

FYS3150 Computational Physics 2014

## Oblig 2

**Løysning av Schrödinger likninga for to elektron i ein tredimensjonal oscillator brønn.**

Øyvind Sigmundson Schøyen

25. september 2014

### **Sammendrag**

Skriv eit samandrag av prosjektet her oppe.  
<https://github.com/Schoyen/FYS3150/tree/master/Oblig2>

## **Innhold**

<b>1</b>	<b>Introduksjon</b>	<b>4</b>
<b>2</b>	<b>Jacobirotasjon</b>	<b>4</b>
2.1	Algoritma . . . . .	4

## 1 Introduksjon

I dette prosjektet er me interesserte i å løyse Schrödinger likninga for to elektron. Likninga er skriva om slik at me kan jobbe med eit ein-lekam problem istadenfor to. Me nyttar lineær algebra for å løyse differensiallikningane som eit sett med lineær likningar. Måten me gjer dette på er ved Jacobirotasjon for å finne eigenvektorar og eigenverdiar. Til slutt vil me plotte bølgefunksjonen for grunntilstanden til elektrona ved hjelp av eigenvektorane og eigenverdiane.

## 2 Jacobirotasjon

For å løyse eigenverdi- og eigenvektorproblem vil me nytte Jacobirotasjon. Dette er ein algoritme som, etter ein rekke similaritetsformasjonar, vil gjere alle ikkje-diagonale matriseelement til null. Denne algoritmen er likevel ikkje ein veldig effektiv algoritme då me ved ein rotasjon kan kome i skade for å gjere eit element som tidligare var null til å bli ikkje-null. Numerisk kan det og ta lang tid før elementa vert null. Me vil difor heile tida teste verdiane mot ein toleranse.

### 2.1 Algoritma

Ein similaritetstransformasjon er gitt ved

$$B = S^T A S$$

kor  $S$  er ein ortogonal matrise der  $SS^T = SS^{-1} = I$ . Matrisa  $S$  transformerer  $A$  ein vinkel  $\theta$  i planet medan  $S^T$  tek ho tilbake. Me vil då velje  $\theta$  slik at alle ikkje-diagonale element vert null. Når me gjer dette numerisk må me gjere ein rekke similaritetstransformasjonar for å oppnå dette. Då har me

$$B = S_n^T \dots S_1^T A S_1 \dots S_n.$$

Kvar matrise  $S$  og  $S^T$  er identitetsmatrisa med unntak av elementa  $s_{kk} = s_{ll} = \cos \theta$ ,  $s_{kl} = -s_{lk} = -\sin \theta$  og  $s_{ii} = 1$  for  $i \neq k$  og  $i \neq l$ . Produktet  $B = S^T A S$  kan då skrivast som

$$\begin{aligned} b_{ii} &= a_{ii}, & i \neq k, i \neq l \\ b_{ik} &= a_{ik} \cos \theta - a_{il} \sin \theta, & i \neq k, i \neq l \\ b_{il} &= a_{il} \cos \theta + a_{ik} \sin \theta, & i \neq k, i \neq l \\ b_{kk} &= a_{kk} \cos^2 \theta - 2a_{kl} \cos \theta \sin \theta + a_{ll} \sin^2 \theta \\ b_{ll} &= a_{ll} \cos^2 \theta + 2a_{kl} \cos \theta \sin \theta + a_{kk} \sin^2 \theta \\ b_{kl} &= (a_{kk} - a_{ll}) \cos \theta \sin \theta + a_{kl}(\cos^2 \theta - \sin^2 \theta). \end{aligned}$$

Me vil no velje  $\theta$  slik at alle ikkje-diagonale element  $b_{kl}$  i praksis vert null. For kvar iterasjon vil me då teste om summen av alle dei ikkje-diagonale elementa er mindre enn ein toleranse  $\epsilon$ . Me vil derimot ikkje gjer dette då det er ein tidkrevande prosess. Erstatninga vert då å sjå om det største elementet blant dei ikkje-diagonale elementa er mindre enn  $\epsilon$ . Dette vil då vere

$$|a_{kl}| = \max_{i \neq j} |a_{ij}|.$$

Me krever at  $b_{kl} = b_{lk} = 0$ . Det gjer oss likninga

$$a_{kl}(c^2 - s^2) + (a_{kk} - a_{ll})cs = b_{kl} = 0. \quad (1)$$

Me definerer no

$$\tau = \frac{a_{ll} - a_{kk}}{2a_{kl}} \quad \Rightarrow \quad a_{ll} - a_{kk} = 2\tau a_{kl}.$$

Setter dette inn i (1) og får

$$\begin{aligned} a_{kl}c^2 - a_{kl}s^2 - 2\tau a_{kl}cs &= 0, \\ \Rightarrow \quad a_{kl} - a_{kl}\frac{s^2}{c^2} - 2\tau a_{kl}\frac{s}{c} &= 0. \end{aligned}$$

Siden  $c = \cos \theta$  og  $s = \sin \theta$  vil me få

$$\begin{aligned} a_{kl} - a_{kl} \tan^2 \theta - 2\tau a_{kl} \tan \theta &= 0, \\ \Rightarrow \quad 1 - t^2 - 2\tau t &= 0, \\ \Rightarrow \quad t^2 + 2\tau t - 1 &= 0. \end{aligned}$$