

A kvantummechanikai bootstrap módszer vizsgálata

Babai Márton István (ELTE TTK Fizika Bsc I. év)
Témavezető: Pásztor Attila (ELTE TTK Elméleti Fizika Tanszék)

2025. január 8.

Kivonat

A kvantummechanikában kevés egzaktul megoldható rendszer van, ezért a számítások elvégzéséhez általában különböző közelítő módszerekre van szükségünk. Ezeknek a módszereknek mind-mind megvannak az előnyeik és hátrányaik, a legtöbbjük egy adott típusú problémára nyújt megoldást. Ebben a dolgozatban egy aránylag újabb módszert, a kvantummechanikai bootstrapot vizsgáljuk. Ennek egy olyan variációját, ami kötött állapotokban mond szigorú alsó és felső korlátokat különböző operátorok várható értékeire. A módszert több egyszerű kvantumrendszerben is megvizsgáljuk, mint például az anharmonikus oszcillátor vagy a dupla gödör potenciál. Megvizsgáljuk az egzakt megoldáshoz való konvergencia hatékonyságát, illetve azt, hogy a módszer hatékonysága hogyan függ a csatolási állandótól. Ahol lehetséges ott összevetjük a módszert hagyományosabb módszerekkel, mint például a variációs módszer vagy a perturbációszámítás.

Tartalomjegyzék

1. Bevezetés	3
1.1. A kvantummechanika	3
1.2. Közelítő módszerek a kvantummechanikában	5
2. Bootstrap módszer a kvantummechanikában	8
2.1. A határozatlansági reláció	9
2.2. Rekurzió $O_k = x^k$ bázis esetén általános potenciálban	10
2.3. Klasszikus periodikus mozgások	13
3. Anharmonikus oszcillátor	14
3.1. Perturbációszámítás	14
3.2. Rekurzió	14
3.3. Algoritmus	15
3.4. Eredmények	16
4. Dupla gödör	19
4.1. Variációs ansatz	19
4.2. Rekurzió	20
4.3. Eredmények	21
5. Morse-potenciál	26
5.1. Egzakt megoldás	26
5.2. Rekurzió az $O_k = e^{kx}$ bázisra	27
5.3. Eredmények	30
6. Összefoglalás és kitekintés	33
6.1. Összefoglalás	33
6.2. Kitekintés	34
A. Saját munka	36

1. Bevezetés

1.1. A kvantummechanika

A kvantummechanika a fizika egyik ága, mely a mikroszkopikus világ leírásával foglalkozik. A története a tizenkilencedik-huszedik század fordulójára vezethető vissza, amikor a technológiának köszönhető precíz mérések olyan eredményeket hoztak, amelyek nem voltak magyarázhatók a klasszikus mechanika, illetve az elektrodinamika törvényeivel.

A kvantummechanika vizsgálja az elemi részecskék viselkedését, így például az elektronok mozgását az atomokban, vagy különböző elektromos terekben. A tudományág elnevezése abból a jelenségből fakad, hogy ilyen kis léptékek mellett bizonyos fizikai mennyiségek nem folytonos módon jelennek meg, hanem jól elkülöníthető, diszkrét értékek között változnak. Ilyen például a hidrogénatomban (és persze más atomokban is) az elektronok különböző lehetséges pályája, amelyekre a Bohr-féle atommodell a következő energiaszinteket engedi meg: $E_n = -\frac{E_1}{n^2}$, ahol $n \in \mathbb{N}$ az adott elektronpálya főkvantumszáma, E_n pedig az ehhez a pályához tartozó energia.

A kvantumfizika az elektronok mellett azonban számos más részecskével foglalkozik. Ide tartoznak például az atommagot alkotó protonok és neutronok, vagy az ezeket felépítő, még elemibb kvarkok, de említhetem a fotonokat, a neutrínókat, a bozonokat és a leptonokat is.

A kvantummechanika szigorú, formális matematikai alapjait többek között Werner Heisenberg és Erwin Schrödinger fektették le. A kvantummechanikai rendszerek állapotát egy komplex szeparábilis Hilbert-tér ($\mathcal{H}$) egy ψ vektoraként írhatjuk le. A konkrét Hilbert-tér pontos meghatározása az adott fizikai rendszertől függ, így például egy elektron spinjének leírásához általában a $\mathcal{H} = \mathbb{C} \times \mathbb{C}$ Descartes-szorzatot használjuk, míg egy részecske helyzetéhez a Hilbert-tér a négyzetesen integrálható komplex függvények tere: $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{C})$. Az állapotvektorokat konvenció szerint egyre normálnak választjuk, azaz $\langle \psi, \psi \rangle = 1$, ahol $\langle \cdot, \cdot \rangle$ a Hilbert-térben vett skalárszorzatot jelöli. A Hilbert-tér vektorait általában a Paul Dirac által bevezetett braket-jelöléssel használjuk, így a $\psi = |\psi\rangle$ oszlopvektorokat ketvektoroknak és a $\psi^\dagger = \langle \psi|$ sorvektorokat bravektoroknak nevezzük.

A megfigyelhető fizikai mennyiségeket a Hilbert-téren értelmezett önadjungált lineáris operátorok reprezentálják. Vagyis $\hat{O} = \hat{O}^\dagger$ vagy ezzel ekvivalensen felírva $\langle O\psi, \phi \rangle = \langle \psi, O\phi \rangle$ tetszőleges $|\psi\rangle$ és $|\phi\rangle$ vektorokra a Hilbert-térben. Ha a rendszer állapotát reprezentáló vektor épp egy ilyen lineáris operátor egyik v_n sajátvektora, azaz $\hat{O}|v_n\rangle = \lambda_n|v_n\rangle$, akkor ezt az állapotot a fizikai mennyiség sajátállapotának nevezzük. Az operátorhoz tartozó megfelelő λ_n valós sajátérték pedig a megfigyelhető fizikai mennyiség értékének felel meg. A sajátvektorok bázist alkotnak, azaz egy általános állapotvektor leírható egy operátor sajátvektorainak lineáris kombinációjaként, ilyenkor azt mondjuk, hogy a megfigyelt fizikai rendszer ezen állapotok szuperpozíciójában van.

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |v_n\rangle.$$

Egy méréssel a szuperpozícióhoz tartozó hullámfüggvény összeomlik és a rendszer a mért mennyiséget reprezentáló operátor egyik sajátállapotába kerül, eredményként pedig a sajátállapothoz tartozó sajátértéket kapjuk. Annak valószínűségét, hogy a mérés eredménye λ_n , a Born-szabály adja meg: $P(\lambda_n) = |\langle v_n | \psi \rangle|^2$. Ennek egy speciális esete az, amikor koordináta bázisban írjuk fel az állapotvektort, az ún. hullámfüggvény segítségével $\psi(\vec{x}) = \langle x | \psi \rangle$. Ekkor annak valószínűsége, hogy a részecske egy adott pont kis környezetében található $|\psi(x)|^2$. Ha egy ψ állapotot sokszor egymás után preparálunk, és az $\hat{O}$ operátor mérését elvégezzük, ennek várható értéke $\langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle = \langle \hat{O} \rangle_\psi$.

A hullámfüggvény időfejlődését a Schrödinger-egyenlet írja le. Egy dimenzióban, $V(x)$ potenciálban mozgó részecske esetén ez az alábbi alakú:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \hat{V}(x, t) \right] \Psi(x, t), \quad (1.1)$$

ahol a jobb oldalon az rendszer mozgási energiájához tartozó $(\frac{\hat{p}^2}{2M})$ operátor, és a potenciális energiához tartozó operátorok összege adja meg a Hamilton-operátort:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2M} + \hat{V}(x, t), \quad (1.2)$$

amely hat a Ψ állapotvektorra. Ennek megfelelően az egyenletet Dirac-formalizmusban így írhatjuk fel:

$$i\hbar \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial t} = \hat{H} |\psi\rangle,$$

ahol a jobb oldalon a kvantumállapot energiájával kapcsolatos Hamilton-operátor hat a Ψ hullámfüggvényre.

Ebben a dolgozatban a Hamilton-operátor sajátvektorainak (vagy energia-sajátállapotoknak) bizonyos tulajdonságait fogjuk vizsgálni különböző Hamilton-operátorok (különböző potenciálok) esetén. Az energia-sajátállapotok definíció szerint olyan $|\phi_n\rangle$ állapotok, amelyekre:

$$\hat{H} |\phi_n\rangle = E_n |\phi_n\rangle, \quad (1.3)$$

vagy koordináta bázisban

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \hat{V}(x, t) \right] \phi_n(x) = E_n \phi_n(x) \quad (1.4)$$

teljesül. Ezt az egyenlőséget időfüggetlen Schrödinger-egyenletnek nevezzük.

Az energia-sajátállapotok ismeretében, tetszőleges kezdeti hullámfüggvény felírható ezek lineárkombinációjaként:

$$\psi(x, t=0) = \sum c_n^{(t=0)} \phi_n(x)$$

Az állapot időfejlődése pedig a Hamilton-operátor linearitása miatt:

$$\psi(x, t) = \sum c_n^{(t=0)} e^{-i \frac{E_n t}{\hbar}} \phi_n(x), \quad (1.5)$$

azaz az energiasajátállapotok ismeretében tetszőleges kezdeti állapot időfejlődése leírható.

1.2. Közelítő módszerek a kvantummechanikában

A Schrödinger-egyenletnek csak kevés esetben ismert **egzakt megoldása**. A két legfontosabb példa a hidrogénatom, és a harmonikus oszcillátor. Ez utóbbinak a tulajdonságaira szükségünk lesz a dolgozat későbbi részeiben, ezért ezeket röviden ismertetjük. A potenciál ez esetben egy parabola:

$$V(x) = \frac{1}{2}M\omega^2 x^2.$$

A $V(x)$ -et behelyettesítve az (1.4) időfüggetlen Schrödinger-egyenletbe az alábbi egyenletet kapjuk:

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2 \phi_n(x)}{\partial x^2} + \frac{1}{2}M\omega^2 x^2 \phi_n(x) = E_n \phi_n(x).$$

Mivel a harmonikus oszcillátor potenciál $x \rightarrow \infty$ és $x \rightarrow -\infty$ limeszben is végtelenhez tart, ezért a spektruma tisztán diszkrét, a rendszernek végtelen sok kötött állapota van. A harmonikus oszcillátor egzakt megoldása megtalálható a legtöbb kvantummechanika tankönyvben [1]. Az n -edik energiaszintje :

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (1.6)$$

Az n -edik energia-sajátfüggvény pedig:

$$\phi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} H_n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right), \quad (1.7)$$

ahol H_n az n -edik Hermite-polinomot jelöli:

$$H_n(z) = (-1)^n e^{z^2} \frac{d^n}{dz^n} \left(e^{-z^2} \right). \quad (1.8)$$

A legtöbb potenciál esetén azonban csak különböző közelítő módszereket tudunk alkalmazni. Az egyik ilyen általánosan használt közelítési módszer a **variációs módszer**. Ennek lényege, hogy egy végtelen dimenziós $\mathcal{H}_\infty$ Hilbert-tér helyett egy véges dimenziós téren dolgozunk. A variációs módszer lineáris verziója (ún. Ritz-féle variációs módszer) esetén egy véges N dimenziós Hilbert-téren N db bázisvektor lineárkombinációjaként felírható hullámfüggvényekkel dolgozunk, azaz a hullámfüggvényt

$$\psi_\infty = \sum_n c_n v_n \approx \psi_N = \sum_n^N c_n v_n \quad (1.9)$$

alakban keressük. Itt a v_n -ek a bázisvektorok, c_n -ek pedig a lineáris kombináció koefficiensei. Ekkor megfelelő fizikai rendszereknél az $N \times N$ -es $\hat{H}^{(N)}$ Hamilton-operátor sajátértékei tartanak a rendszer energiasajátértékeihez, ha $N \rightarrow \infty$. Adott bázison a Hamilton-operátor mátrixelemei:

$$H_{mn} = \langle v_m | \hat{H} | v_n \rangle.$$

H_{mn} mátrixelemek ismeretében a mátrix sajátvektorait és sajátértékeit kiszámolhatjuk. Ezek lesznek az energia-sajátállapotok, illetve az energia-sajátértékek a v_k bázisvektorok által definiált altéren.

A variációs módszerrel becsült alapállapot energiája minden esetben egy felső korlátot ad a kvantumrendszer valódi alapállapot energiájára, hiszen egy a teljes Hilbert-térnél kisebb altéren mondja meg a legalacsonyabb energiájú állapotot. Később látni fogjuk, hogy a dolgozatban vizsgált bootstrap módszer egyik előnye, hogy szigorú alsó és felső korlátot is tud mondani az alapállapot és a gerjesztett állapotok energiájára, ilyen értelemben tehát jóval megbízhatóbb.

A variációs módszer hatékonysága nagyban függ a megválasztott bázistól. Tekintsük például az anharmonikus oszcillátort, aminek potenciálfüggvénye:

$$V(x) = x^2 + gx^4,$$

és bázisnak válasszuk a harmonikus oszcillátor energia-sajátállapotait valamilyen N indexig. Ekkor:

$$H_{mn} = E_n \delta_{mn} + g \int \phi_m(x) x^4 \phi_n(x) dx, \quad (1.10)$$

ahol a $\phi_n(x)$ függvények az (1.7) egyenletben megadott harmonikus oszcillátor sajátállapotok. Egy fix bázisméret esetén a módszer kisebb g értékekre lesz hatékonyabb, hiszen ebben az esetben változnak kevésbé az egzakt energia-sajátállapotok a harmonikus esethez képest.

A variációs ansatznak nem feltétlenül kell lineárisnak lennie a paramétereiben. Azonban itt is csak akkor kaphatunk helyes energiabecslést, ha a vizsgált függvényosztály elég jól illeszkedik a vizsgált problémához. Például ha egy harmonikus oszcillátor alapállapotát a $\psi(x) = \left(\frac{2\beta}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\beta x^2}$ alakban keressük¹, akkor a $\langle \psi | H | \psi \rangle$ skalárszorzatot a β paraméter szerint minimalizálva megkapjuk az egzakt alapállapot energiát. Ezzel szemben, ha az ansatzot pl. $\psi(x) = \sqrt{\alpha} e^{-\alpha|x|}$ alakban vennénk fel, akkor az energia várható értékének α szerinti minimuma csak egy durva felső korlát az alapállapot energiára. Ellentétben a harmonikus oszcillátorral, sok kvantumrendszer esetén sajnos nem nyilvánvaló, hogy milyen alakú az a jó variációs ansatz, amivel pontos becslést lehet kapni az energiára.

Egy másik gyakran használt közelítési módszer a **perturbációszámítás**. Ennek során a kvantummechanikai rendszer Hamilton-operátorát két tag összegére bontjuk. Egy olyan tagra, amely egzaktul megoldható problémát ír le, és egy második tagra amelyet formálisan kicsinek tekintünk. Ekkor (1.4) a következő alakú:

$$\hat{H}_0 \phi_n(x) + g \hat{H}_1 \phi_n(x) = E_n \phi_n(x), \quad (1.11)$$

ahol $\hat{H}_0 + g \hat{H}_1 = \hat{H}$ a Hamilton-operátor, és $\hat{H}_0$ egy egzaktul megoldható rendszer Hamilton-operátora, g pedig a csatolási állandó. Az egyenlet megoldásait kereshetjük Taylor-sor alakban:

$$E_n = E_n^{(0)} + g E_n^{(1)} + g^2 E_n^{(2)} + \dots \quad (1.12)$$

$$|\phi\rangle_n = |\phi\rangle_n^{(0)} + g |\phi\rangle_n^{(1)} + g^2 |\phi\rangle_n^{(2)} + \dots \quad (1.13)$$

¹A prefaktort az exponenciális előtt a normálás határozza meg.

Ezekből a sajátállapotokra és sajátértékekre a

$$(\hat{H}_0 + g\hat{H}_1)(|\phi\rangle_n^{(0)} + g|\phi\rangle_n^{(1)} + g^2|\phi\rangle_n^{(2)} + \dots) = (E_n^{(0)} + gE_n^{(1)} + g^2E_n^{(2)} + \dots)(|\phi\rangle_n^{(0)} + g|\phi\rangle_n^{(1)} + g^2|\phi\rangle_n^{(2)} + \dots)$$

egyenlet adódik. A g csatolási állandóban vezető rendben

$$\hat{H}_0|\phi_n^{(0)}\rangle + g(\hat{H}_1|\phi_n^{(0)}\rangle + \hat{H}_0|\phi_n^{(1)}\rangle) + \mathcal{O}(g^2) = E_n^{(0)}|\phi_n^{(0)}\rangle + g(E_n^{(1)}|\phi_n^{(0)}\rangle + E_n^{(0)}|\phi_n^{(1)}\rangle) + \mathcal{O}(g^2).$$

A g csatolási állandó nulladik rendjére már ismerjük a megoldást, hiszen ez a $\hat{H}_0$ -hoz tartozó rendszer egzakt megoldás, amire $\hat{H}_0|\phi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}|\phi_n^{(0)}\rangle$ teljesül. Ekkor az egyenletben a g -re legalább elsőrendű tagok maradnak. Az első rendre felírható egyenletet balról szorozva az egzaktul megoldható rendszer egy $\langle\phi_m^{(0)}|$ energia-sajátállapotával:

$$g\langle\phi_m^{(0)}|\hat{H}_1|\phi_n^{(0)}\rangle + g\langle\phi_m^{(0)}|\hat{H}_0|\phi_n^{(1)}\rangle = gE_n^{(1)}\langle\phi_m^{(0)}|\phi_n^{(0)}\rangle + gE_n^{(0)}\langle\phi_m^{(0)}|\phi_n^{(1)}\rangle.$$

A nulladik rend megoldása miatt tudjuk, hogy $\langle\phi_m^{(0)}|\hat{H}_0 = E_m^{(0)}\langle\phi_m^{(0)}|$, valamint, mivel a $\phi_i^{(0)}$ állapotok ortogonális bázist alkotnak $\langle\phi_m^{(0)}|\phi_n^{(0)}\rangle = \delta_{m,n}$. Válasszuk $\phi_m^{(0)}$ -et úgy, hogy ez a tag ne essen ki, tehát $m = n$. Ekkor:

$$E_n^{(1)} = \langle\phi_n^{(0)}|\hat{H}_1|\phi_n^{(0)}\rangle. \quad (1.14)$$

A számolást g^2 rendig folytatva a következő korrekció az alábbi alakú [1]:

$$E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle\phi_m^{(0)}|\hat{H}_1|\phi_n^{(0)}\rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}, \quad (1.15)$$

Ezt az eljárást alkalmazva felírhatjuk a perturbációs számítás módszerével az energia-sajátértékeket és energia-sajátállapotokat testzöleges magas rendben, ez azonban sok esetben rengeteg számolást igényel. Konstrukció szerint a perturbációs számítás $g = 0$ körüli sorként írja fel a megoldást, tehát a g kis értékeire működik hatékonyan.

Végül megemlítjük a **sajátérték-egyenlet numerikus megoldásának** lehetőségét is. Ez kötött állapotok esetében például a következőképpen lenne megoldható. Egy adott E energia esetén a (1.4) időfüggetlen Schrödinger-egyenlet megoldható a térbeli derivált véges differenciaként való közelítésével:

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{2\phi_n(x) - \phi_n(x + \Delta x) - \phi_n(x - \Delta x)}{\Delta x^2} + \hat{V}(x)\phi_n(x) = E_n\phi_n(x).$$

Az energia kvantálási feltételét az fogja adni, hogy a megoldás benne van-e a négyzetesen integrálható függvények Hilbert-terében, azaz, hogy a $\phi_n(x)$ függvény lecseng-e a $x \rightarrow \pm\infty$ limeszekben. Az E energiában pásztázva tehát azokat az értékeket kell keresni, ahol ez teljesül. A módszer nehézsége a kontinuum

limesz, azaz $\Delta x \rightarrow 0$ szükségessége, illetve az, hogy a hullámfüggvény ne a numerikus integrálás hibája miatt szálljon el a végtelenben.

Ebben a dolgozatban egy újfajta, az említett módszerektől elviekben is különböző közelítési módszerrel foglalkozunk. Ellentétben az összes itt felsorolt módszerrel, a bootstrap módszer nem közelítő egyenleteken alapul, hanem egzakt egyenletek és szintén egzakt egyenlőtlenségek ötvözésén. Ez azt fogja eredményezni, hogy a bootstrap módszer, noha implementálásában bonyolultabb az itt felsoroltaknál, elméleti szempontból megbízhatóbb, hiszen egzakt alsó és felső korlátokat is tud mondani, nem csak az energiaszintekre, hanem a különböző operátorok várható értékeire is a különböző energia-sajátállapotokban.

A bootstrap módszer az általunk vizsgált formájában csak kötött állapotok vizsgálatára alkalmas, szórási állapotokéra nem. Ezért a klasszikusabb közelítő módszerek esetében is csak a kötött állapotokat tárgyaltuk ebben a részben.

2. Bootstrap módszer a kvantummechanikában

A kvantummechanikai bootstrap első lépése, hogy választunk véges sok (önadjungált) operátort a Hilbert-téren. Ezek bázisán fogunk dolgozni

$$\mathbb{I}, \hat{O}_1, \hat{O}_2, \dots, \hat{O}_N, \quad (2.1)$$

ahol $\mathbb{I} = \hat{O}_0$ az identitás-operátort jelöli.

Az operátor bázis ismeretében tetszőleges ψ állapotra definiálható egy ϕ állapot:

$$|\phi\rangle = \sum_i c_i \hat{O}_i |\psi\rangle. \quad (2.2)$$

A Hilbert-tér beli norma nem negatív, tehát:

$$\langle \phi | \phi \rangle = \sum_{i,j} c_i^* c_j \langle \psi | \hat{O}_i \hat{O}_j | \psi \rangle \geq 0. \quad (2.3)$$

Mivel ennek az egyenlőtlenségnek tetszőleges c_i együtthatókra igaznak kell lennie, ezért az alábbi mátrix pozitív-szemidefinit:

$$\begin{pmatrix} \mathbb{I} & \langle \hat{O}_1 \rangle & \langle \hat{O}_2 \rangle & \dots & \langle \hat{O}_n \rangle \\ \langle \hat{O}_1 \rangle & \langle \hat{O}_1^2 \rangle & \langle \hat{O}_1 \hat{O}_2 \rangle & \dots & \langle \hat{O}_1 \hat{O}_n \rangle \\ \langle \hat{O}_2 \rangle & \langle \hat{O}_2 \hat{O}_1 \rangle & \langle \hat{O}_2^2 \rangle & \dots & \langle \hat{O}_2 \hat{O}_n \rangle \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle \hat{O}_n \rangle & \langle \hat{O}_n \hat{O}_1 \rangle & \langle \hat{O}_n \hat{O}_2 \rangle & \dots & \langle \hat{O}_n^2 \rangle \end{pmatrix} \quad (2.4)$$

A várható értékekből a tömörség kedvéért elhagytuk az állapot kiírását, vagyis az $\langle \hat{O} \rangle \equiv \langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle$ jelölést alkalmazzuk. Ez a pozitív szemidefinitási feltétel tetszőleges Hilbert-térbeli állapotra igaz. Ahhoz, hogy az energia-sajátállapotokra tudjunk eredményeket levezetni, további feltételekre van szükség, amelyek az összes állapot közül kijelölik az energia-sajátállapotokat.

Ha $|n\rangle$ egy $\hat{H}$ Hamilton operátorú rendszer energia-sajátállapota, akkor (1.3) miatt tetszőleges $\hat{O}$ operátorra:

$$\langle n|\hat{H}\hat{O}|n\rangle = E_n\langle n|\hat{O}|n\rangle = \langle n|\hat{O}\hat{H}|n\rangle,$$

ahol E_n az $|n\rangle$ sajátállapothoz tartozó energiasajátértéket jelöli. Tehát bármely energia-sajátállapotában a következő egyenlőségek teljesülnek:

$$\langle [\hat{H}, \hat{O}] \rangle = 0, \quad (2.5)$$

$$\langle \hat{H}\hat{O} \rangle = E\langle \hat{O} \rangle. \quad (2.6)$$

Látni fogjuk, hogy bizonyos kvantummechanikai rendszerek esetén (megfelelő operátor bázison) a (2.5) és (2.5) egyenletek elegendőek arra, hogy véges darab valós számmal kifejezzék a (2.4) mátrix minden elemét, tetszőlegesen nagy bázis esetén. A pozitív definitás feltétele pedig ennek a véges darab valós paraméternek a lehetséges értékeit fogja megszorítani.

A kvantummechanikai bootstrap módszert a [2] cikkben vezették be, ahol az anharmonikus oszcillátor alap- és első gerjesztett állapotára mutatták be ennek működését, egy konkrét csatolási állandó esetén. E dolgozat célja, hogy minél részletesebben megvizsgáljuk a módszer alkalmazhatóságát, nem csak az anharmonikus oszcillátor, hanem több különböző potenciál esetén is.

2.1. A határozatlansági reláció

A bootstrap módszerben alkalmazott pozitív definitási feltétel egyik következménye a közismert határozatlansági reláció. Tekintsünk egy három elemű bázist: $\mathbb{I}, A, B$, ahol A és B egymással nem kommutáló operátorok. Ekkor tetszőleges ψ állapotban képezhető az alábbi $|\phi\rangle = (\alpha + \beta A + \gamma B)|\psi\rangle$ Hilbert-térbeli vektor. Tekintsük a következő normát:

$$\langle \phi|\phi \rangle \geq 0,$$

azaz:

$$\langle \phi|\phi \rangle = \begin{pmatrix} \alpha^* & \beta^* & \gamma^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbb{I} & \langle A \rangle & \langle B \rangle \\ \langle A \rangle & \langle A^2 \rangle & \langle AB \rangle \\ \langle B \rangle & \langle BA \rangle & \langle B^2 \rangle \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix} \geq 0.$$

Ebből látszik, hogy a középső mátrix pozitív szemidefinit, vagyis determinánsa nem kisebb, mint nulla.

$$\det \begin{pmatrix} \mathbb{I} & \langle A \rangle & \langle B \rangle \\ \langle A \rangle & \langle A^2 \rangle & \langle AB \rangle \\ \langle B \rangle & \langle BA \rangle & \langle B^2 \rangle \end{pmatrix} = (\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2)(\langle B^2 \rangle - \langle B \rangle^2) - \langle A \rangle^2 \langle B \rangle^2 + \langle A \rangle \langle B \rangle (\langle AB \rangle + \langle BA \rangle) - \langle AB \rangle \langle BA \rangle \geq 0.$$

A determinánsban megjelenő $(\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2)$ és $(\langle B^2 \rangle - \langle B \rangle^2)$ szórásnégyzeteket jelöljük rendre σ_A^2 és σ_B^2 -tel. Az egyenlet átrendezése után a következőre jutunk:

$$\sigma_A^2 \sigma_B^2 \geq \frac{1}{4} |\langle [A, B] \rangle|^2.$$

A relációból látható, hogy csak két egymással kommutáló A és B operátorok mérésekor kaphatunk pontos értéket mindkét mennyiségre, hiszen a szórásnégyzetek szorzata csak ekkor lehet 0. A reláció nevezetes, speciális esete a Heisenberg-féle határozatlansági elv, mely az $A = p$ impulzus-és $B = x$ helyoperátorok méréseire mondja ki a pontosság határát. A két operátor kommutátora $[p, x] = -i\hbar \cdot \mathbb{I}$. Így a két mennyiség bizonytalansága az alábbi alakú

$$\sigma_p \sigma_x \geq \frac{\hbar}{2}.$$

2.2. Rekurzió $O_k = x^k$ bázis esetén általános potenciálban

Ebben a dolgozatban egyszerű kvantummechanikai rendszerekre vizsgáljuk a bootstrap módszer működését. Az első esetekben a $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2M} + V(x)$ Hamilton-operátorokban szereplő $V(x)$ potenciált polinomfüggvénynek választjuk.

Megmutatjuk, hogy ebben az esetben található egy rekurzió, amellyel véges sok kezdeti érték ismeretében kiszámolható az összes $\langle x^n \rangle$ alakú várható érték. Ezután a

$$\begin{pmatrix} 1 & \langle x \rangle & \langle x^2 \rangle & \dots & \langle x^K \rangle \\ \langle x \rangle & \langle x^2 \rangle & \langle x^3 \rangle & \dots & \langle x^{K+1} \rangle \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle x^K \rangle & \langle x^{K+1} \rangle & \langle x^{K+2} \rangle & \dots & \langle x^{2K} \rangle \end{pmatrix}$$

mátrix pozitív szemidefinitását használhatjuk a kezdeti paraméterek lehetséges értékeinek beszorítására. Az itt tárgyalt rekurziót először a [3] cikkben vezették le. Az egyetlen különbség, hogy míg ott a $\hbar = 1$ egységrendszerhasználták, én expliciten megtartom a $\hbar$ függést minden egyenletben, hogy később tudjam vizsgálni a bootstrap egyenletek $\hbar \rightarrow 0$ klasszikus limeszét.

A számításokhoz felhasználok néhány fontos matematikai és kvantummechanikai azonosságot. Ezek a következők:

Bármely A , B és C mátrixra

$$[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B.$$

Ez alapján $[p, x] = -i\hbar$ kanonikus kommutációs relációból következik, hogy

$$[p, x^k] = -ki\hbar x^{k-1}.$$

A teljes rekurzió számításához szükségünk van néhány segédszámításra, amit a (2.5) és (2.6) összefüggésekből kaphatunk meg. Először, ha $O = x^k$, akkor $[V(x), x^k] = 0$, hiszen a potenciál x egy polinomfüggvénye. Így (2.5)-be behelyettesítve csak a momentum tagot kell figyelembe venni.

$$\langle [H, x^k] \rangle = -\frac{1}{2M} \langle [p^2, x^k] \rangle = 0$$

Használhatjuk a fent említett azonosságokat. Ezek alapján

$$\frac{1}{2M} (i\hbar k \langle x^{k-1} p \rangle + i\hbar \langle p x^{k-1} \rangle) = 0,$$

ahol px^{k-1} a következ  k  ppen is   rhat  :

$$px^{k-1} = x^{k-1}p - i\hbar(k-1)x^{k-2},$$

amib  l

$$k\langle x^{k-1}p \rangle = \frac{i}{2}\hbar k(k-1)\langle x^{k-2} \rangle. \quad (2.7)$$

A rekurzi   fel  r  sa el  tt m  g helyettes  ts  k be az $O = x^{t-1}$ oper  tort a (2.5)-  s azonoss  gba. Ilyenkor a kor  bban l  tott $O = x^k$ esethez hasonl  an, ezt a null  ra rendezett azonoss  got kapjuk:

$$\langle x^{t-2}p \rangle + \langle px^{t-2} \rangle = 0. \quad (2.8)$$

Valamint m  g helyettes  ts  k be ugyanezt az oper  tort a (2.6) egyenl  s  gbe is. Ekkor az $\langle x^{t-1}p^2 \rangle$ v  rhat     rt  ket a következ  k  ppen lehet kifejezni:

$$\langle x^{t-1}p^2 \rangle = 2M \left(E\langle x^{t-1} \rangle - \langle V(x)x^{t-1} \rangle \right). \quad (2.9)$$

Ezeket a seg  dazonoss  gokat a k  ss  bbiekben a rekurzi   fel  r  s  hoz haszn  lni fogom.

A rekurz  v formul  lhoz az O oper  tort x^tp -nek v  lasztjuk,   s ezt (2.5)-be helyettes  tj  k:

$$\langle [H, x^tp] \rangle = \frac{1}{2M} \langle [p^2, x^tp] \rangle + \langle [V(x), x^tp] \rangle. \quad (2.10)$$

Itt a k  t ad  d   kommut  torok kisz  mol  sa kiss   bonyolultabb, ez  rt ezeket k  l  n r  szletezem. El  sz  r az impulzus tagra kapott $[p^2, x^tp]$ kommut  tort vizsg  lom, amit a kor  bban is haszn  lt azonoss  gok alapj  n fel tudunk bontani:

$$[p^2, x^tp] = [p^2, x^t]p + x^t[p^2, p] = -i\hbar t (x^{t-1}p^2 + px^{t-1}p).$$

A p kommut  l a saját hatv  nyaival,   gyhogy csak a $px^{t-1}p$ tag marad meg. Ezt fel  rhatjuk egy kommut  tor seg  ts  g  vel $[p, x^{t-1}]p + x^{t-1}p^2$ alakban, ahol a kommut  tor m  r ismert.

$$[p^2, x^tp] = -i\hbar t (2x^{t-1}p^2 + [p, x^{t-1}]p)$$

A kommut  tor hely  re be  rva a m  r ismert azonoss  got:

$$[p^2, x^tp] = -i\hbar t (2x^{t-1}p^2 - i\hbar(t-1)x^{t-2}p),$$

ahol $x^{t-2}p$ -t megint fel  rhatjuk az el  z  h  z hasonl  an egy kommut  tor seg  ts  g  vel: $[x^{t-2}, p] + px^{t-2}$. Ezt azonban a tagnak csak a fel  re helyettes  tj  k be,   gy a kommut  tort kisz  molva:

$$[p^2, x^tp] = -i\hbar t \left(2x^{t-1}p^2 - \frac{1}{2}\hbar^2(t-1)(t-2)x^{t-3} - \frac{1}{2}i\hbar(x^{t-2}p + px^{t-2}) \right), \quad (2.11)$$

ahol az utolsó tag a behelyettesítés után a (2.8) azonosság alapján kiesik, mert ennek várható értéke nulla.

A potenciálaghoz tartozó kommutátor kiszámításához először kifejezem a kommutátort definíció szerint az operátorok szorzatának különbségeként.

$$[V(x), x^t p] = [V(x), x^t]p + x^t[V(x), p] = x^t(V(x)p - pV(x))$$

Ezután megvizsgálom, hogy ez az új operátor hogyan hat egy tetszőleges ψ állapotra.

$$[V(x), x^t p]\psi = x^t \left(V(x)(-i)\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x} - (-i)\hbar \frac{\partial}{\partial x} (\psi V(x)) \right)$$

A függvények szorzatára vonatkozó differenciálási azonosságot alkalmazva a következőre jutunk:

$$[V(x), x^t p]\psi = i\hbar x^t V'(x)\psi.$$

Tehát a kommutátor a így egyszerűsödik:

$$[V(x), x^t p] = i\hbar x^t V'(x). \quad (2.12)$$

Az így kiszámolt $[p^2, x^t p]$ (2.11) és $[V(x), x^t p]$ (2.12) kommutátorokat tehát visszahelyettesítve (2.10)-be, és az egyenletet átrendezve:

$$\langle x^t V'(x) \rangle = 4\frac{1}{2M}t\langle x^{t-1}p^2 \rangle + \hbar^2 \frac{1}{2M}t(t-1)(t-2)\langle x^{t-3} \rangle. \quad (2.13)$$

A teljes rekurzióhoz még ki kell fejezni az $\langle x^{t-1}p^2 \rangle$ várható értéket x valamely hatványának várható értékeként. Ezt már megtettem a (2.9) egyenletben, amit most behelyettesítve (2.13)-ba:

$$\langle x^t V'(x) \rangle = 4Et\langle x^{t-1} \rangle - 2t\langle V(x)x^{t-1} \rangle + \hbar^2 \frac{1}{2M}t(t-1)(t-2)\langle x^{t-3} \rangle. \quad (2.14)$$

Vegyük észre, hogy a rekurziós egyenlet $t = 1$ speciális esete a jól ismert **virialtétel**:

$$E = \frac{1}{2}\langle xV'(x) \rangle + \langle V(x) \rangle. \quad (2.15)$$

A rekurziós egyenletek konkrét pontenciálra történő felírásából könnyen látszik, hogy a potenciálfüggvény alapján különböző paraméterek közötti összefüggéseket kapunk. Például ha a harmonikus oszcillátort vizsgáljuk, ahol $V(x) \propto x^2$, (2.6)-ot felhasználva és O -t $\mathbb{I}$ -nek választva és (2.6)-ból $O = xp$ -t behelyettesítve E -ből kifejezhetjük $\langle x^2 \rangle$ várható értéket. Ezután (2.14)-be behelyettesítve a potenciált és E -t az egyenlet két paraméter, $\langle x^{t-3} \rangle$ és $\langle x^{t+1} \rangle$ összefüggésére egyszerűsödik. $t=3$ -at választva megkapjuk $\langle x^4 \rangle$ várható értéket, hiszen x^0 várható értéke 1. Ezekből a rekurzió már x tetszőleges páros hatványának várható értékét megadja; x páratlan hatványainak várható értéke pedig a potenciálfüggvény párossága miatt mindig nulla. Így csupán E megadásával a teljes (2.4) mátrixot megkapjuk.

A legtöbb esetben azonban több kezdeti paraméterre van szükség a rekurzió működéséhez. Minden potenciálra definiálhatunk egy S alaphalmazt, mely ezeket a szükséges kezdeti paramétereket tartalmazza. A fentiek és a [4] cikk alapján az alábbiakban felsorolunk néhány példát.

- $V(x) = \frac{1}{2}\omega^2 x^2$; $S = \{E\}$
- $V(x) = gx^3$; $S = \{E, \langle x \rangle, \langle x^2 \rangle\}$
- $V(x) = gx^4$; $S = \{E, \langle x^2 \rangle\}$
- $V(x) = gx^2 + hx^4$; $S = \{E, \langle x^2 \rangle\}$
- $V(x) = x^2 + x^3 + x^4$; $S = \{E, \langle x \rangle, \langle x^3 \rangle, \langle x^5 \rangle\}$

2.3. Klasszikus periodikus mozgások

Érdekes eredményeket kaphatunk, ha a bootstrap által megengedett energiaszinteket és a hozzájuk tartozó $\langle x^2 \rangle$ értékeket a megfelelő klasszikus mechanikai elrendezésekhez hasonlítjuk. A dolgozatban vizsgált kötött állapotok a klasszikus mechanikában leginkább a periodikus mozgást végző tömegponttal mutatnak analógiát. Klasszikus esetben x^2 időátlagra egy mozgási periódusra:

$$\langle x^2 \rangle = \frac{1}{T} \int_0^T x(t)^2 dt,$$

ahol T a periódusidő. Az $\frac{1}{2}m \left(\frac{dx}{dt}\right)^2 + V(x) = E$ energiamegmaradási törvényből kifejezve a dt időintervallumot ez az alábbi alakba írható:

$$\langle x^2 \rangle = \frac{1}{T} 2 \int_{x_1}^{x_2} \frac{x^2 dx}{\sqrt{2(E - V(x))/2}},$$

ahol a T periódusidőt a következő integrál adja:

$$T = 2 \int_{x_1}^{x_2} \frac{dx}{\sqrt{2(E - V(x))/2}},$$

ahol x_1 és x_2 a megállási pontok. Ezekben a pontokban a mozgási energia nulla, azaz a potenciális energia megegyezik az összes energiával. $E = V(x_1) = V(x_2)$. Ha ezt az egyenletet meg tudjuk oldani és két gyököt kapunk, akkor az egyenlet megoldása után a fenti képletekbe behelyettesítve, adott potenciálfüggvényre megkapjuk x^2 várható értékének analógiát (a periódusidőre vett átlagát) az E energia függvényében. Látni fogjuk, hogy a nagyobb energiák felé haladva a bootstrap feltételek által megengedett tartományok az $E - \langle x^2 \rangle$ síkban mindig közel esnek a klasszikus $E - \langle x^2 \rangle$ görbéhez, illetve elég nagy energiákon tartalmazzák is azt. Ez egy példa az ún. korrespondancia-elvre.

3. Anharmonikus oszcillátor

3.1. Perturbációszámítás

Először az anharmonikus oszcillátor speciális Hamilton-operátorára vizsgáljuk a bootstrap módszer működését. Az egyszerűség kedvéért legyen $1/2$ és $\omega = 2$. Ekkor:

$$H = p^2 + x^2 + gx^4 \quad (3.1)$$

Előtte azonban megnézzük, milyen eredményt kaphatunk a perturbációszámítás elvégzésével. Ekkor az (1.11) egyenletben $g\hat{H}_1 = gx^4$. A g -ben nulla rendű megoldás a harmonikus oszcillátor megoldása az (1.6) egyenletből

$$E_n^{(0)} = \hbar 2 \left(n + \frac{1}{2} \right).$$

a g -ben elsőrendű tagok (1.14) -ből

$$E_n^{(1)} = \langle \psi_n^{(0)} | x^4 | \psi_n^{(0)} \rangle.$$

Ugyanígy a g^2 rendű tagok (1.15)-be behelyettesítve:

$$E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \phi_m^{(0)} | x^4 | \phi_n^{(0)} \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}.$$

Ezek alapján (1.12)-ből a perturbációszámítással becsült energiák az anharmonikus oszcillátor első néhány energiaszintjére g -ben második rendig a következők [5]:

$$E_0 = 1 + \frac{3}{4}g - \frac{21}{16}g^2 + \mathcal{O}(g^3) \quad (3.2)$$

$$E_1 = 3 + \frac{15}{4}g - \frac{165}{16}g^2 + \mathcal{O}(g^3) \quad (3.3)$$

$$E_2 = 5 + \frac{39}{4}g - \frac{615}{16}g^2 + \mathcal{O}(g^3). \quad (3.4)$$

Az anharmonikus oszcillátor az egyik legtipikusabb példája a perturbációszámítás alkalmazásának, és jó bevezetés bonyolultabb modellekhez (pl. skalár kvantumtérelméletekhez), ezért a tárgyalása különösen érdekes.

3.2. Rekurzió

Ebben az esetben az $S = \{E, \langle x^2 \rangle\}$ elemei alapján felírhatjuk a rekurziót tetszőleges rendig. Felhasználva az általános polinomfüggvény-potenciálra kiszámolt rekurziót, $V(x) = x^2 + gx^4$ -t (2.14)-be helyettesítve:

$$4(t+1)\langle x^{t+1} \rangle + 4g(t+2)\langle x^{t+3} \rangle = 4tE\langle x^{t-1} \rangle - \hbar^2 \frac{1}{2M} t(t-1)(t-2)\langle x^{t-3} \rangle. \quad (3.5)$$

Ebben a formulában néhány tag még ismeretlen, azonban (2.5) és (2.6) azonosságok alapján ezeket ki tudjuk fejezni E és $\langle x^2 \rangle$ segítségével. Ha $O = xp$, akkor (2.5)-ből:

$$\frac{1}{2M} \langle [p^2, xp] \rangle + \langle [x^2, xp] \rangle + g \langle [x^4, xp] \rangle = 0,$$

amiből

$$-\frac{1}{2M} \langle p^2 \rangle + \langle x^2 \rangle + 2g \langle x^4 \rangle = 0.$$

Továbbá (2.6)-ból, O -t $\mathbb{I}$ -nek választva az energia $E = \frac{1}{2M} \langle p^2 \rangle + \langle x^2 \rangle + g \langle x^4 \rangle$. Ezekből a következő összefüggésre jutunk E , $\langle x^2 \rangle$ és $\langle x^4 \rangle$ között:

$$E = 2 \langle x^2 \rangle + 3g \langle x^4 \rangle, \quad (3.6)$$

amiből az alaphalmaz - azaz E és $\langle x^2 \rangle$ - két kezdeti értéke ismeretében megkapjuk $\langle x^4 \rangle$ -t.

Ezzel tehát kaptunk egy rekurziós formulát, ami az E energia és három egymást követő azonos paritású x hatvány várható értékének ismeretében megadja a következő ilyen paritású x hatvány várható értékét. A várható érték a nulladik hatványra 1; a negyedik hatánya (az fentiek alapján) kifejezhető a második hatvány várható értékéből és az energiából. Az x páratlan hatványainak várható értéke pedig mindig nulla. Tehát adott E -re és $\langle x^2 \rangle$ -re tetszőleges nagy helykoordináta hatványra megkaphatjuk a várható értéket a rekurzióból. Ellenőrizni tudjuk tehát az $X_{ij} = \langle x^{i+j} \rangle$ mátrix pozitív definitását, és így megállapíthatjuk, hogy az általunk választott E és $\langle x^2 \rangle$ értékek megengedettek-e az anharmonikus oszcillátor potenciáljánál.

3.3. Algoritmus

Az energiaszitnek megkeresésére egy pásztázást alkalmazhatam, ami (ebben a dolgozatban) egy két dimenziós sík rendezett pontpárjaira előre választott felbontás mellett egyesével leteszteli, hogy a bootstrap által megengedettek-e, azaz pozitív szemidefinit-e az $X_{ij} = \langle x^{i+j} \rangle$ mátrix.

A számítások elvégzéséhez Python3-at használtam, az ábrákat, grafikonokat pedig a matplotlib pyplot könyvtára segítségével készítettem.

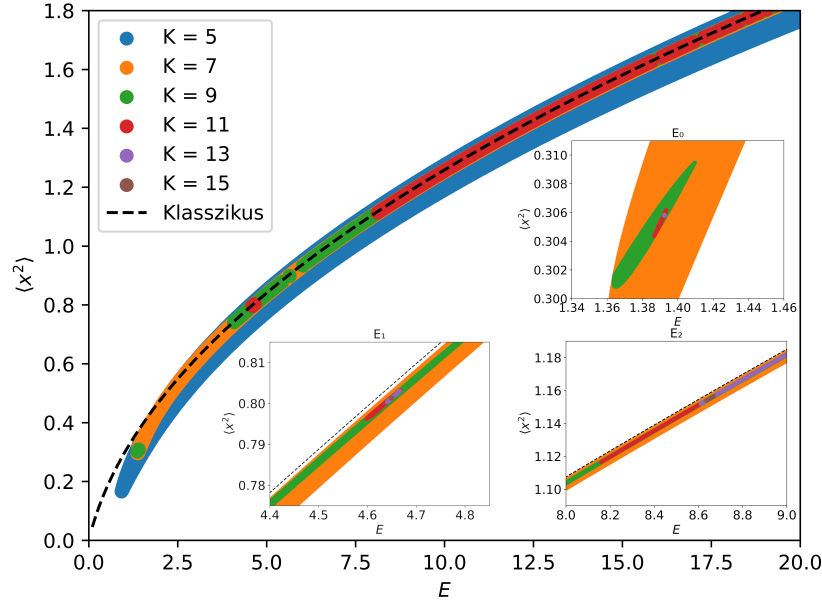
Minden vizsgált rendszerhez írtam egy függvényt, amely a rendszerre jellemző paraméterek alapján egy ilyen rendezett pontpárra megadja, hogy megengedett-e vagy sem. Egy pásztázó metódussal az S alaphalmaz elemeit egy kiválasztott tartományban, előre megadott felbontással egy kis K -ra végigpásztázom. Ezután a metódus a vizsgálandó tartományt leszűkíti arra a kis $|S|$ dimenziós téglalatra (téglalapra), ami a kis K mellett megengedett pontok köré írható és K -t növelve ismét elvégzi a pásztázást. Ezt folytatja az előre megadott maximális K rendig. Az így kapott megengedett pontokat már tudjuk vizsgálni és ábrázolni különböző szempontok alapján.

Hasonló pásztázó függvényt alkalmaztam a csatolási állandók vizsgálatára. Ilyenkor K mellett g -t is változtattam egy-egy pásztázás után. A vizsgálandó

tartományt azonban kissé arrébb kellett tolnom (vagy megfelelően nagyvak választanom az elején), mivel a csatolási állandó változtatásakor az energiaszintek is eltolódnak.

3.4. Eredmények

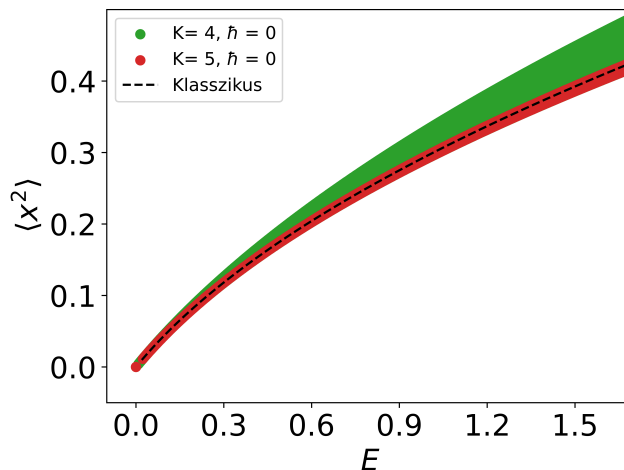
K növelésével egyre szigorúbb megszorításokat kapunk az E és $\langle x^2 \rangle$ lehetséges értékeire, tehát K növelésével közelíteni tudjuk az anharmonikus oszcillátor energiaszintjeit. Az 1. ábra mutatja ezeket az értékeket különböző K rendekre, a $g = 1$ és $M = 1/2$ esetében, ha $\hbar$ -t egységnek választjuk. Ez azt jelenti, hogy az impulzuszómentumot dimenziótlannak vesszük, azaz az impulzus dimenziója $1/\text{hossz}$. Ha még a fénysebességet $c = 1$ -nek vesszük, akkor még az is igaz, hogy az energia egysége is $1/\text{hossz}$. Valamint, mivel $M = 1/2$ -nek vettük, ez lényegében azt jelenti, hogy az energia egysége a részecske tömegének kétszerese.



1. ábra. A bootstrap módszer által megengedett tartományok az $E - \langle x^2 \rangle$ síkon az anharmonikus oszcillátorra $g = 1$ és $M = 1/2$ esetén, különböző K bázis méretek mellett. A szaggatott vonal az ugyanebben a potenciálban történő klasszikus periodikus mozgás esetében mutatja az x^2 periódusidőre vett időátlagát az energia függvényében. A betétek az alapállapotot illetve az első és második gerjesztetett állapotokat mutatják közelebről.

A grafikon jól mutatja, hogy kis energiákra már az $X_{ij} = \langle x^{i+j} \rangle$ mátrix kis rendjénél (kis K -nál) is látszik az energiák kvantáltsága, a nagyobb energiaszintek azonban folytonosnak látszanak. Ezeknél a nagyobb energiáknál magasabb rendig kell kiszámolni a rekurziót, hogy látszódjon a diszkretizáltság. Jól látható, hogy a vizsgált kvantált energiák a klasszikus mozgást jellemző görbe alatt találhatók és a vizsgált K -kra a megengedett sáv jól illeszkedik erre a görbére. Az is látható, hogy a magasabb energiaszintek egyre közelebb vannak a klasszikus rendszer energiájához. Ez a korrespondancia-elv egyik megnyilvánulása.

Mivel a rekurzió kiszámolásánál expliciten benne hagyta képletekben $\hbar$ -t, ezért érdekességgéppen meg tudtam nézni, hogy milyen eredményt ad a bootstrap módszer a $\hbar \rightarrow 0$ limeszben. A 2. ábra ezt mutatja két különböző K értékre. Jól látszik, hogy ez esetben a bootstrap módszer a megfelelő klasszikus periodikus mozgás $E - \langle x^2 \rangle$ görbét közelíti.

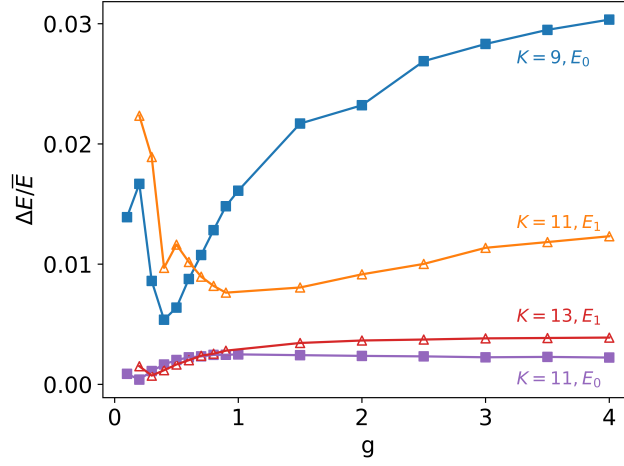


2. ábra. A bootstrap módszer által megengedett tartományok a $\hbar = 0$ esetre, a klasszikus eset közelítéseként, két különböző K -ra. A szaggatott vonal ugyanebben a potenciálban történő klasszikus mozgást jellemzi.

A 3. ábrán bootstrap módszer pontossága látszik a g csatolási állandó függvényében az alapállapot és az első gerjesztett állapot energiájára. (Itt $\hbar$ -t ismét 1-nek választom.) A pontosságot itt a kiválasztott energia becslését mutató "szigitek" relatív szélességének, azaz

$$\frac{\Delta E}{\bar{E}} \equiv \frac{E_{max} - E_{min}}{E_{max} + E_{min}}$$

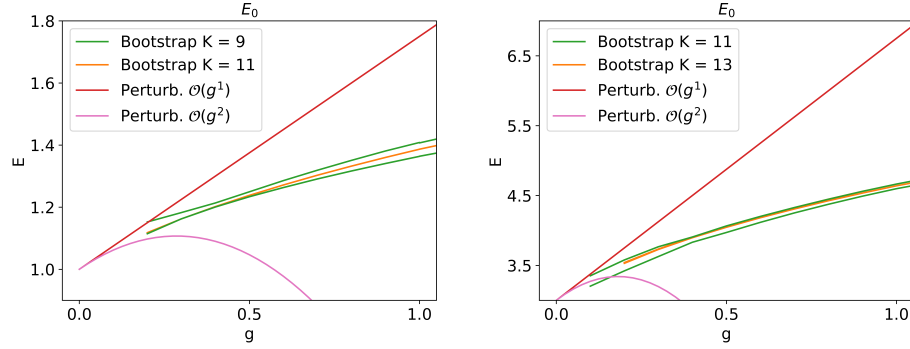
segítségével definiálom.



3. ábra. A bootstrap módszer energiabecslésének pontossága a g függvényében az alapállapot (kék és lila) és az első gerjesztett állapot (narancs és piros) energiájára. Mindkét esetben két különböző K -ra.

Mindkét energiára igaz, hogy fix K bázisméret esetén a legpontosabb becslést nem a $g \rightarrow 0$ limeszben kapjuk, mint pl. a perturbációszámítás vagy a harmonikus oszcillátor bázisát alkalmazó variációs módszer esetén várnánk, hanem egy véges g érték mellett. Ez vélhetően azért van, mert a $g \rightarrow 0$ limesz nem triviális, hiszen $g = 0$ értékénél a bootstrap rekrzióhoz szükséges alaphalmaz csak 1 elemű (hiszen a viriál-tétel összeköti E és $\langle x^2 \rangle$ értékét), míg $g > 0$ esetén az alaphalmaz kételemű. Ez azt eredményezi, hogy a bootstrap módszer egy olyan közelítést ad az anharmonikus oszcillátor spektrumára, ami nem akkor igazán pontos, amikor a potenciál egyik tagja dominál a másikhöz képest, hanem amikor a két tag kb. összemérhető.

A bootstrap szigorú alsó és felső becsléseket ad a különböző energiákra. A 4. ábrán ezeket a határokat ábrázoltam g függvényében zöld, illetve narancssárga görbékkel. A görbék által közrezárt terület a megengedett energiák tartománya. A piros és rózsaszín görbék a perturbációszámítással közelített energiákat ábrázolják g első, illetve második rendjéig kiszámolva (3.2) és (3.3) alapján. Ezek a görbék kis csatolási állandó esetén jól közrefogják a bootstrap által adott energiasávot. Látszik, hogy míg a bootstrap módszer nagyon pontos becslést ad az energiaszintekre nagy g csatolási állandó esetén is, addig a csatolási állandó növelésével a perturbációszámítás hamar pontatlanná válik.



4. ábra. A bootstrap módszer energiabecslésének összevetése a perturbációs számítással az alapállapot (*bal*) és az első gerjesztett állapot (*jobb*) energiájára g függvényében. A zöld, illetve narancs görbék a bootstrap alsó és felső korlátait jelölik különböző K értékekre. A piros, illetve rózsaszín görbék a perturbációs számítás becslése g első, illetve második rendjéig.

4. Dupla gödör

4.1. Variációs ansatz

A következő vizsgált rendszer a dupla gödör potenciál. A rendszer Hamilton-operátora a következő alakban írható fel:

$$H = \frac{1}{2M}p^2 - mx^2 + gx^4, \quad (4.1)$$

ahol $m, g \in \mathbb{R}^+$ valós számok. Az egyszerűség kedvéért legyen ismét $M = 1/2$. Az energia-sajátállapotokat kereshetjük variációs módszerrel egy nemlineáris ansatz segítségével. Egy egyszerű ansatz az alapállapotra két Gauss-görbe összegeként[6]:

$$\psi_\beta(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\pi}{2\beta} \right)^{1/4} (1 + e^{-2\beta})^{-1/2} \left(e^{-\beta(x - \sqrt{m/(2g)})^2} + e^{-\beta(x + \sqrt{m/(2g)})^2} \right).$$

Az ansatzot a kvantummechanikai alagutazás jelensége motiválja. Egy Schrödinger-egyenletet követő részecske nem nulla valószínűséggel át tud jutni egy olyan potenciálgáton, amelynek magassága nagyobb mint a részecske energiája. Az alapállapotban így egy dupla csúcsú hullámfüggvényt várunk, ahol a megtalálási valószínűség maximuma a potenciál minimumaiban ($x = \pm\sqrt{m/(2g)}$) van. A Gauss-eloszlás alakú hullámfüggvény azért indokol, mert a gödör minimuma környékén jó közelítéssel harmonikus a potenciál. A prefaktort a hullámfüggvény normáltsága határozza meg. Itt β szabad paraméternek meg kell keresni a megfelelő értékét. Az ehhez az ansatzhoz tartozó energia várható érték felírható β függvényében:

$$E_0(\beta) = \frac{3g}{\beta^2} + \frac{m}{8\beta} + \frac{m^2}{8g} + \beta - \frac{m\beta^2}{g} + \left(\frac{3m}{8\beta} - \frac{m^2}{8g} + \frac{m\beta^2}{g} \right) \tanh\left(\frac{m}{2g}\beta\right) - \frac{m^2}{4g}.$$

Az ansatz-cal becsült energia ennek a függvénynek a minimumértéke lesz, a megfelelő β paraméter pedig a függvény minimum helye. Kézenfekvő lenne differenciálni az energiafüggvényt β szerint, azonban a tangenshiperbolikus miatt ez nehézkes lenne, így numerikus módszerhez folyamodtam.

Hasonló alakban kereshetjük a hullámfüggvényt az első gerjesztett állapotra, azzal a különbséggel, hogy itt a két Gauss-görbe különbségét vesszük, hiszen egy páros potenciálban az alapállapot hullámfüggvénye mindig páros, míg az első gerjesztett állapot hullámfüggvénye mindig páratlan [1]:

$$\psi_\beta(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\pi}{2\beta} \right)^{1/4} (1 + e^{-2\beta})^{-1/2} \left(e^{-\beta(x - \sqrt{(m/2g)})^2} - e^{-\beta(x + \sqrt{(m/2g)})^2} \right).$$

Így az energia-várható érték is csak kissé tér el:

$$E_1(\beta) = \frac{3g}{\beta^2} + \frac{m}{8\beta} + \frac{m^2}{8g} + \beta - \frac{m\beta^2}{g} + \left(\frac{3m}{8\beta} - \frac{m^2}{8g} + \frac{m\beta^2}{g} \right) \coth \left(\frac{m}{2g}\beta \right) - \frac{m^2}{4g}.$$

Itt a β függvényében kell az $E_1(\beta)$ minimumát megkeresni, hogy megbecsüljük az első gerjesztett állapot energiáját.

4.2. Rekurzió

A potenciálfüggvény ebben az esetben is polinomfüggvény, tehát ismét felhasználhatjuk a (2.14) rekurzív formulát. $V(x)$ behelyettesítése után a következő egyenlőségre jutunk:

$$-4m\langle x^{t+1} \rangle + 8g\langle x^{t+3} \rangle = 8Et\langle x^{t-1} \rangle + 4tm\langle x^{t+1} \rangle - 4tg\langle x^{t+3} \rangle + \hbar^2 \frac{1}{2M} t(t-1)(t-2)\langle x^{t-3} \rangle. \quad (4.2)$$

Az anharmonikus oszcillátorhoz hasonlóan itt is a (2.5) és (2.6) azonosságokat használhatjuk. Ezeknek az egyenleteknek a megoldása nagyon hasonló a korábban kiszámolt rekurziókhoz. $O = xp$ -re (2.5)-ből:

$$\langle p^2 \rangle = m\langle x^2 \rangle + 2g\langle x^4 \rangle.$$

$O = \mathbb{I}$ -t (2.6)-ba helyettesítve:

$$E = \langle p^2 \rangle - m\langle x^2 \rangle + g\langle x^4 \rangle.$$

Ezekből E -t kifejezve:

$$E = -2m\langle x^2 \rangle + 3g\langle x^4 \rangle.$$

Innen pedig már megkapjuk x^4 várható értékét $\langle x^2 \rangle$ és E függvényeként kifejezve:

$$\langle x^4 \rangle = \frac{E + 2m\langle x^2 \rangle}{3g}. \quad (4.3)$$

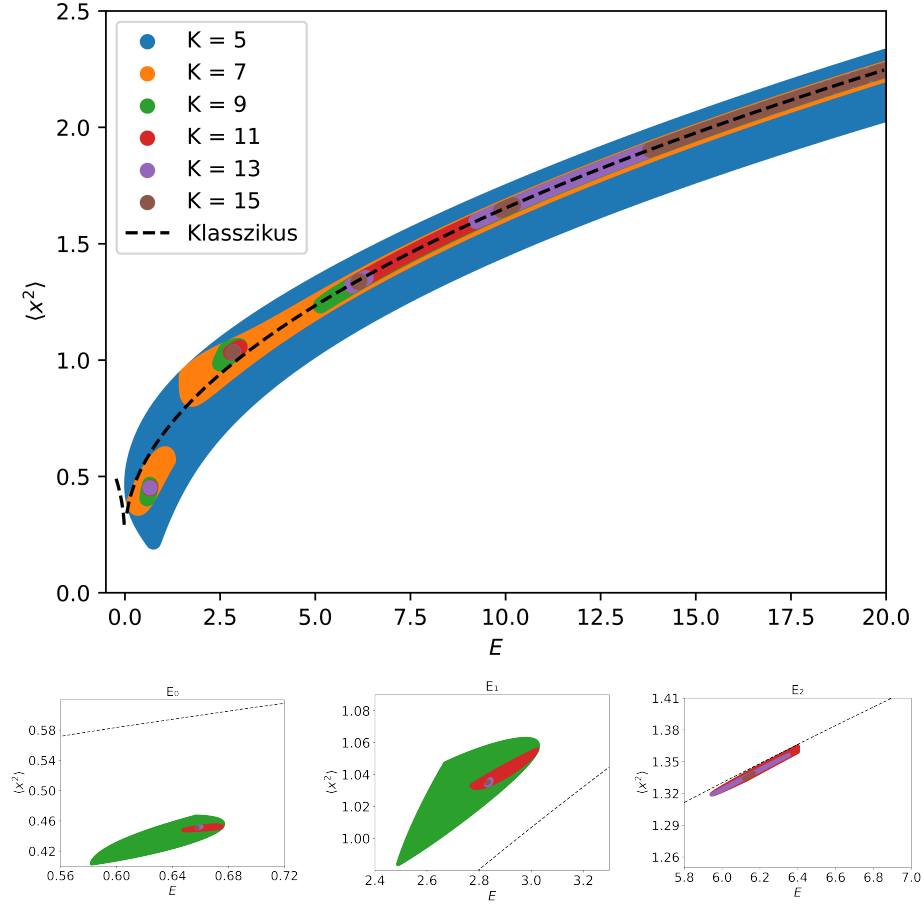
Látható tehát, hogy az alaphalmaz itt is $S = \{E, \langle x^2 \rangle\}$.

A dupla gödör potenciálfüggvény az anharmonikus oszcillátor potenciálfüggvényével szemben negatív értékeket is fölvesz. Ez alapján a pásztázást a negatív energiatartományra is ki kell terjeszteni a potenciálfüggvény minimum értékéig. Valamint a klasszikus görbe itt negatív tartományra is kiszámolható, ehhez a megfordulási pontoknak a negyedfokú egyenlet azonos előjelű gyökei kell figyelembe venni.

4.3. Eredmények

m értékétől függően a szimmetrikus görbék lehetnek sekélyebbek vagy mélyebbek, azaz a potenciál minimuma lehet relatíve kis abszolút értékű negatív szám, illetve relatíve nagy abszolút értékű negatív szám.

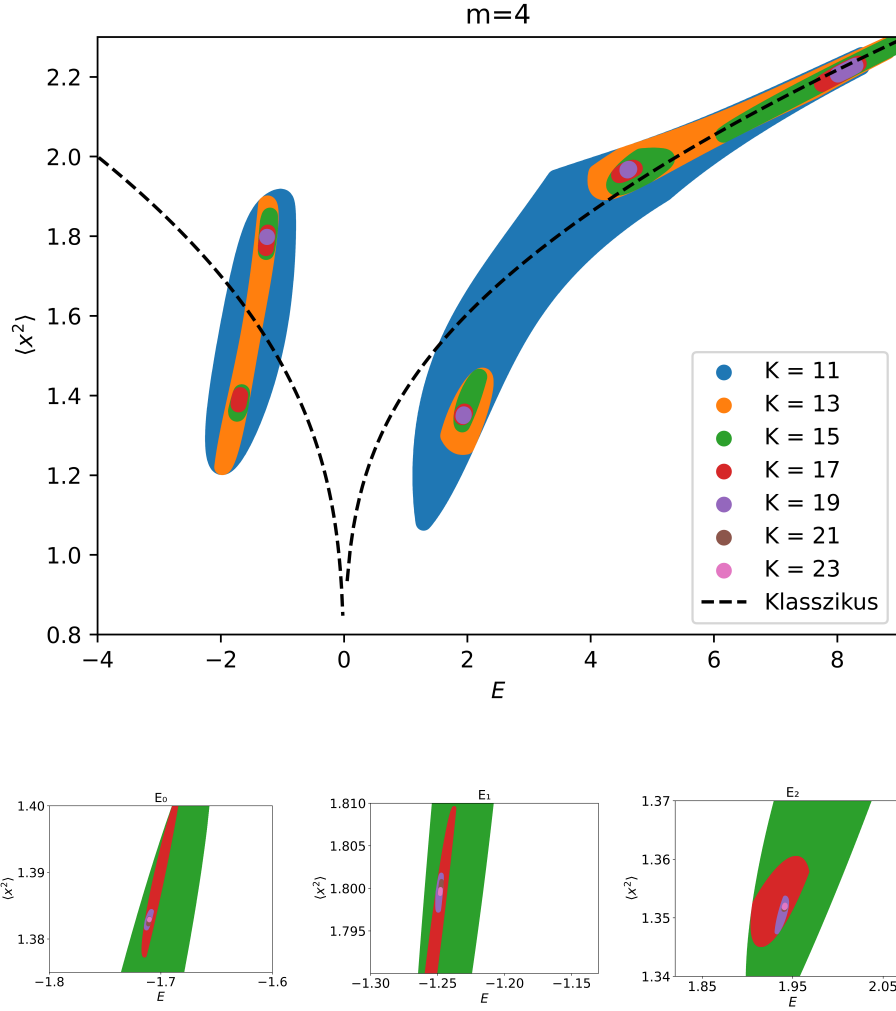
Ha m értékét kicsinek választjuk, a görbék sekélyek lesznek. Ebben az esetben a bootstrap eredménye nagyon hasonlít az anharmonikus oszcillátornál látott eredményhez, ilyenkor nem jelennek meg negatív energiaszintek. A megtalált energiák azonban az anharmonikus oszcillátornál látottakkal ellentétben nem egységesen a klasszikus görbe alatt helyezkednek el, hanem van, ami fölötté, van, ami alatta. A vizsgált esetekben azonban itt is az látszik, hogy a korrespondancia-elv értelmében a nagyobb energiák közelítik a klasszikus esetet. Ez látható a (5) ábrán, ahol az $m = 1$, $g = 1$ esetet vizsgáltam.



5. ábra. *fent* A bootstrap által megengedett tartományok a dupla gödör potenciál esetében, $m = 1$ és $g = 1$ értékekre, különböző K bázisméreteknél. Az egyszerűség kedvéért $\hbar = 1$ és $M = \frac{1}{2}$. A szaggatott vonal az ugyanebben a potenciálban történő klasszikus periodikus mozgásra mutatja x^2 periódusidőre vett átlagát az energia függvényében. *lent* A kisebb ábrák az alapállapotot illetve az első és második gerjesztett állapotot mutatják közelebbről.

A potenciálgödrök minimuma itt -0.25 . Elvileg ezekben a gödrökben is lehetnének kötött energia-sajátállapotok, ahogy a klasszikus görbe is mutatja. Azonban ezek nem elég mélyek ahhoz, hogy negatív energiaszintek is meg tudjanak jelenni. Ez már a bootstrap-mátrix kis rendjénél is egyértelműen látszik. Például $K = 9$ esetén már csak az energia pozitív tartományában vannak megengedett pontok.

Ha m -et nagyobbak választjuk, az energiaszintek sokkal kevésbé illeszkednek a klasszikus görbére, habár a magasabb energiák itt is közelítenek hozzá. Egy ilyen esetet ábrázoltam a 6. ábrán, ahol $m = 4$ -nek és $g = 1$ -nek választotam.

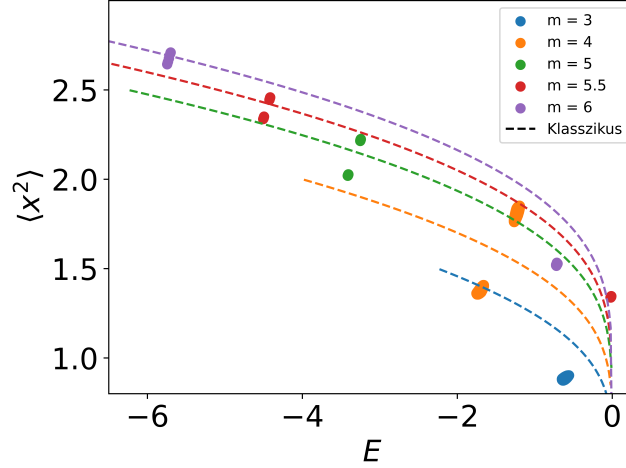


6. ábra. *(fent)* A bootstrap által megengedett tartományok a dupla gödör potenciál esetében, $m = 4$ és $g = 1$ értékekre, különböző K bázisméreteknél. Itt is $\hbar = 1$ és $M = \frac{1}{2}$. A szaggatott vonal az ugyanebben a potenciálban történő klasszikus periodikus mozgásra mutatja x^2 periódusidőre vett átlagát az energia függvényében. *(lent)* A kisebb ábrák az alapállapotot illetve az első és második gerjesztett állapotot mutatják.

Jól látható, hogy a pozitív energiák mellett megjelenik két nullánál kisebb, egymáshoz közeli energiaszint, amely energia-sajátállapotokban azonban az x^2 várható értéke nagyon különbözik. Ezek az ábrán a klasszikus görbe két oldalán helyezkednek el, közel egymás fölött.

m -et tovább növelve a gödrök mélysége és szélessége tovább növekszik. A 7. ábrán ábrázoltam a duplagödör-potenciál legkisebb energiáit és azok viszonyát

a klasszikus görbéhez néhány m értékre. A bootstrap-mátrix méretét minden m -hez egyedinek választottam úgy, hogy a "szigetek" összemérhetőek legyenek. Ehhez kis csatolási állandóknál kisebb K -t választottam, nagyobb m -ekhez pedig nagyobbat. (Pl. $m=3$ -hoz $K=15$, $m=6$ -hoz $K=25$)



7. ábra. A bootstrap módszer által megengedett tartományok az E -ben negatív $E - \langle x^2 \rangle$ felsíkon, különböző m értékek mellett. A K bázisméretet minden m -hez egyedien vannak megválasztva, $15 \geq K \geq 25$. A szaggatott vonalak a színüknek megfelelő potenciálban mutatják a klasszikus mozgás esetét.

Az ábrán jól látszik a gödörben lévő energiák jellege. $m=3$ -ra csak az alapállapot energiája tolódik a negatív tartományba. $m=4$ -re az alapállapot energiája mellett megjelenik a korábban is látott első gerjesztett állapot energiája. Ahogy m növekszik, úgy a két legkisebb energia-sajátértéket ábrázoló "szigetek" közelednek egymáshoz, vagyis a sajátértékekhez tartozó sajátfüggvényekben x^2 várható értéke egyre kevésbé különbözik. Emellett egyre inkább illeszkednek a klasszikus görbére is. Ahogy m növelésével az alapállapot energiája egyre kisebb lesz, úgy egyre több energiszint van a gödörben, vagyis a nulla energia alatt.

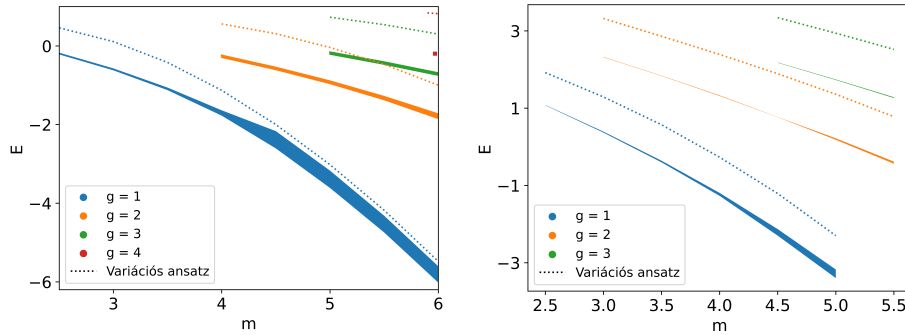
A bootstrap módszer ez esetben is szigorú alsó és felső becsléseket ad az energia és x^2 várható értékeire a variációs módszerrel ellentétben, ami az energiára felső becslést ad, az $\langle x^2 \rangle$ várható érték esetében pedig a priori nem tudni, hogy alsó vagy felső becslést. Az alábbi táblázatokban a 7. ábrán látható becsléseket hasonítom össze a 4.1. fejezetben ismertett egyszerű variációs ansatzal kiszámolt becslésekkel az alapállapot és az első gerjesztett állapot esetében.

m	E_0^{var}	E_0^{boot}	$\langle x^2 \rangle_0^{var}$	$\langle x^2 \rangle_0^{boot}$
3	0.1	[-0.602, -0.588]	2.14	[0.877, 0.891]
4	-1.12	[-1.77, -1.65]	2.41	[1.35, 1.42]
5	-3.02	[-3.42, -3.39]	2.64	[2.01, 2.04]
5.5	-4.18	[-4.51, -4.48]	2.75	[2.32, 2.36]
6	-5.48	[-5.7, -5.698]	2.85	[2.711, 2.714]

m	E_1^{var}	E_1^{boot}	$\langle x^2 \rangle_1^{var}$	$\langle x^2 \rangle_1^{boot}$
4	-1.05	[-1.28, -1.18]	2.41	[1.76, 1.88]
5	-3.01	[-3.26, -3.23]	2.64	[2.21, 2.25]
5.5	-4.18	[-4.3, -4.41]	2.75	[2.44, 2.47]
6	-5.47	[-5.697, -5.696]	2.85	[2.715, 2.717]

Látható, hogy a variációs módszer által adott felső becslések mind az energia mind $\langle x^2 \rangle$ esetében a bootstrap által becsült tartományon kívül esnek. m kis értékeinél aránylag kis mátrixmérettel, vagyis aránylag kevés számolással a bootstrap sokkal pontosabb becslést ad az itt tárgyalt variációs ansatznál. Az m csatolási állandó növelésével azonban a variációs módszer közelít a bootstrap által meghatározott helyes tartományokhoz. Azt mondhatjuk tehát, hogy az itt tárgyalt variációs ansatz mélyebb gödrök esetén valamivel jobb közelítés.

A dupla gödör potenciálnak két csatolási állandója van: m és g . Ha mindkettőt ugyanolyan mértékben változtatjuk az olyan, mintha a potenciálfüggvényt megszoroznánk egy konstassal, vagyis megnyújtjuk. Ettől a gödröknek csak a mélységük változik, a szélességük nem. A 8. ábrán az alapállapot energiáinak bootstrap által megengedett energiatartományát ábrázoltam m függvényében különböző g -kre. A pontozott vonalak a színüknek megfelelő g értékekre mutatják a variációs ansatz felső becslését az alapállapot energiájára.



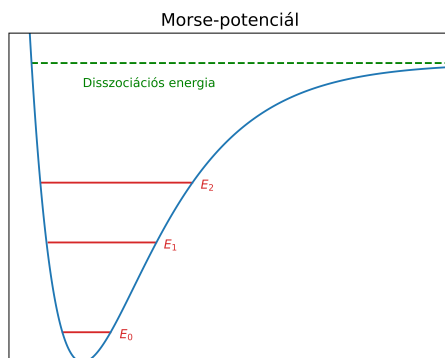
8. ábra. A bootstrap által megengedett alapállapot (*bal*) és első gerjesztett állapot (*jobb*) energiaértékek m csatolási állandó függvényében, $K = 15$ esetén. A különböző színek különböző g értékeket jelölnek. A pontozott görbék a színüknek megfelelő g -re ábrázolják a variációs ansatz által becsült energiát m függvényében.

A táblázat adataihoz hasonlóan itt is látszik, hogy m növelésével a két mód-

szer által adott becslések közelítenek egymáshoz. Ezzel szemben g növelésével a variációs módszer becslése távolodik a bootstrap által megadott helyes energiatartománytól.

5. Morse-potenciál

Ebben a dolgozatban az utolsó vizsgált kvantummechanikai rendszer a Morse-potenciál. A Morse-potenciál egy egyszerű modellje a molekulák rezgéseinek. Ellentétben az eddig tárgyalt potenciálokkal, a Morse-potenciál csak $-\infty$ -ben divergens, míg $+\infty$ -ben egy konstanshoz tart. Ez a konstans a disszociációs energia. Ennek az egyik következménye, hogy csak véges sok kötött állapot van a Morse-potenciálban. A disszociációs energiánál a rendszer összeomlik (a molekula szétesik) és az energiaszintek folytonosá válnak.



9. ábra. A Morse-potenciál jellege. A piros vízszintes vonalak a közötti energiaszinteket jelölik, a zöld szaggatott vonal pedig a disszociációs energiát.

A Morse-potenciál esetében a potenciálfüggvény a következő:

$$V(r) = A(e^{-2a(r-r_e)} - 2e^{-a(r-r_e)}), \quad (5.1)$$

ahol A és a valós paraméterek, r_e pedig a potenciálfüggvény minimumhelye. A minimumhelyet nullának választva és átskálázva az x koordinátát a potenciál a következő alakra egyszerűsíthető:

$$V(x) = A(e^{-2x} - 2e^{-x}). \quad (5.2)$$

5.1. Egzakt megoldás

A Morse-potenciál esetében a különböző energia-sajátértékekre és sajátállapotokra egzakt megoldás is ismert [7]. A sajátértékeket a következő formula adja meg.

$$E_n = 2\sqrt{A} \left(n + \frac{1}{2} \right) - \left(n + \frac{1}{2} \right)^2 - A \quad (5.3)$$

ahol $n = 0, 1, \dots, \left\lfloor \sqrt{A} - \frac{1}{2} \right\rfloor$. Vagyis a kötött energiák száma $\left\lfloor \sqrt{A} + \frac{1}{2} \right\rfloor$.

Az n -edik ilyen sajátállapot hullámfüggvénye:

$$\psi(z) = N_n z^{\sqrt{A}-n-\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{2}z} L_n^{(2\sqrt{A}-2n-1)}(z),$$

ahol $z = 2\sqrt{A}e^{-x}$, L_n az n -edik Laguerre-polinom, N_n pedig az adott energiaszinthez tartozó normálási faktor, ami a következő alakban írható:

$$N_n = \left(\frac{n!(2\sqrt{A}-2n-1)}{\Gamma(2\sqrt{A}-n)} \right)^{\frac{1}{2}}$$

Ez alapján felírható e^{-x} várható értéke, amit később össze tudunk vetni a bootstrap eredményeinkkel:

$$\langle e^{-x} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(z) e^{-x} \psi(z)^* dx$$

5.2. Rekurzió az $O_k = e^{kx}$ bázisra

Itt a potenciál nem x egy polinomfüggvénye, ezért nem érdemes az eddig használt $O_k = x^k$ bázist választani a bootstrap módszerhez. Ehelyett most az $O_t = e^{tx}$ bázisra írjuk föl a rekurziót, ahol t egy nempozitív egész szám. Ismét az eddig is használt (2.5) és (2.6) azonosságokból indulunk ki amikbe a korábbiakhoz nagyon hasonló $O = e^{tx}$ és $O = e^{tx}p$ operátorokat fogjuk helyettesíteni. Először:

$$\langle H e^{tx} \rangle = E \langle e^{tx} \rangle.$$

Innen:

$$\frac{1}{2M} \langle e^{tx} p^2 \rangle = E \langle e^{tx} \rangle - A \langle e^{(t-2)x} \rangle + 2A \langle e^{(t-1)x} \rangle. \quad (5.4)$$

Ezután:

$$\langle [H, e^{tx}] \rangle = 0.$$

Itt a potenciálfüggvény kommutál az e^{tx} operátorral, ami alapján:

$$\langle [H, e^{tx}] \rangle = \frac{1}{2M} \langle [p^2, e^{tx}] \rangle = 0.$$

A kommutátort kifejezve és az impulzus helyére $p = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ -t írva és a szorzatok deriválását elvégezve:

$$\langle [H, e^{tx}] \rangle = \frac{1}{2M} (-i)^2 \hbar^2 (t^2 \langle e^{tx} \rangle + 2t \langle e^{tx} \frac{\partial}{\partial x} \rangle),$$

ahonnan a deriváltakat visszaírva az impulzusoperátorra:

$$t\hbar \langle e^{tx} \rangle + 2i \langle e^{tx} p \rangle = 0.$$

Amiből kifejezhető:

$$i\langle e^{tx}p \rangle = -\frac{1}{2}t\hbar\langle e^{tx} \rangle. \quad (5.5)$$

Ugyanezen azonosság alapján másik O operátorra:

$$\langle [H, e^{tx}p] \rangle = \langle \frac{1}{2M}[p^2, e^{tx}p] \rangle + A\langle [e^{-2x}, e^{tx}p] \rangle - 2A\langle [e^{-x}, e^{tx}p] \rangle = 0.$$

A kommutátorokat itt ismét külön-külön számolom ki.

$$A[e^{-2x}, e^{tx}p] = Ae^{tx}(e^{-2x}p - pe^{-2x})$$

Itt megint beírhatjuk p helyére a derivált alakot, amiből a deriválás után ezt kapjuk:

$$A[e^{-2x}, e^{tx}p] = Ae^{tx}(e^{-2x}p - 2i\hbar e^{-2x} - e^{-2x}p),$$

tehát

$$A[e^{-2x}, e^{tx}p] = -2i\hbar Ae^{(t-2)x}.$$

Az utolsó tagra hasonló módon a következő adódik:

$$-2A[e^{-x}, e^{tx}p] = 2Ai\hbar e^{(t-1)x}.$$

Az impulzus-tag pedig a korábbiak ismeretében

$$[p^2, e^{tx}p] = [p^2, e^{tx}]p = -\hbar^2 t^2 e^{tx}p - 2i\hbar t e^{tx}p^2.$$

Ezekből:

$$\frac{1}{2M}\hbar^2 t^2 i\langle e^{tx}p \rangle - 2t\frac{1}{2M}\langle e^{tx}p^2 \rangle - 2A\langle e^{(t-2)x} \rangle + 2A\langle e^{(t-1)x} \rangle = 0.$$

Ebbe az egyenletbe behelyettesítve (5.4) és (5.5)-ben megkapott azonosságot, $\langle e^{(t-2)x} \rangle$ -re a következő rekurziót kapjuk:

$$\frac{(4tE + \frac{1}{2M}\hbar^2 t^3)\langle e^{tx} \rangle + (8t - 4)A\langle e^{(t-1)x} \rangle}{(4t - 4)A} = \langle e^{(t-2)x} \rangle. \quad (5.6)$$

Ennek a rekurzióknak a segítségével az $S = \{E, \langle e^{-x} \rangle\}$ kezdőértékekből az alábbi bootstrap mátrix írható fel:

$$\begin{pmatrix} 1 & \langle e^{-x} \rangle & \langle e^{-2x} \rangle & \dots & \langle e^{-Kx} \rangle \\ \langle e^{-x} \rangle & \langle e^{-2x} \rangle & \langle e^{-3x} \rangle & \dots & \langle e^{-(K+1)x} \rangle \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle e^{-Kx} \rangle & \langle e^{-(K+1)x} \rangle & \langle e^{-(K+2)x} \rangle & \dots & \langle e^{-2Kx} \rangle \end{pmatrix} \quad (5.7)$$

Belátható, hogy a hullámfüggvény a $x \rightarrow -\infty$ felé haladva $e^{-\sqrt{A}e^{-x}}$ alakú. Ez azt jelenti, hogy a $\langle e^{-nx} \rangle$ várható érték tetszőleges nagy n -re véges, hiába

divergál maga az e^{-nx} az $x \rightarrow -\infty$ limeszben, tehát a fenti bootstrap mátrix nyugodtan használható. Ennek belátásához először vezessünk be egy új

$$y = \sqrt{A}e^{-x}$$

változót, amire a potenciálfüggvény a következő:

$$V = y^2 - 2\sqrt{A}y.$$

Ekkor egy tetszőleges ψ hullámfüggvény deriváltját felírva ezzel a változóval:

$$\frac{d\psi}{dx} = \frac{dy}{dx} \frac{d\psi}{dy} = -y \frac{d\psi}{dy},$$

tehát a második derivált:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = y^2 \frac{d^2\psi}{dy^2} + y \frac{d\psi}{dy}.$$

Az időfüggetlen Schrödinger-egyenlet alapján, felhasználva ezt a második deriváltat:

$$-y^2\psi''(y) - y\psi'(y) + (y^2 - 2\sqrt{A}y)\psi = E\psi,$$

amit leosztva $-y^2$ -tel:

$$\psi''(y) + \frac{\psi'(y)}{y} + \left(\frac{2\sqrt{A}}{y} - 1 \right) \psi(y) = -\frac{E\psi(y)}{y^2}.$$

Ha $x \rightarrow -\infty$, akkor $y \rightarrow \infty$, vagyis az egyenlet törtjei, ahol a nevezőben y legalább első hatványon szerepel, a nullához tartanak. Innen látszik, hogy nagy y esetén $\psi''(y) \simeq \psi(y)$. Ennek a megoldása $\psi(y) \simeq De^{\pm y}$. A hullámfüggvénynek azonban normálhatónak kell lennie, tehát az egyetlen fizikailag értelmes megoldás a negatív előjelű, azaz:

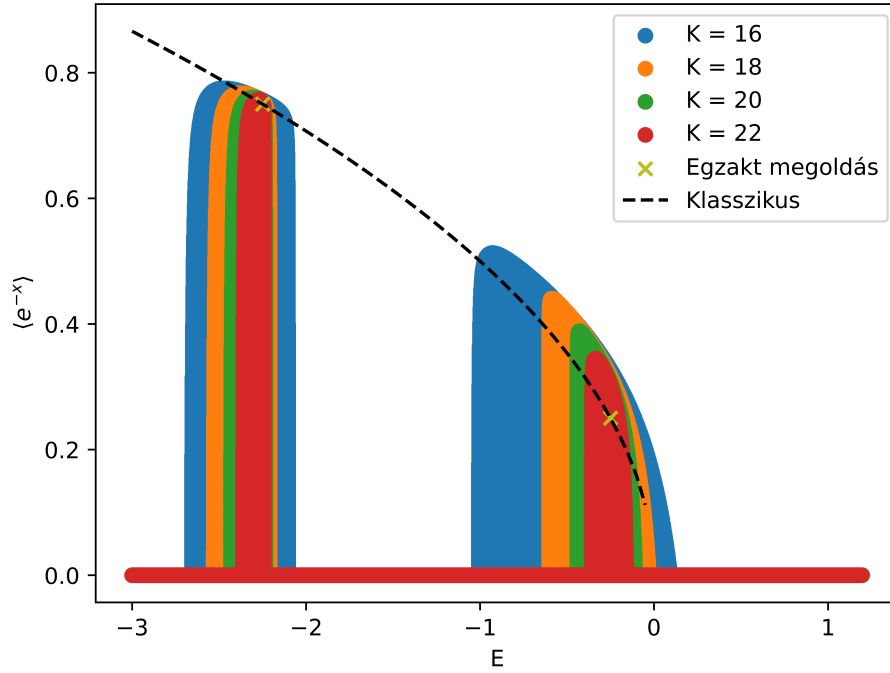
$$\psi(x) \simeq De^{-\sqrt{A}e^{-x}}.$$

Ezzel beláttuk, hogy $\langle e^{-nx} \rangle$ tetszőleges n -re véges, és a (5.7) bootstrap mátrix tényleg használható.

Ez az exponenciális függvény alakú bázis azért kézenfekvő, mert az általam használt (2.5) és a (2.6) kényszerekbe való behelyettesítésnél megjelenik az exponenciális alakú potenciálfüggvény, így a végső rekurzió szükségképpen tartalmazni fog valamilyen ilyen alakú tagot. Ezért volt célszerű a behelyettesítendő O operátorok esetében is hasonló alakokkal próbálkozni, mert így összevonhatók lettek a tagok. Ugyanez volt a gondolatmenet a polinom-potenciálok esetében is.

5.3. Eredmények

Az eddigiekhez hasonlóan a Morse-potenciál esetére is csinálhatunk egy pásztázást. Itt azonban az eddigiektől eltérő módon nem az $E - \langle x^2 \rangle$ síkon, hanem az $E - \langle e^{-x} \rangle$ síkon. Mivel csak véges számú kötött energia van, és ezek mindegyike negatív, minden esetben csak legfeljebb 0-ig kell pásztázni az energia tengelyen. Ahogy a többi potenciál esetén, itt is kezdhethetjük a pásztázást a klasszikus potenciál minimumértékétől, hiszen ez alatt az érték alatt nem lehet kötött állapot energiája. Az 10. ábrán ábrázoltam a megengedett pontokat, a Hamilton-operátor paramétereit $M = \frac{1}{2}$ -nek, $\hbar = 1$ -nek és $A = 4$ -nek választva. Az ábrán az egzakt alapállapot és első gerjesztett állapot energiáját és $\langle e^{-x} \rangle$ várható értéket is jelöltem.

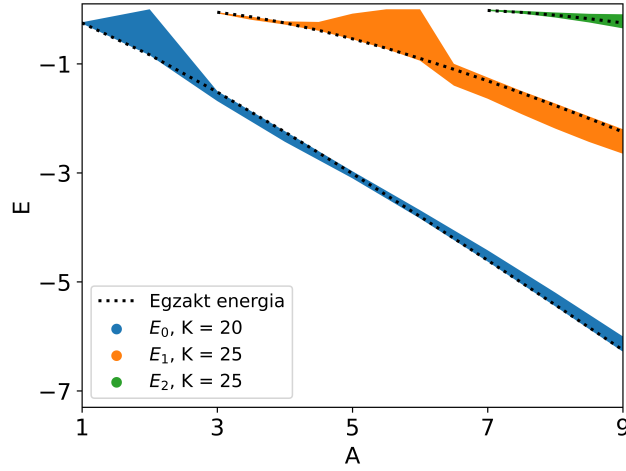


10. ábra. A bootstrap módszer által megengedett tartományok az $E - \langle e^{-x} \rangle$ síkon különböző K bázisméretekre. A paramétereket $\hbar = 1$, $M = \frac{1}{2}$ és $A = 4$ -nek választva. Az ikszek az egzakt megoldást ábrázolják.

A 10. ábrán látható, hogy míg a módszer az $O_k = e^{kx}$ bázissal tud felső becslést adni az $\langle e^{-x} \rangle$ várható értékre, és ez K növelésével jól közelíti az egzakt megoldást, addig szigorú alsó becslést nem tud adni rá. K növelésével azonban a becsült energiatartományok itt is csökkennek és tartalmazzák az egzakt megoldást. $\langle e^{-x} \rangle = 0$ -nál megjelenik egy folytonos egyenes, mivel ekkor az (5.7) mátrixban az első sor első eleme 1, ezen kívül pedig E -től függetlenül minden

más elem nulla, a mátrix így mindig kielégíti a pozitív szemidefinitási feltételt. Fizikai értelme azonban ennek az értéknek nincsen.

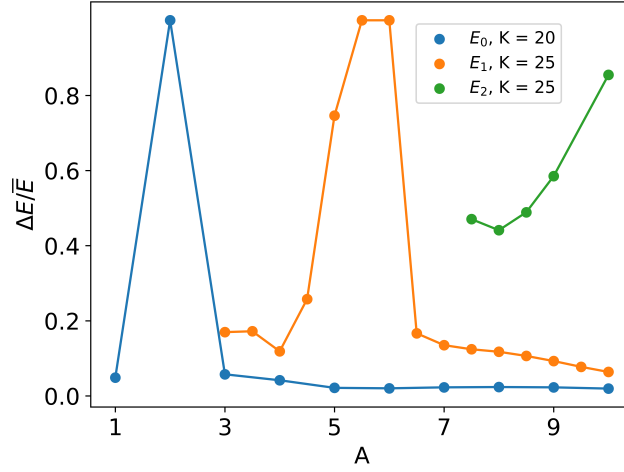
A 11. ábrán a bootstrap által megengedett energiatartományokat és az egzakt megoldás által adott energiákat ábrázoltam A függvényében.



11. ábra. A bootstrap által megengedett energiaértékek A függvényében. A kék, narancs és zöld színek rendre az alapállapot, az első és második gerjesztett állapot energiáját jelölik. A pontozott vonalak az egzakt energiákat jelölik A függvényében.

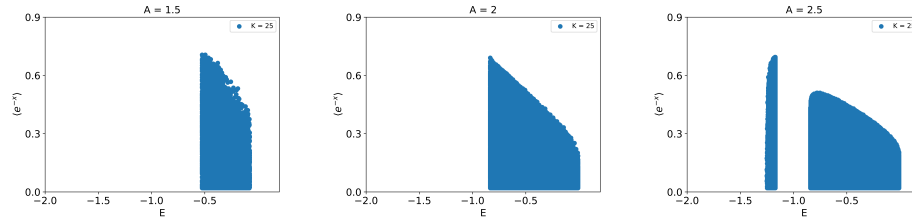
Látható, hogy A növelésével a bootstrap mindig megtalálja a magasabb energiájú kötött állapotokat. A nagyobb energiaszinteknél azonban nagyobb K bázisméretre van szükség, hogy látszódjon ezen energiák diszkrétisége. Ahogy közelítünk egy olyan A értékhez, ahol újabb kötött állapot jelenik meg (az ábrán $A = 2.5$, $A = 6.5$, valamint $A = 9$ körül) a legnagyobb energiára a bootstrap megengedett tartománya elkezd szélesedni, majd később, ahogy elérjük azt az A -t, ahol megjelenik az extra energiaszint, ez a szélesedő tartomány kettéválik és látható lesz a két diszkrét energiájú állapot.

A 12. ábrán a becsült energiatartomány relatív pontossága látható A függvényében. A relatív pontosságot a 3.4. fejezethez hasonlóan itt is az energiatartományok relatív szélességével, $\frac{\Delta E}{E} \equiv \frac{E_{max} - E_{min}}{E_{max} + E_{min}}$ -ként definiálom.



12. ábra. A bootstrap által megengedett energiatartományok relatív pontossága A függvényében. A kék, narancs és zöld színek rendre az alapállapot, az első és második gerjesztett állapot energiáját jelölik.

A 12. ábra jól mutatja, hogy A növelésével a bootstrap relatív pontossága nő (vagyis a "szigetek" relatív szélesség csökken) azon energiaszintek esetén, melyek nem a legnagyobbak az adott A értékek mellett. Ezenkívül jól leolvasható az imént is látott jelenség, miszerint a legnagyobb energiájú kötött állapotra az energiabecslés relatív pontosság csökken, ahogy A közelít egy olyan értékhez, aminél már új energia jelenik meg. Amikor az A elér egy olyan értéket, ahol megjelenik egy új kötött állapot, ez a szélesebb megengedett tartomány két tartománnyá esik szét, amiből az alsó tartomány ennél a nagyobb A értéknél már precízebb becslést mond a kötött állapot energiájára. Ez a jelenség látszik a 13. ábrán is, ahol a bootstrap által megengedett tartományokat különböző A értékekre ábrázoltam egy fix bázisméret esetén. Az A paraméter növelésével a megengedett energiasáv szélesedik, majd kettéválk és megjelenik egy új kötött állapot.



13. ábra. A bootstrap által megengedett tartományok különböző A -kra, $K = 25$ bázisméret esetén.

6. Összefoglalás és kitekintés

6.1. Összefoglalás

A dolgozatban vizsgált kvantummechanikai bootstrap módszer egy egzakt azonosságokon alapuló rekurzív formulával az alaphalmaz elemeinek várható értékeiből tetszőlegesen rendig egyértelműen megadja más mennyiségek várható értékeit, amikre szintén egzakt egyenlőtlenségeknek kell teljesülnie. Ennek köszönhetően egzakt alsó és felső korlátot ad az alaphalmazbeli mennyiségek várható értékeire, ami alapján a becslés pontossága kiszámolható. A módszer esetleges általánosításánál a különböző operátorok várható értékeire adott szigorú alsó és felső korlátok, és a becslés pontosságának ismerete jelentette előny megmaradna. Így a kvantummechanikai bootstrap egy hasznos eszköz lehet bonyolultabb rendszerek vizsgálatánál.

Ebben a dolgozatban három rendszer: az anharmonikus oszcillátor, a dupla gödör potenciál és a Morse-potenciál esetére vizsgáltam a módszer működését.

Az anharmonikus oszcillátor esetén a felhasznált irodalmon [3] felül magasabb energiákra is vizsgáltam a megengedett tartományokat. Itt azt tapasztaltam, hogy az energia növekedésével a kötött állapotok energiaszintjei közelítik a klasszikus esetet, ez a korrespondancia-elv egyik megnyilvánulása. Kiszámoltam a kommutátorokat $\hbar \neq 1$ egységekben is, aminek köszönhetően vizsgálni tudtam a $\hbar \rightarrow 0$ klasszikus limeszt.

Összehasonlítottam a bootstrap módszer pontosságát g csatolási állandó függvényében a jól ismert perturbációszámítással, és azt találtam, hogy nagy g -k esetén a bootstrap jóval pontosabb közelítést ad. Végül azt láttam, hogy a bootstrap nem a $g \rightarrow 0$ limeszben adja a legpontosabb közelítést, hanem g egy kis véges értékénél.

A **dupla gödör potenciált** szintén vizsgálták már a bootstrap módszerrel [3, 4]. A dolgozatban ezt a rendszert egy egyszerűbb, két Gauss-görbéből álló variációs ansatzcal [6] hasonlítottam össze különböző mélységű potenciálgördők esetén. Ennél a rendszernél mindkét csatolási állandó változására megvizsgáltam a bootstrap módszert. A variációs közelítés nagyobb szeparációkra bizonyult pontosabbnak, míg kevésbé mély gördők esetén a bootstrapból kapott egzakt intervallumoktól a variációs módszer becslése aránylag messze esett. Ebből a példából jól látszik, hogy a bootstrap módszer jól tudja kezelni a bizonyos közelítő módszerekkel nem, vagy csak nehezen kezelhető kvantummechanikai alagutazás jelenségét is.

A **Morse-potenciál** egy ezzel a módszerrel eddig nem vizsgált rendszer. Ezért teljesen új rekurziót kellett hozzá vezetnem, az általános polinomiális potenciálokra levezetett rekurzió nem alkalmas hozzá. A Morse-potenciálban mozgó részecske viselkedése kvalitatíven is eltér a korábban vizsgált esetektől, hiszen itt csak véges sok kötött állapot van.

A dolgozatban használt rekurziónál azt találtam, hogy a bootstrap az A csatolási állandó növelésével a kisebb energiákra pontosabb becslést ad. Emelett azonban $\langle e^{-x} \rangle$ várható értékére csak felső becslést kaptam az ebben a dolgozatban alkalmazott operátor bázissal. Végül érdekes jelenség, hogy A növelésekor

egy új kötött állapot megjelenése előtt a legnagyobb energiájú állapot energiabecslésének pontossága romlik, majd az új kötött állapot megjelenésekor a korábban legnagyobb, de immár második legnagyobb energiájú kötött állapot energiabecslése ismét precízebb lesz.

6.2. Kitekintés

A kvantummechanikai bootstrap vizsgálatát többféleképpen is lehetne folytatni. Nyilvánvalóan érdemes lehet megnézni további potenciálokban is a módszer működését.

Az utolsó fejezetben láttuk, hogy nem csak $O_k = x^k$ bázisra lehet értelmes a bootstrap mátrix, sőt bizonyos potenciáloknál ez nem is használható. Ugyanakkor a dolgozatban mutatott $O_k = e^{kx}$ bázissal sem tudtam alsó becslést adni a $\langle e^{-x} \rangle$ értékre a Morse-potenciál esetén. Ebben a dolgozatban csak a könnyen adódó, a potenciálfüggvényhez hasonló alakú operátor bázisokat vizsgáltam. Ez természetesen nem jelenti azt, hogy ezek adnák adott probléma esetén a legpontosabb becslést. Ez alapján egy-egy potenciálra érdemes lehet más bázisokat és rekurziókat kersni, majd ezekre összevetni a bootstrap közelítését. Illetve külön kérdés, hogy egyáltalán mely potenciálokra lehet megfelelő bázishoz olyan rekurziót felírni, amivel tényleg közelíteni tudjuk a várható értékeket.

A 5.2 fejezetben kitértem pár egyéb, a dolgozatban nem vizsgált polinomfüggvény esetében az alaphalmaz elemeire. Itt is látható, hogy vannak olyan potenciálok, ahol az alaphalmaz több, mint két elemű, így a pásztázást a megengedett energiaszintek megtalálásához egy többdimenziós térben kellene elvégezni. Ennek elvégzése értelemeszerűen jóval számításigényesebb lenne. Ez a probléma viszont orvosolható, ha a megengedett tartomány keresését pásztázás helyett optimalizációs problémaként fogalmazzuk meg, ha például az energia pásztázása helyett első körben megkeressük a legkisebb energiát, ami az összes szükséges feltételnek eleget tesz. Az ilyen, pozitív szemidefinitást tartalmazó optimalizációs problémákat **szemidefinit program**oknak hívják, és nagyon hatékony algoritmusok ismertek ezek megoldására. Ez különböző optimalizációs programcsomagokban elérhetők [8]. A pásztázás helyett erre a módszerre való átállás lehetővé tenné a módszer alkalmazását sokmindenziós alaphalmazok esetén is.

Emellett foglalkozni lehetne az energia-sajátállapotok hullámfüggvényének rekonstrukciójával az energia és a megfelelő bázisokban kiszámolt várható értékek ismeretében, hiszen a bootstrapnél például a variációs módszerrel ellentétben az energia-sajátértékek keresése közben nem adunk becslést a hullámfüggvényre. Ez azzal rokon probléma, hogy hogyan lehet rekonstruálni egy valószínűségi sűrűséget az eloszlás momentumaiból.

Érdekes lehet a bootstrap módszer vizsgálata **peremek** jelenlétében is. A jelen dolgozatban csak a teljes valós tengelyen értelmezett hullám függvényekkel dolgoztam. Ez megkönnyítette a számolásainkat, hiszen peremfeltételekkel nem kellett foglalkoznom. Megmutatható, hogy a peremfeltételek extra tagokat adnak a dolgozatban az $\langle [H, O] \rangle = 0$ feltételből levezethető rekurziókhoz [9, 10], de

a peremes kvantummechanikai bootstrapet csak nagyon kevés rendszerre vizsgálták eddig az irodalomban.

Végezetül pedig a legérdekesebb az lenne, ha néhány több szabadsági fokú rendszerre is kiterjesztenénk a kvantummechanikai bootstrap módszert. Érdekes lehet például **csatolt oszcillátorok** vagy más **egyszerű néhány-test rendszerek** vizsgálata. Több szabadsági fokú rendszerek esetén már nem lesz igaz, hogy tetszőleges bootstrap mátrix méretnél mindig ugyanakkor marad az alaphalmaz. Azaz a független változók száma nőni fog a bootstrap mátrix méretével. Ez azt jelenti, hogy a korábban említett algoritmikai fejlesztés (pásztázás helyett optimalizáció) fontos előfeltétele annak, hogy ebbe az irányba folytatni lehessen a kutatást. [11]

függelék A Saját munka

- Anharmonikus oszcillátor
 - magasabb energiaszintek és a korrespondancia elv vizsgálata
 - rekurzió $\hbar \neq 1$ -el és klasszikus limesz vizsgálata
 - a bootstrap módszer pontosságának vizsgálata a csatolás függvényében és összehasonlítás a perturbációszámítással
- Dupla gödör potenciál
 - a bootstrap által talált tartományok a kötött energiaszintekre különböző m paraméterek esetén
 - a bootstrap módszer pontosságának vizsgálata a csatolás függvényében és összevetés egy egyszerű variációs ansatz-cal
- Morse potenciál
 - rekurzió felírása exponenciális függvény alakú operátorbázis esetén
 - a bootstrap módszer pontosságának vizsgálata az A paraméter függvényében
 - a bootstrap módszer viselkedése új energiaszint megjelenésénél

Hivatkozások

- [1] Geszti Tamás: Kvantummechanika (Typotex kiadó) (2014. 04. 01.)
- [2] X. Han, S. A. Hartnoll and J. Kruthoff, „Bootstrapping Matrix Quantum Mechanics,” *Phys. Rev. Lett.* **125** (2020) no.4, 041601 doi:10.1103/PhysRevLett.125.041601 [arXiv:2004.10212 [hep-th]].
- [3] J. Bhattacharya, D. Das, S. K. Das, A. K. Jha and M. Kundu, „Numerical bootstrap in quantum mechanics,” *Phys. Lett. B* **823** (2021), 136785 doi:10.1016/j.physletb.2021.136785 [arXiv:2108.11416 [hep-th]].
- [4] D. Berenstein, G. Hulsey, „Bootstrapping Simple QM Systems,” [arXiv:2108.08757 [hep-th]].
- [5] B. Adali, F. Nutku, „Investigating a Single Quantum Anharmonic Oscillator with Perturbation Theory,” *PAR* 2023, 1 (2), 93–99 doi:10.26650/PAR.2023.0001.
- [6] <https://web.physics.ucsb.edu/~davidgrabovsky/files-teaching/Double%20Well%20Solutions.pdf>
- [7] J.P. Dahl; M. Springborg, „The Morse oscillator in position space, momentum space, and phase space,” *The Journal of Chemical Physics.* 88 (7): 4535 doi:10.1063/1.453761
- [8] <https://www.cvxpy.org/>
- [9] D. Berenstein and G. Hulsey, „Anomalous bootstrap on the half-line,” *Phys. Rev. D* **106** (2022) no.4, 045029 doi:10.1103/PhysRevD.106.045029 [arXiv:2206.01765 [hep-th]].
- [10] L. Sword and D. Vegh, „Quantum mechanical bootstrap on the interval: Obtaining the exact spectrum,” *Phys. Rev. D* **109** (2024) no.12, 126002 doi:10.1103/PhysRevD.109.126002 [arXiv:2402.03434 [hep-th]].
- [11] D. Berenstein, G. Hulsey and P. N. T. Lloyd, „Numerical exploration of the bootstrap in spin chain models,” [arXiv:2406.17844 [hep-th]].