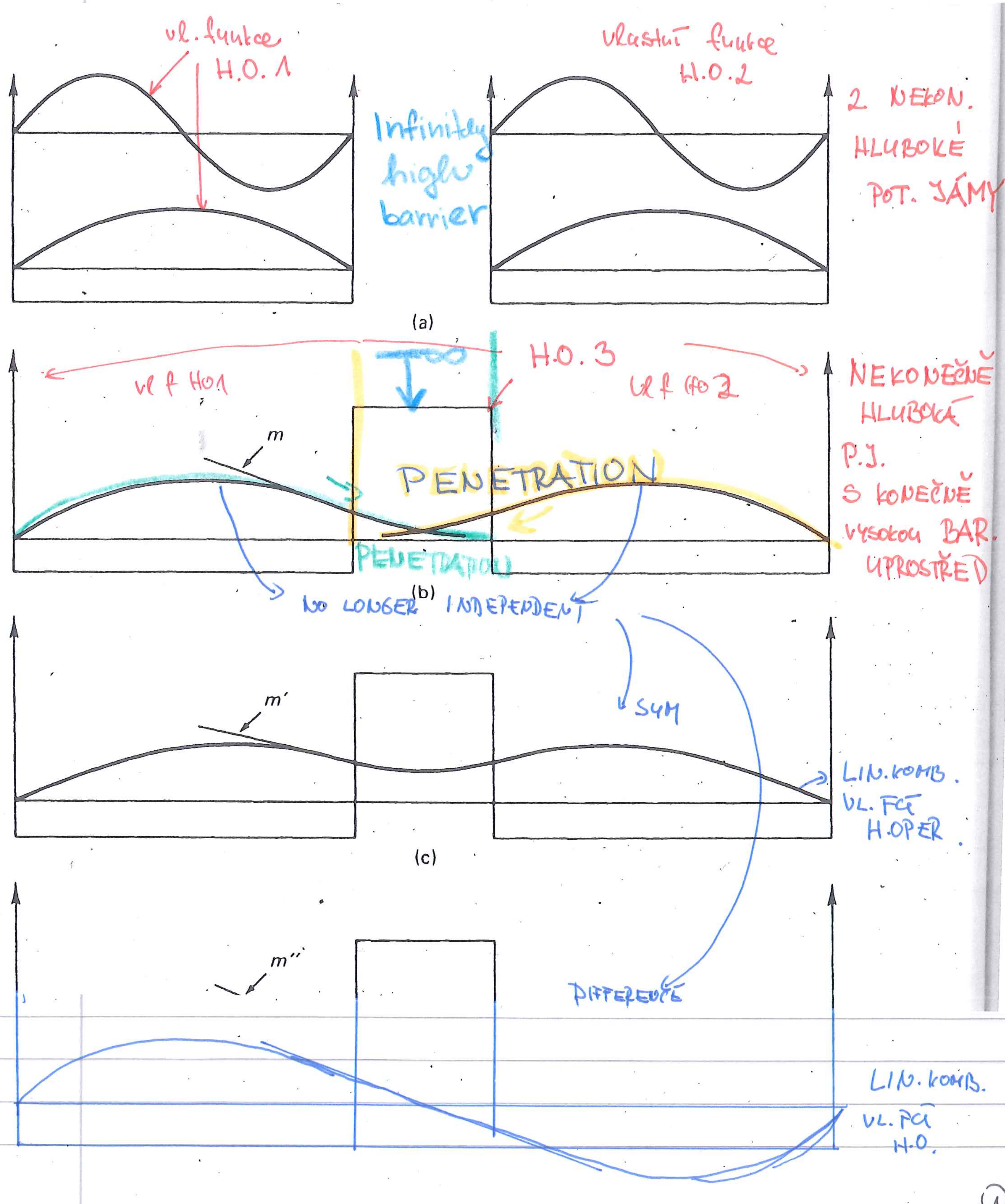
C9930, 9/4/2015 For Pavlaj: Give text, translate but not write (smaller BB)

5. VARIAČNÍ METODA A KONFIGURAČNÍ INTERAKCE

5.1. Úplnost vlastních funkcí H.O.



Když bychom využili VŠECHNY vl. f. h.o., dostaneme PŘESNÉ VYJÁDŘENÍ vl. funkce pro jámu s bariérou:

Post. VI Vlastní funkce libovolného QM operátoru odpovídajícího měřitelné veličině tvoří ÚPLNOU MNOŽINU.
(Dále lze ukázat, že tato množina se dá převést na orthonormální systém).

? Průměrná hodnota veličiny popsané operátorem $\hat{M}$ → např. $\hat{H}$ (energie)

vl. fce H, ε_1 ; vl. fce H, ε_2 , $\varepsilon_1 \neq \varepsilon_2$

pro: $\Psi = c_1 \cdot \psi_1 + c_2 \cdot \psi_2$ pro Ψ normované, ψ_1, ψ_2

Post. V pro střední H. $E_{aver} =$ $M_{av} = \dfrac{\int \Psi^* \hat{M} \Psi \, d\tau}{\underbrace{\int \Psi^* \Psi \, d\tau}_{1 \text{ pro } \Psi \text{ normované}}}$

JÁ:

Dos. $E_{av} = \int \Psi^* \hat{H} \Psi \, d\tau =$

$$= \int (c_1^* \psi_1^* + c_2^* \psi_2^*) \hat{H} (c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2) \, d\tau =$$

$$= c_1^* c_1 \int \psi_1^* \hat{H} \psi_1 \, d\tau + c_1^* c_2 \int \psi_1^* \hat{H} \psi_2 \, d\tau$$

$$+ c_2^* c_1 \int \psi_2^* \hat{H} \psi_1 \, d\tau + c_2^* c_2 \int \psi_2^* \hat{H} \psi_2 \, d\tau =$$

$$= c_1^* c_1 \int \underbrace{\psi_1^* \varepsilon_1 \psi_1 \, d\tau}_{1} + c_1^* c_2 \int \underbrace{\psi_1^* \varepsilon_2 \psi_2 \, d\tau}_{0} +$$

$$+ c_2^* c_1 \int \underbrace{\psi_2^* \varepsilon_1 \psi_1}_{0} \, d\tau + c_2^* c_2 \int \underbrace{\psi_2^* \varepsilon_2 \psi_2}_{1} \, d\tau =$$

$$= c_1^* c_1 \varepsilon_1 + c_2^* c_2 \varepsilon_2$$

Obecně $M_{av} = \sum_i c_i^* c_i \, \mu_i$ pro sadu ON vl. fú

Příklad. Je dána normovaná funkce

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{5}} \left(\psi_{2s} + 2 \cdot \psi_{2p+1} \right).$$

norm. norm

og

Určete průměrnou hodnotu $\hat{L}_z$.

Řeš: $$\langle \hat{L}_z \rangle = \frac{1}{\sqrt{5}} \cdot \frac{1}{\sqrt{5}} \cdot 0 + \frac{2}{\sqrt{5}} \cdot \frac{2}{\sqrt{5}} \cdot +1_{a.u.} =$$

$$= \frac{4}{5}_{a.u.} = 0.8 \text{ a.u.}$$

5.2. Variační PRINCIP

Rayleigh - Ritzův

Lord Rayleigh, Walter Ritz → Švýcarský teor. fyzik 1878-1909

English British physicist → NP 1904) Rayleigh scattering, Rayleigh waves

Pro každou normovanou, fyz. příj. funkci ϕ

$$H_{av} \equiv \int \phi^* \hat{H} \phi \, d\tau \geq E_0$$

kde E_0 je nejnižší vl. hodnota $\hat{H}$.

Žalm 111 Činy Páně jsou veliké, vyhledávané všemi, kdo zálibu v nich našli.

Dk: $$\phi = \sum_i c_i \psi_i \rightarrow \text{úplný ON systém}$$

$$\int \phi^* \hat{H} \phi \, d\tau = \sum_{i=0}^{n} \underbrace{c_i^* c_i}_{\substack{\geq 0 \\ \text{vždy}}} E_i \geq E_0$$

5.3. VARIAČNÍ METODA

= Metoda založená na následující myšlence: Pokud necháme tzv. ZKUŠEBNÍ FUNKCI ve směru klesající energie, ~~bude v ní narůstat podíl vlastní funkce ψ_0 přítomné v příslušné lineární kombinaci.~~ bude se zkušební fce přibližovat skutečné vl. fci (kvůli tomu v ní přimíší VF vyšší E)

Energie obecně konvergují rychleji než VF

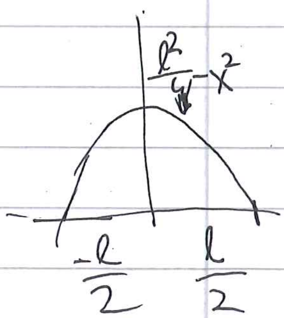
V praxi – zahrnujeme několik parametrů, úspěch závisí na schopnosti sestavit rozumnou zkušební funkci.

Př. Navrhněte zkušební funkci pro částici v 1-rozm. jámě délky l.

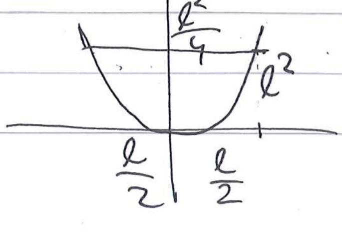
VF = 0 mimo jámu a pro $x=0$, $x=l$

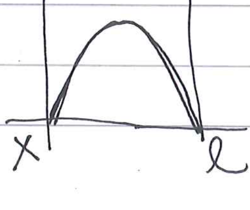
Platí (Messiah, QM): Pro základní stacionární stavy 1-rozm. problému je počet uzlů uvnitř nezřídkých bodů 0 pro ψ ZS a roste o 1 s každým následujícím exc. stavem.

žádné vnitřní uzly – nejjednodušší fce = parabola



$$\phi = x(l-x) \quad \text{pro} \quad 0 \leq x \leq l$$





$x(l-x)$

WF není normovaná

Uvnitř jámy: $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}$

$$\int \phi^* \hat{H} \phi \, d\tau = -\frac{\hbar^2}{2m}\int_0^l x(l-x)\frac{-\hbar^2 d^2}{2m\,dx^2}x(l-x)\,dx =$$

$$= \frac{-\hbar^2}{2m}\int_0^l x(l-x)\frac{d}{dx}(l-2x)\,dx =$$

$$= \frac{-\hbar^2}{2m}\int_0^l x(l-x)(-2)\,dx = \frac{2\hbar^2}{2m}\int_0^l (lx - x^2)\,dx$$

$$= \frac{\hbar^2}{m}\left[\frac{lx^2}{2} - \frac{x^3}{3}\right]_0^l = \frac{\hbar^2}{m}\left[\frac{l^3}{2} - \frac{l^3}{3}\right] =$$

$$= \frac{\hbar^2 l^3}{6m}$$

NORMA VF: $\int_0^l x^2 (l-x)^2 \, dx = \int x^2 l^2 - 2lx^3 + x^4 \, dx =$

$$= \left[\frac{x^5}{5} - \frac{2lx^4}{4} + \frac{l^2x^3}{3}\right]_0^l =$$

$$= \frac{12l^5 - 30l^5 + 20l^5}{60} = \frac{2l^5}{60} = \frac{l^5}{30}$$

$$\frac{\int \phi^* \hat{H} \phi \, d\tau}{\int \phi^* \phi \, d\tau} = \frac{\frac{\hbar^2 l^3}{6m}}{\frac{l^5}{30}} = \frac{\frac{\hbar^2}{m}}{\frac{l^2}{5}} = \frac{5\hbar^2}{ml^2} = \frac{5h^2}{4\pi^2 ml^2} =$$

$$= 0.1266515 \frac{h^2}{ml^2}$$

Pro částici v pot. jámě: $E_1 = \frac{h^2}{8ml^2} = 0.125 \frac{h^2}{ml^2}$

$E_{zkus.\,\phi} < E_{přesná\ VF}$, chyba v energii = 1.3%