PŘIBLIŽNÉ METODY ŘEŠENÍ FYZ. ÚLOH

- v klasické mechanice, - v kvantové (poruchy, variační), - metoda rozměr. jednotek, aproximace, - příklady použití

V klasické mechanice

- nepřesný popis na základě předpokladů
- mech. odpor prostředí
- -"- interakce okolních polí
- jednoduché parametry
- zanedbání lin. lin. apod.

Zjednodušujeme
- bodový pád
- bez deformace
- jednoduchý potenciál
- izotropní a homogenní
- linearizace - zanedbání derivace $\frac{\partial}{\partial t}$ (resp. malý rozvoj apod.)
- nulové tření
- nestlačitelnost + zanedbání v závislosti s teplem
-

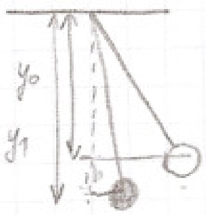
Analyticky to obvykle problém nejde, ale potom co zanedbáme (vhodně zanedbat - může nejít)

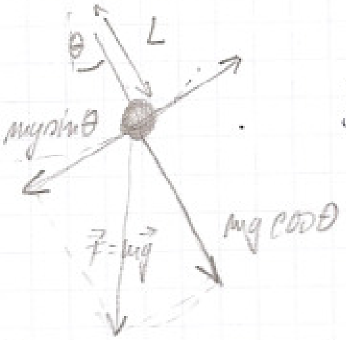
Časté aprox. $\sin\xi \approx \xi$ $\cos\xi \approx 1$ $\tan\xi \approx \xi$ $e^x \approx 1+x$ $\ln(1+x) \approx x$

Binom $(1+x)^n \approx 1+nx$ Stirlingův vzorec $N! = N\ln N - N$

V mechanice kyvadla

Aprox. - homogenní g
- inerciální
- nehmotný závěs
- ve vakuu
- $\sin\theta \approx \theta$





$s = l\cdot\theta$
$\dot{s} = l\dot{\theta}$
$\ddot{s} = l\ddot{\theta}$

$$F = -mg\sin\theta \approx -mg\theta = \ddot{\theta}lm$$

$$\ddot{\theta} + \frac{g}{l}\theta = 0 \quad \theta = \theta_0\cos\left(\sqrt{\tfrac{g}{l}} + \varphi\right)$$ - harm. oscilátor

Kvantovka

Umíme řešit jen idealizovaný Hamiltonián ~~$i\hbar$~~ $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = \hat{H}\psi$

Poruchová teorie: opravy ideál. hamiltoniánu; dobrá pro poruchy malé, odchylky jsou od

Časově nezávislá poruchová teorie $\hat{H}_0|n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}|n^{(0)}\rangle$

$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda\hat{V}$ porucha; $\lambda\in\langle 0,1\rangle$ 0 ... neporušený; 1 porušený úplně

$$\Rightarrow (\hat{H}_0 + \lambda\hat{V})|n\rangle = E_n|n\rangle \qquad |n_a\rangle = |n^0\rangle + \lambda|n^{(1)}\rangle + \lambda^2|n_a^{(2)}\rangle$$
$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_1^{(1)} + \lambda^2 E_a^{(2)}$$

$$(\hat{H}_0 + \lambda\hat{V})|n^0\rangle + \lambda|n^{(1)}\rangle + \lambda^2|n^{(2)}\rangle = (E_n + \lambda E^{(1)} + \lambda^2 E^{(2)})(|n^0\rangle + \lambda|n_n^{(1)}\rangle + \lambda^2|n^{(2)}\rangle)$$

→ porovnáváme mocniny 0. řád - neporušený

1. řád $\hat{H}_0|n^{(1)}\rangle + \hat{V}|n^{(0)}\rangle = E^0|n^{(1)}\rangle + E_n^{(1)}|n^{(0)}\rangle$ neporušený → korekce

$$\langle n^{(0)}|\hat{V}|n^{(0)}\rangle = \langle n^{(0)}|E_1^{(0)}|n^0\rangle \Rightarrow E_1^{(0)} = \langle n^0|\hat{V}|n^0\rangle$$

0 lokál. najdi m. poruch. lze použít pro degeneraci

Odvození $|n^1\rangle = \sum_{k\neq n}\frac{\langle k^0|\hat{V}|n^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)} - E_n^{(0)}}|k^0\rangle$

Pro degeneraci analogicky

$$|n_0\rangle = \underbrace{\sum_i \alpha_i |n_i\rangle}_{\text{superpozice deg. stavů – u H}} + \lambda \sum \ldots \qquad |\psi\rangle_{200},\ |\psi_{2-1-1}\rangle,\ |\psi_{210}\rangle,\ |\psi_{211}\rangle$$

Příklad: částice na kružnici

$$-\frac{\hbar}{2m}\psi''(x) = E\psi(x) \qquad \psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \qquad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar}}$$

$$\psi(x) = \psi(2\pi R + x) \qquad e^{ik2\pi R} = 1 \Rightarrow k_n = n \qquad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 n^2}{2mR^2}$$

kom. kruž.

$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{2\pi R}} e^{\frac{inx}{R}}$ porucha $G = \lambda\cos\frac{2x}{R}$ ψ_n a ψ_{-n} jsou deg. stavy $E_n = E_{-n}$

$$\rightarrow \begin{vmatrix} \langle\psi_n|\hat G|\psi_n\rangle - E^{(1)} & \langle\psi_n|\hat G|\psi_{-n}\rangle \\ \langle\psi_{-n}|\hat G|\psi_n\rangle & \langle\psi_{-n}|\hat G|\psi_{-n}\rangle - E^{(1)} \end{vmatrix} = 0$$

$$\langle\psi_n|\hat G|\psi_n\rangle = \frac{\lambda}{4\pi R}\int e^{-\frac{inx}{R}} e^{-\frac{inx}{R}} \cdot \left(e^{\frac{2ix}{R}} + e^{-\frac{2ix}{R}}\right) dx$$

$$= \frac{\lambda}{4\pi R}\int_0^{2\pi R} e^{\frac{xi(1-n)}{R}} + e^{-\frac{ix(1+n)}{R}}\, dx \ \Big\langle \begin{matrix} 0 \text{ pro } n \neq 1 \rightarrow \text{hledáme nenulové} \\ \frac{\lambda}{2} \text{ naopak} \rightarrow \begin{vmatrix} -E^{(1)} & \frac{\lambda}{2} \\ \frac{\lambda}{2} & -E^{(1)} \end{vmatrix} \end{matrix} \Big\langle \begin{matrix} \frac{\lambda}{2} \\ \frac{\lambda}{-2} \end{matrix}$$

$$\Rightarrow \psi_+ = \frac{\psi_n - \psi_{-n}}{\sqrt2} \qquad \psi_- = \frac{\psi_n - \psi_{-n}}{\sqrt2}$$

Časově závislá porucha

$$\hat H(t) = \hat H_0 + \lambda\hat G(t) \qquad i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \hat H|\psi(t)\rangle$$

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n \underbrace{c_n(t)|\psi_n(t)\rangle}_{\text{časové bez poruchy}} \rightarrow i\hbar\sum_n \dot c_n|\psi_n(t)\rangle + i\hbar\sum_n c_n\frac{d}{dt}|\psi_n(t)\rangle$$

$$= \sum_n c_n \hat H_0|\psi_n(t)\rangle + \lambda\sum_n c_n(t)\,\hat G\,|\psi_n(t)\rangle$$

atp.

Variační metoda, nápomocná pro určení vl. stavů (u molekul)

minimalizujeme $\langle\psi|\hat H|\psi\rangle \geq E_0$ Dk $|\psi\rangle = \sum c_n|\psi\rangle$

$$\sum_{mn} c_m^* c_n \langle\psi_m|\hat H|\psi_n\rangle = \langle\psi|\hat H\psi\rangle$$

$$= \sum_n |c_n|^2 E_n \geq \sum |c_n|^2 \cdot E_0 = E_0$$

∇ o

Příklad: harm. oscilátor $\psi_a(x) = \sqrt{a}\, e^{-a|x|}$

$$E(a) = \langle\psi_a|\hat H|\psi_a\rangle \qquad \hat H = \frac{p^2}{2m} + \frac12 m\omega^2 x^2$$

$$\rightarrow E(a) = \frac{a^2\hbar^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{4a^2} \qquad \frac{dE(a)}{da} = 0 = \frac{a\hbar^2}{m} - \frac{m\omega^2}{2a^3} \qquad a_0 = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar^2}}$$

$$\rightarrow E(a_0) = \frac{\hbar\omega}{\sqrt2} = \sqrt2\, E_0$$

Mnohočást. systémy + 1částicová aprox.

V klasické mechanice je nutné jedno z čeho je hmota, ve mnohočásticových systémech se zaměříme na pohyb každé atp.
Termodynamika - již fenomenologická - dívá se na celek a makr. veličiny

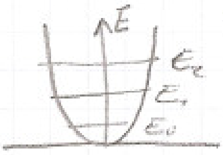
Ve statistickém popisu jsou částice nerozlišitelné, zkoumáme průměrné stavy
Problém mnoha částic se nahrazuje mnoha problémy.

obecná vlnová fce $\psi(\bar{x}_1, \bar{x}_2, x_3 \ldots) =$ složitá

$\rightarrow \psi_1(\bar{x}_1)\,\psi_2(\bar{x}_2) \ldots$ součin jednočásticových vln. fcí

Pro 1 ~~el~~částici Sch. ~~el~~ rce.

Spektrum en. jako harm. oscilátor $E = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$



ψ ?