Universidade de São Paulo
Instituto de Física de São Carlos

Lista 5

Pedro Calligaris Delbem 5255417

Professor: Attilio Cucchieri

Maio de 2025

Sumário

1 Matrix Approach

1.1 Exercício 1

Tarefa: Usando o power method, calcule o maior e o menor autovalor (e os correspondentes autovetores) da matriz simétrica e tridiagonal A com:

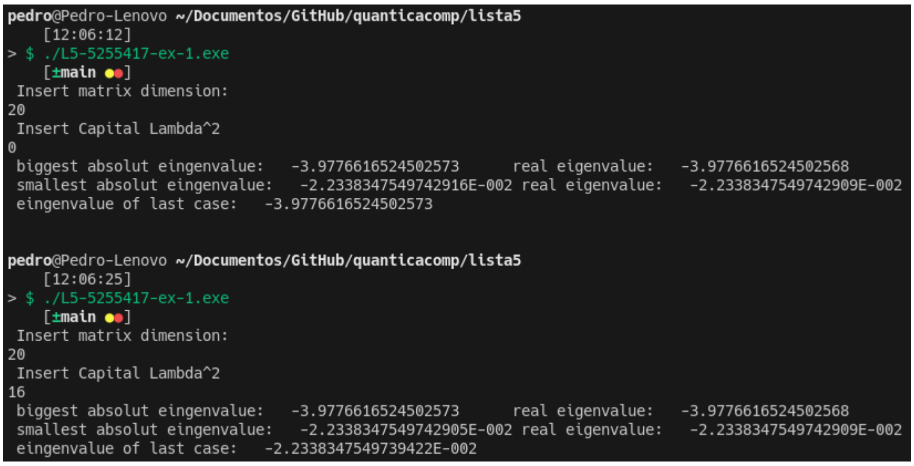
$$A_{ii} = -2, A_{i,i-1} = A_{i-1,i} = 1$$

Considere os três casos descritos na aula: A^k, A^{-k} e $(\Lambda^2 I - A^2)^k$. Compare os resultados com a solução exata.

O código foi compilado com o comando:

gfortran L5-5255417-ex-1.f90 -Wall -Wextra -pedantic -ffree-form -o L5-5255417-ex-1.exe

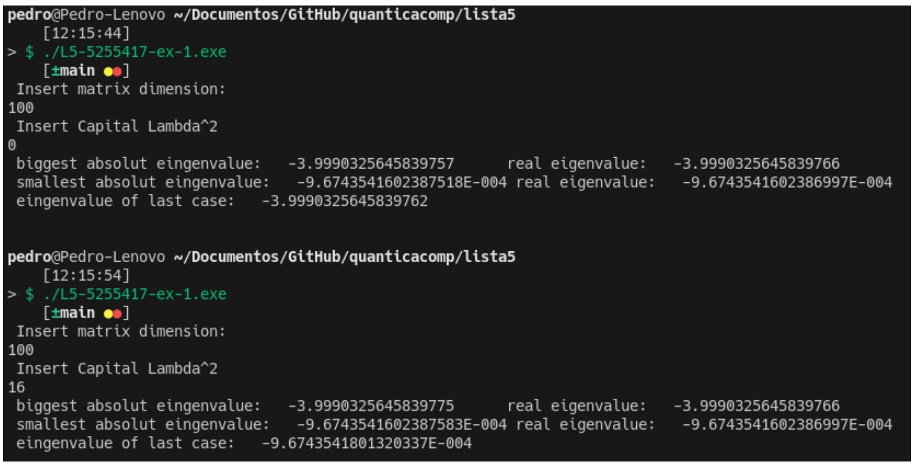
Resultados:



```
pedro@Pedro-Lenovo ~/Documentos/GitHub/quanticacomp/lista5
    [12:06:12]
> $ ./L5-5255417-ex-1.exe
    [±main ●●]
 Insert matrix dimension:
20
 Insert Capital Lambda^2
0
 biggest absolut eingenvalue:   -3.9776616524502573      real eigenvalue:   -3.9776616524502568
 smallest absolut eingenvalue:   -2.2338347549742916E-002 real eigenvalue:   -2.2338347549742909E-002
 eingenvalue of last case:   -3.9776616524502573

pedro@Pedro-Lenovo ~/Documentos/GitHub/quanticacomp/lista5
    [12:06:25]
> $ ./L5-5255417-ex-1.exe
    [±main ●●]
 Insert matrix dimension:
20
 Insert Capital Lambda^2
16
 biggest absolut eingenvalue:   -3.9776616524502573      real eigenvalue:   -3.9776616524502568
 smallest absolut eingenvalue:   -2.2338347549742905E-002 real eigenvalue:   -2.2338347549742909E-002
 eingenvalue of last case:   -2.2338347549739422E-002
```

Figura 1: N=20



```
pedro@Pedro-Lenovo ~/Documentos/GitHub/quanticacomp/lista5
    [12:15:44]
> $ ./L5-5255417-ex-1.exe
    [±main ●●]
 Insert matrix dimension:
100
 Insert Capital Lambda^2
0
 biggest absolut eingenvalue:   -3.9990325645839757      real eigenvalue:   -3.9990325645839766
 smallest absolut eingenvalue:   -9.6743541602387518E-004 real eigenvalue:   -9.6743541602386997E-004
 eingenvalue of last case:   -3.9990325645839762

pedro@Pedro-Lenovo ~/Documentos/GitHub/quanticacomp/lista5
    [12:15:54]
> $ ./L5-5255417-ex-1.exe
    [±main ●●]
 Insert matrix dimension:
100
 Insert Capital Lambda^2
16
 biggest absolut eingenvalue:   -3.9990325645839775      real eigenvalue:   -3.9990325645839766
 smallest absolut eingenvalue:   -9.6743541602387583E-004 real eigenvalue:   -9.6743541602386997E-004
 eingenvalue of last case:   -9.6743541801320337E-004
```

Figura 2: N=100

Nota-se que o método funcionou, para todos os casos, de acordo com esperado. Em particular, para o caso $\Lambda^2 I - A^2$ vê-se que ao escolher Λ adequadamente, recupera-se o melhor e o maior autovalores absolutos. (O código gera um arquivo com os autovetores de cada caso que não foram colocados no terminal para não poluir a vizualização dos resultados)

1.2 Exercício 2

Considere o poço de potencial infinito para uma partícula de massa m, i.e. a equação

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_j(x) = E_j\psi_j(x)$$

Sabemos que no caso de um poço no intervalo $[0, L]$ as autofunções são

$$\psi_j(x) \propto \sin\left(\frac{j\pi x}{L}\right)$$

com autovalores para a energia

$$E_j = \frac{\hbar^2 j^2 \pi^2}{2mL^2}$$

Podemos discretizar a Eq. (1) usando

$$-2\psi_m + \psi_{m+1} + \psi_{m-1} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\delta x^2\psi_m$$

onde $\delta x = L/(n+1)$ e devemos fixar $\phi_0 = \phi(0) = 0$ e $\phi_{n+1} = \phi(L) = 0$. A matriz no lado esquerdo é a matriz $n \times n$

$$\begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & -2 \end{pmatrix}$$

aplicada ao vetor $(\psi_1, \psi_2, ..., \psi_{n-1}, \psi_n)$. De fato, após a multiplicação, a primeira linha é $-2\psi_1 + \psi_2$, que corresponde à expressão $\psi_0 - 2\psi_1 + \psi_2$ com $\psi_0 = 0$. Também, a última linha é $\psi_{n-1} - 2\psi_n$, que corresponde à expressão $\psi_{n-1} - 2\psi_n + \psi_{n+1}$ com $\psi_{n+1} = 0$.

Sabemos que para esta matriz os autovalores são $\lambda_j = -4\sin^2\left[\frac{j\pi}{2(n+2)}\right]$.

- Verifique analiticamente que, no limite de $n \to +\infty$, os autovalores λ_j fornecem os autoestados de energia E_j.

- Usando o power method calcule a energia do estado fundamental E_0 com precisão de 10^{-4} (compare o resultado com o valor exato).
- Faça um gráfico da autofunção normalizada e compare com a solução exata.

O código foi compilado com o comando:

gfortran L5-5255417-ex-2.f90 -Wall -Wextra -pedantic -ffree-form -o L5-5255417-ex-2.exe

1.2.1 Demonstração Analítica

Verificar que:

$$-\frac{2mE_j}{\hbar^2}\delta x^2 = -4\sin^2\left[\frac{j\pi}{2(n+1)}\right]$$

Quando $n \to \infty$, sabemos que $\delta x = \frac{L}{n+1}$ e a energia converge para $E_j = \frac{\hbar^2 j^2 \pi^2}{2mL^2}$.

Expandindo $\sin^2(x)$ em torno de 0:
A aproximação de Taylor para pequenos ângulos é:

$$\sin^2(x) \approx x^2$$

Verificação no limite:
Substituindo E_j, δx e a aproximação do seno na equação inicial:

$$-\frac{2m}{\hbar^2}\left(\frac{\hbar^2 j^2 \pi^2}{2mL^2}\right)\left(\frac{L}{n+1}\right)^2 \approx -4\left(\frac{j\pi}{2(n+1)}\right)^2$$

Simplificando ambos os lados:

$$\begin{aligned} -\frac{2m}{\hbar^2}\frac{\hbar^2 j^2 \pi^2}{2mL^2}\frac{L^2}{(n+1)^2} &\approx -4\frac{j^2\pi^2}{4(n+1)^2} \\ -\frac{j^2\pi^2}{(n+1)^2} &= -\frac{j^2\pi^2}{(n+1)^2} \end{aligned}$$

Logo, a relação é válida no limite $n \to \infty$.

1.2.2 Demonstração da Relação entre $\phi(x)$ e v_i

O objetivo é encontrar a constante de proporcionalidade que relaciona o autovetor discreto v_i, obtido numericamente, com a autofunção contínua $\phi(x)$.

A condição de normalização para a autofunção contínua $\phi(x)$ em um poço de potencial de tamanho L é:

$$\int_0^L |\phi(x)|^2 \, dx = 1 \tag{1}$$

Podemos aproximar esta integral por uma soma de Riemann sobre n pontos discretos, onde $x_i = i \cdot \delta x$ e δx é o passo da discretização:

$$\sum_{i=1}^{n} |\phi(x_i)|^2 \delta x \approx 1 \tag{2}$$

Por outro lado, o autovetor v calculado pelo método numérico é tipicamente normalizado para que a soma de seus componentes ao quadrado seja 1 (norma Euclidiana):

$$\sum_{i=1}^{n} |v_i|^2 = 1 \tag{3}$$

Assumimos que a autofunção nos pontos discretos é proporcional ao autovetor, com uma constante de normalização C:

$$\phi(x_i) = C \cdot v_i \tag{4}$$

Substituindo a equação (4) na equação (2):

$$\sum_{i=1}^{n} |C \cdot v_i|^2 \delta x = 1 \tag{5}$$

Fatorando a constante C e δx para fora da soma:

$$C^2 \delta x \sum_{i=1}^{n} |v_i|^2 = 1 \tag{6}$$

Usando a condição de normalização do vetor v da equação (3), a soma se torna 1:

$$\begin{aligned} C^2 \delta x \cdot (1) &= 1 \\ C^2 &= \frac{1}{\delta x} \\ C &= \frac{1}{\sqrt{\delta x}} \end{aligned}$$

Portanto, a relação entre a autofunção ϕ nos pontos x_i e os componentes do autovetor v_i é:

$$\phi(x_i) = \frac{v_i}{\sqrt{\delta x}} \tag{7}$$

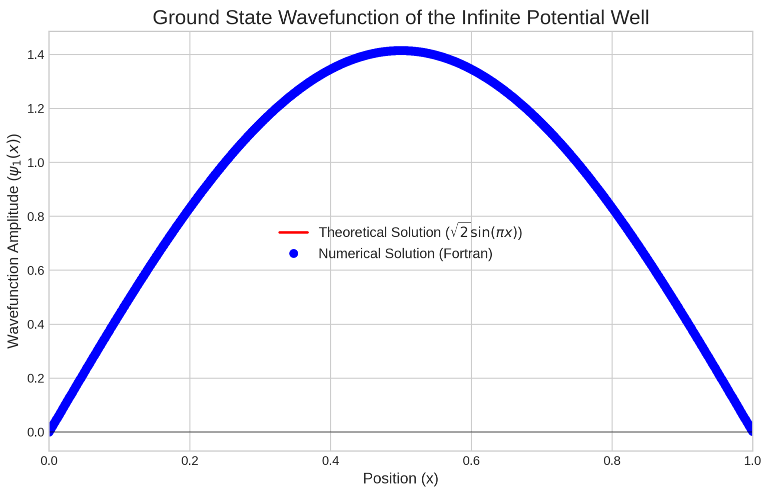
Esta é a relação utilizada no código para gerar o arquivo de resultados.

Resultados:

Utilizou-se N=100000 como se fosse N=infinito, obtendo a energia:

```
> $ ./L5-5255417-ex-2.exe
 Insert matrix dimension:
2000
 Insert tolerance
1.0e-4
computed E0:    9.8696024 real E0:    9.8696044
```

E obteve-se a seguinte autofunção:



De modo que corresponde perfeitamente à função conhecida