Truflanareikningur fyrir margföld ástönd

Byrjum við tvöfalt ástand og sjáum síðan almenna atferð fyrir margfalt ástand

$\Updownarrow$

Minnir einnig á almenna atferð sum við stóðum síðar

Tvöfalt ástand

$$H^0|\psi_a^0\rangle = E^0|\psi_a^0\rangle, \quad H^0|\psi_b^0\rangle = E^0|\psi_b^0\rangle$$

við

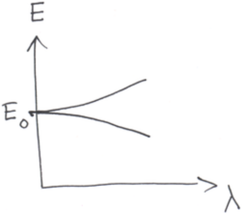
$$\langle\psi_a^0|\psi_b^0\rangle = 0$$

Hvussu sum er línulig samantekt ástandanna

$$|\psi^0\rangle = \alpha|\psi_a^0\rangle + \beta|\psi_b^0\rangle$$

er eginástand H^0

$$H^0|\psi^0\rangle = E^0|\psi^0\rangle$$



truflun getur klofið margfalt ástand

Sem 1. stigs nálgun er hægt að búast við því að nýju ástöndin séu línulegsamantekt ótrufluðu ástandanna

Hærri nálganir taka tillit til fleiri ástanda

Fyrir 1. stig truflun höfðum við áður

$$H^0|\psi^1\rangle + H^1|\psi^0\rangle = E^0|\psi^1\rangle + E^1|\psi^0\rangle$$

Innföldum með $\langle\psi_a^0|$

$$\cancel{\langle\psi_a^0|H^0|\psi^1\rangle} + \langle\psi_a^0|H^1|\psi^0\rangle$$

$$= \cancel{E^0\langle\psi_a^0|\psi^1\rangle} + E^1\langle\psi_a^0|\psi^0\rangle$$

Munum að hér

$$|\psi^0\rangle = \alpha|\psi_a^0\rangle + \beta|\psi_b^0\rangle$$

$$\langle\psi_a^0|H^1|\psi^0\rangle = E^1\langle\psi_a^0|\psi^0\rangle$$

$$\alpha\langle\psi_a^0|H^1|\psi_a^0\rangle + \beta\langle\psi_a^0|H^1|\psi_b^0\rangle = \alpha E^1$$

eða

$$\alpha W_{aa} + \beta W_{ab} = \alpha E^1$$

með

$$W_{ij} \equiv \langle\psi_i^0|H^1|\psi_j^0\rangle \quad (i,j=a,b)$$

Innfjöldum með $\langle \psi_b^0 |$

leiðir til

$$\alpha W_{ba} + \beta W_{bb} = \beta E^1$$

Teknar saman verða þær

$$\begin{pmatrix} W_{aa} & W_{ab} \\ W_{ba} & W_{bb} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = E^1 \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$$

fylkjastök truflunar í hlutrúminu $\{|\psi_i^0\rangle, i = a, b\}$

2x2 eigingildisjafna

með lausn

$$\boxed{E_\pm^1 = \frac{1}{2}\left[W_{aa} + W_{bb} \pm \sqrt{(W_{aa} - W_{bb})^2 + 4|W_{ab}|^2}\right]}$$

Setning

A er hermískur virki sem víxlast við H^0 og H'. Ef $|\psi_a^0\rangle$ og $|\psi_b^0\rangle$ (margföld ástönd H^0) eru líka eiginástönd A með mismunandi eigingildi

$$A|\psi_a^0\rangle = \mu|\psi_a^0\rangle$$
$$A|\psi_b^0\rangle = \nu|\psi_b^0\rangle$$

með $\mu \neq \nu$

þá er $W_{ab} = 0$ og venjulegur truflana reikningur nægir

Sönnun

$$[A, H'] = 0$$

$$\langle \psi_a^0 | [A, H'] | \psi_b^0 \rangle = 0$$

$$\|$$

$$\langle \psi_a^0 | A H' | \psi_b^0 \rangle - \langle \psi_a^0 | H' A | \psi_b^0 \rangle$$

$$= \mu \langle \psi_a^0 | H' | \psi_b^0 \rangle - \nu \langle \psi_a | H' | \psi_b^0 \rangle$$

$$= (\mu - \nu) W_{ab} = 0$$

$$\rightarrow W_{ab} = 0$$

Þetta er mjög handhæg aðferð sem við munum nota þegar hægt er, t.d. fyrir margfölduð ástönd vetnisatóms

Þar þarf t.d. að skoða hvort L_z geti leikið þetta hlutverk.

Homalínugera í n-víða hlutrúmi n-falda Eiginástandsins

Hærri margfeldni

Augljóst að 1. stigs niðurstöður fást með því að nota $n \times n$ - fylkið

$$W_{ij} = \langle \psi_i^0 | H' | \psi_j^0 \rangle$$

Dæmi

Eind í teningi

$$V(x,y,z) = \begin{cases} 0 & \text{if } 0<x<a,\ 0<y<a,\ 0<z<a \\ \infty & \text{annars} \end{cases}$$

Eiginföllin eru

$$\psi^0_{n_x n_y n_z}(x,y,z) = \left(\frac{2}{a}\right)^{3/2} \sin\left(\frac{n_x \pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{n_y \pi y}{a}\right) \sin\left(\frac{n_z \pi z}{a}\right)$$

og eigingildin (orkurófið)

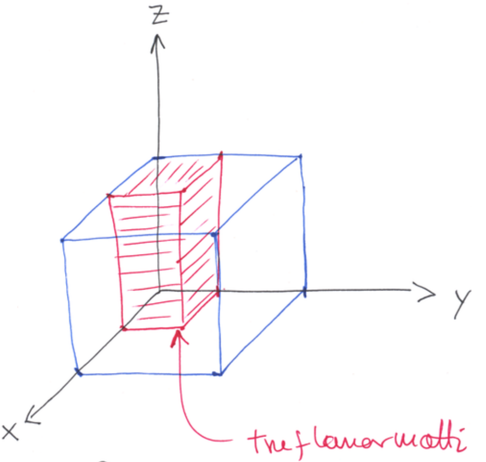
$$E^0_{n_x n_y n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \left\{ n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 \right\}$$

Grunnástand $|\psi_{111}\rangle$ er einfalt með orku $E^0_{111} = 3 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$

Næsta ástand er margfalt

með
$$E_1^0 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}\cdot 6$$

$$\left.\begin{aligned}|\psi_a^0\rangle &= |112\rangle\\ |\psi_b^0\rangle &= |121\rangle\\ |\psi_c^0\rangle &= |211\rangle\end{aligned}\right\} \; |n_x n_y n_z\rangle$$



Athugum truflun

$$H' = \begin{cases} V_0 & \text{ef } \; 0 < x < \frac{a}{2}, \; 0 < y < \frac{a}{2} \\ 0 & \text{annars} \end{cases}$$

$$E_0^1 = \langle 111 | H' | 111 \rangle = \left(\frac{2}{a}\right)^3 V_0 \int_0^{a/2} dx \sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) \int_0^{a/2} dy \sin^2\left(\frac{\pi y}{a}\right) \int_0^{a} dz \sin^2\left(\frac{\pi z}{a}\right)$$

$$= \frac{1}{4} V_0$$

$\bar{a}$ same hått fost

$$W_{aa} = W_{bb} = W_{cc} = \frac{V_0}{4}$$

og

$$W_{ab} = 0 \quad , \quad W_{ac} = 0$$

$$W_{bc} = \frac{16}{2\pi^2} V_0$$

med $K = \left(\frac{8}{3\pi}\right)^2 \approx 0{,}7205$

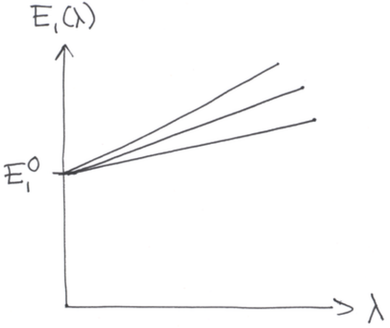
$$\rightarrow W = \frac{V_0}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & K \\ 0 & K & 1 \end{pmatrix}$$

þrenn eigingildi

$$w_1 = 1$$

$$w_2 = 1 + K$$

$$w_3 = 1 - K$$



þessu vegna er 1. stigs leiðréttingin í λ

$$E_1(\lambda) = \begin{cases} E_1^0 + \frac{\lambda V_0}{4} \cdot 1 \\ E_1^0 + \frac{\lambda V_0}{4}(1+K) \\ E_1^0 + \frac{\lambda V_0}{4}(1-K) \end{cases}$$

Truflunin klýfur upp ástandið línuleg nálgun (öll hækka, enda minnkar rúmmál kassans)

Nýju ástöndin eru

$$|\psi^0\rangle = \begin{cases} |a\rangle \\ \frac{|b\rangle + |c\rangle}{\sqrt{2}} \\ \frac{|b\rangle - |c\rangle}{\sqrt{2}} \end{cases}$$

Við getum ekki búið til svipaða aðferð sem virkar 2. stigs truflun fyrir margföld ástönd án þess að taka tillit til annara ástanda

En við getum gert betur

Hugsum okkur kerfi með þekktum lausnum

$$H_0 |n\rangle = E_n^0 |n\rangle$$

notum latneska stafi til að tákna ástöndin í fullkomna grunninum hér $\{|n\rangle\}$

Við leitum lausna á

$$\left[H_0 + H'\right]|\mu\rangle = E_\mu |\mu\rangle \quad (i)$$

Grískir stafir tákna þessi nýju óþekktu ástönd $H_0 + H'$

$\{|n\rangle\}$ var fullkominn grunnur

$$\rightarrow \quad |\mu\rangle = \sum_n C_{\mu n} |n\rangle \quad (ii)$$

þar sem þekkjum ekki liðuna-stuðlana $C_{\mu n}$

Við viljum finna þá og E_μ

Innföldum (i) með $\langle m|$

$$\langle m|\left\{H_0 + H'\right\}|\mu\rangle = E_\mu \langle m|\mu\rangle$$

og notum lausnina (ii) fyrir $|\mu\rangle$

$$\sum_n \Big[\underbrace{\langle m|H_0|n\rangle}_{=\,\delta_{mn}E_n^0} + \underbrace{\langle m|H'|n\rangle}_{\text{hægt að reikna}}\Big] C_{\mu n} = \underbrace{E_\mu \sum_n \underbrace{\langle m|n\rangle}_{=\,\delta_{m,n}} C_{\mu n}}_{=\,E_\mu C_{\mu m}}$$

þarf að finna óþekkt

Hvað erum við með hér?

$$\underbrace{\begin{pmatrix} E_1^0+H'_{11} & H'_{12} & H'_{13} & \cdots \\ H'_{21} & E_2^0+H'_{22} & H'_{21} & \cdots \\ H'_{31} & H'_{32} & E_3^0+H'_{33} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}}_{\text{Óendanlega stórt Hamilton fylki}} \begin{pmatrix} C_{\mu 1} \\ C_{\mu 2} \\ C_{\mu 3} \\ \vdots \end{pmatrix} = E_\mu \begin{pmatrix} C_{\mu 1} \\ C_{\mu 2} \\ C_{\mu 3} \\ \vdots \end{pmatrix}$$

eiginvigrar með liðunarstuðlum

Eigingildi

Veljum N og sníðum fylkið þ.a. við notum bara orkulægstu stök grunnsins upp í $|N\rangle$

Finnum N eigingildin og vigrana, athugum samleitni með því að hækka N

Vonumst til ~~þess~~ að einhver ásættanlegur fjöldi lægstu eigingildanna hafi góða samleitni

Fáum lausn sem jafngildir N. stigs truflun

Oft gert fyrir $N = 100$, $N = 1000$, $N = 10000$

„Exact numerical diagonalization"

Röður við mjög flókin fyrirbæri,
Starta frá flum eða tengingu

level crossing – anticrossing

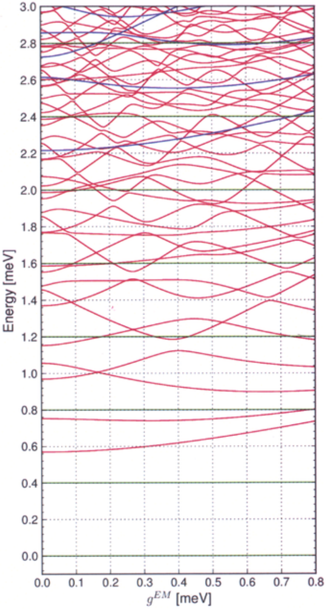
⋮

Má líka líta á sem N-stika

hnikunar reikning

Kerfi einnar eindar, eða
fjöleindakerfi

http://arxiv.org/abs/1109.4728



Upp í 10 rafeindir
Coulombvíxlverkandi og
27 ljóseindir í holi

Tenging rafeinda og
ljóseinda