درس هفدهم: روش وردشی

۱ مقدمه

روش وردشی یا $Variational \ \ Method$ روشی است که به کمک آن می توانیم یک حد بالا برای انرژی حالت پایه یک هامیلتونی پیدا کنیم به این معنا که می توانیم بگوییم انرژی حالت پایه هرچه که باشد، از یک مقدار معین کمتر است. این روش محتاج حل یک معادله دیفرانسیل و یا قطری کردن هامیلتونی نیست و تنها نیازمند محاسبه متوسط هامیلتونی روی یک حالت اولیه است که آن را حالت یا تابع موج آزمایشی $Trial \ Wave \ Function$ می گوییم. هرچه که تابع موج آزمایشی خود را با دیدِ فیزیکی بهتری انتخاب کنیم، می توانیم از روش وردشی استفاده بهتری ببریم. دراین درس تنها به ذکر دو قضیه اساسی در روش وردشی اکتفا می کنیم. کاربردهای این روش را دردرس های آینده خواهیم دید.

۲ دوقضیه اساسی در روش وردشی

قضیه: اگر E_0 انرژی حالت پایه یک هامیلتونی باشد آنگاه به ازای هرحالت دلخواه $|\psi\rangle$ همواره نامساوی زیر برقراراست:

$$\frac{\langle\psi|H|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} \geq E_0. \tag{1}$$

اثبات: ویژه حالت های هامیلتونی را با $|n\rangle$ وانرژی آنها را با E_n نشان می دهیم. می توانیم $|\psi\rangle$ را برحسب ویژه حالت های هامیلتونی بسط دهیم.

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n|n\rangle. \tag{2}$$

دراین صورت طرف چپ نامساوی به صورت زیر درمی آید:

$$\frac{\langle\psi|H|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} = \frac{\sum_n E_n|c_n|^2}{\sum_n |c_n|^2} \geq \frac{E_0\sum_n |c_n|^2}{\sum_n |c_n|^2} = E_0 \tag{3}$$

که درقدم آخر از نامساوی $\forall n \quad E_n \geq E_0$ استفاده کرده ایم.

درعمل وقتی که ازاین قضیه استفاده می کنیم سعی می کنیم که یک بردار حالت که به یک یا چند پارامتر پیوسته بستگی دارد انتخاب کنیم و کمینهٔ $\frac{\langle\psi|H|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}$ را حساب کنیم. به این ترتیب یک حد بالا برای انرژی حالت پایه هامیلتونی بدست می آوریم.

مثال ۱ : دراین مثال یک حد بالا برای انرژی حالت پایه نوسانگر ساده بدست می آوریم. می دانیم که هامیلتونی به شکل زیر است

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2. \tag{4}$$

تابع موج زیر را درنظرمی گیریم

$$\psi(x) = e^{-\alpha x^2} \tag{5}$$

که درآن α یک پارامتر آزاد و مثبت است. برای محاسبه تا بع $F(\psi) \equiv F(\alpha)$ به انتگرال های زیر احتیاج داریم:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\alpha x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}}, \qquad \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-2\alpha x^2} dx = \frac{1}{4\alpha}\sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}} \tag{6}$$

با استفاده از شکل هامیلتونی بدست می آوریم

$$F(\alpha) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\alpha x^2} \left[\frac{\hbar^2\alpha}{m} + (\frac{1}{2}m\omega^2 - \frac{2\hbar^2\alpha^2}{m})x^2\right], \tag{7}$$

و با محاسبه انتگرال ها

$$F(\alpha) = \frac{m\omega^2}{8\alpha} + \frac{\hbar^2\alpha}{2m} \tag{8}$$

کمینه این تابع درنقطه $\alpha_0 = \frac{m\omega}{2\hbar}$ اتفاق می افتد و مقدار تابع درآن نقطه برابر است با

$$F(\alpha_0) = \frac{1}{2}\hbar\omega. \tag{9}$$

بنابراین بدست می آوریم

$$E_0 \leq \hbar\omega. \tag{10}$$

دراین مثال می بینیم که حد بالایی که برای انرژی حالت پایه بدست آورده ایم دقیقاً انرژی حالت پایه است. تابع آزمایشی ای که با آن شروع کردیم پس از بهنجارکردن دراین نقطه برابر می شود با

$$\psi_0(x) = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}, \tag{11}$$

که همان تابع موج حالت پایه نوسانگر است . این مثال نشاندهنده کیفیت کلی تری است که در قضیه زیر بیان شده است.

قضیه ریتز $(Reitz)$: تابع $\langle H\rangle := \langle\psi|H|\psi\rangle$ را که درآن ψ یک حالت بهنجاراست، درنظر بگیرید. این تابع در نقاطی دارای اکسترمم است که ویژه بر دار هامیلتونی باشند. به عبارت دیگر تغییرات درجه اول این تابع دراین نقاط صفراست.

اثبات: با توجه به شرطی که برای بهنجاربودن بردار $|\psi\rangle$ داریم می بایست تغییرات درجه اول تابع $F := \langle H\rangle - \epsilon\langle\psi|\psi\rangle$ را که درآن ϵ یک ضریب لاگرانژ است حساب کنیم. تغییرات درجه اول تابع $F(\psi)$ را حساب می کنیم. داریم

$$\delta F = \langle\delta\psi|H|\psi\rangle + \langle\psi|H|\delta\psi\rangle - \epsilon\langle\delta\psi|\psi\rangle - \epsilon\langle\psi|\delta\psi\rangle. \tag{12}$$

حال قرارمی دهیم

$$|v\rangle := (H-\epsilon)|\psi\rangle. \tag{13}$$

دراین صورت رابطه بالا به شکل زیردرمی آید:

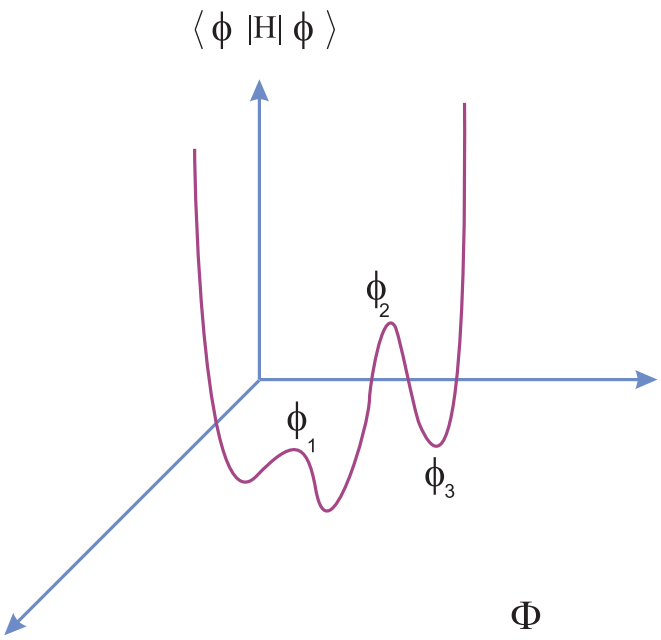
$$\langle v|\delta\psi\rangle + \langle\delta\psi|v\rangle = 0 \qquad\qquad \forall\delta\psi. \tag{14}$$

ازآن جا که این رابطه هم برای $\delta\psi$ و هم برای $i\delta\psi$ می بایست برقرار باشد با نوشتن دو رابطه و جمع کردن آن ها بایکدیگر به این نتیجه می رسیم که

$$\langle v|\delta\psi\rangle = 0 \qquad\qquad \forall\delta\psi \tag{15}$$

اما این شرط فقط وقتی برقرارمی شود که خود بردار $|v\rangle$ برابر باصفر باشد یعنی $H|\psi\rangle = \epsilon|\psi\rangle$. بنابراین نقطه ای که تابع F اکسترمم است همان نقطه ای است که ویژه بردار هامیلتونی است و ضریب لاگرانژ نیز دراین جا همان ویژه مقدار انرژی هامیلتونی است. شکل یک قضیه ریتز را بیان می کند.

نکته مهم: باید دقت کنیم که یک نقطه اکسترمم تنها وقتی یک ویژه بردارِ دقیق هامیلتونی را بدست می دهد که بتوانیم عبارت $F(\psi)$ را درهمه جهات درفضای توابع وردش دهیم. این امر از اثبات قضیه نیز واضح است به این معنا که نقطه اکسترمم



شکل ۱: بنابر قضیه ریتز، نقاط فرین (اکسترمم) تابع $\langle\phi|H|\phi\rangle$ همان ویژه بردارهای هامیلتونی هستند. دراین شکل ϕ_1، ϕ_2 و ϕ_3 سه نقطه فرین و بنابراین سه ویژه بردار مختلف از هامیلتونی هستند.

وقتی منجر به معادله ویژه مقداری می شود که $\delta\psi$ کاملاً دلخواه باشد. به این ترتیب قضیه ریتز تنها یک ارزش نظری دارد. ولی می توان از این قضیه برای یافتن ویژه بردارها و ویژه مقدارهای تقریبی تابع موج استفاده کرد، واین موقعی است که یک تابع آزمایشی را که به یک یا چند پارامتر وابسته‌است در عبارت $\langle\psi|H|\psi\rangle$. قرار داده و مقدار اکسترمم آن را پیدا کنیم. هرچه که تعداد پارامترهای قابل وردش در تابع بیشتر باشد، امکان اینکه تقریب بهتری از ویژه تابع هامیلتونی بدست بیاوریم بیشتر خواهد بود.

تمرین: هامیلتونی زیر را که توصیف کننده یک سیستم دو بعدی است در نظر بگیرید. حالت بسیاری از سیستم ها را به طور تقریبی یا موثر می توان با یک بردار در یک فضای هیلبرت دوبعدی توصیف کرد. هامیلتونی چنین سیستمی را می توان به صورت زیر نوشت:

$$H = \begin{pmatrix} E+\Delta & b \\ b & E-\Delta \end{pmatrix}, \tag{16}$$

که در آن برای سادگی b را حقیقی گرفته ایم. **الف:** ویژه مقدارهای این هامیلتونی را با محاسبه دقیق بدست آورید و انرژی حالت پایه را مشخص کنید. این دو ویژه حالت را برحسب b رسم کنید. فرض کنید که E و Δ ثابت هستند.

ب: حال یک حالت دلخواه به صورت $|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \cos\theta \\ \sin\theta \end{pmatrix}$ را در نظر بگیرید. مقدارِ $\langle\psi|H|\psi\rangle$ را حساب کنید و یک حد بالا برای انرژی حالت پایه پیدا کنید. آیا این حد از مقدار دقیقی که برای حالت پایه در قسمت الف بدست آوردید بیشتر است؟ بهترین حد بالا را با انتخاب مناسبی برای θ مشخص کنید.

تمرین: در یک فضای سه بعدی دو بردار دلخواه $|a\rangle$ و $|b\rangle$ و هامیلتونی زیر را در نظر بگیرید:

$$H = |a\rangle\langle a| - |b\rangle\langle b|. \tag{17}$$

بردارهای $|a\rangle$ یکه هستند ولی متعامد نیستند. با انتخاب پایه مناسبی می توانید این بردارها را به شکل زیر بنویسید:

$$|a\rangle = \begin{pmatrix} \cos\theta \\ \sin\theta \\ 0 \end{pmatrix} \qquad |b\rangle = \begin{pmatrix} \sin\theta \\ \cos\theta \\ 0 \end{pmatrix} \tag{18}$$

الف: ویژه مقدارهای این هامیلتونی را بدست آورید و انرژی حالت پایه را با محاسبه دقیق بدست آورید.

ب: بردار دلخواهِ $|\phi\rangle = \begin{pmatrix} \cos\phi\sin\psi \\ \cos\phi\cos\psi \\ \sin\phi \end{pmatrix}$ را به عنوان یک بردار وردشی در نظر بگیرید و یک حد بالا را برای انرژی حالت پایه بدست آورید.

تمرین: با انتخاب یک تابع وردشی مناسب یک حد بالا برای انرژی حالت پایه پتانسیل یک بعدی زیر بدست آورید:

$$V(x) = \begin{cases} \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 & x \geq 0 \\ \infty & x < 0 \end{cases} \tag{19}$$

تمرین: هامیلتونی زیر را در نظر بگیرید:

$$H = \frac{P_1^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2(X_1 + a)^2 + \frac{P_2^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2(X_2 - a)^2 + K(X_1 - X_2^2). \tag{20}$$

هرگاه K برابر با صفر باشد، این هامیلتونی نشان دهنده دو نوسانگر مستقل است که اولی نقطه تعادلش در $-a$ و دومی نقطه تعادلش در a است.

الف: با در نظر گرفتن یک تابع موج وردشی به صورت حاصلضرب دو تابع گاووسی سعی کنید حد بالایی برای انرژی حالت پایه این سیستم پیدا کنید.

ب: حالت پایه این هامیلتونی و انرژی آن را به صورت دقیق بدست آورید و نتیجه را با نتیجه تقریبی ای که در بند الف بست آوردید مقایسه کنید.

۳ استفاده از روش وردشی برای حل معادله شرودینگر چند ذره ای: روش هارتری

نخست یک مثال ساده دو ذره‌ای را بررسی می کنیم. مثال چند ذره‌ای تعمیم ساده ای از محاسبات این مثال ساده خواهد بود. یک سیستم دو ذره‌ای با هامیلتونی زیر توصیف می شود:

$$H = \frac{P_1^2}{2m} + \frac{P_2^2}{2m} + V(X_1) + V(X_2) + W(|X_1 - X_2|), \tag{21}$$

که درآن $W(|X_1 - X_2|)$ پتانسیل برهم کنش بین دو ذره است و به فاصله دو ذره بستگی دارد. می توانیم این هامیلتونی را به شکل زیر بازنویسی کنیم:

$$H = H_1 + H_2 + W(|X_1 - X_2|), \tag{22}$$

که درآن H_1 و H_2 پتانسیل هایی همانند هستند که به ترتیب روی ذره یک و ذره دو اثر می کنند، یعنی

$$H_1 = \frac{P_1^2}{2m} + V(X_1), \qquad H_2 = \frac{P_2^2}{2m} + V(X_2). \tag{23}$$

به عنوان یک تابع آزمایشی تابع موج زیر را انتخاب می کنیم:

$$\psi(x_1, x_2) = \phi_1(x_1)\phi_2(x_2), \tag{24}$$

که درآن ϕ_1 و ϕ_2 توابع تک ذره‌ای دلخواه هستند. دقت کنید که دراین جا تعداد پارامترهایی که در تابع موج آزمایشی به کار رفته اند بی نهایت است، زیرا شکل تابع های ϕ_1 و ϕ_2 کاملاً دلخواه هستند. با این وجود نباید انتظار داشته باشیم که با این روش تابع موج دقیق را بدست بیاوریم، زیرا خود را به توابع ضربی محدود کرده ایم و این یعنی این که وردش را در تمامی فضای توابع انجام نمی دهیم. می دانیم که این دو تابع می بایست بهنجارباشند به این معنا که

$$\langle\phi_1|\phi_1\rangle = 1 \qquad \langle\phi_2|\phi_2\rangle = 1. \tag{25}$$

مطابق با اصل وردشی می بایست تابع زیر را فرینه کنیم:

$$F(\phi_1, \phi_2) := \langle\psi|H|\psi\rangle - \epsilon_1\langle\phi_1|\phi_1\rangle - \epsilon_2\langle\phi_2|\phi_2\rangle. \tag{26}$$

با توجه به شکل تابع وردشی این عبارت به صورت زیر در می آید:

$$F(\phi_1, \phi_2) = \langle\phi_1|H_1|\phi_1\rangle + \langle\phi_2|H_2|\phi_2\rangle - \epsilon_1\langle\phi_1|\phi_1\rangle - \epsilon_2\langle\phi_2|\phi_2\rangle + \langle\phi_1, \phi_2|W|\phi_1, \phi_2\rangle, \tag{27}$$

که درآن $\langle\phi_1, \phi_2|W|\phi_1, \phi_2\rangle$ نماد خلاصه‌ای برای عبارت زیراست:

$$\langle\phi_1, \phi_2|W|\phi_1, \phi_2\rangle := \int dx_1 \int dx_2 \phi_1^*(x_1)\phi_2^*(x_2)W(|x_1 - x_2|)\phi_1(x_1)\phi_2(x_2). \tag{28}$$

وردش یک یک جملات را بسادگی می توان حساب کرد:

$$\delta\langle\phi_1|\phi_1\rangle = \int \delta\phi_1^*(x)\phi_1(x)dx + cc, \tag{29}$$

که علامت cc دراین جمله و بقیه جملات دیگر نشانه‌ی مزدوج مختلط است:

$$\delta\langle\phi_2|\phi_2\rangle = \int \delta\phi_2^*(x)\phi_2(x)dx + cc, \tag{30}$$

$$\delta\langle\phi_1|H_1|\phi_1\rangle = \int \delta\phi_1^*(x)\hat{H}_1\phi_1(x)dx + cc, \tag{31}$$

که درآن منظوراز $\hat{H}_1$ عملگرِ $\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx_1^2} + V(x_1)$ است. هم چنین

$$\delta\langle\phi_2|H_2|\phi_2\rangle = \int \delta\phi_2^*(x)\hat{H}_2\phi_2(x)dx + cc, \tag{32}$$

و بالاخره

$$\delta\langle\phi_1,\phi_2|W|\phi_1,\phi_2\rangle = \int dx_1 \int dx_2(\delta\phi_1^*(x_1)\phi_2^*(x_2) + \phi_1^*(x_1)\delta\phi_2^*(x_2))W(x_1,x_2)\phi_1(x_1)\phi_2(x_2) + cc. \tag{33}$$

با کنارهم گذاردن تمام این جملات به عبارت زیر برای تغییرات درجه اول F می رسیم:

$$\begin{aligned}\delta F &= \int dx_1\delta\phi_1^*(x_1)\left[\hat{H}_1\phi_1(x_1) + \int dx_2 W(x_1,x_2)|\phi_2(x_2)|^2\phi_1(x_1) - \epsilon_1\phi_1(x_1)\right] \\ &+ \int dx_2\delta\phi_2^*(x_2)\left[\hat{H}_2\phi_2(x_2) + \int dx_1 W(x_1,x_2)|\phi_1(x_1)|^2\phi_2(x_2) - \epsilon_2\phi_2(x_2)\right] + c.c.\end{aligned} \tag{34}$$

برای آنکه تغییرات درجه اول F برای هر تغییری از ϕ_1 و ϕ_2 برابر با صفر باشد، می بایست عبارت های داخل کروشه جداگانه برابر با صفر شوند، یعنی اینکه توابع موج ϕ_1 و ϕ_2 می بایست در معادلات جفت شده‌ی زیر صدق کنند:

$$\begin{aligned}\hat{H}_1\phi_1(x_1) + \int dx_2 W(x_1,x_2)|\phi_2(x_2)|^2\phi_1(x_1) &= \epsilon_1\phi_1(x_1) \\ \hat{H}_2\phi_2(x_2) + \int dx_1 W(x_1,x_2)|\phi_1(x_1)|^2\phi_2(x_2) &= \epsilon_2\phi_2(x_2).\end{aligned} \tag{35}$$

این معادلات تعبیر فیزیکی روشنی دارند. معادله یک بیان می کند که تابع موج ذره‌ی یک یعنی $\phi_1(x_1)$ در یک معادله تک ذره ای شرودینگر صدق می کند با این تفاوت که پتانسیل آن علاوه بر جمله‌ی $V(x_1)$ یک جمله موثر ناشی از برهم کنش این ذره با ذره دوم را نیز در بردارد. بنابراین معادلات بالا را می توان به شکل زیر نوشت:

$$\begin{aligned}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx_1^2}+V_{eff}(x_1)\right]\phi_1(x_1)&=\epsilon_1\phi_1(x_1)\\ \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx_2^2}+V_{eff}(x_2)\right]\phi_2(x_2)&=\epsilon_2\phi_2(x_2),\end{aligned}\tag{36}$$

که درآن

$$\begin{aligned}V_{eff}(x_1) &= V(x_1)+\int dx_2 W(x_1,x_2)|\phi_2(x_2)|^2\\ V_{eff}(x_2) &= V(x_2)+\int dx_1 W(x_1,x_2)|\phi_1(x_1)|^2.\end{aligned}\tag{37}$$

بدین ترتیب توابع موج_ϕ_2,ϕ_1 در معادلات شرودینگر تک ذره‌ای صدق می کنند ولی پتانسیل این معادلات یک پتانسیل موثراست که درعبارت آن تابع موج ذره دیگر نیز وارد می شود. اگر پتانسیل $V_{eff}(x_1)$ را به عنوان مثال در نظر بگیرید، جمله اضافه شده به پتانسیل اصلی تعبیر روشنی دارد، زیرا $|\phi_2(x_2)|^2dx_2$ احتمال آن است که ذره دوم در فاصله‌ی (x_2,x_2+dx_2) باشد و $\int dx_2 W(x_1,x_2)|\phi_2(x_2)|^2$ انرژی پتانسیلی است که دراین وضعیت بین دو ذره وجود دارد. بنابراین عبارت متوسط انرژی پتانسیل بین دو ذره است. همین تعبیر برای معادله شرودینگر دوم نیز برقراراست. دقت کنید که اگر چه بجای یک معادله شرودینگر دو ذره‌ای دو معادله شرودینگر تک ذره ای بدست آورده ایم ولی برای این سادگی بهایی پرداخت کرده‌ایم. اول آنکه دو معادله به هم جفت شده و از هم مستقل نیستند. دوم آنکه این معادلات خطی نیستند، یعنی توان های بالاتر از مرتبه اول از تابع موج هم در آنها وارد شده است. به همین دلیل مجموع دو جواب دیگر یک جواب از معادله شرودینگر نیست. به یک نکته دیگر هم باید اشاره کنیم و آن این که ضرایب تکثیر لاگرانژ یعنی ϵ_1 و ϵ_2 نقش انرژی های تک ذره ها را بازی می کنند. باید دقت کنیم که حتی اگر بتوانیم معادلات جفت شده و غیرخطی 36 را به طور دقیق حل کنیم، به معنای این نیست که حل دقیقی از معادله دو ذره‌ای شرودینگر بدست آورده‌ایم، زیرا مجموعه توابعی که روی آنها وردش داده ایم درعین این که بزرگ بوده است ولی شامل تمام فضای توابع نمی شده است. فهم مستقیم این نکته بسیارساده است. کافی است که تابع_$\psi(x_1,x_2)=\phi_1(x_1)\phi_2(x_2)$ را در معادله

$$(H_1+H_2+W(X_1,X_2))\phi_1(x_1)\phi_2(x_2)=E\phi_1(x_1)\phi_2(x_2)\tag{38}$$

قرار دهیم و از معادلات 36 نیز استفاده کنیم. بنابراین با این روش تنها به یک ویژه بردار تقریبی از معادله شرودینگر می رسیم که ارزش نهایی آن را نیز می بایست تطبیق نتایج ناشی از آن و داده های تجربی معین کنند. ولی به هرحال درغیاب هر گونه روش دقیق برای حل معادله دو ذره‌ای شرودینگر استفاده از این روش می تواند به عنوان گام اول بسیار مفید باشد.

تمرین: هامیلتونی زیر را در نظر بگیرید:

$$H = \frac{P_1^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X_1^2 + \frac{P_2^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X_2^2 + K(X_1 - X_2^2). \tag{39}$$

معادلات هارتری را برای این سیستم بدست آورید.

حال که اصول اساسی این روش را در مورد یک سیستم دو ذره‌ای یاد گرفته‌ایم می توانیم آن را بدون انجام محاسبات بیشتر برای یک سیستم N ذره‌ای به کار ببریم. ما تنها نتایج را می نویسیم زیرا محاسبات آن تعمیم سرراستی از مثال دوذره‌ای است و خواننده خود می تواند محاسبات لازم را انجام دهد. برای یک سیستم N ذره‌ای داریم:

$$H = H_1 + H_2 + \cdots H_N + \sum_{1\leq i<j\leq N} W(|X_i - X_j|). \tag{40}$$

قرار می دهیم:

$$\psi(x_1, x_2, \cdots x_N) \tag{41}$$

که درآن توابع تک ذره‌ای ϕ_1 تا ϕ_N همگی بهنجارهستند. دراین صورت وردش نسبت به توابع موج تک ذره‌ای منجر به دستگاه معادلات جفت شده‌ی زیر می شود:

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + V_{eff}(x_i)\right]\phi_i(x_i) = \epsilon_i\phi_i(x_i), \qquad i = 1, 2, \cdots N, \tag{42}$$

که درآن

$$V_{eff}(x_i) = V_i(x_i) + \frac{1}{2}\sum_{i\neq j}\int W(|x_i - x_j|)|\phi_j(x_j)|^2 dx_j, \tag{43}$$

پتانسیل موثری است که روی ذره i ام اثر می کند. مجموعه معادلاتی که به این صورت بدست می آیند، به معادلات هارتری موسوم است.

۴ ضمیمه یک: فرینه کردن توابع همراه با قید

هرگاه بخواهیم نقاط فرینه‌ی تابعی مثل $f(x, y)$ را پیدا کنیم مطابق با آنچه که در درس های مقدماتی حسابان آموخته‌ایم می بایست معادلات زیر را حل کنیم:

$$\frac{\partial}{\partial x}f(x, y) = 0, \qquad \frac{\partial}{\partial y}f(x, y) = 0. \tag{44}$$

برای بدست آوردن این معادله کافی است که به این نکته توجه کنیم که تغییرات درجه اول تابعِ f در نقطه فرین می بایست صفرباشد. یعنی اینکه

$$df \equiv \frac{\partial f}{\partial x}dx + \frac{\partial f}{\partial y}dy = \nabla f \cdot dr = 0, \tag{45}$$

و چون dr کاملاً دلخواه است پس می بایست بردارِ ∇f در نقطه فرین برابر با صفر باشد. در نتیجه مولفه های بردارِ ∇f می بایست برابر با صفر باشند و این چیزی نیست جز همان معادله‌ی 44.

حال فرض کنید که می خواهیم فرینه‌ی تابع f را نه در همه صفحه‌ی $x-y$ بلکه در روی یک منحنی که با معادله‌ی $\phi(x,y)=0$ تعریف می شود پیدا کنیم. دراین صورت نقطه‌ی فرینی که بدست می آوریم دیگر با نقطه‌ی فرین تابع در کل صفحه مطابقت نمی کند و از معادلات 44 بدست نمی آید. نقطه فرین هنوز دارای این خاصیت است که در آن $df = \nabla f \cdot r$ برابر با صفر است اما نه برای هر dr دلخواه بلکه برای dr هایی که روی منحنی قیدی قرار دارند. از آنجا که روی منحنی قیدی شرط $\phi(x,y)=0$ همواره برقرار است پس این dr ها در شرط $\nabla\phi \cdot dr = 0$ صدق می کنند. بنابراین داریم

$$\nabla f \cdot dr = 0 \qquad \forall \;\; dr \;\; | \;\; \nabla\phi \cdot dr = 0. \tag{46}$$

نتیجه‌ای که از این دو رابطه بدست می آید آن است که در نقطه فرین بردارِ ∇f متناسب با بردار $\nabla\phi$ است یعنی

$$\nabla(f - \epsilon\phi) = 0, \tag{47}$$

که در آن ϵ یک ثابت است که اصطلاحاً ضریب لاگرانژ خوانده می شود. بنابراین برای پیدا کردن نقطه فرین یک تابع روی یک منحنی قیدی می بایست معادلات زیر را حل کنیم:

$$\frac{\partial}{\partial x}(f - \epsilon\phi) = 0, \qquad \frac{\partial}{\partial y}(f - \epsilon\phi) = 0. \tag{48}$$

این استدلال براحتی تعمیم داده می شود. وقتی بخواهیم تابعی مثل $f(x,y,z)$ را همراه با دو قیدِ $\phi_1(x,y,z)=0$ و $\phi_2(x,y,z)=0$ فرینه کنیم آنگاه خواهیم داشت

$$df = \nabla f \cdot dr = 0 \quad \forall \;\; dr \;\; | \;\; \nabla\phi_1 \cdot dr = 0 \;,\; \nabla\phi_2 \cdot dr = 0. \tag{49}$$

بنابراین ∇f می بایست ترکیب خطی‌از $\nabla\phi_1$ و $\nabla\phi_2$ باشد. یعنی اینکه که می بایست داشته باشیم $\nabla(f - \epsilon_1\phi_1 - \epsilon_2\phi_2) = 0$ ، یعنی

$$\frac{\partial}{\partial x}(f - \epsilon_1\phi_1 - \epsilon_2\phi_2) = 0, \qquad \frac{\partial}{\partial y}(f - \epsilon_1\phi_1 - \epsilon_2\phi_2) = 0. \tag{50}$$

۵ ضمیمه دو : روش هارتری از یک دیدگاه کلی تر

در توضیح روش هارتری آنچنانکه در متن درس دیدیم، خود را به دسته معینی از سیستم ها و هامیلتونی ها محدود کردیم. در مثال کلی ای که بررسی کردیم متغیرهای هامیلتونی شامل مکان و تکانه است و پتانسیل نیز به مکان های دو ذره بستگی دارد. در این ضمیمه می خواهیم این روش را از دیدگاه کلی تری بررسی کنیم بطوریکه بتوان آن را برای یک سیستم دلخواه دوذره ای مثلاً سیستمی از دو ذره که انرژی جنبشی ندارند ولی در عوض گشتاورهای مغناطیسی آنها با هم برهم کنش می کنند نیز به کار ببریم. بنابراین به طور کلی فرض می کنیم که دو ذره که حالت های آنهابه ترتیب در فضای هیلبرت V_1 و V_2 توصیف می شوند با هامیلتونی زیر با هم برکنش می کنند:

$$\mathcal{H} = H_1 + H_2 + W_{12}, \tag{51}$$

یا به عبارت بهتر

$$\mathcal{H} = H \otimes I + I \otimes H + W_{12}, \tag{52}$$

که در آن منظور از $H \otimes I$ قسمتی از هامیلتونی است که فقط روی ذره یک عمل می کند و منظور از $I \otimes H$ قسمتی از هامیلتونی است که روی ذره‌ی ۲ عمل می کند. اگر جمله W_{12} یعنی جمله برهم کنش نبود طیف $\mathcal{H}$ براحتی از روی طیف H بدست می آمد ولی جمله برهم کنش پیدا کردن طیف هامیلتونی را دشوار می سازد. در روش هارتری از یک بردار حالت وردشی شروع می کنیم که حاصلضرب دو بردار تک ذره‌ای است به این معنا که بردار وردشی را به صورت زیر در نظر می گیریم:

$$|\Psi\rangle = |\phi_1\rangle \otimes |\phi_2\rangle =: |\phi_1, \phi_2\rangle. \tag{53}$$

بردارهای $|\phi_1\rangle$ و $|\phi_2\rangle$ بردارهای تک ذره‌ای و بهنجار دلخواه هستند که می بایست فرم آنها در روش هارتری بدست آید. حال مطابق با روش هارتری یا قضیه ریتز متوسط $\mathcal{H}$
را روی این حالت وردشی فرینه می کنیم. با توجه به رابطه‌ی 52 بدست می آوریم

$$\langle\phi_1, \phi_2|\mathcal{H}|\phi_1, \phi_2\rangle = \langle\phi_1|H|\phi_1\rangle + \langle\phi_2|H|\phi_2\rangle + \langle\phi_1, \phi_2|W|\phi_1, \phi_2\rangle. \tag{54}$$

در نوشتن این عبارت از بهنجار بودن بردارهای $|\phi_1\rangle$ و $|\phi_2\rangle$ یعنی قید های زیر استفاده کرده ایم

$$\langle\phi_1|\phi_1\rangle = 1, \qquad \langle\phi_2|\phi_2\rangle = 1. \tag{55}$$

حال وردش عبارت

$$\langle\phi_1,\phi_2|\mathcal{H}|\phi_1,\phi_2\rangle - \epsilon_1\langle\phi_1|\phi_2\rangle - \epsilon_2\langle\phi_2|\phi_2\rangle$$

برابر با صفر قرار می دهیم و بدست می آوریم

$$\begin{aligned} 0 &= \langle\delta\phi_1|H|\phi_1\rangle + \langle\delta\phi_2|H|\phi_2\rangle \\ &+ \langle\delta\phi_1,\phi_2|W|\phi_1,\phi_2\rangle + \langle\phi_1,\delta\phi_2|W|\phi_1,\phi_2\rangle \\ &- \epsilon_1(\langle\delta\phi_1|\phi_1\rangle) - \epsilon_2(\langle\delta\phi_2|\phi_2\rangle) + cc, \end{aligned} \tag{56}$$

که در آن cc به معنای $ComplexConjugate$ است. برای ادامه بحث به یک نکته‌ی فنی می بایست دقت کنیم.

یک نکته‌ی ریاضی: فرض کنید که W عملگری باشد که روی فضای $V_1 \otimes V_2$ عمل می کند. بردارهای پایه V_1 را با $\{|e_i\rangle,\quad i=1,\cdots m\}$ و بردارهای پایه‌ی V_2 را با $\{|f_\alpha\rangle,\quad \alpha=1,\cdots n\}$ نمایش می دهیم. برای سادگی نیز فرض می کنیم که این پایه‌ها متعامد و یکه هستند.

دراین صورت هرگاه $|\phi\rangle$ برداری دلخواه در فضای V_1 باشد، ${}_1\langle\phi|W|\phi\rangle_1$ یک عملگر در فضای V_2 است. در واقع اگر بنویسیم $|\phi\rangle_1 = \sum_i \phi_i|e_i\rangle$ آنگاه خواهیم داشت

$$({}_1\langle\phi|W|\phi\rangle_1)_{\alpha,\beta} = \sum_{i,j}\phi_i W_{i\alpha,j\beta}\phi_j. \tag{57}$$

به این ترتیب ${}_1\langle\phi|W|\phi\rangle_1$ عملگری است که درایه هایش مطابق با رابطه بالا تعیین می شود.
به همین ترتیب هرگاه $|\phi\rangle_2$ برداری دلخواه در فضای V_2 باشد، ${}_2\langle\phi|W|\phi\rangle_2$ یک عملگر در فضای V_1 است، که درایه هایش مطابق با رابطه زیر تعیین می شود:

$$({}_2\langle\phi|W|\phi\rangle_2)_{i,j} = \sum_{\alpha,\beta}\phi_\alpha W_{i\alpha,j\beta}\phi_\beta. \tag{58}$$

تمرین: عملگر زیر در فضای هیلبرت مربوط به دو ذره‌ی اسپین ۱/۲ تعریف شده است:

$$W = J\sigma_x\otimes\sigma_x + K\sigma_z\otimes\sigma_z. \tag{59}$$

هرگاه $|\phi\rangle = \begin{pmatrix}\cos\theta\\ \sin\theta\end{pmatrix}$ باشد، عملگرهای زیر را حساب کنید:

$${}_1\langle\phi|W|\phi\rangle_1, \qquad\qquad {}_2\langle\phi|W|\phi\rangle_2. \tag{60}$$

تمرین: عملگر زیر در فضای هیلبرت مربوط به دو ذره‌ی اسپین ۱ تعریف شده است:

$$W = JS_x \otimes S_x + KS_z \otimes S_z. \tag{61}$$

هرگاه $|\phi\rangle = \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix}$ باشد، عملگرهای زیر را حساب کنید:

$$_1\langle\phi|W|\phi\rangle_1, \qquad\qquad _2\langle\phi|W|\phi\rangle_2. \tag{62}$$

پس از این مقدمات به معادله وردشی اصلی یعنی 56 باز می گردیم. از آنجا که این عبارت به ازای هر نوع وردش $\delta\phi_1$ و $\delta\phi_2$ می بایست برابر با صفر باشد بدست می آوریم

$$\begin{aligned} [H + \langle\phi_2|W|\phi_2\rangle]\,|\phi_1\rangle &= 0, \\ [H + \langle\phi_1|W|\phi_1\rangle]\,|\phi_2\rangle &= 0. \end{aligned} \tag{63}$$

این رابطه ها به این معنا هستند که $|\phi_1\rangle$ و $|\phi_2\rangle$ در معادلات شرودینگر تک ذره‌ای صدق می کنند ولی این معادلات به هم جفت شده اند زیرا پتانسیل موثر برای ذره یک عبارت است از $\phi_2|W|\phi_2\rangle$ و پتانسیل موثر برای ذره دو عبارت است از $\phi_1|W|\phi_1\rangle$. در عمل برای حل این معادلات از روش تکرار استفاده می کنیم که در متن درس شرح داده شد.

آنچه که برای یک سیستم دو ذره‌ای شرح دادیم برای یک سیستم بس ذره‌ای نیز به همین صورت تعمیم می یابد.

تمرین: با روش وردشی و با استفاده از حل عددی انرژی حالت پایه این هامیلتونی را حساب کنید:

$$H = J\sigma_1 \cdot \sigma_2 + B(\sigma_{1x} + \sigma_{2x}). \tag{64}$$

٦ ضمیمه سه : تابعی ها و وردش نسبت به یک تابع

دراین ضمیمه به معرفی تابعی $Functional$ و مشتق تابعی $FunctionalDerivative$ می پردازیم. خواندن این ضمیمه برای فهم متن این درس الزامی نیست، ولی دانشجوی علاقمند می تواند با مطالعه این ضمیمه به درک بهتری از وردش یک عبارت نسبت به یک تابع برسد. درحقیقت به زبان دقیق تر، عبارتی که ازآن صحبت می کنیم یک تابعی و وردش آن عبارت نسبت به

آن تابع مشتق تابعی خوانده می شود. وقتی که می گوییم وردش یا تغییرات درجه اول یک عبارت نسبت به یک تابع برابر با صفر باشد، منظور این است که مشتق آن تابعی نسبت به تابعی که متغیرآن است برابر با صفرباشد.

به زبان ریاضی تابعی یا $Functional$، نگاشتی است که متغیرآن یک تابع و حاصل آن یک عدد است. مثالهایی از تابعی ها عبارتنداز:

$$F(\phi) := \int_a^b \phi(x)dx, \tag{65}$$

$$G(\phi) := \int_a^b e^{-\phi^2(x)}dx \tag{66}$$

$$F_{x_0}(\phi) := \phi(x_0), \tag{67}$$

در مثال سوم، تابعی F_{x_0} هر تابع مثل ϕ را به عنوان متغیر می پذیرد و مقدار آن را در نقطه x_0 تحویل می دهد. یک تابعی را می توان به عنوان حد یک تابع چند متغیره وقتی که تعداد متغیرهای آن به سمت بی نهایت میل کرده است نیز نگاه کرد. به عبارت دیگر می توانیم یک تابع مثل $\phi(x)$ را با مقادیر آن در رشته‌ی ای از نقاط نزدیک به هم مثل $\{\phi_n\}$. بنابراین یک تابعی را می توان به عنوان یک تابع N متغیره از متغیرهای $(\phi_1, \cdots \phi_N)$ در حدّی که N به سمت بی نهایت میل می کند نگاه کرد. با این دیدگاه خواننده براحتی می تواند مفهوم مشتق تابعی یا همان وردش را نیز دریابد. برای کامل بودن در زیر نشان می دهیم که چگونه در حد $N \longrightarrow \infty$ مفاهیم مربوط به تابع به مفاهیم مربوط به تابعی تبدیل می شوند:

$$\begin{aligned}
\phi_n &\longrightarrow \phi(x) \\
(\phi_1, \phi_2, \cdots \phi_N) &\longrightarrow \phi \\
F(\phi_1, \phi_2, \cdots \phi_N) &\longrightarrow F[\phi] \\
F(\phi_1 + \epsilon_1, \cdots \phi_N + \epsilon_N) = F(\phi_1, \cdots \phi_N) + \sum_{n=1}^{N} \frac{\partial F}{\partial \phi_n}\epsilon_n &\longrightarrow F[\phi + \epsilon] = F[\phi] + \int \frac{\delta F}{\delta \phi(x)}\epsilon(x)dx \\
\frac{\partial F}{\partial \phi_n} &\longrightarrow \frac{\delta F}{\delta \phi(x)}
\end{aligned} \tag{68}$$

از رابطه ماقبل آخر می توان عبارت صریحی برای مشتق تابعی بدست آورد. دراین رابطه بجای تابع $\epsilon(x)$ قرار می دهیم $\epsilon_{x_0}(x) := \epsilon\delta(x - x_0)$ که درآن ϵ یک پارامتر ثابت ولی دلخواه و x_0 یک نقطه دلخواه در محدوده تعریفِ تابع $\phi(x)$ است. در نتیجه بدست می آوریم:

$$F[\phi + \epsilon_{x_0}] = F[\phi] + \epsilon\frac{\delta F}{\delta \phi(x_0)} \tag{69}$$

و در نتیجه به تعریف زیر از مشتق تابعی می رسیم:

$$\frac{\delta F}{\delta \phi(x_0)} = \lim_{\epsilon \longrightarrow 0} \frac{F[\phi + \epsilon_{x_0}] - F[\phi]}{\epsilon} \tag{70}$$

این تعریف تعمیم سرراست ِتعریف زیر از مشتق جزیی یک تابع است و بیان می کند که مقدار تابعی F چه مقدار تغییر می کند اگر تابع ِϕ را تنها در نقطه‌ی x_0 تغییر دهیم. بهترین راه برای اثبات خواص مشتق تابعی استفاده از همان رابطه‌ی ماقبل آخر در معادلات ِ68 است. در زیر نمونه ای از روابطی را که خواننده می تواند براحتی با استفاده از آن تعریف ثابت کند بدست می دهیم:

$$\begin{aligned}
&F[\phi] = \phi(x_0) \longrightarrow \frac{\delta F}{\delta \phi(x)} = \delta(x - x_0) \\
&F[\phi] = \int_a^b K(y)\phi(y)dy \longrightarrow \frac{\delta F}{\delta \phi(x)} = K(x) \qquad if\ x \in (a,b) \\
&F[\phi] = \int dy \int dz \phi(y) K(y,z) \phi(z) \longrightarrow \frac{\delta F}{\delta \phi(x)} = \int dz K(x,z)\phi(z) + \int dy K(y,x)\phi(y) \\
&\frac{\delta F + G}{\delta \phi(x)} = \frac{\delta F}{\delta \phi(x)} + \frac{\delta G}{\delta \phi(x)} \\
&\frac{\delta FG}{\delta \phi(x)} = F[\phi]\frac{\delta G}{\delta \phi(x)} + \frac{\delta F}{\delta \phi(x)} G[\phi] \\
&\frac{\delta g(F[\phi])}{\delta \phi(x)} = \frac{\partial g(F[\phi])}{\partial F[\phi]} \frac{\delta F[\phi]}{\delta \phi(x)}.
\end{aligned} \tag{71}$$

دررابطه‌ی آخر، F یک تابعی و h یک تابع معمولی است. به عنوان مثالی از رابطه آخر داریم:

$$\frac{\delta e^{\phi^2(x)}}{\delta \phi(y)} = 2\delta(x-y)\phi(x) \times e^{\phi^2(x)}. \tag{72}$$

بنابراین می توان قضیه ریتز را به شکل زیر نیز بیان کرد. نقاطی که درآن مشتق تابعی $F[\phi] := \langle\phi|H|\phi\rangle - \epsilon\langle\phi|\phi\rangle$ صفر می شوند، ویژه بردارهای هامیلتونی هستند.

$$\frac{\delta F[\phi]}{\delta \phi} = 0 \quad \leftrightarrow \quad H|\phi\rangle = \epsilon|\phi\rangle. \tag{73}$$