

Kvantová fyzika, předmět KFY/7KVAF

ZS 2021/2022

Téma 7: Variační metoda

1. Najděte stacionární body funkce $f(x, y, z) = 2x^2 + y^2 + 2z - xy - xz$.
2. Metodou Lagrangeových multiplikátorů nalezněte vázané extrémy funkce $f(x, y) = x^2 + y^2$ s vazbou $g(x, y) = 3x - y + 1$. [Nápověda: najděte lokální extrémy Lagrangeovy funkce $L(x, y, \lambda) = f(x, y) + \lambda \cdot g(x, y)$.]
3. Ukažte, že pro nedegenerované čistě diskrétní spektrum platí pro funkcionál $E(\psi) = \frac{\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \geq E_0$, kde $|\psi\rangle$ je vlastní funkcí hamiltoniánu \hat{H} a E_0 je nejmenší vlastní hodnota tohoto operátoru. [Nápověda: pro nedegenerované čistě diskrétní spektrum platí $\hat{H}|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle$, $n = 0, 1, 2, \dots$ a vlnovou funkci tedy můžeme psát $|\psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n |\psi_n\rangle$.]
4. Ukažte použitím variační metody, že v jednorozměrné potenciálové jámě $V(x) = -V_0$ pro $-a \leq x \leq a$ a $V(x) = 0$ pro $a \geq |x|$ existuje vždy aspoň jeden vázaný stav. [Nápověda: Použijte zkušební vlnovou funkci s jedním parametrem α ve tvaru $\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\alpha}} \exp(-\frac{|x|}{2\alpha})$ a ukažte, že střední hodnota celkové energie (hamiltoniánu) $\langle \hat{H} \rangle = \langle \hat{T} \rangle + \langle \hat{V} \rangle$ je záporná.]
5. Pomocí variační metody spočítejte základní stav atomu vodíku. Využijte zkušební vlnovou funkci ve tvaru $\psi(r) = e^{-\alpha r}$.
6. Předpokládejme zkušební vlnovou funkci s jedním parametrem Z_e pro dvojelektronový iont s nábojem jádra Z ve tvaru $\psi(r_1, r_2) = \frac{Z_e^3}{\pi a_0^3} \exp(-\frac{Z_e r_1}{a_0}) \exp(-\frac{Z_e r_2}{a_0})$. Variační integrál W už budeme mít přímo k dispozici (bez výpočtu) jako $W(Z_e) = (Z_e^2 - 2ZZ_e + \frac{5}{8}Z_e) \frac{e^2}{a_0}$. Nalezněte a) optimální hodnotu variačního parametru Z_e a odpovídající hodnotu variačního integrálu W (pro obecný náboj jádra Z) a b) pomocí těchto vyjádření dopočítejte celkové energie iontů/atomů pro $Z = 1 - 8$ a srovnajte s hodnotami z experimentu (např. pomocí relativní chyby v procentech):

$Z = 1$	H ⁻	-14,35 eV
$Z = 2$	He	-78,98 eV
$Z = 3$	Li ⁺	-198,02 eV
$Z = 4$	Be ²⁺	-371,5 eV
$Z = 5$	B ³⁺	-599,3 eV
$Z = 6$	C ⁴⁺	-881,6 eV
$Z = 7$	N ⁵⁺	-1218,3 eV
$Z = 8$	O ⁶⁺	-1609,5 eV