Cvičení 2: Variační princip.

Motivace: Použití variačního principu k určení energie vázaných stavů.

Úloha 1 - Kvantovnání matematického kyvadla

Hamiltonián kvantového matematického kyvadla je

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

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

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

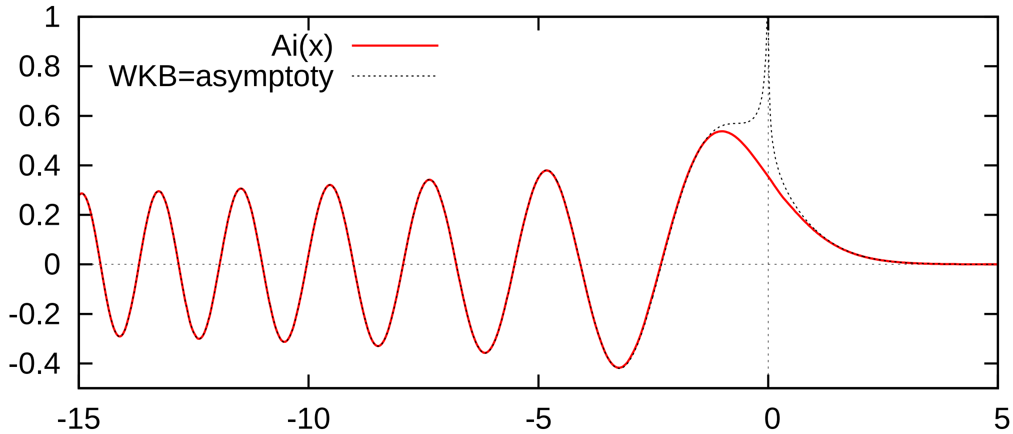
Podrobnější pokyny:

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) 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.

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

Úloha 3 - Částice v kruhové potenciálové jámě

Najděte energie vázaných stavů částice s hmotností m v nekonečně hluboké potenciálové jámě ve tvaru kruhu (ve 2D) o poloměru a. Úlohu řešte v polárních souřadnicích. Pokuste se navrhnout vhodnou vlnovou funkci, která vyhovuje vaší intuici o tom jak by měl vypadat základní (první excitovaný) stav a pro kterou umíte vyčíslit funkcionál energie.

Nakonec můžete srovnat s přesným řešením úlohy, které lze vyjádřit pomocí řešení $J_m(x)$ Besselovy rovnice

$$f''(x) + \frac{1}{x}f'(x) + \left[1 - \frac{m^2}{x^2}\right] f(x) = 0.$$

Kořeny Besselových funkcí jsou dány v následující tabulce

	J_0	J_1	J_2
1	2.4048	3.8317	5.1356
2	5.5201	7.0156	8.4172
3	8.6537	10.1735	11.6198