Cvičení 3: Variační princip a WKB.

Motivace: Použití variačního principu a metody WKB k určení energie vázaných stavů.

Úloha 1 - Kvantovnání matematického kyvadla

Hamiltonián kvantového matematického kyvadla je

$$H = -\frac{\hbar^2}{2I}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\varphi} - A\cos\varphi,$$

kde I, A jsou kladné konstanty a $\phi \in \langle 0, 2\pi \rangle$ je poloha kyvadla. Pomocí variačního principu najděte energii základního stavu tohoto systému. Hledejte nejlepší odhad řešení na množině funkcí (funkce už je normovaná)

$$\psi_\alpha(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\cos\alpha + \frac{1}{\sqrt{\pi}}\sin\alpha\cos\varphi,$$

kde α je variační parametr. Řešte nejdříve obecně a nakonec vyčíslete energii pro $A = \hbar^2/\sqrt{8}I$.
Poznámky:

- Hilbertův prostor systému tvoří periodické, kvadraticky integrovatelné funkce na intervalu $\langle 0, 2\pi \rangle$
- Rozmyslete si, že množina funkcí na níž minimalizujeme funkcionál energie odpovídá prvním třem členům rozvoje do Fourierovy řady, s uvážením faktu, že funkce základního stavu je sudá.
- Jak byste modifikovali postup, pokud byste chtěli nalézt první excitovaný stav? (parita)
- Jak další stavy? (Hylleraas-Undheim theorem)

Úloha 2 - Potenciál nabité mřížky

Nalezněte stacionární stavy částice v jedné dimenzi popsané hamiltoniánem

$$H\psi(q) = -\psi''(q) + |q|\psi(q) = \epsilon\psi(q).$$

Podrobnější pokyny:

a) Zvolte vhodnou třídu funkcí a nalezněte energii základního stavu pomocí variačního principu (například $\psi(q) = \exp(-\alpha q^2)$). Pokuste se z variačního principu nalézt také první excitovaný stav.

b) Nalezněte energie vázaných stavů pomocí metody WKB.

c) Získané výsledky porovnejte s přesným řešením.

Poznámky: Přesné řešení můžete vyjádřit pomocí Airyho funkce, tj. řešení rovnice $Ai''(x) = xAi(x)$, které je omezené pro všechna x. Stačí si uvědomit, jak lze pomocí $Ai(x)$ napsat zvlášť řešení pro $x > 0$ a zvlášť pro $x < 0$ a jaké jsou podmínky napojování v $x = 0$. Přesné energie pak vyjádřete pomocí kořenů funkce $Ai(x)$ a její derivace.

Úloha 3 - Metoda stacionární fáze, asymptotika $Ai(x)$.

Airyho funkci, kterou jsme potřebovali v minulé úloze jsme odvodili minulý semestr pomocí řešení stacionární Schrödingerovy rovnice pro lineární potenciál v p-reprezentaci. Nalezli jsme vzorec

$$Ai(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\left(\frac{1}{3}t^3 + xt\right)} \mathrm{d}t.$$

Použitím metody stacionární fáze odvoďte asymptotickou formuli

$$Ai(x \to -\infty) \simeq \frac{1}{\sqrt{\pi\sqrt{|x|}}} \cos\left(\frac{2}{3}|x|^{\frac{3}{2}} - \frac{\pi}{4}\right).$$

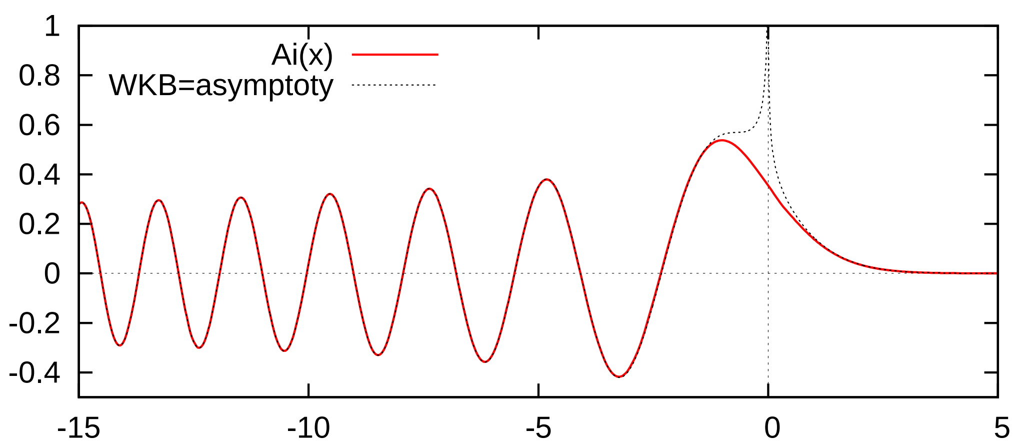
Ukažte pomocí Cauchyovy věty, že ve formuli pro Airyho funkce lze integrovat v komplexní rovině pomocí konturu $t = s + i\sqrt{x}, s \in (-\infty, \infty)$. Použijte metodu stacionární fáze pro tento kontur pro odvození vzorce

$$Ai(x \to \infty) \simeq \frac{1}{2\sqrt{\pi\sqrt{|x|}}} \exp\left(-\frac{2}{3}|x|^{\frac{3}{2}}\right).$$

Srovnejte tyto výsledky s řešením rovnice pro lineární potenciál pomocí WKB a ukažte, že to odpovídá napojovací formuli pro WKB mezi klasicky dovolenou a klasicky zakázanou oblastí

$$\frac{2}{\sqrt{|p(x)|}} \cos\left(\frac{1}{\hbar}\left|\int_a^x p(q)dq\right| - \frac{\pi}{4}\right) \leftrightarrow \frac{1}{\sqrt{|p(x)|}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar}\left|\int_a^x p(q)dq\right|\right)$$

Dodatek - Tabulka kořenů Airyho funkce a její derivace



n	$Ai(x) = 0$	$Ai'(x) = 0$
1	x=-2.3381074105	x=-1.0187929716
2	x=-4.0879494441	x=-3.2481975822
3	x=-5.5205598281	x=-4.8200992112
4	x=-6.7867080901	x=-6.1633073556
5	x=-7.9441335871	x=-7.3721772550