SPRAWOZDANIE - LABORATORIUM NR 4

Diagonalizacja macierzy operatora energii w 2D

Tomasz Gajda

28.03.2020

1 Wstęp teoretyczny

W tym laboratorium zajmowaliśmy się rozwiązywaniem równania Schrödingera. Jest to jedno z podstawowych równań nierelatywistycznej mechaniki kwantowej, które zostało sformułowane przez fizyka Erwina Schrödingera w 1926 roku. Pozwala ono nam opisać ewolucję stanu układu kwantowego w czasie w sposób znacznie dokładniejszy, niż czyni to mechanika klasyczna. W nierelatywistycznej mechanice kwantowej równanie Schrödingera odgrywa rolę tak podstawową, jaką zasady dynamiki Newton'a odgrywają w mechanice klasycznej.

W naszym przypadku zajmowaliśmy równaniem niezależnym od czasu, które otrzymuje się poprzez wstawienie funkcji falowej w specyficznej postaci do równania ogólnego:

$$\widehat{H}\psi(r) = E\psi(r) \tag{1}$$

Pojawiający się dalszej części zadania hamiltonian natomiast, to inaczej funkcja Hamiltona - funkcja uogólnionych pędów i współrzędnych, która opisuje układ fizyczny. Możemy ją otrzymać z wyrażenia na energię całkowitą układu, bądź z funkcji Lagrange'a.

Będąca główną częścią zadania diagonalizacja, to rozkład macierzy kwadratowej A na iloczyn macierzy P, Δ i P^{-1}, gdzie Δ jest macierzą diagonalną, a P macierzą przejścia.

$$A = P\Delta P^{-1} \tag{2}$$

W tym zadaniu jest to dla nas ważne ponieważ współczynniki na głównej przekątnej macierzy diagonalnej Δ są równe kolejnym **wartościom** własnym macierzy A, natomiast kolumny macierzy P to kolejne **wektory** własne macierzy A.

2 Zadanie do wykonania

2.1 Opis problemu

Zadanie z którym spotkaliśmy się na laboratorium dotyczyło znalezienia rozwiązania niezależnego od czasu równania Schrödingera .

$$H\psi = E\psi \tag{3}$$

w dwóch wymiarach. Przedstawiona została również postać operatora energii:

$$H = -\frac{h^2}{2m*}(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}) \tag{4}$$

Dlatego też korzystamy z siatki węzłów:

$$x_i = \Delta \cdot i, i = 1, 2, ..., n_x \tag{5}$$

$$y_j = \Delta \cdot j, j = 1, 2, ..., n_y. \tag{6}$$

Później dyskretyzujemy równanie włąsne na siatce przez zastępowanie drugich pochodnych ilorazami różnicowymi:

$$\psi(x, y) = \psi(x_i, y_j) = \psi_{i,j} \tag{7}$$

$$H\psi = E\psi \rightarrow -\frac{h^2}{2m*}(\frac{\psi_{i+1,j} - 2\psi_{i,j} + \psi_{i-1,j}}{\Delta^2} + \frac{\psi_{i,j+1} - 2\psi_{i,j} + \psi_{i,j-1}}{\Delta^2}) = E\psi_{i,j} \tag{8}$$

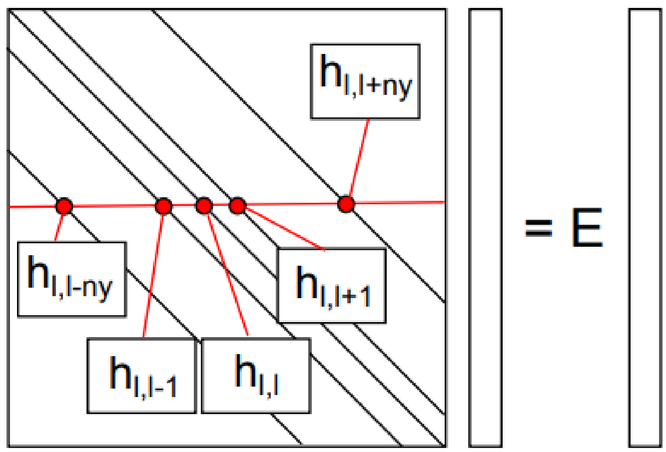
Musimy dokonać teraz reindeksacji: $l = j + (i-1) \cdot n_y, \quad l = 1, 2, ..., n, \quad n = n_x \cdot n_y$
Wprowadzmy również współczynnik $t = \frac{h^2}{2m\Delta^2}$, dzięki czemu równanie staje się krótsze:

$$H\psi = t(\psi_{l-ny} + \psi_{l-1} - 4\psi_l + \psi_{l+1} + \psi_{l+ny}) \tag{9}$$

Jeżeli zapiszemy operator H korzystając z macierzy kwadratowej o rozmiarze n x n, to jedyne niezerowe elementy w wierszu mają postać:

$$H_{l,l\pm n_y} = H_{l,l\pm 1} = t, \quad H_{l,l} = -4t \tag{10}$$

Dlatego też, macierz H jest pięcioprzekątniowa, tak jak zostało to przedstawione na rysunku zamieszczonym poniżej.



Rysunek 1: Macierz operatora energii

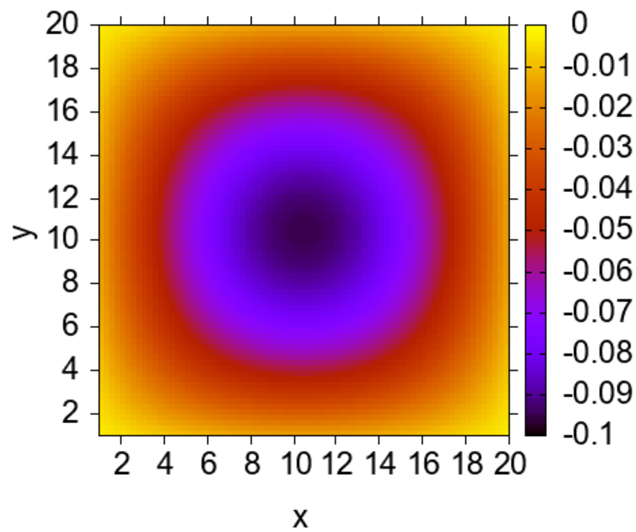
My musimy ją zdiagonalizować.

2.2 Przyjęte założenia

Założenia		
Symbol	Wielkość	Wartość
n	Rozmiar macierzy	$n_x * n_y$
n_x	Rozmiar macierzy w osi x	20
n_y	Rozmiar macierzy w osi y	20
m	Ilość wartości własnych	10
t	Wartość	-0.021

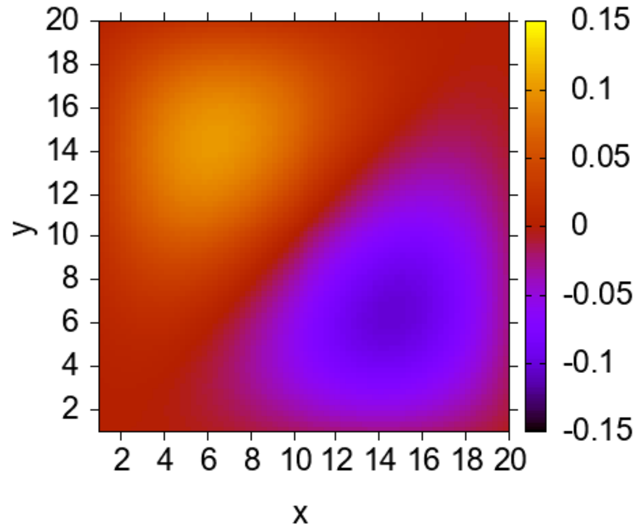
2.3 Wyniki

Wyniki programu przedstawione za pomocą konsolowej wersji programu gnuplot prezentują się zgodnie z oczekiwaniami. Jest to dziesięć wektorów własnych macierzy H odpowiadających dziesięciu wartościom własnym. Prezentacja za pomocą funkcji falowej hamiltonanu dla cząstki w dwuwymiarowym kwadratowym pudle potencjału. Pierwszy przypadek:



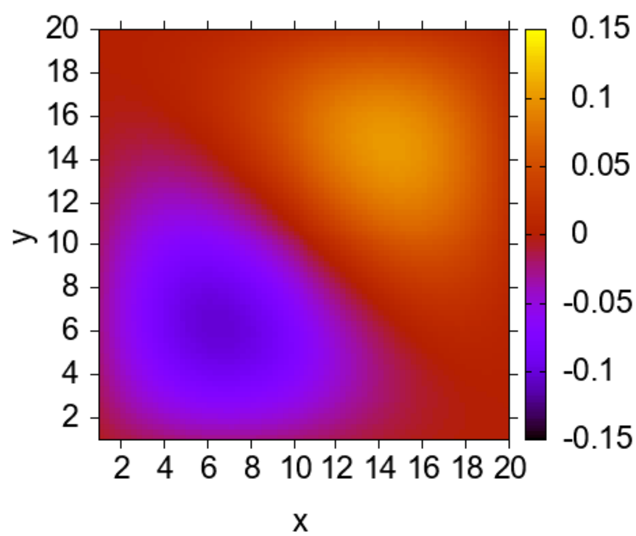
Rysunek 2: Wektor własny $\psi_1(x, y)$ macierzy H

Wartość własna w tym przypadku wynosi $\mathrm{E}_1 = 0.000938$.



Rysunek 3: Wektor własny $\psi_2(x, y)$ macierzy H

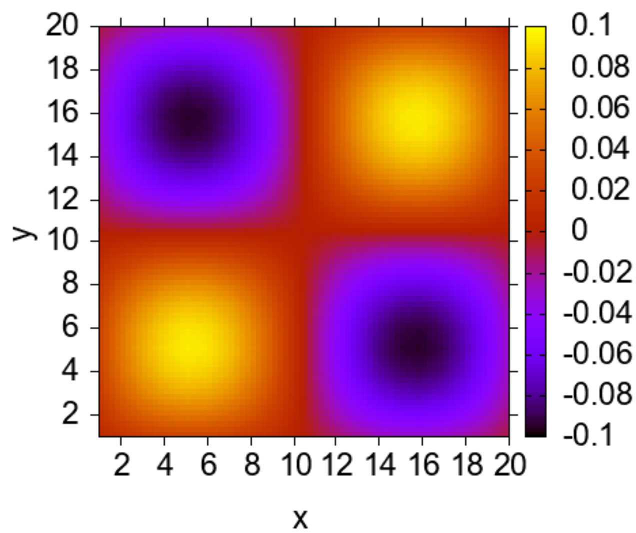
Wartość własna w tym przypadku wynosi $E_2 = 0.002335$.



Rysunek 4: Wektor własny $\psi_3(x, y)$ macierzy H

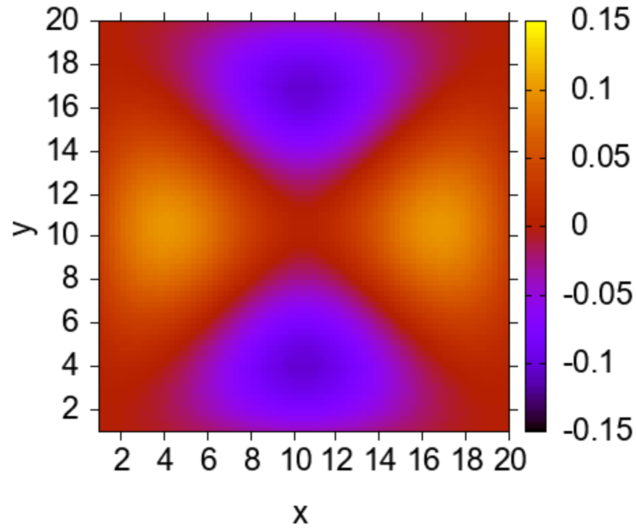
Wartość własna dla tego przypadku wynosi $E_3 = 0.002335$. Możemy zaobserwować że jest ona taka sama jak w przypadku poprzednim - mimo to wektor nie jest jednakowy.

Wiemy, że wektory własne po pomnożeniu przez stałą to wciąż te same wektory własne. Funkcje z biblioteki Numerical Recipes, które wykorzystliśmy dadzą nam w wyniku znormalizowane wektory - dlatego jedyne opcje stałych do mnożenia to 1 i -1. Jest więc bardzo prawdopodobne, że niektóre z naszych wektorów własnych są po prostu odwrócone względem poprzednich.



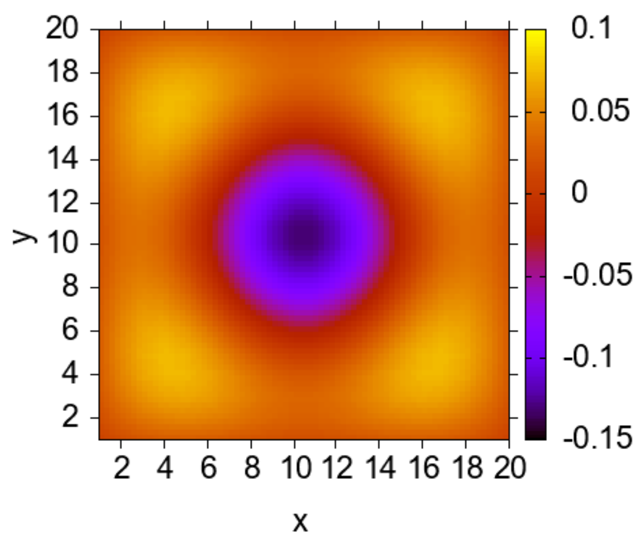
Rysunek 5: Wektor własny $\psi_4(x, y)$ macierzy H

Wartość własna przypadku czwartego wynosi $E_4 = 0.003732$.



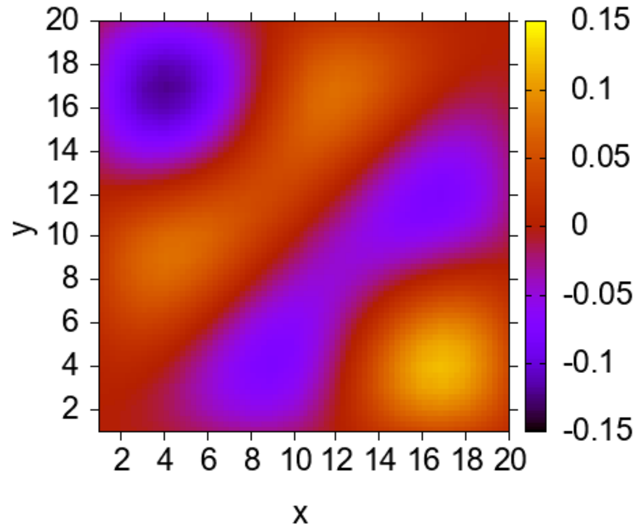
Rysunek 6: Wektor własny $\psi_5(x, y)$ macierzy H

Wartość własna w tym przypadku wynosi $\mathrm{E}_5 = 0.004628$.



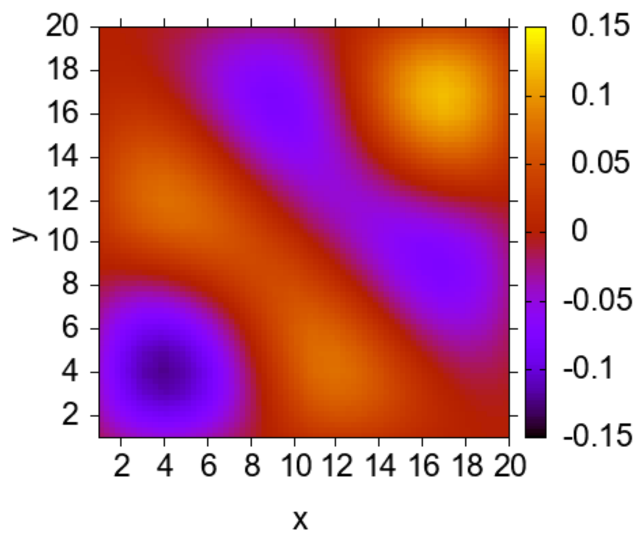
Rysunek 7: Wektor własny $\psi_6(x, y)$ macierzy H

Wartość własna w tym przypadku wynosi $E_6 = 0.004629$. Ponownie możemy zaobserwować zachowanie w przypadku tej samej wartości własnej.



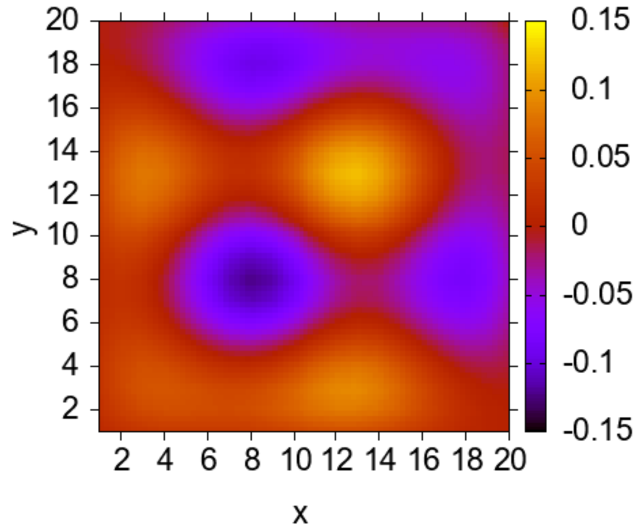
Rysunek 8: Wektor własny $\psi_7(x, y)$ macierzy H

Wartość własna dla tego przypadku wynosi $\mathrm{E}_7 = 0.006025$.



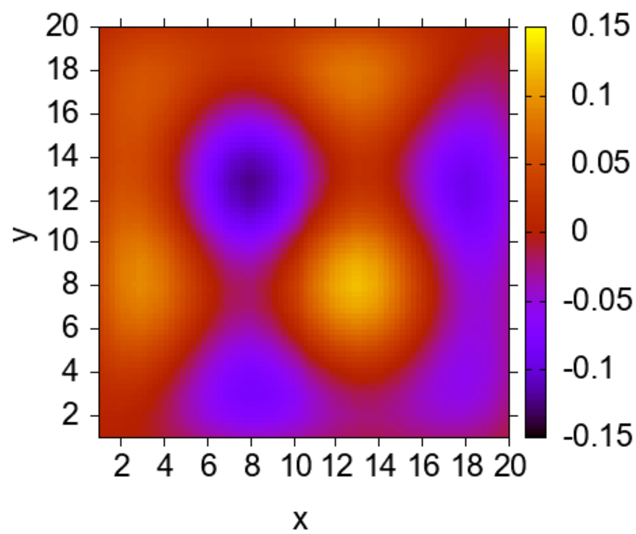
Rysunek 9: Wektor własny $\psi_8(x, y)$ macierzy H

Wartość własna dla przypadku ósmego wynosi $\mathrm{E}_8 = 0.006025$.



Rysunek 10: Wektor własny $\psi_9(x, y)$

Wartość własna dla tego przypadku wynosi $\mathrm{E}_9 = 0.007767$.



Rysunek 11: Wektor własny $\psi_{10}(x, y)$ macierzy H

Wartość własna dla tego przypadku wynosi $\mathrm{E}_{10} = 0.007767$.

3 Wnioski

Otrzymane wektory zgadzają się z naszymi oczekiwaniami, dlatego możemy stwierdzić, że metoda jest efektywna. Jak już wspominałem wcześniej, to, że pomimo takich samych (lub bardzo zbliżonych) wartości własnych wektory własne różnią się od siebie - nie jest błędem. Wektory te są znormalizowane, jedyne możliwe stałe do przemnożenia to 1 oraz -1, właśnie dlatego możliwe jest, by część tych wektorów była po prostu "odbiciem" swoich odpowiedników.