תרגול מספר 9

עקרון הווריאציה

תוכן עניינים

1 חזרה

עקרון הווריאציה מאפשר לנו לבנות בעזרת "ניחוש" קירובים לפונקציית הגל ולאנרגיה של מצב היסוד של מערכת. כיוון שבניחושים שלנו יכולים להיות פרמטרים והשיטה נותנת לנו למצוא את הערכים המתאימים ביותר של הפרמטרים, עקרון הווריאציה גמיש יותר מתורת ההפרעות ומאפשר לנו לפעמים למצוא קירובים טובים יותר. בנוסף, הוא מספק תמיד חסם עליון לאנרגיה. עם זאת, הוא עובד אך ורק עבור מצב היסוד.

העקרון מבוסס על העובדה כי כל פונקציית גל Φ המקיימת את תנאי השפה של הבעיה ניתנת לכתיבה בעזרת טור של הפונקציות העצמיות של ההמילטוניאן: $\Phi=\sum_i u_i\psi_i$. האנרגיה של מצב כזה, $\langle\Phi|\hat{H}|\Phi\rangle=\sum_i|u_i|^2E_i$, תהיה תמיד גדולה יותר מ־E_0, האנרגיה של מצב היסוד. עובדה זו נובעת מכך שהאנרגיה של מצב היסוד היא האנרגיה הקטנה ביותר במערכת, כלומר עבור כל $i\neq 0$, $E_i\geq E_0$ ואפשר לכתוב:

$$\varepsilon=\langle\Phi|\hat{H}|\Phi\rangle=\sum_i|u_i|^2E_i\geq\sum_i|u_i|^2E_0=E_0\overbrace{\sum_i|u_i|^2}^{=1}=E_0.$$

שוויון יתקיים אך ורק כאשר $|u_0|=1$ ו־$|u_i|=0$ עבור $i\neq 0$.

כמובן, אם אנחנו יודעים את המצבים העצמיים של ההמילטוניאן ויכולים לפתח בהם טורים, הבעיה ממילא פתורה. עיקרון הווריאציה נהיה שימושי כאשר אנחנו לא יודעים את הפיתרון, אך יש לנו דרך להגדיר סדרה של ניחושים בעזרת פרמטרים. הניחושים נקראים פונקציות ניסיון (trial functions) אנחנו יכולים לבחור מביניהם את הניחוש הטוב ביותר באמצעות מינימיזציה (ווריאציה) של האנרגיה ε על כל הפרמטרים.

2 אוסצילטור תלת־מימדי

נדגים את העיקרון על בעיה שאנחנו דווקא יודעים לפתור במדוייק, אבל עם ניחוש לא מדוייק. אוסצילטור הרמוני תלת־מימדי מוגדר באמצעות ההמילטוניאן הפריק

$$\begin{aligned}\hat{H}&=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+\frac{1}{2}m\omega^2r^2\\&=\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)+\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{1}{2}m\omega^2y^2\right)+\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial z^2}+\frac{1}{2}m\omega^2z^2\right)\end{aligned}$$

אודות לפריקות, אפשר לכתוב את הפתרונות בצורה

$$\psi_{nlm}(\mathbf{r})=\psi_n(x)\,\psi_l(y)\,\psi_m(z),$$

כאשר עבור כל אחת מהקואורדינטות $\xi=x,y,z$ מתקיים במצב היסוד

$$\psi_0(\xi)=\left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}e^{-\frac{\alpha\xi^2}{2}},\ \alpha=\frac{m\omega}{\hbar},\ E_{0\xi}=\frac{1}{2}\hbar\omega.$$

כלומר, מצב היסוד המדוייק הוא

$$\psi_{000}(\mathbf{r})=\left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}e^{-\frac{\alpha x^2}{2}}\left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}e^{-\frac{\alpha y^2}{2}}\left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}e^{-\frac{\alpha z^2}{2}}=\left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{3}{4}}e^{-\frac{\alpha r^2}{2}},$$

עם אנרגיה $E_{000}=\frac{3}{2}\hbar\omega=1.5\hbar\omega$. אנחנו נעמיד פנים שאנחנו לא יודעים זאת, וננסה למצוא פתרון וריאציוני מהצורה $\Phi=Ae^{-\lambda r}$. זו פונקציית גל שמקיימת את תנאי השפה (מתאפסת האינסוף), ואנחנו נחפש את הערך של λ שנותן את האנרגיה הנמוכה ביותר.

תרגיל: מצאו קירוב לפונקציית הגל של מצב היסוד של אוסצילטור הרמוני תלת־מימדי בעזרת פונקציית הניסיון $\Phi=Ae^{-\lambda r}$. השוו את האנרגיה שהתקבלה לאנרגיה האמיתית.

פיתרון: ראשית, עלינו לנרמל את פונקציית הגל (שימו לב כי המשוואה $\varepsilon=\langle\Phi|\,\hat{H}\,|\Phi\rangle$ מתקיימת אך ורק אם Φ מנורמלת, אחרת $\varepsilon=\frac{\langle\Phi|\hat{H}|\Phi\rangle}{\langle\Phi|\Phi\rangle}$) על ידי מציאת הערך של A שיקיים

$$\begin{aligned}1 &= \langle\Phi|\,\Phi\rangle=A^2\int \mathrm{d}^3r\,e^{-2\lambda r}=4\pi A^2\int_0^\infty e^{-2\lambda r}r^2\mathrm{d}r=4\pi A^2\left(\frac{1}{2\lambda}\right)^3\overbrace{\int_0^\infty e^{-y}y^2\mathrm{d}y}^{=2!}\\ &= \frac{\pi}{\lambda^3}A^2\Rightarrow A=\sqrt{\frac{\lambda^3}{\pi}}.\end{aligned}$$

נחשב, אם כך, את $\varepsilon(\lambda)$:

$$\begin{aligned}\varepsilon &= \langle\Phi|\,\hat{H}\,|\Phi\rangle=\frac{\lambda^3}{\pi}\int\mathrm{d}^3r\,e^{-\lambda r}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+\frac{1}{2}m\omega^2r^2\right)e^{-\lambda r}\\ &= 4\lambda^3\int_0^\infty r^2\mathrm{d}r\\ &\quad\times e^{-\lambda r}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right)+\frac{1}{r^2\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)+\frac{1}{2}m\omega^2r^2\right)e^{-\lambda r}.\end{aligned}$$

כיוון שלפונקציית הניסיון שלנו אין תלות זוויתית, הנגזרות על פי הזוויות מתאפסות. אנחנו נותרים עם:

$$\begin{aligned}\varepsilon &= -4\lambda^3\int_0^\infty r^2\mathrm{d}r\,\frac{\hbar^2}{2m}e^{-\lambda r}\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)e^{-\lambda r}+4\lambda^3\int_0^\infty r^2\mathrm{d}r\,\frac{1}{2}m\omega^2r^2e^{-2\lambda r}\\ &= \frac{2\lambda^4\hbar^2}{m}\int_0^\infty\mathrm{d}r\,e^{-\lambda r}\frac{\partial}{\partial r}r^2e^{-\lambda r}+2\lambda^3m\omega^2\int_0^\infty\mathrm{d}r\,r^4e^{-2\lambda r}\\ &= \frac{4\lambda^4\hbar^2}{m}\int_0^\infty\mathrm{d}r\,e^{-2\lambda r}r-\frac{2\lambda^5\hbar^2}{m}\int_0^\infty\mathrm{d}r\,r^2e^{-2\lambda r}+2\lambda^3m\omega^2\int_0^\infty\mathrm{d}r\,r^4e^{-2\lambda r}\\ &= \frac{4\lambda^4\hbar^2}{m}\left(\frac{1}{2\lambda}\right)^2 1!-\frac{2\lambda^5\hbar^2}{m}\left(\frac{1}{2\lambda}\right)^3 2!+2\lambda^3m\omega^2\left(\frac{1}{2\lambda}\right)^5 4!\\ &= \frac{4\lambda^4\hbar^2}{m}\left(\frac{1}{2\lambda}\right)^2 1!-\frac{2\lambda^5\hbar^2}{m}\left(\frac{1}{2\lambda}\right)^3 2!+2\lambda^3m\omega^2\left(\frac{1}{2\lambda}\right)^5 4!=\boxed{\frac{\hbar^2}{2m}\lambda^2+\frac{3m\omega^2}{2\lambda^2}}.\end{aligned}$$

נבצע מינימיזציה לפי λ:

$$\frac{\partial\varepsilon}{\partial\lambda}=\frac{\hbar^2}{m}\lambda-\frac{3m\omega^2}{\lambda^3}=0\Rightarrow\lambda=\left(\frac{3m^2\omega^2}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{4}}.$$

אם נציב זאת באנרגיה, נקבל כי השגיאה בתוצאה הסופית היא כ־15%.

$$\varepsilon=\frac{\hbar^2}{2m}\sqrt{\frac{3m^2\omega^2}{\hbar^2}}+\frac{3m\omega^2}{2}\sqrt{\frac{\hbar^2}{3m^2\omega^2}}=\frac{1}{2}\sqrt{3}\hbar\omega+\frac{1}{2}\sqrt{3}\hbar\omega=\boxed{\sqrt{3}\hbar\omega\approx 1.73\hbar\omega}.$$

שימו לב כי אם היינו חוזרים על התרגיל עם פונקציית הניסיון $\Phi=Ae^{-\lambda r^2}$, היינו מקבלים את התשובה המדוייקת. גם בלי לדעת את התשובה מראש, היינו יכולים לבצע את התרגיל עבור פונקציות כלליות יותר ויותר (למשל, הצעד הבא יכול להיות $\Phi=Ae^{-\lambda r}+Be^{-\eta r}$) כדי לשפר את התוצאה ולהתקרב לערך האמיתי.

3 קופסה פרבולית

נביט בהמילטוניאן

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \frac{\hat{p}^2}{2m}+\hat{V}\left(x\right),\\ \hat{V}\left(x\right) &= \begin{cases}\infty & |x|\geq\frac{L}{2},\\ \alpha\hat{x}^2 & |x|<\frac{L}{2}.\end{cases}\end{aligned}$$

זוהי קופסה עם תחתית בצורת פרבולה. ננסה להציב פיתרון קבוע, כלומר מהצורה

$$\psi=\begin{cases}A & |x|<\frac{L}{2},\\ 0 & |x|\geq\frac{L}{2}.\end{cases}$$

תנאי הנרמול יקבע את A. בהנחה כי הוא ממשי,

$$\int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}}A^2\mathrm{d}x=LA^2=1\Rightarrow\boxed{A=\frac{1}{\sqrt{L}}}.$$

מכאן,

$$\begin{aligned}\varepsilon &= \langle\psi|\,\hat{H}\,|\psi\rangle=\langle\psi|\,\frac{\hat{p}^2}{2m}\,|\psi\rangle+\langle\psi|\,\hat{V}\left(x\right)|\psi\rangle\\ &= -\hbar^2\frac{1}{2m}\int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}}\frac{1}{\sqrt{L}}\overbrace{\frac{\partial^2}{\partial x^2}\frac{1}{\sqrt{L}}}^{=0}\mathrm{d}x+\int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}}\frac{1}{\sqrt{L}}\alpha x^2\frac{1}{\sqrt{L}}\mathrm{d}x\\ &= \frac{\alpha}{L}\frac{1}{3}\,x^3\Big|_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}}=\frac{\alpha}{L}\frac{2}{3}\left(\frac{L}{2}\right)^3=\boxed{\frac{\alpha L^2}{12}}.\end{aligned}$$

האם יש בעיה עם תשובה זו? בגבול שבו $\alpha=0$ מקבלים $\varepsilon=0$, אנו יודעים שעלינו לקבל חזרה את האנרגיה של חלקיק בקופסה רגילה. אבל אנרגיה זו היא $\frac{\hbar^2}{8mL^2}>0$. כלומר, קיבלנו אנרגיית ווריאציה שהיא קטנה יותר מאנרגיית מצב היסוד האמיתי, בסתירה לעיקרון הווריאציה. הסיבה לכך היא העובדה שהפתרון שבחרנו אינו מקיים את תנאי השפה, כלומר ψ אינו מתאפס בקצותיה של הקופסה.