矩阵对角化

何翼成 *

May 18, 2022

Project 1

一　题目分析

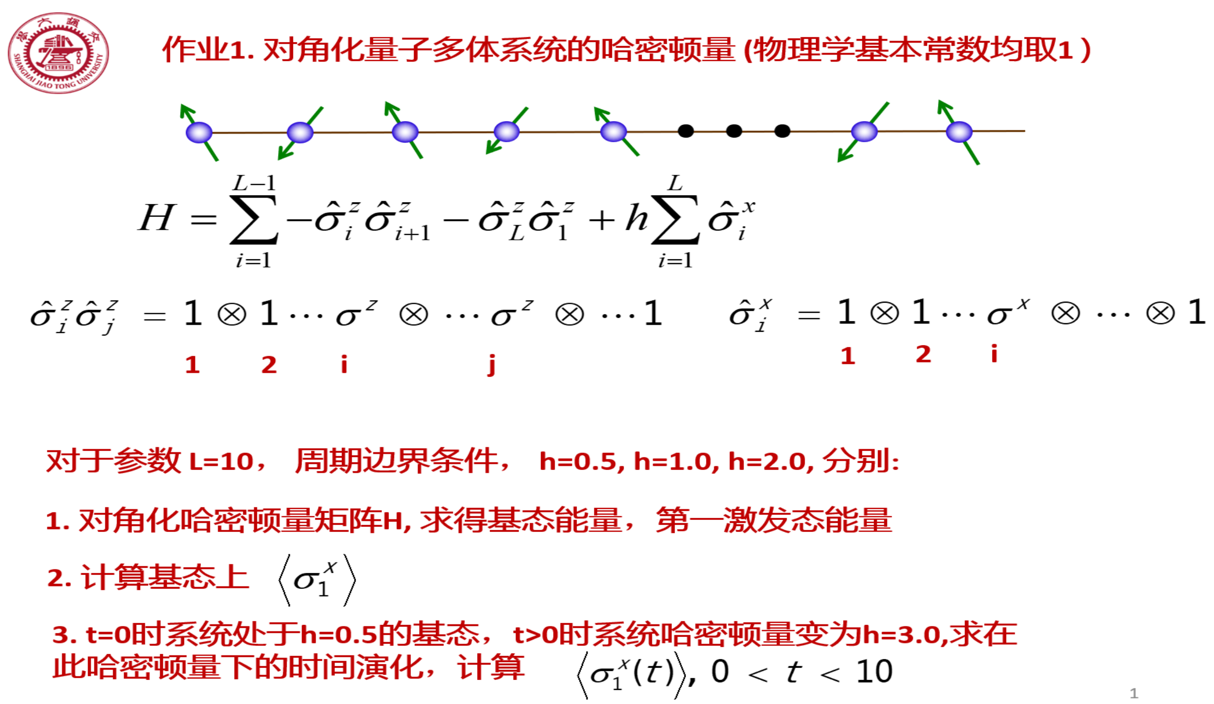

Figure 1: 题目总览

二　代码展示

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

```

---

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

```matlab
%计算不同h下的基态能量和第一激发态
he1e2=zeros(length(h),3);
for n=1:length(h)
    hn=h(n);
    H=G(hn,L);
    En=unique(eig(H));
    disp("h="+hn+"时，基态能量为"+En(1,1)+",第一激发态为"+En(2,1))
    he1e2(n,1)=hn;he1e2(n,2)=En(1,1);he1e2(n,3)=En(2,1);
end

%计算基态的sigma_{1}^x的期望值
disp("-------------------------------------------------")
sigma1x_s=zeros(1,length(h));
for n=1:length(h)
    hn=h(n);
    H=G(hn,L);
    [V,D]=eig(H);%V是特征值的对角矩阵，D使得H=DVD^(-1)
                 %易知D是特征向量(列向量)组成的矩阵
    psi0=V(:,1);
    sigma1x=psi0'*Sigmax(1,L)*psi0;
    sigma1x_s(n)=sigma1x;
    disp("h="+hn+"时，sigma_{1}^2的期望值是"+sigma1x)
end

%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。
disp("-------------------------------------------------")
tspan=0:0.1:10;%时间范围
h=0.5;H=G(h,L);[~,D]=eig(H);psi0=V(:,1);%计算初态波函数
h=3;H=G(h,L);
sigma1x_t=zeros(1,length(tspan));
for n=1:length(tspan)
    t=tspan(n);
    psi=expm(-1i*H*t)*psi0;
    sigma1x=conj(psi.')*Sigmax(1,L)*psi;
    sigma1x_t(n)=sigma1x;
    clc;
    disp("已完成计算进度"+n/length(tspan)*100+"%")
end
plot(tspan,sigma1x_t,'k')
xlabel("Time")
ylabel("<\sigma_{1}^x>")

%%
%定义H的生成函数
function H=G(h,L)
    H=0;
    for i=1:L-1
        H=H-Sigmaz(i,i+1,L)+h*Sigmax(i,L);
    end
```

```
    H=H-Sigmaz(L,1,L)+h*Sigmax(L,L);
end

%生成单一的\hat{sigma_{i}}^z \hat{sigma_{j}}^z元素，未求和
function sigmaz=Sigmaz(i,j,L)
    sigmaZ=[1,0;0,-1];%定义元矩阵
    s=1;
    for n=1:L
        if n==i||n==j
            s=kron(s,sigmaZ);
        else
            s=kron(s,eye(2));
        end
    end
    sigmaz=s;
end

%生成单一的\hat{sigma_{i}}^x元素，未求和
function sigmax=Sigmax(i,L)
    s=1;sigmaX=[0,1;1,0];%定义元矩阵
    for n=1:L
        if n==i
            s=kron(s,sigmaX);
        else
            s=kron(s,eye(2));
        end
    end
    sigmax=s;
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 <sigma1x>

h=0.5 时，σ_1^x 的期望值是-0.25897
h=1 时，σ_1^x 的期望值是-0.63925
h=2 时，σ_1^x 的期望值是-0.93408

3.3 哈密顿量的时间演化

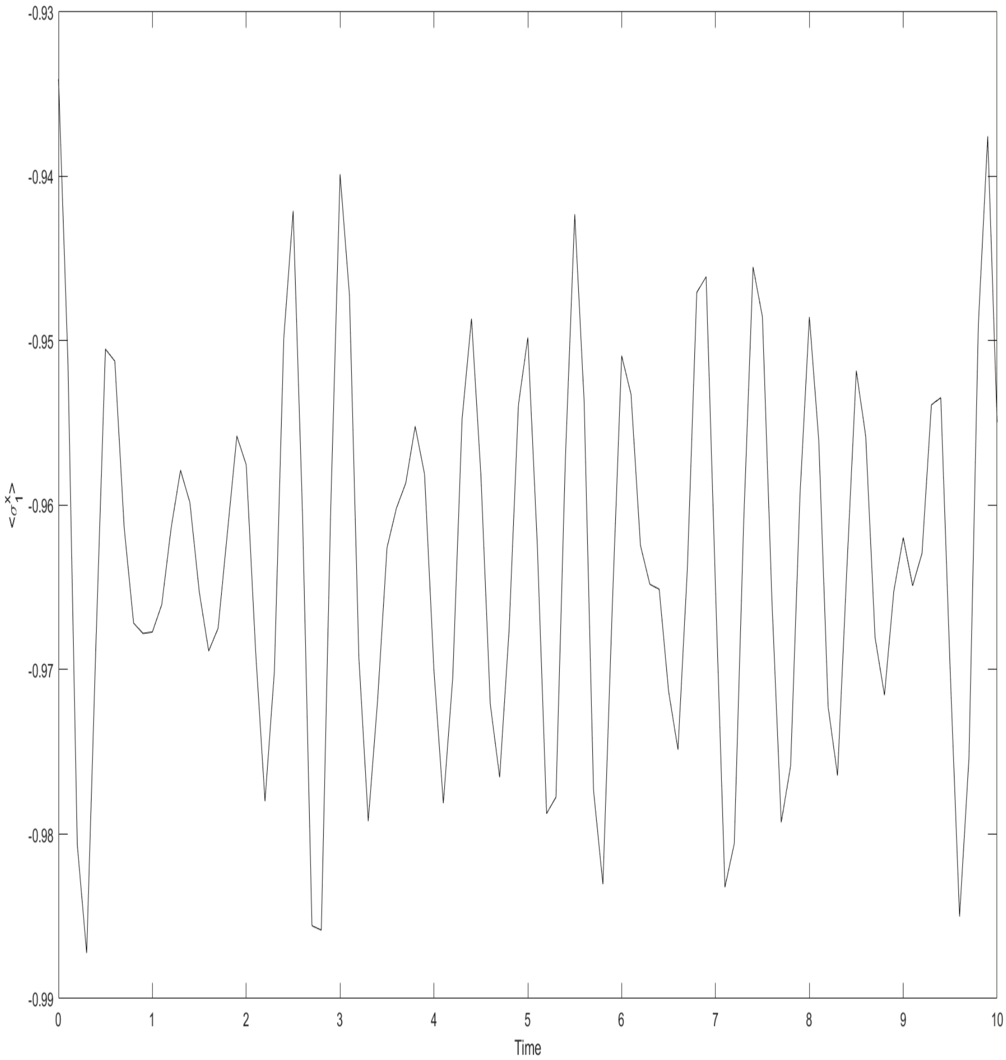

Figure 2: 在 [0,10] 时间下的哈密顿量演化情况

Project2

四 解答

4.1 1

$$
\begin{aligned}
&H\psi = \lambda\psi \\
&|H-\lambda I| = 0 \\
&\Longrightarrow \lambda = \pm\sqrt{a^2+cc^*} \\
&\text{代入不同的}\lambda\text{, 即可求得不同的特征向量} \\
&\lambda_1 = \sqrt{a^2+cc^*} \Longrightarrow \psi_1 = [c, \sqrt{a^2+cc^*}-a] \\
&\lambda_2 = -\sqrt{a^2+cc^*} \Longrightarrow \psi_2 = [-c, \sqrt{a^2+cc^*}+a]
\end{aligned} \tag{1}
$$

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$D = diag\{\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \ddots\}$

而$S = [v_1, v_2, v_3, \ddots], S^{-1} = [v_1, v_2, v_3, \ddots]^*$,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幺正矩阵的定义。
所以在本题中，若是代入第一问求得的值，可以得到:

$$
\begin{aligned}
&D = \begin{bmatrix} \sqrt{a^2+cc^*} & 0 \\ 0 & -\sqrt{a^2+cc^*} \end{bmatrix} \\
&S = \begin{bmatrix} c/A & -c/B \\ (\sqrt{a^2+cc^*}-a)/A & (\sqrt{a^2+cc^*}+a)/B \end{bmatrix}, \\
&A = \sqrt{cc^* + (\sqrt{a^2+cc^*}-a))^2}, B = \sqrt{cc^* + (\sqrt{a^2+cc^*}+a)^2}, \\
&\text{A,B 是为了化为幺正矩阵而添加的系数}
\end{aligned} \tag{2}
$$

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,$(S^{-1}DS) * (S^{-1}DS) = S^{-1}D^2 S$,所以$(S^{-1}DS)^n = S^{-1}D^n S$

所以$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}(it)^n (S^{-1}DS)^n = S^{-1}[\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}(it)^n D^n]S$

$= S^{-1}e^{iDt}S$

同样的，对于e^{iDt}而言, 即有

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

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

所以有$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}(it)^n D^n = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}(it)^n diag\{\lambda_1^n, \lambda_2^n\}$

$= diag\{\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}(it)^n \lambda_1^n, \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}(it)^n \lambda_2^n\}$ (3)

$= diag\{e^{i\lambda_1 t}, e^{i\lambda_2 t}\}$

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

$= e^{i\lambda_1 t}v_1 v_1^T + e^{i\lambda_2 t}v_2 v_2^T$

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

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