5 Variační metoda

Variační metoda[13] je jedna z přibližných časově nezávislých metod v kvantové mechanice. Dalším přibližným metodám — stacionární a nestacionární poruchové metodě — se věnují sekce 11 a 13.

Nechť E_0 je přesná energie základního stavu systému popsaného Hamiltoniánem $\hat{\mathsf{H}}$. Pak pro libovolný (normalizovatelný) vektor $|\psi\rangle$ z Hilbertova prostoru $\mathcal{H}$ tohoto systému platí

$$E_0 \leq \frac{\left\langle\psi\middle|\hat{\mathsf{H}}\middle|\psi\right\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}. \tag{5.0.1}$$

Pokud máme nějakou množinu testovacích funkcí $|\theta\rangle \in \mathcal{M} \subset \mathcal{H}$, pak nám základní stav nejlépe aproximuje minumum funkcionálu

$$E_{\text{min}} = \min_{|\theta\rangle\in\mathcal{M}} E[|\theta\rangle] = \frac{\left\langle\theta\middle|\hat{\mathsf{H}}\middle|\theta\right\rangle}{\langle\theta|\theta\rangle}.$$

V praxi se užívá takové množiny vektorů $|\theta(\boldsymbol{\lambda})\rangle$, která je zcela parametrizována sadou čísel $\boldsymbol{\lambda}$. Pak

$$\boxed{E_{\text{min}} = \min_{\boldsymbol{\lambda}} E(\boldsymbol{\lambda}) = \frac{\left\langle\theta(\boldsymbol{\lambda})\middle|\hat{\mathsf{H}}\middle|\theta(\boldsymbol{\lambda})\right\rangle}{\langle\theta(\boldsymbol{\lambda})|\theta(\boldsymbol{\lambda})\rangle}}. \tag{5.0.2}$$

5.1 Aproximace základního stavu nekonečně hluboké potenciálové jámy

Pomocí variačního principu nalezněte nejlepší aproximaci základního stavu nekonečně hluboké potenciálové jámy pološířky a

$$V(x) = \begin{cases} 0 & |x| < a \\ \infty & |x| > a \end{cases} \tag{5.1.1}$$

s testovací funkcí

$$\theta_\lambda(x) = \langle x|\theta(\lambda)\rangle = a^\lambda - |x|^\lambda \tag{5.1.2}$$

a srovnejte s přesným řešením

$$E_1 = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\pi^2}{4a^2}, \tag{5.1.3a}$$

$$\phi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{a}}\cos\frac{\pi x}{2a}. \tag{5.1.3b}$$

Řešení:

K řešení se využije vztah (5.0.2), kde se minimalizace bude provádět přes jediný parametr λ. Výpočet spočívá ve dvou krocích:

[13] Běžně se označuje také jako *Ritzova variační metoda*.

1. *Výpočet střední hodnoty Hamiltoniánu pro vlnovou funkci $\theta_\lambda(x)$:*

$$
\begin{aligned}
\bar{H}(\lambda) \equiv \frac{\left\langle \theta(\lambda) \middle| \hat{\mathsf{H}} \middle| \theta(\lambda) \right\rangle}{\langle \theta(\lambda) | \theta(\lambda) \rangle} &= \frac{-\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-a}^{a} \theta_\lambda^*(x) \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} \theta_\lambda(x) \mathrm{d}x}{\int_{-a}^{a} |\theta_\lambda(x)|^2 \,\mathrm{d}x} = \\
&= \left| \begin{array}{c} \text{v čitateli i jmenovateli integrujeme sudé funkce} \\ \text{– stačí počítat na intervalu } (0; a) \end{array} \right| = \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\int_0^a \left(a^\lambda - x^\lambda\right) \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} \left(a^\lambda - x^\lambda\right) \mathrm{d}x}{\int_0^a \left(a^\lambda - x^\lambda\right)^2 \mathrm{d}x} = \\
&= \frac{\hbar^2}{2m} \lambda(\lambda - 1) \frac{\int_0^a \left(a^\lambda - x^\lambda\right) x^{\lambda-2} \mathrm{d}x}{\int_0^a \left(a^{2\lambda} - 2x^\lambda a^\lambda + x^{2\lambda}\right) \mathrm{d}x} = \\
&= \frac{\hbar^2}{2m} \lambda(\lambda - 1) \frac{\left[\frac{1}{\lambda-1} a^\lambda x^{\lambda-1} - \frac{1}{2\lambda-1} x^{2\lambda-1}\right]_0^\lambda}{\left[a^{2\lambda} x - \frac{2}{\lambda+1} a^\lambda x^{\lambda+1} + \frac{1}{2\lambda+1} x^{2\lambda+1}\right]} = \\
&= \frac{\hbar^2}{2ma^2} \lambda(\lambda - 1) \frac{\frac{1}{\lambda-1} - \frac{1}{2\lambda-1}}{1 - \frac{2}{\lambda+1} + \frac{1}{2\lambda+1}} = \\
&= \frac{\hbar^2}{2ma^2} \lambda(\lambda - 1) \frac{\frac{2\lambda-1-\lambda+1}{(\lambda-1)(2\lambda-1)}}{\frac{(\lambda+1)(2\lambda+1)-2(2\lambda+1)+\lambda+1}{(\lambda+1)(2\lambda+1)}} = \\
&= \frac{\hbar^2}{4ma^2} \frac{(\lambda+1)(2\lambda+1)}{(2\lambda-1)}.
\end{aligned}
\tag{5.1.4}
$$

2. *Výpočet minima funkce $\bar{H}(\lambda)$:*

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial \bar{H}(\lambda)}{\partial \lambda} &= 0 \\
(2\lambda + 2 + 2\lambda + 1)(2\lambda - 1) - 2(\lambda + 1)(2\lambda + 1) &= 0 \\
4\lambda^2 - 4\lambda - 5 &= 0
\end{aligned}
\tag{5.1.5}
$$

Minimum je dáno kladným kořenem

$$
\lambda_{\min} = \frac{1 + \sqrt{6}}{2} \approx 1{,}723.
\tag{5.1.6}
$$

Po dosazení vychází

$$
\begin{aligned}
E_{\min} \equiv \bar{H}(\lambda_{\min}) &= \frac{\hbar^2}{4ma^2} \frac{2\sqrt{6} + 5}{2} = \\
&= \frac{2\sqrt{6} + 5}{\pi^2} E_0 \approx \\
&\approx 1{,}00298 E_0
\end{aligned}
\tag{5.1.7}
$$

Za pozornost stojí, že i velice jednoduchá testovací funkce závislá jen na jednom jediném parametru dává velice přesný odhad energie základního stavu.