FYS3150 Computational Physics 2014

Oblig 2

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

Øyvind Sigmundson Schøyen

24. september 2014

Sammendrag

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

Innhold

1 Introduksjon

I dette prosjektet er me interesserte i å løyse Schrödinger likninga for to elektron. Likninga er skrive 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 bølgjefunksjonen 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 i midlertid 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 θ i planet medan S^T tek ho tilbake. Me vil då velje θ 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

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

Me vil no velje θ 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 ϵ.