

Skaalainvarianssi kvanttimekaniikassa

LuK-tutkielma, 1.9.2013

Tekijä:

OLLI KOSKIVAARA

Ohjaaja:

KIMMO TUOMINEN



JYVÄSKYLÄN YLIOPISTO
FYSIIKAN LAITOS

TIIVISTELMÄ

Tässä tutkielmassa tarkastellaan klassisesti skaalainvarianttia systeemiä kvanttimekaniikan keinoin. Lähtökohdaksi otetaan klassinen mekaniikka, ja tarkastelemalla vaikutusintegraalia todetaan, että ainoa systeemin skaalainvarianssin takaava potentiaali on muotoa D/r^2 , missä D on vakio. Tämän jälkeen siirrytään ratkaisemaan Schrödingerin yhtälöä kyseiselle potentiaalille. Ensiksi huomataan, että dimensioanalyysin perusteella sidottuja tiloja esittäviä ratkaisuja ei voi olla. Lisäksi havaitaan negatiivisia energioita vastaavien tilojen olevan ongelmallisia. Nämä ongelmat asetetaan kuitenkin sivuun, ja ratkaistaan ominisarvo-ongelma suoraviivaisesti. Tuloksena saadaan negatiivisille energioille matemaattisesti hyvin määritellyt ratkaisut. Ongelmaksi muodostuvat kuitenkin ratkaisujen raju oskillointi origon läheisyydessä sekä negatiiviseen äärettömyyteen jatkuvat energiat.

Katkaisemalla potentiaali etäisyydelle ε origosta ja ratkaisemalla ominisarvo-ongelma uudestaan saadaan alhaalta rajoitettu diskreetti energiaspektri, joka vastaa odotuksia fysikaalisesta tilanteesta. Seuraavaksi ongelmana on rajan $\varepsilon \rightarrow 0$ ottaminen siten, että tilanteen fysikaalinen mielekkyys säilyy. Ratkaisu saadaan vaatimalla, että perustilan energia E_1 pysyy rajaprosessissa vakiona. Muut energiatilat häviävät rajankäynnissä, ja potentiaalın voimakkuutta kuvaavan parametrin arvo määrätty.

Tutkielman viimeisessä osiossa keskustellaan klassisen ja kvanttimekaanisen analyysin välisestä erosta. Skaalainvariantissa systeemissä ei voi esiintyä energiaskaalaa, kuten dimensioanalyysikin jo ennakoi. Pitkän analyysin seurauksena saatiin kuitenkin ratkaisu, jolla on hyvin määritelty perustila. Näennäisen ristiriidan todetaan olevan seurausta anomaalisesta symmetriarikosta, joka tapahtuu siirryttäessä klassisesta teoriasta kvanttiteoriaan. Tässä työssä tarkasteltu $\frac{1}{r^2}$ -potentiaali on esimerkki tapauksesta, jossa systeemillä klassisesti ollut symmetria, tässä tapauksessa skaalainvarianssi, rikkoutuu siirryttäessä kvanttiteoriaan. Lopuksi esitellään lyhyesti muita symmetriarikkoja sekä joitakin niihin liittyviä ilmiöitä.

ABSTRACT

In this Bachelor's thesis a classically scale invariant system is studied from a quantum mechanical point of view. By studying the classical action integral it is first derived, that the only potential that guarantees a system to be scale invariant is the infamous inverse square potential $\frac{D}{r^2}$, where D is a constant. Next, the potential is inserted into Schrödinger's equation. It is first noted that on the grounds of dimensional analysis there cannot be bound states. Also, negative energy states are noticed to be problematic. These problems are put aside, and the eigenvalue problem is solved straightforwardly, resulting with normalizable solutions for the negative energy states. Although the solutions are well defined mathematically, they do not satisfy the usual expectations one has for a physical system. There is no ground state energy, and the solutions oscillate infinitely rapidly near the origin.

As the origin is problematic, the potential is introduced again with a cutoff distance ε from the origin. The eigenvalue problem is solved again, resulting with a bounded discrete energy spectrum. The next problem is how to take the limit $\varepsilon \rightarrow 0$ without losing the physical properties of the situation. The answer is to require that the ground state energy remains constant during the process. When the limit is taken, all excited states vanish, and the value of the coupling constant, describing the strength of the potential in question, is fixed.

The last part of this thesis deals with the differences between the classical and quantum mechanical analyses. A preferred energy scale cannot exist since the system is scale invariant, an argument supported by the dimensional analysis. Yet a solution with a well defined ground state was obtained. This seeming conflict between the analyses is identified to be a consequence of a phenomenon called anomalous symmetry breaking. Thus, the study of the inverse square potential offers an example of broken scale invariance. The symmetry of the classical situation is broken by quantization when a quantum mechanical analysis is carried out. Finally, other symmetry breakings occurring in physics are shortly introduced.

SISÄLTÖ

1	Johdanto	5
2	Skaalainvarianssi klassisessa mekaniikassa	6
2.1	Vapaa hiukkanen	6
2.2	Potentiaali	7
3	Schrödingerin yhtälö ja $\frac{1}{r^2}$-potentiaali	8
3.1	Schrödingerin yhtälö ja pallosymmetrinen potentiaali	8
3.2	Dimensioanalyysiin perustuva tarkastelu	9
3.3	Negatiiviseen energiaan liittyvät sidotut tilat	9
3.4	Ratkaisut origon läheisyydessä	12
3.5	Yleinen ratkaisu	14
4	Katkaistu $\frac{1}{r^2}$-potentiaali	17
4.1	Dimensioanalyysiin perustuva tarkastelu	17
4.2	Energiaspektri	18
4.3	Raja $\varepsilon \rightarrow 0$	19
5	Päätelmät	21
	Lähteet	23

1 JOHDANTO

Symmetrian merkitys matematiikassa ja luonnontieteissä on huomattava. Teoreettisessa fysiikassa erilaisten symmetrioiden tärkeys kiteytyy löytäjänsä Emmy Noetherin mukaan nimettyyn *Noetherin teoreemaan*. Sen mukaan jokaiseen fysikaaliseen systeemin symmetriaominaisuuteen liittyy jokin säilyvä suure. Fysiikassa puhutaankin usein suureen invarianssista eli säilymisestä tietyntyyppisissä muunnoksissa. Esimerkkejä ovat muun muassa pyörimismäärän invarianssi rotaatiosymmetrisessä järjestelmässä ja liikemäärän invarianssi translaatiosymmetrisessä järjestelmässä.

Systeemin tai ilmiön sanotaan olevan *skaalainvariantti*, jos sillä on ominaisuus, joka säilyy jonkin muuttujan dilataatiossa eli skaalauksessa. Yksinkertainen esimerkki lähes skaalainvarianssista prosessista on rantaviivan tai jonkin muun fraktaalimaisen rajan tarkastelu: reuna näyttää likimain yhtä rosoiselta eri etäisyyksiltä tarkasteltaessa. Toinen esimerkki on pilvien katseleminen lentokoneesta. Yksittäisen pilven etäisyyttä lentokoneesta on lähes mahdotonta arvioida, sillä pilven reuna on tarkastelijan näkökulmasta skaalainvariantti. Teoreettisessa fysiikassa on useita tilanteita, joissa on tarvetta skaalainvariantille teorialle. Yksi esimerkki löytyy statistisesta mekaniikasta: faasitransitioiden ja kriittisten pisteiden läheisyydessä systeemin käyttäytyminen ei ole lainkaan riippuvaista pituusskaalasta, joten prosesseja kuvaava teoria on skaalainvariantti. Myös kvanttikenttäteoriasta löytyy useita sovelluksia, joiden kuvaamiseen käytetään skaalainvarianttia teoriaa. [1]

Tässä tutkielmassa systeemin katsotaan olevan skaalainvariantti, jos sitä kuvaavat liikeyhtälöt eivät muutu kerrottaessa koordinaatteja jollakin yhteisellä vakiolla. Tutkielman ensimmäisessä osassa tarkastellaan klassisen mekaniikan keinoin, minkälaisten potentiaalien alaisuudessa systeemi voi olla skaalainvariantti. Seuraavaksi siirrytään tutkimaan klassisesti skaalainvarianttia systeemiä kvanttimekaniikan keinoin. Lopuksi tutkitaan saatuja tuloksia kokonaisuudessaan sekä tarkastellaan, mitä ilmiöitä niiden taustalla piilee.

Tämän tutkielman pääpaino on tarkastelun kohteena olevan potentiaalinen kvanttimekaanisessa analyysissä. Laskut on useimmiten esitetty välivaiheineen, jotta lukijan ei tarvitsisi keskeyttää etenemistä ihmettelemään, miten tulokset on saatu. Vaikka monet laskuista eivät ole teknisesti kovin haastavia, sisältyy niihin oivalluksia, jotka ovat olennaisia asian ymmärtämisen kannalta. Siten päättelyketjut on syytä esittää kokonaisuudessaan.

Tutkielma on aiheeltaan ja sisällöltään hyvin teoreettinen. Erilaisia sovelluksia ja käytännön esimerkkejä ei juurikaan käsitellä, joskin joitakin aiheeseen liittyviä luonnossa esiintyviä ilmiöitä mainitaan, ettei fysikaalinen motivaatio työn taustalla unohtuisi. Pohjimmiltaan tavoitteena on ymmärtää klassisesti skaalainvariantin systeemin käyttäytymistä kvanttimekaniikassa sekä selvittää ilmiöt, jotka ovat pääroolissa siirryttäessä klassisesta teoriasta kvanttiteoriaan.

2 SKAALAINVARIANSSI KLASSISESSA MEKANIIKASSA

Tarkastellaan potentiaalissa $V(r)$ liikkuvaa hiukkasta. Hiukkaseen liittyvä *vaikutusintegraali* on

$$S = \int L dt, \quad (1)$$

missä

$$L = T - V = \frac{1}{2}m\dot{r}^2 - V(r) \quad (2)$$

on hiukkasen liike- ja potentiaalienergian erotus, niin sanottu *Lagrangen funktio* [2]. Yksi tapa hiukkasen liikeyhtälöiden määrittämiseen on vaikutusintegraalin minimoiminen. Tarkasteltava systeemi on siis skaalainvariantti, jos sen vaikutusintegraali ei muutu koordinaattien skaalauksessa, sillä tällöin liikeyhtälötkään eivät muutu. [3]

2.1 VAPAA HIUKKANEN

Rajoitetaan tarkastelu ensin vapaaseen hiukkaseen, jolloin vaikutusintegraali on

$$S = \frac{m}{2} \int \left(\frac{dr}{dt} \right)^2 dt. \quad (3)$$

Koordinaattien skaalaamiseksi tehdään muunnokset

$$\begin{cases} t \rightarrow \tilde{t} = e^{\omega} t, & dt \rightarrow d\tilde{t} = e^{\omega} dt, \\ r \rightarrow \tilde{r} = e^{\tau} r, & dr \rightarrow d\tilde{r} = e^{\tau} dr, \end{cases}$$

missä ω ja τ ovat skaalaukset määrittäviä vakioita. Seuraavaksi vaaditaan, että vaikutusintegraali säilyy muuttumattomana skaalauksessa. Toisin sanoen

$$\frac{m}{2} \int \left(\frac{dr}{dt} \right)^2 dt = \frac{m}{2} \int \left(\frac{d\tilde{r}}{d\tilde{t}} \right)^2 d\tilde{t}.$$

Sijoittamalla muunnokset sekä asettamalla integrandit yhtäsuuriksi saadaan

$$\left(\frac{dr}{dt} \right)^2 dt = e^{2\tau - \omega} \left(\frac{d\tilde{r}}{d\tilde{t}} \right)^2 d\tilde{t},$$

josta saadaan skaalainvarianssin ehdoksi

$$\tau = \frac{\omega}{2}. \quad (4)$$

2.2 POTENTIAALI

Lisätään nyt systeemiin potentiaali $V(r)$. Tavoitteena on tarkastella, minkälainen potentiaalin tulee olla, jotta systeemi on edelleen skaalainvariantti. Rajoitetaan ensin tarkastelu infinitesimaalisiin muunnoksiin. Jos systeemi on skaalainvariantti infinitesimaalisissa koordinaattien skaalauksissa, säilyy invarianssi myös äärellisiin skaalauksiin, sillä ne voidaan rakentaa infinitesimaalisista skaalauksista. Muunnosten infinitesimaaliset versiot saadaan kehittämällä ne Taylorin sarjoiksi ω :n ja τ :n suhteen, siis

$$\begin{cases} \tilde{t} = e^{\omega}t = [1 + \omega + \mathcal{O}(\omega^2)]t \approx (1 + \omega)t, & d\tilde{t} = e^{\omega}dt \approx (1 + \omega)dt, \\ \tilde{r} = e^{\tau}r = [1 + \tau + \mathcal{O}(\tau^2)]r \approx (1 + \tau)r, & d\tilde{r} = e^{\tau}dr \approx (1 + \tau)dr, \end{cases}$$

kun ω ja τ ovat lähellä nollaa. Vastaavalla tavalla potentiaali $V(r)$ muuttuu skaalauksessa potentiaaliksi

$$\tilde{V}(r) = e^{\mu}V(r) \approx (1 + \mu)V(r), \quad (5)$$

missä μ on skaalauksen määräävä vakio.

Ehto potentiaalin pysymiselle vakiona skaalauksessa on

$$V(r)dt = \tilde{V}(r)d\tilde{t}.$$

Sijoittamalla yhtälön oikealle puolelle infinitesimaaliset muunnokset saadaan

$$V(r)dt = (1 + \mu)(1 + \omega)V(r)dt \approx (1 + \mu + \omega)V(r)dt,$$

missä hylättiin viimeisessä vaiheessa skaalausvakioiden suhteen toista kertalukua oleva termi. Näin ollen on oltava

$$\mu = -\omega. \quad (6)$$

Toisaalta skaalatulle potentiaalille pätee

$$\tilde{V}(r) = V(\tilde{r}) = V((1 + \tau)r) \approx V(r) + \tau r \frac{dV(r)}{dr}, \quad (7)$$

missä kehitettiin $V(r + \tau r)$ Taylorin sarjaksi. Yhdistämällä yhtälöt (5) ja (7) saadaan

$$(1 + \mu)V(r) = V(r) + \tau r \frac{dV(r)}{dr}.$$

Sijoittamalla vielä vakioiden väliset relaatiot (4) ja (6) saadaan potentiaalille $V(r)$ differentiaaliyhtälö

$$\frac{dV(r)}{dr} + \frac{2V(r)}{r} = 0. \quad (8)$$

Yhtälö (8) on helposti ratkaistavissa esimerkiksi separoimalla, ja sen yleinen ratkaisu on

$$V(r) = \frac{D}{r^2}, \quad (9)$$

missä D on vakio. Skaalainvariantissa systeemissä potentiaalin on siis oltava yhtälön (9) esittämää muotoa.

3 SCHRÖDINGERIN YHTÄLÖ JA $\frac{1}{r^2}$ -POTENTIAALI

Edellisessä luvussa todettiin klassisen mekaniikan keinoin, että vain muotoa $\frac{D}{r^2}$ oleva potentiaali takaa systeemin invarianssin skaalauksissa. Seuraavaksi tutkitaan asiaa kvanttimekaanisesta näkökulmasta tarkastellen tällaisessa potentiaalissa liikkuvan hiukkasen käyttäytymistä.

3.1 SCHRÖDINGERIN YHTÄLÖ JA PALLOSYMMETRINEN POTENTIAALI

Potentiaalissa $V(\vec{r})$ liikkuvaa hiukkasta kuvaava *Schrödingerin yhtälö* kirjoitetaan useimmiten muodossa

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r}) + V(\vec{r})\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}), \quad (10)$$

missä ψ on hiukkasen aaltofunktio, m massa ja E energia [4]. Otetaan nyt tarkasteltavaksi potentiaali

$$V(\vec{r}) = -\frac{V_0}{r^2}, \quad (11)$$

missä V_0 kuvaa potentiaalın voimakkuutta; negatiivinen V_0 vastaa repulsiivista potentiaalia ja positiivinen attraktiivista. Koska kyseinen potentiaali on pallosymmetrinen, toisin sanoen $V(\vec{r}) = V(r)$, on helpointa siirtyä tarkastelemaan ongelmaa pallokoordinaateissa.

Käyttämällä *Laplacen operaattorin* ∇^2 pallokoordinaattimuotoa sekä etsimällä ratkaisua separoidussa muodossa $\psi(\vec{r}) = R(r)Y_{\ell,m}(\theta, \phi)$, missä $Y_{\ell,m}(\theta, \phi)$ ovat *palloharmonisia funktioita*, päädytään *radiaaliyhtälöön* [4]

$$-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{d}{dr}\left[r^2\frac{dR(r)}{dr}\right] + \left[\frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2mr^2} + V(r)\right]R(r) = ER(r). \quad (12)$$

Merkitsemällä vielä $R(r) = \frac{u(r)}{r}$ ja muokkaamalla saadaan tuloksena *radiaaliselle aaltofunktiolle* $u(r)$ yhtälö

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u(r)}{dr^2} + \left[\frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2mr^2} + V(r)\right]u(r) = Eu(r). \quad (13)$$

Yhtälö (13) voidaan kirjoittaa muodossa

$$\frac{d^2u(r)}{dr^2} + \left[\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - \frac{2m}{\hbar^2}V(r)\right]u(r) = 0, \quad (14)$$

jolloin sijoittamalla potentiaali $V(r) = -\frac{V_0}{r^2}$ saadaan

$$\begin{aligned} &\frac{d^2u(r)}{dr^2} + \left[\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + \frac{2mV_0}{\hbar^2r^2}\right]u(r) = 0 \\ \Leftrightarrow &\frac{d^2u(r)}{dr^2} + \left[\frac{\lambda - \ell(\ell+1)}{r^2} - \zeta^2\right]u(r) = 0, \end{aligned} \quad (15)$$

missä on merkitty $\lambda = \frac{2mV_0}{\hbar^2}$ ja $\xi = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}$.

Koska kiinnostuksen kohteena on potentiaalin vaikutus ratkaisujen käyttäytymiseen, voidaan rajoittua S -tilalle, jolloin sivukvanttiluku ℓ on nolla [5]. Tällöin yhtälö (15) tulee muotoon

$$\frac{d^2u(r)}{dr^2} + \left[\frac{\lambda}{r^2} - \xi^2 \right] u(r) = 0. \quad (16)$$

Kaiken kaikkiaan tarkasteltavaksi jää siis melko yksinkertaisen näköinen yksiulotteista tapausta vastaava differentiaaliyhtälö.

3.2 DIMENSIOANALYYSIIN PERUSTUVA TARKASTELU

Pelkästään dimensioanalyysin perusteella voidaan tehdä päätelmiä yhtälön (16) mahdollisten sidottuja tiloja esittävien ratkaisujen olemassaolosta. Yhtälössä esiintyviä parametreja ovat \hbar , m ja V_0 , joiden yksiköt ovat $[\hbar] = \text{Js} = \frac{\text{kgm}^2}{\text{s}}$, $[m] = \text{kg}$ sekä $[V_0] = \text{Jm}^2 = \frac{\text{kgm}^4}{\text{s}^2}$.

Oletetaan nyt, että tarkasteltavalla systeemillä on energiaan E liittyvä sidottu tila. Tällöin energian yksikkö $[E] = \text{J} = \frac{\text{kgm}^2}{\text{s}^2}$ on pystyttävä ilmaisemaan muiden parametrien yksiköiden avulla. On siis löydettävä rationaaliluvut α , β ja γ siten, että

$$[E] = [\hbar]^\alpha [m]^\beta [V_0]^\gamma.$$

Sijoittamalla yksiköt paikoilleen saadaan yhtälö

$$\text{kgm}^2\text{s}^{-2} = \text{kg}^{\alpha+\beta+\gamma} \text{m}^{2\alpha+4\gamma} \text{s}^{-\alpha-2\gamma},$$

joka puolestaan johtaa yhtälöryhmään

$$\begin{cases} \alpha + \beta + \gamma & = 1 & (17a) \\ 2\alpha + 4\gamma & = 2 & (17b) \\ -\alpha - 2\gamma & = -2. & (17c) \end{cases}$$

Ratkaisemalla yhtälöstä (17b) α ja sijoittamalla tämä yhtälöön (17c) saadaan ristiriita $-1 = -2$. Siis dimensioanalyysin perusteella yhtälöllä (16) ei voi olla sidottuja tiloja esittäviä ratkaisuja.

3.3 NEGATIIVISEEN ENERGIAAN LIITTYVÄT SIDOTUT TILAT

Asetetaan yllä oleva dimensioanalyysiin perustuva tarkastelu hetkeksi sivuun, ja oletetaan, että yhtälöllä (16) on olemassa sidottua tilaa esittävä ratkaisu $u(r)$ liittyen negatiiviseen energiaan $E < 0$. Tällöin myös $u_\eta(r) \doteq u(\eta r)$, $\eta \in \mathbb{R}$, on ratkaisu vastaten energiaa $\eta^2 E$. Tämä voidaan osoittaa tekemällä yhtälöön (16) sijoitus $r = \eta s$, jolloin

$$\frac{d^2}{dr^2} = \frac{1}{\eta^2} \frac{d^2}{ds^2}.$$

Sijoitusten jälkeen yhtälö (16) saadaan muotoon

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\eta^2} \frac{d^2 u(\eta s)}{ds^2} + \left[\frac{\lambda}{(\eta s)^2} - \zeta^2 \right] u(\eta s) = 0 \\ \Leftrightarrow & \frac{d^2 u_\eta(s)}{ds^2} + \left[\frac{\lambda}{s^2} - (\eta \zeta)^2 \right] u_\eta(s) = 0, \end{aligned}$$

josta nähdään, että $u(r)$:n ollessa ratkaisu myös $u_\eta(r)$ on.

Koska $\eta \in \mathbb{R}$ voidaan valita mielivaltaisesti ja $\eta^2 E < 0$, löytyy sidottuja tiloja kaikilla negatiivisilla energian arvoilla. Näin ollen systeemillä ei ole perustilaa, sillä energia ei ole alhaalta rajoitettu.

Tarkastellaan seuraavaksi, millä parametrin λ arvoilla on mahdollista löytää negatiiviseen energiaan liittyviä sidottua tilaa esittäviä ratkaisuja. Kun λ on negatiivinen, on potentiaali repulsiivinen, joten hiukkasen energia on pienimmillään äärettömydessä. Näin ollen negatiivisen energian tiloja ei voi olla. λ :n ollessa nolla potentiaali häviää, ja tarkasteltavana on vain vapaa hiukkanen.

Myöskään λ :n kuuluessa välille $]0, \frac{1}{4}[$ ei negatiivisille energioille ole sidottuja tiloja esittäviä ratkaisuja. Tämän osoittamiseksi kirjoitetaan ensiksi Hamiltonin operaattori

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} - \frac{V_0}{r^2} \quad (18)$$

muodossa

$$H_\nu = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d}{dr} + \frac{\nu}{r} \right) \left(\frac{d}{dr} - \frac{\nu}{r} \right), \quad (19)$$

missä $\nu(1-\nu) = \lambda$ [6]. Muodot ovat ekvivalentit, mikä nähdään operoimalla yhtälön (19) muodolla testifunktioon $\Omega(r)$:

$$\begin{aligned} H_\nu \Omega(r) &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d}{dr} + \frac{\nu}{r} \right) \left(\frac{d}{dr} - \frac{\nu}{r} \right) \right] \Omega(r) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{d}{dr} \frac{\nu}{r} + \frac{\nu}{r} \frac{d}{dr} - \frac{\nu^2}{r^2} \right] \Omega(r) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{d^2}{dr^2} \Omega(r) - \frac{d}{dr} \left(\frac{\nu}{r} \Omega(r) \right) + \frac{\nu}{r} \frac{d}{dr} \Omega(r) - \frac{\nu^2}{r^2} \Omega(r) \right] \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{d^2}{dr^2} \Omega(r) + \frac{\nu}{r^2} \Omega(r) - \cancel{\frac{\nu}{r} \frac{d}{dr} \Omega(r)} + \cancel{\frac{\nu}{r} \frac{d}{dr} \Omega(r)} - \frac{\nu^2}{r^2} \Omega(r) \right] \\ &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nu(1-\nu)}{r^2} \right] \Omega(r) \\ &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} - \frac{V_0}{r^2} \right] \Omega(r) = H \Omega(r), \end{aligned}$$

siis $H_\nu = H$.

Osoitetaan seuraavaksi, että

$$\left(\frac{d}{dr} + \frac{\nu}{r}\right)^\dagger = -\frac{d}{dr} + \frac{\nu^*}{r} \quad (20)$$

operoitaessa funktioihin, jotka häviävät origossa ja äärettömydessä. Hermiten konjugaatin laskusääntöjen nojalla

$$\left(\frac{d}{dr} + \frac{\nu}{r}\right)^\dagger = \left(\frac{d}{dr}\right)^\dagger + \left(\frac{\nu}{r}\right)^\dagger = \left(\frac{d}{dr}\right)^\dagger + \frac{\nu^*}{r}, \quad (21)$$

sillä $\nu \in \mathbb{C}$ ja $\frac{1}{r}$ on hermiittinen.

Derivaattaoperaattorin Hermiten konjugaatti saadaan suoralla laskulla. Tarkastellaan funktioita $\rho(r)$ ja $\zeta(r)$, joiden oletetaan häviävän origossa ja äärettömydessä. Tällöin

$$\begin{aligned} \left\langle \rho \left| \frac{d}{dr} \zeta \right. \right\rangle &= \int_0^\infty \rho^*(r) \frac{d}{dr} \zeta(r) dr = \underbrace{\int_0^\infty \rho^*(r) \zeta(r) dr}_{=0} - \int_0^\infty \left(\frac{d\rho(r)}{dr}\right)^* \zeta(r) dr \\ &= \left\langle -\frac{d}{dr} \rho \left| \zeta \right. \right\rangle, \end{aligned}$$

joten Hermiten konjugaatin määritelmän perusteella

$$\left(\frac{d}{dr}\right)^\dagger = -\frac{d}{dr}. \quad (22)$$

Yhdistämällä yhtälöt (21) ja (22) saadaan haluttu yhtälö (20).

Energia saadaan Hamiltonin operaattorin odotusarvona. Käyttämällä Hamiltonin operaattorin muokattua muotoa (19) sekä yhtälöä (20) saadaan energialle

$$\begin{aligned} E &= \langle H \rangle = \langle \psi | H | \psi \rangle \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left\langle \psi \left| \left(\frac{d}{dr} + \frac{\nu}{r}\right) \left(\frac{d}{dr} - \frac{\nu}{r}\right) \psi \right. \right\rangle \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left\langle \left(\frac{d}{dr} + \frac{\nu}{r}\right)^\dagger \psi \left| \left(\frac{d}{dr} - \frac{\nu}{r}\right) \psi \right. \right\rangle \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \left\langle \left(\frac{d}{dr} - \frac{\nu^*}{r}\right) \psi \left| \left(\frac{d}{dr} - \frac{\nu}{r}\right) \psi \right. \right\rangle. \end{aligned}$$

Jos ν on reaalinen, jolloin $\nu^* = \nu$, saadaan energiaksi

$$\begin{aligned} E &= \frac{\hbar^2}{2m} \left\langle \left(\frac{d}{dr} - \frac{\nu}{r}\right) \psi \left| \left(\frac{d}{dr} - \frac{\nu}{r}\right) \psi \right. \right\rangle \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \int_0^\infty \left[\left(\frac{d}{dr} - \frac{\nu}{r}\right) \psi \right]^* \left[\left(\frac{d}{dr} - \frac{\nu}{r}\right) \psi \right] dr \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \int_0^\infty \left| \left(\frac{d}{dr} - \frac{\nu}{r}\right) \psi \right|^2 dr > 0, \end{aligned}$$

eli negatiivisen energian tiloja ei voi olla. Yhtälöstä $\nu(1 - \nu) = \lambda$ saadaan

$$\nu = \frac{1}{2} \pm \sqrt{\frac{1}{4} - \lambda},$$

eli ν :n reallisuus on yhtäpitävää sen kanssa, että $\lambda < \frac{1}{4}$.

Lopputuloksena saadaan siis, että negatiivisiin energioihin liittyviä sidottuja tiloja ei voi olla, kun $\lambda < \frac{1}{4}$. Kiinnostuksen kohteeksi nousee siis tilanne $\lambda > \frac{1}{4}$, jolloin negatiivisen energian tiloja voi mahdollisesti esiintyä.

3.4 RATKAISUT ORIGON LÄHEISYYDESSÄ

Tarkastellaan seuraavaksi, mitä ehtoja ratkaisuille voidaan asettaa ratkaisematta itse yhtälöä vielä. Oletetaan, että yhtälöllä (16) on ratkaisu, joka voidaan esittää origon läheisyydessä potenssisarjana, jonka alin kertaluku on p . Tällöin ratkaisua voidaan etsiä *Frobeniuksen menetelmällä* tekemällä sarjamuotoinen yrite

$$u(r) = r^p \sum_{n=0}^{\infty} a_n r^n = \sum_{n=0}^{\infty} a_n r^{n+p}.$$

Suoraan derivoimalla saadaan

$$\frac{d^2 u(r)}{dr^2} = \sum_{n=0}^{\infty} (n+p-1)(n+p) a_n r^{n+p-2},$$

jolloin sijoitus yhtälöön (16) antaa tulokseksi

$$\begin{aligned} & \sum_{n=0}^{\infty} (n+p-1)(n+p) a_n r^{n+p-2} + \frac{\lambda}{r^2} \sum_{n=0}^{\infty} a_n r^{n+p} - \xi^2 \sum_{n=0}^{\infty} a_n r^{n+p} = 0 \\ \Leftrightarrow & \sum_{n=0}^{\infty} (n+p-1)(n+p) a_n r^{n+p-2} + \frac{\lambda}{r^2} \sum_{n=0}^{\infty} a_n r^{n+p-2} - \xi^2 \sum_{n=2}^{\infty} a_n r^{n+p-2} = 0. \end{aligned}$$

Origon lähellä matalimman kertaluvun termi r^p hallitsee, joten on soveliaista ottaa summista vain termit $n = 0$, jolloin saadaan *karakteristinen yhtälö*

$$\begin{aligned} & (p-1)pa_0 r^{p-2} + \lambda a_0 r^{p-2} = 0 \\ \Leftrightarrow & (p-1)p + \lambda = 0. \end{aligned} \tag{23}$$

Yhtälön (23) juuret ovat

$$p = \frac{1}{2} \pm \sqrt{\frac{1}{4} - \lambda}.$$

Koska pienillä r :n arvoilla on $u(r) \sim r^p$, pätee radiaaliosalle origon läheisyydessä $R(r) = \frac{u(r)}{r} \sim r^{p-1}$. Vaatimalla, että ratkaisut ovat origossa äärellisiä, voidaan p :n ja siten λ :n arvoille asettaa rajoituksia. Pallokoordinaateissa normitusintegraali on

$$\int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \int_0^{\infty} |R(r)|^2 r^2 \sin \theta \, dr \, d\theta \, d\phi.$$

Koska ratkaisulla $R(r)$ ei ole kulmariippuvuutta, on normittuvuus origossa yhtäpitävää sen kanssa, että

$$\begin{aligned} & \int_0^\varepsilon |R(r)|^2 r^2 dr \sim \int_0^\varepsilon |r^{p-1}|^2 r^2 dr < \infty \\ \Leftrightarrow & \int_0^\varepsilon r^{2p} dr < \infty \\ \Leftrightarrow & \int_0^\varepsilon \frac{1}{2p+1} r^{2p+1} < \infty \\ \Leftrightarrow & 2p+1 \geq 0 \\ \Leftrightarrow & p \geq -\frac{1}{2}. \end{aligned}$$

Tässä integraalin yläraja ∞ on korvattu positiivisella vakiolla ε , sillä tarkastelun kohteena on vain ratkaisun käytös origon lähellä.

Oletetaan nyt, että $\lambda \leq \frac{1}{4}$, jolloin siis $\sqrt{\frac{1}{4} - \lambda}$ on reaalinen. Tällöin saadaan yhtälön (23) suuremman juuren tapauksessa ehdoksi

$$\frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} - \lambda} \geq -\frac{1}{2},$$

joka selvästi toteutuu kaikilla $\lambda \leq \frac{1}{4}$. Pienemmälle juurelle saadaan vastaavasti ehdoksi

$$\frac{1}{2} - \sqrt{\frac{1}{4} - \lambda} \geq -\frac{1}{2},$$

joka toteutuu vain, kun $-\frac{3}{4} \leq \lambda \leq \frac{1}{4}$. Siis origossa normittuva ratkaisu on mahdollinen vain heikosti attraktiiviselle ($\lambda > 0$) tai heikosti repulsiiviselle ($\lambda < 0$) potentiaalille.

Mielenkiintoisessa tapauksessa $\lambda > \frac{1}{4}$, siis potentiaalın ollessa tarpeeksi attraktiivinen, $\sqrt{\frac{1}{4} - \lambda}$ on kompleksinen. Tällöin yhtälön (23) juuret ovat konjugaattipari

$$p = \frac{1}{2} \pm \sqrt{\frac{1}{4} - \lambda} = \frac{1}{2} \pm i\sqrt{\lambda - \frac{1}{4}}.$$

Koska normitusintegraalille pätee nyt origon läheisyydessä

$$\begin{aligned} & \int_0^\varepsilon \int_0^\pi \int_0^\infty |R(r)|^2 r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi \sim \int_0^\varepsilon |R(r)|^2 r^2 dr = \int_0^\varepsilon |u(r)|^2 dr \\ & \sim \int_0^\varepsilon |r^p|^2 dr = \int_0^\varepsilon \left| r^{\frac{1}{2} r \pm i\sqrt{\lambda - \frac{1}{4}}} \right|^2 dr = \int_0^\varepsilon \left| r^{\frac{1}{2}} \right|^2 dr = \int_0^\varepsilon \frac{1}{2} r^2 < \infty, \end{aligned}$$

ovat kaikki ratkaisut neliöintegroituvia pienillä r :n arvoilla tapauksessa $\lambda > \frac{1}{4}$. Jatkossa keskitytään tähän negatiivisten energioiden kannalta olennaiseen tilanteeseen, ja seuraavaksi etsitäänkin yhtälön (16) yleistä ratkaisua kyseisessä tapauksessa.

3.5 YLEINEN RATKAISU

Ratkaistaessa Schrödingerin yhtälöä keskeispotentiaalille törmätään usein *Besselin funktioihin*. Osoittautuu, että myös yhtälön (16) ratkaisu löytyy Besselin funktioiden joukosta.

Aloitetaan yhtälön (16) ratkaiseminen muokkaamalla sitä. Tehdään sijoitus $z = \xi r$, jolloin siis

$$r \frac{du(r)}{dr} = \xi r \frac{1}{\xi} \frac{du(r)}{dr} = z \frac{du(r)}{dz}$$

ja

$$r^2 \frac{d^2u(r)}{dr^2} = \frac{du(r)}{dr} = \xi^2 r^2 \frac{1}{\xi^2} \frac{d^2u(r)}{dr^2} = z^2 \frac{d^2u(r)}{dz^2}.$$

Tällöin yhtälö (16) tulee muotoon

$$z^2 \frac{d^2u(r)}{dz^2} + \lambda u(r) - \xi^2 u(r) = 0. \quad (24)$$

Seuraavaksi sijoitetaan ratkaistavan funktion u paikalle $u(r) = \sqrt{z}f(z)$, missä $f(z)$ on jokin toistaiseksi tuntematon funktio. Tällöin u :n toiseksi derivaataksi tulee

$$\frac{d^2u(r)}{dz^2} = \sqrt{z} \frac{d^2f(z)}{dz^2} + \frac{1}{\sqrt{z}} \frac{df(z)}{dz} - \frac{1}{4} z^{-\frac{3}{2}} f(z).$$

Tekemällä sijoitukset ja sieventämällä saadaan yhtälö (24) lopulta muotoon

$$z^2 \frac{d^2f(z)}{dz^2} + z \frac{df(z)}{dz} - (z^2 - g^2)f(z) = 0, \quad (25)$$

missä $g \doteq \sqrt{\lambda - \frac{1}{4}}$.

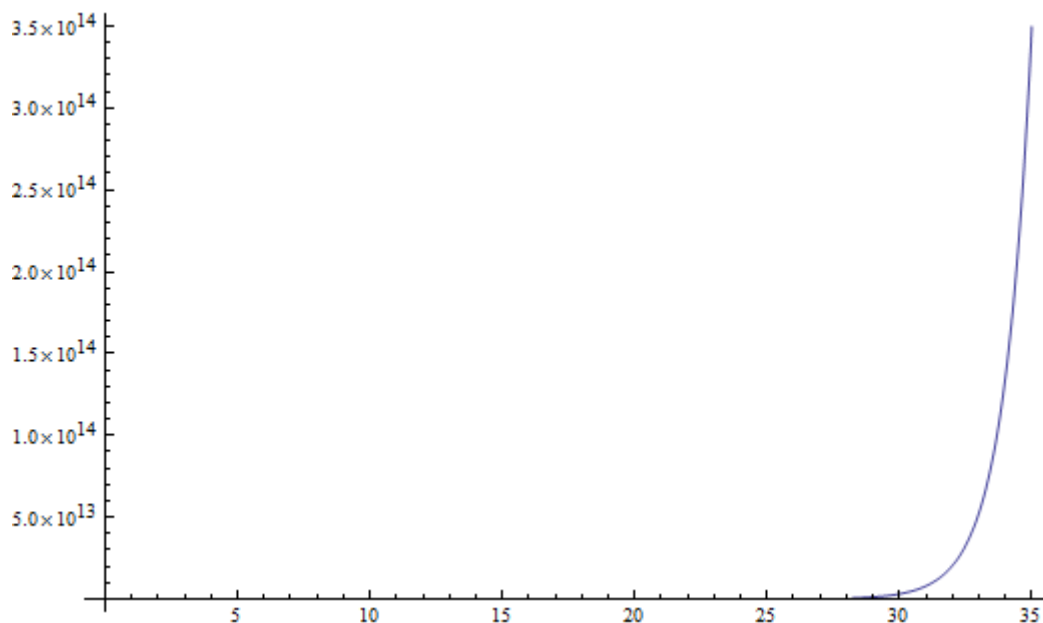
Saatu yhtälö (25) tunnetaan nimellä *modifioitu Besselin yhtälö*. Sen lineaarisesti riippumattomat ratkaisut ovat *modifioitu Besselin ensimmäisen lajin funktio* $I_{ig}(z)$ sekä *modifioitu Besselin toisen lajin funktio* $K_{ig}(z)$ [7]. Näin ollen alun perin ratkaistavana olleen yhtälön (16) yleinen ratkaisu on muotoa

$$u(r) = A\sqrt{r} K_{ig}(\xi r) + B\sqrt{r} I_{ig}(\xi r), \quad (26)$$

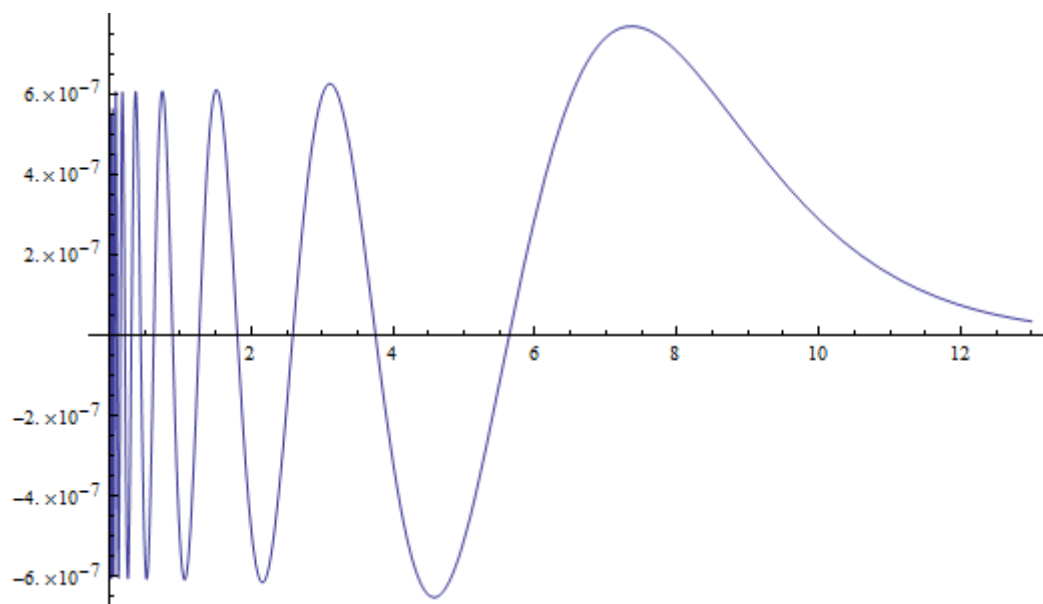
missä A ja B ovat vakioita.

Jotta ratkaisut olisivat fysikaalisesti mielekkäitä, niiden täytyy olla neliöintegroituja. Modifioitu Besselin ensimmäisen lajin funktio $I_{ig}(\xi r)$ kasvaa eksponentiaalisesti argumentin r kasvaessa (kuva 1), joten se ei ole normittuva äärettömyydessä [8]. Modifioitu Besselin toisen lajin funktio $K_{ig}(\xi r)$ on puolestaan eksponentiaalisesti vähenevä, ja origon läheisyydessä se oskilloi hyvin voimakkaasti (kuva 2) [9]. Se kelpaa normittuvaksi ratkaisuksi, joten yhtälön (16) sidottuja tiloja esittäväksi ratkaisuksi saadaan lopulta

$$u(r) = A\sqrt{r} K_{ig}(\xi r). \quad (27)$$



Kuva 1: Kertaluvun 9i modifioidun Besselin ensimmäisen lajin funktion kuvaaja.



Kuva 2: Kertaluvun 9i modifioidun Besselin toisen lajin funktion kuvaaja.

Negatiivisen energian tilat näyttäisivät siis olevan matemaattisesti hyvin määriteltyjä, mutta modifioidun Besselin toisen lajin funktion raju oskillointi origon läheisyydessä rikkoo fysikaalisiin tilanteisiin liittyviä odotuksia. Tavallisesti perustilaan liittyvällä ratkaisulla ei ole lainkaan solmukohtia, ensimmäisen viritystilan ratkaisulla yksi solmukohta, toisen viritystilan ratkaisulla kaksi ja niin edelleen. Nyt perustilaa ei ole lainkaan, sillä negatiivisen energian ratkaisut muodostavat alhaalta rajoittamattoman jatkumon. Lisäksi jokaisella ratkaisulla on ääretön määrä solmukohtia johtuen ratkaisujen oskilloimisesta origon läheisyydessä.

Herää kysymys, onko tarkasteltava $\frac{1}{r^2}$ -potentiaali pelkkä matemaattinen kuriositeetti vailla vastinetta fysikaalisessa maailmassa. Näin ei ole, sillä tunnetaan useita systeemejä, joissa $\frac{1}{r^2}$ -tyyppinen potentiaali esiintyy. Esimerkkejä näistä ovat varatun hiukkasen liike dipolikentässä, tietynlaisia kvanttikenttä- ja gravitaatioteorioita yhdistävä AdS/CFT-dualiteetti sekä joidenkin mustien aukkojen tapahtumahorisonttiin liittyvä fysiikka [10]. Seuraavassa luvussa ongelmaa lähestytään hiukan eri näkökulmasta tavoitteena saada kaiken taustalla piilevä fysiikka esiin.

4 KATKAISTU $\frac{1}{r^2}$ -POTENTIAALI

Koska origo aiheuttaa ongelmia, katkaistaan potentiaali etäisyydelle ε origosta. Määritellään siis uusi potentiaali

$$V_\varepsilon(r) \doteq \begin{cases} -\frac{V_0}{r^2} & \text{kun } r > \varepsilon \\ \infty & \text{kun } 0 \leq r < \varepsilon, \end{cases} \quad (28)$$

ja ratkaistaan ominaisarvo-ongelma uudestaan.

4.1 DIMENSIOANALYYSIIN PERUSTUVA TARKASTELU

Aiemmin energian yksikköä ei saatu rakennettua muiden esiintyvien suureiden yksiköiden avulla, ja näin ollen pääteltiin, ettei ongelmalla ole ratkaisuja. Nyt esiteltiin uusi parametri ε , jonka yksikkö on $[\varepsilon] = \text{m}$. Jotta yhtälöllä (16) olisi ratkaisuja potentiaalille V_ε , on energian yksikölle pädevä

$$[E] = [\hbar]^\alpha [m]^\beta [V_0]^\gamma [\varepsilon]^\delta$$

joillekin rationaaliluvuille α , β , γ ja δ . Yksiköiden sijoittaminen johtaa yhtälöryhmään

$$\begin{cases} \alpha + \beta + \gamma & = 1 \\ 2\alpha + 4\gamma + \delta & = 2 \\ -\alpha - 2\gamma & = -2, \end{cases}$$

jonka eräs ratkaisu on

$$\begin{cases} \alpha & = -2 \\ \beta & = 1 \\ \gamma & = 2 \\ \delta & = -2. \end{cases}$$

Nyt energia E saadaan rakennettua käytössä olevista parametreista esimerkiksi muodossa

$$E \sim \frac{V_0}{\varepsilon^2} w(\lambda),$$

missä w on jokin dimensiottoman parametrin $\lambda = \frac{2mV_0}{\hbar^2}$ funktio. Dimensioanalyysin perusteella yhtälöllä (16) voi siis olla sidottuja tiloja esittäviä ratkaisuja uudestaan määritellylle potentiaalille V_ε .

4.2 ENERGIASPEKTRI

Katkaistulle potentiaalille yleinen ratkaisu on edellen yhtälön (27) mukainen. Aiemmin reunaehtona oli vaatimus $u(r) \rightarrow 0$, kun $r \rightarrow 0$. Nyt reunaehdoksi tulee

$$u(\xi\varepsilon) = 0, \quad (29)$$

ja osoittautuu, että tämä ehto kvantisoii energian.

Kun $z \ll 1$, voidaan modifioidulle Besselin toisen lajin funktiolle $K_{ig}(z)$ käyttää approksimaatiota

$$K_{ig}(z) \approx -\sqrt{\frac{\pi}{g \sinh(\pi g)}} \sin \left[g \ln \left(\frac{z}{2} \right) - \eta_g \right],$$

missä $\eta_g = \arg \Gamma(1 + ig)$ [9]. Koska ε voidaan valita mielivaltaisen pieneksi, voidaan tätä approksimaatiota käyttää yhtälössä (29), jolloin saadaan

$$-\sqrt{\frac{\varepsilon\pi}{g \sinh(\pi g)}} \sin \left[g \ln \left(\frac{\xi\varepsilon}{2} \right) - \eta_g \right] = 0. \quad (30)$$

Yhtälön (30) ratkaisut määräytyvät ehdosta

$$g \ln \left(\frac{\xi\varepsilon}{2} \right) - \eta_g + n\pi = 0, \quad n \in \mathbb{Z}, \quad (31)$$

josta saadaan

$$\xi_n \doteq \xi = \frac{2}{\varepsilon} e^{(\eta_g - n\pi)/g}. \quad (32)$$

Yhtälöstä (32) nähdään, että kun $n \leq 0$, on $\xi\varepsilon \geq 2$. Tällöin yhtälön (30) saamiseksi tehty oletus $\xi\varepsilon \ll 1$ ei ole voimassa, joten negatiiviset n :n arvot hylätään. Positiivisille n oletus on voimassa, kunhan g on tarpeeksi pieni, karkeasti $g < 3$ [9]. Tämä ehto ei aiheuta lisäongelmia, mikä selviää seuraavassa luvussa. Näin ollen saadaan katkaistun potentiaalın tapauksessa diskreetti energiaspektri

$$E_n = -\frac{\hbar^2 \xi_n^2}{2m} = -\frac{2\hbar^2}{m\varepsilon^2} e^{2(\eta_g - n\pi)/g}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (33)$$

$n = 1$ antaa perustilan $E_1 < 0$, ja $E_n \rightarrow 0$, kun $n \rightarrow \infty$. Siis on saatu tutunomainen fysikaalisissa tilanteissa toivottu energiaspektri. Seuraava ongelma onkin, voidaanko katkaisuparametrin ε antaa jotenkin lähestyä nollaa siten, että tilanteen fysikaalinen mielekkyys säilyy.

4.3 RAJA $\varepsilon \rightarrow 0$

Alun perin kiinnostuksen kohteena ollut potentiaali oli ongelmallinen, sillä hyvin määritellystä ratkaisusta huolimatta energiat muodostivat jatkumon vailla perustilaa. Katkaistulle potentiaalille tätä ongelmaa ei tullut, vaan lopputuloksena saatiin toivotunlainen diskreetti energiaspektri. Antamalla katkaisuparametrin ε lähestyä nollaa päästään takaisin alkuperäiseen potentiaaliin. Yhtälöstä (33) kuitenkin nähdään, että jos asetetaan $\varepsilon \rightarrow 0$ ilman minkäänlaisia rajoituksia, lähestyvät energiat E_n negatiivista äärettömyyttä. Näin ollen sidotuille tiloille ei ole perustilaa vastaavaa äärellistä energiaa E_1 , eli törmätään samaan ongelmaan kuin alkuperäisen potentiaalil analyysissä.

Ongelmilta voidaan kuitenkin välttyä olemalla hiukan ovelampia. Yhtälöstä (29) nähdään, että sidosehto ei riipu vain katkaisuparametrin ε vaan tulosta $\xi\varepsilon$. Erityisesti perustilalle ehtona on $K_{ig}(\xi_1\varepsilon) = 0$, joten voidaan vaatia, että ε :n lähestyessä nollaa ξ_1 ja siten myös perustilan energia E_1 pysyvät vakiona. Yhtälöstä (33) nähdään, että tämä on mahdollista, jos ε :n lisäksi myös $g \rightarrow 0$.

g :n lähestyessä nollaa $\eta_g = \arg \Gamma(1 + ig) \rightarrow \arg \Gamma(1) = 0$, joten tämä termi ei aiheuta ongelmia. Lisäksi pienillä g :n arvoilla positiivisten kokonaislukujen n hyväksyminen yhtälössä (31) on oikeutettua juuri tästä syystä, sillä tällöin oletus $\xi\varepsilon \ll 1$ on voimassa. Tämä nähdään tarkastelemalla yhtälöä (32) pienillä g :n arvoilla n :n ollessa yksi.

Pienillä z :n arvoilla gammafunktiolle pätee $\Gamma(1 + z) \approx 1 - \gamma z$, missä γ on *Eulerin-Mascheronin vakio* [11]. Näin ollen pienillä g

$$\eta_g = \arg \Gamma(1 + ig) \approx \arg(1 - \gamma ig) = \arctan(-\gamma g) \approx -\gamma g,$$

missä viimeisessä vaiheessa käytettiin arkustangentin sarjakehitelmää origossa. Käyttämällä tätä approksimaatiota η_g :lle saadaan yhtälön (32) spektri pienillä g :n arvoilla muotoon

$$\xi_n = \frac{2}{\varepsilon} e^{(-\gamma g - n\pi)/g} = \frac{2}{\varepsilon e^{\gamma}} e^{-n\pi/g} = \frac{2}{\varepsilon \gamma'} e^{-n\pi/g}, \quad (34)$$

missä on merkitty $\gamma' \doteq e^\gamma$.

Jäljelle jää kysymys, miten g :n täytyy riippua ε :sta, jotta ξ_1 ja siten E_1 pysyvät vakioina kun $\varepsilon \rightarrow 0$. Toisin sanoen halutaan selvittää funktion $g = g(\varepsilon)$ muoto. Matemaattisesti ξ_1 :n vakiona pysymisen ehto rajaprosessissa on

$$\frac{d}{d\varepsilon} \xi_1 = \frac{d}{d\varepsilon} \left[\frac{2}{\varepsilon \gamma'} e^{-\pi/g(\varepsilon)} \right] = 0, \quad (35)$$

missä oletetaan ε ja g pieniksi. Yhtälö (35) johtaa epälineaariseen differentiaaliyhtälöön

$$\pi\varepsilon \frac{d}{d\varepsilon} g(\varepsilon) = g(\varepsilon)^2. \quad (36)$$

Yhtälö (36) on ratkaistavissa esimerkiksi separoimalla, ja sen ratkaisu on

$$g(\varepsilon) = -\frac{\pi}{\ln \varepsilon + C}, \quad (37)$$

missä C on vakio. Ratkaisusta nähdään, että ε :n mennessä nolnaan myös $g(\varepsilon) \rightarrow 0$, kuten pitääkin.

Nyt siis tiedetään, että ε :n voidaan antaa lähestyä nolaa siten, että perustilaa vastaava energia E_1 pysyy vakiona. Muut energiatilat sen sijaan häviävät rajankäynnissä. Tämä nähdään energiaspektrin lausekkeesta (34):

$$\tilde{\zeta}_n = \frac{2}{\varepsilon\gamma'} e^{-n\pi/g} = \frac{2}{\varepsilon\gamma'} e^{-\pi/g} e^{-(n-1)\pi/g} = \tilde{\zeta}_1 e^{(1-n)\pi/g} \xrightarrow{\varepsilon, g \rightarrow 0} 0,$$

kun $n = 2, 3, 4, \dots$

Jäljelle jää siis yksi sidottua tilaa vastaava negatiivinen energiataso

$$E_1 = -\frac{\hbar^2 \tilde{\zeta}_1^2}{2m}.$$

Energian suuruutta analyysi ei kiinnitä. Lisäksi huomataan, että rajalla $\varepsilon \rightarrow 0$ potentiaalilin voimakkuutta kuvaava parametri $\lambda \rightarrow \frac{1}{4}$. Tämä nähdään rajankäynnissä nolaa lähestyvän g :n määritelmästä $g = \sqrt{\lambda - \frac{1}{4}}$. Näin ollen palattaessa katkaisupotentiaalista alkuperäiseen potentiaaliin jäljelle jää vain yksi sidottu tila, ja lisäksi potentiaalilin voimakkuus määrätty.

5 PÄÄTELMÄT

Nyt on aika tarkastella saatuja tuloksia sekä niihin johtaneita menetelmiä. Aivan työn alussa todettiin klassista vaikutusintegraalia tutkimalla, että $\frac{1}{r^2}$ -muotoiselle potentiaalille tutkittava fysikaalinen systeemi on skaalainvariantti. Seuraavaksi pääteltiin dimensioanalyysin avulla, että Schrödingerin yhtälöllä ei voi olla kyseisen potentiaalintapauksessa sidottuja tiloja esittäviä ratkaisuja. Lisäksi osoitettiin, että jos systeemillä on yksikin sidottu tila vastaten negatiivista energian arvoa, löytyy sidottu tila kaikille negatiiviselle energian arvoille eikä hyvin määriteltyä perustilan energiaa ole. Lopuksi päädyttiin kuitenkin pitkällisen analyysin seurauksena tilanteeseen, jossa Schrödingerin yhtälöllä on $\frac{1}{r^2}$ -potentiaalille yksi hyvin määritelty negatiivista energiaa vastaava sidottu tila esittävä ratkaisu. Muut negatiivisen energian tilat häviävät, ja tilanne on fysikaalisesti järkevä. Kuinka tämä ristiriita eri menetelmillä saatujen tulosten välillä selitetään? Itse asiassa jo kvanttimekaaniseen analyysiin siirryttäessä olisi voitu kysyä, kuinka skaalainvariantissa systeemissä voisi esiintyä minkäänlaista energian kvantisoitumista.

Vastaus löytyy klassisen fysiikan ja kvanttifysiikan eroista. Kun analyysissä siirryttiin tarkastelemaan katkaistua potentiaalia V_ϵ , rikottiin alkuperäisen systeemin skaalainvarianssi eksplisiittisesti, sillä dimensiollinen parametri ϵ määräsi tarkasteltavan kokoluokan. Palattaessa alkuperäiseen potentiaaliin asettamalla $\epsilon \rightarrow 0$ säilyy skaalainvarianssi kuitenkin rikkoutuneena ja kvanttiteoriaan ilmestyy energiaskaala E_1 . Dimensioanalyysiin perustuva argumentti on fysiikaltaan puhtaasti klassinen eikä päde enää siirryttäessä tarkastelemaan ongelmaa kvanttimekaaniselta kannalta.

Tässä työssä käsiteltävä kvanttifysiikka on melko alkeellista, mutta analyysissä törmätään kuitenkin modernissa teoreettisessa fysiikassa erittäin tärkeässä roolissa olevan *renormalisaation* käsitteeseen. Renormalisaatio on menettelytapa, jolla päästään eroon fysikaalisissa laskuissa ilmenevistä epätoivotuista äärettömyyksistä. Tämän työn tapauksessa ongelmana oli negatiiviseen äärettömyyteen ulottuva energioiden jatku-mo. Käyttämällä hyväksi katkaistua potentiaalia saatiin negatiiviset energiat rajattua yhteen perustilaa vastaavaan energiaan.

Klassisen teorian skaalainvarianssi ei siis säily kvanttiteoriaan vaan rikkoutuu renormalisaation seurauksena. Tämä ilmiö tunnetaan *anomaalisena* tai *kvanttimekaanisena symmetriarikkona*. Tarkastellun $\frac{1}{r^2}$ -potentiaalintapauksessa rikkoutuva symmetria on siis skaalainvarianssi, kun kvanttiteoriaan ilmestyy energiaskaala. Skaalan määräytyminen symmetriarikon seurauksena puolestaan tunnetaan *dimensioanalisisena transmutaationa*. Skaalasyymmetrian rikkoutumisen lisäksi anomaalinen symmetriarikko esiintyy esimerkiksi kiraalisymmetrian rikkoutumisessa, joka tunnetaan myös *Adlerin–Bellin–Jackiw’n anomaliana*. [12, 13, 14]

Anomaalisen symmetriarikon lisäksi fysiikassa puhutaan kahdesta muusta symmetriarikosta. Nämä ovat *spontaani symmetriarikko* sekä *eksplisiittinen symmetriarikko*. Spontaanisissa symmetriarikoissa systeemillä on symmetria, joka rikkoutuu perustilassa. Esimerkkejä tästä ovat standardimallin Higgsin kentän $SU(2)$ -symmetrian rikkoutumi-

nen sekä ferromagnetismi. Eksplisiittisessä symmetriarikossa systeemin symmetria rikkoutuu jo liikeyhtälöiden perusteella. Esimerkki tästä on vakiovoiman lisääminen harmonisen oskillaattorin potentiaaliin, mikä rikkoo alkuperäisen systeemin Lagrangen funktiolla olleen symmetrian. [12, 14]

Tämä työ koostuu pääasiassa $\frac{1}{r^2}$ -potentiaalin käsittelystä kvanttimekaniikan keinoin. Motivaatio kyseisen potentiaalin tarkasteluun saatiin toteamalla, että sen vaikutuksen alaisena oleva systeemi on klassisesti skaalainvariantti. Kvanttimekaniikassa skaalainvarianssi kuitenkin rikkoutui, ja rikkoutumisprosessin analyysissä törmättiin renormalisaation sekä symmetriarikon käsitteisiin. $\frac{1}{r^2}$ -potentiaaliin liittyvät ongelmat ovat hyvin tunnettuja, ja niitä on käsitelty lukuisilla erilaisilla tavoilla, joista monet ovat teorialtaan hyvinkin edistyneitä [6, 9, 10, 13]. Tässä työssä potentiaaliin liittyvät ongelmat on kuitenkin ratkaistu melko yksinkertaista kvanttimekaniikkaa käyttäen. Lähestymistapa antaa esimerkin tapauksesta, jossa suoraviivaisen analyysin seurauksena törmätään huomattavasti modernimman fysiikan käsitteisiin vailla esitietoa niiden yhteydestä käsiteltävään ongelmaan.

LÄHTEET

- [1] M. Kaku, *Quantum Field Theory: A Modern Introduction*, Oxford University Press, Oxford, 1993.
- [2] R. P. Feynman, R. B. Leighton ja M. Sands, *The Feynman Lectures on Physics, The New Millennium Edition*, Basic Books, New York, 2010.
- [3] E. Gozzi ja D. Mauro, *Scale Symmetry in Classical and Quantum Mechanics*, *Physics Letters A*, **345** (2005) 273–278, arXiv:quant-ph/0507147v1.
- [4] L. D. Landau ja E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics: Non-Relativistic Theory*, 3rd Edition, Butterworth-Heinemann, Oxford, 2003.
- [5] K. M. Case, *Singular Potentials*, *Physical Review* **80** (1950) 797.
- [6] K. S. Gupta ja S. G. Rajeev, *Renormalization in Quantum Mechanics*, *Physical Review D* **48** (1993) 5940–5945, arXiv:hep-th/9305052v2.
- [7] M. R. Spiegel, S. Lipschutz ja J. Liu, *Mathematical Handbook of Formulas and Tables*, 3rd Edition, McGraw-Hill, New York, 2009.
- [8] G. B. Arfken ja H. J. Weber, *Mathematical Methods for Physicists*, 4th Edition, Academic Press, San Diego, 1995.
- [9] A. M. Essin ja D. J. Griffiths, *Quantum Mechanics of the $1/x^2$ Potential*, *American Journal of Physics* **74** (2006) 109–117, doi: 10.1119/1.2165248.
- [10] S. Moroz ja R. Schmidt, *Nonrelativistic Inverse Square Potential, Scale Anomaly, and Complex Extension*, *Annals of Physics* **325** (2010) 491–513, arXiv:0909.3477v3 [hep-th].
- [11] I. S. Gradshteyn ja I. M. Ryzhik, *Table of Integrals, Series, and Products*, 7th Edition, Academic Press, San Diego, 2007.
- [12] B. R. Holstein, *Chiral Perturbation Theory: a Primer*, arXiv:hep-ph/9510344.
- [13] H. E. Camblong, C. A. G. Canal, L. N. Epele ja H. Fanchiotti, *Dimensional Transmutation and Dimensional Regularization in Quantum Mechanics: I. General Theory*, *Annals of Physics* **287** (2001) 14–56, arXiv:hep-th/0003255v2.
- [14] P. N. Galteland, *Symmetry Breaking in Ordinary and Supersymmetric Models of Quantum Field Theory*, pro gradu -tutkielma, Department of Physics, Norwegian University of Science and Technology, 2012.