

# Sprawozdanie – Laboratorium nr 4

## Diagonalizacja macierzy operatora energii w 2D

Mikołaj Marchewa, 1 kwietnia 2020

### 1. Wstęp teoretyczny

W trakcie trwania zajęć laboratoryjnych wykorzystaliśmy metodę diagonalizacji macierzy. Możliwa jest ona tylko dla macierzy kwadratowej i polega na znalezieniu takiego rozkładu macierzy  $A$ , który będzie on równy iloczynowi macierzy  $P$ ,  $\Delta$ ,  $P^{-1}$ , gdzie  $P$  jest macierzą przejścia, zaś  $\Delta$  jest macierzą diagonalną. Kolejne współczynniki na głównej przekątnej  $\Delta$  są równe kolejnym wartościom własnym macierzy  $A$ . Kolumny macierzy  $P$  to wektory własne macierzy  $A$ .

W programie wykorzystaliśmy funkcje **tred2** oraz **tlqi** z biblioteki *Numerical Recipes*. Pierwsza z nich wykorzystując metodę Householder'a, która pozwala na redukcję macierzy do postaci trójdagonalnej  $T$ :

$$T = P^{-1} \cdot H \cdot P \quad (1)$$

Metoda Householder'a do swojego działania wykorzystuje rozkład  $QR$ :

$$A = Q \cdot R, \quad (2)$$

gdzie:

$Q$  – macierz ortogonalna ( $Q^T \cdot Q = I$ ),

$R$  – macierz trójkątna górna.

Procedura **tlqi** korzystając z algorytmu QL, pozwala na rozwiązanie równania własnego dla rzeczywistej symetrycznej macierzy trójdagonalnej ( $T$ ):

$$T \cdot \vec{y}_k = E_k \cdot \vec{y}_k \quad (3)$$

i zwraca wartości własne  $E_k$  oraz wektory własne macierzy  $T$ .

Wszystkie powyższe narzędzia były niezbędne do rozwiązania niezależnego od czasu równania Schrödingera, będącego głównym problemem tych zajęć. Opracowane przez fizyka Erwina Schrödingera równanie jest podstawowym równaniem mechaniki kwantowej i odgrywa analogiczną do roli zasad dynamiki Newtona w mechanice klasycznej.

Gdy układ odizolowany jest od otoczenia jego energia całkowita nie zmienia się w czasie. Wówczas operator Hamiltona ( $H$ ) nie jest już zależny od czasu, a równanie Schrödingera zapiszemy w następującej postaci macierzowej:

$$H \cdot \psi(r) = E \cdot \psi(r). \quad (4)$$

Operator energii (Hamiltonian) w dwóch wymiarach przyjął następującą formę:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right). \quad (5)$$

Do rozwiązania potrzebne więc będzie wprowadzenie siatki węzłów:  $x_i = \Delta \cdot i, i = 1, 2, \dots, n_x$  oraz  $y_j = \Delta \cdot j, j = 1, 2, \dots, n_y$ . Następnie dyskretyzując równanie własne na siatce zastępujemy drugie pochodne ilorazami różnicowymi:

$$\psi(x, y) = \psi(x_i, y_j) = \psi_{i,j}, \quad (6)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left( \frac{\psi_{i+1,j} - 2\psi_{i,j} + \psi_{i-1,j}}{\Delta^2} + \frac{\psi_{i,j+1} - 2\psi_{i,j} + \psi_{i,j-1}}{\Delta^2} \right) = E \cdot \psi_{i,j}. \quad (7)$$

Po reindeksacji ( $l = j + (i - 1) \cdot n_y$ ) oraz wyprowadzeniu współczynnika  $t = -\frac{\hbar^2}{2m^*}$ , równanie przyjmuje prostszą postać:

$$H \cdot \psi = t(\psi_{l-n_y} + \psi_{l-1} - 4\psi_l + \psi_{l+1} + \psi_{l+n_y}). \quad (8)$$

Zapisując operator H jako macierz kwadratową  $n \times n$ , wówczas elementy niezerowe mają postać:

$$H_{l,l \pm n_y} = H_{l,l \pm 1} = t, \quad H_{l,l} = -4t. \quad (9)$$

## 2. Zadanie do wykonania

### 2.1 Opis problemu

Głównym celem tych zajęć laboratoryjnych było znalezienie rozwiązania niezależnego od czasu równania Schrödingera (4).

Na początku wypełniliśmy macierz kwadratową o wymiarze  $n \times n$  operatora energii ( $H$ ), wiedząc dzięki równaniu (9), że jest to macierz pięcioprzekątnikowa. Uzupełniona została również jednostkowa macierz  $Y$  wymiaru  $n \times n$ . Następnie przy użyciu procedury **tred2** zredukowaliśmy macierz pięcioprzekątnikowa do postaci trójdagonalnej (1).

Kolejnym krokiem było wykorzystanie wektora  $d$  – zapisującego elementy diagonalne macierzy trójdagonalnej  $T$ , oraz wektora  $e$  – zapisującego elementy pozadiagonalne macierzy  $T$ , powstałych w wyniku użycia funkcji **tred2**, do rozwiązania wektora własnego macierzy  $T$  – procedura **tqli**.

Następnie obliczyliśmy wektory własne operatora energii  $H$ , wiedząc że:

$$T = P^{-1} \cdot A \cdot P \quad (10)$$

$$T \cdot y_k = \lambda \cdot y_k \quad (11)$$

$$P^{-1} \cdot A \cdot P \cdot y_k = \lambda \cdot y_k \quad | \cdot P \quad (12)$$

$$A \cdot (P \cdot y_k) = \lambda \cdot (P \cdot y_k) \quad (13)$$

$$A \cdot x_k = \lambda \cdot x_k \quad (14)$$

$$x_k = P \cdot y_k \quad (15)$$

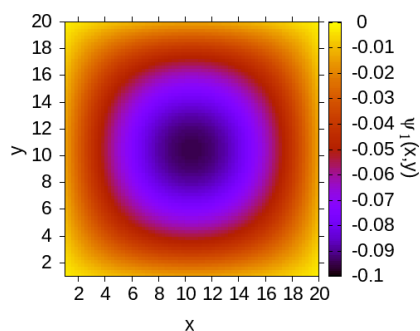
Po powyższych przekształceniach uzyskujemy wzór na obliczenie macierzy wektorów własnych:

$$X = P \cdot Y. \quad (16)$$

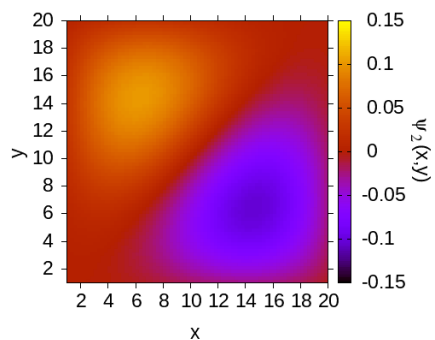
Na końcu posortowaliśmy energie, a wyniki zapisaliśmy do pliku i stworzyliśmy na ich podstawie wykresy przy użyciu programu *Gnuplot*.

## 2.2 Wyniki

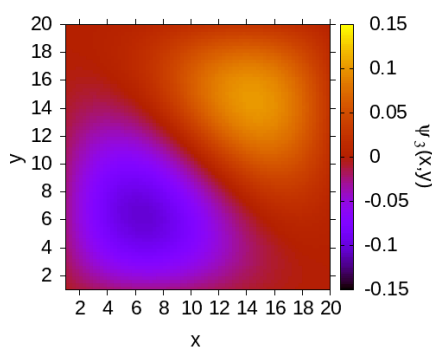
Wyniki na poniższych wykresach przedstawiają uzyskane podczas diagonalizacji wektory własne macierzy  $H$  – funkcje falowe operatora energii – dla wybranych przez nas dziesięciu najniższych energii. Rezultaty poukładane są w sekwencji rosnących wartości własnych (energii poszczególnych stanów).



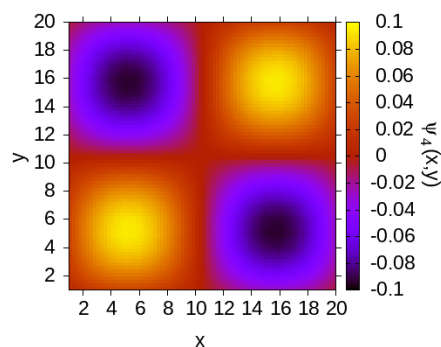
1)  $\psi_1(x, y)$ ,  $E_1 = 0,000938213$



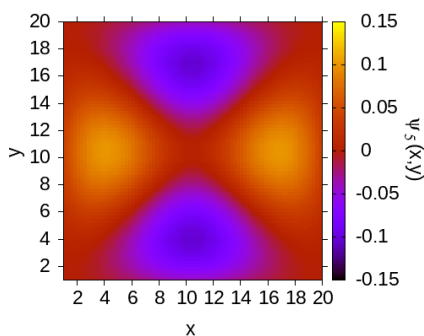
2)  $\psi_2(x, y)$ ,  $E_2 = 0,00233504$



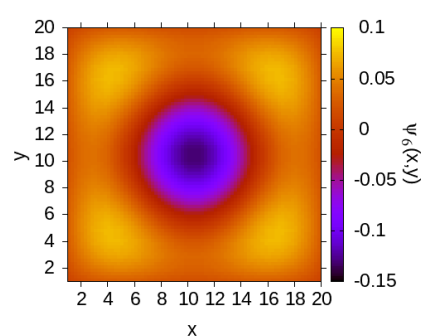
3)  $\psi_3(x, y)$ ,  $E_3 = 0,00233512$



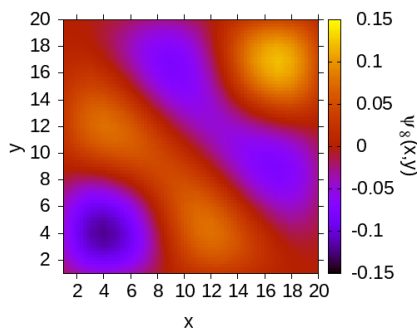
4)  $\psi_4(x, y)$ ,  $E_4 = 0,00373193$



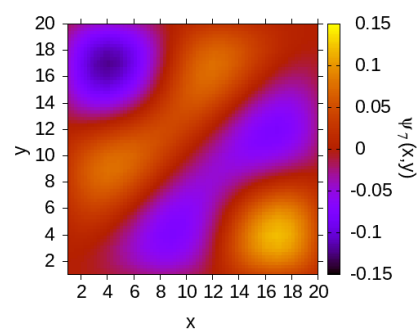
5)  $\psi_5(x, y)$ ,  $E_5 = 0,00462838$



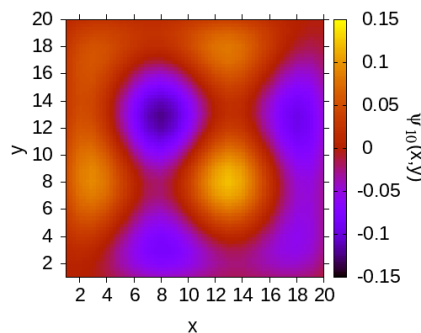
6)  $\psi_6(x, y)$ ,  $E_6 = 0,00462851$



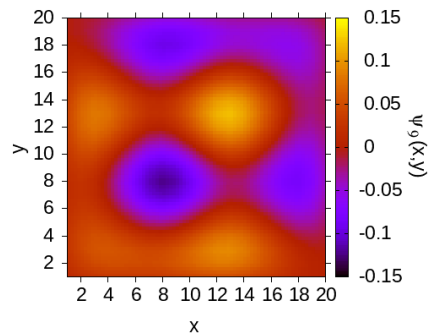
7)  $\psi_7(x, y)$ ,  $E_7 = 0,00602518$



8)  $\psi_8(x, y)$ ,  $E_8 = 0,00602525$



9)  $\psi_9(x, y)$ ,  $E_9 = 0,00776708$



10)  $\psi_{10}(x, y)$ ,  $E_{10} = 0,00776711$

Niektóre z wykresów są bardzo zbliżone wizualnie i wyglądają na swoje lustrzane odbicia. W tych przypadkach energie są marginalnie różne od siebie. Taki efekt możemy obserwować dla par 2) i 3) lub 7) i 8) lub 9) i 10).

### 3. Wnioski

Diagonalizacja macierzy jest niezwykle wszechstronnym narzędziem. Tym razem pozwoliła nam na uzyskanie rozwiązania niezależnego od czasu równania Schrödingera.

Zastosowane procedury **fred2** oraz **tgli** z biblioteki *Numerical Recipes*, w oparciu o metodę redukcji Householdera oraz algorytm QL w stosunkowo wydajny sposób zwróciły poszukiwane wartości i wektory własne. Wektory te są znormalizowane przez co jedynymi możliwymi stałymi mnożenia są 1 i -1. Stąd też w wynikach widoczny jest efekt „odbicia” poszczególnych wykresów. Niektóre wektory mogą też być zamienione kolejnością (o ile odpowiadają tym samym energiom).