En D-dimensjonal kvantebrønn med N partikler har Hamilton-operator

$$\mathbf{H}[\vec{R}] = \sum_{i}^{N} \left(U[\vec{r}_i] - \frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}_i^2 \right) + \sum_{i}^{N} \sum_{j>i}^{N} V[\vec{r}_i, \vec{r}_j] \tag{1}$$

i posisjonsbasis, med

$$U[\vec{r}_i] = \frac{m\omega^2}{2} \left(x_i^2 + y_i^2 + \lambda^2 z_i^2 \right), \tag{2}$$

$$V[\vec{r}_i, \vec{r}_j] = V[\Delta r_{ij}] = \begin{cases} \infty & \text{for } \Delta r_{ij} < a \\ 0 & \text{for } \Delta r_{ij} \geq a \end{cases}, \tag{3}$$

der U altså er kvantebrønn-feltet mens V beskriver en hard veksling mellom partiklene som hindrer at de overlapper. Her er $\vec{r}_i$ og $\vec{\nabla}_i$ henholdsvis posisjonen og den posisjonsderiverte til hver partikkel i, mens $\vec{R}$ er den samla posisjonsvektoren for hele systemet, a er en karakteristisk radius for partiklene, m er partiklenes masse, ω er kvantebrønnstyrken og λ er en parameter som eventuelt gjør kvantebrønnen elliptisk. Videre er

$$\Delta\vec{r}_{ij} = \vec{r}_i - \vec{r}_j \tag{4}$$

$$\implies \Delta r_{ij} = \sqrt{\left(\vec{r}_i - \vec{r}_j\right)^2} \tag{5}$$

avstandsvektoren mellom partiklene i og j.

Innfør først $\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ som lengdemål og $\hbar\omega$ som energimål ved å spalte ut

$$a = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\, a' \tag{6}$$

$$\vec{r}_i = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\, \vec{r'}_i, \tag{7}$$

$$\implies \Delta\vec{r}_{ij} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\, \Delta\vec{r'}_{ij}, \tag{8}$$

$$\vec{\nabla}_i = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, \vec{\nabla'}_i, \tag{9}$$

$$\mathbf{H} = \hbar\omega \mathbf{H}'. \tag{10}$$

De merka størrelsene $\vec{r'}_i$, $\vec{\nabla'}_i$, $\Delta\vec{r'}_{ij}$ og $\mathbf{H}'$ er dimensjonsløse, og den merka Hamilton-operatoren tar formen

$$\mathbf{H}'[\vec{R'}] = \sum_{i}^{N} \frac{1}{2} \left(U'[\vec{r'}_i] - \vec{\nabla'}_i^2 \right) + \sum_{i}^{N} \sum_{j>i}^{N} V'[\Delta r'_{ij}] \tag{11}$$

med

$$U'[\vec{r'}_i] = x_i^2 + y_i^2 + \lambda^2 z_i^2, \tag{12}$$

$$V'[\Delta r'_{ij}] = \begin{cases} \infty & \text{for } \Delta r'_{ij} < a' \\ 0 & \text{for } \Delta r'_{ij} \geq a' \end{cases}. \tag{13}$$

Vi ser heretter bort ifra merkene og behandler de dimensjonsløse ligningene videre.

Sett nå en prøvefunksjon på formen

$$\Psi[\vec{R}] = \prod_i^N g[\vec{r}_i] \prod_j^N \prod_{k>j}^N f[\vec{r}_j, \vec{r}_k] \tag{14}$$

med

$$g[\vec{r}_i] = \epsilon^{-\alpha\left(x_i^2+y_i^2+\beta z_i^2\right)}, \tag{15}$$

$$f[\vec{r}_i, \vec{r}_j] = f[\Delta r_{ij}] = \begin{cases} 0 & \text{for } \Delta r_{ij} < a \\ 1 - \frac{a}{\Delta r_{ij}} & \text{for } \Delta r_{ij} \geq a \end{cases}. \tag{16}$$

Her er α og β variabler til rådighet i jakta på grunnenergien.

Etter variasjonsmetoden er grunnenergien styrt av

$$E_G \leq \langle\Psi|\mathbf{H}|\Psi\rangle \tag{17}$$

for enhver tilstand $|\Psi\rangle$. I posisjonsbasis kan skranken skrives

$$\langle\Psi|\mathbf{H}|\Psi\rangle = \int\cdots\int \Psi^*[\vec{R}]\mathbf{H}[\vec{R}]\Psi[\vec{R}]\delta^{3N}R = \int\cdots\int \left|\Psi[\vec{R}]\right|^2 \frac{\mathbf{H}[\vec{R}]\Psi[\vec{R}]}{\Psi[\vec{R}]}\delta^{3N}R,$$

så vi kan altså innføre en lokal energi

$$E_L[\vec{R}] = \frac{\mathbf{H}[\vec{R}]\Psi[\vec{R}]}{\Psi[\vec{R}]} \tag{18}$$

og betrakte skranken $\langle\Psi|\,\mathbf{H}\,|\Psi\rangle$ som forventningsverdien til denne lokale energien ved en sjansfordeling $\left|\Psi[\vec{R}]\right|^2$, altså

$$E_G \leq \int\cdots\int \left|\Psi[\vec{R}]\right|^2 E_L[\vec{R}]\delta^{3N}R = \langle E_L\rangle\,. \tag{19}$$

Det er altså nyttig å se nærmere på E_L og prøve å finne et analytisk uttrykk for denne.

Potergileddene U og V i Hamilton-operatoren gir direkte bidrag til E_L, så det er kinergileddet, nærmere bestemt den dobbeltderiverte $\vec{\nabla}_i^2\Psi$ som må beregnes nærmere. Skriv

$$\Psi[\vec{R}] = G[\vec{R}]F[\vec{R}] \tag{20}$$

med

$$G[\vec{R}] = \prod_i^N g[\vec{r}_i] \tag{21}$$

$$F[\vec{R}] = \prod_j^N \prod_{k>j}^N f[\Delta r_{jk}] \tag{22}$$

og merk at

$$\vec{\nabla}_i^2\Psi = \vec{\nabla}_i \cdot \Big(\vec{\nabla}_i G F + G\vec{\nabla}_i F\Big) = \vec{\nabla}_i^2 G F + 2\vec{\nabla}_i G \cdot \vec{\nabla}_i F + G\vec{\nabla}_i^2 F. \tag{23}$$

Vi må derfor finne de deriverte av henholdsvis G og F for å få et uttrykk for E_L. De deriverte av G er

$$\vec{\nabla}_i G = \vec{\nabla}_i g[\vec{r}_i] \prod_{j\neq i}^{N} g[\vec{r}_j] \tag{24}$$

$$\Longrightarrow \vec{\nabla}_i^2 G = \vec{\nabla}_i^2 g[\vec{r}_i] \prod_{j\neq i}^{N} g[\vec{r}_j], \tag{25}$$

og ettersom

$$\begin{aligned}
\vec{\nabla}_i g[\vec{r}_i] &= -2\alpha\Big(\vec{r}_i + (\beta-1)\vec{z}_i\Big) g[\vec{r}_i] && (26)\\
\Longrightarrow \vec{\nabla}_i^2 g[\vec{r}_i] &= -2\alpha\left(\Big(D + (\beta-1)\Big) g[\vec{r}_i] + \Big(\vec{r}_i + (\beta-1)\vec{z}_i\Big)\cdot \vec{\nabla}_i g[\vec{r}_i]\right) \\
\Longrightarrow \vec{\nabla}_i^2 g[\vec{r}_i] &= 2\alpha\left(2\alpha\Big(\vec{r}_i + (\beta-1)\vec{z}_i\Big)^2 - \Big(D + (\beta-1)\Big)\right) g[\vec{r}_i] && (27)
\end{aligned}$$

så blir disse ganske enkelt

$$\vec{\nabla}_i G = -2\alpha\Big(\vec{r}_i + (\beta-1)\vec{z}_i\Big) G, \tag{28}$$

$$\vec{\nabla}_i^2 G = 2\alpha\left(2\alpha\Big(\vec{r}_i + (\beta-1)\vec{z}_i\Big)^2 - \Big(D + (\beta-1)\Big)\right) G. \tag{29}$$

For å finne de deriverte av F skriver vi om funksjonen på eksponentialform,

$$F[\vec{R}] = \epsilon^{\sum_{j}^{N}\sum_{k>j}^{N} \ln f[\Delta r_{jk}]}, \tag{30}$$

og ser at

$$\vec{\nabla}_i F = \sum_{j\neq i}^{N}\left(\frac{\vec{\nabla}_i f[\Delta r_{ij}]}{f[\Delta r_{ij}]}\right) F \tag{31}$$

$$\begin{aligned}
\Longrightarrow \vec{\nabla}_i^2 F &= \sum_{j\neq i}^{N}\left(\vec{\nabla}_i \cdot \left[\frac{\vec{\nabla}_i f[\Delta r_{ij}]}{f[\Delta r_{ij}]}\right]\right) F + \sum_{j\neq i}^{N}\left(\frac{\vec{\nabla}_i f[\Delta r_{ij}]}{f[\Delta r_{ij}]}\right)\cdot \vec{\nabla}_i F \\
&= \sum_{j\neq i}^{N}\left(\frac{\vec{\nabla}_i^2 f[\Delta r_{ij}]}{f[\Delta r_{ij}]} - \frac{\Big(\vec{\nabla}_i f[\Delta r_{ij}]\Big)^2}{f^2[\Delta r_{ij}]}\right) F + \sum_{j\neq i}^{N}\sum_{k\neq i}^{N}\left(\frac{\vec{\nabla}_i f[\Delta r_{ij}]\cdot \vec{\nabla}_i f[\Delta r_{ik}]}{f[\Delta r_{ij}] f[\Delta r_{ik}]}\right) F \\
&= \sum_{j\neq i}^{N}\left(\frac{\vec{\nabla}_i^2 f[\Delta r_{ij}]}{f[\Delta r_{ij}]} + \sum_{\substack{k\neq i\\ k\neq j}}^{N} \frac{\vec{\nabla}_i f[\Delta r_{ij}]\cdot \vec{\nabla}_i f[\Delta r_{ik}]}{f[\Delta r_{ij}] f[\Delta r_{ik}]}\right) F. && (32)
\end{aligned}$$

De deriverte av f er

$$\vec{\nabla}_i f[\Delta r_{ij}] = \frac{a\Delta\vec{r}_{ij}}{\Delta r_{ij}^3} \tag{33}$$

$$\Longrightarrow \vec{\nabla}_i^2 f[\Delta r_{ij}] = \frac{aD}{\Delta r_{ij}^3} - \frac{3a\Delta\vec{r}_{ij}^2}{\Delta r_{ij}^5}$$

$$= \frac{a(D-3)}{\Delta r_{ij}^3} \tag{34}$$

så lenge alle $\Delta r_{ij} \geq a$. Merk at

$$\Delta r_{ij} f[\Delta r_{ij}] = \Delta r_{ij} - a \tag{35}$$

og dermed blir

$$\vec{\nabla}_i F = \sum_{j\neq i}^{N} \left(\frac{a\Delta\vec{r}_{ij}}{\Delta r_{ij}^2(\Delta r_{ij} - a)} \right) F, \tag{36}$$

$$\vec{\nabla}_i^2 F = \sum_{j\neq i}^{N} \left(\frac{a(D-3)}{\Delta r_{ij}^2(\Delta r_{ij} - a)} + \sum_{\substack{k\neq i\\k\neq j}}^{N} \frac{a^2\Delta\vec{r}_{ij}\cdot\Delta\vec{r}_{ik}}{\Delta r_{ij}^2(\Delta r_{ij} - a)\Delta r_{ik}^2(\Delta r_{ik} - a)} \right) F. \tag{37}$$

Ligning (23) tar nå formen

$$\begin{aligned}
\vec{\nabla}_i^2 \Psi &= 2\alpha\left(2\alpha\Big(\vec{r}_i + (\beta-1)\vec{z}_i\Big)^2 - \Big(D + (\beta-1)\Big)\right)\Psi \\
&\quad - 4\alpha\Big(\vec{r}_i + (\beta-1)\vec{z}_i\Big)\cdot\sum_{j\neq i}^{N}\left(\frac{a\Delta\vec{r}_{ij}}{\Delta r_{ij}^2(\Delta r_{ij}-a)}\right)\Psi \\
&\quad + \sum_{j\neq i}^{N}\left(\frac{a(D-3)}{\Delta r_{ij}^2(\Delta r_{ij}-a)} + \sum_{\substack{k\neq i\\k\neq j}}^{N}\frac{a^2\Delta\vec{r}_{ij}\cdot\Delta\vec{r}_{ik}}{\Delta r_{ij}^2(\Delta r_{ij}-a)\Delta r_{ik}^2(\Delta r_{ik}-a)}\right)\Psi \\
\Longrightarrow \frac{\vec{\nabla}_i^2\Psi}{\Psi} &= 2\alpha\left(2\alpha\Big(\vec{r}_i + (\beta-1)\vec{z}_i\Big)^2 - \Big(D + (\beta-1)\Big)\right) \\
&\quad + \sum_{j\neq i}^{N}\frac{a(D-3) - 4\alpha\Big(\vec{r}_i + (\beta-1)\vec{z}_i\Big)\cdot a\Delta\vec{r}_{ij}}{\Delta r_{ij}^2(\Delta r_{ij}-a)} \\
&\quad + \sum_{j\neq i}^{N}\sum_{\substack{k\neq i\\k\neq j}}^{N}\frac{a^2\Delta\vec{r}_{ij}\cdot\Delta\vec{r}_{ik}}{\Delta r_{ij}^2(\Delta r_{ij}-a)\Delta r_{ik}^2(\Delta r_{ik}-a)}
\end{aligned} \tag{38}$$

og ved å innføre størrelsene

$$\vec{q}[\vec{r}_i] = -4\alpha\Big(\vec{r}_i + (\beta - 1)\vec{z}_i\Big), \tag{39}$$

$$d[\Delta r_{ij}] = \Delta r_{ij}^2(\Delta r_{ij} - a), \tag{40}$$

$$\vec{s}[\Delta \vec{r}_{ij}] = \frac{a\Delta \vec{r}_{ij}}{2d[\Delta r_{ij}]}, \tag{41}$$

$$\tag{42}$$

følger det at det totale utrykket for den lokale energien blir

$$\begin{aligned} E_L[\vec{R}] = \alpha N\Big(D + (\beta - 1)\Big) + \sum_i^N \frac{1}{2}\left(U[\vec{r}_i] - \frac{1}{4}\vec{q}^2[\vec{r}_i]\right) \\ - \sum_i^N \sum_{j\neq i}^N \left(\frac{a(D-3)}{2d[\Delta r_{ij}]} + \vec{q}[\vec{r}_i] \cdot \vec{s}[\Delta \vec{r}_{ij}]\right) - 2\sum_i^N \sum_{j\neq i}^N \sum_{\substack{k\neq i \\ k\neq j}}^N \vec{s}[\Delta \vec{r}_{ij}] \cdot \vec{s}[\Delta \vec{r}_{ik}] \\ + \sum_i^N \sum_{j>i}^N V[\Delta r_{ij}]. \end{aligned} \tag{43}$$

En annen interessant størrelse for systemet er den såkalte kvantekrafta

$$\vec{Q}[\vec{R}] = \frac{2\vec{\nabla}\Psi[\vec{R}]}{\Psi[\vec{R}]} \tag{44}$$

Fra ligningene over følger det også at

$$\begin{aligned} \vec{\nabla}_i \Psi &= \vec{\nabla}_i G F + G \vec{\nabla}_i F \\ &= -2\alpha\Big(\vec{r}_i + (\beta - 1)\vec{z}_i\Big)\Psi + \sum_{j\neq i}^N \left(\frac{a\Delta \vec{r}_{ij}}{\Delta r_{ij}^2(\Delta r_{ij} - a)}\right)\Psi \\ \implies \frac{\vec{\nabla}_i \Psi}{\Psi} &= -2\alpha\Big(\vec{r}_i + (\beta - 1)\vec{z}_i\Big) + \sum_{j\neq i}^N \left(\frac{a\Delta \vec{r}_{ij}}{\Delta r_{ij}^2(\Delta r_{ij} - a)}\right), \end{aligned} \tag{45}$$

og dermed blir uttrykket for kvantekrafta

$$\vec{Q}[\vec{R}] = \sum_i^N \vec{q}[\vec{r}_i] + 4\sum_i^N \sum_{j\neq i}^N \vec{s}[\Delta \vec{r}_{ij}]. \tag{46}$$

med de innførte størrelsene.