

Egy egyszerű kölcsönható kvantummechanikai rendszer vizsgálata

TDK dolgozat

Nagyfalusi Balázs

Témavezető: Dr. Udvardi László
tudományos főmunkatárs
BME Fizika Intézet
Elmélet Fizika Tanszék

BME

2012

A dolgozat bemutatását a TÁMOP - 4.2.2.B-10/1–2010-0009 „Új
tehetséggondozó programok és kutatások a Műegyetem tudományos
műhelyeiben” című program támogatta.

Tartalomjegyzék

1. Bevezetés	2
2. Kölcsönhatás kezelése betöltésszám reprezentációban	5
2.1. Az izotróp három dimenziós harmonikus oszcillátor	6
2.2. A kölcsönhatás-operátor mátrixának meghatározása	7
2.3. A Lánczos-algoritmus	8
2.4. Az impulzusmomentum operátor	10
2.5. A sűrűségmátrix meghatározása	11
2.5.1. A sűrűségmátrix egy dimenzióban	13
2.5.2. Három dimenzióban	15
2.5.3. Betöltések	17
2.6. Entrópia	18
2.7. A vizsgált rendszerek	19
2.7.1. Hooke-atom	19
2.7.2. Az $1/r^2$ -es potenciál	19
2.7.3. Yukawa-potenciál	20
2.7.4. Gauss-Potenciál	20
2.8. Atomi egységek	20
3. Numerikus eredmények	22
3.1. A kölcsönható rendszerek energiái	22
3.2. Betöltések	25
3.3. Az entrópiák	27
4. Összefoglalás	29

1. fejezet

Bevezetés

A kölcsönható rendszerekben lejátszódó folyamatok vizsgálata a fizika egyik legizgalmasabb területe. Az egyes részecskék közötti kölcsönhatások jelentősége még hangsúlyosabb a kvantummechanikában. A kölcsönhatást is magában foglaló modelleknek általában csak közelítő megoldásait ismerjük, ezért van nagy jelentőségük az analitikusan is megoldható rendszereknek. Az egyik leggyakrabban vizsgált, analitikusan is megoldható modell, a Moshinsky-atom [2], amelyben két harmonikus potenciálban mozgó részecske egymással is harmonikus potenciállal hat kölcsön. Bár a probléma eredeti felvetése több mint negyven esztendő, még manapság is számos cikkben használják egyszerű modelként. Nagy és Pipek is ezen a modellen vizsgálja a másodrendű sűrűségmátrix Hartree–Fock jellegű partícionálásának [3] és az elektronok közötti kölcsönhatás-integrál magfüggvény segítségével történő leírásának érvényességét [4]. A Moshinsky-atom állapotainak az összefonódottságát az utóbbi években az információelmélet eszközeivel vizsgálták [5, 6, 7], kiegészítve a modellt külső mágneses térrel is [8].

Egy másik gyakran vizsgált, egyszerű kölcsönható modell a Hooke-atom, vagy harmonium, amelyben a külső harmonikus potenciálban mozgó elektronok Coulomb-kölcsönhatással hatnak kölcsön egymással. Ennek a modellnek is létezik bizonyos paraméter választás esetén analitikus megoldása [1, 9, 10, 11].

A szakdolgozatomban [14] a Hooke-atom sajátállapotainak meghatározására használt numerikus módszert dolgoztam ki, amely alkalmas a spektrum és a sajátfüggvények előállítására a modellben szereplő paraméterek tetszőleges választása esetén. A jelen dolgozatban a kölcsönhatások egy bővebb halmazát vizsgáljuk, amelyek általánosan az alábbi Hamilton-

operátorral írhatóak le:

$$\mathbf{H} = \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\mathbf{r}_1^2 + \frac{1}{2}m\omega^2\mathbf{r}_2^2 + f(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|), \quad (1.1)$$

ahol $f(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)$ a részecskék közötti kölcsönhatás. Az 1.1. számú Hamilton-operátorral leírható problémák szeparálhatóak, ha bevezetjük az összeg-, és különbségi koordinátákat:

$$\begin{aligned} \mathbf{R} &= \mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2 & \mathbf{r} &= \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, \\ \mathbf{P} &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}}, & \mathbf{p} &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}. \end{aligned} \quad (1.2)$$

Ezekben a változóknak kinetikus és potenciális tag:

$$\begin{aligned} \frac{\mathbf{P}_1^2}{2m} + \frac{\mathbf{P}_2^2}{2m} &= 2 \left(\frac{\mathbf{P}^2}{2m} + \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \right), \text{ illetve} \\ \frac{1}{2}m\omega^2\mathbf{r}_1^2 + \frac{1}{2}m\omega^2\mathbf{r}_2^2 &= \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2}m\omega^2\mathbf{R}^2 + \frac{1}{2}m\omega^2\mathbf{r}^2 \right). \end{aligned} \quad (1.3)$$

Így a Hamilton operátor az új változóknak:

$$\mathbf{H} = 2 \left[\frac{\mathbf{P}^2}{2m} + \frac{1}{2}m \left(\frac{\omega}{2} \right)^2 \mathbf{R}^2 \right] + 2 \left[\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m \left(\frac{\omega}{2} \right)^2 \mathbf{r}^2 + \frac{1}{2}f(\mathbf{r}) \right]. \quad (1.4)$$

Az első tag egy harmonikus oszcillátor, amelynek sajátállapotai ismertek. A részecskék közötti kölcsönhatást, amely számunkra kitüntetett jelentőségű, a második tag tartalmazza. A rendszer energiáját a következő alakban írhatjuk fel:

$$E = \frac{\omega}{2} \left(n + \frac{3}{2} \right) + E_r, \quad (1.5)$$

ahol E_r a kölcsönhatási tagot is tartalmazó második rész energiáját jelöli.

Ahogy már említettük, a számunkra érdekes tag a kölcsönhatást is tartalmazó második rész:

$$\mathbf{H}_i = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m \left(\frac{\omega}{2} \right)^2 \mathbf{r}^2 + \frac{1}{2}f(\mathbf{r}) \quad (1.6)$$

A fenti Hamilton-operátorral általában térbelileg lokalizált fizikai folyamatokat írunk le. A számos rendszer közül, amelyet a fenti operátor modellez megemlíthetjük a már hivatkozott harmoniumot, a pozitroniumot, amely csak a kölcsönhatás előjelében tér el tőle, a tér egy bizonyos tartományára lokalizált hidrogén atomot vagy két csapdázott atomot, amely valamilyen effektív potenciállal hat kölcsön. A numerikus munka során négyféle kölcsönható potenciált vizsgáltunk meg. Az első a Hooke-atom Coulomb-potenciálja ($f(\mathbf{r}) = \frac{1}{r}$), ennek

egy módosítottja ($f(\mathbf{r}) = \frac{1}{r^2}$), és Yukawa- ($f(\mathbf{r}) = \frac{e^{-kr}}{r}$), illetve Gauss-típusú potenciál ($f(\mathbf{r}) = e^{-\frac{r^2}{r_0^2}}$). A kölcsönható rendszer hullámfüggvényeinek korreláltságát a Neumann- és a Tsallis-entrópia [13] segítségével jellemezzük. Az entrópiák kiszámításához meghatározzuk az egyes kétrészecskés állapotok redukált sűrűségmátrixát és a betöltésszámokhoz tartozó természetes pályákat.

2. fejezet

Kölcsönhatás kezelése betöltésszám reprezentációban

A bevezetés az 1.4. egyenletében szereplő Hamilton-operátor szeparálható. Ha a harmonikus oszcillátor n -edik sajátállapotát $\Psi_n(\mathbf{R})$ -rel, és az általunk érdekesnek ítélt a kölcsönhatást is tartalmazó második rész (1.6) egy sajátállapotát $\Phi_m(\mathbf{r})$ -rel jelöljük, akkor a teljes állapot $\Psi_n(\mathbf{R})\Phi_m(\mathbf{r})$ szorzat alakban áll elő. A szorzat két tagja közül az első a részecskék felcserélésére nézve mindig szimmetrikus, a második tag szimmetriáját pedig a $\Phi_n(\mathbf{r})$ hullámfüggvény inverzióval szembeni viselkedése határozza meg. Ha a térbeli inverzió hatására $\Phi_n(\mathbf{r})$ nem vált előjelet, akkor a teljes hullámfüggvény térbeli része szimmetrikus lesz, ezért az antiszimmetrikus $S = 0$ spin szingulett állapottal szorzódik, míg ellenkező esetben a térbeli rész antiszimmetrikus lesz és a szimmetrikus $S = 1$ triplett spin hullámfüggvényhez kapcsolódik. A teljes hullámfüggvényt tehát a $\Psi_n(\mathbf{R})\Phi_m(\mathbf{r})\chi(s_1, s_2)$ alakban írhatjuk fel, ahol $\chi(s_1, s_2)$ a spinállapotfüggvény.

Ebben a fejezetben összefoglaljuk az 1.4 operátor sajátérték problémájára kidolgozott módszerünket. Ennek lényege, hogy az operátort az izotróp három dimenziós harmonikus oszcillátor sajátállapotain fejtjük ki, majd a kapott mátrixot diagonalizáljuk. A kifejtéshez szükség van az $f(\mathbf{r})$ kölcsönhatás mátrixelemeire is, amelyeket az $\mathbf{r}^2$ operátor spektrális felbontása segítségével határozzunk meg. Első lépésként foglaljuk össze a legfontosabb információkat a bázisként használt a harmonikus oszcillátorról.

2.1. Az izotróp három dimenziós harmonikus oszcillátor

A módszer alapja az izotróp három dimenziós harmonikus oszcillátor, amelyről a következő alapvető információkat tudjuk. A rendszert leíró Hamilton-operátor a következő:

$$\mathbf{H} = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\mathbf{R}^2, \quad (2.1)$$

amely szétbontható három darab független egydimenziós harmonikus oszcillátor összegére:

$$\mathbf{H} = \sum_{i=1}^3 \left(\frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 r_i^2 \right). \quad (2.2)$$

A Hamilton-operátor sajátállapotait $|n_x\rangle |n_y\rangle |n_z\rangle$ szorzat alakban adhatjuk meg, ahol $|n_i\rangle$ az i irányú lineáris harmonikus oszcillátor n_i -edik sajátállapota, amely koordináta reprezentációban:

$$\psi_n(r_i) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi} x_0}} H_n \left(\frac{r_i}{x_0} \right) e^{-\frac{r_i^2}{2x_0^2}}, \quad (2.3)$$

ahol $H_n(x)$ az n -edik Hermite-polinom. A továbbiakban a szorzat hullámfüggvényt az $|n_x, n_y, n_z\rangle$ számhármassal fogjuk jelölni. A rendszer energiáját a három független harmonikus oszcillátor energiájának az összegeként kaphatjuk meg:

$$\mathbf{H} |n_x, n_y, n_z\rangle = E_n |n_x, n_y, n_z\rangle, \quad (2.4)$$

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{3}{2} \right), \text{ ahol } n = n_x + n_y + n_z. \quad (2.5)$$

A sajátállapotok az alapállapottól eltekintve elfajultak lesznek. Az elfajulás mértéke megegyezik azzal a számmal, amely megmutatja, hogy n hányféleképpen állítható elő n_i természetes számok összegeként. A degeneráció mértéke harmonikus oszcillátor esetén $\frac{(n+1)(n+2)}{2}$ lesz. A három dimenziós harmonikus oszcillátor invariáns az $O(3)$ három dimenziós forgáscsoporttal szemben, ezért sajátállapotait jellemezhetjük az $\mathbf{L}^2$ és $\mathbf{L}_z$ operátorokhoz tartozó l, m kvantumszámokkal. A degeneráltság mértéke azonban nem kompatibilis az $O(3)$ irreducibilis ábrázolásainak dimenzióival. Ez az inkompatibilitás annak a jele, hogy a rendszernek létezik egy a három dimenziós forgáscsoportnál bővebb, ún. dinamikus szimmetriacsoportja. [12].

Harmonikus oszcillátorra bevezethetők a jól ismert léptető operátorok:

$$a_j = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{r_j}{x_0} + i \frac{p_j}{p_0} \right), \quad a_j^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{r_j}{x_0} - i \frac{p_j}{p_0} \right), \quad j = x, y, z, \quad (2.6)$$

$$\text{ahol } x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}, \text{ és } p_0 = \sqrt{\hbar m\omega}. \quad (2.7)$$

A kommutációs relációjuk:

$$[a_j, a_j^+] = \delta_{i,j}, \quad j = x, y, z, \quad (2.8)$$

hatásuk egy $|n_x, n_y, n_z\rangle$ betöltésű állapotra :

$$a_x |n_x, n_y, n_z\rangle = \sqrt{n_x} |n_x - 1, n_y, n_z\rangle, \quad (2.9)$$

$$a_x^+ |n_x, n_y, n_z\rangle = \sqrt{n_x + 1} |n_x + 1, n_y, n_z\rangle. \quad (2.10)$$

Mindezek kihasználásával felírható a Hamilton-operátor a léptető operátorok segítségével:

$$\mathbf{H} = \sum_{i=1}^3 \left[\hbar\omega \left(a_i^+ a_i + \frac{1}{2} \right) \right] = \hbar\omega \left(\mathbf{a}^+ \mathbf{a} + \frac{3}{2} \right), \quad (2.11)$$

ahol $\mathbf{a}$ egy a három léptető operátor alkotta vektoroperátor. A léptető operátorok felhasználásával a megfelelő mátrixelemek algebrai úton könnyedén megkaphatóak, és nincsen szükség az integrálok direkt kiszámítására.

2.2. A kölcsönhatás-operátor mátrixának meghatározása

Az $f(\mathbf{r})$ kölcsönhatást tartalmazó rendszer energiaszintjeinek, és sajátállapotainak meghatározásához szükséges, hogy a kölcsönhatást is felírjuk a harmonikus oszcillátor sajátállapotainak bázisán. Ez azt jelenti, hogy szükségünk van az $\mathbf{r}$ operátorra a betöltésszám reprezentációban. Sajnálatos módon ezt közvetlenül nem megoldható, de az $\mathbf{r}^2$ operátor már előáll a keltő és eltüntető operátorokból:

$$\mathbf{r}^2 = \frac{x_0^2}{2} (\mathbf{a}^+ + \mathbf{a})^2 \quad (2.12)$$

Ezen összefüggés segítségével előállítható az $\mathbf{r}^2$ operátor mátrixreprezentánsa. Ennek spektrális felbontása segítségével előállítható az $\underline{\mathbf{r}}$ mátrix. Mivel a bázisunk teljes függvényrendszert alkot, az eredeti $\mathbf{r}^2$ operátor függvényeire, és így a kapott $\underline{\mathbf{r}}$ mátrixra is igaz, hogy az $\mathbf{r}$ operátorhoz tartozik. A numerikus munka során csak véges számú bázisfüggvényünk lehet, és ezért ez az összefüggés csak közelítőleg igaz.

Az előző részben ismerttetett tulajdonságok alapján a mátrixelemek a következők lesznek:

$$\begin{aligned}
\underline{\mathbf{r}}^2_{x_1, x_2, y_1, y_2, z_1, z_2} &= \langle n_{x_1}, n_{y_1}, n_{z_1} | -\frac{x_0^2}{2} (\mathbf{a}^+ + \mathbf{a})^2 | n_{x_2}, n_{y_2}, n_{z_2} \rangle = \\
&= -\frac{x_0^2}{2} \langle n_{x_1}, n_{y_1}, n_{z_1} | \mathbf{a}^+ \mathbf{a}^+ + 2\mathbf{a}^+ \mathbf{a} + 1 + \mathbf{a} \mathbf{a} | n_{x_2}, n_{y_2}, n_{z_2} \rangle = \\
&= \frac{x_0^2}{2} \sqrt{(n_{x_2} + 1)(n_{x_2} + 2)} \delta_{n_{x_1}, n_{x_2} + 2} \delta_{n_{y_1}, n_{y_2}} \delta_{n_{z_1}, n_{z_2}} + \\
&+ \frac{x_0^2}{2} (2n_{x_2} + 1) \delta_{n_{x_1}, n_{x_2}} \delta_{n_{y_1}, n_{y_2}} \delta_{n_{z_1}, n_{z_2}} + \\
&+ \frac{x_0^2}{2} \sqrt{(n_{x_2})(n_{x_2} - 1)} \delta_{n_{x_1}, n_{x_2} - 2} \delta_{n_{y_1}, n_{y_2}} \delta_{n_{z_1}, n_{z_2}} + \dots, \quad (2.13)
\end{aligned}$$

ahol csak az egyik komponenst részleteztük, de a másik kettő hasonlóan számolandó.

Mielőtt továbblépnénk a spektrális felbontásra megjegyezhetjük, hogy a teljes Hamilton-operátorban nemcsak $\mathbf{r}$ hanem $\mathbf{p}$ függő tag is szerepel. Az impulzusoperátor spektrális felbontására azonban nincsen szükség, mert az kvadratikusan szerepel. A $\mathbf{p}^2$ operátort pedig $\mathbf{r}^2$ -hez hasonlóan fel tudjuk írni:

$$\mathbf{p}^2 = -\frac{p_0^2}{2} (\mathbf{a}^+ - \mathbf{a})^2 \quad (2.14)$$

A $\mathbf{p}^2$ operátor mátrixelemei ezután hasonlóan kiszámolhatóak.

Az $\mathbf{r}^2$ és a $\mathbf{p}^2$ operátor kapott alakján jól látszik, hogy egy adott n_j kvantumszámhoz tartozó állapot csak az $n_j - 2$, n_j , $n_j + 2$ kvantumszámokkal jellemzett állapotokkal ad zérustól különböző mátrixelemet, amely összesen 7 mátrixelemet jelent egy sorban. Ugyancsak ebből következik, hogy ha egy páros állapotot nézünk az csak párossal hat kölcsön, míg egy páratlan csak páratlannal, vagyis a különböző paritású alterek nem keverednek. Ez kisebb mátrixokat jelent, amely jócskán megkönnyíti a későbbi számolást.

2.3. A Lánczos-algoritmus

A kölcsönhatás mátrixelemeit az $\mathbf{r}^2$ operátor spektrális felbontásának segítségével határozhatjuk meg, amelyhez szükségünk van az operátor sajátértékeire, és sajátvektoraira. Az előző részben kapott $\underline{\mathbf{r}}^2$ mátrix diagonalizálása a nagy méret miatt közvetlenül nehéz, ezért érdemes kihasználni a rendszer szimmetriatulajdonságait. A kifejtés méretének az illusztrálására tegyük fel, hogy az $n = 100$ -as betöltött héjig akarjuk a számolást végezni. Ekkor

a diagonalizálható mátrix sorainak a száma $\sum_{n=1}^{100} \frac{(n+1)(n+2)}{2} = 176850$ lesz. Ha figyelembe vesszük a rendszer paritását, akkor is 89725-ös lesz a mátrixunk dimenziója. Akármilyen kevés nullától különböző elemünk is van, egy ilyen mátrix diagonalizálása közvetlenül nagy numerikus nehézségekkel jár. Erre a feladatra a Lánczos-algoritmus választottuk.

A Lánczos-transzformáció eredménye egy olyan bázis, amelyen egy $\mathbf{A}$ operátor szimmetrikus tridiagonális alakú lesz:

$$\underline{\underline{\tilde{\mathbf{A}}}} = \begin{pmatrix} a_0 & b_1 & 0 & \cdots & 0 \\ b_1 & a_1 & b_2 & & 0 \\ 0 & b_2 & a_2 & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & b_n \\ 0 & 0 & \cdots & b_n & a_n \end{pmatrix}. \quad (2.15)$$

Az együtthatókat a következőképpen számolhatjuk ki. Ha veszünk egy ortonormált rendszert ($\sum_i |\mathbf{u}_i\rangle \langle \mathbf{u}_i| = 1$), és ezzel kiszámoljuk az $\underline{\underline{\mathbf{A}}}$ operátor mátrixelemeit, akkor a következőket kaphatjuk:

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_i^T \underline{\underline{\mathbf{A}}} \mathbf{u}_i &= a_i, \\ \mathbf{u}_i^T \underline{\underline{\mathbf{A}}} \mathbf{u}_{i+1} &= b_{i+1}, \\ \mathbf{u}_{i-1}^T \underline{\underline{\mathbf{A}}} \mathbf{u}_i &= b_i, \\ \mathbf{u}_i^T \underline{\underline{\mathbf{A}}} \mathbf{u}_j &= 0 \text{ egyébként.} \end{aligned} \quad (2.16)$$

A mátrixot pedig kifejtethetjük a következőképpen:

$$\begin{aligned} \underline{\underline{\mathbf{A}}} &= \sum_{i,j} |\mathbf{u}_j\rangle \langle \mathbf{u}_j| \underline{\underline{\mathbf{A}}} |\mathbf{u}_i\rangle \langle \mathbf{u}_i| = |\mathbf{u}_0\rangle a_0 \langle \mathbf{u}_0| + |\mathbf{u}_0\rangle b_1 \langle \mathbf{u}_1| + \\ &+ |\mathbf{u}_1\rangle b_1 \langle \mathbf{u}_0| + |\mathbf{u}_1\rangle a_1 \langle \mathbf{u}_1| + |\mathbf{u}_1\rangle b_2 \langle \mathbf{u}_2| + \dots, \end{aligned} \quad (2.17)$$

vagyis:

$$\begin{aligned} \underline{\underline{\mathbf{A}}} |\mathbf{u}_0\rangle &= |\mathbf{u}_0\rangle a_0 + |\mathbf{u}_1\rangle b_1 \\ \underline{\underline{\mathbf{A}}} |\mathbf{u}_1\rangle &= |\mathbf{u}_0\rangle b_1 + |\mathbf{u}_1\rangle a_1 + |\mathbf{u}_2\rangle b_2 \\ &\vdots \\ \underline{\underline{\mathbf{A}}} |\mathbf{u}_n\rangle &= |\mathbf{u}_{n-1}\rangle b_n + |\mathbf{u}_n\rangle a_n + |\mathbf{u}_{n+1}\rangle b_{n+1}, \end{aligned} \quad (2.18)$$

amelyből:

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{u}_0 | \underline{\underline{\mathbf{A}}} | \mathbf{u}_0 \rangle &= a_0 \\
(\underline{\underline{\mathbf{A}}} - a_0 \underline{\underline{\mathbf{E}}}) | \mathbf{u}_0 \rangle &= | \mathbf{u}_1 \rangle b_1 \\
|(\underline{\underline{\mathbf{A}}} - a_0 \underline{\underline{\mathbf{E}}}) | \mathbf{u}_0 \rangle|^2 &= b_1^2 \\
\frac{1}{b_1} (\underline{\underline{\mathbf{A}}} - a_0 \underline{\underline{\mathbf{E}}}) | \mathbf{u}_0 \rangle &= | \mathbf{u}_1 \rangle.
\end{aligned} \tag{2.19}$$

Így megkaptuk az első sor együtthatóit, amelyekkel már tovább számolhatunk. Így az n . lépésben a következőt kell végrehajtanunk:

$$\begin{aligned}
a_n &= \langle \mathbf{u}_n | \underline{\underline{\mathbf{A}}} | \mathbf{u}_n \rangle \\
b_{n+1}^2 &= |(\underline{\underline{\mathbf{A}}} - a_n \underline{\underline{\mathbf{E}}}) | \mathbf{u}_n \rangle - b_n | \mathbf{u}_{n-1} \rangle|^2 \\
| \mathbf{u}_{n+1} \rangle &= \frac{1}{b_{n+1}} [(\underline{\underline{\mathbf{A}}} - a_n \underline{\underline{\mathbf{E}}}) | \mathbf{u}_n \rangle - b_n | \mathbf{u}_{n-1} \rangle].
\end{aligned} \tag{2.20}$$

A fenti algoritmus végrehajtható az $\mathbf{r}^2$ operátor mátrixreprezentánsán. Ebben az esetben lényeges könnyítést jelent a végrehajtáskor, hogy a mátrix egy sorában legfeljebb csak 7 nullától különböző elem van. Így a (2.20)-ban szereplő egyenletek segítségével már aránylag gyorsan legenerálhatjuk az $\underline{\underline{\mathbf{r}^2}}$ mátrix tridiagonális alakját. Tehát egy szabadon választott $\mathbf{u}_0$ kezdővektorból indulva a fent ismertetett rekurziós lépéseken keresztül előállíthatjuk az $\{\mathbf{u}_i\}$ ortonormált vektorrendszert, amelyen az $\mathbf{A}$ operátor tridiagonális alakú lesz az a_i , b_i diagonális és offdiagonális mátrixelemekkel.

A transzformáció kulcsfontosságú része az $\mathbf{u}_0$ kezdővektor megválasztása. Az 1.6. Hamilton-operátor invariáns a három dimenziós forgáscsoporttal szemben, ezért sajátfüggvényei csoportosíthatóak az $\mathbf{L}^2$, és $\mathbf{L}_z$ operátorok sajátállapotai szerint. Ha az $\mathbf{u}_0$ kezdővektort az $\mathbf{L}^2$ és $\mathbf{L}_z$ operátorok sajátvektorának választjuk, akkor az algoritmus tulajdonságainak köszönhetően a generálódó $\{\mathbf{u}_i\}$, ortonormált vektorrendszer többi tagja is az l irreducibilis reprezentáció m -edik sora is szerint transzformálódik, amelynek következtében a transzformáció után az 1.6. operátornak csak az (l, m) szektorát kapjuk, lényegesen csökkentve a diagonalizálandó mátrix méretét.

2.4. Az impulzusmomentum operátor

Ahhoz, hogy a Lánczos-algoritmust alkalmazhassuk, szükség van az impulzusmomentum operátor egy reprezentánsára a három dimenziós harmonikus oszcillátor bázisán. Belátható,

hogy a jól ismert harmonikus oszcillátor léptető operátorokkal a következőképpen írható fel az impulzusmomentum operátora:

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} = i\hbar(\mathbf{a}^+ \times \mathbf{a}), \quad (2.21)$$

A harmonikus oszcillátor bázison felírva az $\mathbf{L}_z$ operátor megfelelő mátrixelemei a következőképpen néznek ki:

$$\begin{aligned} \langle l_{x_1}, l_{y_1}, l_{z_1} | \mathbf{L}_z | l_{x_2}, l_{y_2}, l_{z_2} \rangle &= i\hbar \langle l_{x_1}, l_{y_1}, l_{z_1} | a_x^+ a_y - a_y^+ a_x | l_{x_2}, l_{y_2}, l_{z_2} \rangle = \\ &= i\hbar \delta_{l_{z_1}, l_{z_2}} \sqrt{(l_{x_2} + 1)l_{y_2}} \delta_{l_{x_1}, l_{x_2}+1} \delta_{l_{y_1}, l_{y_2}-1} - \\ &- i\hbar \delta_{l_{z_1}, l_{z_2}} \sqrt{l_{x_2}(l_{y_2} + 1)} \delta_{l_{x_1}, l_{x_2}-1} \delta_{l_{y_1}, l_{y_2}+1}. \end{aligned} \quad (2.22)$$

Az izotróp három dimenziós harmonikus oszcillátor sajátállapotait három kvantumszámmal jellemezhetjük: $|n, l, m\rangle$, ahol n a főkvantumszám, amely meghatározza az állapot energiáját, l és m pedig az $\mathbf{L}^2$, és $\mathbf{L}_z$ operátorok sajátállapotait jelölik.

$$\begin{aligned} l &= 0, 2, \dots, n & \text{ha } n \text{ páros} \\ l &= 1, 3, \dots, n & \text{ha } n \text{ páratlan.} \end{aligned} \quad (2.23)$$

Ha az $\mathbf{L}_z$ operátort az n főkvantumszámmal jellemezhető altéren fejtjük ki, akkor az $m = n$, és $m = -n$ sajátértékhez tartozó sajátállapot egyértelmű lesz. Az utóbbi sajátállapot vektorrepresentációját a Lánczos-algoritmus kezdővektoraként választva az algoritmus a kívánt módon lefuttatható.

A Lánczos-algoritmus végrehajtása után már egy szimmetrikus, tridiagonális $\underline{\underline{\mathbf{r}}}^2$ mátrixszal állunk szemben, amelynek a spektruma és sajátvektorai, és így tetszőleges $f(\underline{\underline{\mathbf{r}}})$ függvény már könnyen kiszámolhatóak. A transzformáció során megkapott $\{\mathbf{u}_i\}$ vektorrendszerrel pedig a $\underline{\underline{\mathbf{p}}}^2$ mátrix is a Lánczos-vektorok definálta bázisba transzformálhatóak. A külön kiszámolt kinetikus, és kölcsönhatási tag egyesítése után a sajátértékegyenlet megoldható, és megkapjuk a keresett sajátállapotokat.

2.5. A sűrűségmátrix meghatározása

Az előző részben megmutattuk, hogy miként tudjuk az 1.6. Hamilton-operátor sajátállapotait előállítani az izotróp három dimenziós harmonikus oszcillátor sajátfüggvényeinek

lineáris kombinációjaként:

$$\Phi_i = \sum_{\mathbf{n}} c_{i\mathbf{n}} |\mathbf{n}\rangle, \quad (2.24)$$

ahol $|\mathbf{n}\rangle$ az $|n_x, n_y, n_z\rangle$ állapotot jelöli. Annak érdekében, hogy megvizsgáljuk az egyrészecskés állapotok összefonódottságát a teljes, kétrészecskés hullámfüggvényben, meghatározzuk az egyes sajátállapotok egyrészecskés redukált sűrűségmátrixát:

$$\rho_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \int \Psi_0^*(\mathbf{r} + \mathbf{r}'') \Psi_0(\mathbf{r}' + \mathbf{r}'') \Phi_i^*(\mathbf{r} - \mathbf{r}'') \Phi_i(\mathbf{r}' - \mathbf{r}'') d\mathbf{r}'' \quad (2.25)$$

A dolgozatban azokat az állapotokat vizsgáljuk, amelyekben az 1.4. operátor első tagjának Ψ_0 hullámfüggvénye alapállapotban van. A gerjesztések csak a kétrészecskés hullámfüggvény a kölcsönhatást tartalmazó második tagjára korlátozódnak. Úgy gondoljuk, hogy ez a megszorítás lényegesen nem befolyásolja az eredményeket.

A 2.25. sűrűségmátrix nyoma egységnyi ($Tr\rho = 1$), diagonális része, $\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r})$ az adott állapot megtalálási valószínűség-sűrűségét adja. A sűrűségmátrix sajátállapotait természetes pályáknak, a hozzájuk tartozó sajátértékeket betöltésszámoknak hívjuk. A természetes pályák segítségével a redukált sűrűségmátrixot felírhatjuk független sűrűségmátrixok összegeként:

$$\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_i n_i |i\rangle \langle i|, \quad (2.26)$$

ahol $|i\rangle$ a természetes pályákat, n_i pedig a betöltéseket jelöli. Tiszta állapotban egyetlen természetes pálya segítségével előállíthatjuk a sűrűségmátrixot, minden más pályához tartozó betöltés eltűnik. A kölcsönhatásmentes alapállapot ilyen tulajdonsággal bír.

A redukált sűrűségmátrixot is kifejtethetjük a három dimenziós harmonikus oszcillátor sajátfüggvényein. Ezt a mátrixot diagonalizálva megkaphatjuk a betöltéseket és a természetes pályákat.

A 2.25. sűrűségmátrixban szereplő hullámfüggvényeket összeg-, és különbségi koordinátákban határoztuk meg. A mátrixelemeinek meghatározásához vissza kell térnünk az eredeti $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ részecske koordinátákhoz. Az áttérés nem egyszerű ezért először egy dimenzióban ismertetjük az egyes lépéseket, majd általánosítunk három dimenzióra.

2.5.1. A sűrűségmátrix egy dimenzióban

Hullámfüggvény

A sűrűségmátrix elemeinek meghatározásához az $\mathbf{R} = \mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2$ összeg-, és $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ különbségi koordinátákról át kell térni az eredeti $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ koordinátákra. Vegyük figyelembe, hogy az $\mathbf{R}, \mathbf{r}$ koordinátákban kapott kvázioszcillátorok frekvenciája az eredeti fele, és így a fellépő konstansokat is transzformálnunk kell. Az új x_0 , és p_0 az eredeti egységekben:

$$x_0 = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} = \sqrt{2}x_0^{\text{ered}}, \quad p_0 = \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} = \frac{p_0^{\text{ered}}}{\sqrt{2}} \quad (2.27)$$

Első lépésként megmutatjuk, hogy az összeg és különbségi koordinátákban felírt alapállapotok szorzata egy konstans erejéig megegyezik az eredeti koordinátákban vett alapállapotok szorzatával:

$$\begin{aligned} \Psi_0(x_1 - x_2)\Psi_0(x_1 + x_2) &= \left(\frac{m\omega}{2\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega(x_1-x_2)^2}{4\hbar}} \left(\frac{m\omega}{2\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega(x_1+x_2)^2}{4\hbar}} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega x_1^2}{2\hbar}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega x_2^2}{2\hbar}} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \Psi_0(x_1)\Psi_0(x_2). \end{aligned} \quad (2.28)$$

A sűrűségmátrix kifejtéséhez felhasznált állapotokat az a_r^+ operátor felhasználásával állíthatjuk elő az alapállapotok szorzatára hattanva:

$$\Psi_n(x_1 - x_2)\Psi_0(x_1 + x_2) = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a_{x_1-x_2}^+)^n \Psi_0(x_1 - x_2)\Psi_0(x_1 + x_2)$$

A számításokban a gerjesztést mindig a különbségi tagban végeztük, ezért itt is azt kell felírunk, hogy a gerjesztést kifejező $a_{x_1-x_2}^+$ operátor hogyan írható fel az egyrészcskés operátorokkal.

$$\begin{aligned} a_r^+ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{r}{x_0} - i \frac{p}{p_0} \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{x_1 - x_2}{x_0^{\text{ered}} \sqrt{2}} - i \frac{(p_1 - p_2)\sqrt{2}}{2p_0^{\text{ered}}} \right) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{x_1}{x_0^{\text{ered}}} - i \frac{p_1}{p_0^{\text{ered}}} \right) - \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{x_2}{x_0^{\text{ered}}} - i \frac{p_2}{p_0^{\text{ered}}} \right) \right] = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (a_{x_1}^+ - a_{x_2}^+) \end{aligned} \quad (2.29)$$

A kétrészecskés lineáris harmonikus oszcillátor n -edik sajátállapota felírható az eredeti x_1, x_2 koordinátákban:

$$\begin{aligned}
\Psi_n(x_1 - x_2)\Psi_0(x_1 + x_2) &= \frac{1}{\sqrt{n!}} (a_{x_1-x_2}^+)^n \Psi_0(x_1 - x_2)\Psi_0(x_1 + x_2) = \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^n (a_{x_1}^+ - a_{x_2}^+)^n \Psi_0(x_1)\Psi_0(x_2) = \\
&= \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^{n+1} \sum_{j=0}^n (-1)^j \binom{n}{j} (a_{x_1}^+)^j (a_{x_2}^+)^{n-j} \Psi_0(x_1)\Psi_0(x_2) = \\
&= \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^{n+1} \sum_{j=0}^n (-1)^j \binom{n}{j} \sqrt{j!(n-j)!} \Psi_j(x_1)\Psi_{n-j}(x_2) = \\
&= \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^{n+1} \sum_{j=0}^n (-1)^j \sqrt{\binom{n}{j}} \Psi_j(x_1)\Psi_{n-j}(x_2). \tag{2.30}
\end{aligned}$$

A megkapott állapotokból a korábban kiszámolt lineárkombinációs együtthatókkal már előállíthatjuk a vizsgált rendszer állapotfüggvényeit.

$$\begin{aligned}
\Omega(x_1, x_2) &= \sum_{n=0}^N c_n \Psi_n(x_1 - x_2)\Psi_0(x_1 + x_2) = \\
&= \sum_{n=0}^N c_n \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^{n+1} \sum_{j=0}^n (-1)^j \sqrt{\binom{n}{j}} \Psi_j(x_1)\Psi_{n-j}(x_2). \tag{2.31}
\end{aligned}$$

A sűrűség

A redukált sűrűségmátrix kiszámolásához alkossuk meg a kétrészecskés sűrűségmátrixot definíció szerint az alábbi módon:

$$\begin{aligned}
\Omega^*(x_1, x_2)\Omega(x'_1, x'_2) &= \frac{1}{2} \sum_{m=0, n=0}^N c_m^* c_n \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^{n+m} \sum_{j=0}^n \sum_{k=0}^m (-1)^{j-k} \sqrt{\binom{n}{j} \binom{m}{k}} \cdot \\
&\cdot \Psi_k^*(x_1)\Psi_{m-k}^*(x_2)\Psi_j(x'_1)\Psi_{n-j}(x'_2), \tag{2.32}
\end{aligned}$$

Ezután integráljuk ki a második változóra:

$$\begin{aligned}
\int \Omega^*(x_1, x_2) \Omega(x'_1, x_2) dx_2 &= \frac{1}{2} \sum_{m=0, n=0}^N c_m^* c_n \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \right)^{n+m} \sum_{j=0}^n \sum_{k=0}^m (-1)^{j-k} \sqrt{\binom{n}{j} \binom{m}{k}} \cdot \\
&\cdot \Psi_k^*(x_1) \Psi_j(x'_1) \int \Psi_{m-k}^*(x_2) \Psi_{n-j}(x_2) dx_2 = \\
&= \frac{1}{2} \sum_{m=0, n=0}^N c_m^* c_n \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \right)^{n+m} \sum_{j=0}^n \sum_{k=0}^m (-1)^{j-k} \sqrt{\binom{n}{j} \binom{m}{k}} \cdot \\
&\cdot \Psi_k^*(x_1) \Psi_j(x'_1) \delta_{m-k, n-j} =, \tag{2.33}
\end{aligned}$$

végezzük el az összegzést m -re, majd cseréljük fel a kétféle összegzést gondosan figyelve azok tartományára:

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{2} \sum_{n=0}^N c_{n-j+k}^* c_n \sum_{j=0, k=0}^{\min(n, m)} \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \right)^{2n-j+k} \sqrt{\binom{n}{j} \binom{n+k-j}{k}} \Psi_k^*(x_1) \Psi_j(x'_1) = \\
&= \frac{1}{2} \sum_{j=0, k=0}^N \sum_{n=j}^N c_{n-j+k}^* c_n \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \right)^{2n-j+k} \sqrt{\binom{n}{j} \binom{n+k-j}{k}} \Psi_k^*(x_1) \Psi_j(x'_1). \tag{2.34}
\end{aligned}$$

Így egy dimenzióban megkapjuk a redukált sűrűségmátrixot, amelynek (j, k) eleme:

$$\rho_{(j, k)} = \frac{1}{2} \sum_{n=j}^N c_{n-j+k}^* c_n \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \right)^{2n-j+k} \sqrt{\binom{n}{j} \binom{n+k-j}{k}}. \tag{2.35}$$

2.5.2. Három dimenzióban

Az egy dimenzióban elvégzett számítás menete analóg módon elvégezhető három dimenzióban is. Első lépésben meghatározzuk a harmonikus oszcillátor hullámfüggvényeit, majd azok lineáris kombinációiból megkapjuk a vizsgált rendszer sajátállapotait. Az állapotfüggvények ismeretében pedig a sűrűségmátrix kiszámolható.

Hullámfüggvény

A három dimenziós oszcillátor alapállapota egy dimenzióval analóg módon:

$$\Psi_{0,0,0}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \Psi_{0,0,0}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2) = \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \right)^3 \Psi_{0,0,0}(\mathbf{r}_1) \Psi_{0,0,0}(\mathbf{r}_2) \tag{2.36}$$

A gerjesztett állapotok hasonlóan alkothatóak meg, de immár három irányban tudunk gerjeszteni, azonban az egyes keltő operátorok alakja, és visszavezetésük az egy dimenzióval analóg módon véghezvihető, és a gerjesztés egyrészecske gerjesztésekkel leírható.

$$\begin{aligned}
\Psi_{n_1, n_2, n_3}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \Psi_{0,0,0}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2) &= \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^3 \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^n \sum_{j_1=0}^{n_1} \sum_{j_2=0}^{n_2} \sum_{j_3=0}^{n_3} \prod_{i=1}^3 \binom{n_i}{j_i} \frac{1}{\sqrt{n_i!}} (-1)^j \\
&\quad (a_{x_1}^+)^{j_1} (a_{x_2}^+)^{n_1-j_1} (a_{y_1}^+)^{j_2} (a_{y_2}^+)^{n_2-j_2} (a_{z_1}^+)^{j_3} (a_{z_2}^+)^{n_3-j_3} \Psi_{0,0,0}(\mathbf{r}_1) \Psi_{0,0,0}(\mathbf{r}_2) = \\
&= \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^{n+3} \sum_{j_1=0}^{n_1} \sum_{j_2=0}^{n_2} \sum_{j_3=0}^{n_3} \sqrt{\prod_{i=1}^3 \binom{n_i}{j_i}} (-1)^j \Psi_{j_1, j_2, j_3}(\mathbf{r}_1) \Psi_{n_1-j_1, n_2-j_2, n_3-j_3}(\mathbf{r}_2)
\end{aligned} \tag{2.37}$$

A gerjesztett állapotokból előáll az állapotfüggvény:

$$\begin{aligned}
\Omega(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= \sum_{\{n_i\}=0}^N c_{n_1, n_2, n_3} \Psi_{n_1, n_2, n_3}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \Psi_0(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2) = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^3 \cdot \\
&\cdot \sum_{\{n_i\}=0}^N c_{n_1, n_2, n_3} \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^n \sum_{j_1=0}^{n_1} \sum_{j_2=0}^{n_2} \sum_{j_3=0}^{n_3} \sqrt{\prod_{i=1}^3 \binom{n_i}{j_i}} \\
&\cdot (-1)^j \Psi_{j_1, j_2, j_3}(\mathbf{r}_1) \Psi_{n_1-j_1, n_2-j_2, n_3-j_3}(\mathbf{r}_2).
\end{aligned} \tag{2.38}$$

Sűrűség

Ismét állítsuk elő az állapotok szorzataként a sűrűségmátrixot:

$$\begin{aligned}
\Omega^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \Omega(\mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2) &= \frac{1}{8} \sum_{\{n_i\}=0}^N \sum_{\{m_i\}=0}^N c_{\{m_i\}}^* c_{\{n_i\}} \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^{n+m} \sum_{\{j_i\}=0}^{\{n_i\}} \sum_{\{k_i\}=0}^{\{m_i\}} (-1)^{j-k} \\
&\sqrt{\prod_{i=1}^3 \binom{n_i}{j_i} \binom{m_i}{k_i}} \cdot \prod_{i=1}^3 \Psi_{k_i}^*(r_{1,i}) \Psi_{m_i-k_i}^*(r_{2,i}) \Psi_{j_i}(r'_{1,i}) \Psi_{n_i-j_i}(r'_{2,i}).
\end{aligned} \tag{2.39}$$

Ezt is integráljuk ki a második változóban

$$\begin{aligned} \int \Omega^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \Omega(\mathbf{r}'_1, \mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_2 &= \frac{1}{8} \sum_{\{n_i\}=0}^N \sum_{\{m_i\}=0}^N c_{\{m_i\}}^* c_{\{n_i\}} \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \right)^{n+m} \sum_{\{j_i\}=0}^{\{n_i\}} \sum_{\{k_i\}=0}^{\{m_i\}} \\ &\quad (-1)^{j-k} \sqrt{\prod_{i=1}^3 \binom{n_i}{j_i} \binom{m_i}{k_i}} \cdot \prod_{i=1}^3 \Psi_{k_i}^*(r_{1,i}) \Psi_{j_i}(r'_{1,i}) \cdot \\ &\quad \cdot \underbrace{\int \Psi_{m_1-k_1}^*(x_2) \Psi_{n_1-j_1}(x_2) dx_2}_{\delta_{m_1-k_1, n_1-j_1}} \underbrace{\int \Psi_{m_2-k_2}^*(y_2) \Psi_{n_2-j_2}(y_2) dy_2}_{\delta_{m_2-k_2, n_2-j_2}} \underbrace{\int \Psi_{m_3-k_3}^*(z_2) \Psi_{n_3-j_3}(z_2) dz_2}_{\delta_{m_3-k_3, n_3-j_3}} =, \end{aligned}$$

majd végezzük el az indexek lehetséges összejejtéseit

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{8} \sum_{\{n_i\}=0}^N c_{\{n_i+k_i-j_i\}} \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \right)^{2n+k-j} \sum_{j_1, k_1=0}^{\min(n_1, m_1)} \sum_{j_2, k_2=0}^{\min(n_2, m_2)} \sum_{j_3, k_3=0}^{\min(n_3, m_3)} (-1)^{j-k} \\ &\quad \sqrt{\prod_{i=1}^3 \binom{n_i}{j_i} \binom{n_i+k_i-j_i}{k_i}} \prod_{i=1}^3 \Psi_{k_i}^*(r_{1,i}) \Psi_{j_i}(r'_{1,i}) =, \end{aligned}$$

és cseréljük meg az összegzéseket

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{8} \sum_{\{j_i\}=0}^N \sum_{\{k_i\}=0}^N (-1)^{j-k} \sum_{\{n_i=j_i\}}^N c_{\{n_i+k_i-j_i\}}^* c_{\{n_i\}} \sqrt{\prod_{i=1}^3 \binom{n_i}{j_i} \binom{n_i+k_i-j_i}{k_i}} \\ &\quad \cdot \prod_{i=1}^3 \Psi_{k_i}^*(r_{1,i}) \Psi_{j_i}(r'_{1,i}). \end{aligned}$$

A redukált sűrűségmátrix ($\mathbf{j}, \mathbf{k}$) eleme részletesen kiírva:

$$\begin{aligned} \varrho_{\mathbf{j}, \mathbf{k}} &= \frac{1}{8} (-1)^{j_1+j_2+j_3-k_1-k_2-k_3} \sum_{n_1=j_1}^N \sum_{n_2=j_2}^N \sum_{n_3=j_3}^N c_{n_1+k_1-j_1, n_2+k_2-j_2, n_3+k_3-j_3}^* c_{n_1, n_2, n_3} \\ &\quad \sqrt{\binom{n_1}{j_1} \binom{n_1+k_1-j_1}{k_1} \binom{n_2}{j_2} \binom{n_2+k_2-j_2}{k_2} \binom{n_3}{j_3} \binom{n_3+k_3-j_3}{k_3}}. \quad (2.40) \end{aligned}$$

2.5.3. Betöltések

A redukált sűrűségmátrix diagonalizálásával megkaphatjuk a rendszerre jellemző betöltéseket. A betöltések megadják, hogy a rendszer milyen arányban oszlik meg a természetes pályáin. A nagyobb betöltésű pályán nagyobb, az alacsonyabbon kisebb valószínűséggel találunk elektront.

Kölcsönhatás nélküli esetre a redukált sűrűségmátrix és a betöltések könnyen meghatározhatóak. Alapállapotban a két oszcillátor együttesen leírható egy $|000\rangle_1 |000\rangle_2$ állapotfüggvénnyel. Az ebből alkotott sűrűségmátrix triviálisan egy darab egységnyi betöltést ad.

A gerjesztett állapot ennél bonyolultabb. Az első gerjesztett állapot egy lehetséges állapotfüggvénye az alábbi lesz:

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left[|000\rangle_1 \frac{1}{\sqrt{3}} (|001\rangle_2 + |010\rangle_2 + |100\rangle_2) + \frac{1}{\sqrt{3}} (|001\rangle_1 + |010\rangle_1 + |100\rangle_1) |000\rangle_2 \right]. \quad (2.41)$$

Ha megalkotjuk a sűrűségmátrixot, majd kiintegráljuk az első vagy másik változójában, akkor az alábbi mátrixot kapjuk:

$$\underline{\underline{\rho}} = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/6 & 1/6 & 1/6 \\ 0 & 1/6 & 1/6 & 1/6 \\ 0 & 1/6 & 1/6 & 1/6 \end{pmatrix}, \quad (2.42)$$

ahol az első oszlop tartozik a $|000\rangle$ -hoz, a háromszor hármass blokk pedig az egyszerűen gerjesztettekhez. A diagonalizálás után kapunk egy $1/2$ -es értéket, amely a $|000\rangle$ állapothoz tartozik, és egy másik $1/2$ -es betöltést amelyhez tartozó természetes pálya a három egységnyi gerjesztésű egyrészecske állapot egyenlő arányú keveréke. Érdekes módon a kölcsönhatásmentes gerjesztett állapotok nem lesznek tiszta állapotok az elfajultságuknak köszönhetően.

2.6. Entrópia

A sűrűségmátrixból nemcsak a betöltéseket kaphatjuk meg, hanem az állapotok egymáshoz való viszonyáról is kaphatunk információt. A kölcsönhatás hatására az addig tiszta állapotban levő kvantumrendszer kevert állapotba került. Ezt a kevertséget, az állapotok összefonódottságának mértékét a különféle entrópiákkal mérhetjük. Mi az állapotaink jellemzésre az ú.n. Neumann-, illetve Tsallis-entrópiát választottuk. Ezeket a következőképpen definiálhatjuk:

$$S^N(\rho) = -\text{Tr} \rho \ln \rho, \quad (2.43)$$

$$S_q^{Ts}(\rho) = \frac{1}{1-q} [\text{Tr} \rho^q - 1]. \quad (2.44)$$

Speciálisan mi $q = 2$ -t választottunk, amikor $S_2^{Ts}(\rho) = 1 - \text{Tr}\rho^2$. A fent definíciókból az is látszik, hogy mindkét entrópia pozitív, azonban a von Neumann entrópia tetszőlegesen pozitív értéket felvehet, addig a Tsallis maximálisan egy lehet.

Egy tiszta állapot egyetlen hullámfüggvényből épül fel, ezért sűrűségmátrixában egyetlen nemzérus elem, egy egyes szerepel. Egy ilyen rendszer entrópiája, mindkét esetre zérus. Egy összefonott rendszerre a sűrűségmátrixnak több zérustól különböző eleme van, így a hozzá tartozó entrópia pozitív. Minél nagyobb az entrópia annál összefonottabb a rendszer.

2.7. A vizsgált rendszerek

Eddig általánosan beszéltünk az $f(\mathbf{r})$ kölcsönhatásról, de most nézzük meg a konkrét példákat.

2.7.1. Hooke-atom

A legelső választásunk a kölcsönhatásra az $f(\mathbf{r}) = k \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}$ volt. Az ilyen kölcsönhatással jellemzett rendszer az ún. Hooke-atom. Erről a rendszerről már írtam a szakdolgozatomban is [14]. A teljes rendszer Hamilton-operátora eredeti koordinátákban a következőképpen néz ki:

$$\mathbf{H}_{\text{Hooke}} = \frac{1}{2m} \mathbf{p}_1^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 \mathbf{r}_1^2 + \frac{1}{2m} \mathbf{p}_2^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 \mathbf{r}_2^2 + k \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}. \quad (2.45)$$

Az átírt koordinátákban az általunk vizsgált különbségi koordinátától függő tag:

$$\mathbf{H}_{\text{Hooke},r} = 2 \left[\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \left(\frac{\omega}{2} \right)^2 \mathbf{r}^2 + k \frac{1}{2\mathbf{r}} \right]. \quad (2.46)$$

2.7.2. Az $1/\mathbf{r}^2$ -es potenciál

Megtehetjük, hogy a Hooke-atom $1/\mathbf{r}$ -es Coulomb-potenciálját, $1/\mathbf{r}^2$ -esre cseréljük. Egy ilyen rendszer a következő Hamilton-operátorral írható le:

$$\mathbf{H} = \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \mathbf{r}_1^2 + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \mathbf{r}_2^2 + \tilde{k} \frac{e^2}{(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)^2}. \quad (2.47)$$

Az átírt koordinátákban az általunk vizsgált különbségi koordinátától függő tag:

$$\mathbf{H}_{\text{Hooke},r} = 2 \left[\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \left(\frac{\omega}{2} \right)^2 \mathbf{r}^2 + \tilde{k} \frac{1}{2\mathbf{r}^2} \right]. \quad (2.48)$$

2.7.3. Yukawa-potenciál

Vizsgálhatunk olyan rendszert is, amelyben az elektronok közötti kölcsönhatás Yukawa-potenciál alakú. Ez lényegében a Coulomb-potenciál árnyékolt „változata”. Ez esetben a Hamilton-operátor a következő:

$$\mathbf{H}_{\text{Yukawa}} = \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\mathbf{r}_1^2 + \frac{1}{2}m\omega^2\mathbf{r}_2^2 + \alpha \frac{e^{-k|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}. \quad (2.49)$$

A számunkra érdekes rész az új koordinátáival:

$$\mathbf{H}_{\text{Yukawa},r} = 2 \left[\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\mathbf{r}^2 + \alpha \frac{e^{-k\mathbf{r}}}{2\mathbf{r}} \right]. \quad (2.50)$$

2.7.4. Gauss-Potenciál

Érdekes feladat a két Gauss-potenciállal kölcsönható elektron rendszerének vizsgálata. A Gauss-potenciál megfelelő paraméterválasztásával közelíthetjük a $\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ kontaktpotenciált:

$$\mathbf{H}_{\text{Gauss}} = \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\mathbf{r}_1^2 + \frac{1}{2}m\omega^2\mathbf{r}_2^2 + \alpha e^{-\frac{(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)^2}{r_0^2}}, \quad (2.51)$$

amely az új koordinátákban:

$$\mathbf{H}_{\text{Gauss},r} = 2 \left[\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m \left(\frac{\omega}{2} \right)^2 \mathbf{r}^2 + \frac{\alpha}{2} e^{-\frac{\mathbf{r}^2}{r_0^2}} \right]. \quad (2.52)$$

2.8. Atomi egységek

Amikor ilyen kis rendszerek vizsgálunk, akkor célszerű az ebben a mérettartományban természetes egységeket használni. Ezeket kikeverhetjük az univerzális állandókból egy kis dimenzióanalízissel. A megfelelő hosszúság, energia és körfrekvencia dimenziójú egységek az alábbiak:

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{kme^2}, \quad E_0 = \frac{ke^2}{a_0}, \quad \omega_C = \frac{ke^2}{\hbar a_0}. \quad (2.53)$$

A megkapott hosszskála az a_0 Bohr-sugár, az energiaskálánk pedig a Hartree. Ha ω -t ω_C egységekben mérjük, vagyis $\omega = \omega_C \tilde{\omega}$, akkor a korábban definiált x_0 , és p_0 a következő alakúvá válik:

$$\begin{aligned} x_0 &= \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\tilde{\omega}\frac{ke^2}{a_0\hbar}}} = \sqrt{a_0 \frac{\hbar^2}{kme^2} \frac{1}{\tilde{\omega}}} = \frac{a_0}{\sqrt{\tilde{\omega}}}, \\ p_0 &= \sqrt{\hbar m\omega} = \dots = \frac{\hbar}{a_0} \sqrt{\tilde{\omega}}. \end{aligned} \quad (2.54)$$

Vagyis kihasználva, hogy $\|\mathbf{p}\| = p_0/\sqrt{2}$, és $\|\mathbf{r}\| = r = x_0/\sqrt{2}$ a Hamilton-operátorban szereplő oszcillátor tag abszolút értéke a következőképpen írható fel:

$$\begin{aligned}\frac{\|\mathbf{p}^2\|}{2m} &= \frac{p_0^2}{4m} = \frac{\hbar^2}{4ma_0^2} \tilde{\omega} = \frac{\tilde{\omega}}{4} \frac{ke^2}{a_0} = \frac{\tilde{\omega}}{4} E_0 \\ \frac{1}{2} m \omega^2 \|\mathbf{r}^2\| &= \frac{1}{2} m \omega_c^2 \tilde{\omega}^2 \frac{x_0^2}{2} = \frac{\tilde{\omega}}{4} \tilde{\omega} m \left(\frac{ke^2}{\hbar a_0} \right)^2 \frac{a_0^2}{\tilde{\omega}} = \frac{\tilde{\omega}}{4} \frac{ke^2}{a_0} = \frac{\tilde{\omega}}{4} E_0.\end{aligned}\quad (2.55)$$

Hasonlóan átírhatóak az előző részben felírt $f(\mathbf{r})$ kölcsönhatások is, és így megkapjuk a megfelelő mátrixreprezentásokat:

$$\mathbf{H}_{\text{Hooke}} = E_0 \left(\frac{\tilde{\omega}}{4} (\underline{\mathbf{p}}^2 + \underline{\mathbf{r}}^2) + \frac{\sqrt{\tilde{\omega}}}{2} \underline{\mathbf{r}}^{-1} \right), \quad (2.56)$$

$$\mathbf{H}_{\mathbf{r}^{-2}} = E_0 \left(\frac{\tilde{\omega}}{4} (\underline{\mathbf{p}}^2 + \underline{\mathbf{r}}^2) + \frac{\tilde{\omega}}{4} \underline{\mathbf{r}}^{-2} \right), \quad (2.57)$$

$$\mathbf{H}_{\text{Yukawa}} = E_0 \left(\frac{\tilde{\omega}}{4} (\underline{\mathbf{p}}^2 + \underline{\mathbf{r}}^2) + \frac{\alpha}{E_0} \sqrt{2\tilde{\omega}} e^{-k \frac{a_0}{\sqrt{2\tilde{\omega}}}} (\underline{\mathbf{r}}) \right), \quad (2.58)$$

$$\mathbf{H}_{\text{Gauss}} = E_0 \left(\frac{\tilde{\omega}}{4} (\underline{\mathbf{p}}^2 + \underline{\mathbf{r}}^2) + \frac{\alpha}{E_0} e^{-\frac{1}{2\tilde{\omega}} \frac{a_0^2}{r_0^2}} (\underline{\mathbf{r}}^2) \right). \quad (2.59)$$

3. fejezet

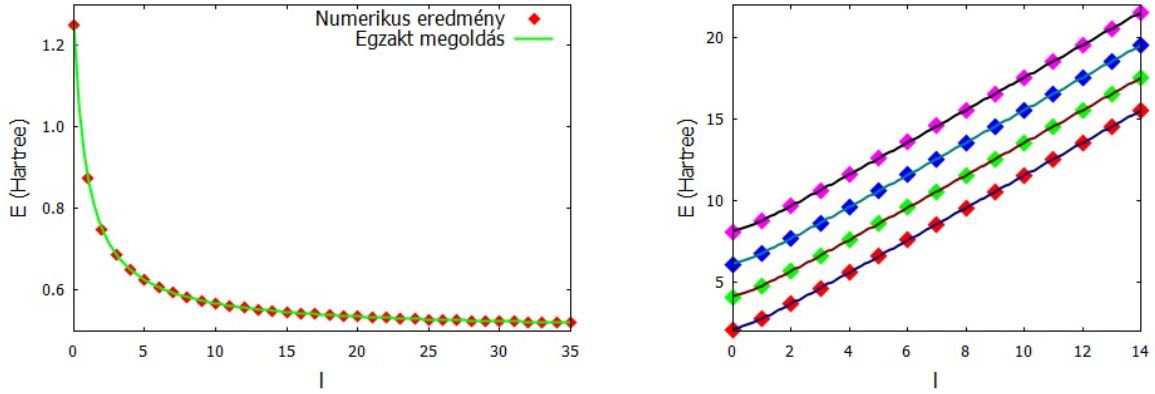
Numerikus eredmények

A különféle kölcsönhatásoktól való függést úgy vizsgáltuk, hogy bevezettünk egy paramétert, amellyel a kölcsönhatás erősségét tudtuk változtatni. Vagyis $f(\mathbf{r})$ helyett $af(\mathbf{r})$ -rel számoltunk különféle a -kra. A 2.8. részben felírtuk az általunk vizsgált Hamilton-operátorokat atomi egységekben. Ha megvizsgáljuk a Hooke-atom esetét, akkor az ω paraméter növelésével a kölcsönhatási tag $1/\sqrt{\omega}$ -val eltűnik. Tehát abban az esetben az a paraméter megfelel az oszcillátor frekvenciájának növelésének, amely a rendszer egy természetes skálája. Hasonló szemléletes jelentés más kölcsönhatásokra is adható a -nak.

3.1. A kölcsönható rendszerek energiái

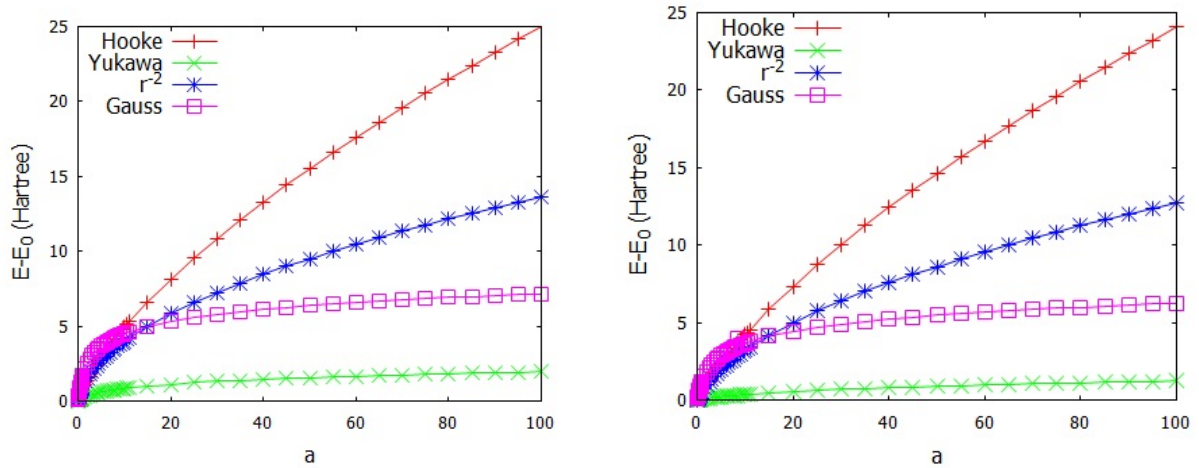
A módszer ellenőrzéseként elsőként nézzük a Hooke-atom esetét. Ezt a rendszert a szakdolgozatomban vizsgáltam, ott beláttuk, hogy a módszer eredményei konvergálnak az analitikus megoldáshoz. A eredmények jobb összehasonlítása érdekében egy közös ábrán (3.1) láthatóak a különböző l -ekhez tartozó energiaértékek. Ugyanerre az ábrára viszonyításképpen rátettük a Taut [1] által kiszámolt eredményt egy folytonos vonalként. Fontos megjegyezni, hogy a fizikai értelme a folytonos görbének is csak az egész pontokban van. A Hooke-atom mellett hasonlóan ábrázoltuk az $1/r^2$ -es kölcsönható potenciál analitikus [15] és numerikus megoldásait. Jól látszik, hogy a számítási eredményeink szépen illeszkednek mindkét esetben a görbékre, a módszerünk az egzakt energianívókat adja vissza, még magasan gerjesztett állapotokra is.

Miután ellenőriztük a sajátenergiák pontosságát nézzük hogyan változik a rendszer energiája a kölcsönhatás bevezetett skálaparamétere függvényében. A kölcsönhatásmentes



3.1. ábra. Bal oldalon Hooke-atom energiaértékek növekvő l mellett, $\omega = \frac{1}{2(l+1)}$, a jobb oldalon az $1/r^2$ -es kölcsönható potenciálhoz tartozó energiaértéket ábrázoltuk $\omega = 1$ választással. Az egyes vonalak a különböző főkvantumszámokhoz tartozó energiákat jelölik.

esetre ($a = 0$) a módszer visszaadja az oszcillátorra várt $3/2\omega$ -s illetve $5/2\omega$ -s energiákat. A 3.2. ábrán a rendszer alapállapotú és első gerjesztett energiáját mutatjuk be a négy kölcsönhatás esetén a kölcsönhatás erősségének függvényében. A kölcsönhatások közül legkevésbé a Yukawa-, és Gauss-típusú potenciálok módosítják az energiát, míg a másik két esetben a kölcsönhatás erősítésével az energia folyamatosan nő.



3.2. ábra. Az energia kölcsönhatás függése az a paramétertől alapállapotban (bal ábra) és az első gerjesztett állapotban (jobb ábra) E_0 a nemkölcsönható energia, $\omega = 1$, $n_{max} = 100$. A Gauss-potenciál szélessége $r_0 = 1$, a Yukawa-potenciál paramétere $k = 2$

A Gauss-potenciálnál lehetőségünk van arra, hogy változtassuk a potenciál szélességét. A potenciál csúcsosítható, és szét is kenhető. Úgy változtattuk a Gauss-potenciál para-

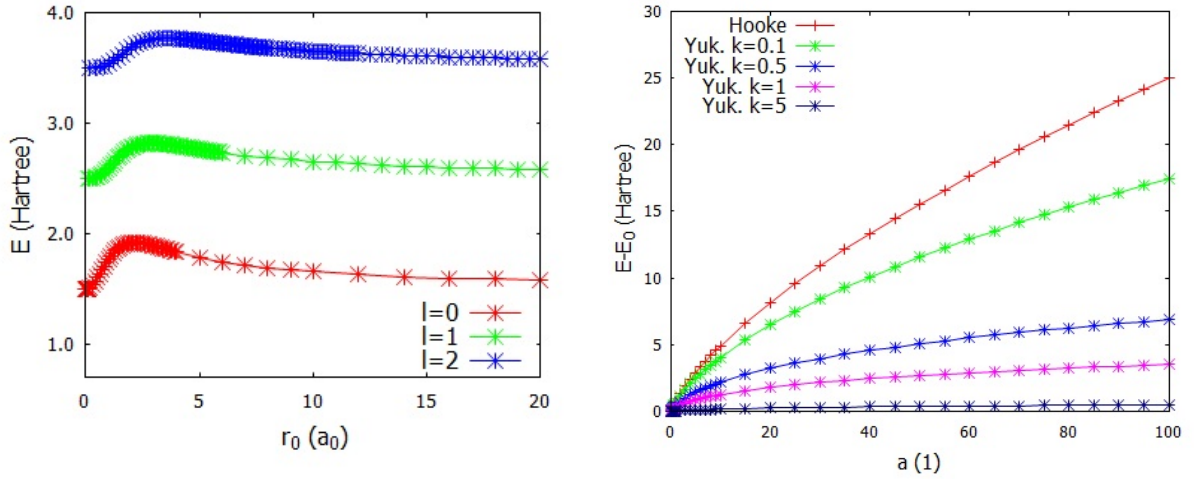
méreteit, hogy a potenciál alatti terület ne változzon. Ilyen feltételek mellett az $r_0 \rightarrow 0$ határesetben kontaktpotenciált kapunk. A továbbiakban válasszuk a területet egységre:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \alpha e^{-\left(\frac{r}{r_0}\right)^2} d\mathbf{r} = 1,$$

amely a következő megkötést jelenti a két paraméterre:

$$(\sqrt{\pi}\alpha r_0)^3 = 1, \text{ vagyis } \alpha = \frac{\sqrt{\pi}}{r_0}.$$

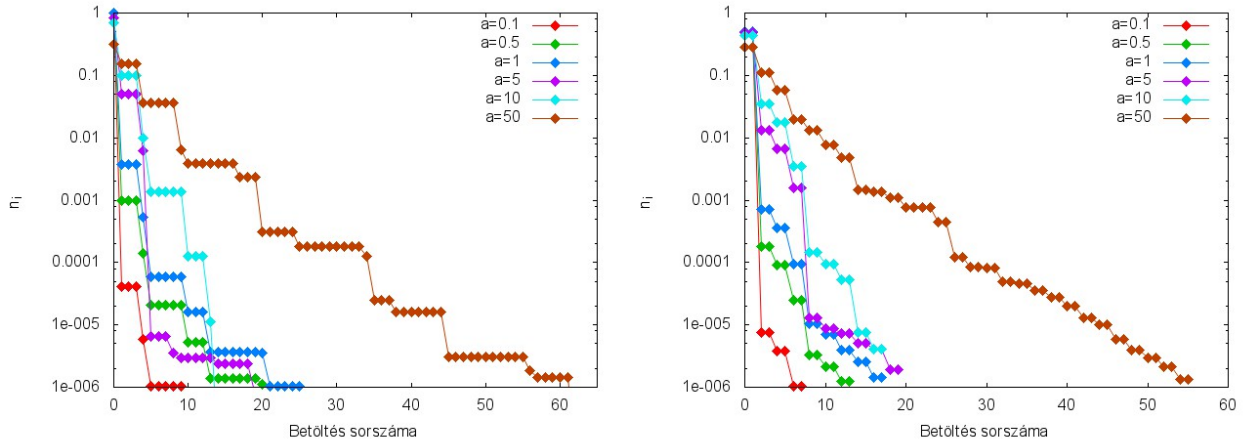
A potenciál szélességétől, mint a potenciál egy paraméterétől való függést alapállapotra és az első két gerjesztett állapotra néztük meg. Az eredmény a 3.3. ábrán látható.



3.3. ábra. Az energia változása a Gauss-görbe félérték-szélességének függvényében alap- illetve gerjesztett állapotokra $n_{max} = 100$ -as $\omega = 1$ -es paraméterválasztás mellett, illetve a Coulomb-potenciál előállítására Yukawa-potenciál $k = 0$ határeseteként (alapállapotra)

A megfigyelés az, hogy mind nagyon széles, mind nagyon hegyes Gauss-potenciálra a nemkölcönható energiát kapjuk, az elektronok szabad részecskeként viselkednek. A határeseteket magyarázhatjuk úgy, hogy a hullámfüggvények bizonyos állapotokra koncentráltak, és ha azokon a kölcsönhatási járulék kicsi, akkor az energia a szabad eseté lesz. A köztes esetek között mindig látunk egy olyan esetet, amikor az energia maximális. Ezen szélesség a gerjesztés növelésével egyre növekszik, és egyre inkább elmosódik.

Egy másik természetesen adódó paraméterfüggés a Yukawa-és Coulomb-potenciál hasonlóságán alapul. Várhatóan, ha a Yukawa-potenciál k paraméterét 0-hoz közelítjük, akkor megkapjuk a Coulomb-potenciálhoz tartozó görbét. A számítás alapállapotra végeztük el, és az eredmény a 3.3-as jobb oldali ábrán látható.



3.4. ábra. Hooke-atom betöltései alap és gerjesztett állapotra, ($\omega = 1$)

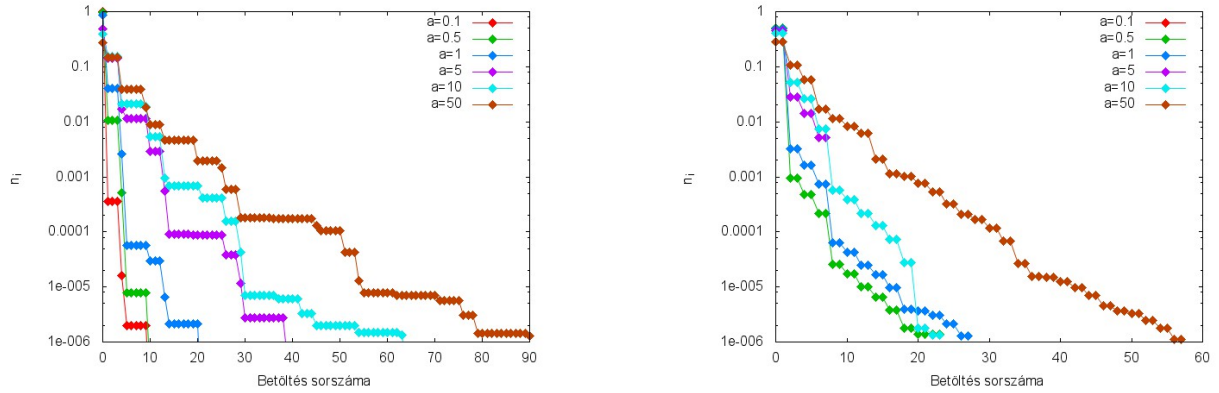
3.2. Betöltések

A redukált sűrűségmátrixból megkapjuk a természetes pályák betöltéseit. A nemkölsönható rendszer betöltéseit a 2.5.3. részben már megnéztük. Most nézzük, hogy a numerikus eredmények szerint hogyan változnak a betöltések a kölcsönhatás hatására.

A 3.4. bal oldali ábrán a Hooke-atom alapállapotú betöltéseinek változása látható a kölcsönhatási paraméter pár értékénél. Az ábráról leolvasható, hogy gyenge kölcsönhatás esetén egyetlen nagy betöltésű pálya van, míg a többi betöltés nagyságrendekkel kisebb. Ez az eredmény jól egybevág azzal a ténnyel, hogy nemkölsönható esetben csak egyetlen egységnyi betöltést várunk. Azonban ahogy erősödik a kölcsönhatás a nagy betöltés csökken és több kisebb betöltésű pálya is megjelenik. Az alapállapotról tudjuk, hogy a teljesen szimmetrikus ábrázolás szerint transzformálódik, emiatt a hozzá tartozó redukált sűrűségmátrix is invariáns lesz a három dimenziós forgáscsoporttal szemben, így a természetes pályák is oszthatóak az l, m kvantumszámok szerint. A 3.4. ábrán betöltések között megjelenik a $2l + 1$ -es degeneráció. Az ábráról szépen leolvashatóak a 3-szoros, és 5-szörös, és erősebb kölcsönhatásra még nagyobb degenerációjú pályák.

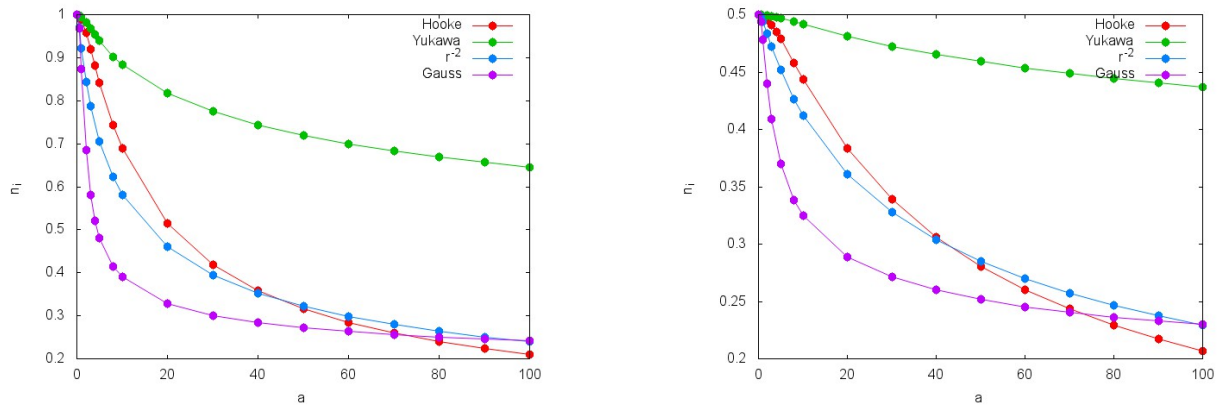
A 3.4. jobb oldali ábráján az első gerjesztett állapot betöltéseinek változása látható. Ez a gerjesztett állapot már nem teljesen szimmetrikus, mint az alapállapot, ezért a hozzá tartozó sűrűségmátrix sem lesz invariáns a 3D forgáscsoporttal szemben. A $2l + 1$ -es degenerációk helyett párosával fordulnak elő a betöltések. Itt is megfigyelhetjük, hogy visszakaptuk a nemkölsönható esetben megkapott betöltéseket a gyengén kölcsönható esetre, és

hogy a kölcsönhatás erősítése itt is növeli a kisebb betöltések számát.



3.5. ábra. Betöltései alap és gerjesztett állapotra Gauss-potenciálban, ($\omega = 1$, $r_0 = 1$)

Hasonló ábrát kapunk a többi kölcsönhatásra is. Az elvárás ott is az, hogy a gyengén kölcsönható esetek adják vissza az egységnyi illetve kétszer feles betöltéseket. A Gauss-potenciál esete a 3.5-ös ábrákon látható.

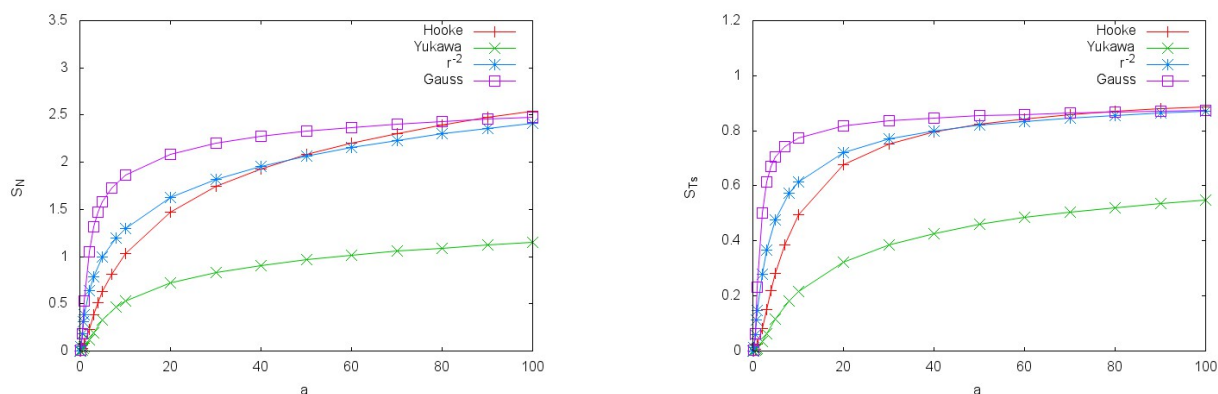


3.6. ábra. Legnagyobb betöltés változása alap-, és az első gerjesztett állapotban ($\omega = 1$) $\omega = 1$, $n_{max} = 100$. A Gauss-potenciál szélessége $r_0 = 1$, a Yukawa-potenciál paramétere $k = 2$.

A kölcsönhatás megjelenése jól beazonosítható a legnagyobb betöltés nagyságában. Amikor bekapcsoljuk a kölcsönhatást, akkor az csökkenni kezd, a csökkenés mértéke a 3.6-os ábrákon látható alap- illetve gerjesztett állapotra. Látszik, hogy a különböző kölcsönhatások máshogyan változtatják a betöltést. A legszembetűnőbb az, hogy a Yukawa-potenciálra a betöltések sokkal kevésbé változnak, mint a másik három esetre.

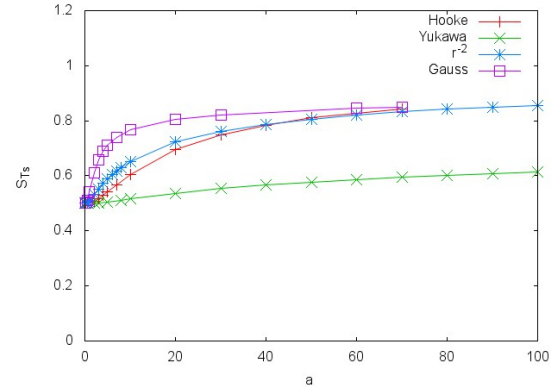
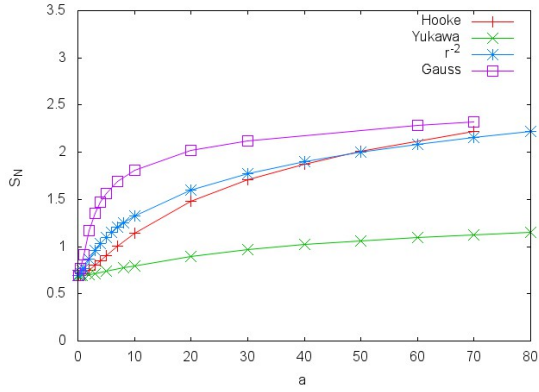
3.3. Az entrópiák

Az entrópiákat a betöltésekhez hasonlóan az alapállapotra és az első gerjesztett állapotra határoztuk meg. A 3.7. ábrán a kölcsönhatás erősségének függvényében ábrázoltuk a vizsgált négy kölcsönható rendszer Neumann-, illetve Tsallis-entrópiáját a kölcsönható alapállapotnak. Mindkét ábrán jól látszik, hogy a nemkölcsönható alapállapot entrópiája nulla, az állapotok nem keverednek. Azonban a kölcsönhatás bekapcsolásával ez már többé nem lesz így. Leolvasható, hogy a Gauss-kölcsönhatás keveredése indul a legmeredekebben, aztán mintha telítésbe menne. A legkisebb entrópiát a Yukawa-potenciál esetében kapjuk. Mindkét entrópia értéke jóval elmarad a másik három kölcsönhatásétól, sokkal kevésbé fonódnak össze az egyrészecske állapotok. Érdekes észrevétel, hogy a Hooke-atomban az összefonódottság kezdetben a második leggyengébb, de a kölcsönhatás erősségét növelve nagyobb entrópiájú állapotokat hoz létre, mint az $1/r^2$ -es, vagy Gauss potenciál.

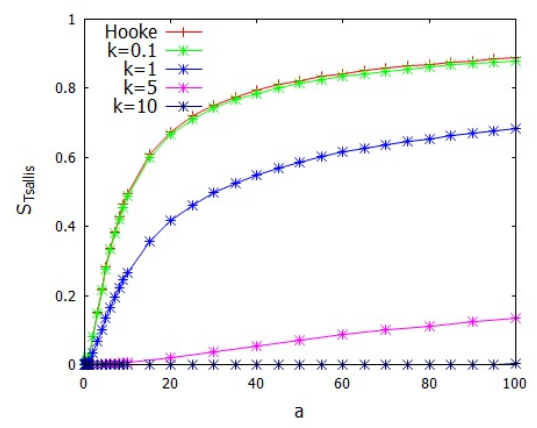
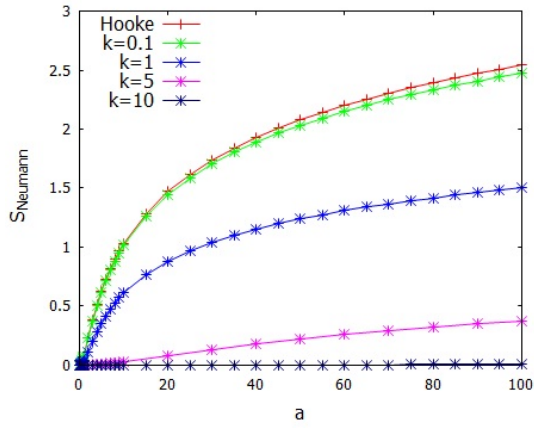


3.7. ábra. Az alapállapot Neumann-, és Tsallis-entrópiája a kölcsönhatás erősségének függvényében, $\omega = 1$ mellett, $\omega = 1$, $n_{max} = 100$. A Gauss-potenciál szélessége $r_0 = 1$, a Yukawa-potenciál paramétere $k = 2$.

Második lépésként vizsgáljunk egy gerjesztett állapotot. Az első gerjesztett állapot degenerált, azonban az entrópia csak a betöltésszámoktól függ, amelyek a különböző egyszerűen gerjesztett állapotokra megegyeznek, amely azt jelenti, hogy az entrópiák értéke ezen esetekre ugyanaz. Ezen rendszerekhez tartozó Neumann-, illetve Tsallis-entrópiát látható 3.8. ábrán. Megállapítható itt is, hogy a nemkölcsönható gerjesztett állapot az alapállapottal szemben már nem tiszta. A Tsallis entrópiára $S_{Ts} = 0,5$ -öt, míg a Neumann entrópiára $S_N = 0,69$ -et kaptunk, amely megegyezik az elméletileg várt $\ln 2$ -vel. A kölcsönhatás bekapcsolásával ismét elkezdett nőni az entrópia mind a négy esetre, a függvények menete pedig hasonlít az alapállapotban megállapítottakra.



3.8. ábra. Az első gerjesztett állapot Neumann-, és Tsallis-entrópiája az a kölcsönhatási paraméter függvényében, $\omega = 1$ mellett, $\omega = 1$, $n_{max} = 100$. A Gauss-potenciál szélessége $r_0 = 1$, a Yukawa-potenciál paramétere $k = 2$.



3.9. ábra. Az alapállapot állapot Neumann-, és Tsallis-entrópiája az a kölcsönhatási paraméter függvényében, $\omega = 1$ mellett, $\omega = 1$, $n_{max} = 100$

Az energiákhoz hasonlóan Yukawa-potenciálra kiszámoltuk, hogyan változnak az entrópiák a levágási paraméter függvényében alapállapotban. Az eredmény a 3.9. ábrán látható. Itt is visszkapjuk azt az eredményt, amit az energiáknál, vagyis a Yukawa-sajátállapotok is szépen folytonosan átmennek Coulomb-állapotokba a levégés eltüntetésével. A paraméter növelésével az is látszik, hogy a levágás megerősítésével a kölcsönhatás összefonó hatása eltűnik, és a kölcsönhatásmentes eset entrópiáját kapjuk vissza.

4. fejezet

Összefoglalás

A dolgozatban két, harmonikus potenciálban mozgó elektron viselkedését vizsgáltuk négy különböző kölcsönható potenciál esetében. Kidolgoztunk egy numerikus eljárást, amely tetszőleges, csak a relatív koordinátáktól függő kölcsönható potenciál esetén alkalmas a kételektron hullámfüggvény és a redukált egyrészecskés sűrűségmátrix meghatározására. Kiszámítottuk a spektrumot és a hozzá tartozó sajátállapotokat, előállítottuk a redukált sűrűségmátrixot. A sűrűségmátrixból meghatároztuk a természetes pályák betöltéseit, és kiszámoltuk az állapotok Neumann-, és Tsallis-entrópiáit. Az entrópiák segítségével az egyrészecskés állapotok összefonódottságát vizsgáltuk a kétrészecskés hullámfüggvény alap-, és első gerjesztett állapotában a kölcsönhatás erősségének függvényében.

Irodalomjegyzék

- [1] M. Taut, „Two electrons in an external oscillator potential: Particular analytic solutions of a Coulomb correlation problem”, *Phys. Rev. A*, **48**, 3561 (1993)
- [2] M. Moshinsky, „How Good is the Hartree-Fock Approximation” *American Journal of Physics* **36**, 52 (1968)
- [3] I. Nagy, J. Pipek, „Hartree-Fock-like partitioning of the two-matrix for an exactly solvable two-electron model atom”, *Phys. Rev. A* **83**, 034502 (2011)
- [4] I. Nagy, J. Pipek, „Approximations for the interparticle interaction energy in an exactly solvable two-electron model atom”, *Phys. Rev. A* **81**, 014501 (2010)
- [5] C. Amovilli, N.H. March, „Quantum information: Jaynes and Shannon entropies in a two-electron entangled artificial atom”, *Phys. Rev. A* **69**, 054302 (2004)
- [6] H.G. Laguna, R.P. Sagar, „Statistical correlations in the Moshinsky atom”, *Phys. Rev. A* **84**, 012502 (2011)
- [7] H G Laguna and R P Sagar, „Positionmomentum correlations in the Moshinsky atom”, *J. Phys. A: Math. Theor.* **45** 025307 (2012)
- [8] P.A. Bouvrie, A.P. Majtey, A.R. Plastino, P. Sánchez-Moreno and J.S. Dehesa, „Quantum entanglement in exactly soluble atomic models: The Moshinsky model with three electrons, and with two electrons in a uniform magnetic field”, *Eur. J. Phys. D* **66**, 15 (2012)
- [9] J. Cioslowski, K. Pernal, „The ground state of harmonium”, *J. Chem. Phys.* **113**, 8434 (2000)
- [10] J. Krawowski, L. Cyrnek, „ Harmonium”, *Annalen der Physik* **13**, 181 (2004)

- [11] R. Atrea, Chandra Shekhar Mohapatra, P.K. Panigrahi, „Finding exact and approximate wave functions of Hooke atom, their information entropy and correlation”, *Physics Letters A* **361**, 33 (2007)
- [12] M Lutzky, „Symmetry groups and conserved quantities for the harmonic oscillator” *J. Phys. A: Math. Gen.* **11**, 249 (1978)
- [13] I. Bengtsson, K. Życzkowski, „Geometry of quantum states”, *Cambridge University Press* (2006)
- [14] Nagyfalusi Balázs, „Hooke-atom”, BSc szakdolgozat (2011)
- [15] R. Crandall, R. Whitnell, R. Bettge, „Exactly soluble two-electron atomic model”, *Am. J. Phys.* **52**, 438 (1984)