

# Universidade de São Paulo

## Instituto de Física de São Carlos

### **Lista 5**

Pedro Calligaris Delbem 5255417

Professor: Attilio Cucchieri

Maio de 2025

# Sumário

<b>1</b>	<b>Matrix Approach</b>	<b>2</b>
1.1	Exercício 1 . . . . .	2
1.2	Exercício 2 . . . . .	3
1.2.1	Demonstração Analítica . . . . .	4
1.2.2	Demonstração da Relação entre $\phi(x)$ e $v_i$ . . . . .	4

# 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/quantacomp/lista5
[12:06:12]
> $ ./L5-5255417-ex-1.exe
[+main ●●]
Insert matrix dimension:
20
Insert Capital Lambda^2
0
biggest absolut eingenvale: -3.9776616524502573 real eigenvalue: -3.9776616524502568
smallest absolut eingenvale: -2.2338347549742916E-002 real eigenvalue: -2.2338347549742909E-002
eigenvalue of last case: -3.9776616524502573

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

Figura 1: N=20

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

pedro@Pedro-Lenovo ~/Documentos/GitHub/quantacomp/lista5
[12:15:54]
> $ ./L5-5255417-ex-1.exe
[+main ●●]
Insert matrix dimension:
100
Insert Capital Lambda^2
16
biggest absolut eingenvale: -3.9990325645839775 real eigenvalue: -3.9990325645839766
smallest absolut eingenvale: -9.6743541602387583E-004 real eigenvalue: -9.6743541602386997E-004
eigenvalue 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  $\Lambda$  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 visualização 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  $(\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_{n-1}, \psi_n)$ . 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  $n \rightarrow +\infty$ , os autovalores  $\lambda_j$  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  $n \rightarrow \infty$ , 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  $E_j$ ,  $\delta x$  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  $n \rightarrow \infty$ .

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

O objetivo é encontrar a constante de proporcionalidade que relaciona o auto-vetor 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:

$$\int_0^L |\phi(x)|^2 dx = 1 \quad (1)$$

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

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

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):

$$\sum_{i=1}^n |v_i|^2 = 1 \quad (3)$$

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

$$\phi(x_i) = C \cdot v_i \quad (4)$$

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

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

Fatorando a constante  $C$  e  $\delta x$  para fora da soma:

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

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  $\phi$  nos pontos  $x_i$  e os componentes do autovetor  $v_i$  é:

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

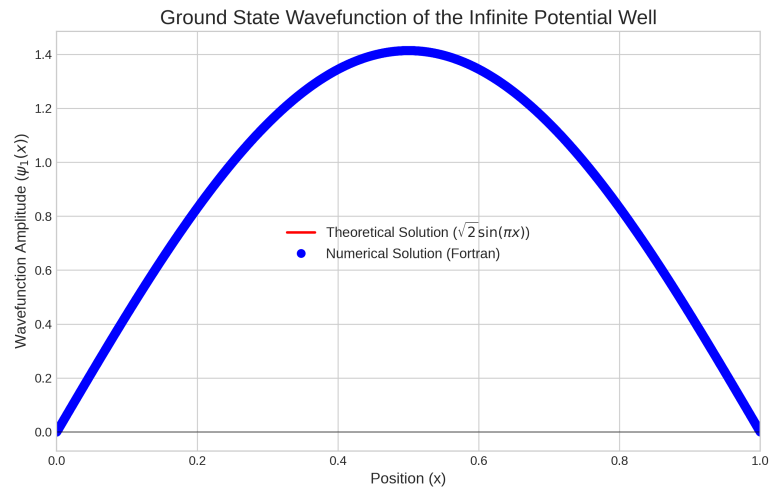
Esta é a relação utilizada no código para gerar o arquivo de resultados.

Resultados:

Utilizou-se  $N=10000$  como se fosse  $N=\text{infinito}$ , obtendo a energia:

```
pedro@Pedro-Lenovo ~/Documentos/GitHub/quanticacomp/lista5
> $ ./L5-5255417-ex-2.exe
Insert matrix dimension:
10000
Insert tolerance
1.0e-4
computed E0: 9.8696043 real E0: 9.8696044
```

E obteve-se a seguinte autofunção:



De modo que corresponde perfeitamente à função conhecida