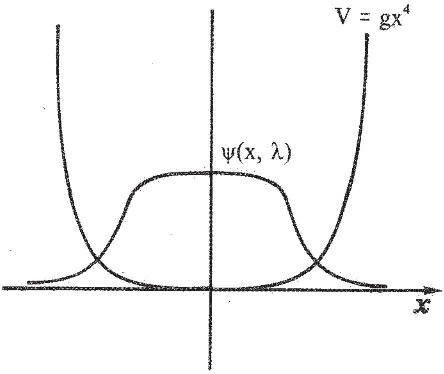
ΣΥΜΠΛΗΡΩΜΑ 9.5

Ένας μεταβολικός υπολογισμός με δύο παραμέτρους μεταβολής

▶ **Παράδειγμα : Τό δυναμικό $V(x) = gx^4$.(*)**



Σχῆμα 20

᾿Αντιπαραβάλλοντας τά σχήματα 19 καί 20 ὁ ἀναγνώστης μπορεῖ νά δεῖ ἀμέσως ὅτι τό δυναμικό gx^4 εἶναι πολύ πιό «ἐπίπεδο» ἀπό τόν ἁρμονικό ταλαντωτή στή γειτονιά τῆς ἀρχῆς, καί πολύ πιό «κατακόρυφο» ἀπ᾿ αὐτόν γιά μεγάλα x.᾿Αντίστοιχα διαφορετική πρέπει νἆναι λοιπόν καί ἡ μορφή τῆς βασικῆς κυματοσυνάρτησης. Στό δυναμικό gx^4 πρέπει νά μοιάζει μᾶλλον μέ... καπέλλο παρά μέ καμπάνα. Δηλαδή πρέπει νά σβήνει πολύ ἀργά γιά μικρά x —ὥστε νά ἀξιοποιηθεῖ πλήρως ὁ πλατύς πυθμένας τοῦ δυναμικοῦ— καί πολύ γρήγορα γιά μεγάλα, ὥστε νά ἀποφευχθεῖ ἡ ἐνεργειακά ἀσύμφορη περιοχή τῶν «τοιχωμάτων».

῎Αν καί αὐτές οἱ λεπτές προδιαγραφές κάθε ἄλλο παρά ἱκανοποιοῦνται ἀπό τήν Γκαουσσιανή καμπάνα

$$\psi(x, \lambda) = Ne^{-\lambda x^2/2} \tag{1}$$

(*)῾Η μελέτη αὐτοῦ τοῦ παραδείγματος μπορεῖ ἄνετα νά παραληφθεῖ.

εἶναι, ἐν τούτοις, διδακτικό νά δοῦμε ὅτι τό ἀποτέλεσμα πού παίρνομε γιά τήν ἐνέργεια τῆς θεμελιώδους στάθμης εἶναι ἀρκετά κοντά στήν «ἀκριβή» τιμή $E_0 = 0{,}668$(*) ἡ ὁποία ἔχει βρεθεῖ μέ ἀριθμητικές μεθόδους. ῾Η ἐκλογή (1) ἔχει, βέβαια, καί τό πρόσθετο πλεονέκτημα ὅτι τά ἀναγκαῖα ὁλοκληρώματα ὑπολογίζονται ἀκριβῶς. Γιά $\hbar = m = g = 1$ θἄχομε

$$\overline{E} = \langle H \rangle = \frac{1}{2}\langle p^2 \rangle + \langle x^4 \rangle$$

Τό $\langle p^2 \rangle$ εἶναι γνωστό ἀπό τό προηγούμενο παράδειγμα ($\langle p^2 \rangle = \lambda/2$) ἐνῶ γιά τό $\langle x^4 \rangle$ βρίσκομε

$$\langle x^4 \rangle = N^2 \int_{-\infty}^{+\infty} x^4 e^{-\lambda x^2} dx = \sqrt{\frac{\lambda}{\pi}} \cdot \frac{3}{4\lambda^2} \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}} = \frac{3}{4\lambda^2}$$

(*) Στό σύστημα μονάδων ὅπου $\hbar = m = g = 1$.

Θἄναι λοιπόν

$$\overline{E}(\lambda) = \frac{1}{4}(\lambda + \frac{3}{\lambda^2}) \Rightarrow \frac{d\overline{E}}{d\lambda} = \frac{1}{4}(1 - \frac{6}{\lambda^3}) = 0 \Rightarrow \lambda = 6^{1/3}$$

ὁπότε ἡ «μεταβολική τιμή» γιά τήν ἐνέργεια τῆς θεμελιώδους στάθμης βγαίνει ἴση μέ

$$E_{\mu\varepsilon\tau} = \frac{3}{8}\, 6^{1/3} = (\frac{3}{4})^{4/3} \approx 0{,}681 \qquad (2)$$

καί διαφέρει ἀπό τήν ἀκριβῆ τιμή ($E_{\alpha\kappa\rho.} = 0{,}668$) μόνο κατά 1,9%.

'Ενθαρρυμένοι ἀπ' αὐτή τήν ἐπιτυχία ἄς ἐπιχειρήσομε τώρα ἕναν πιό φιλόδοξο μεταβολικό ὑπολογισμό μέ δοκιμαστική συνάρτηση τήν

$$\psi(x, \lambda, \mu) = N e^{-\lambda|x|^{\mu}/2} \qquad (3)$$

ἡ ὁποία ἐκτός ἀπό τό λ ἔχει σάν πρόσθετη παράμετρο μεταβολῆς τήν τιμή τῆς δύναμης τοῦ ἐκθετικοῦ. 'Από ὑπολογιστική ἄποψη ἡ μόνη νέα δυσκολία εἶναι ὅτι τά ὁλοκληρώματα πού θά χρειαστοῦμε ἐκφράζονται μέσω τῆς λεγόμενης «συνάρτησης γάμα» ἡ ὁποία εἶναι ἄγνωστη στούς περισσότερους ἀναγνῶστες καί θά πρέπει ν' ἀνοίξομε μιά παρένθεση γιά νά ποῦμε δυό λόγια σχετικά.

▶ **Ἡ συνάρτηση Γάμα.** Βασικά πρόκειται γιά τή γενίκευση καί σέ μή ἀκέραιους ἀριθμούς τῆς περίφημης *παραγοντικῆς συνάρτησης* $n! = 1\ 2 \ldots n$. 'Αφετηρία τῆς ζητούμενης γενίκευσης εἶναι ὁ γνωστός μας τύπος

$$\int_0^\infty t^n e^{-t} dt = n! \qquad (4)$$

στόν ὁποῖο τό ὁλοκλήρωμα τοῦ πρώτου μέλους ὑπάρχει ὄχι μόνο γιά

(*) Στό σύστημα μονάδων ὅπου $\hbar = m = g = 1$.

ἀκέραιες θετικές τιμές τῆς δύναμης πού πολλαπλασιάζει τό ἐκθετικό, ἀλλά γιά κάθε πραγματική τιμή τοῦ ἐκθέτη μεγαλύτερη τοῦ μεῖον ἕνα. 'Επομένως ἡ σχέση

$$\Pi(x) = \int_0^\infty t^x e^{-t} dt \qquad (5)$$

ὁρίζει μιά συνάρτηση πού γιά $x = n$ ($n = 0, 1, 2, \ldots$) συμπίπτει μέ τήν $f(n) = n!$ καί ἐπιπλέον ἔχει νόημα τουλάχιστον πάνω στό θετικό ἡμιάξονα. Στήν πραγματικότητα ἡ $\Pi(x)$ —γνωστή σάν *ἡ παραγοντική συνάρτηση*— ὁρίζεται σ' ὁλόκληρο τό μιγαδικό ἐπίπεδο τῆς μεταβλητῆς x καί εἶναι παντοῦ ἀναλυτική ἐκτός ἀπό τά σημεῖα $x = -1, -2, -3, \ldots$ ὅπου ἔχει ἁπλούς πόλους. Ὅσο γιά τή *συνάρτηση Γάμα* αὐτή δέν εἶναι παρά ἡ παραγοντική συνάρτηση $\Pi(x)$ μετατοπισμένη πρός τά δεξιά κατά μονάδα. Θἄναι δηλαδή

$$\Gamma(x) = \Pi(x-1) = \int_0^\infty t^{x-1}e^{-t}dt \tag{6}$$

῾Η Π(x) δηλώνεται συχνά καί μέ τό σύμβολο x! ὥστε νά ὑπογραμμίζεται καί συμβολιστικά ἡ «καταγωγή» της ἀπό τήν n! καί νά θεωροῦνται ἔτσι σάν αὐτονόητες «κληρονομικές» της ἰδιότητες, σχέσεις σάν τήν ἀκόλουθη

$$x!(x+1) = (x+1)! \quad ἤ \quad \Pi(x)\cdot(x+1) = \Pi(x+1) \tag{7}$$

ἡ ὁποία, γιά τη συνάρτηση Γάμα, γράφεται σάν

$$x\Gamma(x) = \Gamma(x+1) \tag{8}$$

Μιά ἄμεση συνέπεια αὐτῆς τῆς βασικῆς ἰδιότητας εἶναι ὅτι μποροῦμε νά βροῦμε τίς τιμές τῆς συνάρτησης Γάμα σ' ὅλο τόν πραγματικό ἄξονα ἀρκεῖ νά τίς ξέρομε στό διάστημα (0,1). Οἱ τιμές τῆς Γ(x) σ' αὐτό τό διάστημα ἔχουν ὑπολογιστεῖ μέ ἀκρίβεια δέκα δεκαδικῶν ψηφίων καί εἶναι καταγραμμένες σέ πίνακες. Γιά κάθε ἄλλο x δέν ἔχομε παρά νά χρησιμοποιήσομε τόν (8) ὅσες φορές χρειαστεῖ γιά νά ἀναχθοῦμε τελικά στό βασικό διάστημα (0,1). ῾Η πρακτική χρησιμότητα τῆς συνάρτησης Γάμα ἔγκειται, μεταξύ τῶν ἄλλων, καί στό γεγονός ὅτι μιά μεγάλη ποικιλία ὁλοκληρωμάτων μποροῦν νά ἐκφραστοῦν μέσω αὐτῆς καί ἔτσι νά βρεθοῦν ἀμέσως οἱ τιμές τους ἀπό τούς σχετικούς πίνακες. Παραδείγματος χάρη μέ τήν ἀλλαγή μεταβλητῆς $t = \lambda x^\mu$ ὅλα τά ὁλοκληρώματα τοῦ τύπου

$$I = \int_0^\infty x^\nu e^{-\lambda x^\mu}dx \tag{9}$$

θά γράφονται τελικά στή μορφή (6) καί ἐπομένως θά ἐκφράζονται μέσω τῆς συνάρτησης Γάμα. Πράγματι ἄν κάνετε τίς σχετικές πράξεις βλέπετε ἀμέσως ὅτι γιά τό ὁλοκλήρωμα (9) θἄναι

$$\int_0^\infty x^\nu e^{-\lambda x^\mu}dx = \frac{1}{\mu}\Gamma\left(\frac{\nu+1}{\mu}\right)\lambda^{-\frac{\nu+1}{\mu}} \tag{10}$$ ◀

Καί ἐπιστρέφομε τώρα στό μεταβολικό μας ὑπολογισμό γιά τή δοκιμαστική συνάρτηση (3). Ὅπως καί πρίν χρειαζόμαστε τίς μέσες τιμές $<x^4>$ καί $<p^2>$. Γιά τήν πρώτη θἄχομε

$$<x^4> = N^2\int_{-\infty}^{+\infty} x^4e^{-\lambda|x|^\mu}dx = 2N^2\int_0^\infty x^4e^{-\lambda x^\mu}dx$$

$$= 2N^2\cdot\frac{1}{\mu}\Gamma(5/\mu)\lambda^{-5/\mu}$$

ὅπου ὁ συντελεστής κανονικοποίησης θά ὑπολογιστεῖ ἀπό τήν

$$N^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\lambda|x|^\mu}dx = 2N^2 \int_0^{\infty} e^{-\lambda x^\mu}dx = 2N^2 \cdot \frac{1}{\mu}\,\Gamma(1/\mu)\lambda^{-1/\mu} = 1$$

καί ἔτσι θἄχομε τελικά

$$<x^4> = \frac{\mu\lambda^{1/\mu}}{\Gamma(1/\mu)} \cdot \frac{1}{\mu}\,\Gamma(5/\mu)\lambda^{-5/\mu} = \frac{\Gamma(5/\mu)}{\Gamma(1/\mu)}\,\lambda^{-4/\mu}$$

Γιά τή μέση τιμή $<p^2>$ θἄναι

$$<p^2> = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi'|^2dx = 2N^2 \int_0^{\infty} ((e^{-\lambda x^{\mu/2}})')^2dx$$

$$= 2N^2 \int_0^{\infty} (-\frac{\lambda\mu}{2}\, x^{\mu-1})^2 e^{-\lambda x^\mu}\,dx = 2N^2 \cdot \frac{\lambda^2\mu^2}{4} \cdot \int_0^{\infty} x^{2\mu-2}e^{-\lambda x^\mu}dx$$

$$= \frac{\mu\lambda^{1/\mu}}{\Gamma(1/\mu)} \cdot \frac{\lambda^2\mu^2}{4} \cdot \frac{1}{\mu}\,\Gamma\,(\frac{2\mu-1}{\mu})\lambda^{-\frac{2\mu-1}{\mu}}$$

$$<p^2> = \frac{\mu^2}{4}\,\frac{\Gamma(2\mu-1/\mu)}{\Gamma(1/\mu)}\,\lambda^{2/\mu}$$

Ἡ μέση ἐνέργεια $\overline{E}$ θά ἰσοῦται, ἐπομένως, μέ

$$\overline{E}(\lambda,\ \mu) = \frac{\mu^2\Gamma(2\mu-1/\mu)}{8\Gamma(1/\mu)}\,\lambda^{2/\mu} + \frac{\Gamma(5/\mu)}{\Gamma(1/\mu)}\,\lambda^{-4/\mu} \qquad (11)$$

ἤ συνοπτικά

$$\overline{E} = \alpha\lambda^{2/\mu} + \beta\lambda^{-4/\mu} \qquad (12)$$

ὅπου

$$\alpha = \alpha(\mu) = \frac{\mu^2\Gamma(2\mu-1/\mu)}{8\Gamma(1/\mu)} \qquad \text{καί} \qquad \beta = \beta(\mu) = \frac{\Gamma(5/\mu)}{\Gamma(1/\mu)}$$

Γιά ἕνα δεδομένο μ ἡ (12) γίνεται ἐλάχιστη ὅταν

$$\frac{d\overline{E}}{d\lambda} = \alpha \cdot \frac{2}{\mu} \cdot \lambda^{\frac{2}{\mu}-1} + \beta \cdot (\frac{-4}{\mu}) \cdot \lambda^{-\frac{4}{\mu}-1} = 0$$

$$\lambda = \lambda_0 = (\frac{2\beta}{\alpha})^{\mu/6}$$

μέ ἀντίστοιχη ἐλάχιστη τιμή τήν

$$\overline{E}(\lambda,\ \mu)\big|_{\lambda=\lambda_0} = \overline{E}(\mu) = \frac{3}{2^{2/3}}\,\alpha^{2/3}\beta^{1/3}$$

ή, ἐκπεφρασμένα

$$\overline{E}(\mu) = \frac{3}{4}\cdot\left(\frac{\mu^2}{2}\right)^{2/3}\frac{\Gamma^{1/3}\left(\frac{5}{\mu}\right)\,\Gamma^{2/3}\left(\frac{2\mu-1}{\mu}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{\mu}\right)} \tag{13}$$

Δυστυχῶς ἡ τιμή τοῦ μ πού ἐλαχιστοποιεῖ τήν (13) μπορεῖ νά βρεθεῖ μόνο ἀριθμητικά. Μιά καί οἱ τιμές τῆς συνάρτησης γάμα ὑπάρχουν σέ πίνακες(*) οἱ ἀπαιτούμενοι ὑπολογισμοί γίνονται ἄνετα μ' ἕναν ὑπολογιστή τσέπης. Γιά μερικές τιμές τοῦ μ στό διάστημα [2,3] τά ἀποτελέσματα εἶναι γραμμένα στόν πίνακα 1. Ὅπως βλέπετε κι ἀπό τόν πίνακα, ἄν ξεκινήσομε ἀπό τήν τιμή μ = 2 καί προχωρήσομε μέ μικρές αὐξήσεις (π.χ. Δμ = 1/4) πρός τά πάνω, βλέπομε ὅτι μέχρι, περίπου, τό 2 1/2 ἡ μέση ἐνέργεια ἐλαττώνεται κι ἀπό κεῖ κι ὕστερα αὐξάνει. Τό ἐλάχιστο πρέπει νἆναι κάπου ἀνάμεσα στις τιμές μ = 2 1/4 καί μ = 2 1/2 γιά τίς ὁποῖες ἡ μέση ἐνέργεια εἶναι ἡ ἴδια. Γιά μ = 2 3/8, πού εἶναι τό μέσο αὐτοῦ τοῦ διαστήματος, βρίσκομε

ΠΙΝΑΚΑΣ 1

μ	$\overline{E}(\mu)$
2	0,681
$2\frac{1}{4}$	0,670
$2\frac{3}{8}$	0,669
$2\frac{1}{2}$	0,670
$2\frac{3}{4}$	0,678
3	0,689

(*) Κυττάξτε π.χ. στό: HANDBOOK OF MATHEMATICAL FUNCTIONS: Abramowitz - Segun, 'Εκδόσεις Dover.

$$E_{\mu\varepsilon\tau.} = \overline{E}\left(2\frac{3}{8}\right) = 0{,}669$$

πού διαφέρει ἀπό τήν ἀκριβή τιμή (0,668) μόνο κατά τό τρίτο δεκαδικό ψηφίο. Τό ποσοστιαῖο λάθος εἶναι μόλις ἑνάμισυ τοῖς χιλίοις!

Ὅπως βλέπετε τό βέλτιστο μ βγῆκε μεγαλύτερο ἀπό δύο ὅπως θἄπρεπε νά ἀναμένεται ἀφοῦ ἡ κυματοσυνάρτησή μας πρέπει νά σβήνει στό ἄπειρο ταχύτερα ἀπ' ἐκείνη τοῦ ἁρμονικοῦ ταλαντωτή. Ταυτόχρονα ὅμως τό μ βγῆκε μικρότερο ἀπό τήν τιμή μ = 3 πού θἄλεγε κανείς ὅτι εἶναι ἡ ἐκ τῶν προτέρων καλλίτερη ἐκλογή, μιά καί ἀντιστοιχεῖ στή δύναμη τῆς πραγματικῆς ἐκθετικῆς συμπεριφορᾶς στό ἄπειρο γιά τό δυναμικό x^4. ('Υπενθυμίζομε σχετικά ὅτι γιά δυναμικά πού εἶναι δυνάμεις τοῦ x ἡ ἀσυμπτωτική συμπεριφορά στό ἄπειρο θἄχει τή μορφή $\psi_\infty(x) \sim \exp(\lambda|x|^\mu)$ ὅπου τά λ καί μ προσδιορίζονται ἀντικαθιστώντας στήν ἐξίσωση καί ἀπαιτώντας νά ἱκα-

(*) Κυττάξτε π.χ. στό: HANDBOOK OF MATHEMATICAL FUNCTIONS: Abramowitz - Segun, 'Εκδόσεις Dover.

νοποιεῖται γιά μεγάλα x. Ἔτσι γιά τό δυναμικό x^4 προκύπτει ὅτι θἄναι $\psi_\infty(x) \sim \exp(-|x|^3/3)$). Ἐκ τῶν ὑστέρων δέν εἶναι ὅμως δύσκολο νά καταλάβει κανείς γιατί τό μ θἄπρεπε νά βγεῖ μικρότερο ἀπό τρία. Θἄπρεπε διότι γιά $\mu = 3$ ναί μέν ἔχομε μιά κυματοσυνάρτηση πού πάει στό ἄπειρο ὅπως ἡ πραγματική, ἀλλά ταυτόχρονα σβήνει πολύ ἀπότομα γιά μικρά x ὅπου τό δυναμικό ἔχει πολύ πλατύ πυθμένα καί εἶναι πρός τό συμφέρον τοῦ σωματιδίου νά μείνει ὅσο γίνεται περισσότερο ἐκεῖ. Εἶναι προφανές λοιπόν ὅτι ἐφ᾽ ὅσον περιοριζόμαστε σέ δοκιμαστικές κυματοσυναρτήσεις τῆς μορφῆς $\psi(x) = N\exp(-\lambda|x|^\mu)$ τό μ θά ὑπόκειται σέ ἀνταγωνιστικές ἀπαιτήσεις ἀπό τήν περιοχή τοῦ πυθμένα καί τῶν τοιχωμάτων, μέ ἀποτέλεσμα ἡ τιμή του νἄναι σίγουρα μικρότερη ἀπ᾽ αὐτήν πού ἐπιβάλλει ἡ ἀσυμπτωτική περιοχή ἀπό μόνη της.

Τά παραπάνω ἄς εἶναι ἕνα δεῖγμα τοῦ εἴδους τῆς ἐκ τῶν ὑστέρων ἀνάλυσης πού κάνει κανείς στά ἀποτελέσματα ἑνός μεταβολικοῦ ὑπολογισμοῦ, ὥστε νά προχωρήσει μετά σέ μιά πολύ «σοφότερη» ἐκλογή δοκιμαστικῆς κυματοσυνάρτησης. Τό μόνο ὅριο στήν ἀκρίβεια πού μποροῦμε νά πετύχομε μ᾽ αὐτό τόν τρόπο εἶναι οἱ ὑπολογιστικές μας δυνατότητες.