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.

Tartalomjegyzék

Ábrák jegyzéke

Táblázatok jegyzéke

1. Bevezetés

Probléma leírása

nem méréselmélet, gyakorlati jelentőség, eddigi tárgyalások, Bi hiánya

Airy függvények

egyéb helyen felbukkan a fizikában

Szemiklasszika

gyakorlati jelentősége, kvantummechanika klasszikus mechanika közötti pedagógiai kapcsolat

Green-függvények

gyakorlati jelentőség, perturbáció megválasztható

Schrödinger-egyenlet animáció

kóddal vizualizáció

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

$$\psi_{klm}(x,y,z,t) = e^{-\frac{iE_{klm}}{\hbar}t}\psi_k^{(1)}(x)\psi_l^{(2)}(y)\psi_m^{(3)}(z) \tag{2.2}$$

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

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_k^{(i)}(x_i)}{dx_i^2} + F_i x_i \psi_k^{(i)}(x) = E_k^{(i)}\psi_k^{(i)}(x_i), \tag{2.3}$$

a határfeltételek $\psi_k^{(i)}\Big|_{x_i=0} = \psi_k^{(i)}\Big|_{x_i=L_i} = 0$. Az E_{klm} energia a három egy dimenziós stacionárius Schrödinger-egyenlet sajátenergiáinak összege,

$$E_{klm} = E_k^{(1)} + E_l^{(2)} + E_m^{(3)}. \tag{2.4}$$

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.

$$N_k^{(i)} = \int_0^{L_i} dx_i \left|\psi_k^{(i)}(x_i)\right|^2. \tag{2.9}$$

A továbbiakban az egy dimenziós probléma részleteit vizsgáljuk.

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.

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

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 $\nu^2 = \frac{1}{9}$.

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

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

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

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

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

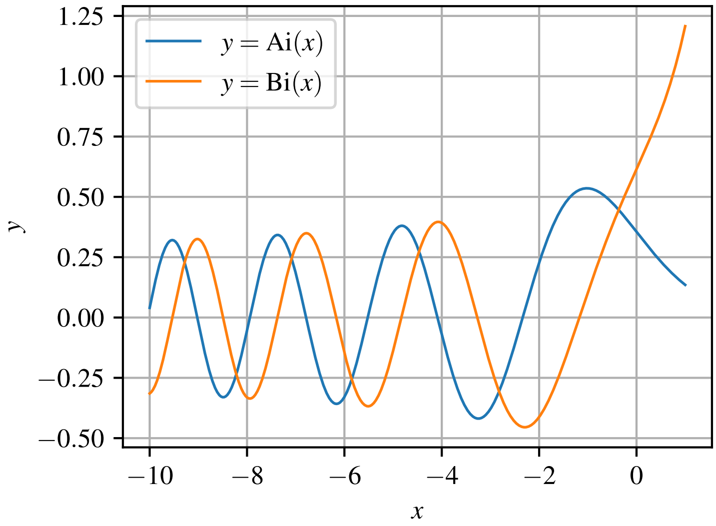
$$\mathrm{Ti}(x) = \frac{\mathrm{Ai}(x)}{\mathrm{Bi}(x)} \tag{2.22}$$

függvényt.

Az $x \to \infty$ aszimptotikus alakok megkaphatóak a Bessel-függvények aszimptotikus alakjából:

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

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



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

$$\mathrm{Ai}(x) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}x^{1/4}} e^{-\frac{2}{3}x^{\frac{3}{2}}} + \mathcal{O}\left(x^{-5/4}\right), \tag{2.25}$$

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

A $\mathrm{Ti}(x)$ definíciójába behelyettesítve (2.23) és (2.24) egyenleteket,

$$\mathrm{Ti}\left(-x\right) = -\cot\left(\frac{2}{3}x^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right) + \mathcal{O}\left(x^{-5/4}\right). \tag{2.27}$$

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

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

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

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

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

Az egy dimenziós időfüggetlen Schrödinger-egyenlet megoldása

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

melyet a határfeltételekhez kell illeszteni,

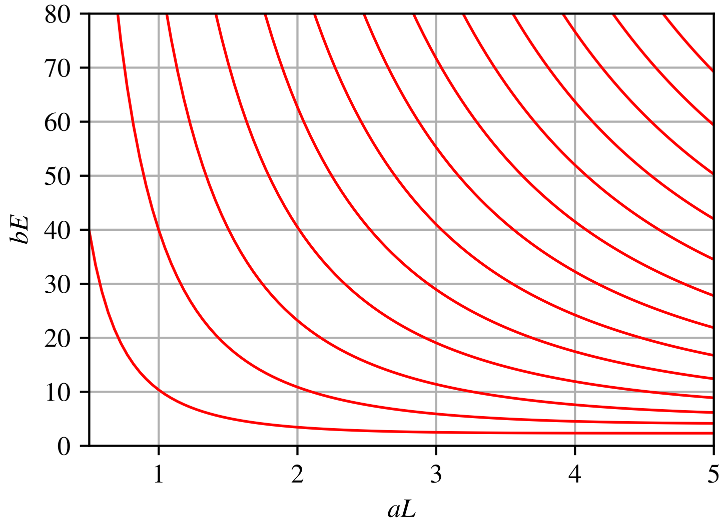
$$\psi(0) = \psi(L) = 0. \tag{2.37}$$

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

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

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

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



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.

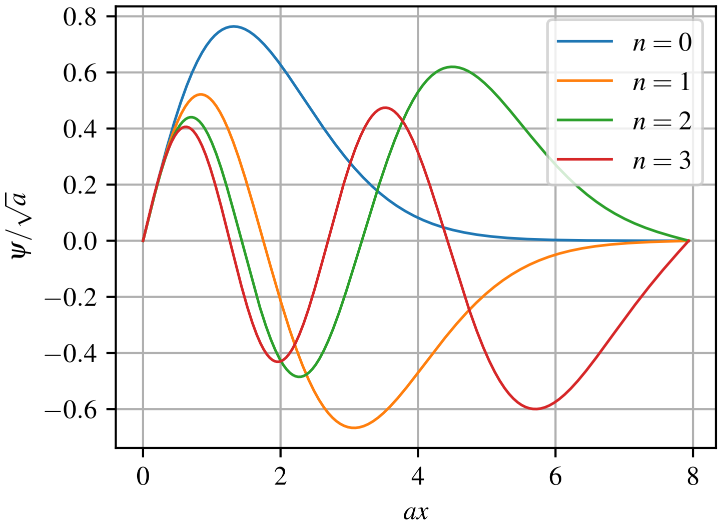
Amikor $FL \ll \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}$, a potenciál jól közelíthető konstans potenciállal, mivel az alapállapot energiájához képest is elhanyagolható a lineáris potenciál eltérése a konstans potenciáltól. Eben a esetben $E \propto n^2$. $E \ll FL$ esetben az energiaszintek jó közelítéssel konstanssá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

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

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,

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

A ψ_k-t tartalmazó tagok kiesnek a határokon, mert a határfeltételeknek megfelelően $\psi_k = 0$ $x = 0$ és $x = L$-ben. A maradék tag $x = 0$-beli értéke $\frac{1}{\pi^2}$ az Airy-függvények Wronski-determinánsa (2.30) miatt. A 2.3. ábra az első néhány sajátállapotot szemlélteti, 1-re normálva az N_k 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 $N = \sqrt{ab} = \sqrt[3]{\frac{2m}{\hbar^2 \sqrt{F}}}$, 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. Az Airy-függény Fourier transzformáltja

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{Ai}(x) e^{-ikx}\, dx = e^{ik^3/3}. \tag{2.48}$$

Ez azt jelenti, hogy az impulzus térben a hullámfüggvény

$$\psi_E(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi F\hbar}} \exp\left(i\left(\frac{1}{3}\left(\frac{p}{a\hbar}\right)^3 - \frac{pE}{F\hbar}\right)\right), \tag{2.49}$$

$$|\psi_E(p)|^2 = \frac{1}{2\pi F\hbar}. \tag{2.50}$$

Az impulzus hullámfüggvény amplitúdója nem függ az impulzustól! Ez nem meglepő, mert a klasszikus esetben az impulzus időfejlődése

$$p(t) = -Ft + p_0, \tag{2.51}$$

tehát minden részecske egy kis dp tartományban dp/F időt tölt, adott impulzushoz tartozó részecskesűrűség értéke független az impulzustól. Ennek a klasszikus fizika beli megállapításnak a megfelelője, hogy $|\psi_E(p)|^2$ p-től független.

3. Szemiklasszikus közelítés

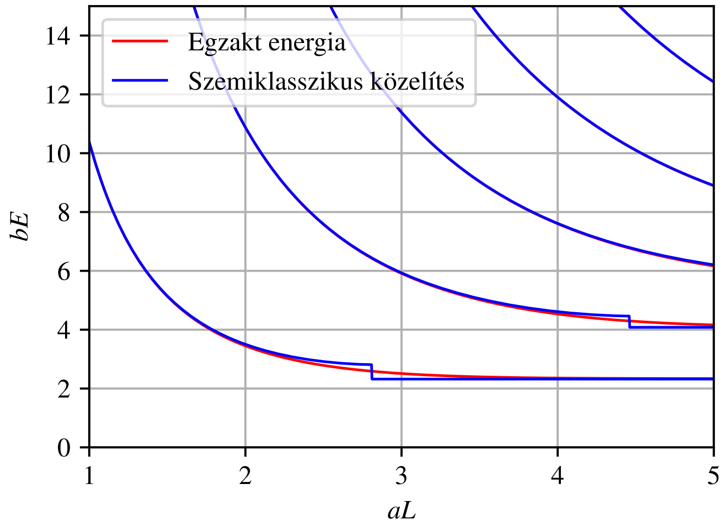
3.1. Szemiklasszikus energiaszintek

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,

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

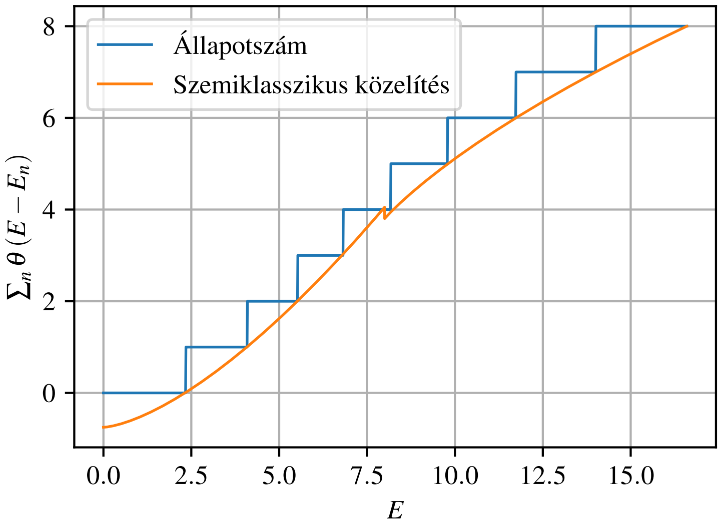
A második eset amikor $E > FL$, ekkor a fordulópontok 0-ban és L-ben vannak, és a Maslov index 1. Mind az $x = 0$, mind az $x = L$ fordulópontban $\frac{\pi}{2}$ fázis vesz fel a szemiklasszikus hullámfüggvény,

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



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.

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 az E-L diagrammon szemlélteti a szemiklasszikus köelítés pontosságát. Két különböző esetben is pontos a szemiklasszikus közelítés. Nagy kvantumszámok esetében általánosságban is igaz, hogy pontos a szemiklasszikus közelítés. Ezen felül $E \gg FL$ esetében is pontos, ennek oka, hogy ilyenkor a lineáris potenciál elhanyagolható, viszont az így kapott problémát, a végtelen potenciálgödröt, a szemiklasszikus közelítés egzaktul írja le. A 3.2. ábra szemlélteti a szemiklasszikus és egzakt állapotszámok viszonyát. A szemiklasszikus energiaszintekre vonatkozó egyenleteket minden esetben kézenfekvő az állapotok számának meghatározására használni, hiszen az egyenlet alapból n-re van rendezve a Maslov-indextől eltekintve.



3.2. 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.

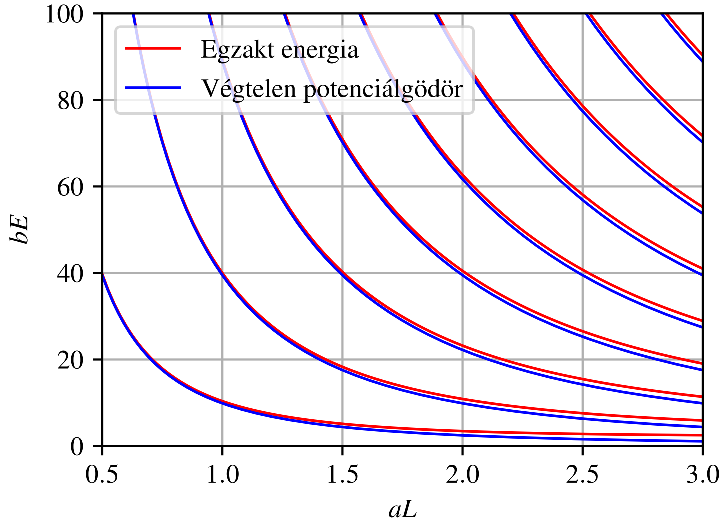
Amennyiben $E \gg FL$ a (3.2) egyenleten a különbség az $E^{3/2}$ függvény deriváltjának segítségével helyettesíthető,

$$(n+1)h \approx FL\frac{d}{dE}\left(\frac{4\sqrt{2m}}{3F}E^{3/2}\right) = 2\sqrt{2m}E^{1/2}L. \tag{3.3}$$

Átrendezve az egyenletet energiára a megszokott végtelen potenciálgödör energiaszintjeit kapjuk,

$$E_n \approx \frac{(n+1)^2h^2}{8mL^2}. \tag{3.4}$$

Ezeket az energiaszinteket a 3.3. ábra összeveti az E-L diagrammon az egzakt energiaszintekkel.



3.3. 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.

3.2. Összehasonlítás az egzakt eredménnyel

A (2.39) egyenletet nagy bE illetve nagy $bE - aL$ esetén a (2.27) közelítés alkalmazható,

$$\cot\left(\frac{2}{3}(bE - aL)^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right) - \cot\left(\frac{2}{3}(bE)^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right) = 0. \tag{3.5}$$

A $\cot(x)$ függvény π-ben periodikus. Mivel a $(0, \pi)$ intervallumban szigorúan monoton csökken, a (3.5) egyenletnek csak akkor van megoldása, ha a $\cot(x)$ függvények argumentumainak különbsége $n\pi$. Azaz

$$\frac{2}{3}(bE)^{3/2} - \frac{2}{3}(bE - aL)^{3/2} = n\pi. \tag{3.6}$$

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 (3.5) 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,

$$\frac{dx}{v} = \sqrt{-\frac{m}{2Fx}}dx \propto |\psi(x)|^2 dx, \tag{3.7}$$

a klasszikus mechanikából ismert energia megmaradás szerint. Átrendezve

$$\psi(x) \propto \frac{1}{\sqrt[4]{-x}}. \tag{3.8}$$

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,

$$\psi(x) \propto \exp\left(\pm i \int_{x_0}^{x} k\left(x'\right)\, dx'\right), \tag{3.9}$$

Attól függően, hogy a részecske $+x$ vagy $-x$ irányban halad. A klasszikus energia megmaradás meghatározza az impulzust, ami alapján a de Broglie hullámszám

$$k = \frac{\sqrt{2mF}}{\hbar}\sqrt{-x}. \tag{3.10}$$

A k integrálja könnyen kiszámítható,

$$\int \frac{\sqrt{2mF}}{\hbar} \sqrt{-x}\, dx = \frac{2}{3} \left(-ax\right)^{3/2} . \tag{3.11}$$

A részecskeáram klasszikusan mindenhol 0, ebben a potenciálban minden részecske visszaesik. Ez a feltétel ekvivalens azzal a feltétellel, hogy ψ valós, azaz a (3.9) egyenletnek csak bizonyos kombinációi léphetnek fel. Ezt írja le az exponenciális függvény helyettesítése a szinusz függvénnyel, és a ϕ_0 fázistolás,

$$\psi(x) \propto \mathrm{Ai}(ax) \approx \frac{1}{\sqrt[4]{-ax}} \sin\left(\frac{2}{3}\left(-ax\right)^{3/2} + \phi_0\right) . \tag{3.12}$$

Ez az egyenlet kombinálja a fázisra és az amplitúdóra vonatkozó feltételeket, és egyezik a (2.23) és a (2.24) aszimptotikus alakokkal.

Pozitív x esetén a kinetikus energia negatív lenne, ami formálisan képzetes de Broglie hullámhossznak felel meg. Ezen formális összefüggés alapján az aszimptotikus alak polinomiális részét leszámítva az aszimptotikus alakok

$$\mathrm{Ai}(x) \approx \exp\left(-\frac{2}{3}x^{3/2}\right) , \tag{3.13}$$

$$\mathrm{Bi}(x) \approx \exp\left(\frac{2}{3}x^{3/2}\right) . \tag{3.14}$$

A polinomiális részt leszámítva ez egyezik a (2.25) és a (2.26) egyenletekkel.

4. Homogén tér Green-függvénye

A Green-függvény a szilárdtest fizika egyik legtöbbet használt eszköze. A mérhető és egyéb jelentős egyensúlyi mennyiségek gyakran egyszerűen kifejezhetőek a Green-függvénnyel, mint például a (lokális) állapotsűrűség, imaginárius idő használatával pedig termodinamikai mennyiségek: egy részecske operátorok egyensúlyi várható értéke, bizonyos esetekben még két részecske operátorok várható értéke is.

A frekvenciatér beli Green-függvény a Hamilton operátor rezolvenseként definiálható. A rezolvens, avagy a Green operátor

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

és ezen operátorhoz tartozó magfüggvény, a Green függvény

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

A projektor felbontással rendelkező operátorok függvényei felírhatóak összeg alakban is, ez a Green-operátor esetében

$$\hat{G}(E) = \sum_n \frac{|n\rangle \langle n|}{E - E_n}. \tag{4.3}$$

Több féle időfüggő Green-függvény van, ezek mind az időfüggő Schrödinger-egyenlet differenciálegyenletek elméletéből ismert Green-függvények, csupán a határfeltételekben különböznek. Amennyiben a Hamilton-operátor időfüggetlen,

$$G(x, y, t) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dE\, G(x, y; E) e^{-\frac{i}{\hbar} Et}. \tag{4.4}$$

Mivel $G(x, y; E)$-nek valós E mentén pólusai vannak, az integrál elvégzéséhez további előírásokra van szükség. A pólusok kerülési iránya határozza meg, hogy retardált vagy avanzsált Green-függvényt kapunk. A pólusok kerülési irányában különböző Green-függvények közötti különbség előállíthatóak a $\hat{G}(E)e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$ pólusai körül vett komplex E kontúrintegrálokkal. Ezen kontúrintegráloknak az eredménye a reziduumtétel szerint viszont nem más, mint a hullámfüggvénynek a pólushoz tartozó sajátállapotra vett projekciójának időfejlesztő operátora,

$$\frac{1}{2\pi\hbar i} \oint_{C_n} \hat{G}(E) e^{-\frac{i}{\hbar}Et} = |n\rangle \langle n| \, e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}, \tag{4.5}$$

ahol C_n pozitív irányítású ϵ sugarú kör az n. pólus, azaz az n. sajátenergia körül. Ez tetszőleges állapotra hattatva megoldja az időfüggő Schrödinger-egyenletet, ezért lehet különböző kerülési irányokkal előírt Fourier szerű integrál időfüggő Green-függvény.

A retardált Green függvény kontúrra a pólusokat felülről, a pozitív képzetes résszel rendelkező irányban kerüli meg. Másképpen fogalmazva a kontúr a valós tengely, viszont a sajátenergiákat módosítva kell elvégezni az integrált, $E_n \to E_n - i\epsilon$, majd a számítás végén az $\epsilon \to 0^+$ határesetet venni. Ez fizikailag annak felel meg, hogy a sajátállapotoknak van időbeli lecsengése, ϵ időállandóval.

$$G_R(x, y, t) = \frac{1}{2\pi\hbar} \lim_{\epsilon \to 0^+} \int_{-\infty}^{\infty} dE\, G(x, y; E + i\epsilon) e^{-\frac{i}{\hbar}Et}, \tag{4.6}$$

ez a típusú Green-függvény a múltban 0 az időbeli lecsengés miatt. Egy másik nevezetes Green-függvény az avanzsált Green-függvény,

$$G_A(x, y, t) = \frac{1}{2\pi\hbar} \lim_{\epsilon \to 0^+} \int_{-\infty}^{\infty} dE\, G(x, y; E - i\epsilon) e^{-\frac{i}{\hbar}Et}, \tag{4.7}$$

ez a Green-függvény az előzőhöz hasonló logika alapján $t > 0$ esetén 0. A (4.5) egyenlet alapján e két Green-függvény különbsége előállítja az időfejlesztő operátor magját,

$$\hat{G}_A(t) - \hat{G}_R(t) = \sum_n \frac{1}{2\pi\hbar} \oint_{C_n} \hat{G}(E) e^{-\frac{i}{\hbar}Et} = i \sum_n |n\rangle \langle n| \, e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} = i\hat{U}(t). \tag{4.8}$$

Ez a kontúrintegrál szummázás helyett egy kibővített kontúrral szerepel [6]-ban. A továbbiakban az egy dimenziós homogén tér Green-függvényével foglalkozunk.

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.

$$\left(E - \hat{H}\right) \hat{G}\left(E\right) = \hat{I}, \tag{4.9}$$

azaz

$$\int dx' \langle x| \left(E - \hat{H}\right) |x'\rangle \langle x'| \, \hat{G}\left(E\right) |y\rangle = \langle x| \, \hat{I} \, |y\rangle = \delta\left(x - y\right). \tag{4.10}$$

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

$$\left(E - \hat{H}_x\right) G\left(x, y; E\right) = \delta\left(x - y\right), \tag{4.11}$$

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

$$\left(E + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} - Fx\right) G\left(x, y; E\right) = \delta\left(x - y\right), \tag{4.12}$$

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 (4.12) egyenlet y körüli integrálásából kapott feltételek határozzák meg. A doboz falára vonatkozó határfeltételek

$$G\left(x, y; E\right)\big|_{x=0} = 0, \tag{4.13}$$

$$G\left(x, y; E\right)\big|_{x=L} = 0. \tag{4.14}$$

A 4.12. egyenlet x szerinti integrálja y körüli ϵ sugarú környezetében az $\epsilon \to 0^+$ határesetben

$$\lim_{\epsilon \to 0^+} \frac{\partial}{\partial x} G\left(x, y; E\right)\Big|_{x=y-\epsilon}^{x=y+\epsilon} = \frac{2m}{\hbar^2}. \tag{4.15}$$

Itt a jobb oldal integrálja $\theta\left(x-y\right)|_{x=y-\epsilon}^{x=y+\epsilon}=1$ az előírt határesetben. Mivel $G(x,y;E)$-ről feltesszük, hogy folytonos, a bal oldal integrálja is folytonos, leszámítva a deriváltakat tartalmazó tagokat. A határeset elvégzése közben a deriváltakat nem tartalmazó tagok így kiesnek. A 4.12. egyenlet $\int_{y-\epsilon}^{y+\epsilon}dx'\int_{y-\epsilon}^{x'}dx$ integrálja az $\epsilon\to 0^+$ határesetben

$$\lim_{\epsilon\to 0^+} G\left(x,y;E\right)|_{x=y-\epsilon}^{x=y+\epsilon}=0 \tag{4.16}$$

folytonossági feltételt adja. A jobb oldal integrálja $\left(x-y\right)\theta\left(x-y\right)|_{x=y-\epsilon}^{x=y+\epsilon}$, ami a határesetben 0. Az $\left(Fx-E\right)G\left(x,y;E\right)$ integrálja is 0 a határesetben, az előző integrálhoz hasonló módon.

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 (4.16) egyenletet. A tartomány peremén a homogén megoldás eltűnését megkövetelve a (4.13) és a (4.14) teljesül. Érdemes bevezetni a

$$u=ax-bE, v\ =ay-bE \tag{4.17}$$

jelöléseket. A fent leírt három kritériumot és szimmetria tulajdonságot teljesítő ansatz a

$$G\left(x,y;E\right)=C_0(E)\times\begin{cases}\Big(\mathrm{Ti}(aL-bE)\,\mathrm{Bi}(v)-\mathrm{Ai}(v)\Big)\times & \\ \quad\Big(\mathrm{Ti}(-bE)\,\mathrm{Bi}(u)-\mathrm{Ai}(u)\Big) & x\le y\\ \Big(\mathrm{Ti}(aL-bE)\,\mathrm{Bi}(u)-\mathrm{Ai}(u)\Big)\times & \\ \quad\Big(\mathrm{Ti}(-bE)\,\mathrm{Bi}(v)-\mathrm{Ai}(v)\Big) & x\ge y\end{cases}. \tag{4.18}$$

A $C_0(E)$ együtthatót úgy kell megválasztani, hogy a (4.15) egyenlet teljesüljön. A (4.15) egyenletbe behelyettesítve a (4.18) egyenlet, és osztva $C_0(E)$-vel,

$$\begin{aligned}\frac{1}{C_0(E)}\frac{2m}{\hbar^2}&=\frac{1}{C_0(E)}\lim_{\epsilon\to 0^+}\left.\frac{\partial G(x,y;E)}{\partial x}\right|_{x=y-\epsilon}^{x=y+\epsilon}\\ &=a\lim_{\epsilon\to 0^+}\Big(-\mathrm{Ti}(aL-bE)\,\mathrm{Bi}'(u)\,\mathrm{Ai}(v)-\mathrm{Ti}(-bE)\,\mathrm{Ai}'(u)\,\mathrm{Bi}(v)\\ &\qquad+\mathrm{Ti}(aL-bE)\,\mathrm{Bi}(v)\,\mathrm{Ai}'(u)+\mathrm{Ti}(-bE)\,\mathrm{Ai}(v)\,\mathrm{Bi}'(u)\Big)\\ &=a\Big(\mathrm{Ti}(-bE)-\mathrm{Ti}(aL-bE)\Big)\Big(\mathrm{Ai}(v)\,\mathrm{Bi}'(v)-\mathrm{Ai}'(v)\,\mathrm{Bi}(v)\Big)\\ &=a\frac{\mathrm{Ti}(-bE)-\mathrm{Ti}(aL-bE)}{\pi}.\end{aligned} \tag{4.19}$$

A második egyenlőségnél kihasználtuk, hogy a $\mathrm{Bi}(v)\,\mathrm{Bi}'(u)$-t és $\mathrm{Ai}(v)\,\mathrm{Ai}'(u)$-t tartalmazó tagok kiesnek. A harmadik egyenlőségnél a határérérték kiértékelhető, az $\epsilon\to 0^+$

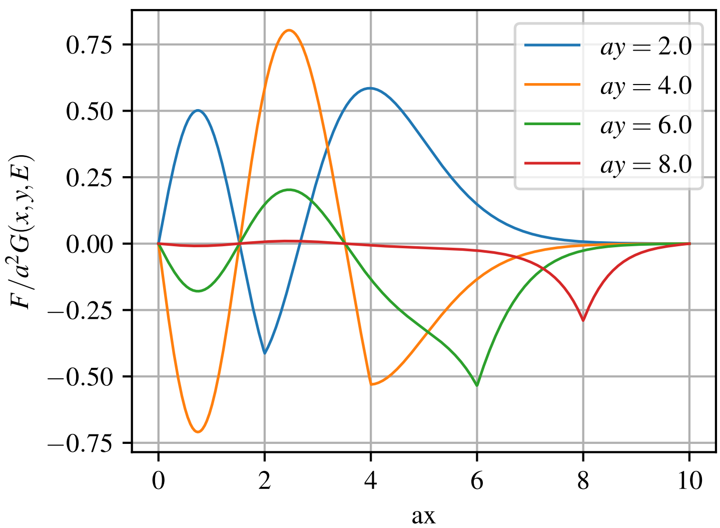
határesetben $u \to v$, így szorzat alakba írható az összeg. Végül a negyedik sorban a Wronski-determinánst használtuk fel, (2.30) egyenletnek megfelelően. Az a definíciója szerint $\frac{2m}{\hbar^2} = \frac{a^3}{F}$, így (4.19) átrendezésével

$$C_0(E) = \frac{a^2}{F} \frac{\pi}{\mathrm{Ti}(-bE) - \mathrm{Ti}(aL - bE)}. \tag{4.20}$$

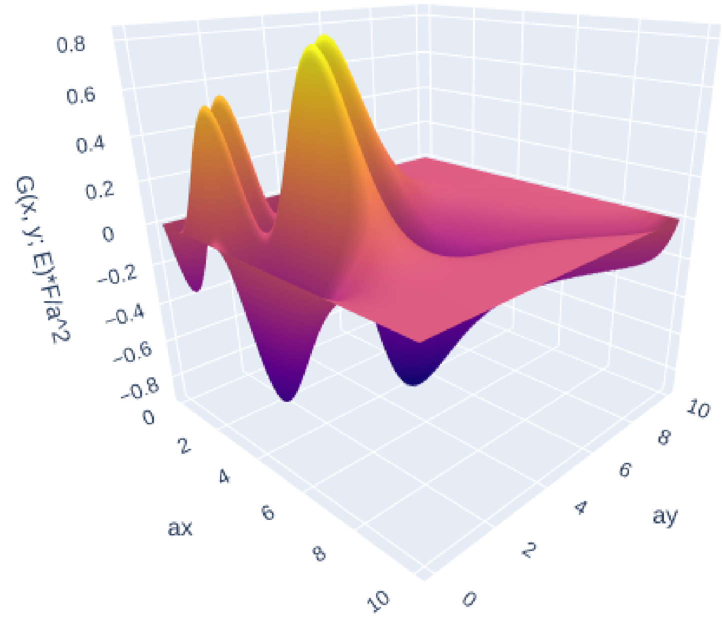
Összesítve az eredményeket, a rendszer energiafüggő Green-függvénye

$$G(x, y; E) = \frac{a^2}{F} \frac{\pi}{\mathrm{Ti}(-bE) - \mathrm{Ti}(aL - bE)} \times \begin{cases} \Big(\mathrm{Ti}(aL - bE)\,\mathrm{Bi}(v) - \mathrm{Ai}(v)\Big)\times \\ \qquad \Big(\mathrm{Ti}(-bE)\,\mathrm{Bi}(u) - \mathrm{Ai}(u)\Big) & x \leq y \\ \Big(\mathrm{Ti}(aL - bE)\,\mathrm{Bi}(u) - \mathrm{Ai}(u)\Big)\times \\ \qquad \Big(\mathrm{Ti}(-bE)\,\mathrm{Bi}(v) - \mathrm{Ai}(v)\Big) & x \geq y \end{cases} \tag{4.21}$$

A 4.1. és a 4.2. ábra a (4.21) Green-függvényt ábrázolja. A doboz mérete $aL = 10$, és az energia, ahol a Green-függvény ki van értékelve $bE = 5$.



4.1. ábra.



4.2. ábra.

A (4.3) egyenletnek megfelelően a Green-függvénynek pólusai vannak $E = E_n$-ben. Ezt a (4.21) egyértelmen mutatja, mivel a nevezőjében a (2.39) 0-ra rendezett egyenlet bal oldala szerepel. Ennek az egyenletnek a gykei határozták meg az E_k sajátenergiákat.

Egy érdekes matematikai következmény, hogy a Green-függvényre vonatkozó differenciál egyenlet megoldásával elvégeztük a 4.3. egyenlet összegzését. Ez az összeg az Airy függvények szorzatának összege lenne, osztva $E - E_k$-val és a megfelelő N_k normálási faktorral ahol E_k-t a (2.39) transzcendens egyenlet határoz meg. A Green-függvényre vonatkozó differenciálegyenlet ismerete nélkül az összeg elvégzése reménytelennek látszana.

4.2. Green-függvény határesetei

A két falú doboz Green-függvényéből megfelelő határesetekben előállítható más fizikai rendszerek Green-függvénye is. Például az $L \to \infty$ határeset visszaadja a felül nyitott doboz Green-függvényét, avagy a földön pattogó kvantum részecske ("quantum bouncer") Green-függvényét. Egy következő transzformáció határeseteként megkaphatjuk a falak nélküli végtelen lineáris potenciálban mozgó részecske Green-függvényét. Ehhez mind a helykoordinátát, mind az energiát meg kell változtatni: $x \to x' = x + d$, $y \to y\prime = y + d$ és $E \to E' = E + Fd$, végül a $d \to \infty$ határesetet kell venni.

Az $L \to \infty$ határeset könnyen elvégezhető. A (2.25) és a (2.26) egyenletek szerint $\mathrm{Ti}(aL - bE)$ gyorsan 0-hoz tart. Ezt az eredményt felhasználva az $x = 0$-ban fallal bezárt részecske Green-függvénye $= Fx$ potenciálban

$$G_{egyfal}(x, y; E) = -\frac{a^2}{F}\frac{\pi}{\mathrm{Ti}(-bE)} \times \begin{cases} \mathrm{Ai}(v)\Big(\mathrm{Ti}(-bE)\,\mathrm{Bi}(u) - \mathrm{Ai}(u)\Big) & x \leq y \\ \mathrm{Ai}(u)\Big(\mathrm{Ti}(-bE)\,\mathrm{Bi}(v) - \mathrm{Ai}(v)\Big) & x \geq y \end{cases}. \tag{4.22}$$

A következő határesetet valamivel nehezebb kiszámítani. Ezt előre lehet sejteni, mert az eddigi Green-függvények olyan rendszereket írtak le, ahol minden állapot kötött állapot. A falak nélküli lineáris potenciálhoz nem tartoznak kötött állapotok, csak szórásállapotok vannak. Ez a változás megmutatkozik a Green-függvény pólusszerkezetében, utalva arra, hogy ez a határeset jelentősen megváltoztatja a Green-függvényt matematikai értelemben is. A feljebb említett átmenet,

$$\begin{aligned} x' &= x + d \\ y' &= y + d \\ E' &= E + Fd \\ d &\to \infty \end{aligned}. \tag{4.23}$$

E az átmenet eltolja a helykoordinátát, miközben a részecske kinetikus energiáját, változatlanul tartja. Az u v változók értéke (4.17) egyenlet szerint változatlan marad, a $d \to \infty$ határérték nem változtatja az alakjukat. Mivel a falak nélküli rendszernek az egész valós energiatengely a spektruma, a Green-függvényt az $E' = E + Fd \pm i\epsilon$ energiában vizsgáljuk, a $\mathrm{Ti}(-bE')$ viselkedését kell meghatározni nagy E' esetén. Felhasználva a (2.27) egyenletet

$$
\begin{aligned}
\mathrm{Ti}(-x-i\epsilon) &\approx -\frac{\cos\left(\frac{2}{3}(x+i\epsilon)^{3/2}-\frac{\pi}{4}\right)}{\sin\left((x+i\epsilon)^{3/2}-\frac{\pi}{4}\right)} \\
&\approx -\frac{\cos\left(\frac{2}{3}x^{3/2}+i\sqrt{x}\epsilon-\frac{\pi}{4}\right)}{\sin\left(\frac{2}{3}x^{3/2}+i\sqrt{x}\epsilon-\frac{\pi}{4}\right)} \\
&= -\frac{\cos\left(\frac{2}{3}x^{3/2}-\frac{\pi}{4}\right)\cosh\left(\sqrt{x}\epsilon\right)-i\sin\left(\frac{2}{3}x^{3/2}-\frac{\pi}{4}\right)\sinh\left(\sqrt{x}\epsilon\right)}{\sin\left(\frac{2}{3}x^{3/2}-\frac{\pi}{4}\right)\cosh\left(\sqrt{x}\epsilon\right)+i\cos\left(\frac{2}{3}x^{3/2}-\frac{\pi}{4}\right)\sinh\left(\sqrt{x}\epsilon\right)} \\
&= -\frac{\cos\left(\frac{2}{3}x^{3/2}-\frac{\pi}{4}\right)-i\sin\left(\frac{2}{3}x^{3/2}-\frac{\pi}{4}\right)\tanh\left(\sqrt{x}\epsilon\right)}{\sin\left(\frac{2}{3}x^{3/2}-\frac{\pi}{4}\right)+i\cos\left(\frac{2}{3}x^{3/2}-\frac{\pi}{4}\right)\tanh\left(\sqrt{x}\epsilon\right)} \\
&\approx -\frac{\cos\left(\frac{2}{3}x^{3/2}-\frac{\pi}{4}\right)-i\sin\left(\frac{2}{3}x^{3/2}-\frac{\pi}{4}\right)\mathrm{sgn}\left(\epsilon\right)}{\sin\left(\frac{2}{3}x^{3/2}-\frac{\pi}{4}\right)+i\cos\left(\frac{2}{3}x^{3/2}-\frac{\pi}{4}\right)\mathrm{sgn}\left(\epsilon\right)}.
\end{aligned}
\tag{4.24}
$$

A sorok közötti lépésekhez felhasználtuk a $(x+a)^\alpha \approx x^\alpha + \alpha x^{\alpha-1}a$ közelítést, a trigonometrikus addíciós képleteket, a képzetes argumentumú trigonometrikus függvények és hiperbolikus függvények kapcsolatát, valamint az előel függvény közelítését a tanh függvénnyel. Ezek a közelítések egzaktak az $x \to \infty$ határesetben, ezért

$$
\lim_{x\to\infty} \mathrm{Ti}(-x-i\epsilon) = \begin{cases} i & \epsilon > 0 \\ -i & \epsilon < 0 \end{cases}.
\tag{4.25}
$$

Ez az eredmény kellett ahhoz, hogy a (4.23) átmenet alapján meghatározzuk a fal nélküli lineáris $V = Fx$ potenciálhoz tartozó Green-függényt. Ha $\mathrm{Im}(E) > 0$

$$
\begin{aligned}
G_{nincsfal}(x,y;E) &= \lim_{d\to\infty} G_{egyfal}(x+d,y+d;E+Fd) \\
&= \frac{\pi a^2}{F} \times \begin{cases} \mathrm{Ai}(v)\Big(\mathrm{Bi}(u) - i\,\mathrm{Ai}(u)\Big) & x \le y \\ \mathrm{Ai}(u)\Big(\mathrm{Bi}(v) - i\,\mathrm{Ai}(v)\Big) & x \ge y \end{cases}.
\end{aligned}
\tag{4.26}
$$

Ha $\mathrm{Im}(E) < 0$, akkor a (4.25) egyenlet $-i$ a limeszben, így

$$
\begin{aligned}
G_{nincsfal}(x,y;E) &= \lim_{d\to\infty} G_{egyfal}(x+d,y+d;E+Fd) \\
&= \frac{\pi a^2}{F} \times \begin{cases} \mathrm{Ai}(v)\Big(\mathrm{Bi}(u) + i\,\mathrm{Ai}(u)\Big) & x \le y \\ \mathrm{Ai}(u)\Big(\mathrm{Bi}(v) + i\,\mathrm{Ai}(v)\Big) & x \ge y \end{cases},
\end{aligned}
\tag{4.27}
$$

ez a kifejezés csak az i előjelében különbözik az előzőtől. Az egész valós tengely mentén ugrása van ennek a Green-függvénynek a képzetes részének. Ez egybevág azzal a korábbi eredménnyel hogy tetszőleges energiájú sajátállapotai lehetnek a fal nélküli rendszernek, mert a Green-függvénynek vágása van a folytonos spektrumhoz tartozó energiák mentén.

4.3. Állapotsűrűség

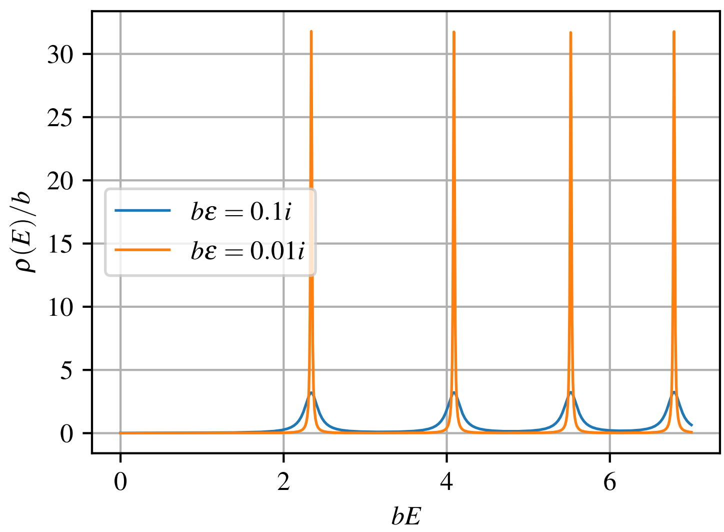
Ahogy azt a Green-függvények bevezetésénél említettük, alkalmasak a (lokális) állapotsűrűség meghatározására [7, 7. o.],

$$\rho\left(E\right) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\epsilon \to 0^+} \operatorname{Im} \operatorname{Tr} \hat{G}\left(E + i\epsilon\right), \tag{4.28}$$

$$\rho(x, E) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\epsilon \to 0^+} \operatorname{Im} G(x, x, E + i\epsilon). \tag{4.29}$$

$\rho(E)\, dE$ az állapotok száma egy dE energiatartományban, az állapotsűrűség. $\rho(x, E)\, dE\, dx$ pedig a megtalálási valószínűséggel súlyozott állapotok száma dx intervallumban dE energiatartományban, az úgynevezett lokális állapotsűrűség.

Ezeket a formulákat numerikus módon közelítőleg ki lehet értékelni kicsi, de véges ϵ választásával, ezt szemlélteti a 4.3. ábra.



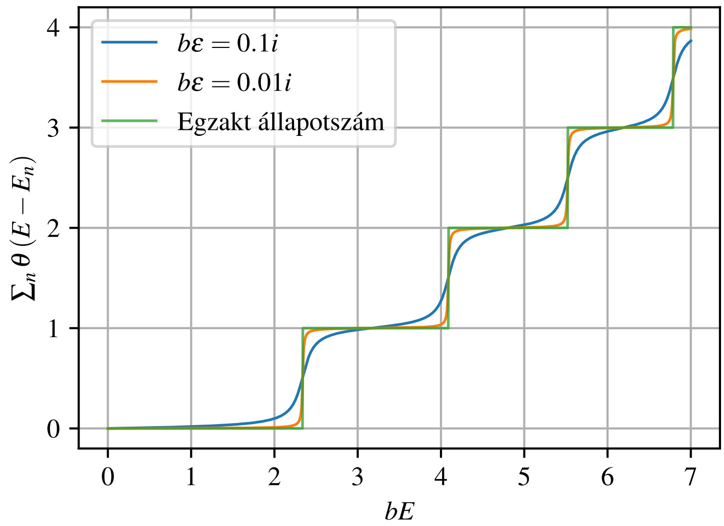
4.3. ábra. A 4.28. képlet alapján számolt állapotsűrűség. A kék függvényt $\epsilon = 10^{-3}/b$, a narancssárga görbét pedig $\epsilon = 10^{-2}/b$ helyettesítéssel kaptuk. Látható, hogy ϵ csökkentésével a tüskék egyre keskenyebbek, és egyre magasabbak lesznek.

Ennek a közelítésnek egy jó tulajdonsága, hogy a formula származtatásához a jól ismert

$$\frac{1}{x \pm i\epsilon} = \frac{1}{x} \mp i\pi\delta(x) \tag{4.30}$$

formulát lehet használni. Ennek a formulának a levezetése során a $\delta(x)$ állandó területű, de egyre szűkebb Lorentz-görbék határértékeként bukkan fel. Ez azt jelenti, hogy véges ϵ

esetén is a sajátenergiákhoz tartozó csúcsok alatti terület változatlan, az állapotsűrűség E szerinti integrálja nagy E-k és véges ϵ esetén is pontos marad.



4.4. ábra. A 4.3. ábrán bemutatott függvények integrálja látható ezen az ábrán. Mind a két függvény ugrása közelítőleg 1, ami at jelenti, hogy a 4.3. ábrán látható tüskék alatti terület jó közelítéssel 1. Az ϵ csökkentése a lépcsőfüggvényhez közelíti az integrált függvényt, ami egyezik az elvárásokkal.

A (4.22) Green-függvényhez tartozó állapotsűrűség kvalitatíve nem különbözik az előző számítás menetétől és eredményétől, hiszen az előzőhöz hasonlóan csak diszkrét sajátenergiák vannak, ezeknek csupán az értékük különböző.

Más a helyzet a (4.26), (4.27) Green-függvénnyel. Itt csak folytonos spektrumba tartozó sajátenergiák vannak, mind szórásállapotokhoz tartoznak. Ebben az esetben csak a lokális állapotsűrűséget lehet értelmezni, hiszen a sajátállapotok négyzetének integrálja végtelen, csak Dirac-deltára normálhatóak. A (4.29) egyenletnek megfelelően a határérték kiszámításához a pozitív képzetes részre vonatkozó (4.26) kifejezést kell használni,

$$\begin{aligned}\rho(x,E) &= -\frac{1}{\pi}\lim_{\epsilon\to 0^+}\operatorname{Im}\left\{\frac{a^2\pi}{F}\operatorname{Ai}(ax-b(E+i\epsilon))\Big(\operatorname{Bi}(ax-b(E+i\epsilon))-i\operatorname{Ai}(ax-b(E+i\epsilon))\Big)\right\}\\ &= \frac{a^2}{F}\operatorname{Ai}^2(ax-bE).\end{aligned} \tag{4.31}$$

Nem meglepő módon ez az E energiájú sajátállapot abszolútérték négyzete (2.46). A nomálási faktor is egyezik, hiszen $\frac{a^2}{F} = ab$.

4.4. Perturbációszámítás

A perturbációszámítás a Green-függvény egyik legjelentősebb alkalmazása. Ebben a részben a Green-függvény perturációs sorának a konvergencia tulajdonságait vizsgáljuk. A konvergencia tartományát és sebességét befolyásolja a perturbáló operátor triviális módosítása, konkrétan a vizsgált példában az $\frac{FL}{2}\hat{I}$ operátort a perturbáló tagból levonjuk és a perturálatlan operátorhoz hozzáadjuk. Ezzel a teljes Hamilton operátor nem változik, de a perturbációs sor konvergenciája igen.

A perturbációszámításhoz a Hamilton operátort két részre bontjuk,

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}. \tag{4.32}$$

A $\hat{H}_0$ operátorhoz tartozó rezolvens operátor $\hat{G}_0\left(E\right)$. Mind $\hat{H}$ és mind $\hat{H}_0$ kifejezhetőek a rezolvenseikkel, ha ezeket behelyettesítjük a fenti egyenletbe, implicit egyenletet kapunk $\hat{G}\left(E\right)$-re nézve,

$$-\hat{G}^{-1}\left(E\right) - E = -\hat{G}_0^{-1}\left(E\right) - E + \hat{V}. \tag{4.33}$$

Ezt kisebb átalakítások után fel lehet használni perturbációszámításra. Az egyenletet balról $\hat{G}_0\left(E\right)$-vel, jobbról $\hat{G}\left(E\right)$-vel szorozzuk, így

$$\hat{G}\left(E\right) = \hat{G}_0\left(E\right) + \hat{G}_0\left(E\right)\hat{V}\hat{G}\left(E\right) \tag{4.34}$$

eredményhez jutunk. Megfelelően definiálva $\hat{G}_n\left(E\right)$ operátorokat,

$$\hat{G}_n\left(E\right) = \hat{G}_0\left(E\right)\sum_{k=0}^{n}\left(\hat{V}\hat{G}_0\left(E\right)\right)^k, \tag{4.35}$$

a $\hat{G}_n$-ekre a (4.34) egyenlethez hasonló rekurziós összefüggés áll fent,

$$\hat{G}_{n+1}\left(E\right) = \hat{G}_0\left(E\right) + \hat{G}_0\left(E\right)\hat{V}\hat{G}_n\left(E\right). \tag{4.36}$$

Ha $\left\|\hat{V}\hat{G}_0\left(E\right)\right\| < 1$ akkor a $\hat{G}_n$ sorozat konvergál. Operátor normának a Hilbert-tér normája által indukált normát vesszük, így az operátorok konvergenciája kompatibilis a Hilbert-tér beli konvergenciával.

$$\left\|\hat{A}\right\| = \sup\left\{\sqrt{\left\langle\phi\,\middle|\,\hat{A}^\dagger\hat{A}\,\middle|\,\phi\right\rangle},\ \text{ahol}\ \langle\phi\,|\,\phi\rangle = 1\right\}. \tag{4.37}$$

A sor határértéke a (4.36) miatt kielégíti a (4.34) egyenletet. Így konvergencia esetén

$$\hat{G}\left(E\right) = \hat{G}_0\left(E\right)\sum_{n=0}^{\infty}\left(\hat{V}\hat{G}_0\left(E\right)\right)^n. \tag{4.38}$$

Ez azt jelenti, hogy ha egy operátornak van projektor felbontása, akkor a normája a legnagyobb sajátérték abszolút értéke lesz, vagy általános esetben a sajátértékek szuprémuma. Ez hasznos jelen esetben is, mivel így meg tudjuk határozni az $\hat{V} = a\hat{x} + b$ operátor normáját. Ennek az operátornak a sajátfüggvényei a $\delta(x - x_0)$ függvények, így a sajátértékek maximuma a $[0, L]$ tartományban

$$\left\| \hat{V} \right\| = \max(|b|, |aL + b|). \tag{4.39}$$

A (4.3) egyenlet alapján $\hat{G}(E)$ normája is meghatározható, az összeg nevezői közül kiválasztva a legkisebb abszolút értékűt,

$$\left\| \hat{G}(E) \right\| = \frac{1}{E - E_k}, \tag{4.40}$$

ahol E-hez a komplex síkon a legközelebbi sajátérték E_k. Ezek segítségével felső korlátot lehet adni a $\left\| \hat{G}_1 \hat{V} \right\|$-re.

A Hamilton-operátort eredetileg

$$\begin{aligned} \hat{H} =& \frac{\hat{p}^2}{2m} + F\hat{x} = \hat{H}_1 + \hat{V}_1 \\ \hat{H}_1 =& \frac{\hat{p}^2}{2m} \\ \hat{V}_1 =& F\hat{x} \\ \hat{G}_1(E) =& \frac{1}{E - \hat{H}_1} \end{aligned} \tag{4.41}$$

részekre bontottuk. $\hat{G}_0$ a $\hat{H}_0$ operátor Green-függvénye. Ebben ha az esetben a $\hat{G}_0$ pólusaitól legalább FL távolságban, azaz $|E - E_k| > FL$, a komplex energia síkban a sor garantáltan konvergál, mert

$$\left\| \hat{G}_1(E) V_1 \right\| < \left\| \hat{G}_1(E) \right\| \|V_1\| = \frac{FL}{|E - E_k|} < 1. \tag{4.42}$$

Vizsgálunk egy módosított felontást is,

$$\begin{aligned} \hat{H} =& \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{FL}{2} + F\hat{x} - \frac{FL}{2} = \hat{H}_2 + \hat{V}_2 \\ \hat{H}_2 =& \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{FL}{2} \\ \hat{V}_2 =& F\hat{x} - \frac{FL}{2} \\ \hat{G}_2(E) =& \frac{1}{E - \hat{H}_2} \end{aligned} \quad . \tag{4.43}$$

A perturbációszámítás során így a perturbálatlan operátor szerepét a $\frac{\hat{p}^2}{2m}+\frac{FL}{2}$ operátor tölti be. Ebben az esetben a garantált konvergencia tartomány nagyobb, az $\left|E-E_k-\frac{FL}{2}\right|>\frac{FL}{2}$ reláció telesülése esetén a perturbációs sor garantáltan konvergál,

$$\left\|\hat{V}_2\hat{G}_2(E)\right\|<\left\|\hat{V}_2\right\|\left\|\hat{G}_2(E)\right\|=\frac{\frac{FL}{2}}{\left|E-E_k-\frac{FL}{2}\right|}<1. \tag{4.44}$$

A második sorhoz tartozó perturbálatlan Green-függvény

$$\hat{G}_2(E)=\frac{1}{E-\left(\frac{\hat{p}^2}{2m}+\frac{FL}{2}\right)}=\hat{G}_1\left(E-\frac{FL}{2}\right), \tag{4.45}$$

könnyen kifejezhető az eredeti eset perturbálatlan $\hat{G}_1$ Green-függvényével.

A $\frac{\hat{p}^2}{2m}$ Green-függvénye a $[0,L]$ tartományban a 4.1. fejezethez hasonlóan meghatározható,

$$G_1(x,y;E)=-\frac{\hbar}{\sqrt{2m}}\frac{1}{\sin(kL)}\times\begin{cases}\sin(k(y-L))\sin(kx) & x\leq y\\ \sin(k(x-L))\sin(ky) & x\geq y\end{cases}, \tag{4.46}$$

$$k=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}. \tag{4.47}$$

A $G_0(x,y;E)$ diszkretizálásával lehetővé válik a perturbációs sor numerikus kiértékelése. A $[0,L]$ tartományból N egyenletes eloszlású pontot választva, az operátorok közelíthetőek $N\times N$ mátrixokkal, és az operátorok szorzata a közelítő mátrixok szorzatával,

$$\begin{aligned}x_k&=\frac{kL}{N-1}\\ \hat{A}\rightarrow A_{kl}&=\left\langle x_k\middle|\hat{A}\middle|x_l\right\rangle\\ \hat{A}\hat{B}\rightarrow(AB)_{kl}&=\frac{L}{N-1}\sum_{m=0}^{N-1}A_{km}B_{ml}\end{aligned}, \tag{4.48}$$

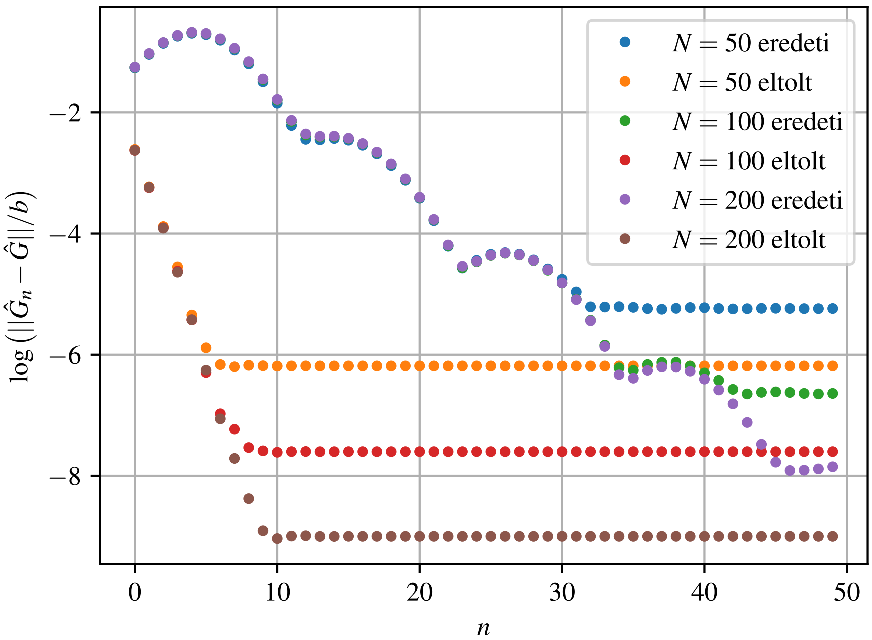
az indexek $0,1,\ldots N-1$ értékűek lehetnek. Szükség van még a operátor norma közelítésére is. A standard ℓ^2 mátrixnorma megszorozva $\frac{L}{N-1}$-el megfelelő. A skálázási faktorra azért van szükség, mert az operátorok szorzatának közelítésében a mátrix szorzat is skálázva van. A két különböző perturbáció és a különböző N esetek konvergenciája numerikusan vizsgálható,

$$(V_1G_1(E))_{kl}=Fx_kG_1(x_k,y_l,E) \tag{4.49}$$

az első perturbációs sorban felmerülő $\hat{V}\hat{G}_0(E)$ mátrix közelítése,

$$(V_2G_2(E))_{kl}=F\left(x_k-\frac{L}{2}\right)G_1\left(x_k,y_l;E-\frac{FL}{2}\right) \tag{4.50}$$

pedig a módosított perturbációs sorban felmerülő $\hat{V}_2\hat{G}_2(E)$ operátor mátrix közelítése. Minden eszköz adott, hogy a $\left\|\hat{G}_n(E)\right\| - \hat{G}(E)$ sorozatot a diszkretizáció segítségével numerikusan vizsgáljuk. Az eredményeket a 4.5. ábra mutatja. Látható, hogy adott finomságú diszkretizáció esetén a második perturbációs sor, ami a $V(x) = Fx - \frac{FL}{2}$ potenciálhoz tartozik, gyorsabban közelít az egzakt Green-függvényhez. A gyorsabb konvergencián túl amikor a numerikusan kiértékelt sor stacionáriussá válik a lépésszám függvényében, a kapott eredmény közelebb van az egzakt Green-függvényhez. Ez a különbség, amelyik tetszőleges lépésszám után is megmarad, a diszkretizáció finomságával jó közelítéssel fordítottan arányos, az ábrán a felbontás duplázása a különbség normájának logaritmusát egy állandó értékkel csökkentette.

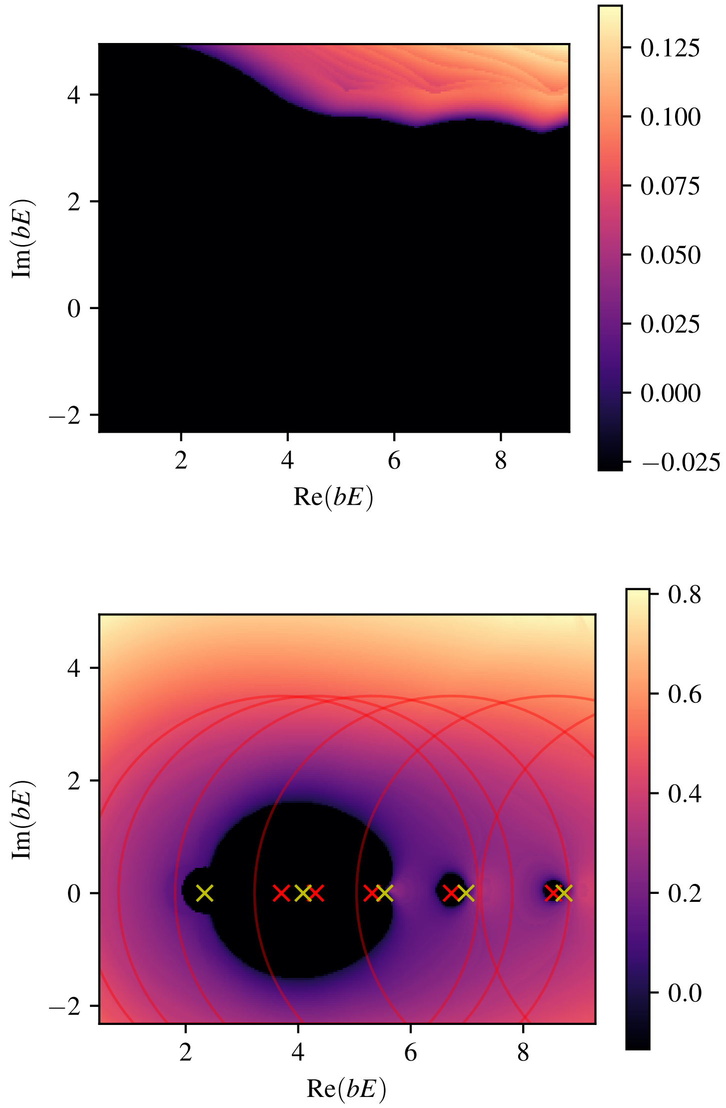


4.5. ábra. test

Mivel a 4.5. ábrán a lépésszám függvényében a különbség normája exponenciálisan csökken amíg el nem ér egy a diszkretizáció finomságától függő minimális hibát, a konvergencia vagy divergencia sebességét meg lehet becsülni a lépések függvényében a normákra illesztett exponenciális függvény kitevőjével,

$$d(n) = d(0)\exp(-\alpha n) + r, \tag{4.51}$$

ahol α jelentése a konvergencia sebessége, ha negatív, a sor divergál, d pedig a egzakt eredménytől való eltérés operátor normája. A maradék tagot r modellezi, ez az r tag lesz közelítőleg fordítottan arányas N-nel.



4.6. ábra. Ez az ábra a két perturbációs sor konvergenciáját hasonlítja össze a komplex energia síkon. Mind a két ábrán a doboz mérete $aL = 7$. 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 az α paraméterrel a (4.51) egyenletből. A piros körökön kívüli tartomány a (4.44) formula által garantált konvergencia tartományt jelöli. A piros x-ek a $\hat{G}_0$ pólusait, a sárga x-ek pedig az egzakt $\hat{G}$ operátor pólusait jelölik.

A 4.6. ábra jól mutatja, hogy a második perturbációs sor gyorsabban, és nagyobb tartományban konvergál. A két perturbációs sor között a különbség csupán annyi, hogy a perturbáló tag egy triviális részét, az egység operátorral arányosat, a perturbálatlan Hamilton-operátorhoz csoportosítjuk a perturáló operátorból, ezzel csökkentve a $\hat{V}\hat{G}(E)$ normáját a (**??**) egyenleten.

5. Összegzés

A. Szabad részecske gyorsuló koordinátarendszerben

Pozitív x irányban

B. Numerikus számítások

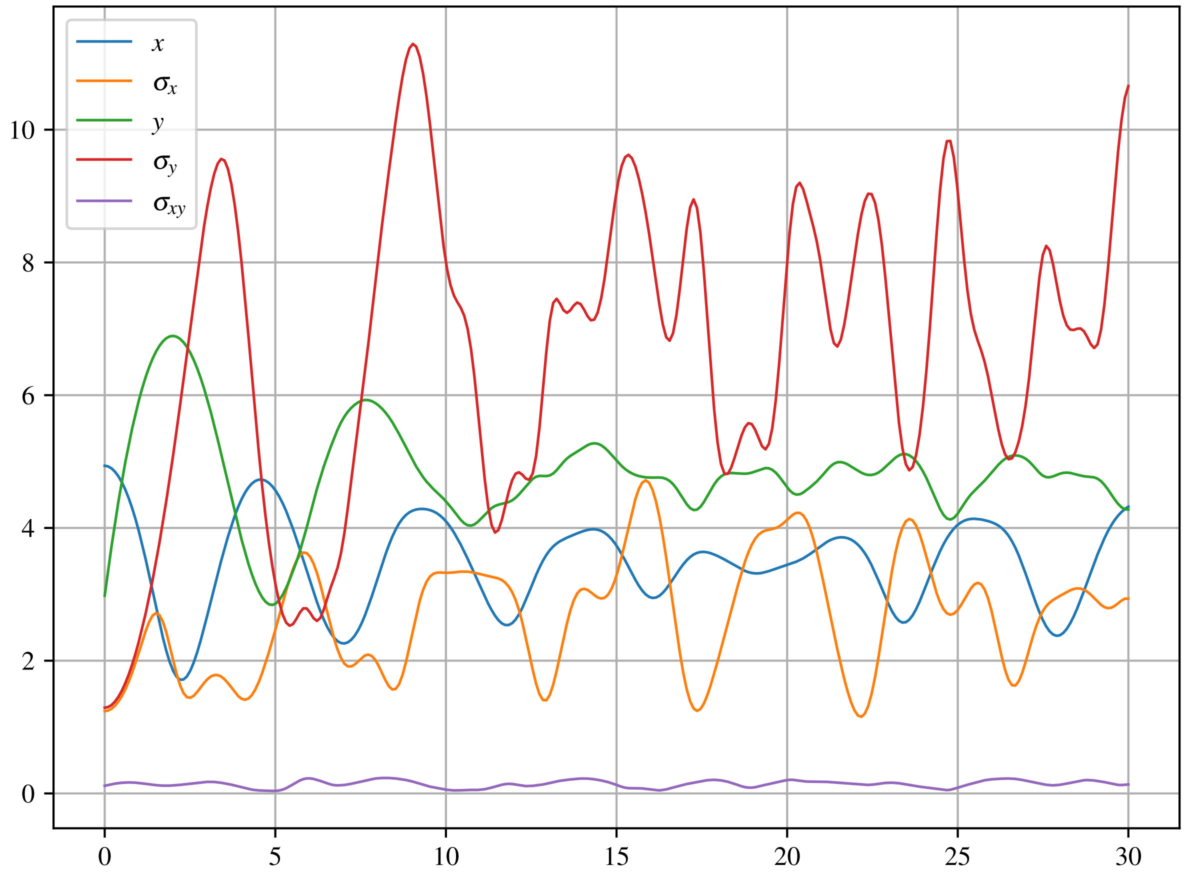
Az összes számításhoz és ábra készítéséhez használt kód elérhető a `https://github.com/KurtiZoltan/schroedinger/tree/master/code` oldalon, Python nyelven. Továbbiakban néhány érdekesebb kódrészletet és eredményt mutatunk be.

B.1. Hullámfüggvény időfejlődése

B.1.1. 1D

B.1.2. 2D

B.2. Momentumok időfejlődése



B.1. ábra. Várható értékek és szórások időfejlődése

```
def convergenceImproved(E):
    G0 = test.G0(x, y, E - test.F * test.L / 2)
    VG0 = (test.F * x - test.F * test.L / 2) * G0 / N * test.L
    realG = test.G(x, y, E)
    G = G0
    norm0 = dx * np.linalg.norm(G0 @ VG0, ord=2)
```

```
    norms = np.array([norm0])
    steps = np.array([0])
    for i in range(20):
        Gprev = G
        G = G0 + G @ VG0
        norm = dx * np.linalg.norm(G - realG, ord=2)
        norms = np.append(norms, norm)
        steps = np.append(steps, i+1)
        if norm/norm0 + norm0/norm > 5:
            break

    popt, pcov = curve_fit(normguess, steps, norms/norms[0])
    return -popt[0]
```

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

[6] F. Porter. *Course notessolving the schrödinger equation: Resolvents*. `http://www.hep.caltech.edu/~fcp/physics/quantumMechanics/resolvent/resolvent.pdf`

[7] E.N. Economou. *Green's Functions in Quantum Physics*. Springer Series in Solid-State Sciences. Springer, 2006. ISBN 9783540122661