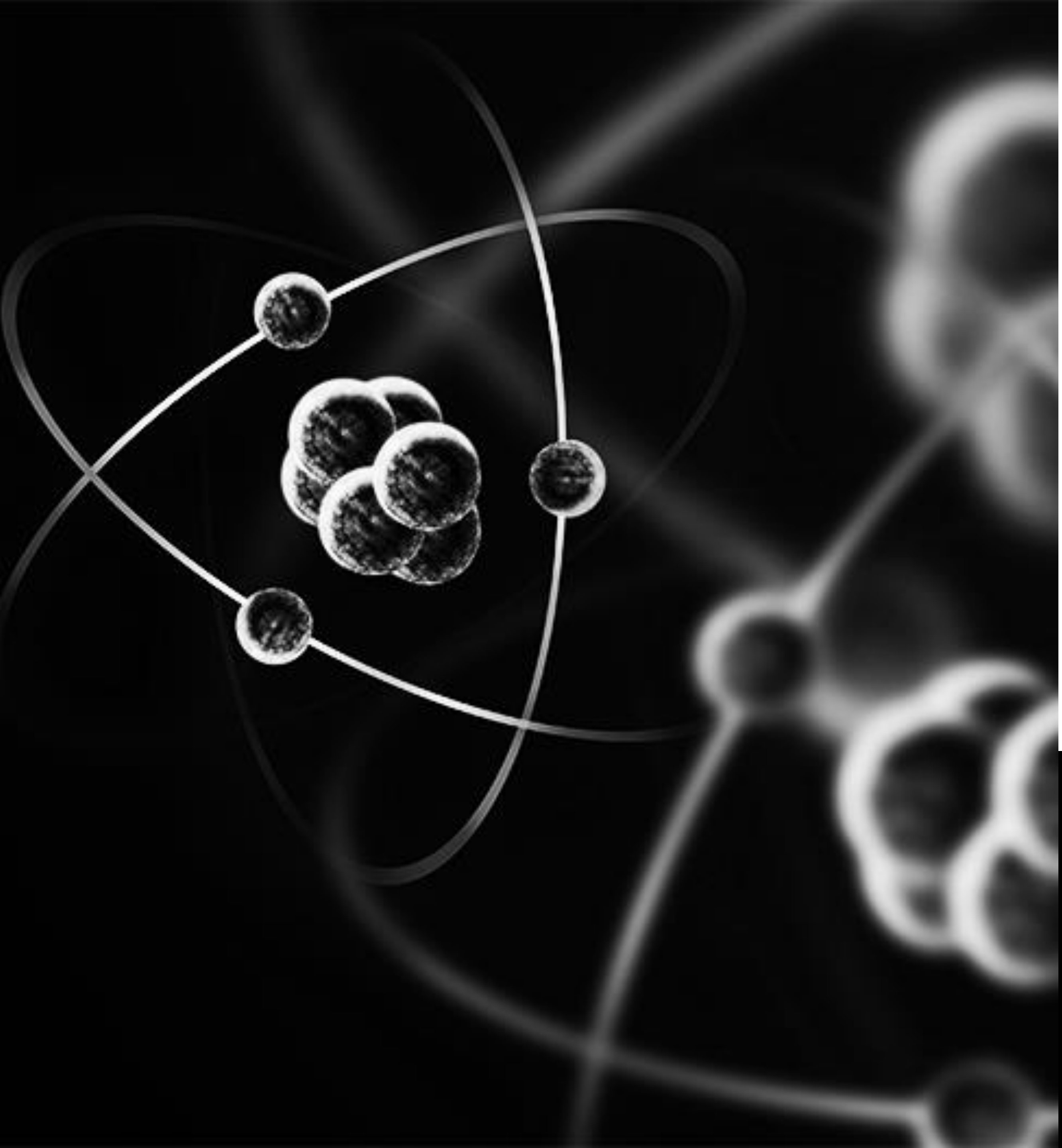
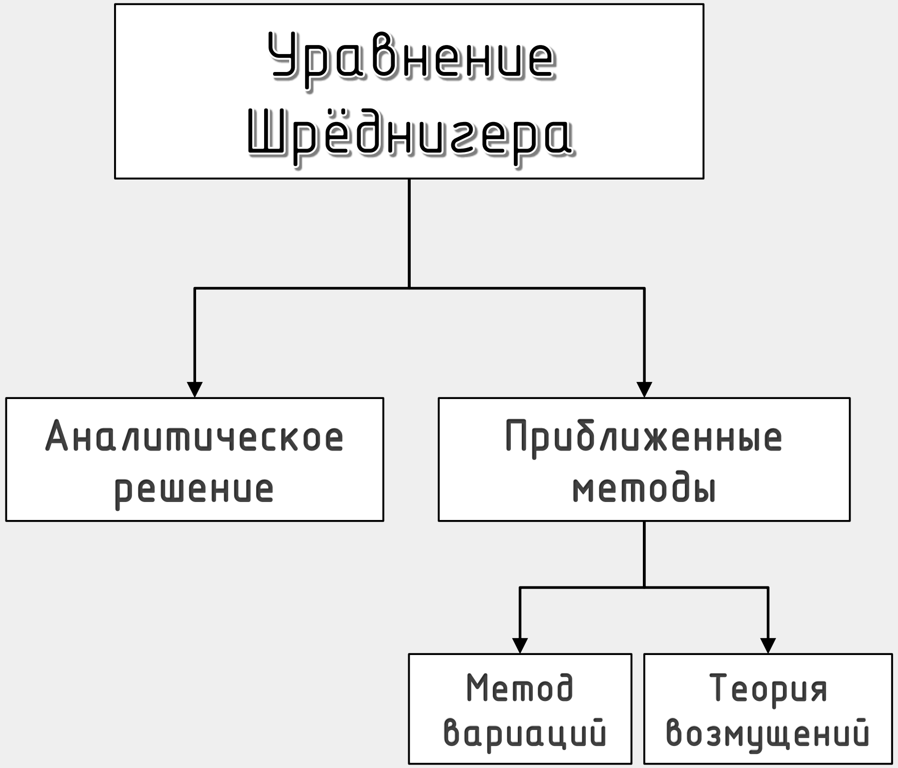


Методы вычисления спектров поглощения излучения оптического диапазона твердых тел.

Теория возмущений.
Золотое правило Ферми.
Вариационный метод.

Введение

Не всегда задача решения уравнения Шредингера является аналитически разрешимой. В таких случаях обращаются к использованию приближенных решений. Такие решения дает, например, теория возмущений и метод вариаций.



Постановка задачи

Проблема

Проблемой является столкновение с нерешаемостью аналитическим подходом уравнения Шредингёра.

Актуальность

Приведенные методы наиболее используемы в вопросах касающихся неразрешимых аналитически уравнений.

Цель

Познакомить с теорией и на простейших примерах продемонстрировать теорию возмущений и вариационный метод.

Теория возмущений

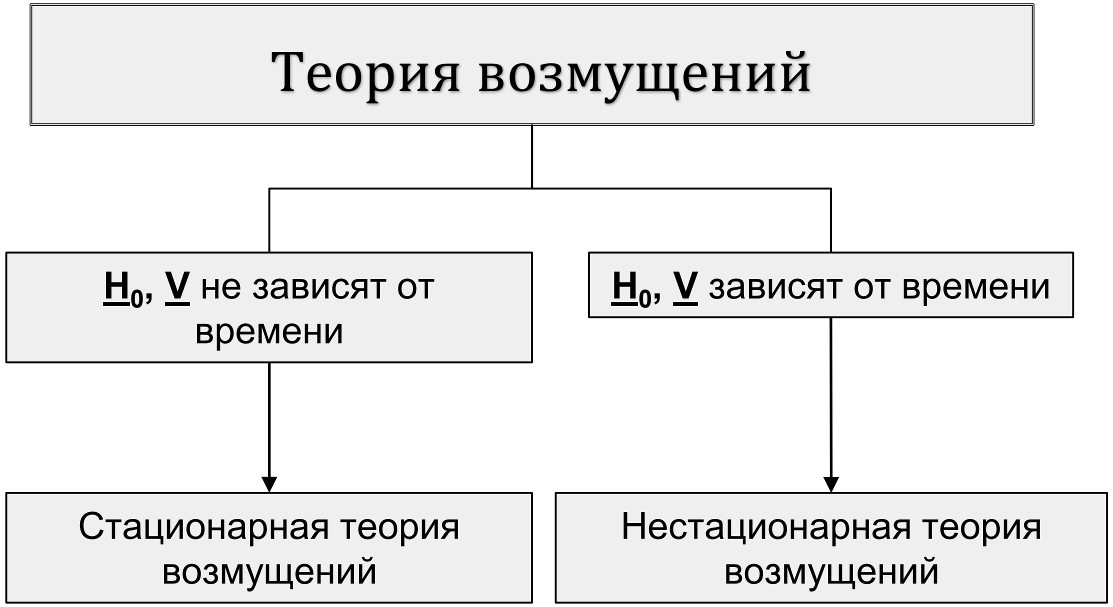
Применимость: Гамильтониан H системы можно представить в виде:

$$H = H_0 + \lambda V,$$

где H_0- гамильтониан системы, имеющей аналитическое решение,

$\lambda \ll 1$ –константа связи,

V - оператор возмущения.



Стационарная теория возмущений

Стационарная теория возмущений подразумевает решение стационарного уравнения Шрёдингера, то есть операторы явно не зависят от времени.

Стационарная теория возмущений, опять же, подразделяется на два принципиально различающихся случая.

Невырожденная стационарная теория возмущений

Для невозмущенной системы каждому значению энергии соответствует одна волновая функция.

Известны собственные значения $E_n^{(0)}$ и собственные функции $n^{(0)}$ гамильтониана невозмущенной системы $\underline{H}_0$, то есть

$$\underline{H}_0|n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}|n^{(0)}\rangle$$

Возмущенная система:

$$\underline{(H_0+V)}|n\rangle = E_n|n\rangle$$

E_n и $|n\rangle$ уже не являются известными.

$|n\rangle$ - линейная комбинация невозмущенных собственных векторов:

$$|n\rangle = \Sigma a_n\,|\,n^{(0)}\rangle$$

Невырожденная стационарная теория возмущений

Уравнение Шрёдингера:

$\langle m|\ *|$ $\quad \underline{(H_0+\lambda V)}\ \Sigma a_n\ |\ n^{(0)}\rangle = \Sigma\ E_n\ a_n\ |\ n^{(0)}\rangle$

$[E-E_m^{(0)}]a_m = \Sigma V_{mn}a_n,$

где $V_{mn}=\langle m|V|n^{(0)}\rangle.$

$\lambda << 1:$

$E_n = E_n^{(0)} + \Sigma\lambda^p e_p$

$|n\rangle = |n^{(0)}\rangle + \Sigma\lambda^p|n^{(p)}\rangle$

$\langle n^{(0)}|n\rangle \equiv 1$

p=0: $\quad \langle n^{(0)}|n\rangle = 1 \Rightarrow |n\rangle = |n^{(0)}\rangle$

p=1: $\quad \langle n^{(0)}|n\rangle = \langle n^{(0)}|n^{(0)}\rangle + \langle n^{(0)}|\ \lambda|n^{(1)}\rangle$

$\langle n^{(0)}|n\rangle=1+\lambda\langle n^{(0)}|\ n^{(1)}\rangle$

$\lambda\langle n^{(0)}|\ n^{(1)}\rangle=0$

...

$\langle n^{(i)}|\ n^{(0)}\rangle=0,\ i \in N$

Невырожденная стационарная теория возмущений

Уравнение Шрёдингера:

$$(\underline{H}_0+\lambda\underline{V})\left(|n^{(0)}\rangle + \Sigma\lambda^p|n^{(p)}\rangle\right)= \left(E_n^{(0)} + \Sigma\lambda^p e_p\right)\left(|n^{(0)}\rangle + \Sigma\lambda^p|n^{(p)}\rangle\right)$$

$p = 0$: $\underline{H}_0|n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}|n^{(0)}\rangle$

$p = 1$: $\underline{H}_0|n^{(1)}\rangle + \underline{V}|n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}|n^{(1)}\rangle + e_1|n^{(0)}\rangle$

$p = p$: $\underline{H}_0|n^{(p)}\rangle + \underline{V}|n^{(p-1)}\rangle = E_n^{(0)}|n^{(p)}\rangle + e_1|n^{(p-1)}\rangle$

$p = 1$

$$\langle n^{(0)}|\ {*}|\ \underline{H}_0|n^{(1)}\rangle + \underline{V}\ |\ n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}|n^{(1)}\rangle + e_1|n^{(0)}\rangle$$

$$\langle n^{(0)}|\ \underline{H}_0|n^{(1)}\rangle + \langle n^{(0)}|\ \underline{V}\ |\ n^{(0)}\rangle = \langle n^{(0)}|\ E_n^{(0)}|n^{(1)}\rangle + \langle n^{(0)}|\ e_1|n^{(0)}\rangle$$

$$\langle n^{(0)}|\ \underline{V}\ |\ n^{(0)}\rangle = e_1$$

$$|n^{(1)}\rangle = \Sigma C_k\ |\ k^{(0)}\rangle\ ,\ C_k\text{-?}$$

$$\langle k^{(0)}|\ \underline{H}_0|n^{(1)}\rangle + \langle k^{(0)}|\ \underline{V}\ |\ n^{(0)}\rangle = \langle k^{(0)}|\ E_n^{(0)}|n^{(1)}\rangle + \langle k^{(0)}|\ e_1|n^{(0)}\rangle$$

$$E_k^{(0)}\ C_k + V_{kn} = E_n^{(0)}\ C_k$$

$$C_k = \frac{V_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}$$

Невырожденная стационарная теория возмущений

Поправки I порядка:

$$e_1 = \langle n^{(0)} | \underline{V} | n^{(0)} \rangle$$

$$|n^{(1)}\rangle = \Sigma \frac{V_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} | k^{(0)} \rangle$$

Поправка II порядка (для энергии):

$$e_2 = \langle n^{(0)} | \underline{V} | n^{(1)} \rangle$$

$$e_2 = \Sigma \frac{V_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \langle n^{(0)} | \underline{V} | k^{(0)} \rangle$$

$$e_2 = \Sigma \frac{V^2{}_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}$$

Поправка p порядка:

$$e_p = \langle n^{(0)} | \underline{V} | n^{(p-1)} \rangle$$

$$|n^{(p)}\rangle = \Sigma C_k \, | k^{(0)} \rangle$$

$$C_k = [\langle n^{(0)} | \underline{V} | n^{(p-1)} \rangle - \Sigma \, e_{p-m} \langle n^{(0)} | n^{(m)} \rangle]$$

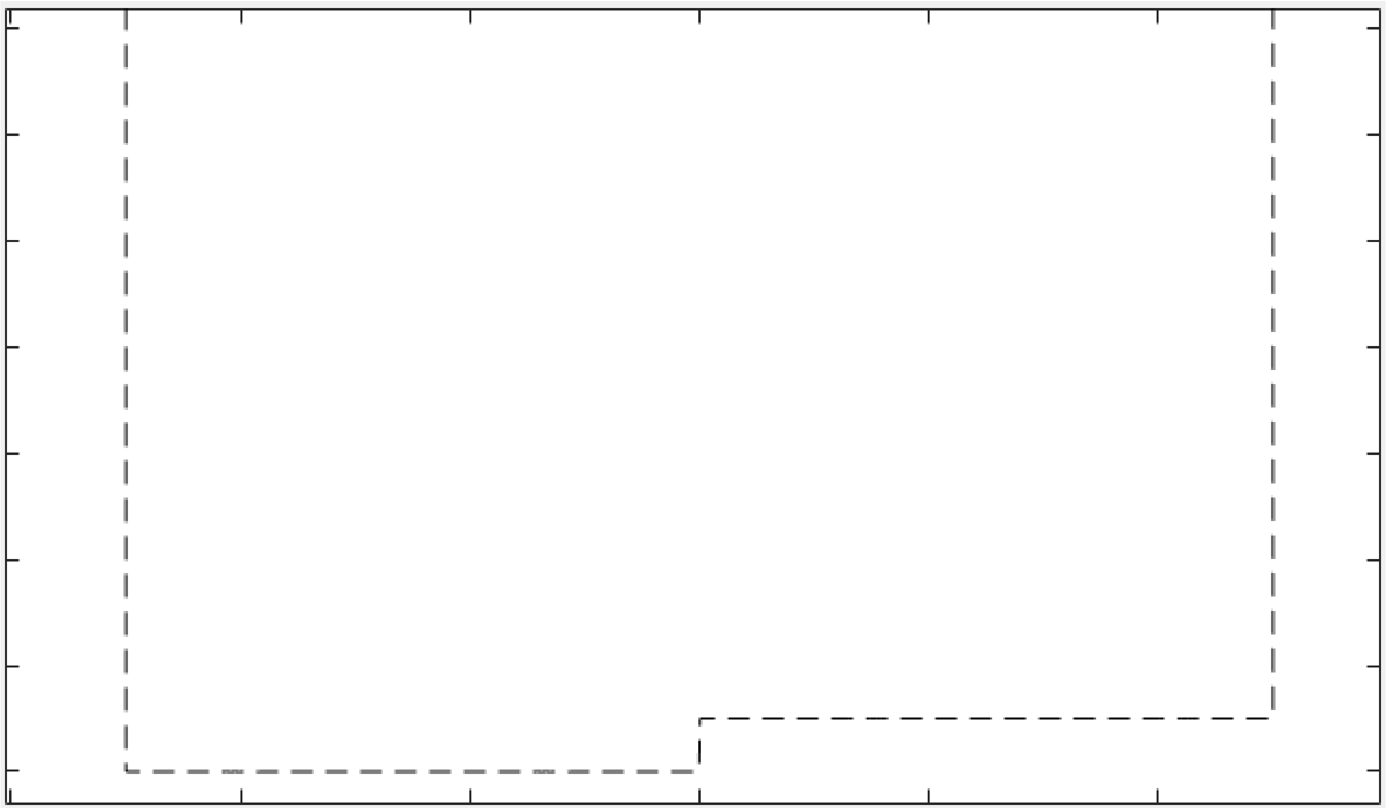
$$/(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})$$

Движение частицы в одномерной потенциальной яме прямоугольного профиля с бесконечными стенками. Возмущение в виде ступеньки*.

- Для уже решенной (см. приложение Б) задачи об одномерной потенциальной яме с известными волновыми функциями и значениями энергии введем возмущение ступенчатого вида.

$$V = \lambda * \theta\left(\frac{L}{2} - x\right) \text{ эВ},$$

λ=0,01



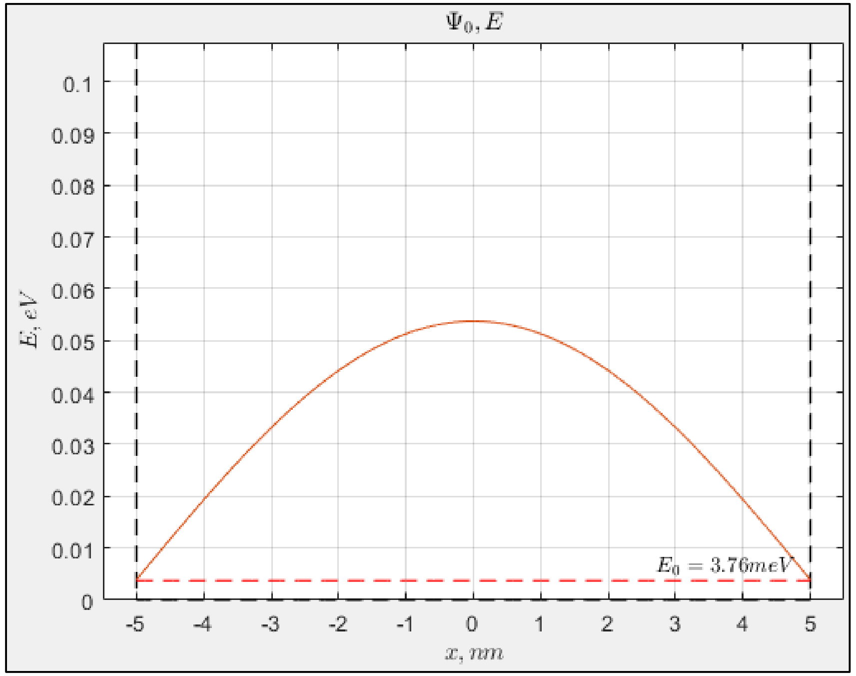
*Решение данной задачи приведено в файле NDSP.mat

Движение частицы в одномерной потенциальной яме прямоугольного профиля с бесконечными стенками. Возмущение в виде ступеньки

- Для решения данного невозмущенного профиля можно использовать готовые выражения из приложения Б, но для возможности менять вид профиля был использован численный метод.

- Решение невозмущенной задачи для основного состояния:

  E_0=3.76 мэВ




```
%numerical solution for hamiltonian
E=eye(Np)*(-30);
E=E+diag(ones(1,Np-1)*16,-1);
E=E+diag(ones(1,Np-1)*16,1);
E=E+diag(ones(1,Np-2)*(-1),-2);
E=E+diag(ones(1,Np-2)*(-1),2);

%Hamiltonian
H=E*koef+diag(U);
Hpetr=E*koef+diag(U+Upetr);

%finding eigenvalues and eigenvectors
[P,En]=eig(H);
[Ppetr,Enpetr]=eig(Hpetr);
En=diag(En);
Enpetr=diag(Enpetr);
```

Движение частицы в одномерной потенциальной яме прямоугольного профиля с бесконечными стенками. Возмущение в виде ступеньки

- Ограничимся n_1-n_{10}
- Найдем поправки e_1, $|n^{(1)}\rangle$, e_2

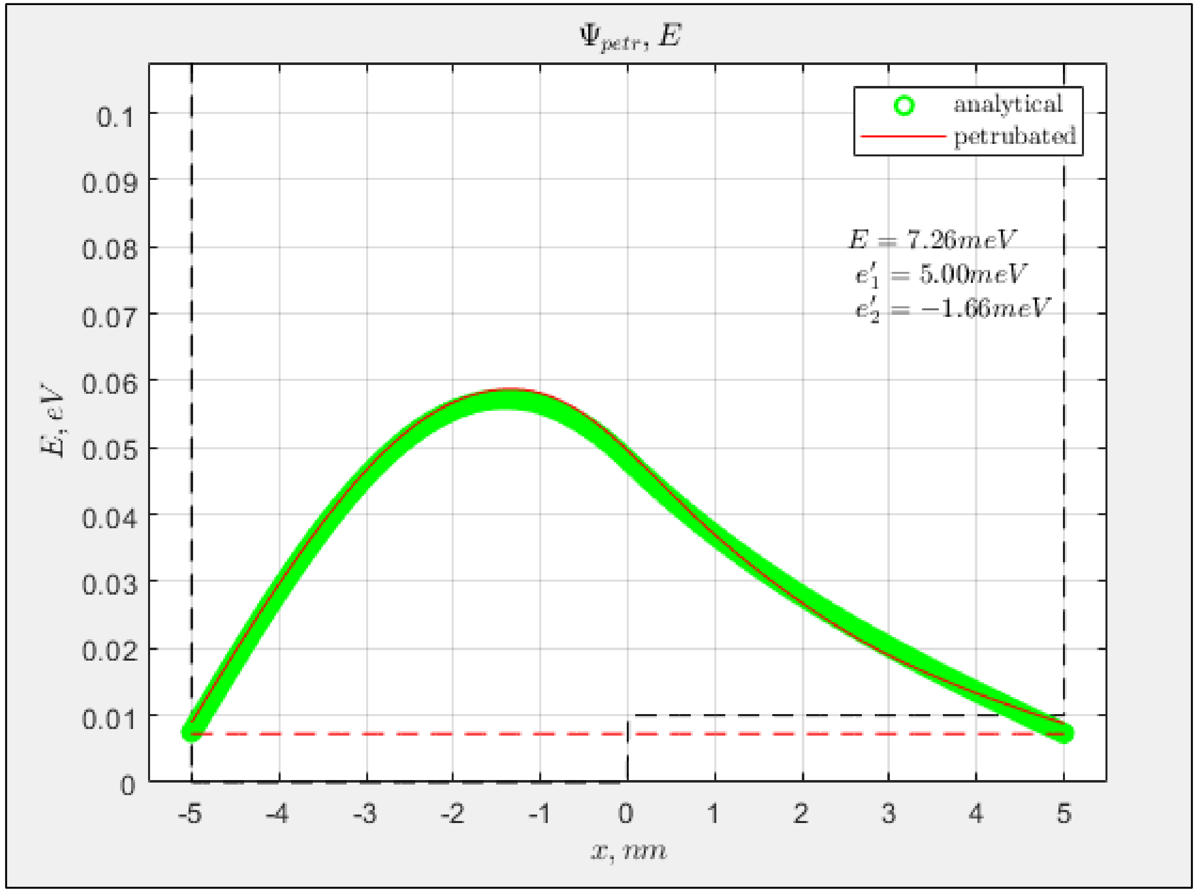
e_1 = 5 мэВ

e_2 = -1.66 мэВ

- Полученное значение энергии:

$E' = E_0 + e_1 + e_2$ = 7.09 мэВ

- Численное решение дало значение 7,26 мэВ, аналитическое – 7,28 мэВ (wellbarier.m/приложение Ж).
- Значение расходится с полученным численным методом на $\epsilon = \delta E/E = 2{,}33\%$, что является удовлетворяющим для наложенных ограничений.



Движение частицы в одномерной потенциальной яме прямоугольного профиля с бесконечными стенками. Периодическое возмущение*.

- Профиль типа:

$$U = \lambda \sin\left(\frac{10\pi}{L} x\right)$$

- Поправки e_1, $|n^{(1)}\rangle$, e_2

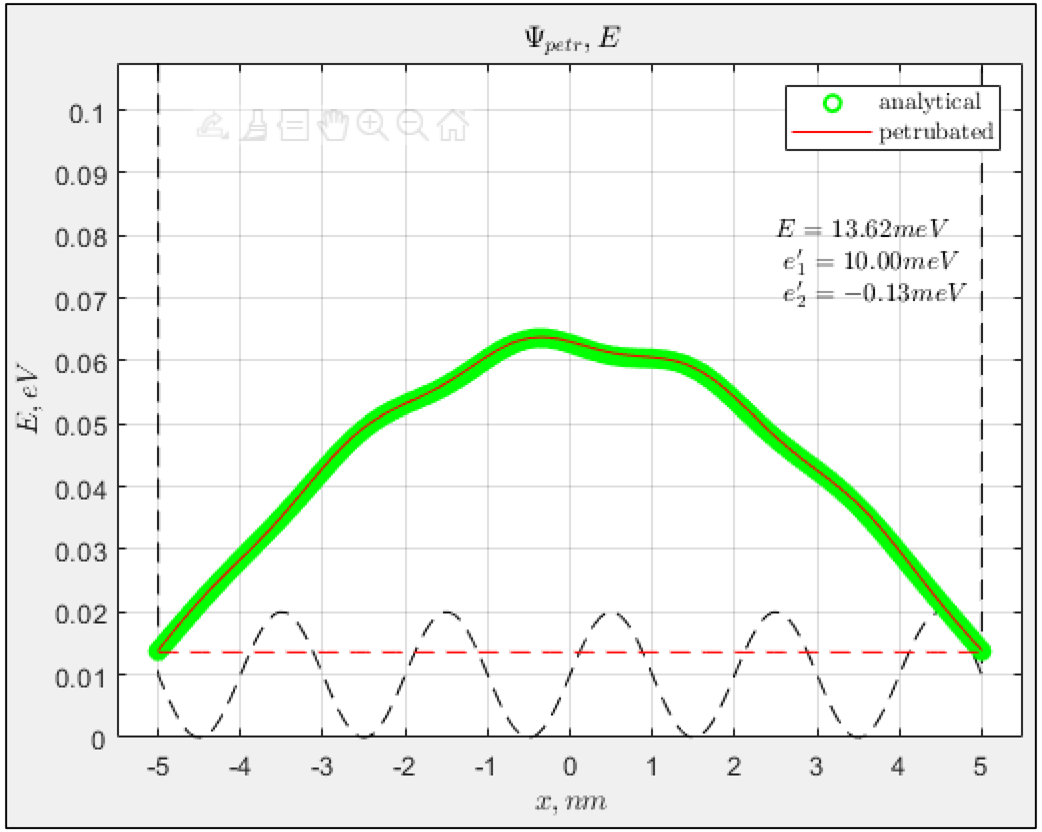
e_1 = 10.62 мэВ

e_2 = -0.13 мэВ

- Полученное значение энергии:

$E' = E_0 + e_1 + e_2 = 13.63$ мэВ

- ϵ=0.07%



*Решение данной задачи приведено в файле NDSP.mat

Стационарная теория возмущений

Стационарная теория возмущений подразумевает решение стационарного уравнения Шрёдингера, то есть операторы явно не зависят от времени.

Стационарная теория возмущений, опять же, подразделяется на два принципиально различающихся случая.

Вырожденная стационарная теория возмущений

Для невозмущенной системы каждому значению энергии может соответствовать не одна волновая функция.

Известны собственные значения $E_n^{(0)}$ и собственные функции $n^{(0)}_\alpha$ гамильтониана невозмущенной системы $\underline{H}_0$, то есть

$$\underline{H}_0|n^{(0)}_\alpha\rangle = E_n^{(0)}|n^{(0)}_\alpha\rangle$$

$\alpha=1,2\ldots k$ –вырожденные уровни

По-прежнему для энергий:

$$E_n = E_n^{(0)} + \Sigma\lambda^p e_p$$

$$|n\rangle = |n^{(0)}\rangle + \Sigma\lambda^p|n^{(p)}\rangle$$

Но:

$$|n^{(0)}\rangle=\Sigma C_\alpha |n^{(0)}_\alpha\rangle$$

Зафиксируем:

$$\langle n^{(0)}_\alpha|n\rangle \equiv C_\alpha$$

Спектр ортонормирован:

$$\langle n^{(0)}_\alpha|n^{(0)}_b\rangle = \delta_{ab}$$

Вырожденная стационарная теория возмущений

- Уравнение Шрёдингера (для p=1):

$(\underline{H}_0+\lambda\underline{V})(\Sigma C_a|n^{(0)}{}_a\rangle + \lambda|n^{(1)}\rangle) = (E_n{}^{(0)} + \lambda e_1)(\Sigma C_a|n^{(0)}{}_a\rangle+\lambda|n^{(1)}\rangle)$

$\langle n^{(0)}{}_b| \ast| \quad \underline{V}\, \Sigma C_a|n^{(0)}{}_a\rangle + \underline{H}_0\, |n^{(1)}\rangle = E_n{}^{(0)}\, |n^{(1)}\rangle + e_1\, \Sigma C_a|n^{(0)}{}_a\rangle$

$\Sigma C_a\, V_{ba} + \langle n^{(0)}{}_b|\underline{H}_0|n^{(1)}\rangle = E_n{}^{(0)}\langle n^{(0)}{}_b|n^{(1)}\rangle + e_1\Sigma C_a\langle n^{(0)}{}_b|n^{(0)}{}_a\rangle$

где $V_{ba} = \langle n^{(0)}{}_b|\, \underline{V}\, |n^{(0)}{}_a\rangle$

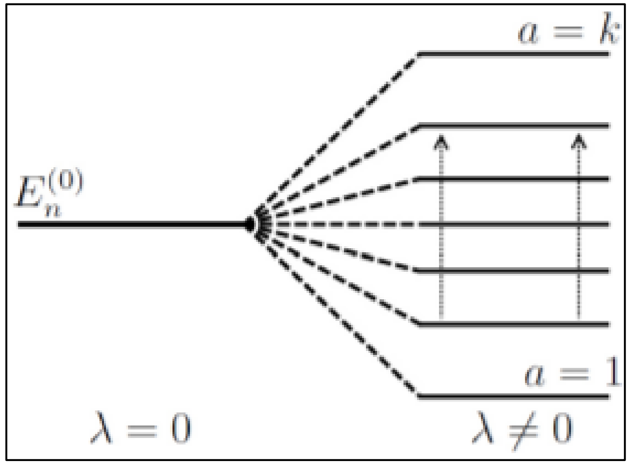
$\langle n^{(0)}{}_b|\underline{H}_0|n^{(1)}\rangle = \langle \underline{H}_0 n^{(0)}{}_b|n^{(1)}\rangle = E_n{}^{(0)}\langle n^{(0)}{}_b|n^{(1)}\rangle = 0$

$\Sigma C_a\, V_{ba} = e_1 \Sigma C_a \delta_{ab}$

$\Sigma C_a\, [V_{ba} - e_1 \delta_{ab}] = 0$

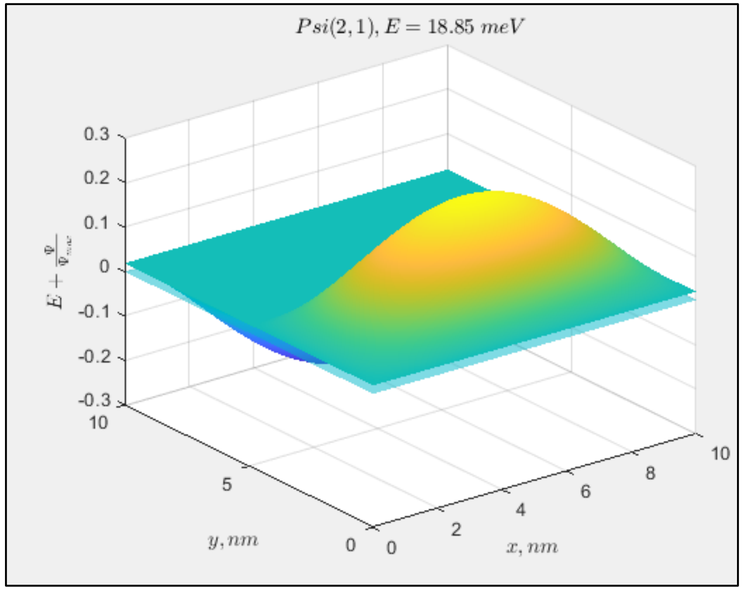
$\underline{V}\mathbf{C} = e_1\mathbf{C}$

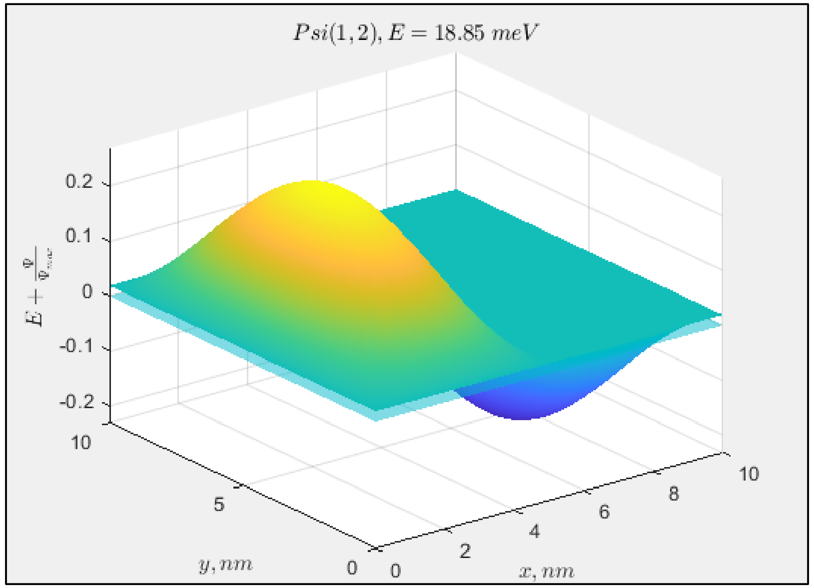
$|m_g\rangle = |n^{(0)}\rangle + \lambda|n^{(1)}\rangle = \Sigma C_a|n^{(0)}{}_a\rangle$



Движение частицы в двумерной потенциальной яме квадратного профиля с бесконечными стенками. Возмущение в виде ступеньки*.

- В качестве системы, имеющей вырождение возьмем простейший случай.
- Вырожденными являются ψ_{12} и ψ_{21}
- Задача является уже решенной (см. приложение B), то есть известны волновые функции и значения энергии





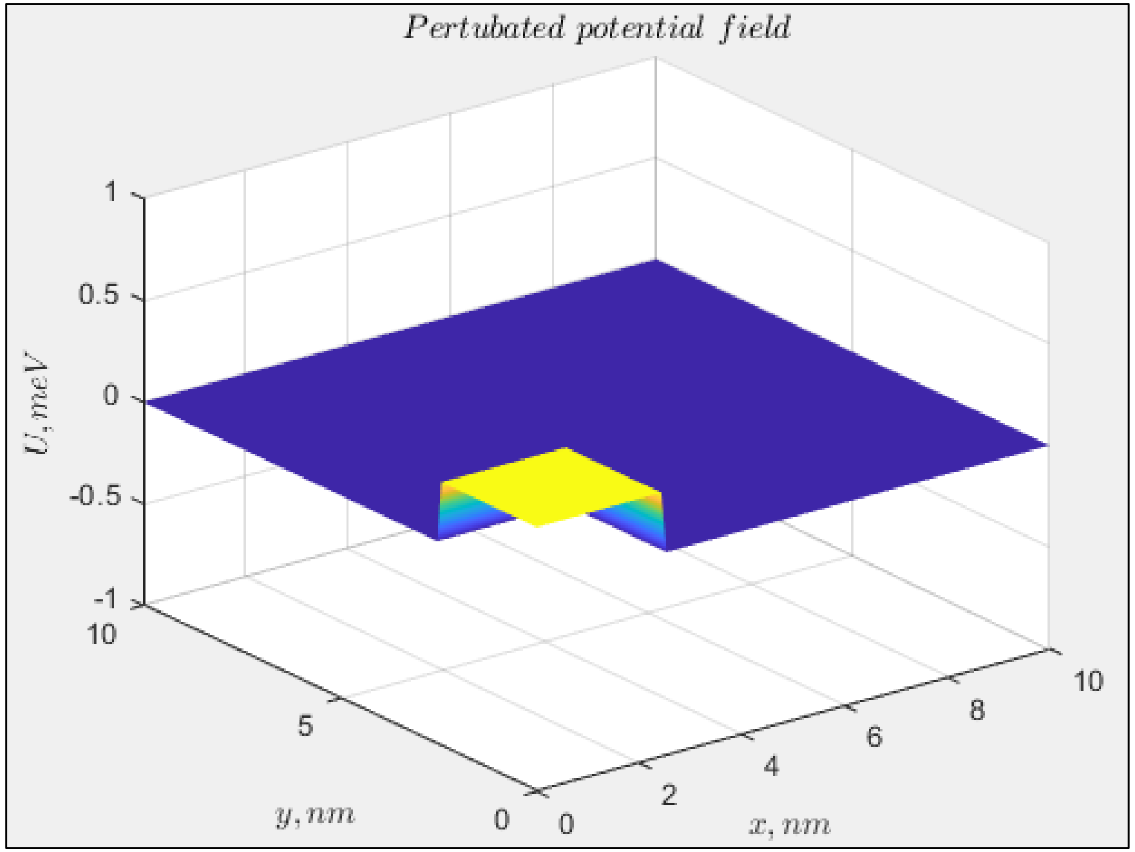
*Решение данной задачи приведено в файле DSP.mat

Движение частицы в двумерной потенциальной яме квадратного профиля с бесконечными стенками. Возмущение в виде ступеньки*.

Введем возмущение ступенчатого вида.

$$V = \lambda\,\theta\left(\frac{L}{4} - y\right)\theta\left(\frac{L}{4} - x\right)\text{эВ},$$

λ=0,3



Движение частицы в двумерной потенциальной яме квадратного профиля с бесконечными стенками. Возмущение в виде ступеньки*.

Кратность вырождения k=2

$V_{11} = \langle \psi_{12} | \underline{V} | \psi_{12} \rangle = V_{22}$

$V_{12} = \langle \psi_{12} | \underline{V} | \psi_{21} \rangle = V_{21}$

Тогда:

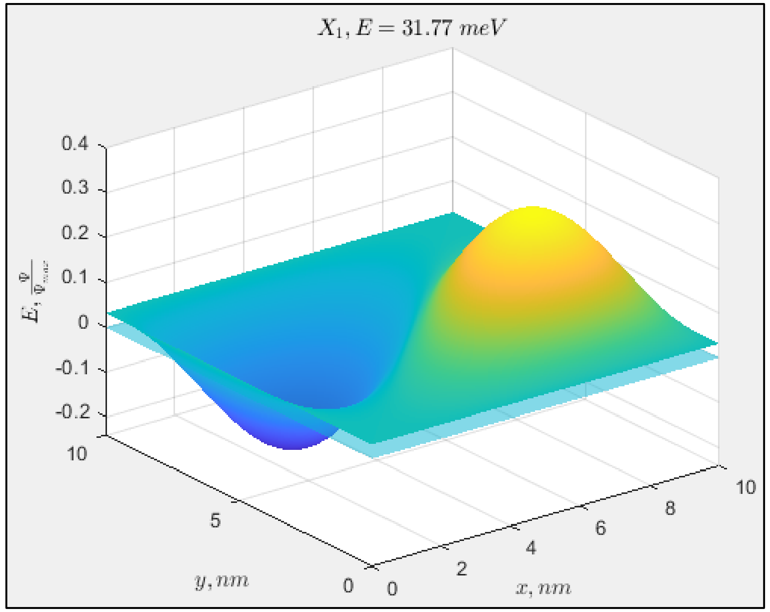
$C_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}};$ $\quad$ $C_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}};$

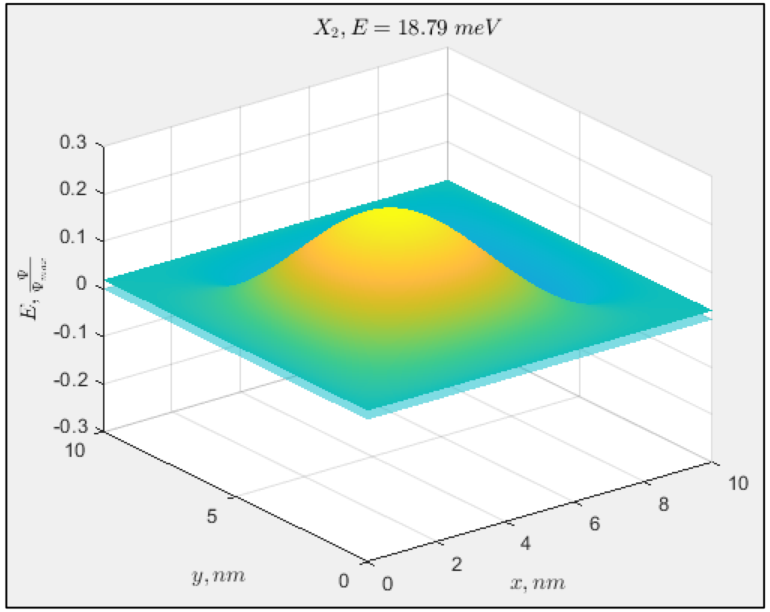
$X_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{12} + \psi_{21})$ $\quad$ $X_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{12} - \psi_{21})$

Собственные значения:

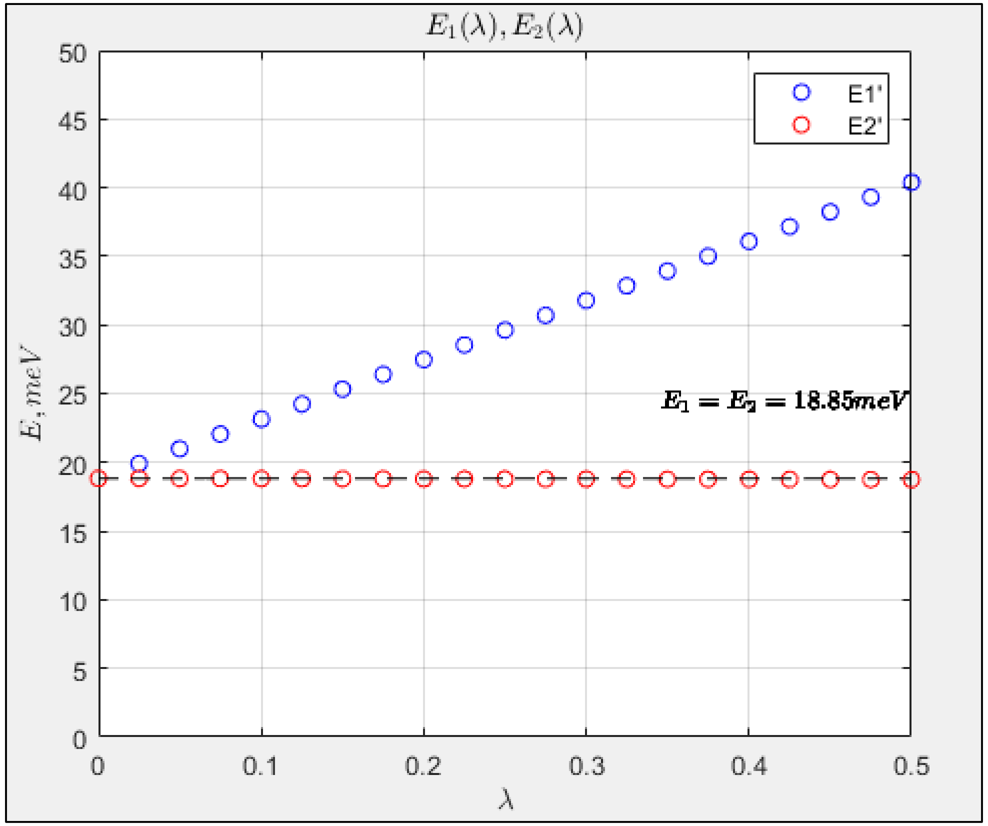
de_1=13,503 мэВ $\quad$ de_2=-0,058 мэВ

$de_i = \langle X_i | \underline{V} | X_i \rangle$





Движение частицы в двумерной потенциальной яме квадратного профиля с бесконечными стенками. Возмущение в виде ступеньки*.



Зависимость поправок от коэффициента связи – линейна.

Стационарная теория возмущений

Стационарная теория возмущений подразумевает решение стационарного уравнения Шрёдингера, то есть операторы явно не зависят от времени.

Стационарная теория возмущений, опять же, подразделяется на два принципиально различающихся случая.

Теория возмущений

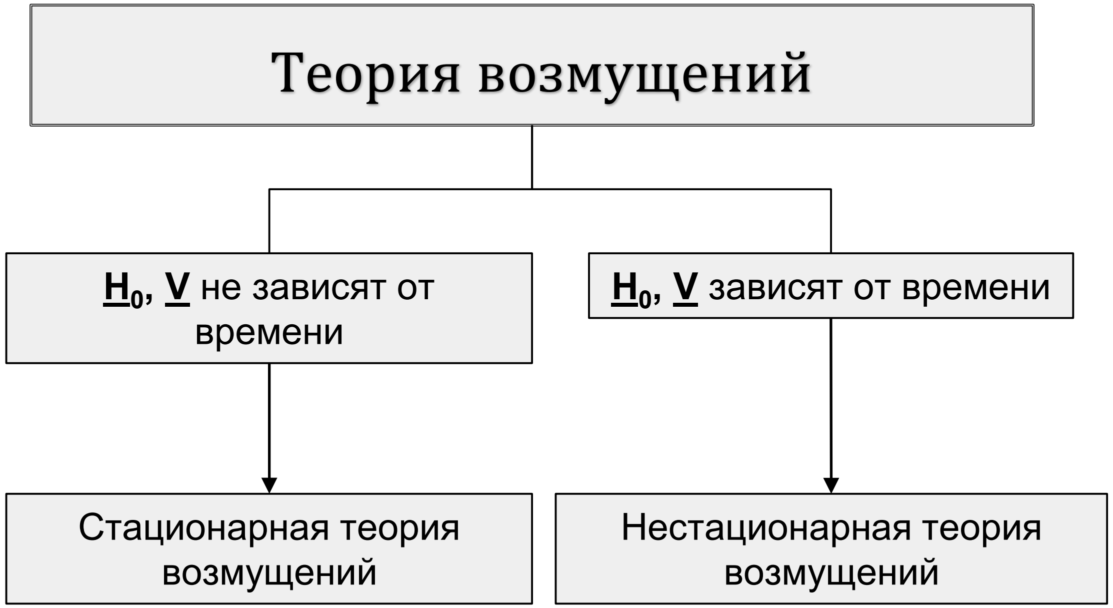
Применимость: Гамильтониан $\underline{H}$ системы можно представить в виде:

$$\underline{H = H_0} + \lambda \underline{V},$$

где $\underline{H}_0$- гамильтониан системы, имеющей аналитическое решение,

$\lambda << 1$ –константа связи,

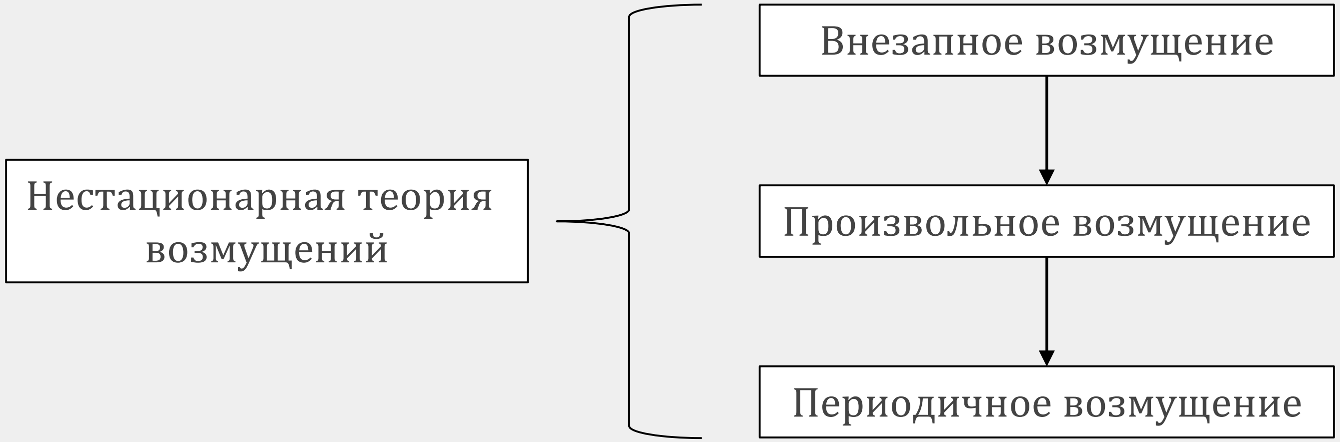
$\underline{V}$ - оператор возмущения.



Нестационарная теория возмущений

Пусть возмущение $\underline{V}(t)$ зависит от времени. Будем считать, что возмущение начинает действовать в момент $t = 0$, т.е. $\underline{V}(t) \equiv 0$ при $t < 0$.

$$\underline{H} = \underline{H}(t)$$



Внезапное возмущение

$V(t) \in [0, V]$

$t \in [0, \tau], \tau << T$

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \widehat{H}\Psi$$

$$\hbar \frac{|\Delta\Psi|}{\Delta t} \sim \left|E_i - E_j\right| |\Psi|$$

$$\frac{|\Delta\Psi|}{|\Psi|} \sim \frac{\Delta t \left|E_i - E_j\right|}{\hbar} \ll 1$$

$$\Delta t \ll \frac{\hbar}{\left|E_i - E_j\right|} \sim T$$

$\Psi(0) = | i \rangle$

$\Psi(\tau) \approx \Psi(0) = | i \rangle$

$\tau < T$: $|\Psi(\tau)\rangle = \Sigma a_k \mid \psi_k\rangle$

$a_k = \langle \psi_k | \Psi(\tau)\rangle = \langle \psi_k | i \rangle$

Произвольное возмущение

τ~T

$i\hbar|\Psi(t)\rangle' = (\underline{H}_0 + \lambda\, \underline{V})|\Psi(t)\rangle$

$\Psi(0) = |\, i\, \rangle$

$|\Psi(t)\rangle = \Sigma a_k(t)\, |\, k\rangle \exp(-i\omega_k t)$

$a_k(0)=\delta_{ik}$

$i\hbar\, \Sigma a'_k(t)\, |\, k\rangle \exp(-i\omega_k t) + \hbar\, \Sigma a_k(t)\, |\, k\rangle \omega_k \exp(-i\omega_k t) =$

$\Sigma a_k(t)\, \underline{H_0}|\, k\rangle \exp(-i\omega_k t) + \lambda \Sigma a_k(t)\, \underline{V}|\, k\rangle \exp(-i\omega_k t)$

$\hbar\omega_k\, |\, k\rangle = E_k\, |\, k\rangle = \underline{H}\, |\, k\rangle$

$i\hbar\, \Sigma a'_k(t)\, |\, k\rangle \exp(-i\omega_k t) = \lambda \Sigma a_k(t)\, \underline{V}\, |\, k\rangle \exp(-i\omega_k t)$

$\langle n\, |$*

$i\hbar\, a'_n(t) \exp(-i\omega_n t) = \lambda \Sigma a_k(t)\, \underline{V_{nk}} \exp(-i\omega_k t)$

$a'_n(t) = -i\lambda/\hbar * \Sigma a_k(t)\, \underline{V_{nk}} \exp(i(\omega_n - \omega_k)t)$

$a_n(t) = a^{(0)}{}_n(t) + \lambda a^{(1)}{}_n(t) \ldots$

$a_n(0) = a^{(0)}{}_n(0) + \lambda a^{(1)}{}_n(0) + \ldots = \delta_{in}$

$a^{(0)}{}_n(0) = \delta_{ik},\ a^{(1)}{}_n(0) = 0, \ldots$

$a^{(0)}{}_n(t) + \lambda a^{(1)}{}_n(t) \ldots =$

$= -i\lambda/\hbar * \Sigma(a^{(0)}{}_k(t) + \lambda a^{(1)}{}_k(t) \ldots)\, \underline{V_{nk}} \exp(i(\omega_n - \omega_k)t)$

$a'^{(0)}{}_n(t) = 0 \Rightarrow a_n(t) = \mathrm{const} = a_n(0) = \delta_{in}$

$a'^{(1)}{}_n(t) = -i\lambda/\hbar * \underline{V_{ni}} \exp(i(\omega_n - \omega_k)t)$

$$a(t) = -\frac{i}{\hbar} \lambda \int_0^t V_{ni}(t) e^{-i(\omega_i - \omega_k)t'}\, dt'$$

Периодичное возмущение

$V(t) = F_0\cos(\omega t) = F\exp(i\omega t) + F\exp(-i\omega t)$

$$a(t) = -\frac{i}{\hbar}\lambda F_{ni}\int_0^t e^{-\mathrm{i}(\omega_i-\omega_k\pm\omega)t'}\,dt'$$

$\omega = \omega_i - \omega_k$

$t \gg T$

$$a(t) = -\frac{i}{\hbar}\lambda F_{ni}\int_0^t e^{-\mathrm{i}(\omega_i-\omega_k+\omega)t'}\,dt'$$

$$P = |a(t)|^2 = \frac{4\lambda^2}{\hbar^2}F_{ni}\frac{\sin^2\left(\frac{\Delta E/2}{\hbar}t\right)}{\Delta E^2}$$

$$P_n = \int P\,\rho_n dE_n$$

$$P = \lambda^2\frac{2\pi t}{\hbar}|F_{ni}|^2\delta(\Delta E)$$

$W = \frac{P}{t} = \frac{2\pi}{\hbar}|F_{ni}|^2\delta(\Delta E)$ - частота переходов

$W \sim 1/\tau$

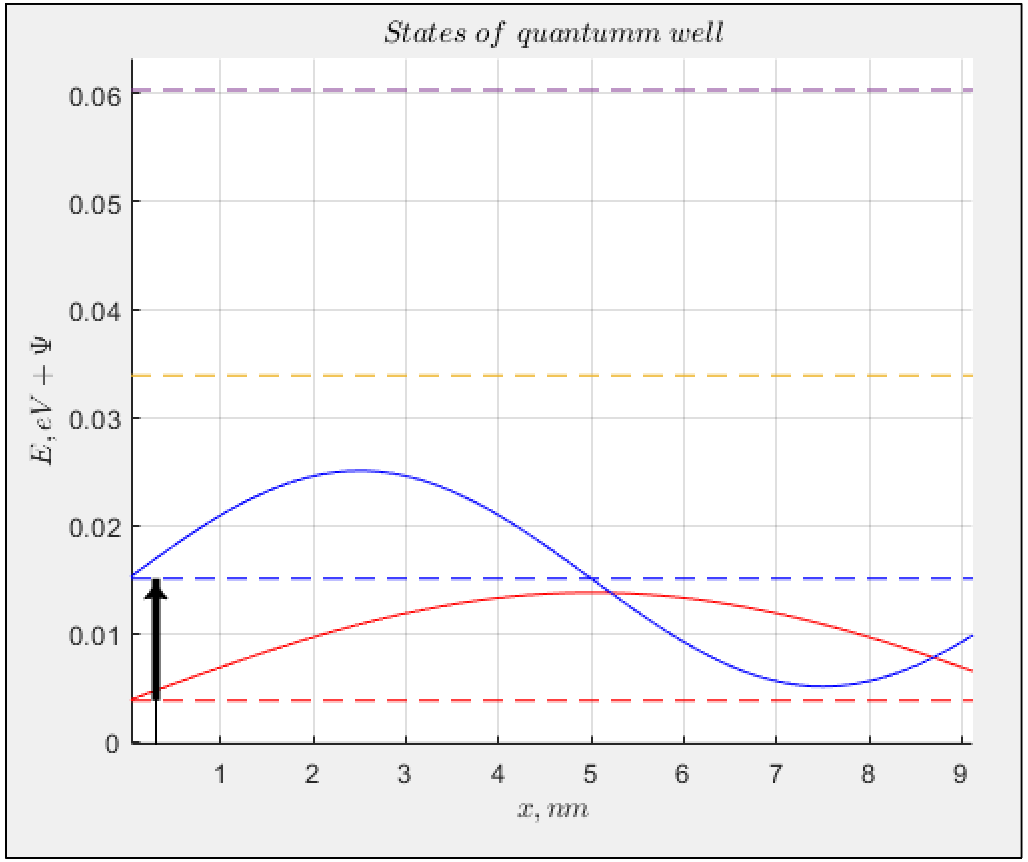
Периодичное возмущение

Решение задачи приведено в файле PTNSP.mat

Рассмотрим одномерную потенциальную яму в которой переход из основного на первое возбужденное состояние происходит под действием периодичного поля:

F=0,5cos(ωt), эВ

Частоту ω определим из разности энергий уровней.



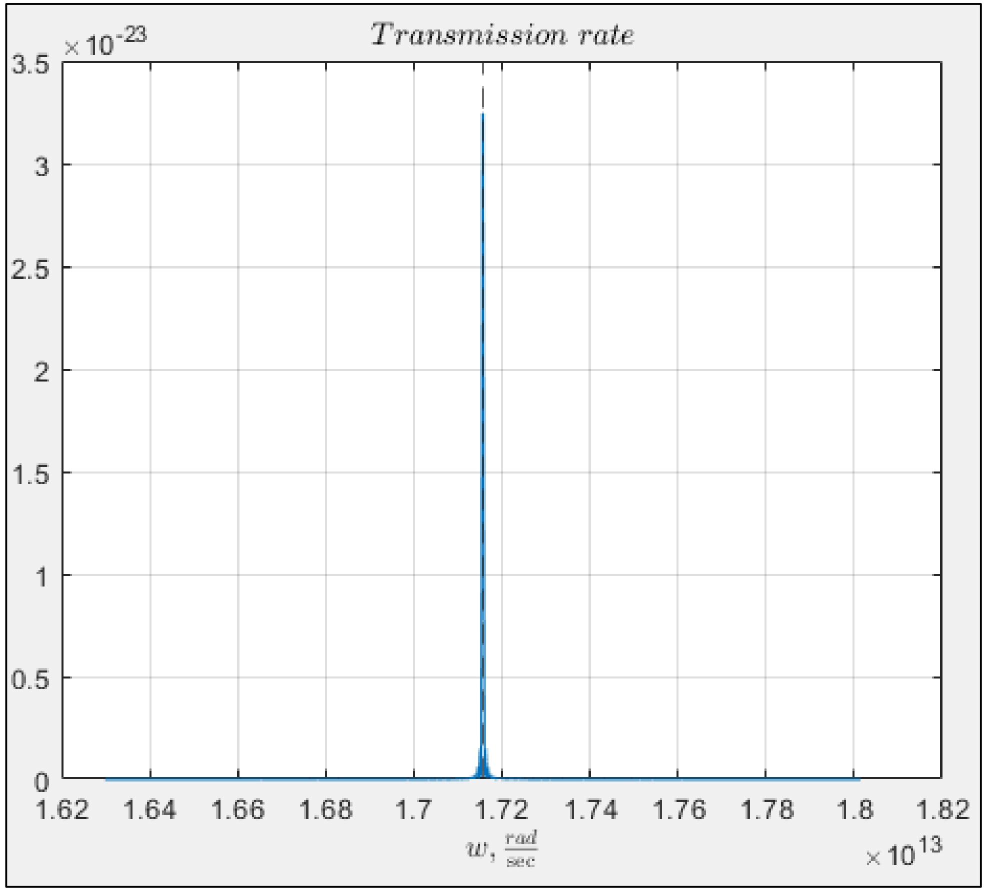
Периодичное возмущение

Решение задачи приведено в файле PTNSP.mat

Частота переходов W будет равна следующей величине:

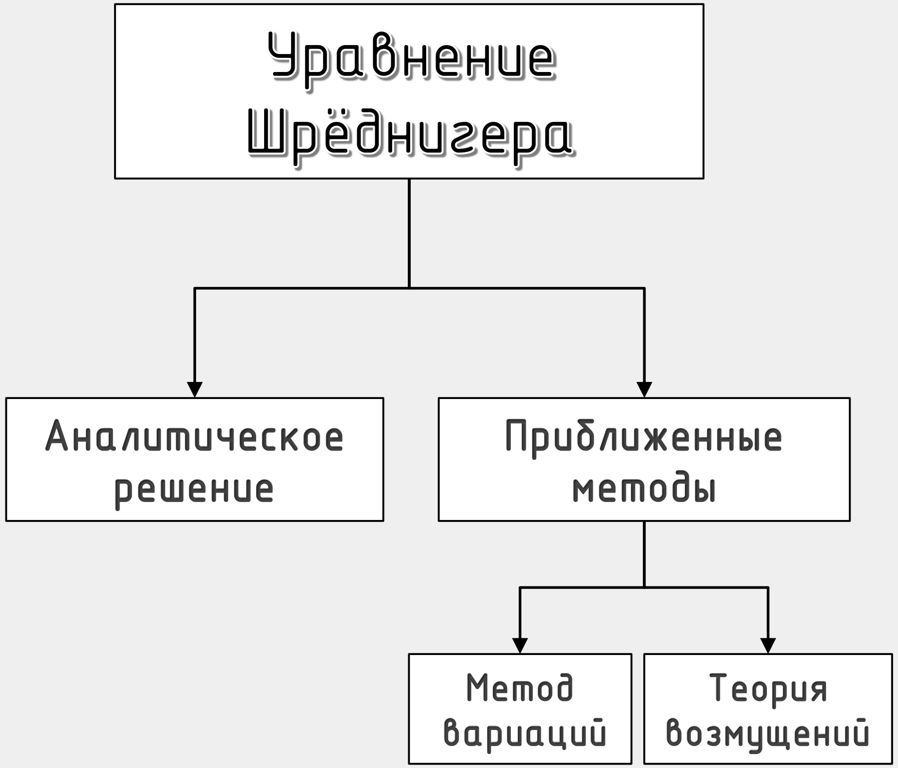
$$W=1{,}25 \cdot 10^{-23}\ c^{-1}$$

Времени жизни основного состояния порядка 10^{23} секунд.



Введение

Не всегда задача решения уравнения Шредингера является аналитически разрешимой. В таких случаях обращаются к использованию приближенных решений. Такие решения дает, например, теория возмущений и метод вариаций.



Метод вариаций

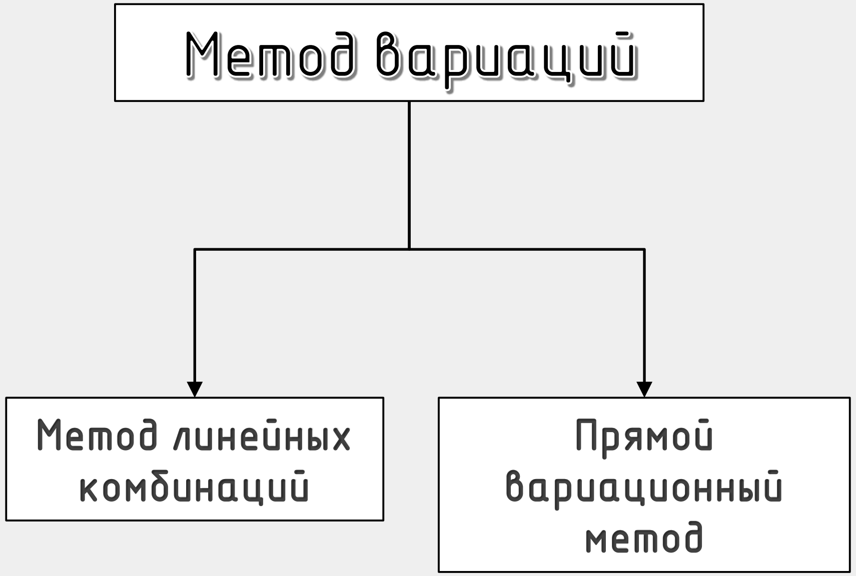
В отличие от теории возмущений мы не упрощаем гамильтониан, а подбираем функцию.

Данная произвольная функция $|\Psi_0\rangle$ должна реализовать минимум средней энергии.

$$|\Psi_0\rangle = \sum c_n |\psi_n\rangle,$$

$$\langle E\rangle = \langle\Psi_0|H|\Psi_0\rangle = \sum |c_n|^2 E_n \geq \sum |c_n|^2 E_0 = E_0 \sum |c_n|^2 = E_0$$

$$\langle E\rangle \geq E_0$$



Метод линейных комбинаций

$$|\Psi_0\rangle = \sum c_n|\varphi_n\rangle$$

$$\partial E/(\partial c_1)=\partial E/(\partial c_2)=\ldots=\partial E/(\partial c_n)=0$$

$$\langle\Psi_0|\Psi_0\rangle=\sum\sum c_i^* c_j\langle\varphi_i|\varphi_j\rangle=\sum\sum c_i^* c_j S_{ij}=1$$

$$\delta[\langle\Psi_0|H_0|\Psi_0\rangle-E\langle\Psi_0|\Psi_0\rangle] =$$

$$= \delta\sum\sum c_i^* c_j[\langle\varphi_i|H_0|\varphi_j\rangle-ES_{ij}]$$

$$H_{ij}=\langle\varphi_i|H_0|\varphi_j\rangle$$

$$\sum c_i^* \sum c_j[H_{ij}-ES_{ij}]=0$$

$$\sum c_j[H_{ij}-ES_{ij}]=0$$

$$\det[H_{ij}-ES_{ij}]=0$$

$$E_1<E_2<\ldots$$

Для $E_1 \sum c_j[H_{ij}-E_1S_{ij}]=0$

Профиль ступенчатого типа

*решение задачи в файле linear.mat

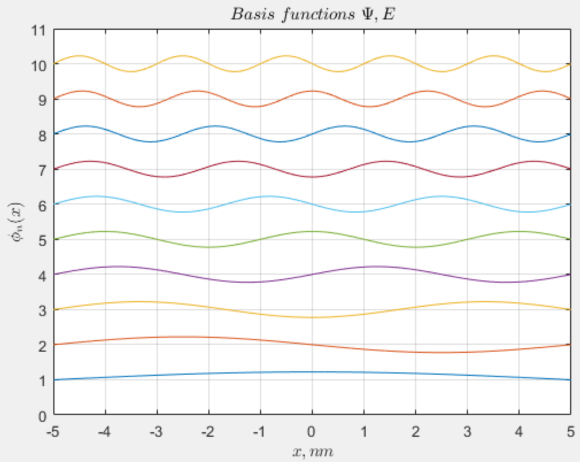
Профиль – ступенька.

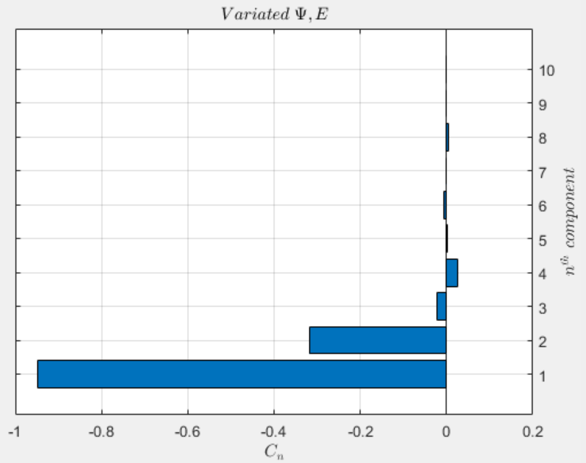
Базисные функции - решение задачи о яме:

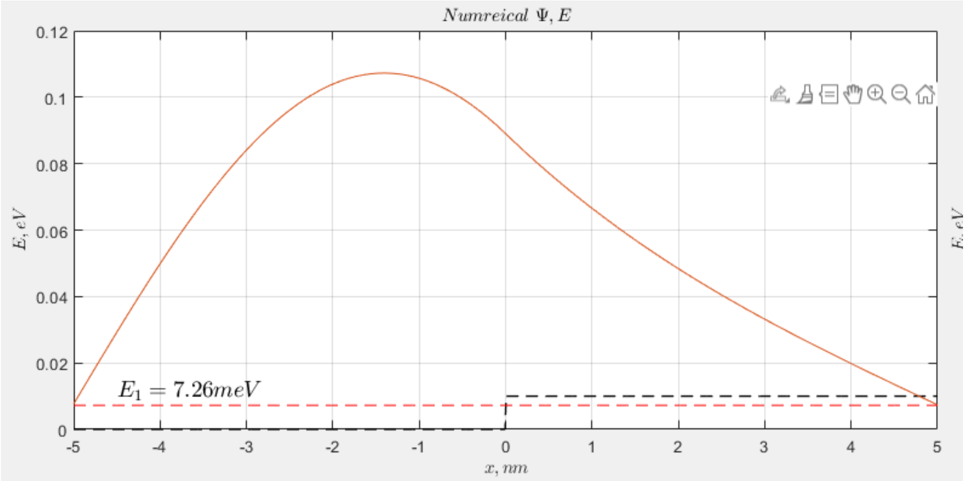
$$\varphi_n = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{\pi n}{a}x + \frac{\pi}{2}n\right), \mathbf{n = 1 \dots 10}$$

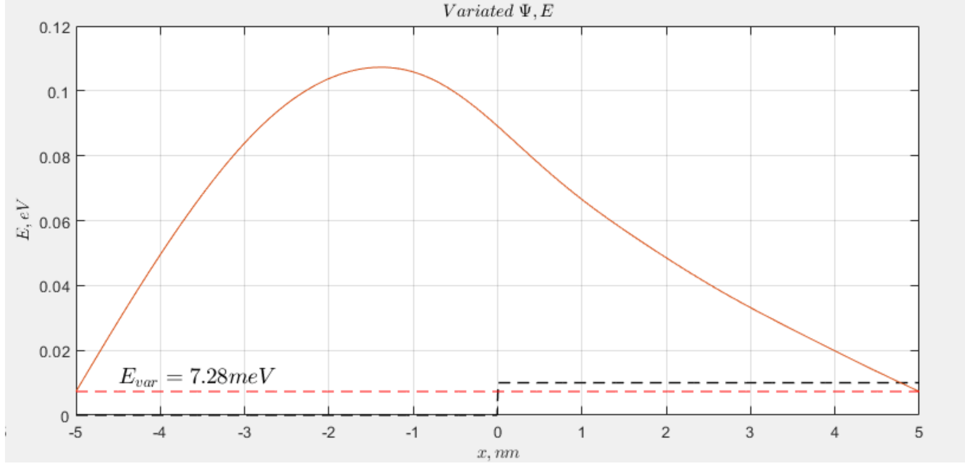
$$\Psi = \sum c_n \varphi_n$$

$$\det[H_{ij} - ES_{ij}] = 0$$









ϵ = 0.29%

Профиль треугольного типа

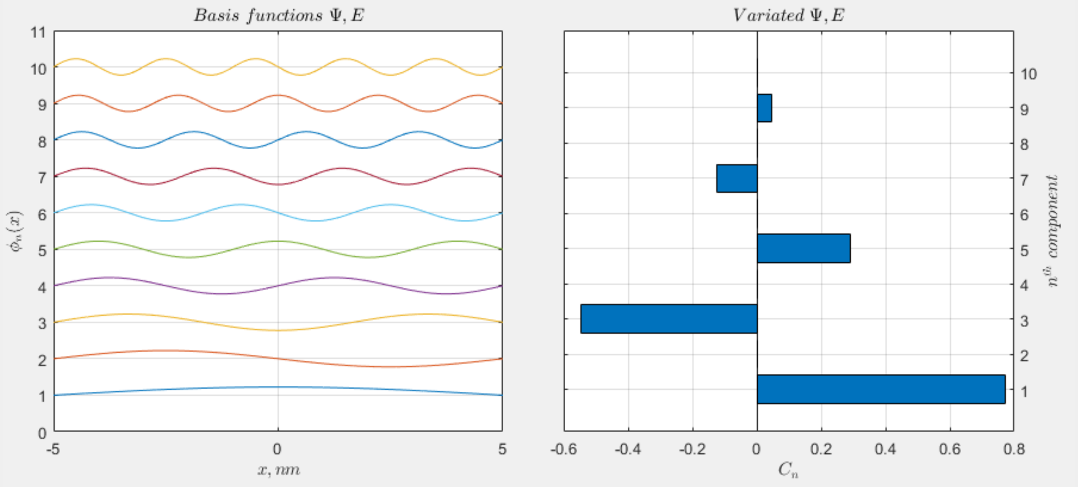
*решение задачи в файле linear.mat

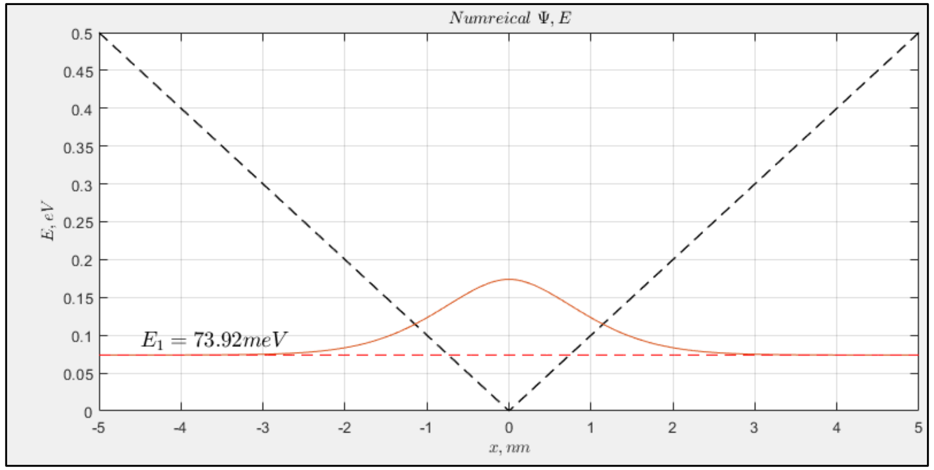
Профиль – треугольный.
Базисные функции - решение задачи о яме:

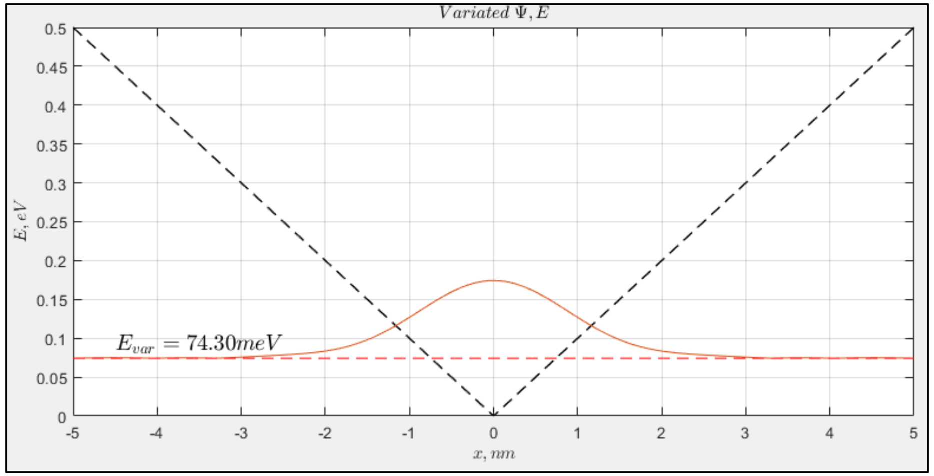
$$\varphi_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi n}{a} x + \frac{\pi}{2} n\right), \mathbf{n = 1 \ldots 10}$$

$$\Psi = \sum c_n \varphi_n$$

$$\det[H_{ij} - ES_{ij}] = 0$$







$\epsilon = 0.51\%$

Метод вариаций

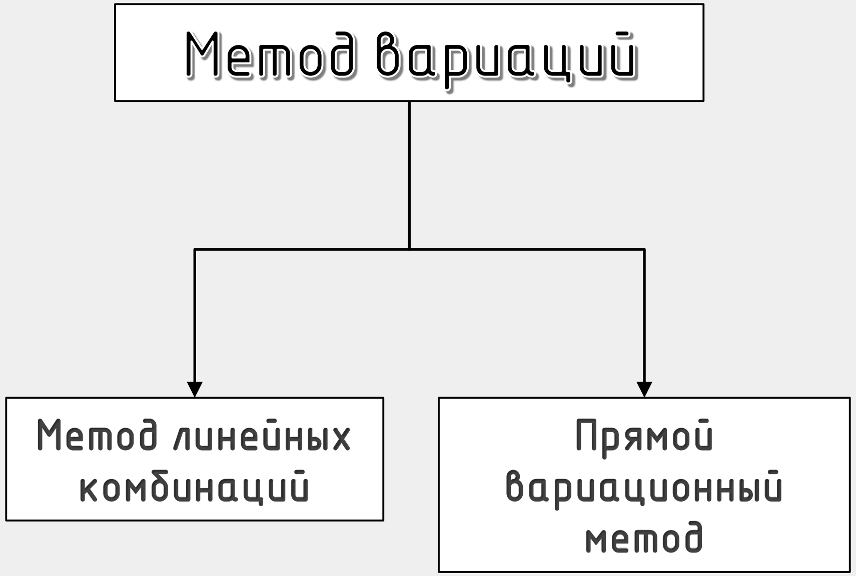
В отличие от теории возмущений мы не упрощаем гамильтониан, а подбираем функцию.

Данная произвольная функция $|\Psi_0\rangle$ должна реализовать минимум средней энергии.

$$|\Psi_0\rangle = \sum c_n |\psi_n\rangle,$$

$$\langle E\rangle = \langle\Psi_0|H|\Psi_0\rangle = \sum |c_n|^2 E_n \geq \sum |c_n|^2 E_0 = E_0 \sum |c_n|^2 = E_0$$

$$\langle E\rangle \geq E_0$$



Прямой вариационный метод

$|\Psi_0\rangle = |\Psi_0\rangle\,(\alpha,\beta,\ldots)$

$\partial E/(\partial\alpha)=\partial E/(\partial\beta)=\ldots=0$

$E_1=\min[E]$

$\langle\Psi_1|\Psi_1\rangle=1$

$|\Psi_1\rangle = |\Psi_1\rangle\,(\alpha_1,\beta_1,\ldots)$

$E_2=\min[E]$

$\langle\Psi_2|\Psi_2\rangle=1$

$\langle\Psi_2|\Psi_1\rangle=0$

$|\Psi_2\rangle = |\Psi_2\rangle\,(\alpha_2,\beta_2,\ldots)$

…

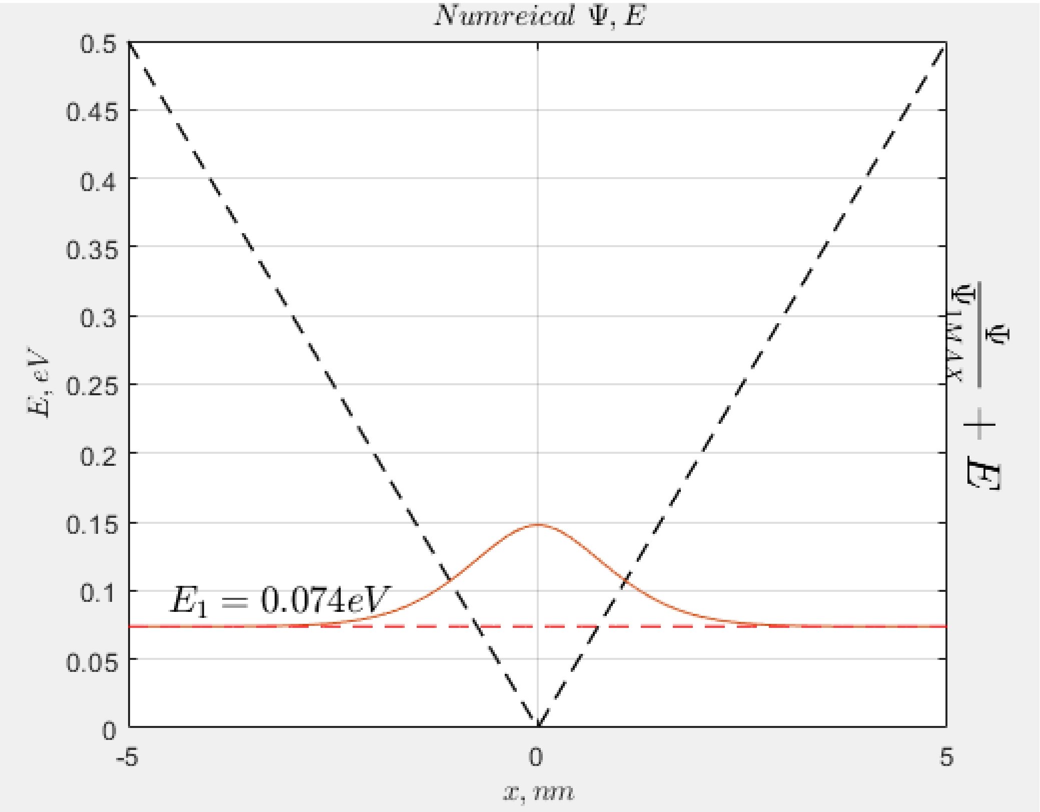
Треугольный профиль

*решение задачи в файле rand.mat

Профиль – треугольный.
Базисная функция – кривая габора:

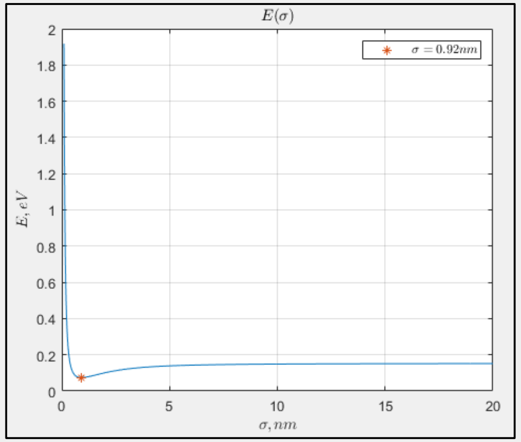
$$\Psi = A\exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right)\cos\left(\frac{2\pi}{\lambda}x\right)$$

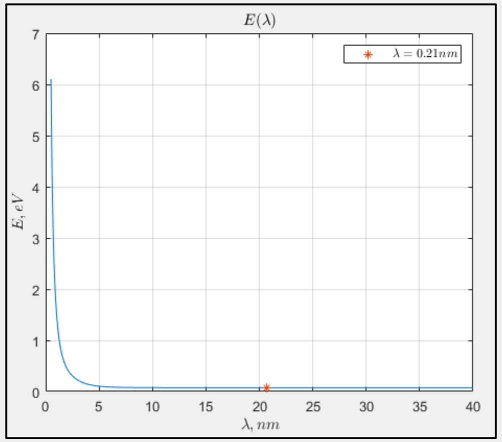
$$\langle\Psi|\Psi\rangle=1$$

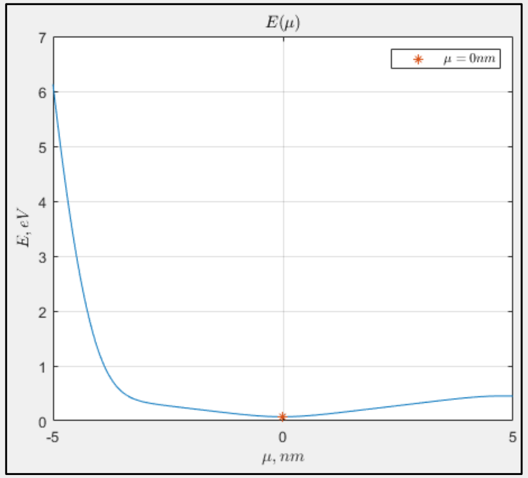


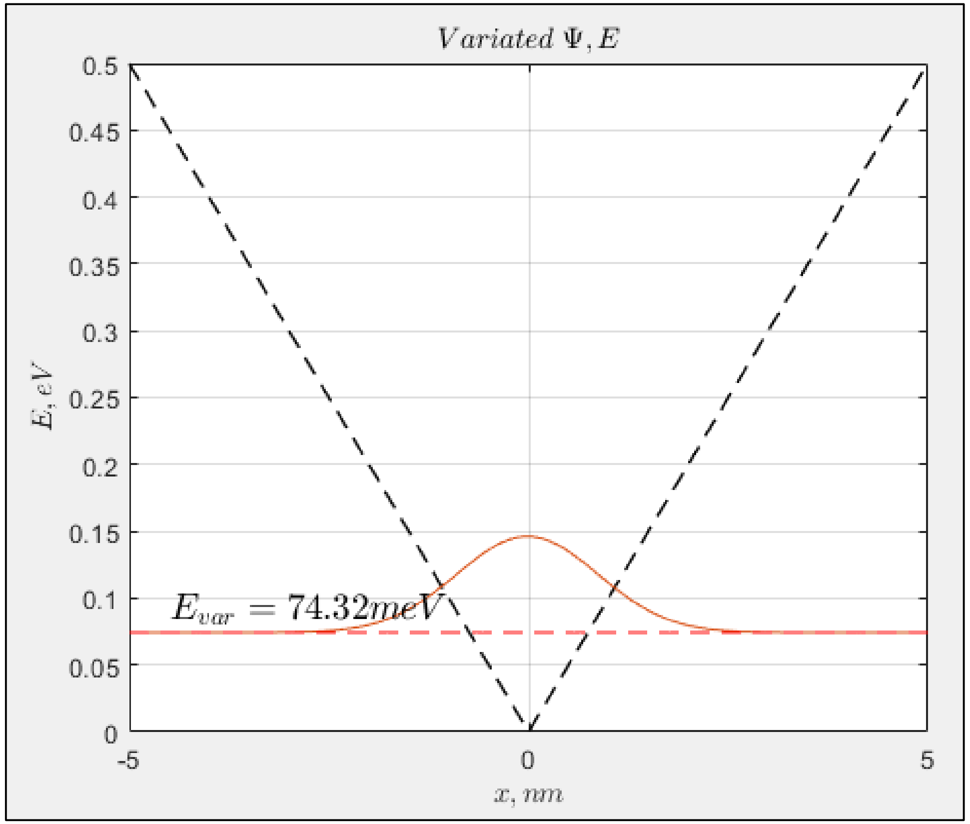
Ожидаем:
λ=2L, 3σ=L/3, $\mu = 0$

Треугольный профиль









Получили:

λ=2.06*L, σ=L*0.09, $\mu = 0$

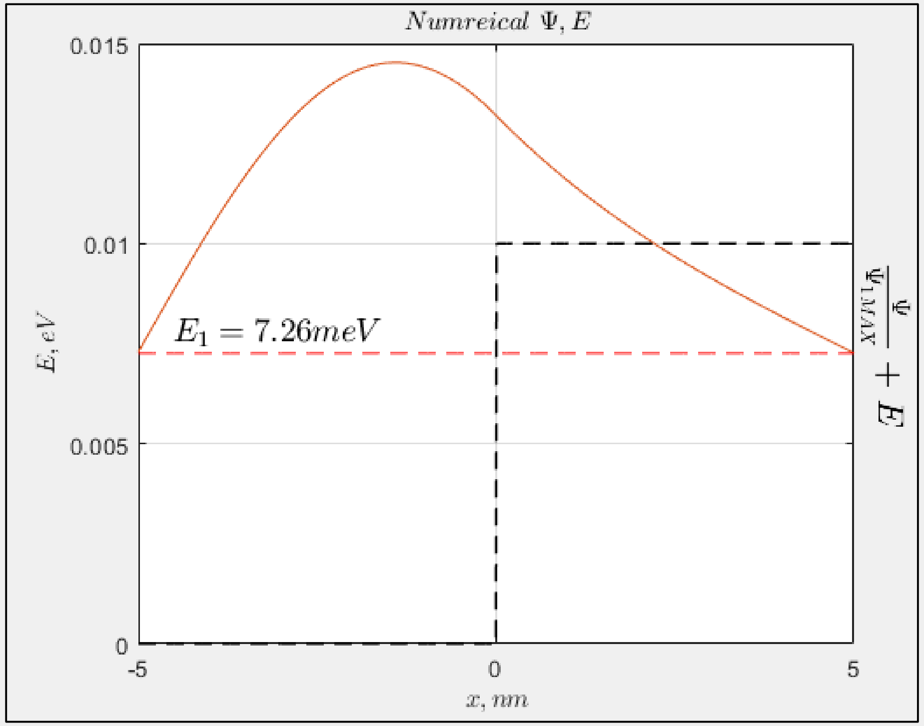
ϵ = 0.55%

Ступенчатый профиль

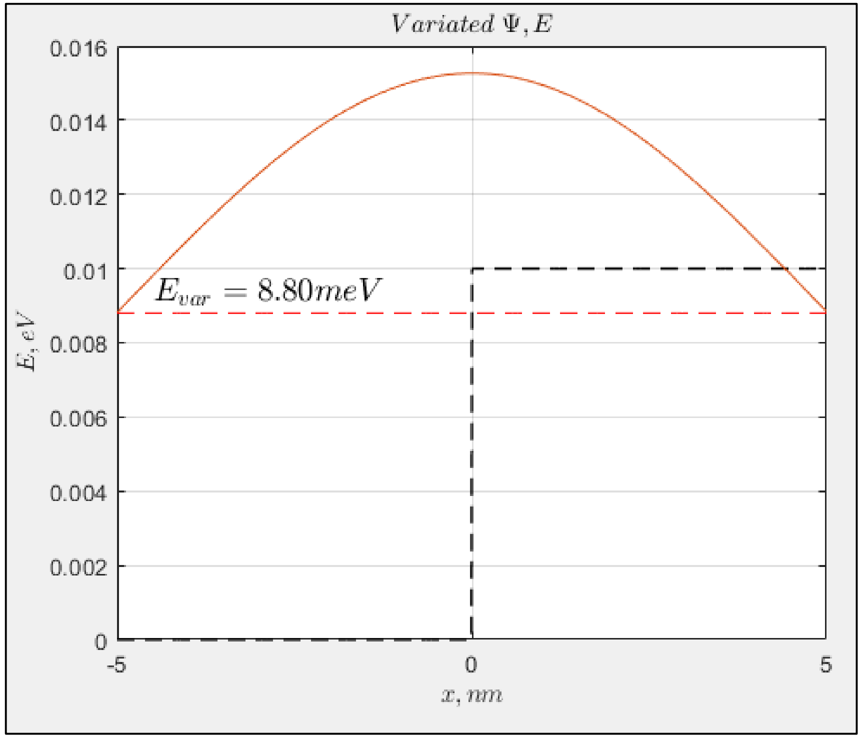
*решение задачи в файле rand.mat

Профиль – ступенька. Базисная функция – кривая габора:

$$\Psi = A\exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right)\cos\left(\frac{2\pi}{\lambda}x\right); \qquad \langle\Psi|\Psi\rangle = 1$$

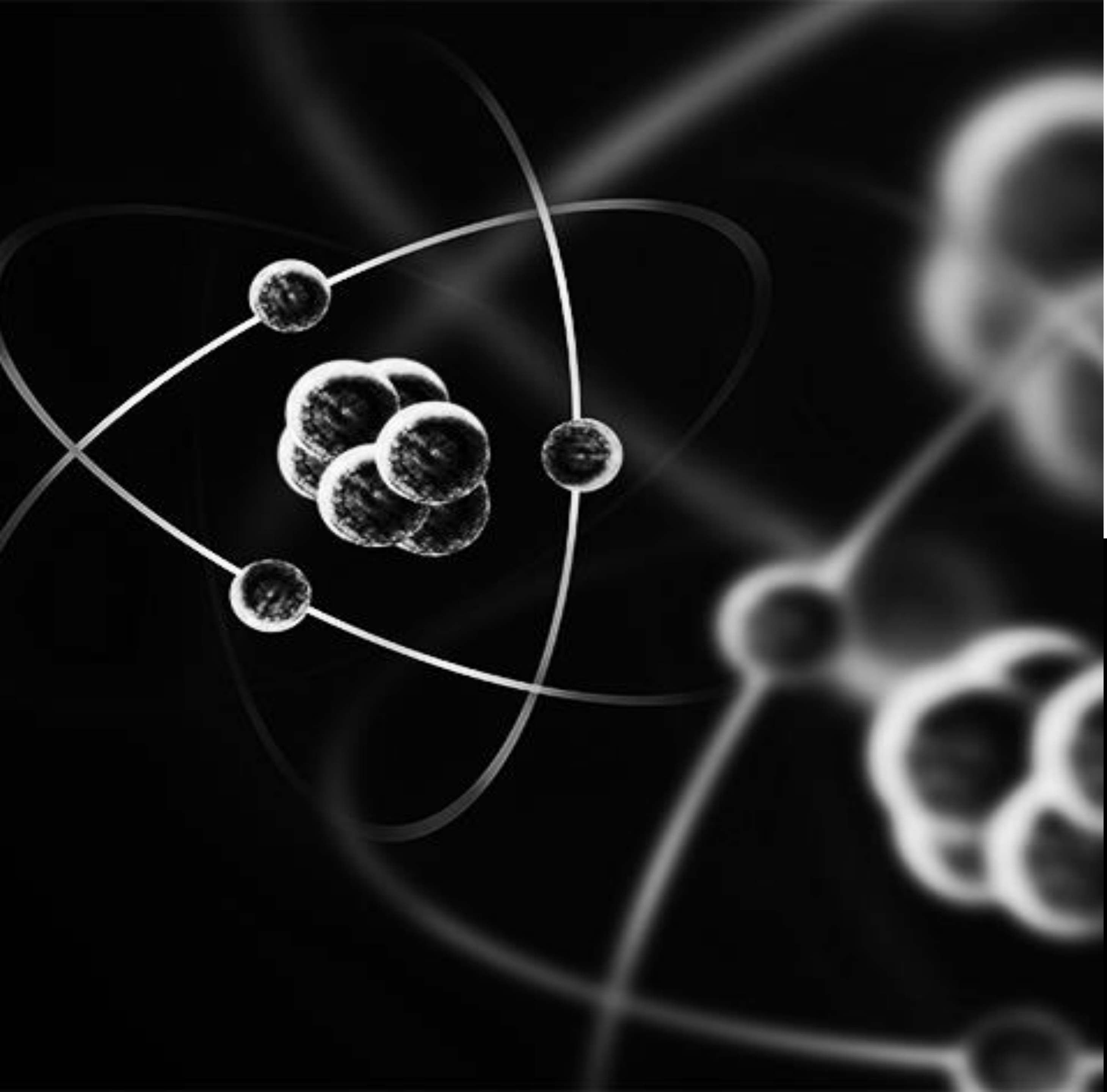


$\epsilon = 22\%$



Вывод

Каждый из рассмотренных методов имеет свои преимущества и пригоден только для определенного класса задач.



Thank you!

Do you have any questions?

andrew4ig@mail.com
8-925-368-1008