

FYS3150: Prosjekt 2

Saurav Sharma, Delmon Arous

2. oktober 2013

Sammendrag

Vi diskuterer numeriske løsninger av Schrödingers ligning innvirket av et tredimensjonalt harmonisk oscillator. Her reduserer vi Schrödingers ligning til en egenverdiligning som løses gjennom Jacobis iterative metode. En god innføring av denne metoden blir gitt, slik at den blir implementert i C/C++ og en sammenligning av dens funksjonalitet med andre iterative metoder som anvender likhetstransformasjoner blir foretatt. Her ser vi på hva som skyldes konvergens av Jacobis metode. Vi undersøker så hvordan gitterpunkter, grensebetingelser og ulike oscillator frekvenser avhenger av egenverdiene (energiene) til både en partikkel i en harmonisk oscillator og to partikler som Coulomb-vekselvirker i et eksternt oscillator potensial.

Introduksjon

Hensikten med dette prosjektet er å løse Schrödinger-ligningen for to partikler i et eksternt tredimensjonalt harmonisk oscillator potensial, både med og uten frastøtende Coulomb-vekselvirkning. Vi reformulerer derfor Schrödinger-ligning, som er i seks dimensjoner, om til diskretisert form som gir opphav til en egenverdi-problem gjennom substitusjoner og approksimasjoner. Vi har da klart å redusere ligningen fra seks dimensjoner til å bli en generell ligningen i en dimensjon. Ved å innføre en tridiagonal matrise kan likhetstransformasjoner ved iterative metoder anvendes for å løse egenverdi-systemet. Prosjektet introduserer oss til en spesiell metode, Jacobis metode, som bli anvendt for å løse dette systemet. Med det skal vi skrive vår egen kode som implementerer Jacobis metode.

Teori

Numerisk løsning av Schrödingers ligning for en partikkel i et eksternt harmonisk oscillator potensial

I dette prosjektet tar vi for oss Schrödingers ligning i sfæriske koordinater (r, θ, ϕ) . Her antar vi at potensialet er sfærisk symmetrisk, altså at potensialet er kun en funksjon av avstand fra et bestemt origo. I tre dimensjoner lyder da den tidsuavhengige Schrödinger ligningen,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V\psi = E\psi. \quad (1)$$

Her ser vi etter en løsning ved separasjon av variable,

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y(\theta, \phi), \quad (2)$$

hvor $R(r)$ og $Y(\theta, \phi)$ er hhv. den radielle og angulære delen av bølgefunksjonen ψ .

Her legger vi merke til at de sfæriske harmoniske, $Y(\theta, \phi)$, forblir urørt for sfærisk symmetriske potensialer. Potensialet $V(r)$ påvirker da kun den radielle delen av bølgefunksjonen. Vi er derfor interessert i bare den radielle delen av Schrödinger ligningen. Videre er Laplace-operatoren i sfæriske koordinater gitt ved,

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \left(\frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right). \quad (3)$$

Ved innsetting av (2) og (3) i (1) gir for den radielle delen av Schrödinger ligningen,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R(r) + V(r)R(r) = ER(r), \quad (4)$$

hvor $r \in [0, \infty]$, kvantetallet l beskriver angulær momentet til elektronet, potensialet til en harmonisk oscillator er $V(r) = \frac{1}{2}kr^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2$ og energien E av en harmonisk oscillator med frekvens ω er gitt ved,

$$E_{nl} = \hbar\omega \left(2n + l + \frac{3}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots \text{ og } l = 0, 1, 2, \dots$$

Vi kan forenkle ligning (4) ved substitusjonen $R(r) = \frac{u(r)}{r}$,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} u(r) + \left(V(r) + \frac{l(l+1)}{r^2} \frac{\hbar^2}{2m} \right) u(r) = Eu(r), \quad u(0) = u(\infty) = 0. \quad (5)$$

Videre introduserer vi en dimensjonsløs variabel $\rho = r/\alpha$ der α er en konstant av dimensjon lengde, og setter $l = 0$ i dette prosjektet. Vi får da

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m\alpha^2} \frac{d^2}{d\rho^2} u(\rho) + \frac{k}{2} \alpha^2 \rho^2 u(\rho) &= Eu(\rho) \\ -\frac{d^2}{d\rho^2} u(\rho) + \frac{mk}{\hbar^2} \alpha^4 \rho^2 u(\rho) &= \frac{2m\alpha^2}{\hbar^2} Eu(\rho) \\ -\frac{d^2}{d\rho^2} u(\rho) + \rho^2 u(\rho) &= \lambda u(\rho) \end{aligned} \quad (6)$$

der vi har brukt at α holdes fikset, $\alpha = \left(\frac{\hbar^2}{mk} \right)^{1/4}$, og definert $\lambda = \frac{2m\alpha^2}{\hbar^2} E$. Med det kan vi løse ligning (6) numerisk ved å approksimere $u''(\rho)$ gjennom tre-punktsformelen (oppnås gjennom Taylor-utvikling),

$$u''(\rho) = \frac{u(\rho+h) - 2u(\rho) + u(\rho-h)}{h^2} + O(h^2) \quad (7)$$

hvor steglengden, gitt ved n antall steg, er $h = \frac{\rho_{\max} - \rho_{\min}}{n} = \frac{\rho_{\max}}{n}$. Med det stykker vi opp intervallet vårt $\rho \in [0, \rho_{\max}]$ i n subintervaller ved å la $\rho_i = ih$ for $i = 0, 1, \dots, n$. Derfor kan vi approksimere Schrödingers ligning (6) til,

$$\begin{aligned} & -\frac{u(\rho_i + h) - 2u(\rho_i) + u(\rho_i - h)}{h^2} + \rho_i^2 u(\rho_i) = \lambda u(\rho_i) \\ \Rightarrow & -\frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{h^2} + \rho_i^2 u_i = -\frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{h^2} + V_i u_i = \lambda u_i, \end{aligned}$$

der $V_i = \rho_i^2$ er potensialet av den harmoniske oscillatoren. Her kan Schrödingers ligning skrives mer kompakt ved å introdusere en tridiagonal matrise med diagonale elementer $d_i = \frac{2}{h^2} + V_i$ og ikke-diagonale elementer $e_i = -\frac{1}{h^2}$,

$$d_i u_i + e_{i-1} u_{i-1} + e_{i+1} u_{i+1} = \lambda u_i \quad (8)$$

eller på formen $\mathbf{A}\mathbf{u} = \lambda\mathbf{u}$

$$\begin{pmatrix} d_1 & e_1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ e_1 & d_2 & e_2 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & e_2 & d_3 & e_3 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & d_{n-2} & e_{n-2} \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & e_{n-2} & d_{n-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \dots \\ \dots \\ \dots \\ u_{n-1} \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \dots \\ \dots \\ \dots \\ u_{n-1} \end{pmatrix} \quad (9)$$

Numerisk løsning av Schrödinger ligningen for to Coulomb-vekselvirkende partikler i et eksternt harmonisk oscillator potensial

For ett elektron påvirket av et harmonisk oscillator potensial, er Schrödingers ligning gitt ved ligning (5). For to elektroner uten frastøtende Coulomb-interaksjon har vi heller

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr_2^2} + \frac{1}{2} k r_1^2 + \frac{1}{2} k r_2^2 \right) u(r_1, r_2) = E^{(2)} u(r_1, r_2)$$

der $E^{(2)}$ er energitilstanden til begge elektronene med sammensatt radiell bølgefunksjon $u(r_1, r_2)$.

Videre innfører vi den relative koordinaten $\mathbf{r} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1$ og massesenter koordinaten $\mathbf{R} = \frac{1}{2}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)$. Dette gir

$$\left(-\frac{\hbar^2}{m} \frac{d^2}{dr^2} - \frac{\hbar^2}{4m} \frac{d^2}{dR^2} + \frac{1}{4} k r^2 + k R^2 \right) u(r, R) = E^{(2)} u(r, R).$$

Vi vil finne en løsning av ligningen ved separasjon av variable, altså på formen $u(r, R) = \psi(r)\psi(R)$, med tilhørende relativ energi E_r og massesenter-energi E_R . Den totale to-elektronenergien blir derfor $E^{(2)} = E_r + E_R$.

Vi legger til et ledd i Schrödingers ligning for å inkludere frastøtende Coulomb-vekselvirkning mellom elektronene,

$$V(r_1, r_2) = \frac{\beta e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} = \frac{\beta e^2}{r} = \frac{1.44 \text{ eV nm}}{r}$$

og får for den r -avhengige delen av ligningen

$$\left(-\frac{\hbar^2}{m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{4} k r^2 + \frac{\beta e^2}{r} \right) \psi(r) = E_r \psi(r).$$

Videre introduserer vi igjen den dimensjonsløse variabelen $\rho = r/\alpha$,

$$-\frac{d^2}{d\rho^2} \psi(\rho) + \frac{1}{4} \frac{mk}{\hbar^2} \alpha^4 \rho^2 \psi(\rho) + \frac{m\alpha\beta e^2}{\rho \hbar^2} \psi(\rho) = \frac{m\alpha^2}{\hbar^2} E_r \psi(\rho)$$

Vi definerer “frekvensen” på oscillatoren $\omega_r^2 = \frac{1}{4} \frac{mka^4}{\hbar^2}$ og $\lambda = \frac{ma^2}{\hbar^2} E_r$, og holder konstanten α fikset slik at $\alpha = \frac{\hbar^2}{m\beta e^2}$. Med det får vi for Schrödinger ligningen,

$$-\frac{d^2}{d\rho^2}\psi(\rho) + \omega_r^2 \rho^2 \psi(\rho) + \frac{1}{\rho}\psi(\rho) = -\frac{d^2}{d\rho^2}\psi(\rho) + V(\rho)\psi(\rho) = \lambda\psi(\rho) \quad (10)$$

Denne ligningen kan løses numerisk ved bruk av ligning (8), men der potensialet er nå endret til $V_i = \omega_r^2 \rho_i^2 + \frac{1}{\rho_i}$.

Jacobis metode

Matrisen \mathbf{A} er reell og symmetrisk, og har derfor n egenverdier $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$. Siden matrisen \mathbf{A} er reell og symmetrisk, finnes det reell ortogonal matrise \mathbf{S} slik at

$$\mathbf{S}^T \mathbf{A} \mathbf{S} = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n), \quad \mathbf{S}^T \mathbf{S} = \mathbf{S}^{-1} \mathbf{S} = \mathbf{I}$$

hvor transformasjonsmatrisen er gitt ved,

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \cos \theta & 0 & \dots & 0 & \sin \theta \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \dots & -\sin \theta & \dots & \dots & 0 & \cos \theta \end{pmatrix}$$

Matriseelementene av \mathbf{S} som er ulik null er derfor gitt ved

$$s_{kk} = s_{ll} = \cos \theta, s_{kl} = -s_{lk} = -\sin \theta, s_{ii} = -s_{ii} = 1, \quad i \neq k, l$$

For å estimere egenverdiene til \mathbf{A} numerisk, må vi utføre likhetstransformasjoner på \mathbf{A} for å redusere matrisen enten til en diagonal form, $\text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n)$, eller tridiagonal form. Likhetstransformasjonen er gitt ved,

$$\mathbf{B} = \mathbf{S}^T \mathbf{A} \mathbf{S} \quad (11)$$

hvor \mathbf{B} er en likhetstransformasjon av matrisen \mathbf{A} . Det er viktig å merke seg at matrisen \mathbf{B} har de samme egenverdiene som \mathbf{A} , men beholder ikke de samme egenvektorene gjennom transformasjonen. Ligning (11) gir

$$\begin{aligned} b_{ii} &= a_{ii}, \quad i \neq k, l \\ b_{ik} &= a_{ik} \cos \theta - a_{il} \sin \theta, \quad i \neq k, l \\ b_{il} &= a_{il} \cos \theta + a_{ik} \sin \theta, \quad i \neq k, l \\ b_{kk} &= a_{kk} \cos^2 \theta - 2a_{kl} \cos \theta \sin \theta + a_{ll} \sin^2 \theta \\ b_{ll} &= a_{ll} \cos^2 \theta + 2a_{kl} \cos \theta \sin \theta + a_{kk} \sin^2 \theta \\ b_{kl} &= (a_{kk} - a_{ll}) \cos \theta \sin \theta + a_{kl}(\cos^2 \theta - \sin^2 \theta) \end{aligned}$$

Jacobis metode går ut å redusere normen av de ikke-diagonale elementene i matrisen \mathbf{A} gjennom et antall iterasjoner. Verdien av disse elementene reduseres til de er mindre enn en angitt terskelverdi (ideelt lik null),

$$\text{off}(\mathbf{A}) = \sqrt{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1, j \neq i}^n a_{ij}^2} > \epsilon \quad (12)$$

Ved å definere $t = \tan \theta = \frac{\sin \theta}{\cos \theta} = \frac{s}{c}$ og $\tau = \cot 2\theta = \frac{a_{ll} - a_{kk}}{2a_{kl}}$, kan vi definere vinkelen θ slik at de ikke-diagonale matriseelementene blir $a_{kl} \neq 0$ ved å bruke den trigonometriske identiteten $\cot 2\theta = \frac{1}{2}(\cot \theta - \tan \theta)$. Dette gir da

$$t^2 + 2\tau t - 1 = 0 \implies t = -\tau \pm \sqrt{1 + \tau^2} \quad (13)$$

og c og s kan beregnes ut ifra $c = \frac{1}{\sqrt{1+t^2}}$ og $s = ct$.

Ved å velge t til å være den minste av røttene, gir $|\theta| \leq \frac{\theta}{4}$ og det minimerer differansen mellom den opprinnelige matrisen \mathbf{A} og likhetmatrisen \mathbf{B} siden

$$\|\mathbf{B} - \mathbf{A}\|_F^2 = 4(1 - c) \sum_{i=1, i \neq k, l}^n (a_{ik}^2 + a_{il}^2) + \frac{2a_{kl}^2}{c^2}. \quad (14)$$

Derfor gjelder ligning (12).

Problem

(a)

I denne deloppgaven skal vi implementere Jacobis metode for å løse egenverdiligningen (8).

Vi skal også diskutere hvorfor ved det å velge t til å være den minste av røttene i ligning (13) gir minimal differanse mellom den opprinnelige matrisen A og likhetmatrisen B ved ligning (14). Vi skal derfor se på hvorfor dette leder til ligning (12) for Jacobis metode.

(b)

Her løser vi Schrödinger ligningen (4) numerisk ved å betrakte egensystemet (8). Dette blir gjort gjennom likhettransformasjoner ved bruk av Jacobis metode.

Vi undersøker hvor mange steg n trengs for å få de tre laveste egenverdiene med en presisjon på fire gjeldende siffer. Vi skal også se hvordan egenverdiene avhenger av ρ_{max} .

Videre sammenligner vi vår egendefinerte algoritme, som anvender Jacobis metode, med Armadillo funksjonen som løser egensystemer. Her skal vi blant annet se på tidsbruket for begge algoritmene.

(c)

I denne deloppgaven tar vi for oss to partikler i et harmonisk oscillator potensial som Coulomb-vekselvirker med hverandre. Vi løser derfor Schrödinger ligningen (10) numerisk ved å betrakte systemet som tridiagonalt. For å gjøre det, estimerer vi egenverdiene igjen ved bruk av Jacobis metode. Her er vi interessert i tilfellene der frekvensen $\omega_r = 0.01, 0.5, 1, 5$ for grunntilstanden med $l = 0$ for to-partikkel systemet. Vi sammenligner resultatene oppnådd mellom varierende frekvenser på oscillator potensialet.

(d)

Vi plotter bølgefunksjonen for to Coulomb-vekselvirkende partikler i et eksternt oscillator potensial som funksjon av den relative koordinaten og for forskjellige verdier av oscillator frekvensen ω_r . Her plotter vi bølgefunksjonen selv både med og uten Coulomb-interaksjon mellom partiklene. Vi er kun interessert i bølgefunksjonen for grunntilstanden med $l = 0$ og for de to første eksiterte tilstandene som er av samme symmetri. Vi utelater massesenter bevegelsen.

Resultater

(a)

Pseudokode for Jacobis algoritme:

```
function jacobimethod(n, A(n,n)) {
    epsilon = 1.0e-9;
    i = 0;
    while(max(a_ij^2) > epsilon && i < maximum number of iterations) {
        |a_kl| = max(|a_ij|) when (i != j);
        Store the indices k,l;
        Compute tau = ((a_ll - a_kk) / 2a_kl);
        Choose the lowest value t = -tau +/- sqrt(1+tau^2);
        Compute c = 1/sqrt(1+t^2);
        Compute s = tc;
        Compute the similarity transformation for (k,l), obtain the transformed matrix B=trans(←
            S)*A*S;
        i++;
    }
}
```

(b)

Tabell 1: Sammenligning mellom estimerte verdier for de tre minste egenverdiene ved bruk av Jacobis metode og Armadillos egenfunksjon, dette for n gitterpunkter. Tabellen viser også tidsbruket for hver algoritme, og oversikt over antall likhetstransformasjoner ved Jacobis metode for n gitterpunkter. Her er $\rho_{max} = 7$.

n	Jacobis metode					Armadillos egenløser			
	Tid [s]	Antall iterasjoner	λ_0	λ_1	λ_2	Tid [s]	λ_0	λ_1	λ_2
50	0.994	2953	2.994	6.969	10.93	0.002	2.994	6.969	10.93
100	15.557	12686	2.998	6.992	10.98	0.006	2.998	6.992	10.98
200	252.261	53154	2.999	6.998	10.99	0.049	2.999	6.998	10.99
400	3959.689	219472	2.999	6.999	10.99	0.220	2.999	6.999	10.99

Tabell 2: Sammenligning mellom estimerte verdier for det relative avviket $\log_{10}(\epsilon_i)$ av de tre minste egenverdiene ved bruk av Jacobis metode og Armadillos funksjon for egenproblemer, dette for n gitterpunkter. Tabellen viser også tidsbruket for hver algoritme. Her er $\rho_{max} = 7$.

$\log_{10}(\epsilon_i)$	Jacobis metode			Armadillos egenløser		
n	λ_0	λ_1	λ_2	λ_0	λ_1	λ_2
50	-2.689	-2.357	-2.165	-2.689	-2.357	-2.165
100	-3.292	-2.961	-2.769	-3.292	-2.961	-2.769
200	-3.894	-3.563	-3.372	-3.894	-3.563	-3.372
400	-4.496	-4.165	-3.974	-4.496	-4.165	-3.974

(c)

(d)

Tabell 3: Estimat av de tre minste egenverdiene ved Jacobis metode for to Coulomb-vekselvirkende partikler i et eksternt oscillator potensial med "frekvens" ω_r . Her er $n = 200$ og $\rho_{max} = 7$.

ω_r	λ_0	λ_1	λ_2
0.01	0.5162	1.234	2.317
0.5	2.230	4.134	6.073
1	4.057	7.908	11.82
5	17.44	37.02	56.74

Diskusjon

(a)

I denne deloppgaven har vi implementert Jacobis metode for å løse egenverdiligningen (8). Dette gjorde vi ved å følge pseudokoden gitt i resultater. I funksjonen begynner vi med å velge en grenseverdi for antall likhetstransformasjoner (antall iterasjoner). For hver iterasjon undersøker vi om betingelsen (12) er oppfylt ved å oppdatere de ikke-diagonal elementene i matrisen. Siden denne betingelsen er en veldig tidskrevende prosess, undersøker vi heller betingelsen $\max_{i \neq j}(a_{ij}^2) > \epsilon$ for hver iterasjon. Så ved å lokalisere de maksimale ikke-diagonal elementene, kan vi beregne $\tau \rightarrow t \rightarrow c \rightarrow s$. Med det kan vi transformere matrisen vår gjennom $\mathbf{B} = \mathbf{S}(k, l, \theta)^T \mathbf{A} \mathbf{S}(k, l, \theta)$. Denne prosedyren gjentas fram til $\max_{i \neq j}(a_{ij}^2) \leq \epsilon$.

Ved å velge t til å være den minste av røttene gir oss minimal differanse mellom likhetmatrisen \mathbf{B} og ligningmatrisen \mathbf{A} . Om vi betrakter $\tau > 0$, gir det oss minimal rot ved å velge $t = -\tau + \sqrt{1 + \tau^2}$. Da for ekstreme verdier $\tau \gg 1$ gir det oss $t \approx 0$, som resulterer i $c \approx 1$ og dermed vil differansen bli minimal $\|\mathbf{B} - \mathbf{A}\|_F^2 \approx 2a_{kl}^2$. Ved derimot å velge roten av t til å bli maksimal for $\tau > 0$, og betrakter igjen $\tau \gg 1$, vil det resultere i $t \ll -1$. Dette medføre $c \approx 0$, noe som blåser opp differansen mellom \mathbf{A} og \mathbf{B} for hver iterasjon og medføre divergens av metoden. Dette er symmetrisk for tilfellet $\tau < 0$.

(b)

Vi løser ligning (9) ved Jacobis iterative metode, og oppnår tabell 1 og tabell 2. I tre dimensjoner er de tre første egenverdiene for $l = 0$ gitt ved $\lambda_0 = 3$, $\lambda_1 = 7$ og $\lambda_2 = 11$. Vi ser fra tabell 2 at for $n = 200$ gitterpunkter gir oss tilstrekkelig presisjon på litt under fire gjeldende siffer. Derfor skal det være unødvendig å kjøre for $n > 200$, også med tanke på hvor tidskrevende Jacobis algoritme er i forhold til egenfunksjonen i Armadillo. Tidsbruket av Jacobis metode kommer av at algoritmen bruker $3n^2 - 5n^2$ flyttallsoperasjoner på rotasjoner og hver rotasjon krever $4n$ flyttallsoperasjoner, noe som gir totalt antall flyttallsoperasjoner $12n^3 - 20n^3$ for å redusere de ikke-diagonale matriseelementene til terskelverdien. En annen faktor for tidsbruket er at etter hver likhetstransformasjon, så kan ikke-diagonale matriseelementer (som tidligere var satt til null) endre verdi til forskjellig fra null etter en ny transformasjon. Dette påvirker da konvergens av Jacobis metode.

Her påvirker ρ_{max} estimatet av egenverdiene. Ved å sette $\rho_{min} = 0$ og $\rho_{max} = 7$, plasserer vi uendelig potensial for $\rho = 0$ og $\rho = 7$ i den eksterne oscillatoren. Dette medfører grensebetingelser for bølgefunksjonen $u(0) = u(7) = 0$. Ved å øke ρ_{max} , vil egenverdiene (energiene) minke. Dette siden bølgefunksjonen er null i endepunktene, så minker dens frekvens og blir dermed mindre intensiv.

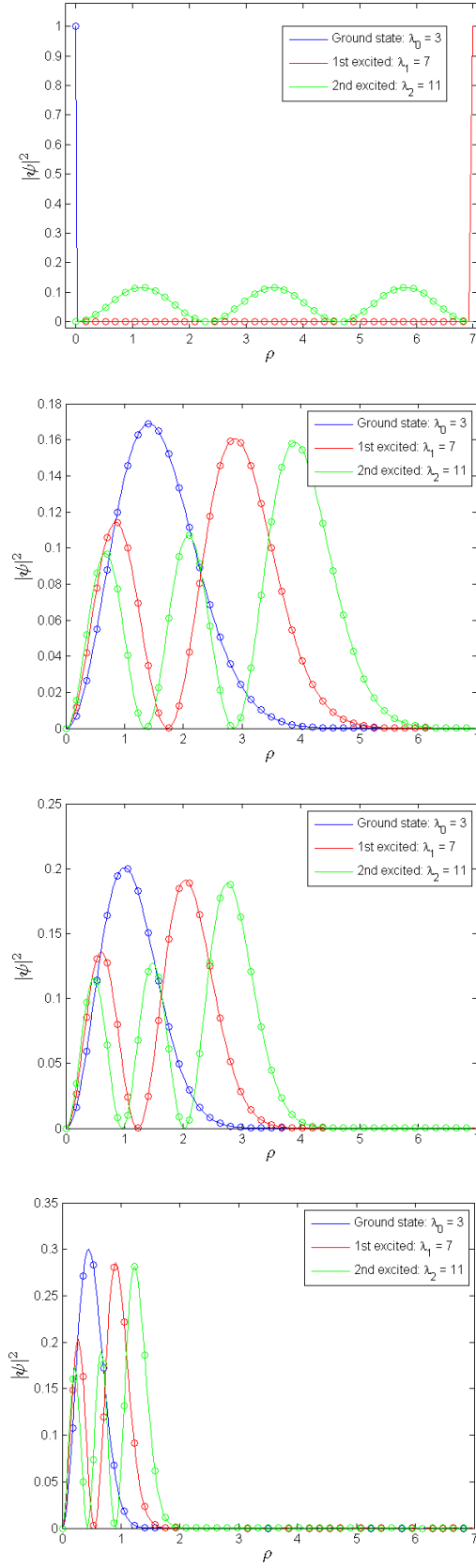
Fra tabell 1 finner vi at antall likhetstransformasjoner (iterasjoner) går som $n^2 + O(n)$, hvor dimensjonen til matrisene vi bruker er $n \times n$.

(c)

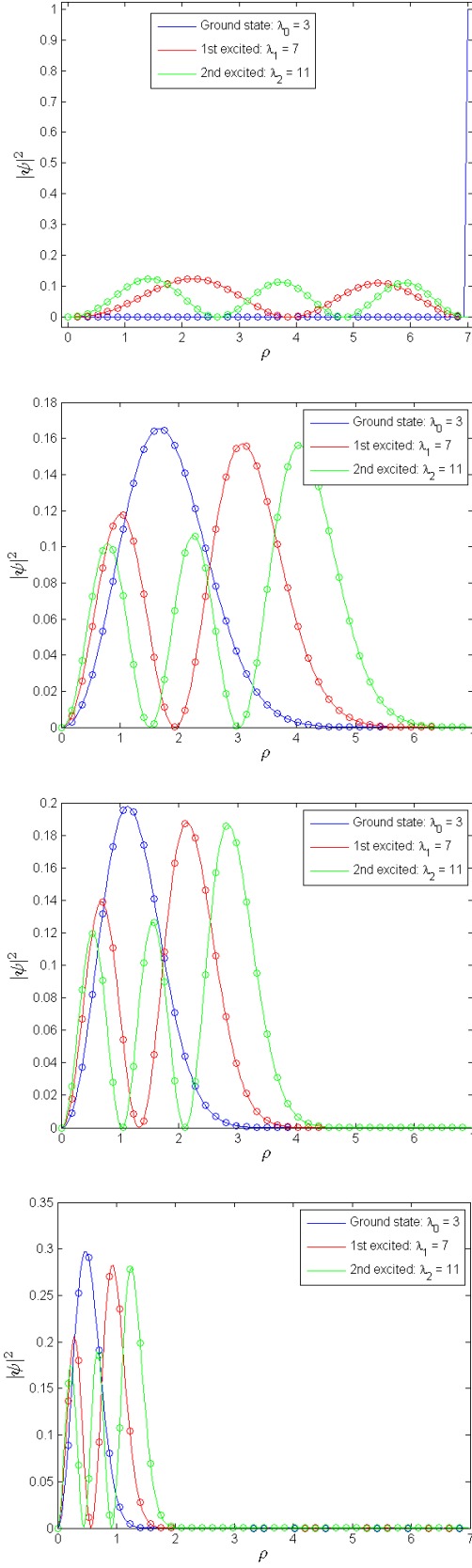
Fra tabell 3 ser vi at egenverdiene λ_i øker med økende frekvenser ω_r . Siden parameteren ω_r reflekterer styrken på oscillator potensialet, ser vi at for minkende ω_r så blir korrelasjonen mellom partiklene større. For økende ω_r vil oscillator potensialet blir større, noe som da gir større λ_0 (grunntilstandenergi) for partikkelsystemet.

(d)

Konklusjon



Figur 1: .



Figur 2: .