KVANTNA MEHANIKA POTENCIALA X^{-2}

ROK GERŠAK

Fakulteta za matematiko in fiziko
Univerza v Ljubljani

V tem članku se iščejo lastna stanja potenciala x^{-2}, ki v treh dimenzijah predstavlja polje električnih dipolov. Primer takšnega sistema je gibanje elektrona v bližini polarne molekule[6]. Praviloma vsak privlačni potencial dovoljuje sipalna in diskretizirana vezana stanja. Takšni so potencialna jama, funkcija delta, harmonski potencial in Coulombski potencial. Med naštetimi pa z razlogom ni x^{-2} potenciala, saj krši osnovna načela kvantne mehanike. Za rešitev takšnega potenciala je potrebna uporaba bolj prefinjenih metod, kot sta renormalizacija in sebi adjungirana razširitev.

QUANTUM MECHANICS OF THE X^{-2} POTENTIAL

This article will search for eigenstates of the x^{-2} potential. Three dimensional analog of this potential would represent an electric field of dipoles as in movement of an electron, which is attached to a closed-shell polar molecule[6]. In general, every attractive potential allows scattering states and discrete bound states. This is true for potential well, delta function, harmonic oscillator and Coulomb potential. Careful readers should have noticed that x^{-2} potential is missing in previous sentence, since it violates fundamental principles of quantum mechanics. To find any eigenstate of the x^{-2} potential more sophisticated methods such as renormalization and self-adjoint extension need to be used.

1. Lastnosti potenciala

Raziščimo najprej lastnosti potenciala. Definirajmo enodimenzionalni potencial[1]:

$$V(x) = \begin{cases} \infty, & x \leq 0 \\ -\frac{a}{x^2}, & x > 0 \end{cases} \tag{1}$$

Za pozitivne x je potencial oblike a/x^2, pri čemer je a poljubna realna konstanta primernih dimenzij, za negativne x pa je neskončno visoka stopnica. Hamiltonov operator in Schrodingerjeva enačba se v območju $x > 0$ zapišeta kot:

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

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi(x)}{\mathrm{d}x^2} + \frac{\alpha\psi(x)}{x^2} = \varkappa^2\psi(x), \tag{3}$$

kjer je $\alpha = \frac{2ma}{\hbar^2}$ in $\varkappa^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2}$.

Poglejmo kakšen mora biti parameter α, da dobimo bodisi vezana bodisi sipalna stanja. Pričakujemo, da bodo za $\alpha < 0$ obstajala samo sipalna stanja, saj je takrat potencial odbojen, za $\alpha > 0$ pa bodo obstajala tudi vezana stanja, saj je potencial privlačen. Če uvedemo $\alpha = \nu(1-\nu)$, lahko operator H zapišemo kot:

$$\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + \frac{\nu}{x}\right)\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} - \frac{\nu}{x}\right)f(x) = \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + \frac{\nu}{x}\right)\left(\frac{\mathrm{d}f(x)}{\mathrm{d}x} - \frac{\nu f(x)}{x}\right) =$$

$$= \frac{\mathrm{d}^2 f(x)}{\mathrm{d}x^2} + \frac{\nu f(x)}{x^2} - \frac{\nu}{x}\frac{\mathrm{d}f(x)}{\mathrm{d}x} + \frac{\nu}{x}\frac{\mathrm{d}f(x)}{\mathrm{d}x} - \frac{\nu^2 f(x)}{x^2} =$$

$$= \frac{\mathrm{d}^2 f(x)}{\mathrm{d}x^2} + \frac{\nu(1-\nu)f(x)}{x^2} = \frac{\mathrm{d}^2 f(x)}{\mathrm{d}x^2} + \frac{\alpha f(x)}{x^2},$$

$$\Longrightarrow H = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + \frac{\nu}{x}\right)\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} - \frac{\nu}{x}\right). \tag{4}$$

Z operatorjem H v obliki (4) bomo zapisali pričakovano vrednost energije. Še prej pa izračunajmo, kakšen je adjungirani operator $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + \frac{\nu}{x}$:

$$\int_0^\infty g(x)^* \left(\frac{\mathrm{d}f(x)}{\mathrm{d}x} + \frac{\nu f(x)}{x} \right) \mathrm{d}x = g(x)^* f(x)|_0^\infty - \int_0^\infty \left(\frac{\mathrm{d}g(x)}{\mathrm{d}x} \right)^* f(x) \mathrm{d}x +$$
$$+ \int_0^\infty \left(\frac{\nu^* g(x)}{x} \right)^* f(x) \mathrm{d}x = \int_0^\infty \left(- \frac{\mathrm{d}g(x)}{\mathrm{d}x} + \frac{\nu^* g(x)}{x} \right)^* f(x) \mathrm{d}x, \tag{5}$$

kjer smo uporabili metodo integracije po delih in sta funkciji $g(x)$ ter $f(x)$ na robovih enaki 0.

Sedaj zapišimo pričakovano vrednost energije:

$$E = \langle \psi | H | \psi \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \langle \psi | \big(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + \frac{\nu}{x} \big) \big(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} - \frac{\nu}{x} \big) \psi \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} \langle \big(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} - \frac{\nu^*}{x} \big) \psi | \big(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} - \frac{\nu}{x} \big) \psi \rangle,$$

kjer smo preko tretjega enačaja uporabili lastnost (5). Če je $\nu = \frac{1}{2} \pm \sqrt{\frac{1}{4} - \alpha}$ realen, kar je res za $\alpha \leq \frac{1}{4}$, sledi:

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \int_0^\infty | \big(\frac{\mathrm{d}\psi(x)}{\mathrm{d}x} - \frac{\nu \psi(x)}{x} \big) |^2 \mathrm{d}x \geq 0 \qquad (\alpha \leq \frac{1}{4}). \tag{6}$$

Prišli smo do pomembne ugotovitve. Če je $\alpha \leq \frac{1}{4}$, obstajajo samo sipalna stanja, če pa je $\alpha > \frac{1}{4}$, kar bomo obravnavali v nadaljevanju, pa so možna tudi vezana stanja.

Recimo, da smo našli vezano stanje $\psi_v(x)$ z energijo E_v. Raztegnimo funkcijo[1] za faktor λ in poglejmo, če je lastna funkcija operatorja H:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\mathrm{d}^2 \psi_v(\lambda x)}{\mathrm{d}x^2} + \frac{\alpha \psi_v(\lambda x)}{x^2} \right) = -\frac{\hbar^2 \lambda^2}{2m} \left(\frac{\mathrm{d}^2 \psi_v(\lambda x)}{\mathrm{d}(\lambda x)^2} + \frac{\alpha \psi_v(\lambda x)}{(\lambda x)^2} \right) = \lambda^2 E_v. \tag{7}$$

Funkcija $\psi_v(\lambda x)$ je lastna funkcija z energijo $\lambda^2 E_v$, ker pa je λ katerokoli realno število, to pomeni, da če nam uspe najti eno vezano stanje, potem obstajajo lastna stanja za vsako energijo. Sistem se torej nahaja v vzbujenem stanju, osnovno stanje pa sploh ne obstaja. Nekaj z našim potencialom ni v redu, saj bi takšen sistem lahko sprostil neskončno količino energije.

2. Rešitev Schrodingerjeve enačbe

V tem poglavju bomo poskušali rešiti Schrodingerjevo enačbo za sipalna ter vezana stanja. Zapišimo še enkrat Schrodingerjevo enačbo:

$$\frac{\mathrm{d}^2 \psi(x)}{\mathrm{d}x^2} + \frac{\alpha \psi(x)}{x^2} = \varkappa^2 \psi(x). \tag{8}$$

Do rešitve lahko pridemo s pomočjo vrst. Vzemimo nastavek $\psi(x) = x^p \sum_{k=0}^\infty a_k x^k$ in ga vstavimo v enačbo (8):

$$\sum_{k=0}^\infty a_k [(p+k)(p+k-1) + \alpha] x^{k-2} = \varkappa^2 \sum_{k=0}^\infty a_k x^k. \tag{9}$$

Enačba mora veljati za vsak k[1]:

$$\begin{aligned}
k = 0: \quad & a_0[p(p-1) + \alpha] = 0, \\
& p = \nu = \frac{1}{2} \pm \sqrt{\frac{1}{4} - \alpha} = \frac{1}{2} \pm i g_1, \\
k = 1: \quad & a_1[2p + p(p-1) + \alpha] = 0, \\
& a_1 = 0, \\
k = 2: \quad & a_2[2pk + k(k-1)] = \varkappa^2 a_2 x^2, \\
\dots &
\end{aligned}$$

Ker je $a_1 = 0$, so vsi lihi koeficienti enaki nič. Ostanejo nam samo sodi koeficienti, za katere lahko zapišemo rekurzijsko formulo:

$$a_{k+2} = \frac{\varkappa^2 a_k}{k(k+2(\pm ig_1))}, \qquad ig_1 = \sqrt{\frac{1}{4} - \alpha}, \tag{10}$$

ki je enaka rekurzijski formuli koeficientov Besslove funkcije[3] reda $p = \pm ig_1$. Nastavek preoblikujemo v $\psi(x) = x^{\frac{1}{2}} Z(x)$, kjer za $Z(x)$ velja Besslova diferencialna enačba[3]:

$$\frac{\mathrm{d}^2 Z(x)}{\mathrm{d}x^2} + \frac{1}{x}\frac{\mathrm{d}Z(x)}{\mathrm{d}x} + \Bigg(-\varkappa^2 - \frac{(\frac{1}{4} - \alpha)}{x^2}\Bigg) Z(x) = 0. \tag{11}$$

Rešitev Schrodingerjeve enačbe je na dlani. Rešimo jo najprej za vezana stanja, za katera velja:

$$\begin{aligned} &\varkappa^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2} > 0, \\ &(\frac{1}{4} - \alpha) = (ig_1)^2 < 0 \qquad (g_1 > 0). \end{aligned}$$

Enačbo (11) prepišemo v:

$$\frac{\mathrm{d}^2 Z(x)}{\mathrm{d}x^2} + \frac{1}{x}\frac{\mathrm{d}Z(x)}{\mathrm{d}x} + \Bigg(-\varkappa^2 - \frac{(ig_1)^2}{x^2}\Bigg) Z(x) = 0. \tag{12}$$

Rešitev enačbe (12) je linearna kombinacija modificiranih Besslovih funkcij[3] reda ig_1, rešitev Schrodingerjeve enačbe pa:

$$\psi(x) = \sqrt{x}\Bigg(A_1 I_{ig_1}(\varkappa x) + B_1 K_{ig_1}(\varkappa x)\Bigg). \tag{13}$$

Dobljena funkcija (13) mora ustrezati robnim pogojem:

$$\begin{aligned} &\psi(x)|_\infty = 0, \\ &\qquad \to A_1 = 0, \\ &\psi(x)|_0 = 0, \\ &\qquad \to \text{pogoj avtomatsko izpoljnjen}, \end{aligned}$$

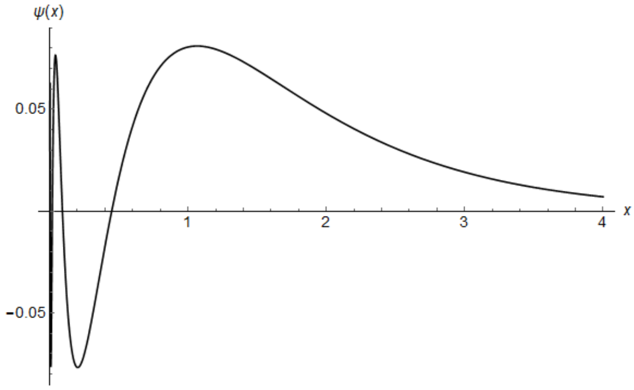
kar nam da:

$$\psi(x) = B_1 \sqrt{x} K_{ig_1}(\varkappa x), \qquad B_1 = \varkappa \sqrt{\frac{2\sinh(\pi g_1)}{\pi g_1}}. \tag{14}$$

Limitna primera funkcije (14) sta (glej dodatek):

$$\begin{aligned} x \ll 1: &\quad \psi(x) \approx -B_1 \sqrt{\frac{\pi x}{g_1 \sinh(g_1 \pi)}} \sin\Bigg(g_1 \ln\big(\frac{\varkappa x}{2}\big) - \arg\big(\Gamma(1 + ig_1)\big)\Bigg), \\ x \gg 1: &\quad \psi(x) \asymp B_1 \pi \frac{e^{-\varkappa x}}{\sqrt{2\pi\varkappa}} \sim 0. \end{aligned}$$

Opazimo, da funkcija $\psi(x)$ v neskončnosti pada proti nič, v izhodišču pa močno oscilira, kar je posledica divergence logaritma. Oscilacija povzroči, da ima vsaka rešitev neskončno ničel. Sistem je tako za vsa vezana stanja v neskončno vzbujenem stanju in osnovno stanje sploh ne obstaja! To smo sicer na elegantnejši način pokazali že v prejšnjem poglavju.



Slika 1. Funkcija $\psi_{g_1}(x)$ v odvisnosti od x za $g_1 = 2$.

Poiščimo še rešitev sipalnih stanj, za katera velja:

$$-\varkappa^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} = k^2 > 0,$$
$$(\frac{1}{4} - \alpha) = (ig_1)^2 < 0 \qquad (g_1 > 0).$$

Enačbo (11) prepišemo v:

$$\frac{\mathrm{d}^2 Z(x)}{\mathrm{d}x^2} + \frac{1}{x}\frac{\mathrm{d}Z(x)}{\mathrm{d}x} + \left(k^2 - \frac{(ig_1)^2}{x^2}\right) Z(x) = 0. \tag{15}$$

Za razliko od prej, je sedaj rešitev[3] kar linearna kombinacija Besslovih funkcij, ki jo zapišemo s Hanklovimi funkcijami. Rešitev Schrodingerjeve enačbe je:

$$\psi(x) = \sqrt{x}\left(A_2 H^{(1)}_{ig_1}(kx) + B_2 H^{(2)}_{ig_1}(kx)\right), \tag{16}$$

ki mora ustrezati robnim pogojem:

$$\begin{aligned} &\psi(x)|_\infty \neq 0, \\ &\qquad \to \text{pogoj avtomatsko izpoljnjen}, \\ &\psi(x)|_0 = 0, \\ &\qquad \to \text{pogoj avtomatsko izpoljnjen}, \end{aligned}$$

s čimer ni težav. Funkcijo (16) normiramo, kar nam da zvezo med konstantama A_2 in B_2. Znašli smo se v težavah, saj smo upoštevali vse pogoje, funkcija (16) pa je še vedno odvisna od ene poljubne konstante. Amplitudi Hanklovih funkcij sta tako poljubno veliki. Hitro lahko ugotovimo, da nam je zmanjkal en pogoj, ki bi določil preostalo konstanto. Limitna primera funkcije (16) sta (glej dodatek):

$$\begin{aligned} x \ll 1: \quad &\psi(x) = \sqrt{x}\left(A_2 e^{\frac{g_1\pi}{2}}\left(F_{ig_1}(kx) + G_{ig_1}(kx)\right) + B_2 e^{\frac{-g_1\pi}{2}}\left(F_{ig_1}(kx) - G_{ig_1}(kx)\right)\right), \\ &F_{ig_1}(kx) \approx \sqrt{\frac{2\tanh(\frac{g_1\pi}{2})}{\pi g_1}} \cos\left(g_1 \ln(\frac{kx}{2}) - \arg\left(\Gamma(1+ig_1)\right)\right), \\ &G_{ig_1}(kx) \approx \sqrt{\frac{2\coth(\frac{g_1\pi}{2})}{\pi g_1}} \sin\left(g_1 \ln(\frac{kx}{2}) - \arg\left(\Gamma(1+ig_1)\right)\right), \\ x \gg 1: \quad &\psi(x) \asymp B_2 \sqrt{\frac{2}{\pi k}} e^{i\frac{\pi}{2}(\frac{1}{2}+ig_1)}\left(e^{-ikx} + \frac{A_2}{B_2} e^{-i\pi(\frac{1}{2}+ig_1)} e^{ikx}\right). \end{aligned}$$

V izhodišču zopet dobimo oscilacije, v neskončnosti pa imamo dva potujoča valova, kjer eden potuje iz, drugi pa v izhodišče. Poljubno visoka amplituda izhodnega vala ne zagotavlja ohranjanja verjetnosti!

3. Renormalizacija

V prejšnem poglavju smo naleteli na resne probleme. Za vezana stanja energija ni bila kvantizirana in osnovno stanje ni obstajalo, sipalna stanja pa so imela poljubno visoko amplitudo. Izvor teh problemov je v tem, da ima x^{-2} potencial v izhodišču premočno singularnost. Težav se znebimo, če popravimo potencial tako, da ga za ϵ premaknemo iz izhodišča[1]:

$$V(x) = \begin{cases} \infty, & x \leq \epsilon \\ -\frac{a}{x^2}, & x > \epsilon \end{cases} \tag{17}$$

S tem dobimo na spodnji meji (pri ϵ) dodaten pogoj, ki ga funkcija $\psi(x)$ ne bo avtomatsko izpolnila. Na koncu bomo naredili limito $\epsilon \to 0$ ter pogledali, kaj ostane od pogojev, oz. kako moramo ravnati z njimi, da se izognemo problemov.

Tako kot prej začnimo z vezanmi stanji, za katera prepišemo funkcijo (13):

$$\psi(x) = \sqrt{x}\Big(A_1 I_{ig_1}(\varkappa x) + B_1 K_{ig_1}(\varkappa x)\Big),$$

ki mora zadostiti robnim pogojem:

$$\begin{aligned} \psi(x)|_\infty &= 0, \\ &\to A_1 = 0, \\ \psi(x)|_\epsilon &= 0, \\ &\to K_{ig_1}(\varkappa\epsilon) = 0, \\ &\to g_1 \ln\big(\frac{\varkappa\epsilon}{2}\big) - \arg\big(\Gamma(1+ig_1)\big) = n\pi \qquad (n \in \mathbb{Z}), \end{aligned} \tag{18}$$

kjer smo uporabili razvoj modificirane Besslove funkcije za majhne x (glej dodatek). Pridelali smo dodaten pogoj:

$$\varkappa_n \epsilon = 2e^{\frac{1}{g_1}\big(\arg(\Gamma(1+ig_1))+n\pi\big)}, \tag{19}$$

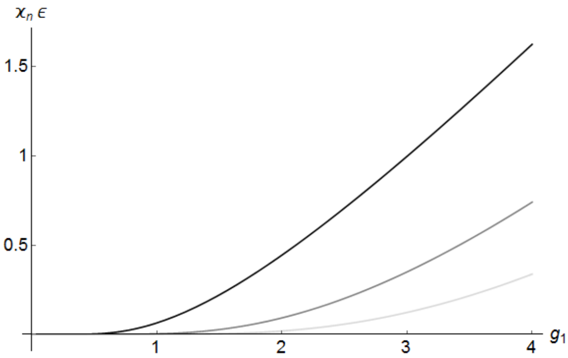
ki nam diskretizira energijo vezanih stanj. Odpravili smo prvi problem! Pošljimo sedaj $\epsilon \to 0$ in si pomagajmo s sliko 2 in 3. Ker želimo, da $\varkappa_n$ ostane konstanten, ko gre $\epsilon \to 0$, moramo poslati tudi $g_1 \to 0$. Sedaj, ko vemo, da mora biti g_1 majhen, razvijmo funkcijo $\arg\big(\Gamma(1+ig_1)\big)$ za male g_1[2]:

$$\begin{aligned} &\Gamma(1+ig_1) \approx 1 - iC_o g_1, \\ &\arg\big(\Gamma(1+ig_1)\big) = \arctan(-C_o g_1) \approx -C_o g_1. \end{aligned} \tag{20}$$

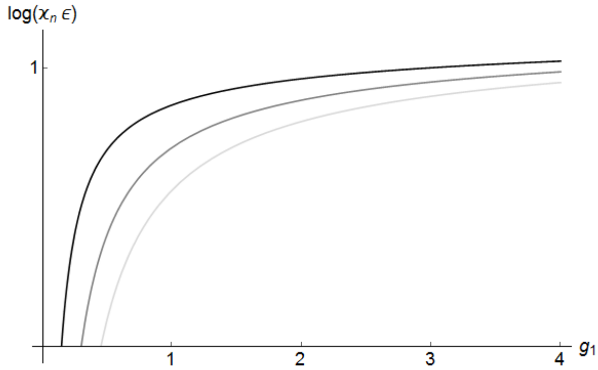
Rezultat (20) vstavimo v pogoj (19):

$$\varkappa_n \epsilon = \frac{2}{\gamma} e^{-\frac{n\pi}{g_1}} \qquad (n \in \mathbb{N}), \tag{21}$$

kjer je γ Euler-Mascheronijeva konstanta in kjer smo spremenili $n \to -n$ in upoštevali, da mora biti eksponent majhen, zato so odpadli vsi negativni n.



Slika 2. $\varkappa_n\epsilon$ v odvisnosti od g_1 za n=1 (črna), n=2 (siva) in n=3 (svetlo siva).

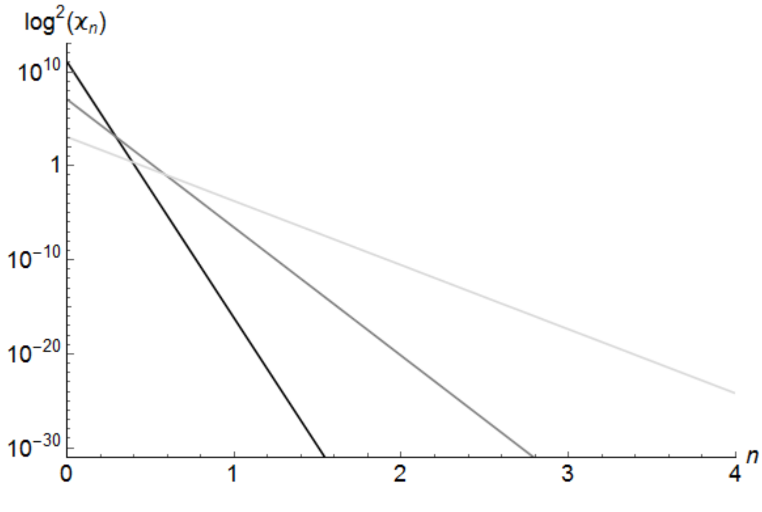


Slika 3. $\varkappa_n\epsilon$ v logaritemskem merilu v odvisnosti od g_1.

Za osnovno stanje se pogoj v limiti zapiše kot:

$$\varkappa_1\epsilon = \frac{2}{\gamma}e^{-\frac{\pi}{g_1}}, \tag{22}$$

kjer je $\varkappa_1$ majhen. Za $n = 2, 3, ..$ dobimo $\varkappa_2, \varkappa_3, ..$, ki pa so praktično 0. To lahko vidimo iz slike 3, kjer je narisana logaritemska odvisnost $\varkappa_n$ od g_1 za različne n. V limitnem primeru $\epsilon \to 0$ dobimo tako samo osnovno stanje, ki pa ima nedoločljivo energijo, ker je le ta odvisna od parametra ϵ. Na sliki 4 je prikazan energijski spekter za tri razične ϵ in g_1, kjer se lepo vidi, da za majhne ϵ in g_1 preživi samo osnovno stanje, saj eksponent v (21) vzbujena stanja pošje v nič.



Slika 4. ${\varkappa_n}^2$ v logaritemskem merilu v odvisnosti od n. Črna črta je za $\epsilon = 0.00001$ in $g_1 = 0.1$, siva za $\epsilon = 0.001$ in $g_1 = 0.2$ ter svetlo siva za $\epsilon = 0.1$ in $g_1 = 0.4$.

Popravimo še sipalna stanja. Prepišimo funkcijo (16):

$$\psi(x) = \sqrt{x}\left(A_2 H^{(1)}_{ig_1}(kx) + B_2 H^{(2)}_{ig_1}(kx)\right),$$

ki mora zadostiti robnim pogojem:

$$\begin{aligned}
&\psi(x)|_\infty \neq 0,\\
&\qquad \to \text{pogoj avtomatsko izpoljnjen},\\
&\psi(x)|_\epsilon = 0,\\
&\qquad \to \frac{A_2}{B_2} = -\frac{H^{(2)}_{ig_1}(k\epsilon)}{H^{(1)}_{ig_1}(k\epsilon)} = -e^{2i\vartheta},\\
&\qquad \to \vartheta \approx i\frac{g_1}{2}\pi - \arctan\left[\coth(\frac{g_1\pi}{2})\tan\left(g_1\ln(\frac{k\epsilon}{2}) - \arg\left(\Gamma(1+ig_1)\right)\right)\right],
\end{aligned} \tag{23}$$

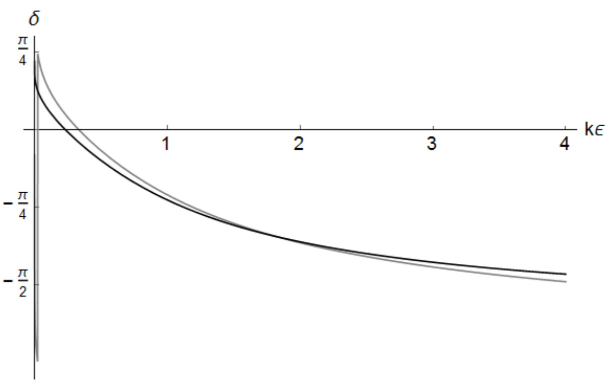
kjer smo uporabili razvoj Hanklovih funkcij za majhne x (glej dodatek). Rešitev zapišemo kot[1]:

$$\psi(x) = B_2\sqrt{x}\left(H^{(2)}_{ig_1}(kx) - e^{2i\vartheta}H^{(1)}_{ig_1}(kx)\right), \tag{24}$$

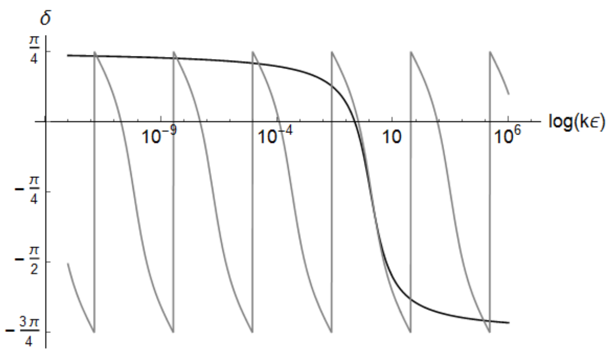
kjer je ϑ enaka (23). Problema ni več, saj z normiranjem določimo še preostalo poljubno konstanto B_2. Funkcijo (24) v neskončnosti zapišemo kot:

$$\begin{aligned}
&\psi(x) \asymp B_2\sqrt{\frac{2}{\pi k}}e^{i\frac{\pi}{2}(\frac{1}{2}+ig_1)}\left(e^{-ikx} - e^{2i\delta}e^{ikx}\right),\\
&\delta \approx -\frac{\pi}{4} - \arctan\left[\coth(\frac{g_1\pi}{2})\tan\left(g_1\ln(\frac{k\epsilon}{2}) - \arg\left(\Gamma(1+ig_1)\right)\right)\right],
\end{aligned} \tag{25}$$

kjer δ predstavlja fazni premik. Spreminjanje δ v odvisnosti od $k\epsilon$ je izrisano na slikah 5 in 6. V logaritemsku merilu se lepo vidi, kako se, z manjšanjem g_1 za majhne $k\epsilon$, fazni premik približuje vrednosti $\frac{\pi}{4}$. Zapomnimo si to!



Slika 5. δ v odvisnosti od $k\epsilon$. Črna je za $g_1 = 0.02$, siva pa za $g_1 = 0.2$.



Slika 6. δ v logaritemskem merilu. Zopet je črna za $g_1 = 0.02$, siva pa za $g_1 = 0.2$.

Sedaj pošljimo $\epsilon \to 0$ in izrazimo k s pomočjo $\varkappa_1$ (22):

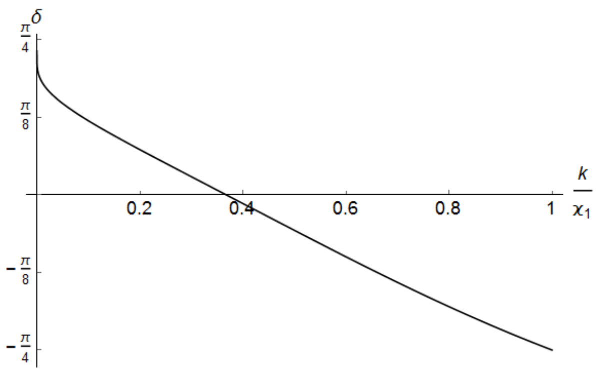
$$k = \frac{2}{\gamma\epsilon} e^{-\frac{\pi}{g_1}} \frac{k}{\varkappa_1} \tag{26}$$

in ga skupaj s približkom (20) vstavimo v enačbo (25):

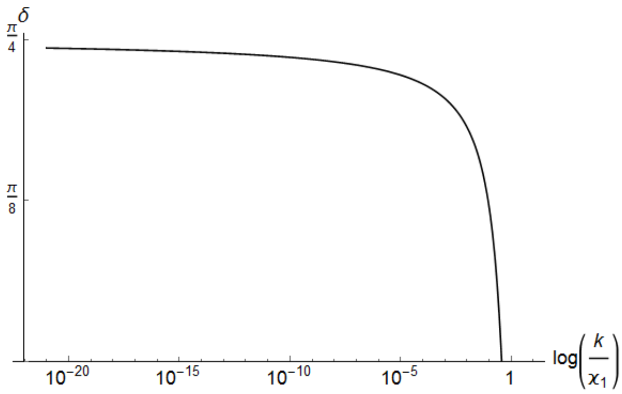
$$\delta \approx -\frac{\pi}{4} - \arctan\left[\coth(\frac{g_1\pi}{2}) \tan\left(g_1 \ln(\frac{k}{\varkappa_1})\right)\right], \tag{27}$$

$$\tan\delta \approx \frac{\ln\left(\frac{k}{\varkappa_1}\right) + \frac{\pi}{2}}{\ln\left(\frac{k}{\varkappa_1}\right) - \frac{\pi}{2}}, \tag{28}$$

kjer smo v (28) uporabili razvoj za majhne argumente[2] $\frac{k}{\varkappa_1}$. Fazni premik δ v odvisnosti od vrednosti $\frac{k}{\varkappa_1}$ je izrisan na sliki 7 in 8. Iz slike 6 in 8 razberemo, da če v popravljenem potencialu limitira $\epsilon \to 0$, torej se potencial približuje začetnemu, dobimo za majhne energije sipalnih stanj, oziroma za $k \ll \varkappa_1$, fazni premik enak $\frac{\pi}{4}$.



Slika 7. δ v odvisnosti od $\frac{k}{\varkappa_1}$ za majhne $\frac{k}{\varkappa_1}$.



Slika 8. δ v logaritemskem merilu za majhne $\frac{k}{\varkappa_1}$.

Zakaj smo se tako trudili s faznim premikom? Recimo, da želimo iz meritev rekonstruirati potencial. Z meritvijo energije vezanega stanja:

$$E_n = -\frac{\hbar^2 {\varkappa_n}^2}{2m} \tag{29}$$

dobimo zvezo med ϵ in g_1 (19) oz. (21). Za določitev ϵ in g_1 pa potrebujemo še eno meritev. Lahko poiščemo še eno vezano stanje in njegovo energijo, ali pa izvedemo nizko energijsko sipanje in izmerimo fazni premik, ki pa je prav tako odvisen od ϵ in g_1 (25) oz. (28). Za zelo majhne ϵ pa dveh vezanih stanj sploh ni, saj imamo samo osnovno stanje, zato smo primorani v meritev faznega premika.

Dolgujemo še eno pojasnilo[1]. Prej smo namreč dokazali, da če ima sistem eno vezano stanje, je vsaka negativna energija lastna vrednost in tako sistem nima osnovnega stanja. To sedaj ne velja več, ker smo potencial premaknili za ϵ iz izhodišča, in zato lastnega stanja ne moremo poljubno raztegovati, saj s tem premikamo robni pogoj na spodnji meji. Kljub temu, da smo ϵ poslali proti 0, zlom simetrije potenciala ostaja.

4. Sebi adjungirana razširitev

V tem poglavju bomo poiskali izvor problemov in bolj formalen način odprave le teh. Na hitro obnovimo linearne operatorje. Imamo operator H:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \frac{\alpha}{x^2}\right) \tag{30}$$

z definicijskim območjem $D(H)$ in $H^\dagger$ z definicijskim območjem $D(H^\dagger)$. Definicijsko območjo operatorjev H in $H^\dagger$ sestavljata množici funkcij $\psi(x)$ in $\phi(x)$, ki sta v Hilbertovem prostoru, v katerem je definiran notranji produkt. Operator H je sebi adjungiran operator, če sta izpolnjena naslednja pogoja:

- operator je hermitski: $H = H^\dagger$
- definicijski območji sovpadata: $D(H) = D(H^\dagger)$

Na zadnji pogoj velikokrat pozabimo. Recimo, da je operator H hermitski:

$$\langle\phi(x)|H\psi(x)\rangle = \langle H\phi(x)|\psi(x)\rangle \tag{31}$$

definicijski območji pa ne sovpadata: $D(H^\dagger) \supset D(H)$, kar se lahko zgodi. Če želimo, da bo H sebi adjungiran, moramo razširiti območje $D(H)$, da sovpade z območjem $D(H^\dagger)$. Postopek imenujemo sebi adjungirana razširitev.

Najprej poglejmo, če je prvi pogoj že izpolnjen, torej če je operator hermitski:

$$\begin{aligned}\langle\phi(x)|H\psi(x)\rangle &= -\frac{\hbar^2}{2m}\int_0^\infty \phi(x)\left(\frac{\mathrm{d}^2\psi(x)}{\mathrm{d}x^2} + \frac{\alpha\psi(x)}{x^2}\right)\mathrm{d}x = \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\phi(x)^*\frac{\mathrm{d}\psi(x)}{\mathrm{d}x}\Big|_0^\infty - \left(\frac{\mathrm{d}\phi(x)}{\mathrm{d}x}\right)^*\psi(x)\Big|_0^\infty + \int_0^\infty\left(\frac{\mathrm{d}^2\phi(x)}{\mathrm{d}x^2} + \frac{\alpha\phi(x)}{x^2}\right)^*\psi(x)\mathrm{d}x\right] = \\ &= \langle H\phi(x)|\psi(x)\rangle - \frac{\hbar^2}{2m}\left[\phi(x)^*\frac{\mathrm{d}\psi(x)}{\mathrm{d}x} - \left(\frac{\mathrm{d}\phi(x)}{\mathrm{d}x}\right)^*\psi(x)\right]\Big|_0^\infty.\end{aligned} \tag{32}$$

Operator H je hermitski, če je robni člen enak 0. Pogoj, da sta na robu funkciji $\psi(x)$ in $\phi(x)$ nič, ne zadostuje, saj lahko odvoda v izhodišču divergirata, kar se pogosto tudi zares zgodi. Neskončnost ne predstavlja težav, ker smo v L^2 prostoru. Problem v izhodišču rešimo tako, da prestavimo rob v okolico ϵ, kjer sta funkcija $\psi(x)$ in njen odvod enaka nič. Robni člen je tako zares enak 0 in operator H je hermitski na območju (ϵ, ∞). Definicijsko območje $D(H)$ smo tako strogo določili, za razliko od območja $D(H^\dagger)$, ki je kar celoten Hilbertov prostor, saj bo robni člen enak 0 za vsak $\phi(x)$ iz Hilbertovega prostora.

Da bo operator H sebi adjungiran moramo narediti sebi adjungirano razširitev, ki pa je bolj matematične kot fizikalne narave. Zaradi tega je narejena v dodatku B, mi pa se bomo na tem mestu ustavili. Naredimo torej sebi adjungirano razširitev operatorja H. Najprej definirajmo podprostor $N_\pm$[5]:

$$N_\pm = \left\{\phi_\pm(x) \in D(H^\dagger), \qquad H^\dagger\phi_\pm(x) = \pm i\lambda\phi_\pm(x)\right\}, \tag{33}$$

kjer je λ realna in pozitivna. Dimenzijo (število linearno neodvisnih rešitev) podprostora $N_\pm$ predstavlja $n_\pm$, za katerega sta Weyl in von Neumann dokazala[5]:

- $n_+ = n_- = 0$: Operator H je sebi adjungiran.
- $n_+ = n_- = n \geq 1$: Obstaja neskončno mnogo sebi adjungiranih razširitev, parametriziranih z n x n matriko.
- $n_+ \neq n_-$: Sebi adjungirana razširitev ne obstaja.

V našem primeru[1] je $n_+ = n_- = n = 1$ in imamo enoparametrično družino razširitve. Rešitev enačbe (33):

$$\frac{\mathrm{d}^2\phi_\pm(x)}{\mathrm{d}x^2} + \frac{\alpha\phi_\pm(x)}{x^2} = {\varkappa_\pm}^2\phi_\pm(x),$$

kjer je:

$$\varkappa_\pm = \varkappa_0 e^{\mp i\frac{\pi}{4}} = \sqrt{\mp i\frac{\lambda 2m}{\hbar^2}}. \tag{34}$$

To že poznamo, saj je enaka rešitvi Schrodingerjeve enačbe:

$$\phi_\pm(x) = A_\pm\sqrt{x}K_{ig_1}(\varkappa_\pm x), \tag{35}$$

pri čemer smo že upoštevali robne pogoje. Množica funkcij $\psi(x)$ je v sebi adjungirani domeni $(D(H) = D(H^\dagger))$, če velja[1]:

$$\Phi(x) = \phi_+(x) + \eta\phi_-(x), \tag{36}$$

$$\langle\Phi(x)|H\psi(x)\rangle = \langle H\Phi(x)|\psi(x)\rangle,$$

$$\lim_{x\to 0}\big[\Phi(x)^*\frac{\mathrm{d}\psi(x)}{\mathrm{d}x} - \big(\frac{\mathrm{d}\Phi(x)}{\mathrm{d}x}\big)^*\psi(x)\big] = 0. \tag{37}$$

Da bo operator H sebi adjungiran, mora biti izpolnjen pogoj (37), zato bomo razvili funkciji $\Phi(x)$ in $\psi(x)$ za majhne x (glej dodatek). Približka bomo vstavili v pogoj (37) ter naredili limito proti 0, s čimer dobimo v splošnem nek nov pogoj.

Razvijmo torej $\Phi(x)$:

$$\Phi(x) \approx \sqrt{x}\bigg(C_1 e^{ig_1\ln(\varkappa_0 x)} - D_1 e^{-ig_1\ln(\varkappa_0 x)}\bigg), \tag{38}$$

$$\frac{\mathrm{d}\Phi(x)}{\mathrm{d}x} \approx \frac{1}{\sqrt{x}}\bigg((\frac{1}{2} + ig_1)C_1 e^{ig_1\ln(\varkappa_0 x)} - (\frac{1}{2} - ig_1)D_1 e^{-ig_1\ln(\varkappa_0 x)}\bigg), \tag{39}$$

$$C_1/D_1 = -\frac{i}{2}\sqrt{\frac{\pi}{g_1\sinh(g_1\pi)}}e^{\mp i\left(\arg\left(\Gamma(1+ig_1)\right)+g_1\ln 2\right)}\bigg(A_+e^{\pm i\frac{g_1\pi}{4}} + \eta A_- e^{\mp i\frac{g_1\pi}{4}}\bigg),$$

in $\psi(x)$:

$$\psi(x) \approx -B_1\sqrt{\frac{\pi x}{g_1\sinh(g_1\pi)}}\sin\xi, \tag{40}$$

$$\frac{\mathrm{d}\psi(x)}{\mathrm{d}x} \approx -B_1\sqrt{\frac{\pi}{xg_1\sinh(g_1\pi)}}\bigg(\frac{1}{2}\sin\xi + g_1\cos\xi\bigg), \tag{41}$$

$$\xi = g_1\ln\big(\frac{\varkappa x}{2}\big) - \arg\big(\Gamma(1+ig_1)\big).$$

Vstavimo sedaj enačbe (41), (40), (39) in (38) v pogoj (37). Dobimo:

$$\bigg[(\frac{x}{x_o})^{-2ig_1} - 1\bigg]\bigg[\frac{1}{2}\sin\xi + g_1\cos\xi\bigg] - \bigg[(\frac{1}{2} - ig_1)(\frac{x}{x_o})^{-2ig_1} - (\frac{1}{2} + ig_1)\bigg]\sin\xi \to 0, \tag{42}$$

kjer sta:

$$x_0 = \frac{1}{\varkappa_0}(\frac{D_1*}{C_1*})^{-2ig_1},$$

$$\xi = g_1\ln\big(\frac{\varkappa x}{2}\big) - \arg\big(\Gamma(1+ig_1)\big).$$

Pogoj (42) je izpolnjen, če je $x = x_0$ in $\sin\xi = 0$, torej če je:

$$g_1\ln\big(\frac{\varkappa\epsilon}{2}\big) - \arg\big(\Gamma(1+ig_1)\big) = n\pi \qquad (n\in\mathbb{Z}). \tag{43}$$

Razprave na tem mestu ne bomo nadaljevali, ker je dobljeni pogoj enak pogoju (18).

5. Zaključek

Razrešitev x^{-2} potenciala je težavna. Uspe nam z renormalizacijo definicijskega območja ali sebi adjungirano razširitvijo, vendar se takšna pot upira misli, ker vedno stremimo k čim bolj enostavnim modelom, ki zadovoljivo opišejo naravo problema. Vseeno pa smo se naučili, da ni nujno vsak hermitski operator tudi sebi adjungiran operator. Kakorkoli že, reševanje lastnih stanj v potencialu dipola je treba vzeti resno.

6. Dodatek

V tem dodatku so zbrane vse uporabljene lastnosti modificiranih Besslovih in Hanklovih funkcij. Modificirana Besslova funkcija K z imaginarnim redom ig_1 se v limitnih primerih glasi[4]:

$$x \ll 1: \quad K_{ig_1}(\varkappa x) \approx -\sqrt{\frac{\pi}{g_1 \sinh(g_1 \pi)}} \sin\Big(g_1 \ln\big(\frac{\varkappa x}{2}\big) - \arg\big(\Gamma(1+ig_1)\big)\Big), \tag{44}$$

$$x \gg 1: \quad K_{ig_1}(\varkappa x) \asymp \pi \frac{e^{-\varkappa x}}{\sqrt{2\pi \varkappa x}}. \tag{45}$$

Hanklovi funkciji z imaginarnim redom ig_1 se v limitnih primerih glasita[4, 2]:

$$x \ll 1: \quad H^{(1)(2)}_{ig_1}(kx) = e^{\pm \frac{g_1 \pi}{2}} \Big(F_{ig_1}(kx) \pm G_{ig_1}(kx)\Big), \tag{46}$$

$$F_{ig_1}(kx) \approx \sqrt{\frac{2\tanh(\frac{g_1\pi}{2})}{\pi g_1}} \cos\Big(g_1 \ln\big(\frac{kx}{2}\big) - \arg\big(\Gamma(1+ig_1)\big)\Big),$$

$$G_{ig_1}(kx) \approx \sqrt{\frac{2\coth(\frac{g_1\pi}{2})}{\pi g_1}} \sin\Big(g_1 \ln\big(\frac{kx}{2}\big) - \arg\big(\Gamma(1+ig_1)\big)\Big),$$

$$x \gg 1: \quad H^{(1)(2)}_{ig_1}(kx) \asymp \sqrt{\frac{2}{\pi kx}} e^{\pm i(kx - \frac{\pi}{4} - \frac{ig_1\pi}{2})}. \tag{47}$$

Zahvala
Za nasvete pri pisanju članka bi se rad zahvalil mentorju izred. prof. dr. Marku Žnidariču.

LITERATURA

[1] Andrew M. Essin, in David J. Griffiths, *Quantum mechanics of the 1/x2 potential*, American Journal of Physics **74** (2006), 109.

[2] I.S. Gradshteyn in I.M. Ryzhik, *Table of integrals, series, and products*, Academic Press, 2007.

[3] George B. Arfken in Hans J. Weber, *Mathematical Methods for Physicists*, Elsevier, 2005.

[4] T. M. Dunster, *Bessel Functions of Purely Imaginary Order, with an Application to Second-Order Linear Differential Equations Having a Large Parameter*, SIAM Journal on Mathematical Analysis **21** (1990), 995.

[5] Guy Bonneau, Jacques Faraut in Galliano Valent, *Self-adjoint extensions of operators and the teaching of quantum mechanics*, American Journal of Physics **69** (2001), 332.

[6] C. Desfrançois, H. Abdoul-Carime, N. Khelifa in J. P. Schermann, *Potentials: Electron Exchange between Rydberg Atoms and Polar Molecules*, Physical Review Letters **73** (1994), 2436.