SPRAWOZDANIE – LABORATORIUM 4
Wektory i wartości własne

Jan Wojdylak, 28.03.2021

1. Cel ćwiczenia

Wyznaczenie wartości i wektorów własnych macierzy oraz znalezienie rozwiązania równania Schroedingera.

2. Opis problemu

Do rozwiązania mamy równanie Schroedingera, jest to jedno z podstawowych równań nierelatywistycznej mechaniki kwantowej. Równanie to pozwala opisać ewolucję stanu układu kwantowego w czasie:

$$-\frac{h^2}{2m}\nabla^2\psi(r) + V(r)\psi(r) = E\psi(r)$$

Gdzie: V(r) to energia potencjalna, $\psi(r)$ – funkcja falowa, a E to energia odpowiadająca funkcji falowej.

Zadanie sprowadza się do znalezienia poziomów energii i odpowiadającym im funkcji falowym dla cząstki o masie *m* umieszczonej w potencjale jednowymiarowego oscylatora harmonicznego $V(x) = kx^2/2$. Jeśli za jednostkę energii przyjmiemy $h\omega$, gdzie $\omega^2 = \frac{k}{m}$ oraz jednostkę długości $\sqrt{\frac{h}{m\omega}}$ powyższe równanie przyjmuje postać:

$$-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + \frac{1}{2}x^2\psi(x) = E\psi(x)$$

Zastępując drugą pochodną po lewej stronie równania ilorazem różnicowym otrzymujemy następujące przybliżenie:

$$\frac{\psi(x_{i+1)} - 2\psi(x_i) + \psi(x_{i-1})}{(\Delta x)^2} \approx \frac{d^2\psi}{dx^2}(x = \mathrm{x_i})$$

Możemy zamienić to równanie na równanie iteracyjne, gdzie $\psi i = \psi(x_i)$

$$-\frac{1}{2}\frac{\psi_{i+1} - 2\psi_i + \psi_{i-1}}{(\Delta x)^2} + \frac{1}{2}x_i^2\psi_i = E_{\psi_i}$$

Takie równanie możemy zapisać w postaci macierzowej żądając zerowania się funkcji falowej ψ(x) w nieskończonościach, czyli jeżeli ψ(x = -L → -∞) = $\psi_0 = 0$ oraz ψ(x = +L → +∞) = $\psi_N = 0$

$$\begin{pmatrix} h_{1,1} & h_{1,2} & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ h_{2,1} & h_{2,2} & h_{2,3} & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & h_{3,2} & h_{3,3} & h_{3,4} & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & & & & \vdots & & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & h_{N-3,N-4} & h_{N-3,N-3} & h_{N-3,N-2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & h_{N-2,N-3} & h_{N-2,N-2} & h_{N-2,N-1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & h_{N-1,N-2} & h_{N-1,N-1} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \vdots \\ \psi_{N-3} \\ \psi_{N-2} \\ \psi_{N-1} \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \vdots \\ \psi_{N-3} \\ \psi_{N-2} \\ \psi_{N-1} \end{pmatrix}$$

Macierz hamiltonianu jest wiec nie tylko rzeczywista i symetryczna, ale i trójprzekatniową. Korzystając z tego faktu znajdziemy jej wektory i wartości własne.

3. Opis metody

W celu rozwiązania zadania skorzystaliśmy z metody bisekcji. Pierwszym krokiem było wypełnienie wartości macierzy Hamiltonianu o rozmiarze N×N zgodnie ze wzorami: $h_{i,i-1} = h_{i-1,i} = -\frac{1}{2(\Delta x)^2}$ dla $i = 2, \ldots, N-1$, $h_{i,i} = (\Delta x)^{-2} + \frac{x_i^2}{2}$, $x_i = -L + i\Delta x$ dla $i = 1, \ldots, N-1$ oraz $\Delta x = 2L/N$.

Następnie w celu wyznaczenia wartości własne postępujemy następująco: dla dowolnie wybranej liczby l należy obliczyć wartość wielomianu charakterystycznego

$$\omega_i(\lambda) = det(J_i - \lambda I)$$

Ze względu na szczególną postać macierzy można skorzystać ze wzorów na wielomiany charakterystyczne:

$$\omega_0(\lambda) = 1$$

$$\omega_1(\lambda) = h_{1,1} - \lambda$$

$$i = 2,3, \ldots, n$$

$$\omega_i(\lambda) = (h_{i,i} - \lambda)\omega_{i-1}(\lambda) - |h_{i-1,i}^2|\omega_{i-2}(\lambda)$$

$$W(\lambda) = \omega_n(\lambda)$$

Kolejne takie iteracje wykonujemy rekurencyjnie zmieniając przedział, dla pierwszego wykonania funkcji ustalamy przedział korzystając z twierdzenia Gershgorina o lokalizacji wartości własnych, przedział definiujemy równaniem

$$c_i = \left\{ z: |z - a_{ii}| \le \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}| \right\}$$

Mając taki przedział jesteśmy pewni, że nasza wartość własna się w nim znajduje. Lambda za każdym razem jest połową przedziału, następnie korzystając z wyżej podanych wzorów obliczamy wielomiany charakterystyczne dla konkretnej lambdy. Wraz z każdą iteracją sprawdzamy, czy nastąpiła zmiana znaku, jeśli tak to ją zliczamy, takie kroki wykonujemy, aż otrzymamy ω_n. Następnie porównujemy otrzymaną wartość zmian znaku z wartością, dla której chcemy wyliczyć wartość własną i decydujemy się jaki przedział wybrać korzystając z twierdzenia.

Twierdzenie: Jeżeli elementy pozadiagonalne są niezerowe, to ciąg wartości spełnia warunki:

a) Jeżeli $\omega_i(\lambda) = 0$ dla pewnego i < n to

$$\omega_{i\text{-}1}(\lambda)\omega_{i+1}(\lambda) < 0$$

b) Jeżeli $\omega_\mathrm{n}(\lambda) = \omega(\lambda)$ jest różne od 0, to liczba zmian znaków sąsiednich liczb

$$\omega_0(\lambda), \omega_1(\lambda), \dots, \omega_\mathrm{n}(\lambda)$$

jest równa liczbie wartości własnych macierzy mniejszych od λ

c) Jeżeli $\omega_\mathrm{n}(\lambda) = 0$, to λ jest wartością własną macierzy, a ponadto jest tyle wartości własnych mniejszych niż λ, ile nastąpiło zmian znaków w ciągu $\omega_0(\lambda), \omega_1(\lambda), \dots, \omega_{\mathrm{n}\text{-}1}(\lambda)$

Po wyznaczeniu wartości własnych wyznaczamy wektory własne według wzorów:

$$x_1 = 1$$

$$x_2 = \frac{\lambda - h_{11}}{h_{12}}$$

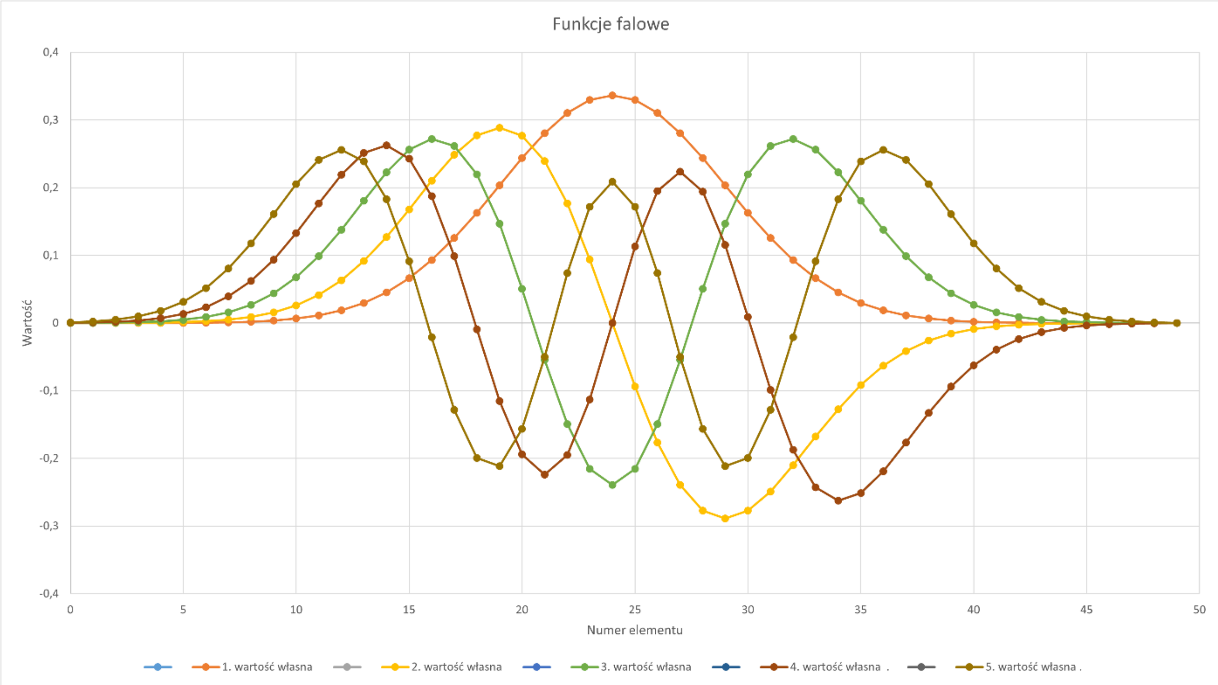
$$x_{i+1} = \frac{(\lambda - h_{ii})x_i - h_{i,\mathrm{i}+1}x_{i-1}}{\mathrm{h}_{i,\mathrm{i}+1}}, \qquad i = 2, 3, \dots, n-1$$

4. Wyniki

W celu wyznaczenia 5 pierwszych wartości własnych, wykonałem dla każdego z nich 50 iteracji uzyskując coraz dokładniejsze przybliżenia λ. Ostatecznie otrzymałem:

λ_0 = 0,4987468514 - 1. wartość własna
λ_1 = 1,4937215221 - 2. wartość własna
λ_2 = 2,4836387335 - 3. wartość własna
λ_3 = 3,4684600788 - 4. wartość własna
λ_4 = 4,4481540670 - 5. wartość własna

Na wspólnym wykresie przedstawiłem wykres znormalizowanych wektorów własnych dla kolejnych wartości własnych.



Otrzymane wykresy zgadzają się z analitycznym wykresem stanu energii oscylatora kwantowego obliczonego z równania Schroedingera zależnego od czasu.

5. Podsumowanie

Celem zajęć było znalezienie wartości i wektorów własnych macierzy hamiltonianu reprezentującej równanie Schroedingera. Aby znaleźć wartości własne posłużyliśmy się metodą bisekcji, dla tak zdefiniowanej macierzy, metoda bisekcji jest bardzo szybką metodą otrzymania wartości własnych.