

Projekt nr C.7.3

Obliczanie metodą wariacyjną poziomów energetycznych dla potencjału Yukawy

Wprowadzenie

Potencjał Yukawy (ekranowany potencjał kulombowski) modeluje wiele oddziaływań w fizyce, np. oddziaływania jądrowe lub oddziaływanie cząstek naładowanych w ośrodku ekranującym. Rozwiązania problemu własnego dla stanów związanych układu dwóch cząstek oddziaływujących za pośrednictwem potencjału Yukawy znajdują zatem zastosowanie w różnych działach fizyki. Zagadnienia tego nie da się rozwiązać analitycznie – rozwiążemy je tutaj metodą wariacyjną.

Rozważany układ dwóch cząstek opisany jest za pomocą równania Schrödingera, Po dokonaniu separacji ruchu środka masy i przejściu do współrzędnych sferycznych, otrzymujemy problem jednowymiarowy, opisany za pomocą radialnego równania falowego:

$$(\hat{H} - E_{nl})\chi_{nl}(r) = 0 \quad (1)$$

gdzie n jest główną liczbą kwantową, l jest azymutalną liczbą kwantową, a funkcja $\chi_{nl}(r)$ jest radialną funkcją falową.

W atomowych jednostkach energii $E_0 = \mu B^2 / 2\hbar^2$ i długości $a_0 = \hbar^2 / \mu B$, gdzie μ jest masą zredukowana układu cząstek, $B > 0$ jest parametrem sprzężenia potencjału Yukawy, hamiltonian ma postać:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} \quad (2)$$

przy czym operator energii kinetycznej dany jest wzorem:

$$\hat{T} = -\frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} \quad (3)$$

a operator energii potencjalnej:

$$\hat{V} = -\frac{2}{r} e^{-Cr} \quad (4)$$

Parametr ekranowania C jest równy odwrotności długości ekranowania D , tzn. $C = 1/D$. W granicy $C \rightarrow 0$ otrzymujemy kulombowską energię potencjalną, dla której parametr sprzężenia $B = \kappa e^2$, gdzie $\kappa = 1/4\pi\epsilon_0$, a e jest ładunkiem elementarnym. Wariacyjną funkcję próbną proponujemy w postaci:

$$\chi(r) = \sum_{j=1}^N c_j \varphi_j(r) \quad (5)$$

gdzie – dla prostoty zapisu – opuszczone zostały wskaźniki nl oznaczające stan kwantowy. We wzorze (6) N oznacza liczbę funkcji bazowych φ_j , a c_j są liniowymi parametrami wariacyjnymi. Funkcje bazowe proponujemy w formie:

$$\varphi_j(r) = A_j e^{-\alpha_j r} \quad (6)$$

przy czym stałe normalizacyjne

$$A_j = 2\alpha_j^{3/2} \quad (7)$$

a α_j są nieliniowymi parametrami wariacyjnymi. Wariacyjne oszacowania od góry \bar{E} dla kolejnych poziomów energetycznych obliczamy za pomocą ilorazu Rayleigha:

$$\bar{E} = \frac{\langle \chi | \hat{H} | \chi \rangle}{\langle \chi | \chi \rangle} \quad (8)$$

Oznaczamy iloczyn skalarny $\langle \chi | \chi \rangle$ symbolem S i obliczamy jego wartość:

$$S = \sum_{i,j=1}^N S_{ij} \quad (9)$$

gdzie S_{ij} są całkami nakładania:

$$S_{ij} = \langle \varphi_i | \varphi_j \rangle = A_i A_j \int_0^{\infty} r^2 e^{-(\alpha_i + \alpha_j)r} dr \quad (10)$$

Wykonanie całkowania we wzorze (11) daje wynik:

$$S_{ij} = \frac{8p_{ij}}{(\alpha_i + \alpha_j)^3} \quad (11)$$

gdzie

$$p_{ij} = (\alpha_i \alpha_j)^{3/2} \quad (12)$$

Elementy macierzowe hamiltonianu dane są wzorami:

$$H_{ij} = T_{ij} + V_{ij} \quad (13)$$

przy czym

$$T_{ij} = \frac{8(\alpha_i \alpha_j)^{5/2}}{(\alpha_i + \alpha_j)^3} + \frac{4p_{ij}l(l+1)}{\alpha_i + \alpha_j} \quad (14)$$

raz

$$V_{ij} = -\frac{8p_{ij}}{(\alpha_i + \alpha_j + C)^2} \quad (15)$$

Należy zwrócić uwagę na fakt, że funkcje bazy (7) są wprawdzie unormowane, ale nie są ortogonalne. W związku z tym warunek istnienia minimum ilorazu Rayleigha (9) względem parametrów liniowych c_i prowadzi do następującego równania macierzowego:

$$(\mathbf{H} - \lambda \mathbf{S})\mathbf{C} = \mathbf{0} \quad (16)$$

gdzie \mathbf{H} i \mathbf{S} są macierzami o elementach H_{ij} i S_{ij} , liniowe parametry wariacyjne c_i odpowiadające kolejnym stanom kwantowym tworzą kolumny macierzy \mathbf{S} , a wartości własne λ mogą służyć jako oszacowania energii tych stanów. Jakość tych oszacowań zależy od uzyskanej zbieżności procedury diagonalizującej kolejno macierze \mathbf{S} i \mathbf{H} . Pojawia się przy tym możliwość znacznego zafałszowania wyniku wskutek błędów numerycznych. Aby tego uniknąć, wykorzystujemy fakt, że iloraz Rayleigha (9) dostarcza zawsze oszacowania od góry energii stanu kwantowego. Jeżeli więc według wzoru (9) obliczymy:

$$\bar{E} = \frac{1}{S} \sum_{i,j=1}^N c_i c_j H_{ij} \quad (19)$$

to wartość oczekiwana \bar{E} będzie oszacowaniem od góry dokładnej energii rozważanego stanu kwantowego:

$$\bar{E} \geq E \quad (20)$$

Lewą stronę tej nierówności można teraz minimalizować ze względu na parametry nieliniowe α_i , otrzymując w ten sposób coraz lepsze przybliżenia dokładnej wartości E .

Zadania do wykonania

1. Sprawdzić, czy jednostki atomowe we wzorach (1), (4) i (5) zostały prawidłowo wprowadzone.
2. Za pomocą rachunku analitycznego sprawdzić wzory na elementy macierzowe S_{ij} i H_{ij} .
3. Korzystając z dowolnej procedury bibliotecznej na diagonalizację macierzy, napisać program diagonalizujący macierz \mathbf{S} .
4. Wykorzystując otrzymaną w zadaniu 3 macierz transformacji \mathbf{U} , przetransformować przy jej użyciu macierz \mathbf{H} , czyli obliczyć:

$$\tilde{\mathbf{H}} = \mathbf{U}^t \mathbf{H} \mathbf{U} \quad (21)$$

5. Rozwiązać numerycznie równanie własne:

$$(\tilde{\mathbf{H}} - \lambda \mathbf{I})\tilde{\mathbf{C}} = \mathbf{0} \quad (22)$$

gdzie \mathbf{I} jest macierzą jednostkową.

6. Uzyskane w zadaniu 5. liniowe parametry wariacyjne c_i wykorzystać do wyznaczenia \bar{E} według wzoru (19).
7. Zaproponować sposób doboru nieliniowych parametrów wariacyjnych α_i , i za pomocą procedury minimalizacyjnej wyznaczyć minimalną wartość \bar{E} .
8. Sporządzić tabelę obliczonych wartości własnych energii w funkcji liczb kwantowych oraz parametru ekranowania C dla różnej liczby N elementów bazy i przy różnym sposobie doboru nieliniowych parametrów wariacyjnych. Wyznaczyć krytyczne wartości parametru C , przy których znikają kolejne stany związane.

Wskazówki

- a) Wykonać rachunki testowe dla $C = 0$ i porównać uzyskane wyniki ze znanymi poziomami energetycznymi atomu wodoru.
- b) Zamiast liczb kwantowych nl użyć do numeracji poziomów energetycznych liczb kl , gdzie $k = n - l$ jest numerem kolejnego stanu kwantowego o określonej azymutalnej liczbie kwantowej l .

Literatura

- [1] R.Eisberg, R.Resnick – „Fizyka kwantowa”