Számítási módszerek a fizikában 1, 14. hét

I. Az $A = \begin{pmatrix} 3 & 1 & 1 \\ 1 & 3 & 1 \\ 1 & 1 & 5 \end{pmatrix}$ mátrix sajátértékei és normált sajátvektorai az alábbiak.

$$\begin{aligned} E_1^{(0)} &= 2 \qquad & v_1^{(0)} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(-1,1,0) \\ E_2^{(0)} &= 3 \qquad & v_2^{(0)} &= \frac{1}{\sqrt{3}}(1,1,-1) \\ E_3^{(0)} &= 6 \qquad & v_3^{(0)} &= \frac{1}{\sqrt{6}}(1,1,2) \end{aligned}$$

Legyen $V = \begin{pmatrix} 0 & a & a \\ a & 0 & 0 \\ a & 0 & 0 \end{pmatrix}$, ahol $a \in \mathbb{R}$ paraméter és tekintsük az $A' = A + V$ mátrixot.

1. Igazoljuk, hogy a perturbációszámítás első rendjében a sajátértékek az alábbi járulékot kapják.

$$E_1^{(1)} = -a \qquad E_2^{(1)} = 0 \qquad E_3^{(1)} = a.$$

2. Igazoljuk, hogy a $B_{ij} = \left\langle v_i^0, V v_j^{(0)} \right\rangle$ elemekből ($i, j \in \{1,2,3\}$) álló mátrix az alábbi.

$$B = \frac{a}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 0 & -1 & -\sqrt{2} \\ -1 & 0 & -\sqrt{3} \\ -\sqrt{2} & -\sqrt{3} & 0 \end{pmatrix}$$

3. Igazoljuk, hogy a

$$\rho_{ij} = \begin{cases} 0, & \text{ha,} \quad i = j; \\ \dfrac{B_{ij}}{E_i^{(0)} - E_j^{(0)}}, & \text{ha,} \quad i \neq j; \end{cases}$$

mátrix az alábbi.

$$\rho = \frac{a}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & \frac{1}{2\sqrt{2}} \\ -1 & 0 & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{1}{2\sqrt{2}} & \frac{-1}{\sqrt{3}} & 0 \end{pmatrix}$$

4. Igazoljuk, hogy a perturbációszámítás első rendjében a sajátvektorok az alábbi járulékot kapják.

$$v_1^{(1)} = \frac{\sqrt{2}a}{8}(-1,-1,2) \qquad v_2^{(1)} = \frac{\sqrt{3}a}{9}(2,-1,1) \qquad v_3^{(1)} = \frac{\sqrt{6}a}{72}(7,1,4)$$

5. Mutassuk meg, hogy a

$$w_i = A'(v_i^{(0)} + v_i^{(1)}) - (E_i^{(0)} + E_i^{(1)})(v_i^{(0)} + v_i^{(1)}) \qquad i \in \{1,2,3\}$$

vektorok az alábbiak.

$$w_1 = \frac{\sqrt{2}a^2}{8}(0,-2,1) \qquad w_2 = \frac{2\sqrt{3}a^2}{9}(0,1,1) \qquad w_3 = \frac{\sqrt{6}a^2}{72}(-10,6,11)$$