مکانیک کوانتومی ۲

روش وردشی

(Variational Method)

سعید عابدین‌پور

References:

- Section 10.4 of G. Auletta, M. Fortunato, and G. Parisi, “Quantum Mechanics”
- Section 5.4 of J. J. Sakurai and J. Napolitano, “Modern Quantum Mechanics”

روش تقریبی اختلال که قبلا با آن آشنا شدیم، در مواقعی کاربرد دارد که مساله‌ای «شبیه» به مساله اصلی مورد نظر ما قابل حل باشد. مثلا وقتی که

$$H = H_0 + V$$

و حل جمله اول هامیلتونی برایمان معلوم باشد.

- در مواقعی که قادر به پیدا کردن چنین هامیلتونی مشابه قابل حلی نباشیم، روش وردشی می‌تواند بسیار مفید باشد.

- هامیلتونی H را در نظر بگیرید (با ویژه حالتها و ویژه مقادیر نامعلوم برای ما)

$$H|n\rangle = \varepsilon_n |n\rangle \qquad n = 0, 1, 2, \ldots$$

- بطوریکه: $\varepsilon_0 < \varepsilon_1 < \ldots$

- حال فرض کنید هدف ما بدست آوردن حالت پایه و انرژی متناظر با آن یعنی $|0\rangle$ و ε_0 است.

- اگر یک بردار حالت دلخواه بهنجار مانند $|\phi\rangle$ را بعنوان حدسی برای حالت پایه در نظر بگیریم، خواهیم داشت:

اصل وردش $$E_\phi = \langle\phi|H|\phi\rangle \geq \varepsilon_0$$

- به این حالت، حالت آزمون یا trial میگوییم.

- اثبات این قضیه کاملا سر راست است. کافیست بسط حالت آزمون را در پایه ویژه حالتهای دقیق (ولیکن ناشناخته) هامیلتونی در نظر بگیریم:

$$|\phi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle \quad \text{where} \quad \sum_n |c_n|^2 = 1$$

- در این صورت خواهیم داشت:

$$E_\phi = \sum_{n,m} c_m^* c_n \langle m|H|n\rangle = \sum_n |c_n|^2 \varepsilon_n \geq \sum_n |c_n|^2 \varepsilon_0 = \varepsilon_0$$

- در اینجا از تعامد ویژه حالتهای هامیلتونی و بهنجار بودن حالت آزمون بهره برده ایم.

- حالت مساوی فقط و فقط وقتی برقرار است که حالت آزمون همان حالت پایه واقعی باشد.

$$E_\phi = \langle \phi | H | \phi \rangle \geq \varepsilon_0$$

- اولین نتیجه رابطه فوق این است که حالت آزمون، به هر میزان نادقیق هم که باشد، میتواند کران بالایی برای انرژی حالت پایه بدست دهد.
- نتیجه (بدیهی) بعدی این که حالت پایه واقعی را علی الاصول باید بتوان با جستجو در بین تمام حالتهای بهنجار مجاز، و یافتن حالتی که کمترین انرژی را دارد بدست آورد. هرچند اینکار در عمل در اغلب مواقع غیر ممکن است.

- حتی اگر اینکار در عمل ممکن نباشد، می‌توان با در نظر گرفتن حالت آزمونی که به تعدادی پارامتر وابسته است

$$E_\phi(\lambda_1, \lambda_2, \ldots) = \langle \phi_{\lambda_1,\lambda_2,\ldots} | H | \phi_{\lambda_1,\lambda_2,\ldots} \rangle$$

و کمینه کردن انرژی نسبت به آن پارامترها $\frac{\partial E}{\partial \lambda_i} = 0$ ، سعی کرد تا حد ممکن به انرژی حالت پایه نزدیک شد.

بدیهی است که کمینه کردن باید با حفظ شرط بهنجارش همراه باشد (نرم حالت را تغییر ندهد).

- اگر حالت آزمون، شکل تابعی حالت پایه واقعی را داشته باشد، عمل کمینه کردن منجر به یافتن حالت پایه واقعی خواهد شد.

مثال: حدس یک تابع گاوسی برای حالت پایه نوسانگر هماهنگ یک بعدی.

- اگر خطای حالت آزمون نسبت به حالت واقعی متناسب با ϵ باشد: $|\phi\rangle = |0\rangle + \epsilon|\delta\phi\rangle$

خطای انرژی بدست آمده برای حالت پایه، متناسب با ϵ^2 خواهد بود.

- باید از شهود فیزیکی خود برای نوشتن تابع آزمونی که رفتارهای حدی و تقارنی مورد انتظار را تا حد امکان داشته باشد بهره بگیریم. هر چه حدس بهتری داشته باشیم به میزان بیشتری به انرژی حالت پایه نزدیک خواهیم شد.

دقت: مادامی که جواب دقیق (حالت پایه واقعی) را ندانیم، هیچ راهی برای تشخیص وجود یا عدم وجود تابع آزمون بهتری که انرژی کمتری را نتیجه دهد نخواهیم داشت. در نتیجه حالت پایه واقعی سیستم عملا برایمان یک معما خواهد بود.

- برای بدست آوردن n-امین حالت برانگیخته، از همان نسخه بکار رفته برای بدست آوردن حالت پایه استفاده میکنیم، بعلاوه شرط تعامد آن حالت، بر تمام حالتهای پایینتر:

$$\langle \phi_n | \phi_m \rangle = \delta_{n,m}, \qquad \text{where} \quad m = 0, 1, \ldots, n-1$$

- **مثال:**

نوسانگر هماهنگ یک بعدی $$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

- حالت پایه دقیق: $$\psi_0(x) = \langle x|0\rangle = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left[-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right]$$

- انرژی حالت پایه: $$\varepsilon_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$$

ولی فرض کنید جواب دقیق مساله را نمیدانیم و قصد داریم به روش وردشی مساله را بررسی کنیم.

- چون پتانسیل V(x) در فواصل دور واگرا می‌شود، تمامی ویژه حالتهای سیستم مقید خواهند بود. یعنی احتمال پیدا کردن ذره در فواصل دور از x=0 باید به سمت صفر میل کند.
- همچنین تابع موج حالت پایه باید بدون گره باشد.

- تابع آزمون: $$\phi_a(x) = \frac{A}{a^2 + x^2}$$

- A ضریب بهنجارش و a یک پارامتر آزاد برای وردش است.

- شرط بهنجارش تابع آزمون:

$$\int \mathrm{d}x\,|\phi_a(x)|^2 = 1 \quad \longrightarrow \quad A = \sqrt{\frac{2a^3}{\pi}}$$

- چشمداشتی هامیلتونی نسبت به حالت آزمون:

$$E_\phi(a) = \langle \phi_a | H | \phi_a \rangle = \frac{\hbar^2}{4ma^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 a^2$$

- کمینه کردن انرژی نسبت به پارامتر آزاد:

$$\frac{dE_\phi(a)}{da} = 0 \quad \longrightarrow \quad a_0^2 = \frac{\hbar}{\sqrt{2}m\omega}$$

- انرژی کمینه برای تابع آزمون:

$$E_\phi(a_0) = \frac{\sqrt{2}}{2}\hbar\omega \approx \frac{1.414}{2}\hbar\omega$$

- البته عدد بدست آمده چندان دقیق نیست (بیش از چهل درصد خطا دارد). دلیل این مساله انتخاب تابع آزمونی است که با آهنگ بسیار کندتری، از آنچه که باید، در فواصل دور کوچک می‌شود ($1/x^2$ بجای افت نمایی)

- بررسی کنید: اگر تابع آزمون انتخابی بشکل زیر بود

$$\phi_a(x) = Ae^{-ax^2}$$

پس از کمینه کردن انرژی نسبت به پارامتر آزاد a انرژی و حالت پایه دقیق سیستم بدست می‌آمد.