Η αποτελεσματικότητα του λογισμού μεταβολών

Ν. Λυγερός

Όταν εξετάζουμε το έργο του Καραθεοδωρή, αντιλαμβανόμαστε πόσο ισχυρό αποδεικτικό εργαλείο είναι η θεωρία του λογισμού μεταβολών. Βέβαια, ακολουθεί με τον δικό του τρόπο την παράδοση που ανέπτυξαν ο Bernouilli, ο Euler, ο Jacobi και ο Hamilton. Μόνο που στο έργο του, το εργαλείο είναι συστηματικό και έχει επηρεαστεί από την αξιωματική του προσέγγιση των μαθηματικών μέσω του πλαισίου που καθιέρωσε ο Hilbert. Όμως η αποτελεσματικότητα του λογισμού μεταβολών προέρχεται και από την ευρηματικότητά του, όπως το αποδεικνύει η αρχή του λογισμού μεταβολών.

Όταν θέλουμε να υπολογίσουμε την ενέργεια E_{gs} ενός συστήματος που περιγράφεται μέσω της Hamiltomian H και δεν έχουμε πρόσβαση στη λύση της εξίσωσης του Schrödinger μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε την αρχή του λογισμού μεταβολών, για να βρούμε ένα ανώτερο όριο για την ενέργεια E_{gs}.

Πιο συγκεκριμένα, ισχύει το εξής για κάθε κανονικοποιημένη συνάρτηση ψ:

$$E_{gs} \leq \langle \psi | H | \psi \rangle \equiv \langle H \rangle$$

Το νοητικό σχήμα της απόδειξης λειτουργεί, διότι οι ιδιοσυναρτήσεις του H αποτελούν ένα πλήρες σύνολο και μπορούμε να εκφράσουμε τη συνάρτηση ψ ως ένα γραμμικό συνδυασμό: $\psi = \sum_n c_n \psi_n$ με $H\psi_n = E_n \psi_n$, όπως η συνάρτηση ψ είναι κανονικοποιημένη έχουμε:

$$1 = \langle \psi \mid \psi \rangle = \left\langle \sum_m c_m \psi_m \middle| \sum_n c_n \psi_n \right\rangle = \sum_n \sum_m c_m^* c_n \langle \psi_m \mid \psi_n \rangle = \sum_n |c_n|^2$$

Διότι μέσω της κανονικοποίησης των ιδιοσυναρτήσεων έχουμε $\langle \psi_m \mid \psi_n \rangle = \delta_{mn}$ όπου δ_{mn} είναι το σύμβολο του Kronecker.

Κατά συνέπεια,

$$\langle H \rangle = \left\langle \sum_m c_m \psi_m \middle| H \sum_n c_n \psi_n \right\rangle$$

$$\langle H \rangle = \sum_m \sum_n c_m^* E_n c_n \langle \psi_m | \psi_n \rangle = \sum_n E_n |c_n|^2$$

Όπως η E_{gs} είναι η μικρότερη ιδιοτιμή, έχουμε $E_{gs} \leq E_n$.

Άρα, τελικά βρίσκουμε:

$$\langle H \rangle \geq E_{gs} \sum_n |c_n|^2 = E_{gs}$$

Με αυτόν τον τρόπο, η αρχή του λογισμού μεταβολών μετατρέπει το αρχικό πρόβλημα της εύρεσης της ενέργειας σε επιλογή μιας κανονικοποιημένης συνάρτησης. Σε πρώτη φάση, θα μπορούσαμε να εκφράσουμε επιφυλάξεις για αυτήν τη συμβολή. Ενώ σε δεύτερη φάση, αντιλαμβανόμαστε ότι η κανονικοποιημένη συνάρτηση του Gauss αποτελεί μια καλή υποψήφια για την επίλυση αυτού του προβλήματος και όπως η χρήση της είναι εύκολη, η αποτελεσματικότητα της θεωρίας λογισμού μεταβολών εκφράζεται και πρακτικά.

Παραδείγματος χάριν, για ένα μονοδιάστατο αρμονικό ταλαντωτή όπου έχουμε:

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

Ξέρουμε ότι $E_{gs} = \frac{1}{2}\hbar w$. Αλλά ας εξετάσουμε τα αποτελέσματα του λογισμού μεταβολών.

Επιλέγουμε: $\psi(x) = A.e^{-bx^2}$, όπου b είναι η σταθερά και $A = \left(\frac{2b}{\pi}\right)^{1/4}$ διότι:

$$1 = |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2bx^2} dx = |A|^2 \sqrt{\frac{\pi}{2b}}$$

Έστω: $\langle H \rangle = \langle T \rangle + \langle V \rangle$

$$\langle T \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m}|A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-bx^2} \frac{d^2}{dx^2}(e^{-bx^2})dx = \frac{\hbar^2 b}{2m}$$

και

$$\langle H \rangle = \frac{m\omega^2}{8b} + \frac{\hbar^2 b}{2m}$$

άρα

$$\langle H \rangle = \frac{m\omega^2}{8b} + \frac{\hbar^2 b}{2m}$$

Και αν ελαχιστοποιήσουμε $\langle H \rangle$

$$\frac{d\langle H\rangle}{db}=\frac{\hbar^2}{2m}-\frac{m\omega^2}{8b^2}=0\Rightarrow b=\frac{m\omega}{2\hbar}$$

Κατά συνέπεια:

$\langle H\rangle_{\min}=\frac{1}{2}\hbar\omega$, δηλαδή ακριβώς την τιμή του E_{gs}.