

Cvičení KT1 13. 12. 2022 (11. cvičení)

Témata:

- variační metoda: Ritzův variační princip, lineární a nelineární parametrizace

Variační metoda

Dnešní cvičení se budeme věnovat druhému typu přibližných metod: metodě variační. Jejím základem je tzv. Ritzův variační princip, který nám říká, že střední hodnota energie nějaké náhodné, tzv. testovací, funkce $|\psi\rangle$ je vždy vyšší nebo rovna přesné energii

$$E_{\text{var}} - E_0 \geq 0. \quad (1)$$

(I) Ukažte.

Abychom se dostali ke skutečné energii co nejbliž, musíme zvolit co nejbližší (nejvhodnější) testovací funkci. Toho můžeme dosáhnout tím, že testovací vlnovou funkci parametrizujeme a pak energii optimalizujeme vzhledem k tomuto, popř. těmto, parametrům.

Možnosti parametrizace máme dvě: lineární a nelineární. Jejich princip a použití si ukážeme na příkladu harmonického oscilátoru s poruchou $\delta\hat{x}^2$.

Nelineární parametrizace:

Tento přístup spočívá v tom, že do testovací funkce vhodně umístíme parametr a následně najdeme jeho optimální hodnotu. Tento přístup zpravidla vede k rychlejšímu a správnějšímu řešení, ale není univerzální.

Mějme tedy systém

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2} + \frac{\hat{x}^2}{2} + \delta\hat{x}^2 \quad (2)$$

a zkusme naléznout energii základního stavu.

Jako vhodná testovací funkce se zjevně jeví vlastní funkce harmonického oscilátoru:

$$|\psi_{\text{LHO},0}\rangle = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} e^{-\frac{\hat{x}^2}{2}}. \quad (3)$$

(II) Jakou energii získáme použitím této funkce?

Náš odhad vylepšíme tím, že do funkce 3 vhodně umístíme parametr α :

$$|\psi_t(\alpha)\rangle = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} e^{-\alpha\frac{\hat{x}^2}{2}}. \quad (4)$$

(III) Spočítejte energii $E_{\text{var}}(\alpha)$.

(IV) Energii optimalizujte, tj. najděte α dávající nejnížší energii.

Lineární parametrizace:

Testovací funkci rozvedeme do vlastních stavů systému, které umíme vařešit:

$$|\psi_t\rangle = \sum_n c_n |n\rangle. \quad (5)$$

Teoreticky je jedno, jakou bázi zvolíme. Důležité je, aby báze byla úplná. V praxi se ovšem snažíme najít tu nejvhodnější bázi, abychom rozvíjeli do co nejmenšího počtu funkcí a zároveň se rychle blížili ke skutečné energii.

(V) Ukažte, že pak řešíme vlastní problém

$$(H - E_{\text{var}}S)\vec{c} = 0. \quad (6)$$

Pro náš systém

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2} + \frac{\hat{x}^2}{2} + \delta\hat{x}^2 \quad (7)$$

je zjevně výhodné zvolit bázi vlastních stavů LHO.

(VI) Uvažujme stavy $|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle, |3\rangle, |4\rangle$ a postupně uvažujme báze $\{|0\rangle\}$, $\{|0\rangle, |1\rangle\}$, atd. a odhadněme energii základního stavu.

(VII) Porovnejte výsledky získané variační metodou (lineární i nelineární) a poruchovou metodou.

Povinná úloha na příště

Uvažujte atom vodíku

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2} - \frac{1}{\hat{r}} \quad (8)$$

a jeden gaussian jako testovací funkci (opt. parametr α)

$$\psi_t = N e^{-\alpha r^2}. \quad (9)$$

Najděte nejlepší odhad energie základního stavu atomu vodíku, který s touto funkcí můžeme získat.

Bonusová úloha na příště

Uvažujme hamiltonián dvouhladinového systému ve tvaru

$$H = \begin{pmatrix} E_a & 0 \\ 0 & E_b \end{pmatrix} \quad (10)$$

a vlastní stavy označme $|a\rangle$ a $|b\rangle$. Ukažte, že podle variační metody jsou $|a\rangle$ a $|b\rangle$ funkce s vlastními energiemi E_a , resp. E_b .

Dále uvažujte, že maticové elementy $H_{ab} = H_{ba}^*$ jsou nenulové. V takovém případě variační princip povede na stavy odlišné od $|a\rangle$, $|b\rangle$. Ukažte, že pro původně degenerovaný systém $H_{aa} = H_{bb}$ dojde k sejmutí degenerace a rozštěpení hladin se rovná dvojnásobku H_{ab} .

Nápověda: Výhodná je parametrizace $|\psi\rangle = \cos \alpha |a\rangle + \sin \alpha |b\rangle$.