 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

3.2. Összehasonlítás az egzakt eredménnyel 10

3.3. Airy függvények aszimptotikája 11

4. Homogén tér Green-függvénye **12**

4.1. Egzakt Green-függvény 12

4.2. Állapotsűrűség 14

4.3. Green-függvény perturbáció számítással 16

A. Szabad részecske gyorsuló koordinátarendszerben **18**

B. Numerikus számítások **19**

B.1. Momentumok időfejlődése 19

B.2. Hullámfüggvény időfejlődése 19

B.2.1. 1D 19

B.2.2. 2D 19

Hivatkozások **20**

Ábrák jegyzéke

2.1. Airy-függvények 4
2.2. Egzakt energiaszintek 6
2.3. sajátállapotok 7
3.1. Szemiklasszikus állapotszám 10
4.1. Állapotsűrűség 15
4.2. Állapotok száma 16
4.3. Green-függvény perturbációs sorának konvergenciája 18
B.1. Várható értékek és szórások időfejlődése 19

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 erőtér hat a részecskére, azaz $\boldsymbol{F} = \text{const}$. A potenciál így $V(x,y,z) = -F_x x - F_y y - F_z z$. A rendszer időfüggő Schrödinger-egyenlete

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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.

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

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

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

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

2.2. Egy dimenzióban

Az egy dimenziós probléma tárgyalásának két esete van aszerint, hogy $\boldsymbol{F}$ megfelelő komponense 0-e. Amennyiben a komponens 0, a feladat a szabad részecske utáni legelemibb probléma megoldása: a végtelen potenciálgödör. Amennyiben $\boldsymbol{F}$ 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

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

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

$$N_n = 1. \tag{2.11}$$

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

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2}. \tag{2.12}$$

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

2.2.2. Airy függvények

Az Airy egyenlet

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

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

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

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

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.

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

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 következőek:

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

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

$x \leq 0$ tartományban

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

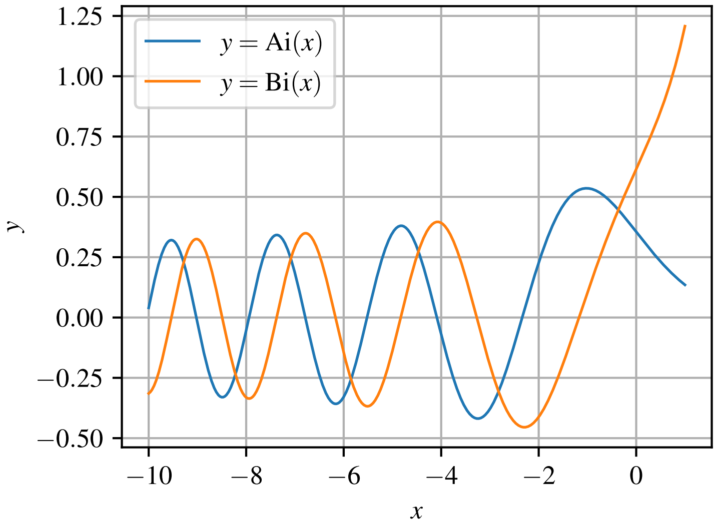
alakban keresve a megoldást a $v(x)$-re kapott egyenlet a Bessel-egyenlet, megint $\nu^2 = \frac{1}{9}$.

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

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

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

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



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

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

$$\mathrm{Ti}(x) = \frac{\mathrm{Ai}(x)}{\mathrm{Bi}(x)} \tag{2.22}$$

függvényt.

$x \to \infty$ aszimptotikus alak:

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

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

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

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

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

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

$$\int y^2\, dx = xy^2 - y'^2, \tag{2.28}$$

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

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

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

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

2.2.3. Véges F eset

A (2.13) egyenlet (2.3) alakúra hozható a

$$x = ax' - bE, \tag{2.31}$$

$$y(x) = y(ax' - bE) \tag{2.32}$$

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

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

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

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

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

Az egy dimenziós időfüggetlen Schrödinger-egyenlet megoldása

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

melyet a határfeltételekhez kell illeszteni,

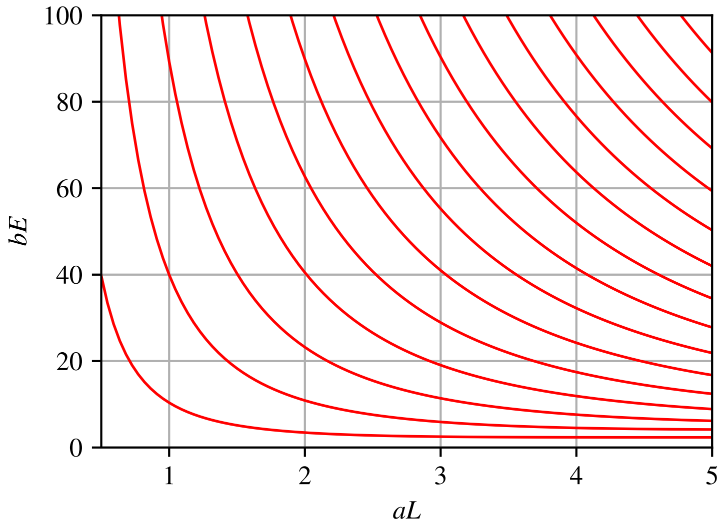
$$\psi(0) = \psi(L) = 0. \tag{2.37}$$

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

$$0 = \psi(L) = \mathrm{Bi}(-bE)\,\mathrm{Ai}(aL-bE) - \mathrm{Ai}(-bE)\,\mathrm{Bi}(aL-bE). \tag{2.38}$$

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

$$\mathrm{Ti}(aL - bE) - \mathrm{Ti}(-bE) = 0. \tag{2.39}$$



2.2. ábra. Egzakt energia szintek, bE és aL közötti relációval ábrázolva. Az ába jobb alsó sarkán látható, hogy $E \ll FL$ esetén az energiaszintek L-től függetlenek lesznek, mivel a félvégtelen tér beli homogén tér energiaszintjeit közelítik.

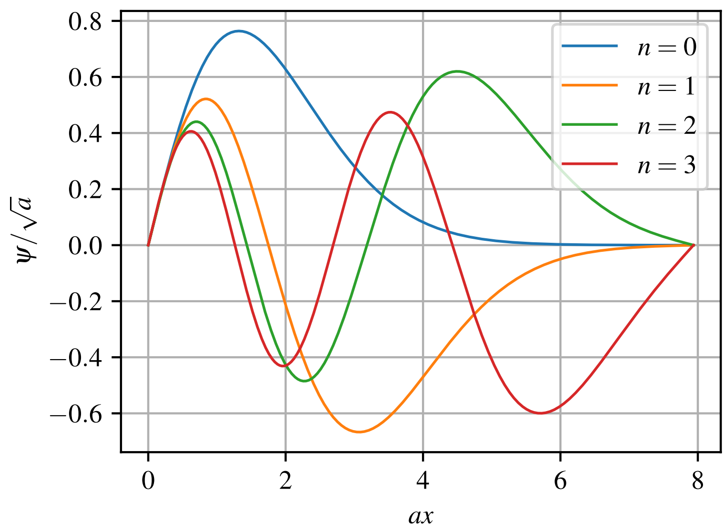
Amikor $FL \ll \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}$, a potenciál jól közelíthető konstans potenciállal, mivel az alapállapot energiájához képest is elhanyagolható a lineáris potenciál eltérése a konstans potenciáltól. Eben a esetben $E \propto n^2$. $E \ll FL$ esetben az energiaszintek jó közelítéssel konstanssá válnak. Ennek az oka, hogy $\lim_{L\to\infty} \psi(x) = \alpha\,\mathrm{Ai}\,(ax - b)$, mert a $\mathrm{Bi}\,(x)$ exponenciálisan növekszik nagy x-ek esetén. Ebben az eseten az energiaszinteket a $\mathrm{Ai}(-bE) = 0$ egyenlet határozza meg. Ezeket az aszimptotikus viselkedéseket a 2.2. ábra jól mutatja, később a Szemiklasszikus közelítés vizsgálata során részletesebben tárgyaljuk.

$$\psi_k(x) = \mathrm{Bi}(-bE_k)\,\mathrm{Ai}(ax - bE_k) - \mathrm{Ai}(-bE_k)\,\mathrm{Bi}(ax - bE_k) \tag{2.40}$$

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 alkalmazható,

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

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 együtthatók 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 $x \to \infty$-ből nem jönnek részecskék, és nem is tartózkodnak ott. Ezek problémás állapotok lennének, végtelen energiával rendelkeznének. Tehát a szórásállapotokra vonatkozó feltétel, hogy

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

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 $x \to \infty$-ből nem jönnek részecskék. Ennek következtében az a sajátállapotokat $|E\rangle$ egyértelmen jelöli. A (2.42) feltétel azt jelenti, hogy az Airy-függvények közül a $\mathrm{Bi}(ax - bE)$ nem szerepel a lineáris kominációban, a megoldás tisztán az $\mathrm{Ai}(ax - bE)$ függvény lesz,

$$\langle x \,|\, E\rangle = N\,\mathrm{Ai}(ax - bE). \tag{2.43}$$

A szórásállapotokra vonatkozó normálási feltétel

$$\langle E \,|\, E'\rangle = \delta(E - E'). \tag{2.44}$$

Ez alapján N meghatározható (2.29) azonosság felhasználásával,

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

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

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

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

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

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 $\mathrm{Ai}(x)$ 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.

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dp \, \mathrm{Ai}(x) \tag{2.48}$$

3. Szemiklasszikus közelítés

3.1. Szemiklasszikus energiaszintek

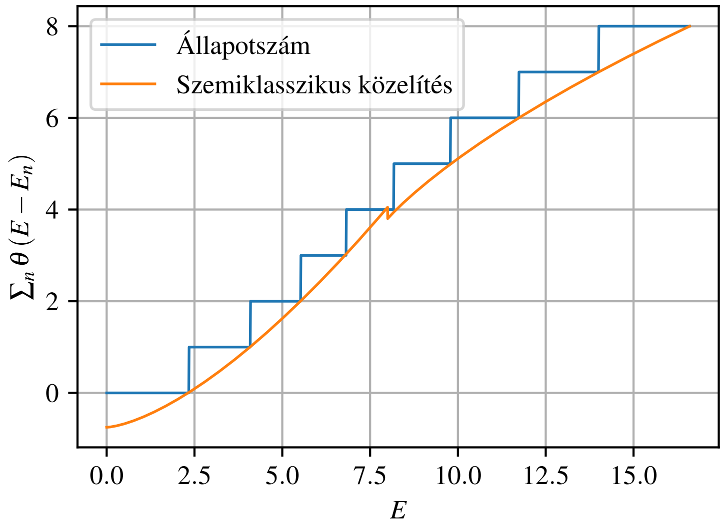
A dobozba zárt részecske esetében két esetet kell vizsgálni a szemiklasszikus energiaszintek meghatározásához. Az első eset, amikor az energia $E < FL$, tehát a fordulópont a második fal elérése előtt van. Ebben az esetben a Maslov index $\frac{3}{4}$ [5] (2.4.1 fejezet). Az $x = 0$ fordulópontban a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

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

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,

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

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 (2.25) közelítés alkalmazható,

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

A $\cot(x)$ függvény π-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

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

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 köelítések megegyeznek.

Amennyiben $bE - aL$ negatív, a $\mathrm{Ti}(bE - aL)$ 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 $L \to \infty$ 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 normálható. Ezért a valószínűségeknél csak arányosságról beszélhetünk, egy részecske rendszerre vonatkozó valószínűségsűrűségként nem értelmezhető. Egy lehetséges interpretáció a szórásállapotok esetében $|\psi|^2$-re, hogy nem kölcsönható részecske áramról van szó, és a résecskék 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,

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

a klasszikus mechanikából ismert energia megmaradás szerint. Átrendezve

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

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,

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

A klasszikus energia megmaradás meghatározza az impulzust, ami alapján a de

Broglie hullámszám

$$k = \frac{\sqrt{2mF}}{\hbar}\sqrt{-x}. \tag{3.8}$$

A k integrálja könnyen kiszámítható,

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

Az amplitúdóra és hullámhosszra vonatkozó feltételeket összekombinálva

$$\psi(x) \propto \mathrm{Ai}(ax) \propto \frac{1}{\sqrt[4]{-ax}}\sin\left(\frac{2}{3}\left(-ax\right)^{3/2}\right). \tag{3.10}$$

4. Homogén tér Green-függvénye

A rezolvens operátor definíciója

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

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

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

4.1. Egzakt Green-függvény

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

$$\left(E - \hat{H}\right)\hat{G}\left(E\right) = \hat{I}, \tag{4.3}$$

azaz

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

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

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

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

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

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

$$G\left(x, y; E\right)\big|_{x=0} = 0, \tag{4.7}$$

$$G\left(x, y; E\right)\big|_{x=L} = 0. \tag{4.8}$$

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

$$\lim_{\epsilon\to 0^+} G\left(x, y; E\right)\big|_{x=y-\epsilon}^{x=y+\epsilon} = 0 \tag{4.9}$$

folytonossági feltételt adja. 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 eredeti függvény is folytonos, így az integrálja is. A 4.6. egyenlet x szerinti integrálja y körüli ϵ sugarú környezetében az $\epsilon \to 0^+$ határesetben

$$\lim_{\epsilon\to 0^+} \frac{\partial}{\partial x} G\left(x, y; E\right)\bigg|_{x=y-\epsilon}^{x=y+\epsilon} = \frac{2m}{\hbar^2}. \tag{4.10}$$

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. 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

$$u = ax - bE, \tag{4.11}$$

$$v = ay - bE \tag{4.12}$$

jelöléseket. A fent leírt három kritériumot teljesítő ansatz

$$G\left(x, y; E\right) = C_0(E) \times \begin{cases} \begin{array}{r} \left(\mathrm{Ai}(aL - bE)\,\mathrm{Bi}(v) - \mathrm{Bi}(aL - bE)\,\mathrm{Ai}(v)\right) \times \\ \left(\mathrm{Ai}(bE)\,\mathrm{Bi}(u) - \mathrm{Bi}(-bE)\,\mathrm{Ai}(u)\right) \end{array} & x \le y \\ \begin{array}{r} \left(\mathrm{Ai}(aL - bE)\,\mathrm{Bi}(u) - \mathrm{Bi}(aL - bE)\,\mathrm{Ai}(u)\right) \times \\ \left(\mathrm{Ai}(bE)\,\mathrm{Bi}(v) - \mathrm{Bi}(-bE)\,\mathrm{Ai}(v)\right) \end{array} & x \ge y \end{cases}. \tag{4.13}$$

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

A rezolvens operátornak pólusai vannak a rendszer E_k sajátenergiáinál:

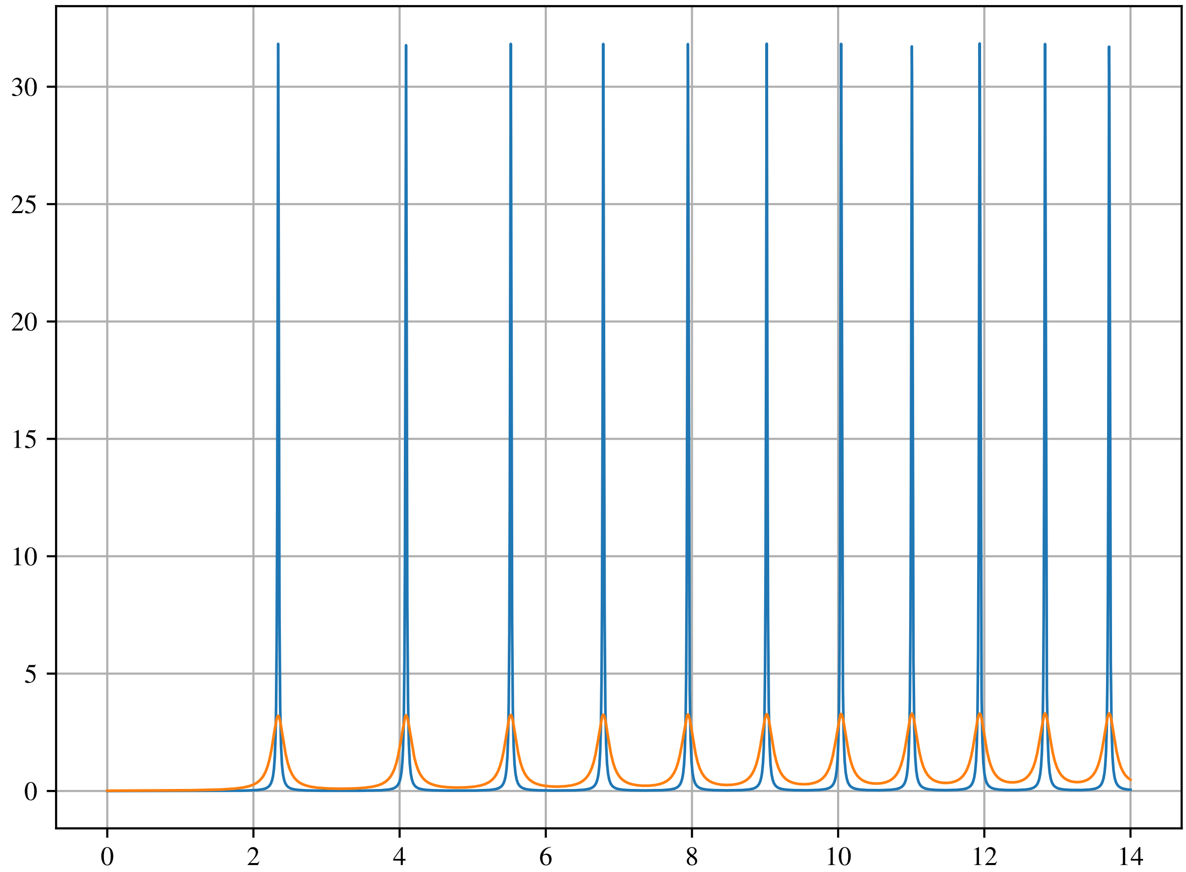
$$\hat{G}\,(E) = \sum_n \frac{|n\rangle\,\langle n|}{E_n - E} \tag{4.15}$$

Így ha E kielégíti a 2.39. egyenletet, akkor a rezolvensnek és ezért a Green-függénynek is pólusa kell hogy legyen. Ezt a C_1 szingularitásán lehet a leg könnyebben 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 nevezőének ,ásodik 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.

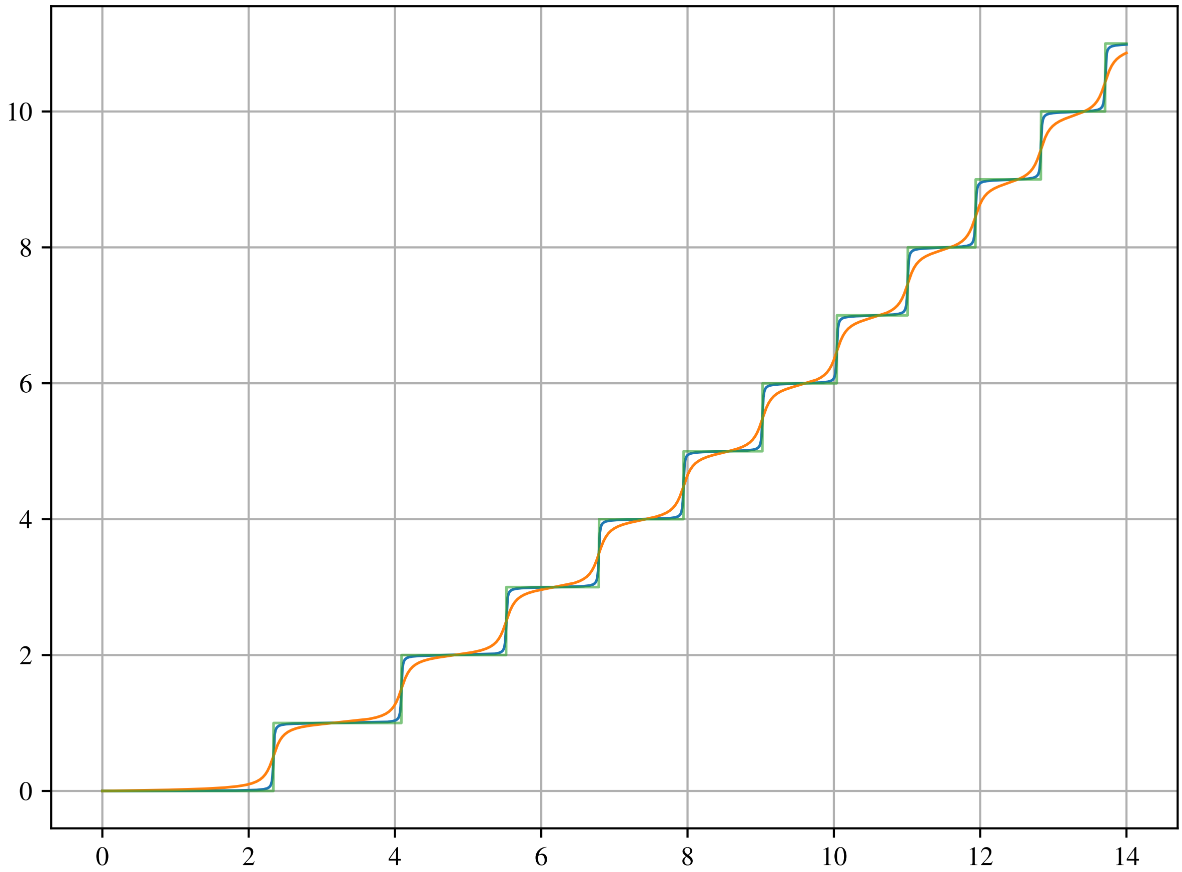
Egy érdekes matematikai eredmény, hogy a Green-függvényre vonatkozó differenciál egyenlet megoldásával elvégeztem a 4.15. egyenlet összegzését. Ez az összeg az Airy függvények szorzatának összege lenne, osztva $E_k - E$-vel és a megfelelő normálási faktorral, ami Airy függvények szorzatának 0 és L közötti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

$$\rho\,(E) = \frac{1}{\pi} \lim_{\epsilon \to 0^+} \mathrm{Im}\mathrm{Tr}\hat{G}\,(E + i\epsilon) \tag{4.16}$$



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 at 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:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} \tag{4.17}$$

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.

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

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

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

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

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

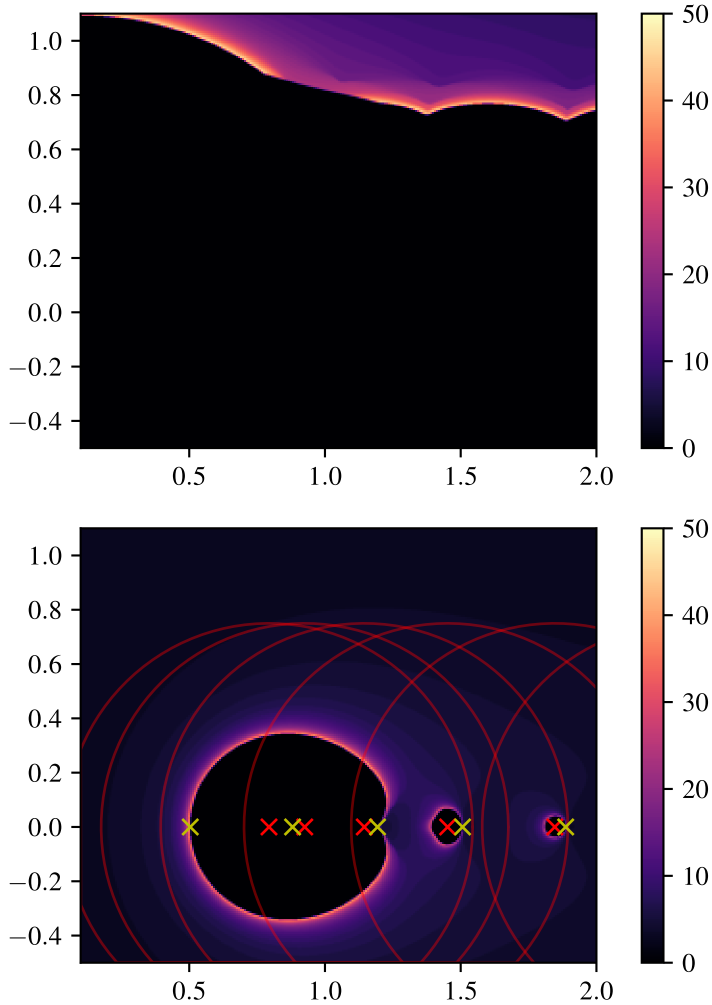
Ha $\left\|\hat{V}\hat{G}_0(E)\right\| < 1$ akkor a $\hat{G}_n$ sorozat konvergál, és kielégíti a 4.19. egyenletet. Ezért konvergencia esetén:

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

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 $\hat{G}_0(E)$ Green-függvényt is a **??**-**??**, **??**. és a **??**. egyenletek alapján határozom meg.

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

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



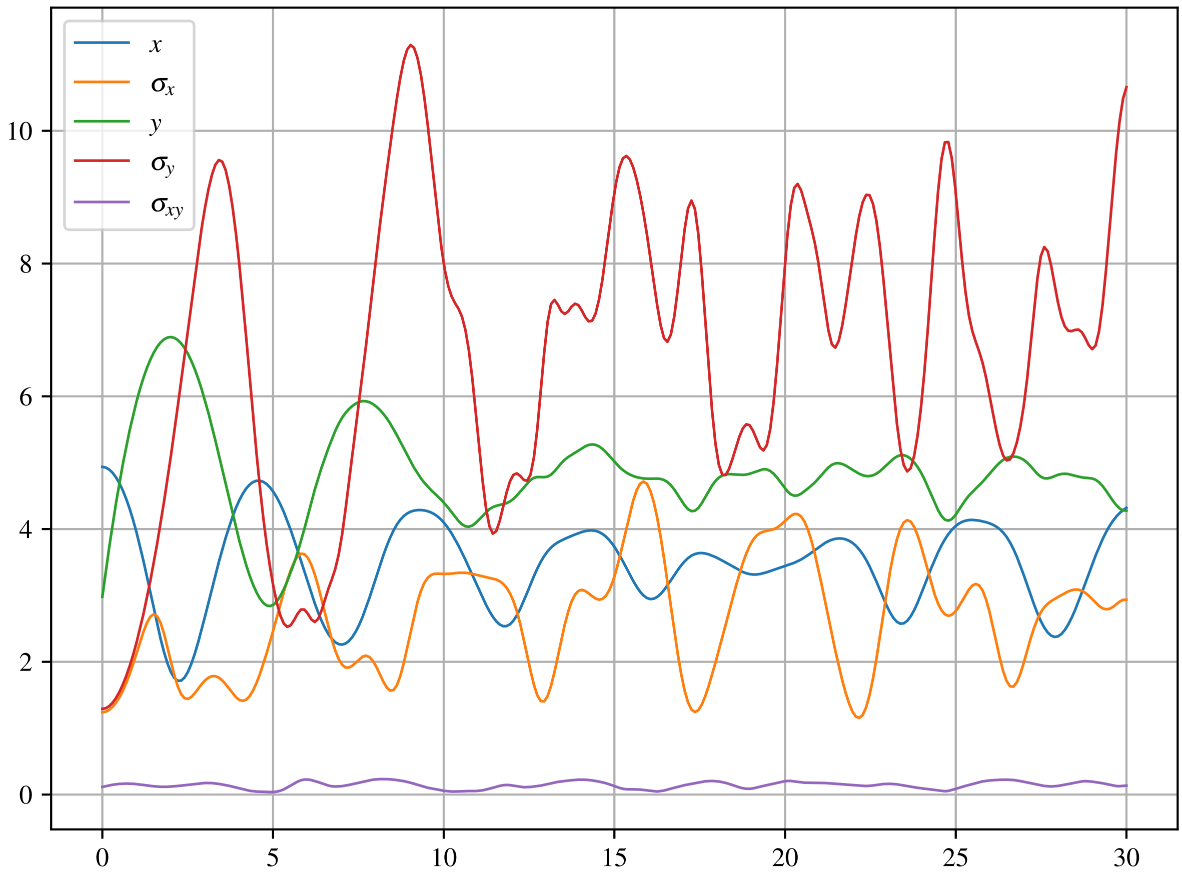
4.3. ábra. Ez az ábra a két perturbációs sor konvergenciáját hasonlítja össze a komplex energia síkon. A felső ábra a $V = Fx$ perturbáló potenciálnak, míg az alsó a $V = Fx - FL/2$ perturbáció szerinti sornak felel meg. A fekete tartományok divergenciát jelölnek, míg a többi szín a sorfejtés tagjainak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