A HATÁRFELTÉTELEK FIZIKAI SZEREPE ÉS MATEMATIKAI LEÍRÁSA A KVANTUMMECHANIKÁBAN

Fülöp Tamás

RMKI, 2010.04.02

Miért?

Van, amikor muszáj:

- szinguláris potenciálok (pl. Coulomb)
- szinguláris objektumok (δ, visszaverő falak)

Van, amikor célszerű:

- egyszerű, elegendő modell
- mik a vezető viselkedések, univerzalitási osztályok

Van, amikor tanulságos:

- SUSY, dualitás, WKB-egzaktság, Berry-fázis, energia-anholonomia, renormálás, nemrenormálhatóság, Klauder-jelenség, Landau-pólus, anomália és dimenziós transzmutáció

Honnan tudhatjuk, hogy kell határfeltétel?

Számolással:

- túl sok sajátfüggvény: nem $\perp$
- minden $\lambda \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$ is sajátérték
- $(H\psi, \chi) - (\psi, H\chi) = \text{felületi tagok} \neq 0$

Léteznek kritériumok: hány dimenzióban, $V(r) = g/r^p$ milyen p hatványú, g milyen tartományban

Nem önadjungált a szimmetrikus Hamilton-operátor $\Longrightarrow$

- nincs spektráltétel
- nincs fizikai interpretáció
- nincs unitér időfejlődés

Hogyan lehet kezelni?

- Regularizálás, limit
  — kimaradhatnak esetek
  — ad hoc paraméterezés
  — nehéz számolás
- Kézzel teljes ortogonális rendszereket formálni
  — ad hoc paraméterezés
  — nehéz számolás
- Neumann-jellemzés
  — jobb paraméterezés
  — kevesebb számolás
- Peremértékek terének módszere
  — legjobb paraméterezés
  — legkevesebb számolás (a rendszer definiálásához nem kell megoldani a rendszert)
  — kifejezi a szingularitás lokális jellegét

Mi az önadjungáltság:

$A : \mathcal{D}(A) \subset \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ *szimmetrikus*: $(A\psi, \chi) = (\psi, A\chi)$

$\uparrow \qquad \nwarrow \qquad \nwarrow$ $\qquad\qquad \forall\, \psi, \chi \in \mathcal{D}(A)$ -ra.

lin. sűrű szeparábilis

Az *adjungált* A^+: $\chi \in \mathcal{D}(A^+)$, ha $\exists\, \tilde{\chi} \in \mathcal{H}$:

$(A\psi, \chi) = (\psi, \tilde{\chi}) \qquad \forall\, \psi \in \mathcal{D}(A)$ -ra. $\qquad A^+\chi := \tilde{\chi}$.

A szimmetrikus $\iff A \subset A^+$.

A *önadjungált*: $A = A^+$ (spektráltétel, e^{-iAt})

A *lényegében önadjungált*: 1 önadjungált kiterjesztés

Ha A szimmetrikus, de nem lényegében önadjungált:

Neumann: *defekt-alterek, defekt-indexek*:

$$\text{rögzt. } \lambda \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}\,, \qquad \begin{array}{c} \mathcal{E}_\lambda := \{\psi \in \mathcal{H} \mid A^+\psi = \lambda\psi\}, \\ \uparrow \\ n_\lambda := \dim \mathcal{E}_\lambda \end{array} \qquad \begin{array}{c} \mathcal{E}_{\lambda^*} \\ \uparrow \\ n_{\lambda^*} \end{array}$$

Ha $n_\lambda = n_{\lambda^*} = n$ (a mi Ham.-op.-aink ilyenek lesznek):

$\forall$ unitér $U_N : \mathcal{E}_\lambda \to \mathcal{E}_{\lambda^*} \quad \exists\, A_{U_N}$ önadjungált:

$$\mathcal{D}(A_{U_N}) = \{\psi_0 + \psi_\lambda + U_N\psi_\lambda \mid \psi_0 \in \mathcal{D}(A),\, \psi_\lambda \in \mathcal{E}_\lambda\}$$

(kölcsönösen egyértelmű megfeleltetés)

U_N: n^2 valós paraméter

(1D: n véges; 2D, 3D: szinguláris vonal, felület esetén ∞)

Alternatív leírás: (peremértékek tere)

ha $\exists\,\Gamma_1, \Gamma_2 : \mathcal{D}(A^+) \to \mathcal{H}_\mathrm{b}$ (dim $\mathcal{H}_\mathrm{b} = n$)

úgy, hogy $\forall\,\psi, \chi \in \mathcal{D}(A^+)$

$$(A^+\psi, \chi) - (\psi, A^+\chi) = (\Gamma_1\psi, \Gamma_2\chi)_\mathrm{b} - (\Gamma_2\psi, \Gamma_1\chi)_\mathrm{b}$$

továbbá $\forall\,\Psi_1, \Psi_2 \in \mathcal{H}_\mathrm{b}$ $\exists\,\psi \in \mathcal{D}(A^+)$:

$$\Gamma_1\psi = \Psi_1, \qquad \Gamma_2\psi = \Psi_2$$

akkor $\forall\,U \in \mathcal{U}(\mathcal{H}_\mathrm{b})$ -hoz $\exists\,A_U$ önadjungált:

$$\mathcal{D}(A_U) = \{\psi \in \mathcal{D}(A^+) \mid (U - \mathbf{1}_\mathrm{b})\Gamma_1\psi + i(U + \mathbf{1}_\mathrm{b})\Gamma_2\psi = 0\}$$

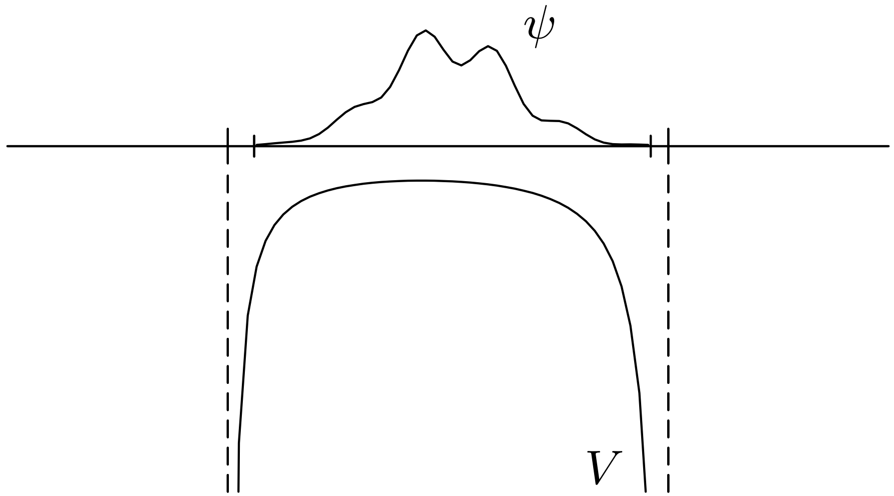
Megjegyzések: U_N egy speciális eset ($\mathcal{H}_\mathrm{b} = \mathcal{E}_\lambda$)

Alkalmazásokban egyszerű, kellemes

$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\,\triangle + V\,,$ $\qquad$ V valós, pl. $\sim \frac{1}{r},\ \frac{1}{r^2},$

egy 1D intervallumon, félegyenesen, egyenesen, körön, és a magasabb dimenziós problémák radiális része (a nemtriv. része) is félegyenes-probléma

Szimmetrikus H: C^2,



H^+: AC^2, bármilyen viselkedés a szinguláris helyeken

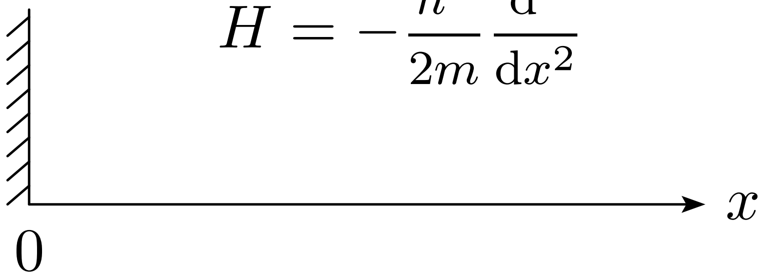
A peremértékek terének módszerét használjuk:

- a legkevesebb erőfeszítéssel a legtöbbet kapjuk
- ismeretesek receptek $\Gamma_1\,,\ \Gamma_2$ -re

Példák, egyszerűbbtől a bonyolultabb felé haladva (sok jellegzetesség már az egyszerűeknél felbukkan):

Félegyenes (térbeli doboz; 2D, 3D δ $l = 0$ része):

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}$$



$$(H^+\psi, \chi) - (\psi, H^+\chi) =$$

$$= -\tfrac{\hbar^2}{2m}(\psi^*\chi' - \psi^{*\prime}\chi)(+0)$$

$$= -\tfrac{\hbar^2}{2m}W[\psi^*, \chi](+0)$$

(nincs $x \to \infty$ tag: ld. később)

$$\mathcal{H}_\mathrm{b} = \mathbb{C}, \qquad \Gamma_1\psi = \psi(0), \qquad \Gamma_2\psi = L_0\psi'(0)$$

($-\tfrac{\hbar^2}{2m}$ -mel egyszerűsíthetünk, L_0 tetszőleges nemnulla valós hossz dimenziójú segédmennyiség)

$$U \in \mathcal{U}(1)\ :\ U = e^{i\vartheta},\ \ \vartheta \in [0, 2\pi):$$

$$(e^{i\vartheta} - 1)\psi(0) + i(e^{i\vartheta} + 1)L_0\psi'(0) = 0\,,$$ avagy

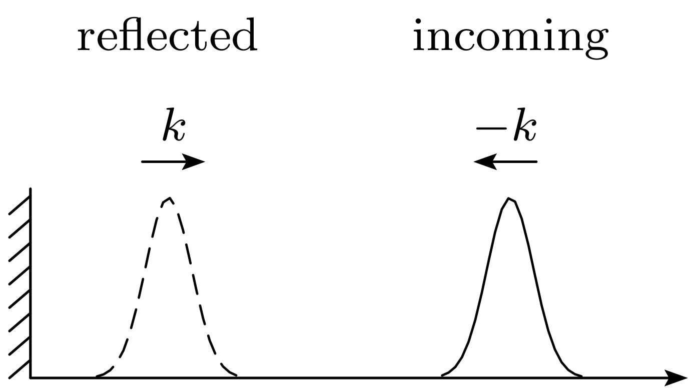
$$\psi(0) + L\psi'(0) = 0,$$ ahol $L = L_0 \cot\frac{\vartheta}{2} \in (-\infty, \infty) \cup \{\infty\}$

$L = 0$: Dirichlet, $L = \infty$: Neumann, a többi: Robin

$E > 0$: $\quad \varphi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}(e^{-ikx} - e^{2i\delta_k}e^{ikx}), \quad e^{2i\delta_k} = \frac{1-ikL}{1+ikL}$

$E < 0$: $\quad \varphi_{\text{bound}}(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}e^{-\frac{x}{L}}, \quad E_{\text{bound}} = -\frac{\hbar^2}{2mL^2} \quad (L > 0)$

Időkésés:



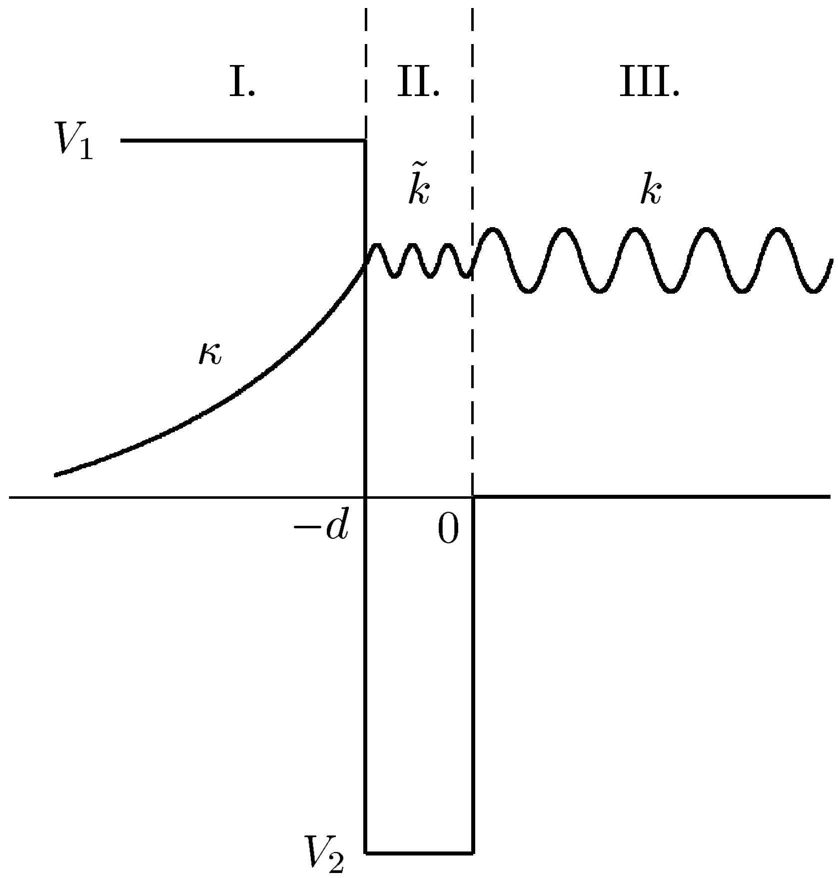
$$\tau = \frac{-2mL}{\hbar k(1+k^2L^2)}$$

Skálainvariancia kvantumosan sérül (kivéve $L = 0, \infty$), dimenziós mennyiség keletkezik a rendszerben (dimenziós transzmutáció)

A határfeltétel realizálása: pl.

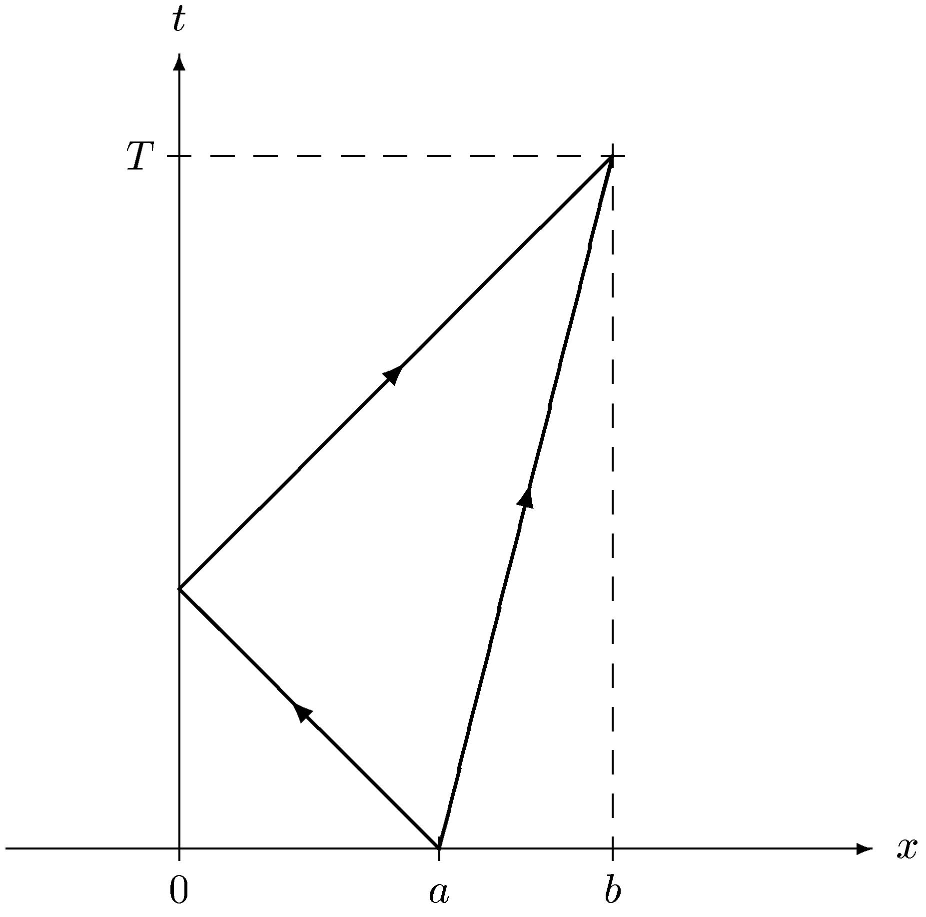
$$V_1(d) = c\, d^{-5},$$

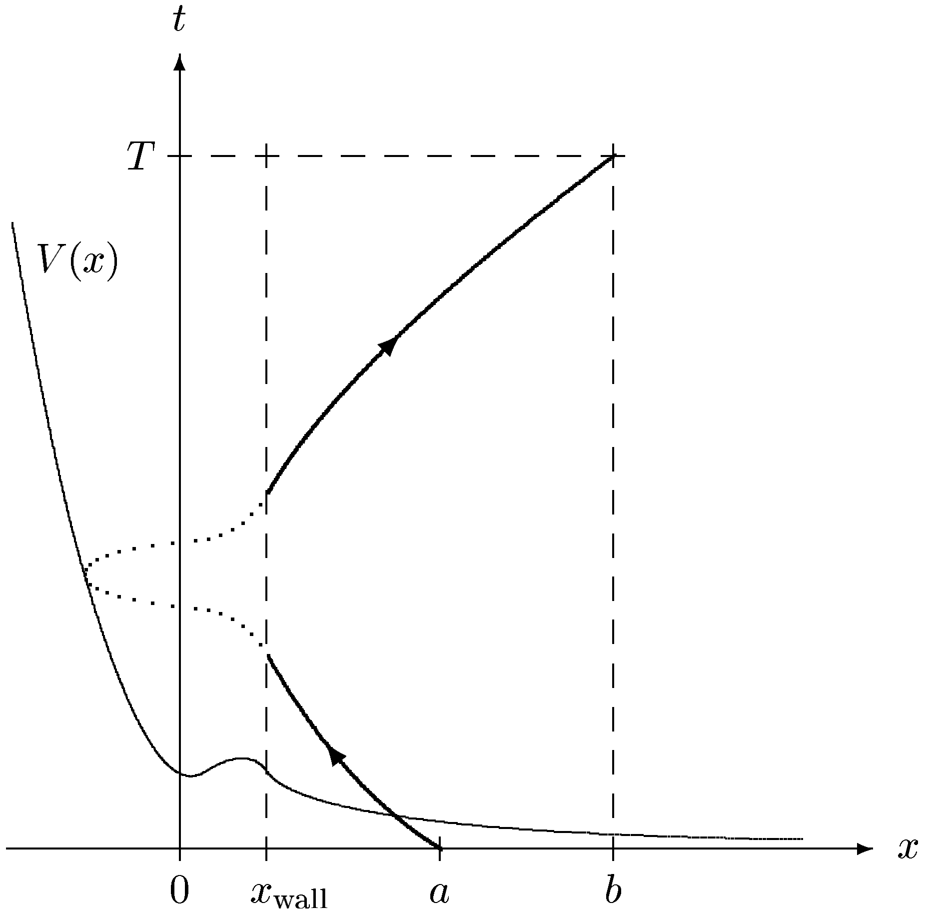
$$V_2(d) = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi^2}{4}\, d^{-2} + \frac{2}{L}\, d^{-1}\right)$$



WKB-egzaktság: ha

$$K(b,T;a,0) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar T}}\, e^{\frac{im}{2\hbar T}(b-a)^2} + \sqrt{\frac{1}{2\pi i\hbar}\frac{\partial^2 S_\mathrm{b}}{\partial a\,\partial b}}\, e^{\frac{i}{\hbar}S_\mathrm{b}(b,T;a,0)}$$





$L=0$: simán; $\quad L=\infty$: realizáló pot.; $\quad$ többi L: nem

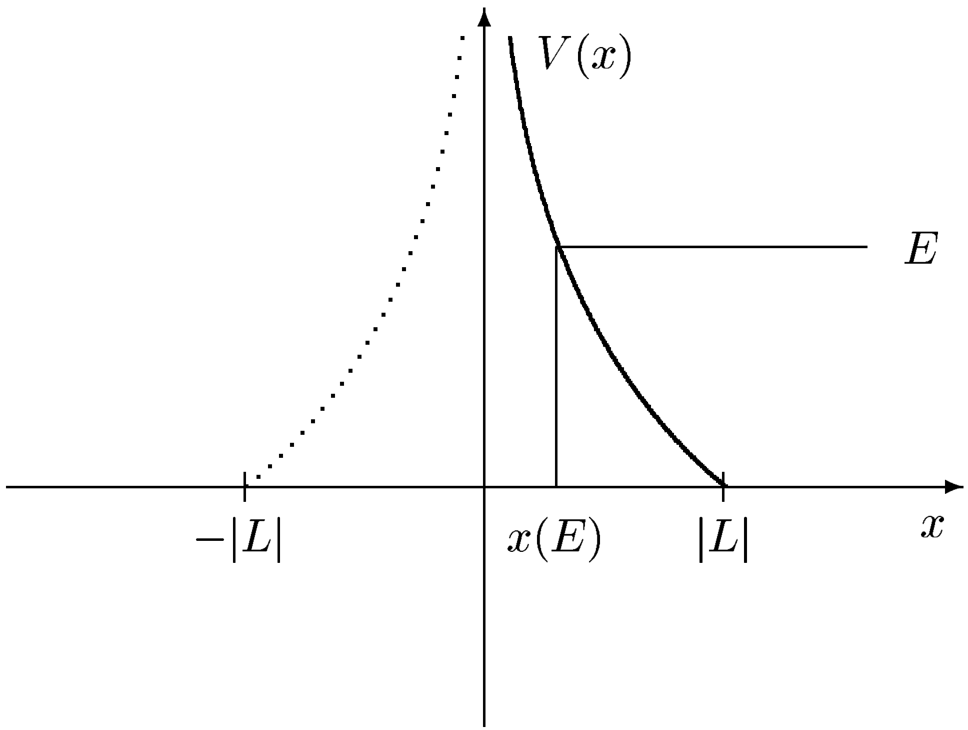
Az időkésés kl. realizálása:

$L > 0$:

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{2mL^2}\left(\frac{L^2}{x^2} - 1\right)$$

$L < 0$:

„szintén” (nemfizikai ág)



2D, 3D δ térelméleti stílusú tárgyalása: a csatolási állandó 0-hoz tart, mégsem a szabadot kapjuk

térelméletben se feltétlenül kaphatunk meg minden esetet egyetlen UV levágó paraméterrel (+ finomhangolás)

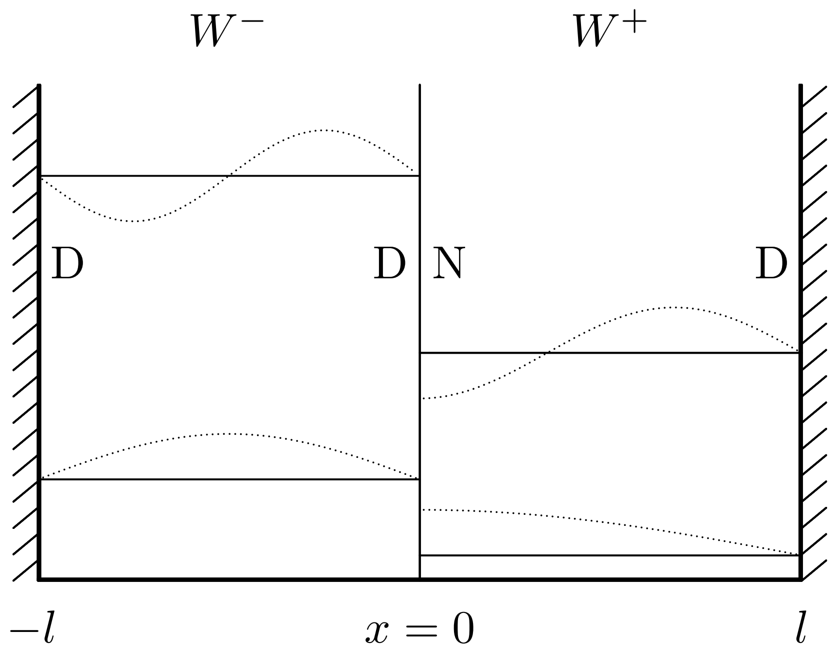
Landau-pólus csak perturbatívan lép fel

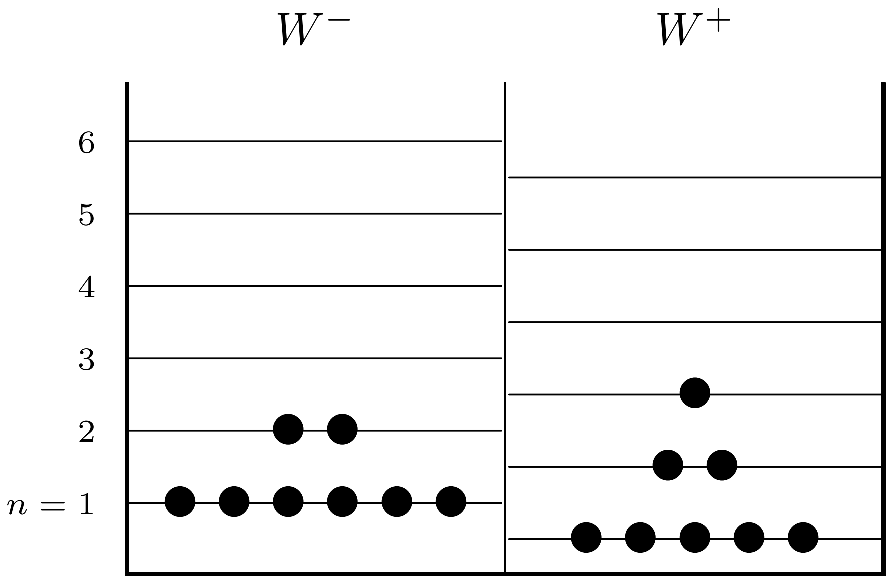
Szabad kvantumgáz, T hőm.,

D: $\psi = 0$, N: $\psi' = 0$

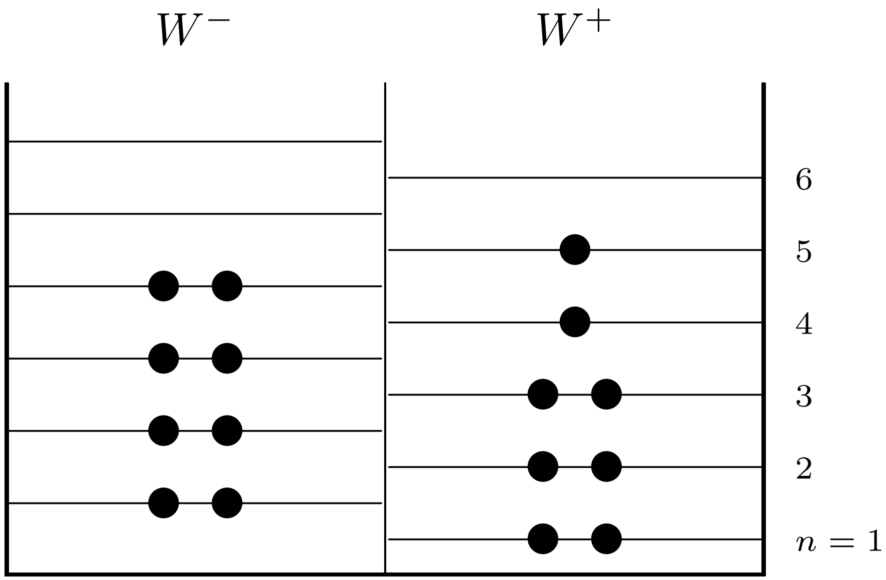
$$E_n^- = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{l}\right)^2 n^2,$$
$$E_n^+ = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{l}\right)^2 \left(n-\frac{1}{2}\right)^2,$$

eredő erő mennyi?

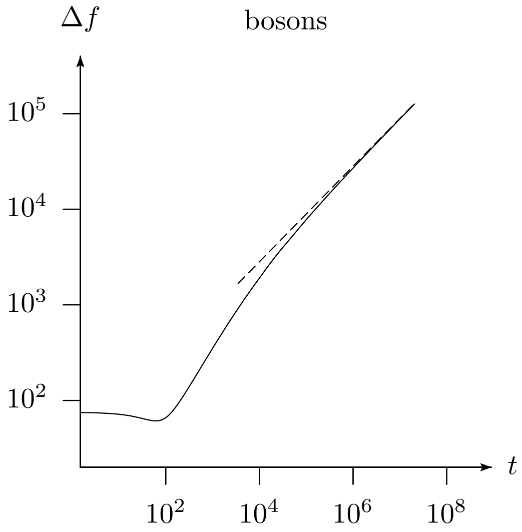


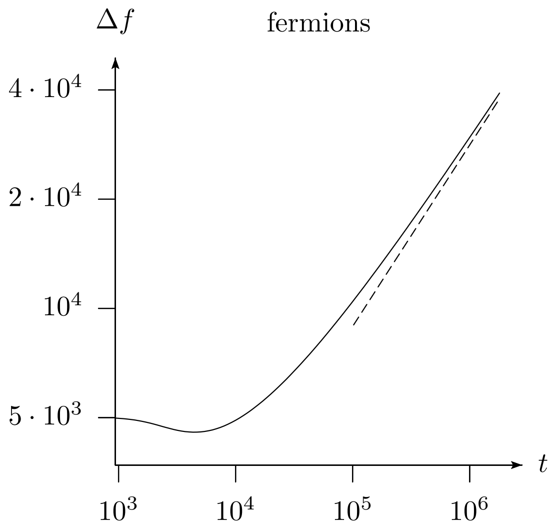


bosons



fermions

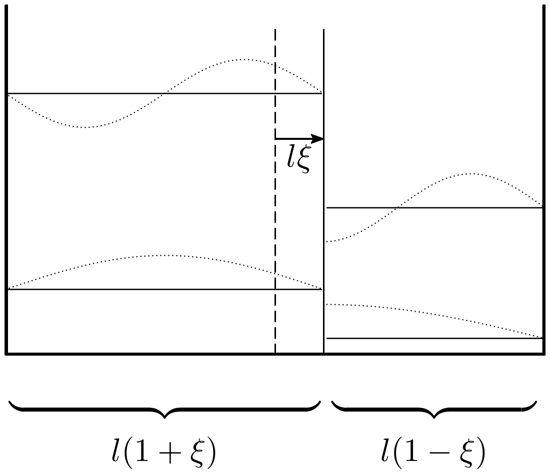


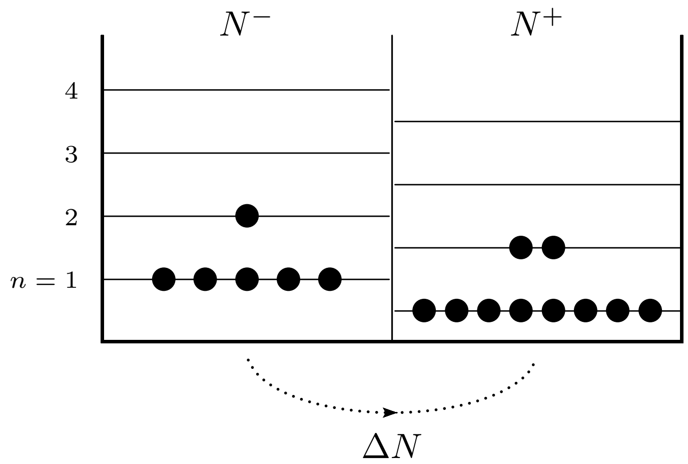


t : dimenziótlanított hőmérséklet

Δf : dimenziótlanított erő

Egyensúly hol:

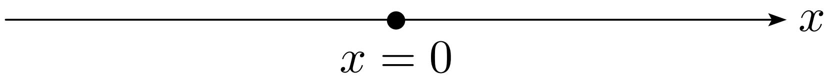




$$\xi = \frac{\sqrt[3]{4}-1}{\sqrt[3]{4}+1} \simeq 0.227 \text{ ill. } \xi \simeq 1 + \frac{1}{2N}$$

$$\Delta N = \frac{3}{5} N \text{ ill. } \frac{1}{4}$$

$$(H^+\psi,\chi) - (\psi, H^+\chi) =$$



$$= -\tfrac{\hbar^2}{2m}\{(\psi^*\chi' - \psi^{*\prime}\chi)(+0) -$$
$$-(\psi^*\chi' - \psi^{*\prime}\chi)(-0)\}$$

$$\mathcal{H}_{\mathrm{b}} = \mathbb{C}^2, \qquad \Gamma_1\psi = \begin{pmatrix}\psi(+0)\\ \psi(-0)\end{pmatrix}, \qquad \Gamma_2\psi = L_0\begin{pmatrix}\psi'(+0)\\ -\psi'(-0)\end{pmatrix}$$

$U \in \mathcal{U}(2)$, $\qquad (U - \mathbf{1}_2)\Gamma_1\psi + i(U + \mathbf{1}_2)\Gamma_2\psi = 0$

$2^2 = 4$ paraméter: két távolságskála ($L_\pm$) és két szög

δ, δ', δ'', „mágneses fluxus”

L_+, L_-: legfeljebb két kötött állapot

időkésés, alul-/felüláteresztő szűrő

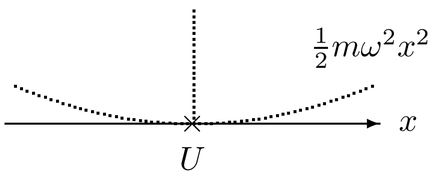
Dualitás (folytonos általánosítása):

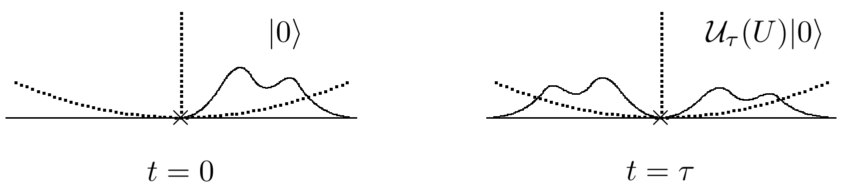
$$(\mathcal{F}_W\psi)(x) := \begin{cases} W_{11}\psi(x) + W_{12}\psi(-x), & x > 0 \\ W_{21}\psi(-x) + W_{22}\psi(x), & x < 0 \end{cases}$$

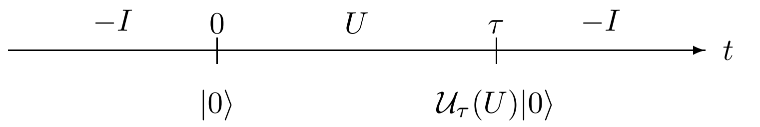
Hatására $U \longmapsto U_{\mathcal{F}_W} = WUW^{-1}$

(az U-val paraméterezés egyik előnye)

„Kvantumos abakusz” (kvantumbit):







Pontszingularitás körön:

a 4. paraméter mindenképpen fizikai: a mágneses fluxus

véges kerület => diszkrét spektrum

„folytonos dualitás” itt is

WKB-egzaktság itt is

SUSY — a $\{Q_i, Q_j\} = H_U \delta_{ij} \quad (i, j = 1, 2)$ értelmezési tartománnyal együtt kell teljesüljön!

anholonómia: egy kör a paramétertérben => Berry-fázis, $E_1 \to E_2$

Most szinguláris potenciálok: ψ, ψ' általában divergál a szingularitásnál

Referenciamódusok: egy rögzített valós E_0 sajátértékhez $\varphi^{(1)}$, $\varphi^{(2)}$ valós sajátfüggvények (nem felt. normálhatóak), melyekre $W[\varphi^{(1)}, \varphi^{(2)}] = 1$

Esetek:

- mindkettő L^2_{loc} a szingularitásnál: — limit-circle
- egy lineárkombináció L^2_{loc}: — limit-point
- egyetlen lineárkombináció se L^2_{loc}: — ez nem lehetséges

Limit-point eset: $W[\psi^*, \chi] \to 0$ a szingularitásnál

(példa: )

egy ilyen szingularitáshoz nem kell határfeltétel

Limit-circle eset:

$\forall\,\psi \in \mathcal{D}(H^+)$ aszimptotikusan hasonló $\varphi^{(1)}$, $\varphi^{(2)}$-höz:

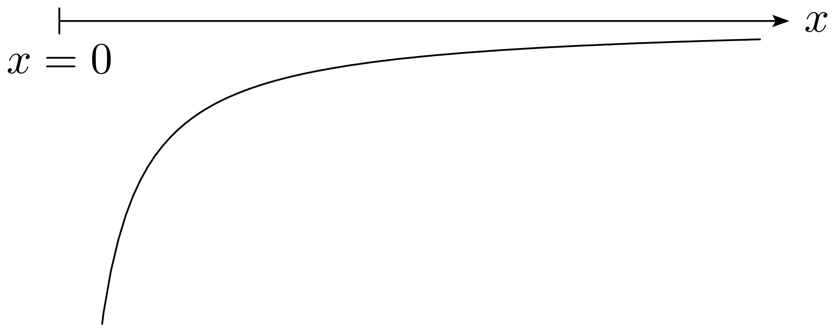
$$\psi(x) = \varphi^{(1)}(x)\left[\underset{\substack{\uparrow\\ -\lim W[\varphi^{(2)},\psi]}}{c^{(1)}} + \underset{\substack{\searrow\\ 0}}{\eta^{(1)}(x)}\right] + \varphi^{(2)}(x)\left[\underset{\substack{\uparrow\\ \lim W[\varphi^{(1)},\psi]}}{c^{(2)}} + \underset{\substack{\searrow\\ 0}}{\eta^{(2)}(x)}\right]$$

határszámok: ψ, ψ' véges kombinációi

$W[\psi^*,\chi] = W[\varphi^{(1)},\psi]^* W[\varphi^{(2)},\chi] - W[\varphi^{(2)},\psi]^* W[\varphi^{(1)},\chi]$:

mind véges: jó Γ_1, Γ_2 -célra.

$\varphi^{(1)}$, $\varphi^{(2)}$ aszimptotikáját is elég tudni ehhez



$$\Gamma_1\psi = W[\varphi^{(1)},\psi](+0),$$
$$\Gamma_2\psi = W[\varphi^{(2)},\psi](+0),$$
$$\Gamma_1\psi + L\Gamma_2\psi = 0$$

Példa: 3D Coulomb: $H = \frac{\hbar^2}{2m}\left(-\triangle + \frac{g}{r}\right)$

A radiális részben kell határfeltétel ($l = 0$)

$$\varphi^{(1)}(r) \approx -r, \qquad \varphi^{(2)}(r) \approx 1 + gr\ln|g|r$$

$L = 0$: a szokásos, jól ismert, reguláris eset

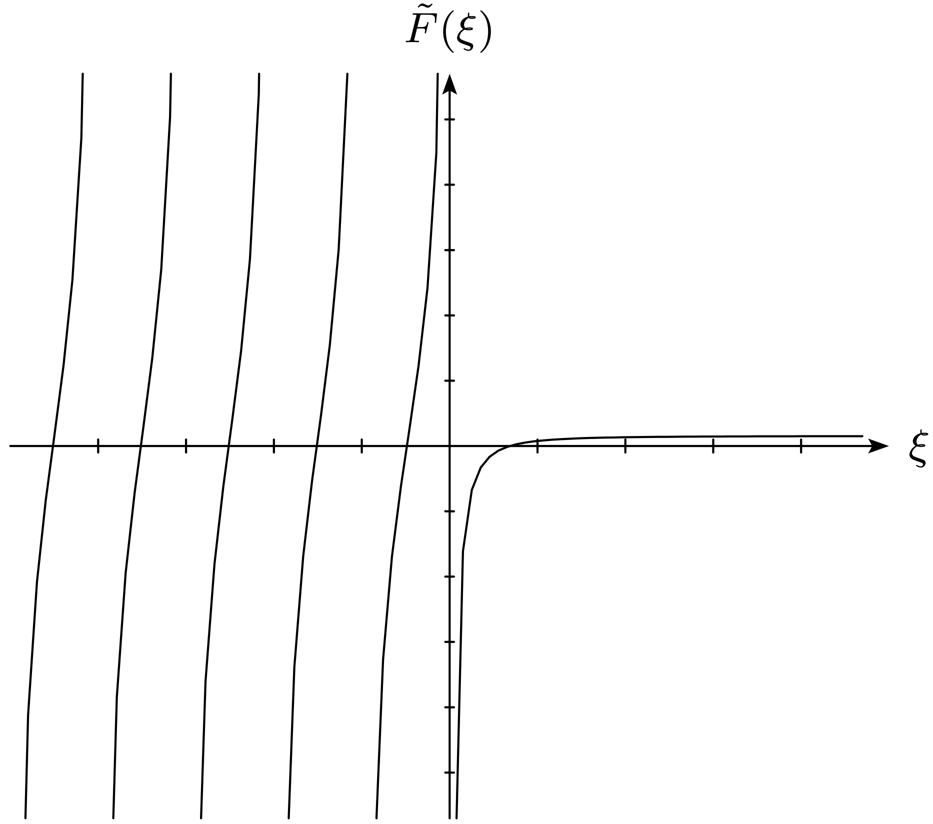
$L \neq 0$: szinguláris komponens is van ψ-ben (ψ' divergál)

(pl. mezo-atomok: p^+ π^-: egy rövid hatótávolságú erő is van)

A kötött állapotok: megoldandó

$$g\tilde{F}\left(\frac{g}{2\sqrt{-2mE/\hbar^2}}\right) = -\frac{1}{L}, \qquad \text{ahol}$$

$$\tilde{F}(\xi) = \frac{\Gamma'}{\Gamma}(1+\xi) - \ln|\xi| - \frac{1}{2\xi} - \frac{\Gamma'}{\Gamma}(1) - \frac{\Gamma'}{\Gamma}(2)$$



Ha $g < 0$ (vonzó):

$L = 0$: $\quad E_n = -\frac{R}{n^2}$

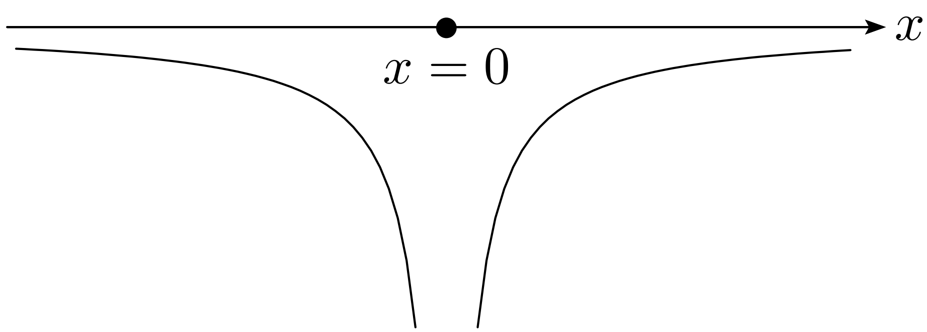
$L = \infty$: $E_n = -\frac{R}{(n-c_n)^2}$

$c_1 = 0.5130$, $\; c_2 = 0.4879$,

$c_3 = 0.4857$, $\; \ldots$

$c_\infty = 0.4844$ (határérték)

Erősebben szinguláris pot.: kikapcsolása nem a szabad esethez konvergál (Klauder-jelenség; mi körül perturbáljunk?)

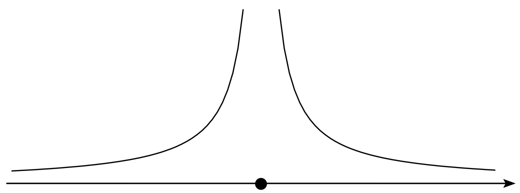


$$\Gamma_1 \psi = \begin{pmatrix} W[\varphi^{(1)}, \psi](+0) \\ W[\varphi^{(1)}, \psi](-0) \end{pmatrix}$$

$$\Gamma_2 \psi = \begin{pmatrix} W[\varphi^{(2)}, \psi](+0) \\ -W[\varphi^{(2)}, \psi](-0) \end{pmatrix}$$

$U \in \mathcal{U}(2)$, $\sim$ 

Teljes visszaverődés vonzó potenciálról is

Alagutazás egy taszító  -on át is

Spektrum, integrálhatóság (Calogero) is U-függő