Lekce VII | VARIAČNÍ PRINCÍPY V ROZPTYLU

- Rozšíření Rayleigh – Ritzovi metody pro vázané stavy $\in L^2$
  - RR metoda dáva aproximaci vlnové fce i aproximaci energie
  - není vlastní stav ani vlastní číslo $\hat{H}$

1. Kohnova metoda – počátky patří Hulténovi 1944

$$\left[-\frac{d^2}{dr^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + 2V(r) - k^2\right] u_\ell(r) = 0$$

$$L_\ell(E)\, u_\ell(r) = 0$$

- Definujme fcionál

$$I_\ell = \int_0^\infty \bar{u}_\ell(r)\, L_\ell(E)\, \bar{u}_\ell(r) \qquad \text{pro testovací řešení } \bar{u}_\ell(r)$$

A.) $\bar{u}_\ell(0) = 0$

B.) $\bar{u}_\ell(r) \xrightarrow{r\to\infty} F_\ell(kr) + \lambda\, G_\ell(kr)$ … F_ℓ, G_ℓ lineárně nezávislé řešení pro $V(r)=0$

- Funkcionál $I_\ell = 0$ pro $\bar{u}_\ell = u_\ell$.
- Co se stane s I_ℓ když $\bar{u}_\ell(r) = u_\ell(r) + \delta u_\ell(r)$?

A.) $\delta u_\ell(0) = 0$

B.) $\delta u_\ell(r) \xrightarrow{r\to\infty} \delta\lambda\, G_\ell(kr)$

$$\delta I_\ell = \int_0^\infty \delta u_\ell\, L_\ell\, u_\ell\, dr + \underbrace{\int_0^\infty u_\ell\, L_\ell\, \delta u_\ell\, dr}_{(A)} + \int_0^\infty \delta u_\ell\, L_\ell\, \delta u_\ell\, dr$$

(A) jediný nesymetrický (nehermitovský) operátor na třídě fcí $u_\ell(r), \delta u_\ell(r)$ je kinetická energie $-\frac{d^2}{dr^2}$:

$$-\int_0^R u_\ell \frac{d^2}{dr^2}\delta u_\ell = -\left[u_\ell \frac{d}{dr}\delta u_\ell\right]_0^R + \int_0^R \frac{du_\ell}{dr}\frac{d\delta u_\ell}{dr} = \underbrace{-\left[u_\ell \frac{d}{dr}\delta u_\ell\right]_0^R + \left[\delta u_\ell \frac{d}{dr} u_\ell\right]_0^R}_{\delta u_\ell \frac{d}{dr}u_\ell - u_\ell \frac{d}{dr}\delta u_\ell\Big|_R} - \int_0^R \delta u_\ell \frac{d^2}{dr^2} u_\ell \;;$$

$k\,\delta\lambda\, W(G,F) = W(\delta u_\ell, u_\ell) \leftarrow \delta u_\ell \frac{d}{dr}u_\ell - u_\ell \frac{d}{dr}\delta u_\ell\Big|_R$

$$\delta I_\ell = 2\int_0^\infty \delta u_\ell \underbrace{L_\ell u_\ell \, dr}_{0} + k\,\delta\lambda \underbrace{W(G,F)}_{-W(F,G)=-W} + \int_0^\infty \delta u_\ell L_\ell \delta u_\ell$$

$$\boxed{\delta I_\ell = -kW\delta\lambda + \int_0^\infty \delta u_\ell L_\ell \delta u_\ell}$$ – Katova identita (Kato)

$$\boxed{[\lambda] = \bar\lambda + \frac{1}{kW}\int_0^\infty \bar u_\ell L_\ell \bar u_\ell}$$ ← Kohnův variační princip

Výběr asymptotiky $F_\ell(kr)$, $G_\ell(kr)$:

1.) ~~reálná asymptotika~~ $F_\ell(kr) = \sin(kr - \frac{\ell\pi}{2})$

$G_\ell(kr) = \cos(kr - \frac{\ell\pi}{2})$

$$u_\ell(r) \xrightarrow{r\to\infty} \sin(kr - \frac{\ell\pi}{2}) + \lambda\cos(kr - \frac{\ell\pi}{2})$$

$$\boxed{\begin{aligned} W(F_\ell, G_\ell) &= -1 \\ \lambda &= \operatorname{tg}\delta_\ell \end{aligned}}$$

Kohn

$$[\operatorname{tg}\delta_\ell] = \overline{\operatorname{tg}\delta_\ell} - \frac{1}{k}\int_0^\infty \bar u_\ell L_\ell \bar u_\ell$$

2.) ~~reálná asymptotika~~ $F_\ell(kr) = \cos(kr - \frac{\ell\pi}{2})$

$G_\ell(kr) = \sin(kr - \frac{\ell\pi}{2})$

Rubinow (Inverzní Kohnův VP)

$$\boxed{\begin{aligned} W(F_\ell, G_\ell) &= +1 \\ \lambda &= \operatorname{cotg}\delta_\ell \end{aligned}}$$

$$[\operatorname{cotg}\delta_\ell] = \overline{\operatorname{cotg}\delta_\ell} + \frac{1}{k}\int_0^\infty \bar u_\ell L_\ell \bar u_\ell$$

3.) $u_\ell(r) \xrightarrow{r\to\infty} \sin(kr - \frac{\ell\pi}{2} + \delta)$

Hulthén

$$[\delta_\ell] = \bar\delta_\ell + \frac{1}{k}\int_0^\infty \bar u_\ell L_\ell \bar u_\ell$$

Kohnova metoda – pokračování, řešení v bazi

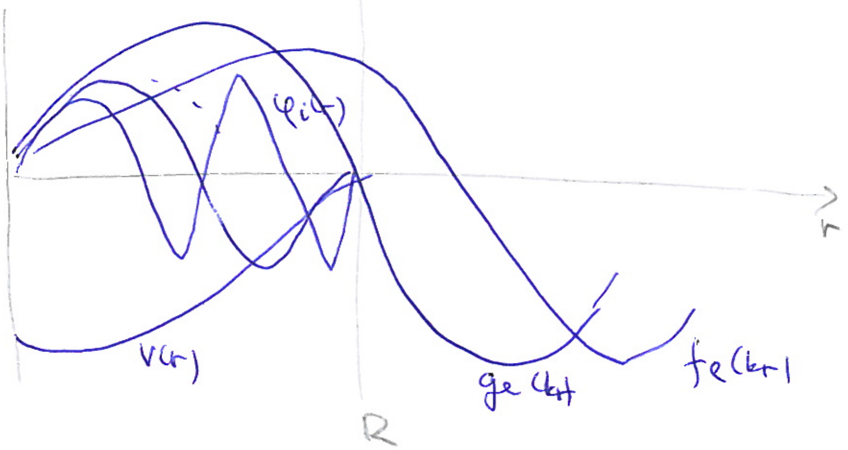
Pro potenciál $V(r)$ zanedbatelný pro $r > R$:

$$\bar{u}_\ell(r) = f_\ell(kr) + \bar{\lambda}\, g_\ell(kr) + \sum_{i=1}^{N} c_i \varphi_i(r)$$ baze má $N+2$ členů

A.) $\varphi_i(0) = 0$

B.) $\varphi_i(r) = 0$ pro $r > R$

C.) $f_\ell(0) = g_\ell(0) = 0$



$$[\lambda] = \bar{\lambda} + \frac{1}{kW}\int_0^\infty \Big[f_\ell(kr) + \bar{\lambda} g_\ell(kr) + \sum_{i=1}^{N} c_i\varphi_i(r)\Big] L \Big[f_\ell(kr) + \bar{\lambda} g_\ell(kr) + \sum_{i=1}^{N} c_i\varphi_i(r)\Big]$$

Variace:

1.) $$\frac{\partial[\lambda]}{\partial\bar{\lambda}} = 0 = 1 + \frac{1}{kW}\int_0^\infty g_\ell L \bar{u}_\ell + \frac{1}{kW}\int_0^\infty \bar{u} L g_\ell$$

$$= 1 + \frac{2}{kW}\int_0^\infty g_\ell L \bar{u}_\ell + \frac{1}{kW}\underbrace{W(g_\ell, \bar{u}_\ell)}_{-Wk}$$

$$\Rightarrow \int_0^\infty g_\ell L \bar{u}_\ell = 0$$

2.) $$\frac{\partial[\lambda]}{\partial c_j} = 0 = \int_0^\infty \varphi_j L \bar{u}_\ell = 0$$

$\varphi_0 \equiv g_\ell$

$c_0 \equiv \lambda$

$$\int_0^\infty \varphi_j L\Big(f_\ell + \sum_{i=0}^{N} c_i\varphi_i\Big) = 0 \Rightarrow \boxed{Mc + s = 0}$$

$$\boxed{c = -M^{-1}s}$$

vektorově

$$M_{ij} = \int_0^\infty \varphi_i L \varphi_j$$

M závisí na energii

$$s_i = \int_0^\infty \varphi_i L f_\ell$$

- Inverze přináší Kohnovy anomálie pro reálné funkce f_ℓ a g_ℓ.
- Problém řeší volba $g_\ell = i\,(F_\ell(kr) - i\,G_\ell(kr))$

— Komplexní Kohnova metoda

Schwingrův variační princip

Schwingrovy přednášky na Harvardu → pub. 1947.

- Variační metoda na LS rovnici
- Off-shell variační metoda

Identity budeme pracovat s retardovaným $G_0^{(+)}$

A. $|p^+\rangle = |p\rangle + G_0^{(+)} V |p^+\rangle \qquad / \langle p'^- | V$

B. $\langle p'^- | = \langle p' | + \langle p'^- | V G_0^{(+)}$

$$\langle p'^- | V | p^+\rangle = \underbrace{\langle p'^- | V | p\rangle}_{\langle p' | T | p\rangle} + \langle p'^- | V G_0^{(+)} V | p^+\rangle$$

C. $\langle p' | T | p\rangle = \langle p'^- | V - V G_0^{(+)} V | p^+\rangle$

$\overline{p'^-}$ a $\overline{p^+}$ jsou aprox. řešení (testovací řešení)

z C. plyne:

$$\langle p' | T | p\rangle = \langle \overline{p'^-} - p'^- | V - V G_0^{(+)} V | \overline{p^+} - p^+\rangle - \langle \overline{p'^-} | V - V G_0^{(+)} V | \overline{p^+}\rangle$$
$$+ \underbrace{\langle \overline{p'^-} | V - V G_0^{(+)} V | p^+\rangle}_{A.\ V|p\rangle} + \underbrace{\langle p'^- | V - V G_0^{(+)} V | \overline{p^+}\rangle}_{B.\ \langle p' | V | \overline{p^+}\rangle}$$

Takže:

$$\boxed{\begin{aligned}\langle p' | T | p\rangle = {} & \langle \overline{p'^-} | V | p\rangle + \langle p' | V | \overline{p^+}\rangle - \langle \overline{p'^-} | V - V G_0^{(+)} V | \overline{p^+}\rangle \\ & + \langle \Delta p'^- | V - V G_0^{(+)} V | \Delta p^+\rangle\end{aligned}} \quad \text{Identita}$$

kdyby $\overline{p'^-}$ a $\overline{p^+}$ byly exaktní tak máme

$$\langle p' | T | p\rangle = \langle p' | T | p\rangle + \langle p' | T | p\rangle - \langle p' | T | p\rangle + \emptyset$$

$$\boxed{[\langle p' | T | p\rangle] = \langle \overline{p'^-} | V | p\rangle + \langle p' | V | \overline{p^+}\rangle - \langle \overline{p'^-} | V - V G_0^{(+)} V | \overline{p^+}\rangle + \mathcal{O}(\Delta^2)}$$

Lineární forma Schwing. VP

Poznámka: Dá se místo $t = t + t - t$ taky zkusit $t = \frac{t \cdot t}{t}$?

jinými slovy, je:

$$\langle p'|T|p\rangle = \frac{\langle p'|V|p+\rangle\langle p'-|V|p\rangle}{\langle p'-|V - VG_0^{(+)}V|p^+\rangle}$$ variačně stabilní ?

Nápověda: $t\left[1+\frac{\alpha h^2}{t^2+aht+bh^2}\right]$

Příklady substitucí ve SVP: (snaha obejít 9-dim integrál)

1.) $|q+\rangle = V|p+\rangle$

$\langle q'-| = \langle p'-|V$

$[\langle p'|T|p\rangle] = \langle p'|q+\rangle + \langle q'-|p\rangle - \langle q'-|V^{-1} - G_0^{(+)}|q+\rangle$

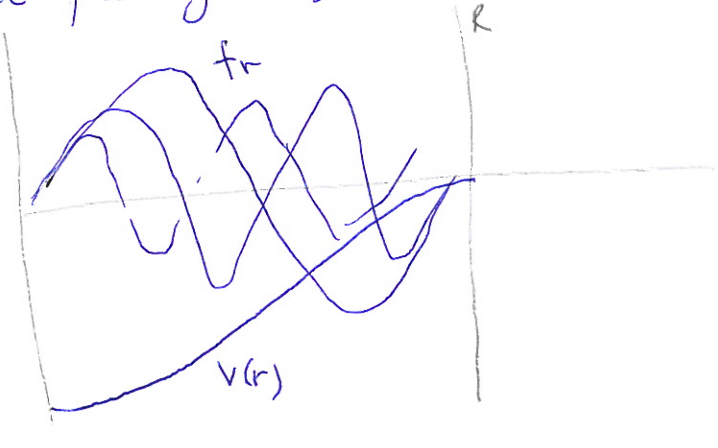
2.) Částečná substituce, kompromis mezi dimenzí integrace a inverzí V

$\langle q'-| = \langle p'-|V$

$[\langle p'|T|p\rangle] = \langle p'|V|p+\rangle + \langle q'-|p\rangle - \langle q'-|1 - G_0^{(+)}V|p+\rangle$

Schwingrův VP v bázi

- Srovnání s Kohn VP → pro V konečného dosahu stačí L^2 báze
  protože $|p'-\rangle$ a $|p^+\rangle$ jsou vždy násobeny potenciálem
- nestaráme se o okrajové podmínky (asymptotiku), jsou v $G_0^{(+)}$



$$|p^+\rangle = \sum_r b_r |f_r\rangle$$

$$|p'^-\rangle = \sum_s c_s |f_s\rangle$$

$$[\langle p'|T|p\rangle] = \sum_r b_r \langle p'|V|f_r\rangle + \sum_s c_s \langle f_s|V|p\rangle$$

$$- \sum_{rs} b_r c_s \langle f_s|V - VG_0^{(+)}V|f_r\rangle$$

$$\boxed{\begin{aligned} &1.)\quad \frac{\partial [\langle p'|T|p\rangle]}{\partial b_r} = 0 \\ &2.)\quad \frac{\partial [\langle p'|T|p\rangle]}{\partial c_s} = 0 \end{aligned}}$$

1.) $$c_s = \sum_r \langle p'|V|f_r\rangle D_{rs}$$

2.) $$b_r = \sum_s D_{rs} \langle f_s|V|p\rangle$$

$$\boxed{(D^{-1})_{rs} = \langle f_r|V - VG_0^{(+)}V|f_s\rangle}$$

Po dosazení (všechny 3 členy jsou stejné)

$$\boxed{[\langle p'|T|p\rangle] = \sum_{rs} \langle p'|V|f_r\rangle D_{rs} \langle f_s|V|p\rangle}$$

- Výhody: nezávislost na normalizaci $|p^+\rangle$ a $|p'^-\rangle$
  libovolná L^2 baze $|f_r\rangle$

Rovnice je východisko pro Schwinger-Lanczos metodu kde generujeme postupně bazi $|f_r\rangle$ takovým způsobem aby se minimalizoval počet členů v 2-sumaci