

# 矩阵对角化

何翼成\*

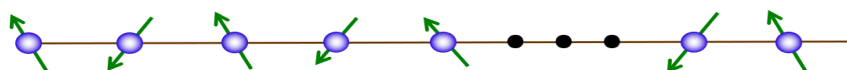
May 2, 2022

## Project 1

### 一 题目分析



作业1. 对角化量子多体系统的哈密顿量 (物理学基本常数均取1)



$$H = \sum_{i=1}^{L-1} -\hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_{i+1}^z - \hat{\sigma}_L^z \hat{\sigma}_1^z + h \sum_{i=1}^L \hat{\sigma}_i^x$$

$$\hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_j^z = \underset{1}{1} \otimes \underset{2}{1} \cdots \underset{i}{\sigma^z} \otimes \cdots \underset{j}{\sigma^z} \otimes \cdots \underset{L}{1} \quad \hat{\sigma}_i^x = \underset{1}{1} \otimes \underset{2}{1} \cdots \underset{i}{\sigma^x} \otimes \cdots \otimes \underset{L}{1}$$

对于参数  $L=10$ , 周期边界条件,  $h=0.5, h=1.0, h=2.0$ , 分别:

1. 对角化哈密顿量矩阵  $H$ , 求得基态能量, 第一激发态能量

2. 计算基态上  $\langle \sigma_1^x \rangle$

3.  $t=0$  时系统处于  $h=0.5$  的基态,  $t>0$  时系统哈密顿量变为  $h=3.0$ , 求在此哈密顿量下的时间演化, 计算  $\langle \sigma_1^x(t) \rangle, 0 < t < 10$

1

Figure 1: 题目总览

### 二 代码展示

```
1 clear;clc;
2 L=10;
3 h=[1/2,1,2];
4
```

\*学号:520072910043;  
邮箱地址: heyicheng@sjtu. edu. cn

```

5 %计算不同h下的基态能量和第一激发态
6 he1e2=zeros(length(h),3);
7 for n=1:length(h)
8     hn=h(n);
9     H=G(hn,L);
10    En=unique(eig(H));
11    disp("h="+hn+"时, 基态能量为"+En(1,1)+" ,第一激发态为"+En(2,1))
12    he1e2(n,1)=hn;he1e2(n,2)=En(1,1);he1e2(n,3)=En(2,1);
13 end
14
15 %计算基态的 $\sigma_x$ 的期望值
16 disp("-----")
17 sigma1x_s=zeros(1,length(h));
18 for n=1:length(h)
19     hn=h(n);
20     H=G(hn,L);
21     [V,D]=eig(H);%V是特征值的对角矩阵, D使得H=DVD-1
22     %易知D是特征向量(列向量)组成的矩阵
23     psi0=V(:,1);
24     sigma1x=psi0'*Sigmax(1,L)*psi0;
25     sigma1x_s(n)=sigma1x;
26     disp("h="+hn+"时,  $\sigma_x$ 的期望值是"+sigma1x)
27 end
28
29 %t=0时系统处在h=0.5的基态, t>0时h=3, 求哈密顿量的时间演化。
30 disp("-----")
31 tspan=0:0.1:10;%时间范围
32 h=0.5;H=G(h,L);[~,D]=eig(H);psi0=V(:,1);%计算初态波函数
33 h=3;H=G(h,L);
34 sigma1x_t=zeros(1,length(tspan));
35 for n=1:length(tspan)
36     t=tspan(n);
37     psi=expm(-1i*H*t)*psi0;
38     sigma1x=conj(psi.').*Sigmax(1,L)*psi;
39     sigma1x_t(n)=sigma1x;
40     clc;
41     disp("已完成计算进度"+n/length(tspan)*100+"%")
42 end
43 plot(tspan,sigma1x_t,'k')
44 xlabel("Time")
45 ylabel("<\sigma_{1}^x>")
46
47 %%
48 %定义H的生成函数
49 function H=G(h,L)
50     H=0;
51     for i=1:L-1
52         H=H-Sigmaz(i,i+1,L)+h*Sigmax(i,L);
53     end

```

```

54     H=H-Sigmaz(L,1,L)+h*Sigmax(L,L);
55 end
56
57 %生成单一的 $\hat{\sigma}_i^z$   $\hat{\sigma}_j^z$ 元素，未求和
58 function sigmaz=Sigmaz(i,j,L)
59     sigmaZ=[1,0;0,-1];%定义元矩阵
60     s=1;
61     for n=1:L
62         if n==i || n==j
63             s=kron(s,sigmaZ);
64         else
65             s=kron(s,eye(2));
66         end
67     end
68     sigmaz=s;
69 end
70
71 %生成单一的 $\hat{\sigma}_i^x$ 元素，未求和
72 function sigmax=Sigmax(i,L)
73     s=1;sigmaX=[0,1;1,0];%定义元矩阵
74     for n=1:L
75         if n==i
76             s=kron(s,sigmaX);
77         else
78             s=kron(s,eye(2));
79         end
80     end
81     sigmax=s;
82 end

```

### 三 结果分析与结论

通过代入不同的初始量  $h$ ，可以得到不同的结果。

#### 3.1 基态能量与第一激发态能量

$h=0.5$  时，基态能量为-10.6356，第一激发态为-10.6353  
 $h=1$  时，基态能量为-12.7849，第一激发态为-12.6275  
 $h=2$  时，基态能量为-21.2712，第一激发态为-19.2706

#### 3.2 $\langle \sigma_1^x \rangle$

$h=0.5$  时， $\sigma_1^x$  的期望值是-0.25897  
 $h=1$  时， $\sigma_1^x$  的期望值是-0.63925  
 $h=2$  时， $\sigma_1^x$  的期望值是-0.93408

### 3.3 哈密顿量的时间演化

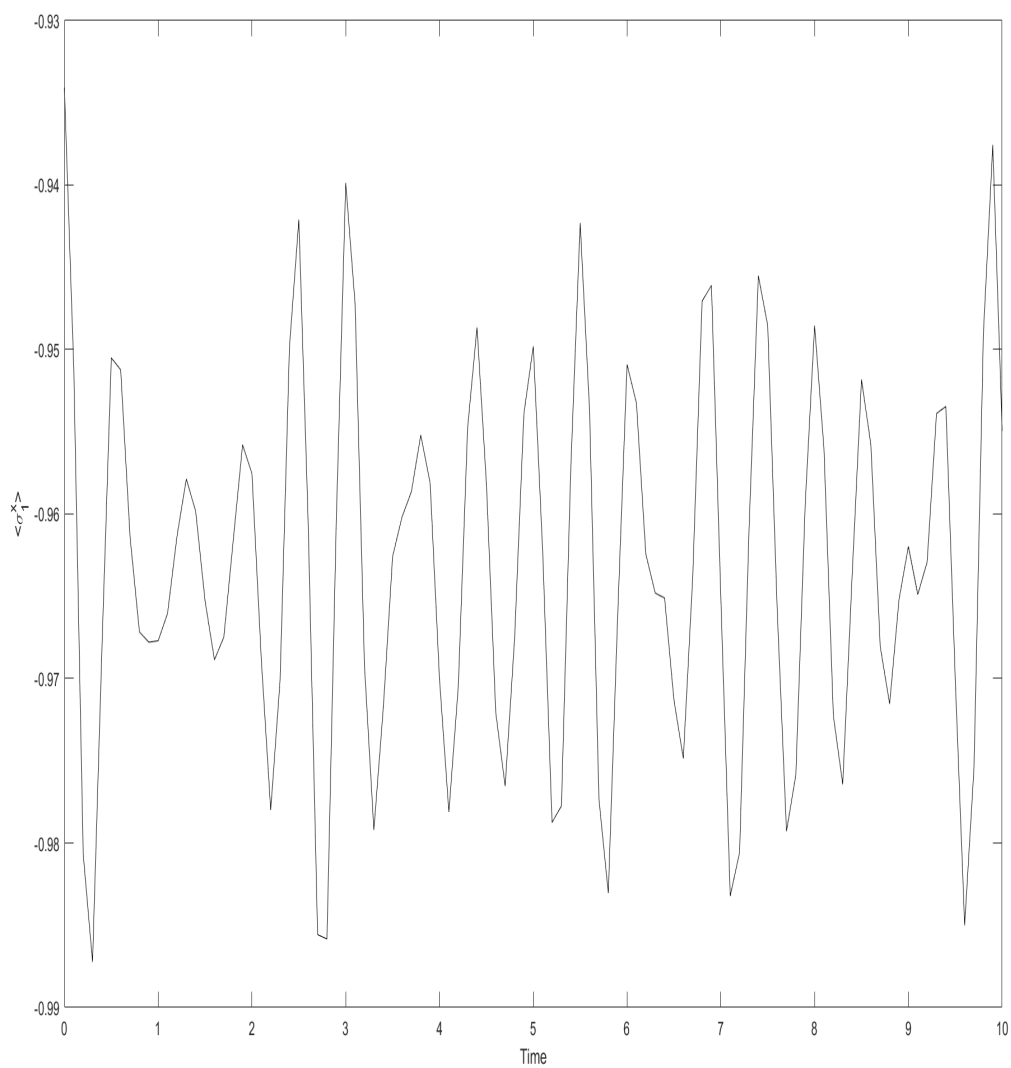


Figure 2: 在  $[0,10]$  时间下的哈密顿量演化情况

## Project2

### 四 解答

#### 4.1 1

$$\begin{aligned}
 H\psi &= \lambda\psi \\
 |H - \lambda I| &= 0 \\
 \implies \lambda &= \pm\sqrt{a^2 + cc^*}
 \end{aligned} \tag{1}$$

代入不同的 $\lambda$ , 即可求得不同的特征向量

$$\begin{aligned}
 \lambda_1 &= \sqrt{a^2 + cc^*} \implies \psi_1 = [c, \sqrt{a^2 + cc^*} - a] \\
 \lambda_2 &= -\sqrt{a^2 + cc^*} \implies \psi_2 = [-c, \sqrt{a^2 + cc^*} + a]
 \end{aligned}$$

#### 4.2 2

由矩阵对角化的性质可知, $D$  即为对角元素为特征值的矩阵, 而  $S$  为列向量为特征向量的矩阵。

可知 $D = \text{diag}\{\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \dots\}$

而 $S = [v_1, v_2, v_3, \dots], S^{-1} = [v_1, v_2, v_3, \dots]^*$ , 其中 $v_i$ 是对应 $\lambda_i$ 的特征向量

由特征向量的正交不难知道其满足么正矩阵的定义。

所以在本题中, 若是代入第一问求得的值, 可以得到:

$$\begin{aligned}
 D &= \begin{bmatrix} \sqrt{a^2 + cc^*} & 0 \\ 0 & -\sqrt{a^2 + cc^*} \end{bmatrix} \\
 S &= \begin{bmatrix} c/A & -c/B \\ (\sqrt{a^2 + cc^*} - a)/A & (\sqrt{a^2 + cc^*} + a)/B \end{bmatrix},
 \end{aligned} \tag{2}$$

$$A = \sqrt{cc^* + (\sqrt{a^2 + cc^*} - a)^2}, B = \sqrt{cc^* + (\sqrt{a^2 + cc^*} + a)^2},$$

$A, B$  是为了化为么正矩阵而添加的系数

## 4.3 3

已知  $H = S^{-1}DS$

$$e^{iHt} = e^{it(S^{-1}DS)} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (it)^n (S^{-1}DS)^n$$

而一般意义上,  $(S^{-1}DS) * (S^{-1}DS) = S^{-1}D^2S$ , 所以  $(S^{-1}DS)^n = S^{-1}D^nS$

$$\begin{aligned} \text{所以 } \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (it)^n (S^{-1}DS)^n &= S^{-1} \left[ \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (it)^n D^n \right] S \\ &= S^{-1} e^{iDt} S \end{aligned}$$

同样的, 对于  $e^{iDt}$  而言, 即有

$$e^{iDt} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (it)^n D^n, \text{ 而对角矩阵 } D = \text{diag}\{\lambda_1, \lambda_2\}$$

对角矩阵拥有性质  $D^n = \text{diag}\{\lambda_1^n, \lambda_2^n\}$

$$\begin{aligned} \text{所以有 } \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (it)^n D^n &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (it)^n \text{diag}\{\lambda_1^n, \lambda_2^n\} \\ &= \text{diag}\left\{ \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (it)^n \lambda_1^n, \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (it)^n \lambda_2^n \right\} \\ &= \text{diag}\{e^{i\lambda_1 t}, e^{i\lambda_2 t}\} \end{aligned} \tag{3}$$

综上所述,,  $e^{iHt} = [v_1, v_2] \text{diag}\{e^{i\lambda_1 t}, e^{i\lambda_2 t}\} [v_1, v_2]^T$

$$\begin{aligned} &= e^{i\lambda_1 t} v_1 v_1^T + e^{i\lambda_2 t} v_2 v_2^T \\ &= e^{i\lambda_1 t} \begin{bmatrix} cc^* & c\sqrt{a^2 + cc^*} - ac \\ c\sqrt{a^2 + cc^*} - ac & 2a^2 + cc^* - 2a\sqrt{a^2 + cc^*} \end{bmatrix} / (cc^* + 2a^2 + cc^* - 2a\sqrt{a^2 + cc^*}) \\ &+ e^{i\lambda_2 t} \begin{bmatrix} cc^* & -c\sqrt{a^2 + cc^*} - ac \\ -c\sqrt{a^2 + cc^*} - ac & 2a^2 + cc^* + 2a\sqrt{a^2 + cc^*} \end{bmatrix} / (cc^* + 2a^2 + cc^* + 2a\sqrt{a^2 + cc^*}) \end{aligned}$$