The variational principle مبدأ التغاير

تقول نظرية التغاير ان القيمة المتوقعة للطاقة لاي دالة موجية تساوي او اكبر من طاقة المستوي المستقر (المستوي الارضي) وهذه النتيجه توفر اداة جيدة لحساب طاقات الحد الاعلى من طاقة الاستقرار

لدينا مؤثر الهاملتونين الذي لا يعتمد على الزمن $\hat{H}$ ومجموعة دواله الذاتية (دوال الهاملتونين) $|\Psi_n>$ و طاقات ذاتية E_n وهذه تحقق معادلة شرودنجر غير المعتمدة على الزمن

$$\hat{H}|\Psi_n> = E_n|\Psi_n>$$

ولاي دالة فان القيمة المتوقعة للطاقة اكبر من او تساوي طاقة الاستقرار

$$\langle \hat{H} \rangle = \frac{\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \geq E_g$$

E_g تمثل طاقة الاستقرار وعلاقة المساواة تتم فقط عندما تساوي الدالة $|\Psi>$ دالة الاستقرار .

برهان هذه النظرية سهل جدا لذلك سنوسع الدالة $|\Psi>$ بدلالة الدوال الذاتية للهاملتونين

$$|\Psi\rangle = \sum_n C_n |\Psi_n\rangle$$

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = 1 = \left\langle \sum_m C_m \Psi_m \middle| \sum_n C_n \Psi_n \right\rangle$$

$$1 = \sum_m \sum_n C_m^* C_n \langle \Psi_m | \Psi_n \rangle$$

$$1 = \sum_n |C_n|^2$$

لان $\langle \Psi_m | \Psi_n \rangle = \delta_{mn}$

$$\langle \hat{H} \rangle = \left\langle \sum_m C_m \Psi_m \middle| \hat{H} \middle| \sum_n C_n \Psi_n \right\rangle$$

$$= \sum_m \sum_n C_m^* C_n \left\langle \Psi_m \middle| \hat{H} \middle| \Psi_n \right\rangle$$

$$= \sum_m \sum_n C_m^* C_n E_n \left\langle \Psi_m \mid \Psi_n \right\rangle$$

$$= \sum_m \sum_n C_m^* C_n E_n \delta_{mn}$$

$$\left\langle \hat{H} \right\rangle = \sum_n E_n \left| C_n \right|^2$$

بما ان $E_g \le E_n$

$$\therefore \left\langle \hat{\mathrm{H}} \right\rangle \ge E_g \sum_n \left| C_n \right|^2 = E_g$$

<u>مثال (1):</u>

افترض ان الهاملتونين للمتذبذب التوافقي ببعد واحد هو $\hat{H} = (-\frac{d^2}{d\eta^2} + \eta^2)\frac{\hbar w}{2}$ أذ ان $\eta = \sqrt{\frac{mw}{\hbar}}\, \mathrm{x}$

استخدم نظرية التغاير مع الدالة التجريبيه $\Psi = A\eta\left(a - \eta^2\right)$ وان $\eta^2 \langle a$

$\Psi = 0$ عندما $\eta^2 \ge a$ وهنا A يمثل ثابت المعايرة

جد ثابت المعايرة A

جد القيمة المتوقعة للطاقة

هل القيمه المتوقعة تمثل طاقة الاستقرار

الحل:

لدينا $\eta^2 \langle\, a \Rightarrow\ -\sqrt{\mathrm{a}}\, \langle\, \eta\, \langle\, \sqrt{a}$

1- معايرة الدالة

$$\left\langle \Psi \middle| \Psi \right\rangle = 1 = \left| A \right|^2 \int_{-\sqrt{a}}^{\sqrt{a}} \eta^2 (a - \eta^2)^2 \, d\eta$$

1

$$1 = |A|^2 \frac{16}{3x35} \mathrm{a}^{7/2}$$

$$|A|^2 = \frac{3x35}{16\ \mathrm{a}^{7/2}}$$

2- يجب ان نجد $J(a)$ او $E(a)$ والتي تمثل القيمة المتوقعة

$$J(a) = E(a) = \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle = \frac{1}{2}\hbar w |\mathrm{A}|^2 \int_{-\sqrt{\mathrm{a}}}^{\sqrt{a}} \eta\,(\mathrm{a} - \eta^2)\left(-\frac{d^2}{d\eta^2} + \eta^2\right)\eta\,(\mathrm{a} - \eta^2)\,d\eta$$

$$= \frac{1}{2}\hbar w |\mathrm{A}|^2 \int_{-\sqrt{\mathrm{a}}}^{\sqrt{a}} \left(6\eta^2 a + a^2\eta^4 - a\eta^6 - 6\eta^4 - a\eta^6 + \eta^8\right) d\eta$$

$$= \frac{4}{5}\hbar w \left(a^{5/2} + \frac{2}{7x9} a^{9/2}\right)$$

3- الان علينا ايجاد مشتقة $J(a)$ بالنسبة لعامل التغاير a ثم جعل المشتقة تساوي صفر

$$\frac{\partial J(a)}{\partial a} = \frac{\partial E(a)}{\partial a} = \frac{21\hbar \mathrm{w}}{4}\left(-a^{-2} + \frac{2}{7x9}\right) = 0$$

$$a^2 = \frac{63}{2}$$

$$J(a) = E(a) = E_0 = \sqrt{\frac{7}{2}}\ \hbar \mathrm{w}$$

هذه الطاقة لا تمثل طاقة الاستقرار للمتذبذب التوافقي وهذا واضح من شكل الدالة فهي دالة فردية وليست زوجية فهي تمثل حالة متهيجه.

مثال (2):

عندما تستخدم الدالة التجريبية ذات الشكل $\Psi(x)=\dfrac{A}{x^2+\alpha^2}$ لتقدير طاقة المستوي المستقر للمذبذب التوافقي فان القيمة المتوقعة وجدت انها تساوي $|A|^2\left(\dfrac{\pi\hbar^2}{8m\alpha^5}+\dfrac{\pi k}{4\alpha}\right)$ أذ ان A ثابت المعايرة α هو عامل التغير واخيرا k يمثل ثابت النابض.

جد 1- A 2- القيمة المتوقعه للطاقة

الحل:

1- نعاير الدالة لايجاد الثابت A

$$\int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*(x)\Psi(x)dx=1$$

$$=|A|^2\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dx}{(x^2+\alpha^2)^2}=|A|^2 2\int_{0}^{\infty}\frac{dx}{(x^2+\alpha^2)^2}$$

ليكن $x=\alpha\tan(\vartheta)$ لذلك $x=0\Rightarrow\vartheta=0$ وان $x=0\Rightarrow\vartheta=0$ ، $dx=\alpha\sec^2\vartheta d\vartheta$

$$1=|A|^2\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dx}{(x^2+\alpha^2)^2}=|A|^2 2\int_{0}^{\pi/2}\frac{\alpha\sec^2\vartheta d\vartheta}{\left(\alpha^2\tan^2\vartheta+\alpha^2\right)^2}\text{ ،}$$

$$1=|A|^2 2\int_{0}^{\pi/2}\frac{\alpha\sec^2\vartheta d\vartheta}{\left(\alpha^2\sec^2\vartheta\right)^2}$$

$$1=|A|^2\frac{2}{\alpha^3}\int_{0}^{\pi/2}\cos^2\vartheta d\vartheta=|A|^2\frac{2}{\alpha^3}\int_{0}^{\pi/2}\frac{1-\cos(2\vartheta)}{2}d\vartheta$$

$$1=|A|^2\frac{2}{\alpha^3}\left(\frac{\pi}{4}\right)$$

$$A=\sqrt{\frac{2\alpha^3}{\pi}}$$

ولايجاد طاقة الاستقرار يجب ان نجد اولا

$$J(\alpha)=E(\alpha)=|A|^2\left(\frac{\pi\hbar^2}{8m\alpha^5}+\frac{\pi k}{4\alpha}\right)=\left(\frac{\hbar^2}{4m\alpha^2}+\frac{k}{2}\alpha^2\right)$$

$$\frac{\partial J(\alpha)}{\partial \alpha} = \frac{\partial E(\alpha)}{\partial \alpha} = \frac{\partial \langle \hat{H} \rangle}{\partial \alpha} = \left(-\frac{2\hbar^2}{4m\alpha^3} + k\alpha \right) = 0$$

$$\alpha_0^2 = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2km}}$$

$$J(\alpha_0) = E(\alpha_0) = \langle \hat{H} \rangle_{\min} = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{2k}{m}}\hbar + \frac{k}{2}\sqrt{\frac{1}{2m\hbar}}\hbar$$

$$= \frac{1}{2}\sqrt{2}\hbar w$$

$$E = 0.7\hbar w$$

مثال (3):

برهن البديهية التالية مستخدما مبدأ التغاير : أذا كان $< \Psi|\Psi_{gs} > = 0$ فان $< H > \geq E_{fe}$ وان E_{fe} تمثل طاقة الحالة المتهيجة الاولى.

لنكتب الدالة بالصيغة المعروفة اي بدلالة مجموعة دوال الهاملتونين

$$\Psi = \sum_{n=1}^{\infty} C_n \Phi_n$$

اذا ان Φ_1 تمثل دالة الاستقرار وبما ان

$$< \Psi|\Phi_1 > = 0$$

$$\sum_{n=1}^{\infty} C_n < \Psi|\Phi_1 >= C_1 = 0$$

اي ان ثابت عامل دالة الاستقرار يساوي صفر

$$< H > = \sum_{n=2}^{\infty} |C_n|^2 < \Phi_n|H|\Phi_n >$$

$$< H > = \sum_{n=2}^{\infty} |C_n|^2 E_n < \Phi_n|\Phi_n >$$

$$< H > = \sum_{n=2}^{\infty} |C_n|^2 E_n \geq E_{fe} \sum_{n=2}^{\infty} |C_n|^2$$

$$= E_{fe}$$

لان E_n اكبر من E_{fe} لكل قيم n ماعدا $n = 1$

سؤال:

جد افضل تحديد على طاقة المستوي المتهيج الاول للمتذبذب التوافقي البسيط ببعد واحد مستخدما الدالة التجريبية $\Psi(x) = Ax\exp(-bx^2)$

مثال (4):

متذبذب توافقي ذو بعد واحد طاقته الكلية $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} - \alpha\delta(x)$. استخدم مبدأ التغاير مع الدالة التجريبية $\Psi(x) - Aexp(-bx^2)$ لتقدير طاقة المستوي المستقر (الارضي) وقارن النتيجه مع $E_g = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}$ ؟

الحل:

نجري عملية المعايرة للدالة اولا

$$1 = |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-2bx^2)\, dx = |A|^2 \sqrt{\frac{\pi}{2b}}$$

$$A = \left(\frac{2b}{\pi}\right)^{1/4}$$

$$< H >= J(b) =< T > + < U >$$

$$< T > = -\frac{\hbar^2}{2m} \ |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-bx^2} \frac{d^2}{dx^2}\left(e^{-bx^2}\right) dx = \frac{\hbar^2 b}{2m}$$

$$< U >= -\alpha |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-bx^2} \delta(x) dx = -\alpha \sqrt{\frac{2b}{\pi}}$$

$$J(b) = \frac{\hbar^2 b}{2m} \ - \alpha \sqrt{\frac{2b}{\pi}}$$

$$\frac{\partial J(b)}{\partial b} = \frac{\hbar^2}{2m} - \frac{\alpha}{\sqrt{2\pi b}} = 0$$

$$b_0 = \frac{2(m\alpha)^2}{\pi\hbar^4}$$

$$J(b_0) = < H >_{min} = E(b_0) = -\frac{m\alpha^2}{\pi\hbar^2}$$

وهذه النتيجة اكبر من قيمة الطاقة المعطاة بالسؤال

$$E(b_0) > E_g$$

لان π اكبر من 2