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

# Ábrák jegyzéke



# 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 $\psi_0$ 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.

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

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 egyszer, 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 elentős 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

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

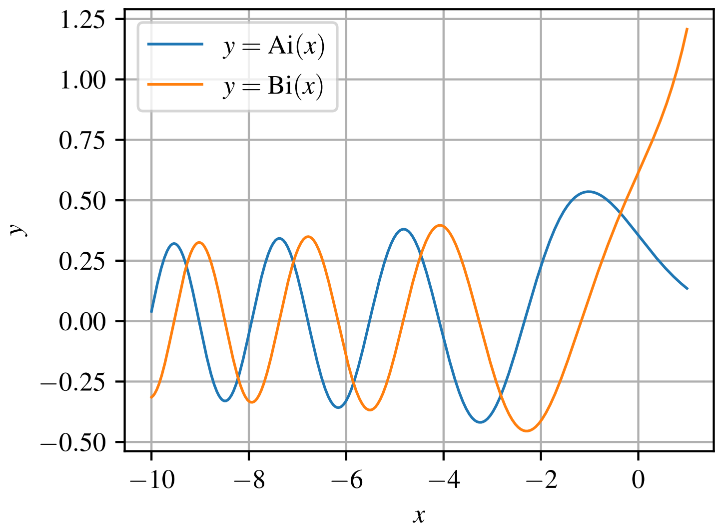
alakban keresve a megoldást a $v(x)$-re kapott egyenlet a Bessel-egyenlet, megint $\nu^2 = \frac{1}{9}$.

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

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.

A Green-függvény meghatározása közben felmerül a Wronski-determinánsa az Airy-függvényeknek, ez [3] (9.2.7) szerint

$$\mathcal{W}\{\mathrm{Ai}(x), \mathrm{Bi}(x)\} = \mathrm{Ai}(x)\mathrm{Bi}'(x) - \mathrm{Bi}(x)\mathrm{Ai}'(x) = \frac{1}{\pi}. \tag{2.29}$$

### 2.2.3. Véges $F$ eset

A (2.13) egyenlet (2.3) alakúra hozható a

$$x = ax' - bE, \tag{2.30}$$

$$y(x) = y(ax' - bE) \tag{2.31}$$

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

$$\frac{d^2y(ax - bE)}{dx'^2} - \left(a^3x - a^2bE\right) y(ax - bE) = 0. \tag{2.32}$$

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

$$a = \sqrt[3]{\frac{2mF}{\hbar^2}}, \tag{2.33}$$

$$b = \sqrt[3]{\frac{2m}{\hbar^2 F^2}}. \tag{2.34}$$

Az egy dimenziós időfüggetlen Schrödinger-egyenlet megoldása

$$\psi(x) = c_1\mathrm{Ai}(ax - bE) + c_2\mathrm{Bi}(ax - bE), \tag{2.35}$$

melyet a határfeltételekhez kell illeszteni,

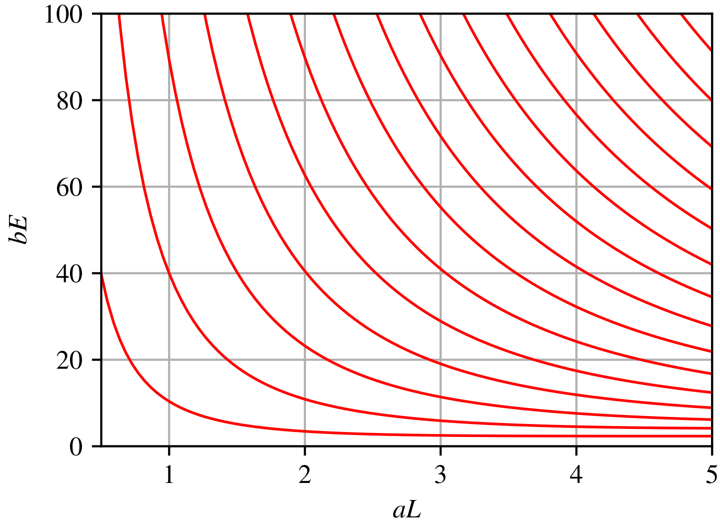
$$\psi(0) = \psi(L) = 0. \tag{2.36}$$

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,

$$0 = \psi(L) = \mathrm{Bi}(-bE)\mathrm{Ai}(aL - bE) - \mathrm{Ai}(-bE)\mathrm{Bi}(aL - bE). \tag{2.37}$$

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

$$\mathrm{Ti}(aL - bE) - \mathrm{Ti}(-bE) = 0. \tag{2.38}$$




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.

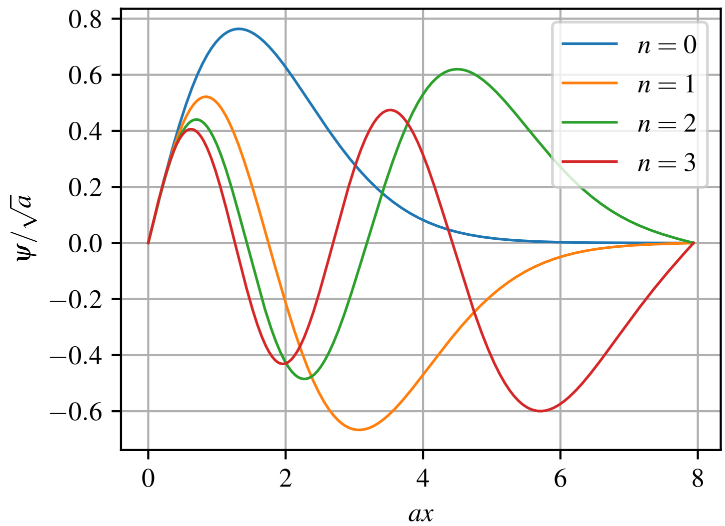
Amikor $FL \ll \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}$, a potenciál jól közelíthető konstans potenciállal, mivel az alapállapot energiájához képest is elhanyagolható a lineáris potenciál eltérése a konstans potenciáltól. Eben a esetben $E \propto n^2$. $E \ll FL$ esetben az energiaszintek jó közelítéssel konstanssá 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.

$$\psi_k(x) = \mathrm{Bi}(-bE_k)\mathrm{Ai}(ax - bE_k) - \mathrm{Ai}(-bE_k)\mathrm{Bi}(ax - bE_k) \tag{2.39}$$

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 alkalmazható,

$$\begin{aligned} N_k &= \int_0^L dx\, |\psi_k(x)|^2 \\ &= \left(x - \frac{bE}{a}\right)\psi_k(x)^2 - \frac{1}{a^3}\psi_k'(x)^2\Big|_{x=0}^{x=L} \\ &= \frac{1}{a}\left(\frac{1}{\pi^2} - \left(\mathrm{Bi}(-bE)\mathrm{Ai}'(aL-bE) - \mathrm{Ai}(-bE)\mathrm{Bi}'(aL-bE)\right)^2\right). \end{aligned} \tag{2.40}$$

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 (2.29) 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. Szabad részecske gyorsuló koordinátarendszerben

Pozitív $x$ irányban

# 3. Szemiklasszikus közelítés

$$nh = \oint p\, dq = \tag{3.1}$$

$E/F < L$ esete:

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

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

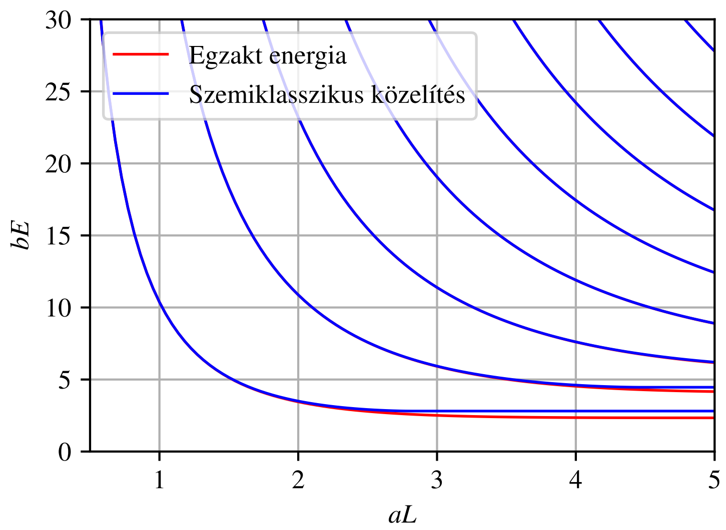
$E/F > L$ esete:

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

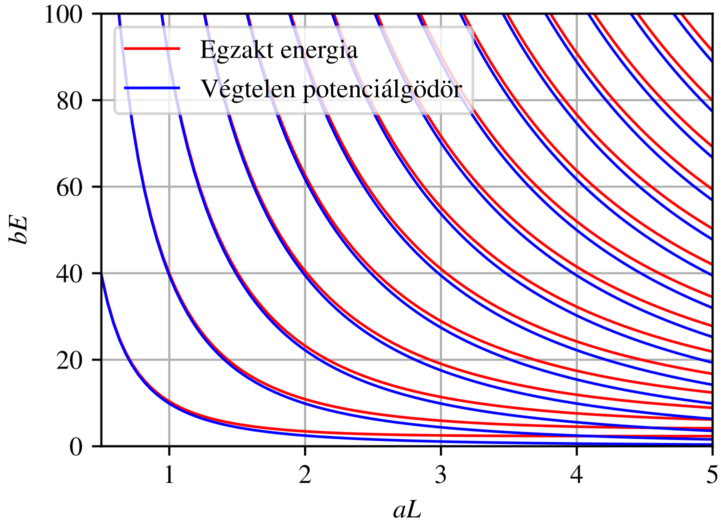
$E \gg FL$ esetén a különbség az $E^{3/2}$ függvény deriváltjának segítségével helyettesíthető:

$$nh \approx 2\sqrt{2m}E^{1/2}L \tag{3.5}$$

$$E_n \approx \frac{n^2h^2}{8mL^2} \tag{3.6}$$




3.1. ábra. Az ábra a szemiklasszikus energiaszinteket hasonlítja össze az egzakt energiaszintekkel. Ez az ábra is a $bE$ és $aL$ közötti relációt ábrázolja. A szemiklasszikus közelítés nagy kvantumszámok illetve $E \gg FL$ esetén pontos. Utóbbi oka, hogy ebben az esetben a potenciál elhanyagolható, és a potenciál nélküli végtelen potenciálgödör energiaszintjeit pedig a szemiklasszikus közelítés egzaktul megadja.




3.2. ábra. Az ábrán a végtelen potenciálgödör és az egzakt energiaszintek összehasonlítása látható. Ez csak az $E \gg FL$ esetben jó közelítés, a szemiklasszikus energiaszintek jóval pontosabbak.

## 3.1. Összehasonlítás az egzakt eredménnyel

$x \to \infty$ aszimptotikus alak:

$$\mathrm{Ai}\left(-x\right) = \frac{1}{\sqrt{\pi}x^{1/4}} \cos\left(\frac{2}{3}x^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right) + \mathcal{O}\left(x^{-5/4}\right) \tag{3.7}$$

$$\mathrm{Bi}\left(-x\right) = -\frac{1}{\sqrt{\pi}x^{1/4}} \sin\left(\frac{2}{3}x^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right) + \mathcal{O}\left(x^{-5/4}\right) \tag{3.8}$$

$$\mathrm{Ti}\left(-x\right) = -\cot\left(\frac{2}{3}x^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right) + \mathcal{O}\left(x^{-5/4}\right) \tag{3.9}$$

Ezzel a közelítéssel a 2.38. egyenlet alakja:

$$\cot\left(\frac{2}{3}\left(bE - aL\right)^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right) = \cot\left(\frac{2}{3}\left(bE\right)^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right) \tag{3.10}$$

, azaz

$$\frac{2}{3}\left(bE\right)^{3/2} - \frac{2}{3}\left(bE - aL\right)^{3/2} = n\pi \tag{3.11}$$

. Az $a$ és $b$ behelyettesítésével az egyenlet

$$\frac{2\sqrt{2m}}{3F\hbar}\left(E^{3/2} - \left(E - FL\right)^{3/2}\right) = n\pi \tag{3.12}$$

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.

### 3.2. Airy függvények aszimptotikája

# 4. Homogén tér Green-függvénye

A rezolvens operátor definíciója

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

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

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

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-függény megegyezik a differenciálegyenletek elméletéből ismert Green-függvénnyel.

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

azaz

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

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

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

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

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

#### 4.0.1. Egzakt Green-függvény

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

$$G(x, y; E) = C_1 \mathrm{Ai}\left(\sqrt[3]{\frac{2mF}{\hbar^2}} x - \sqrt[3]{\frac{2m}{\hbar^2 F^2}} E\right) + C_2 \mathrm{Bi}\left(\sqrt[3]{\frac{2mF}{\hbar^2}} x - \sqrt[3]{\frac{2m}{\hbar^2 F^2}} E\right) \tag{4.7}$$

illetve az $x > y$ tartományban

$$G(x,y;E) = C_3 \mathrm{Ai}\left(\sqrt[3]{\frac{2mF}{\hbar^2}}x - \sqrt[3]{\frac{2m}{\hbar^2 F^2}}E\right) + C_4 \mathrm{Bi}\left(\sqrt[3]{\frac{2mF}{\hbar^2}}x - \sqrt[3]{\frac{2m}{\hbar^2 F^2}}E\right) \tag{4.8}$$

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

$$G(x,y;E)|_{x=0} = 0 \tag{4.9}$$

$$G(x,y;E)|_{x=L} = 0 \tag{4.10}$$

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

$$\lim_{\epsilon \to 0^+} G(x,y;E)|_{x=y-\epsilon}^{x=y+\epsilon} = 0 \tag{4.11}$$

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 erdeti függvény is folytonos, így az integrálja is. A 4.6. egyenlet $x$ szerinti integrálja $y$ körüli $\epsilon$ sugarú környezetében az $\epsilon \to 0^+$ határesetben:

$$\lim_{\epsilon \to 0^+} \frac{\partial}{\partial x} G(x,y;E)\bigg|_{x=y-\epsilon}^{x=y+\epsilon} = -\frac{2m}{\hbar^2} \tag{4.12}$$

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 4.7. és a 4.8. egyenlet behelyettesítése meghatározza a $C$ együtthatókra vonatkozó egyenleteket:

$$\frac{C_2}{C_1} = -\mathrm{Ti}(-bE) \tag{4.13}$$

$$\frac{C_4}{C_3} = -\mathrm{Ti}(aL - bE) \tag{4.14}$$

$$\frac{C_3}{C_1} = \frac{\mathrm{Ti}(ay - bE) - \mathrm{Ti}(-bE)}{\mathrm{Ti}(ay - bE) - \mathrm{Ti}(aL - bE)} \tag{4.15}$$

TODO: $b$ lecserélése $bE$-re az előző részekben.

$$C_1 = -\frac{2m}{a\hbar^2} \frac{1}{\left(\left(\frac{C_3}{C_1} - 1\right)\mathrm{Ai}'(ay - bE) + \left(\frac{C_4}{C_3}\frac{C_3}{C_1} - \frac{C_2}{C_1}\right)\mathrm{Bi}'(ay - bE)\right)} \tag{4.16}$$

$$C_1 = -\frac{a^2}{F}\frac{1}{\left(\left(\frac{C_3}{C_1}-1\right)\mathrm{Ai}'(ay-bE)+\left(\frac{C_4}{C_3}\frac{C_3}{C_1}-\frac{C_2}{C_1}\right)\mathrm{Bi}'(ay-bE)\right)} \tag{4.17}$$

A 4.13-4.16, 4.7. és a 4.8. egyenletek explicit, analitikus módon előállítják a $G(x,y;E)$ Green-függvényt. Valós energiákra $G(x,y;E) = G(y,x;E)^*$. Ebből következik, hogy a Green-függvény $x<y$ eset $y$ függése kiemelhető lesz, és megegyezik az $x>y$ eset $x$ függésével. Ezek szerint $\mathrm{Ai}(ay-bE)-\mathrm{Ti}(aL-bE)\,\mathrm{Bi}(ay-bE)$ kiemelhető a $C_1$ együtthatóból,

$$C_1 = \frac{a^2}{F}\frac{\mathrm{Ai}(ay-bE)-\mathrm{Ti}(aL-bE)\,\mathrm{Bi}(ay-bE)}{(\mathrm{Ti}(-bE)-\mathrm{Ti}(aL-bE))\,(\mathrm{Bi}(-bE)\,\mathrm{Ai}'(-bE)-\mathrm{Ai}(-bE)\,\mathrm{Bi}'(-bE))}. \tag{4.18}$$

Az algebrai átalakításokon túl fel kellett használni, hogy $\mathrm{Ai}(ay-bE)\,\mathrm{Bi}'(ay-bE)-$ $\mathrm{Bi}(y-bE)\,\mathrm{Ai}'(ay-bE)$ $y$-tól független konstans tehát $y=0$ helyettesíthető bele. Ez onnan látható, hogy $y$ szerinti deriváltja 0,

$$\begin{aligned}
&(\mathrm{Ai}(ay-bE)\,\mathrm{Bi}'(ay-bE)-\mathrm{Bi}(ay-bE)\,\mathrm{Ai}'(ay-bE))' \\
&= a\mathrm{Ai}'(ay-bE)\,\mathrm{Bi}'(ay-bE)+a\mathrm{Ai}(ay-bE)\,\mathrm{Bi}''(ay-bE) \\
&\quad - a\mathrm{Bi}'(ay-bE)\,\mathrm{Ai}'(ay-bE)-a\mathrm{Bi}(ay-bE)\,\mathrm{Ai}''(ay-bE) \\
&= a\mathrm{Ai}(ay-bE)\,(ay-bE)\,\mathrm{Bi}(ay-bE)-a\mathrm{Bi}(ay-bE)\,(ay-bE)\,\mathrm{Ai}(ay-bE) \\
&= 0.
\end{aligned} \tag{4.19}$$

Ez után már az $x$-$y$ szimmetriája jól látható a Green-függvénynek.

$$C_0 = \frac{a^2}{F}\frac{1}{(\mathrm{Ti}(-bE)-\mathrm{Ti}(aL-bE))\,(\mathrm{Bi}(-bE)\,\mathrm{Ai}'(-bE)-\mathrm{Ai}(-bE)\,\mathrm{Bi}'(-bE))} \tag{4.20}$$

bevezetésével a Green függvény egyszerűbb alakra hozható,

$$G(x,y;E) = C_0\times\begin{cases}
\begin{array}{c}(\mathrm{Ai}(ay-bE)-\mathrm{Ti}(aL-bE)\,\mathrm{Bi}(ay-bE))\times \\ (\mathrm{Ai}(ax-bE)-\mathrm{Ti}(-bE)\,\mathrm{Bi}(ax-bE))\end{array} & x\le y \\
\begin{array}{c}(\mathrm{Ai}(ay-bE)-\mathrm{Ti}(-bE)\,\mathrm{Bi}(ay-bE))\times \\ (\mathrm{Ai}(ax-bE)-\mathrm{Ti}(aL-bE)\,\mathrm{Bi}(ax-bE))\end{array} & x>y
\end{cases} \tag{4.21}$$

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

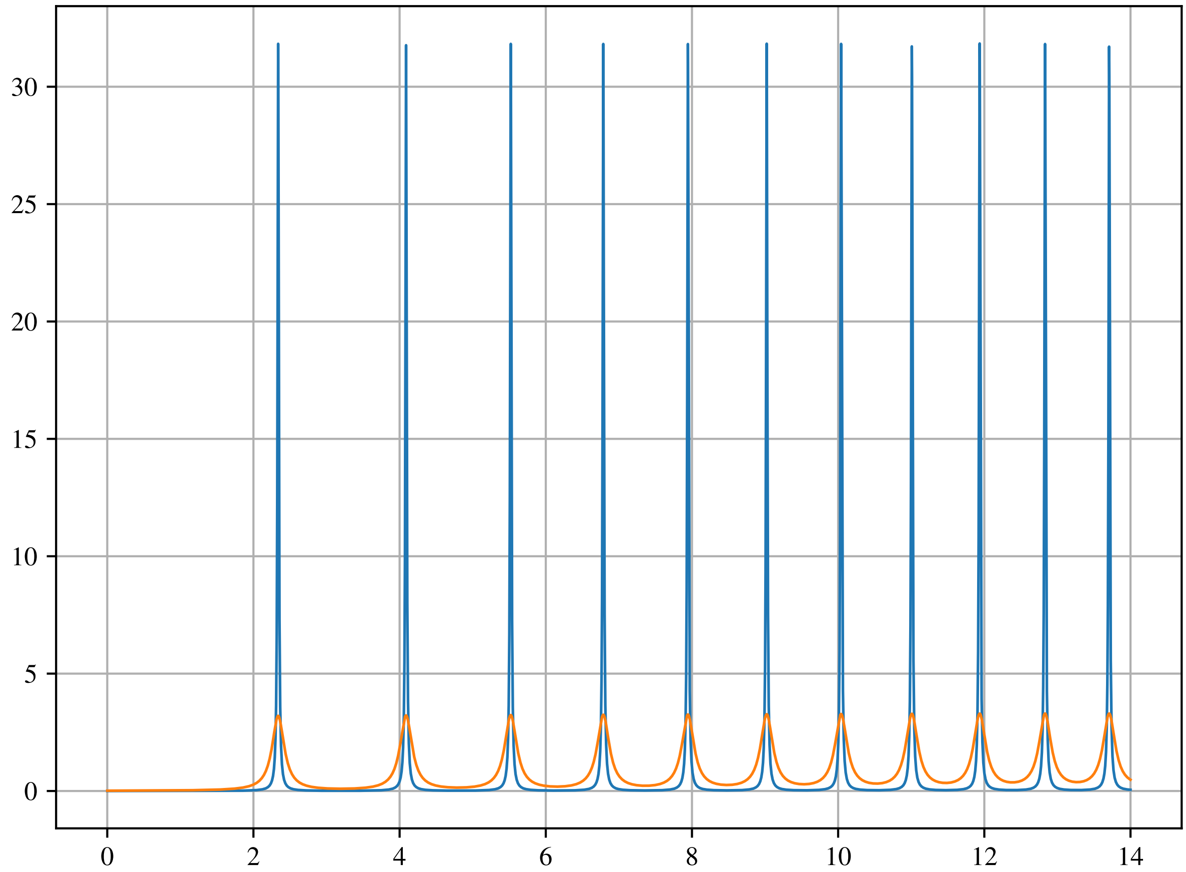
$$\hat{G}(E) = \sum_n \frac{|n\rangle\langle n|}{E_n-E} \tag{4.22}$$

Így ha $E$ kielégíti a 2.38. 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.

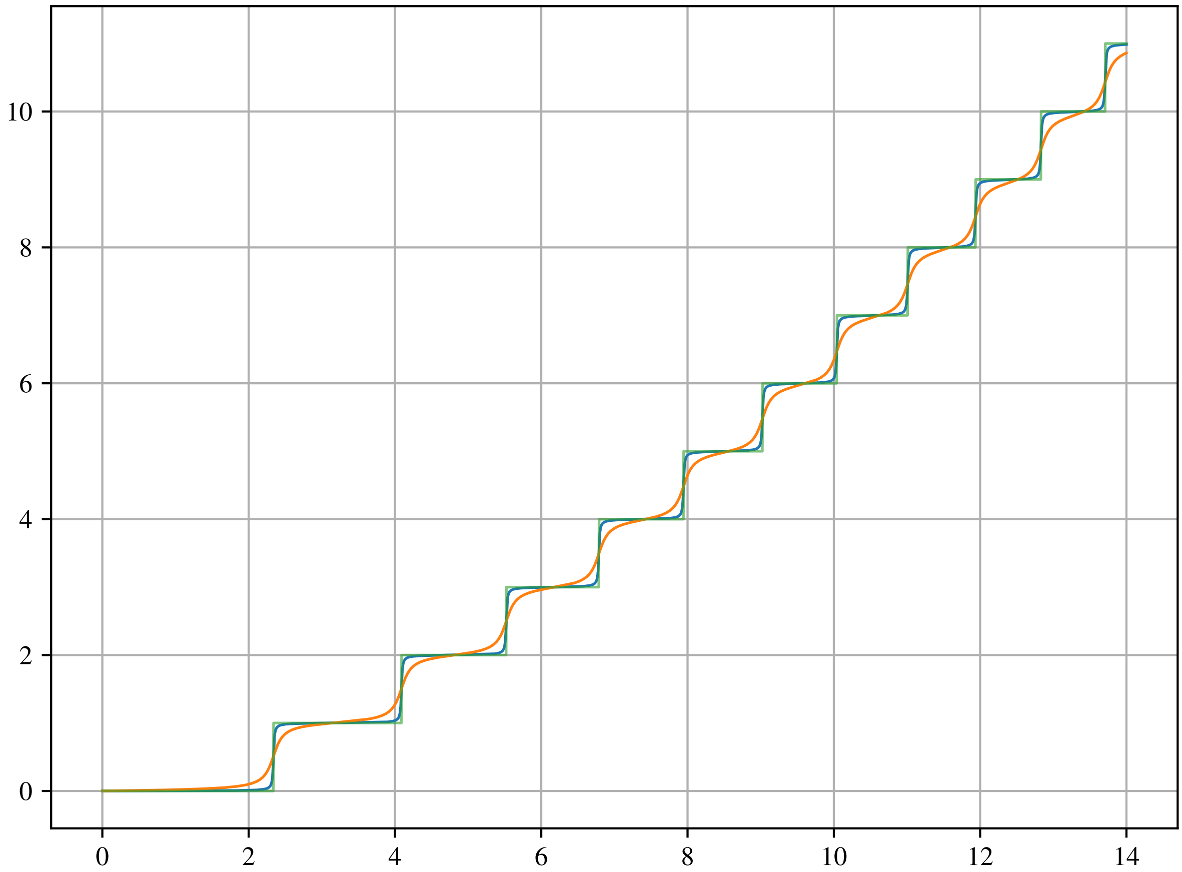
A 2.38. egyenlet szerint a $\frac{C_3}{C_1}$ számlálójának és nevezőének ,ásodik tagjai egyenlőek. Első tagjuk bármely $E$ esetén egyenlő, így hányadosuk 1, valamint a 2.38. egyenlet esetén $\frac{C_2}{C_1} = \frac{C_4}{C_3}$. Ezeknek a következtében mind $\frac{C_3}{C_1} - 1$, mind $\frac{C_4}{C_3}\frac{C_3}{C_1} - \frac{C_2}{C_1}$ 0-val egyenlő, így a $C_1$-re vonatkozó kifejezés nevezője 0. Ezek a $\frac{1}{E_n - E}$ típusú pólusok a 4.22. egyenletből.

Egy érdekes matematikai eredmény, hogy a Green-függvényre vonatkozó differenciál egyenlet megoldásával elvégeztem a 4.22. 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 2.38. transzcendens egyenlet határozza meg. A Green-függvényre vonatkozó differenciálegyenlet nélkül az összeg elvégzése reménytelennek látszana.

$$\rho\left(E\right) = \frac{1}{\pi} \lim_{\epsilon \to 0^+} \mathrm{Im}\mathrm{Tr}\hat{G}\left(E + i\epsilon\right) \tag{4.23}$$




4.1. ábra. A 4.23. 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 at 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.

### 4.0.2. Green-függvény perturbáció számítással

A perturbációszámításhoz a Hamilton operátort két részre bontom fel:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} \tag{4.24}$$

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.

$$\hat{G}^{-1}\left(E\right) + E = \hat{G}_0^{-1}\left(E\right) + E + \hat{V} \tag{4.25}$$

$$\hat{G}\left(E\right)=\hat{G}_{0}\left(E\right)-\hat{G}_{0}\left(E\right)\hat{V}\hat{G}\left(E\right) \tag{4.26}$$

Az alábbi módon definiálva $\hat{G}_n\left(E\right)$ operátort, a 4.26. egyenlethez hasonló rekurziós összefüggés áll fent:

$$\hat{G}_{n}\left(E\right)=\hat{G}_{0}\left(E\right)\sum_{k=0}^{n}\left(-\hat{V}\hat{G}_{0}\left(E\right)\right)^{k} \tag{4.27}$$

$$\hat{G}_{n+1}\left(E\right)=\hat{G}_{0}\left(E\right)-\hat{G}_{0}\left(E\right)\hat{V}\hat{G}_{n}\left(E\right) \tag{4.28}$$

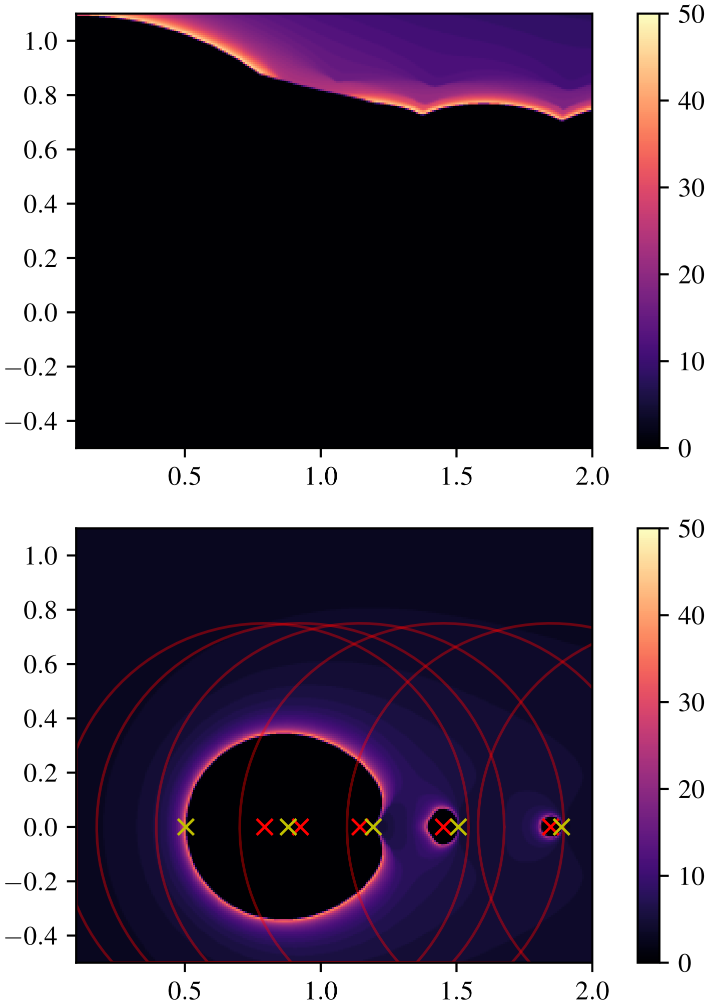
Ha $\left\|\hat{V}\hat{G}_0\left(E\right)\right\| < 1$ akkor a $\hat{G}_n$ sorozat konvergál, és kielégíti a 4.26. egyenletet. Ezért konvergencia esetén:

$$\hat{G}\left(E\right)=\hat{G}_{0}\left(E\right)\sum_{n=0}^{\infty}\left(-\hat{V}\hat{G}_{0}\left(E\right)\right)^{n} \tag{4.29}$$

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 4.13-4.16, 4.7. és a 4.8. egyenletek alapján határozom meg.

$$G_{0}\left(x,y;E\right)=\begin{cases}-\frac{2m}{k\hbar^{2}}\frac{1}{\sin(kL)}\sin\left(k\left(y-L\right)\right)\sin\left(kx\right) & x\leq y\\ -\frac{2m}{k\hbar^{2}}\frac{1}{\sin(kL)}\sin\left(k\left(x-L\right)\right)\sin\left(ky\right) & x>y\end{cases} \tag{4.30}$$

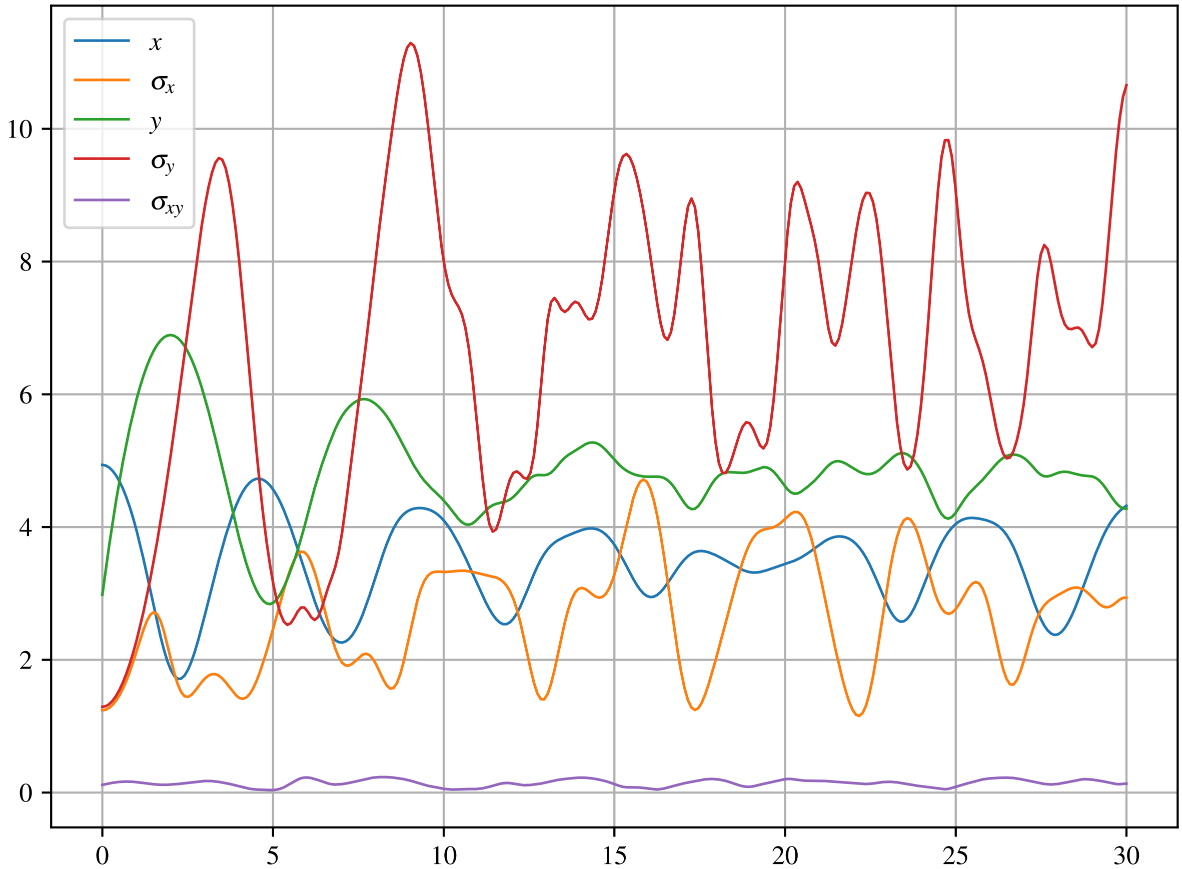
, ahol $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$.




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.

# 5. Numerikus számítások

## 5.1. Momentumok időfejlődése




5.1. ábra. Várható értékek és szórások időfejlődése

## 5.2. Hullámfüggvény időfejlődése

### 5.2.1. 1D

### 5.2.2. 2D

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

$$\mathrm{Ti}\sqrt[3]{\frac{2mF}{\hbar^2}}L - \sqrt[3]{\frac{2m}{\hbar^2 F^2}}FL - \mathrm{Ti}{-}\sqrt[3]{\frac{2m}{\hbar^2 F^2}}FL = 0 \tag{5.1}$$

, azaz

$$\mathrm{Ai}-\sqrt[3]{\frac{2mF}{\hbar^2}}L = 0 \tag{5.2}$$

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

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

# 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] *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.