

Autovalori e autovettori

Se esiste un vettore x per cui

$$Ax = \lambda x \quad x \neq 0$$

Allora λ è un autovalore della matrice A corrispondente all'autovettore x

- Gli autovalori sono soluzioni dell'equazione secolare

$$\det(A - \lambda I) = 0$$

- Le trasformazioni di similarità non cambiano gli autovalori

$$\begin{aligned}\det(SAS^{-1} - \lambda I) &= \det(SAS^{-1} - \lambda SS^{-1}) \\ &= \det(S(A - \lambda I)S^{-1}) = \det(S)\det(A - \lambda I)\det(S^{-1}) \\ &= \det(A - \lambda I)\end{aligned}$$

- Gli autovettori sono invece cambiati

$$Ax = \lambda x \quad \Rightarrow \quad SAx = S\lambda x \quad \Rightarrow \quad SAS^{-1}Sx = \lambda Sx$$

da qui si vede che il nuovo autovettore con autovalore λ è Sx

Uso in fisica

- *Gli autovalori e autovettori sono ampiamente usati nella fisica quantistica*
- *ad ogni grandezza fisica è associato un operatore autoaggiunto*
- *un operatore autoaggiunto può essere rappresentato da una matrice hermitiana*
- *se è reale la matrice è simmetrica*
- *i valori discreti che le grandezze possono assumere sono gli autovalori di queste matrici*
- *gli stati del sistema sono espandibili in termini degli autovettori $|u_j\rangle$, che formano un sistema ortonormale completo*
- *gli elementi di matrice sono ottenuti, in questa base, da*

$$\langle u_i | \hat{A} | u_j \rangle = A_{ij}$$

- *ad esempio, l'energia si ottiene calcolando gli elementi di matrice dell'Hamiltoniana \hat{H}*

Autovettori

Suppongo di aver trovato la matrice S che diagonalizza A

$$SAS^{-1} = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n) = \Lambda$$

per ricavare gli autovettori; moltiplico a sinistra per S^{-1} e ottengo

$$AS^{-1} = S^{-1}\Lambda$$

Chiamo $u^{(i)}$ il vettore che ha per componenti gli elementi della colonna i di S^{-1} e ottengo

$$A_{ik}S_{kj}^{-1} = S_{ik}^{-1}\Lambda_{kj} = \lambda_j S_{ij}^{-1}$$

$$A_{ik}u_k^{(j)} = \lambda_j u_i^{(j)} \quad \Rightarrow \quad A\vec{u}^{(j)} = \lambda_j \vec{u}^{(j)}$$

I vettori colonna di S^{-1} sono gli autovettori

Il metodo preferito per trovare autovalori e autovettori sono le trasformazioni di similarità. Usare l'equazione secolare per trovare n radici complesse è un sistema lento e poco efficace, salvo che per casi particolari.

Iterazioni

Per risolvere il problema si possono effettuare trasformazioni consecutive T_1, T_2, \dots, T_n per cui

$$A_1 = T_1 A T_1^{-1} \quad A_2 = T_2 A_1 T_2^{-1} = T_2 T_1 A T_1^{-1} T_2^{-1} = (T_2 T_1) A (T_2 T_1)^{-1}$$

per arrivare ad ottenere, dopo n , iterazioni, una matrice in forma diagonale

$$\begin{aligned}\Lambda &= T_n \cdot T_{n-1} \dots T_1 \cdot A \cdot T_1^{-1} \dots T_{n-1}^{-1} T_n^{-1} \\ &= (T_n \cdot T_{n-1} \dots T_1) \cdot A \cdot (T_n \cdot T_{n-1} \dots T_1)^{-1}\end{aligned}$$

Da cui si ricava che

$$S = T_n \cdot T_{n-1} \cdot \dots \cdot T_1$$

e S^{-1} è la matrice che contiene gli autovettori

Matrici simmetriche ed hermitiane

- Le matrici simmetriche hanno $a_{ij} = a_{ji}$ e quelle hermitiane $a_{ij} = a_{ji}^*$
- Se il loro ordine è n hanno sempre n autovalori reali (simmetriche) o complessi coniugati (hermitiane)
- Alcuni autovalori possono coincidere
- La matrice U che le diagonalizza è una matrice unitaria ($U^\dagger \cdot U = U \cdot U^\dagger = 1$) se le matrici sono complesse, isometrica se sono reali.

Rotazioni di Jacobi

Una trasformazione unitaria conserva la quantità

$$\sum_{ij=1}^n a_{ij}^2 = \text{Tr}(A^\dagger \cdot A)$$

- *Faccio un gran numero di trasformazioni unitarie*
- *Ognuna di queste diminuisce gli elementi di matrice non diagonali*
- *Alla fine otterrò una matrice che ha gli autovalori sulla diagonale principale ed è nulla altrove*

La trasformazione elementare T_{ij} con $i < j$ differisce dalla matrice unità solo per

$$T_{ii} = T_{jj} = \cos(\theta) \quad T_{ij} = \sin(\theta) \quad T_{ji} = -\sin(\theta)$$

L'angolo θ è scelto in modo da annullare a_{ij} . Ad esempio T_{13} con $n = 3$ è

$$\begin{pmatrix} \cos(\theta) & 0 & \sin(\theta) \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin(\theta) & 0 & \cos(\theta) \end{pmatrix}$$

Dettagli tecnici

- solo le righe i e j sono cambiate da ogni rotazione;
- se a_{ij} è già molto piccolo la rotazione non viene effettuata;
- si fanno più cicli ciascuno con tutti i possibili i e j ;
- Se la trasformazione è T_{ij} questa modifica la matrice secondo la regola:

$$\begin{aligned}a'_{jj} &= a_{ii} \sin^2 \theta + a_{jj} \cos^2 \theta + 2a_{ij} \sin \theta \cos \theta \\a'_{ii} &= a_{ii} \cos^2 \theta + a_{jj} \sin^2 \theta - 2a_{ij} \sin \theta \cos \theta \\a'_{ij} &= (\cos^2 \theta - \sin^2 \theta)a_{ij} + \sin \theta \cos \theta(a_{ii} - a_{jj}) \\a'_{ki} &= a_{ki} \cos \theta - a_{kj} \sin \theta \quad k \neq i, j \\a'_{kj} &= a_{kj} \cos \theta + a_{ki} \sin \theta \quad k \neq i, j\end{aligned}$$

- il valore di θ per cui $a'_{ij} = 0$ riduce gli elementi non diagonali

$$\sum_{p,q=1,p \neq q}^n (a'_{pq})^2 = \sum_{p,q=1,p \neq q}^n (a_{pq})^2 - 2a_{ij}^2$$

Matrici tridiagonali

Sono diverse da zero solo per a_{ij} con $|i - j| \leq 1$

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & 0 & 0 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & 0 \\ 0 & a_{32} & a_{33} & a_{34} \\ 0 & 0 & a_{43} & a_{44} \end{pmatrix}$$

È particolarmente facile calcolare il determinante, e quindi il polinomio caratteristico, per una matrice tridiagonale simmetrica

$$D_4(\lambda) = \begin{vmatrix} a_{11} - \lambda & a_{12} & 0 & 0 \\ a_{12} & a_{22} - \lambda & a_{23} & 0 \\ 0 & a_{23} & a_{33} - \lambda & a_{34} \\ 0 & 0 & a_{34} & a_{44} - \lambda \end{vmatrix}$$

Da cui

$$D_4(\lambda) = (a_{44} - \lambda)D_3(\lambda) - a_{34}^2 D_2(\lambda)$$

Gli zeri di $D_N(\lambda)$ possono poi essere trovati con il metodo di Newton o con altri metodi per la ricerca delle radici

Metodo di Householder

- Vale per matrici simmetriche
- Le riduce alla forma tridiagonale
- usa il metodo delle successive trasformazioni di similarità

$$P_{N-2} \cdot P_{N_3} \dots P_2 \cdot P_1$$

- Scelgo P della forma

$$P_{ij} = \delta_{ij} - 2u_i u_j$$

con $\|u\| = 1$

- $P^2 = I$ Infatti

$$\begin{aligned} P_{ik} P_{kj} &= (\delta_{ik} - 2u_i u_k)(\delta_{kj} - 2u_k u_j) \\ &= \delta_{ij} - 2u_i u_j - 2u_i u_j + 4u_i u_j \|u\|^2 = \delta_{ij} \end{aligned}$$

- Ne segue che $P = P^{-1}$ e la trasformazione di similarità per una matrice A è

$$PAP^{-1} = PAP$$

- La trasformazione conserva la simmetria di A

$$(PAP)_{ij} = (\delta_{ik} - 2u_i u_k) a_{kl} (\delta_{lj} - 2u_l u_j) = \\ a_{ij} - 2u_i(u_k a_{kj}) - 2u_j(a_{il} u_l) + 4u_i u_j(u_k a_{kl} u_l) = \\ a_{ji} - 2(a_{jk} u_k) u_i - 2(u_l a_{li}) u_j + 4u_i u_j(u_k a_{lk} u_l) = (PAP)_{ji}$$

- Posso ora cercare un valore del vettore \vec{u} che renda la matrice più vicina a una tridiagonale, annullando tutti gli elementi a_{j1} con $j > 2$, e quindi anche a_{1j} con $j > 2$. In particolare se $u_0 = 0$ ho che

$$a'_{00} = (\delta_{0k} - 2u_0 u_k) a_{kl} (\delta_{l0} - 2u_l u_0) = a_{00}$$

$$a'_{0j} = (\delta_{0k} - 2u_0 u_k) a_{kl} (\delta_{lj} - 2u_l u_j) = a_{0j} - 2a_{0l} u_l u_j$$

Definisco per comodità di calcolo

$$T = \sum_{k=0}^{N-1} a_{0k} u_k$$

e trovo

$$a'_{0j} = a_{0j} - 2Tu_j$$

facendo il quadrato e sommando su j

$$\sum_{j=0}^{N-1} a'^2_{0j} = \sum_{j=0}^{N-1} a^2_{0j} + 4T^2 \sum_{j=0}^{N-1} u_j^2 - 2T \sum_{j=0}^{N-1} a_{0j} u_j = \sum_{j=0}^{N-1} a^2_{0j}$$

Impongo ora che la prima colonna della matrice A' sia analoga a quella di una matrice tridiagonale. Ho allora

$$a'_{0j} = 0 \text{ se } j > 1 \Rightarrow a_{0j} = 2Tu_j$$

e trovo facilmente

$$a'_{00} = a_{00} \quad a'^2_{01} = \sum_{j=1}^{N-1} a_{0j}^2$$

Partendo ora dalle due equazioni

$$\begin{aligned} a_{01} &= a'_{01} + 2Tu_1 \\ a_{0j} &= 2Tu_j \quad j > 1 \end{aligned}$$

Moltiplicando per a_{01} la prima equazione e per a_{0j} la seconda e sommando su j ottengo

$$\sum_{j=1}^{N-1} a_{0j}^2 = 2T^2 + a'_{01}a_{01}$$

e infine

$$\begin{aligned} T &= \sqrt{\left(\sum_{j=1}^{N-1} a_{0j}^2 - 2a_{01}a'_{01} \right) / 2} \\ u_1 &= (a_{01} - a'_{01}) / 2T \\ u_j &= a_{0j} / 2T \end{aligned}$$

- Si può ora proseguire calcolando in modo analogo le trasformazioni che annullano gli elementi non tridiagonali della seconda, terza, etc. colonna.
- Ogni volta dovrò prendere trasformazioni in cui $u_1 = 0$, $u_1 = u_2 = 0$, $u_1 = u_2 = u_3 = 0$, in modo da non modificare la colonna 1, 2, 3, ... e così via fino alla colonna $N - 2$ compresa.
- A questo punto la matrice è tridiagonale e si applicano le regole per trovare gli autovalori delle matrici tridiagonali.

In sostanza

- Considero gli elementi a_{ij} della colonna che voglio ridurre a forma tridiagonale
- Trovo u_j dalle formule precedenti
- Calcolo $y_i = \sum_j a_{ij}u_j$ e $z = \sum_{ij} u_i u_j a_{ij}$ che mi servono per calcolare tutti gli a'_{ij} dalla formula
$$a'_{ij} = a_{ij} - 2u_i y_j - 2u_j y_i + 4z u_i u_j$$
- Ripeto il procedimento per $N - 2$ volte.

Limiti sugli autovalori

Si dimostra che per ogni autovalore λ vale

$$\min_i \left(a_{ii} - \sum_{j \neq i} |a_{ij}| \right) \leq \lambda \leq \max_i \left(a_{ii} + \sum_{j \neq i} |a_{ij}| \right)$$

Questo mi permette di restringere la ricerca degli autovalori in un intervallo noto

Per una matrice tridiagonale simmetrica, con elementi diagonali α_i ed elementi non diagonali β_i , questo si può esprimere come

$$\begin{aligned} \alpha_0 - |\beta_0| &\leq \lambda \leq \alpha_0 + |\beta_0| \\ \alpha_1 - |\beta_0| - |\beta_1| &\leq \lambda \leq \alpha_0 + |\beta_0| + |\beta_1| \\ &\dots \\ \alpha_k - |\beta_{k-1}| - |\beta_k| &\leq \lambda \leq \alpha_k + |\beta_{k-1}| + |\beta_k| \\ &\dots \\ \alpha_{n-1} - |\beta_{n-2}| &\leq \lambda \leq \alpha_{n-1} + |\beta_{n-2}| \end{aligned}$$

Inoltre, per matrici tridiagonali simmetriche, si dimostra che la sequenza dei determinanti parziali

$$1, D_1(\lambda), D_2(\lambda), \dots, D_N(\lambda)$$

cambia segno tante volte quanti sono gli autovalori minori di λ . Ciò mi consente di verificare se ho trovato tutte le radici

Oscillatore armonico quantistico

- Considero l'equazione di Schrödinger per gli autovalori

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

e prendo un s.o.n.c. di funzioni $u_j(x)$.

- L'hamiltoniana dell'oscillatore armonico è data da

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} + \frac{1}{2}\omega^2x^2$$

- ψ si potrà esprimere come combinazione lineare di queste

$$\psi(x) = \sum_{j=0}^{N-1} c_j u_j(x)$$

- Moltiplicando la prima equazione a destra per $u_i(x)$ e integrando trovo

$$\sum_{j=0}^{N-1} c_j \int u_i(x) \hat{H} u_j(x) dx = E \sum_{j=0}^{N-1} c_j \delta_{ij} = E c_i$$
$$\sum_{j=0}^{N-1} H_{ij} c_j = E c_i$$

Quast'ultima è un'equazione agli autovalori in cui le componenti degli autovettori sono i c_j

Implementazione numerica

- Non posso studiare il problema in un intervallo infinito, perciò devo rinchiudere il mio sistema nell'intervallo $[-L/2, +L/2]$.
- Le soluzioni dell'equazione di una particella libera, che posso utilizzare come base, sono

$$u_j(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{2\pi}{L} jx\right)$$

oppure

$$u_j(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \cos\left(\frac{2\pi}{L} jx\right)$$

- Il potenziale armonico è simmetrico rispetto allo scambio $x \rightarrow -x$ e quindi la parità sarà conservata; perciò, se parto da una base di funzioni pari troverò autovettori pari, e analoga situazione vale per una base dispari.
- Posso quindi limitarmi, per esempio, agli autovettori pari. Gli elementi di matrice, in questo caso, saranno

$$\frac{2}{L} \int_{-L/2}^{L/2} \cos\left(\frac{2\pi}{L} ix\right) \left(\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2\pi}{L} j\right)^2 + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \right) \cos\left(\frac{2\pi}{L} jx\right) dx$$

- A questo punto posso calcolare gli autovalori di \hat{H} e i c_j , e le autofunzioni ψ saranno date da:

$$\psi = \sqrt{\frac{2}{L}} \sum_{j=0}^{N-1} c_j \cos\left(\frac{2\pi}{L} jx\right)$$

Riscalare le equazioni

- Gestire con il computer piccole o grandi costanti fisiche è complicato
- Cerco di liberarmene riscalando le equazioni
- Per l'oscillatore armonico questo significa scrivere

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x \quad \text{e} \quad \varepsilon = \frac{2E}{\hbar\omega}$$

- L'equazione di Schrödinger diventa

$$\psi''(\xi) - \xi^2 \psi(\xi) = -\varepsilon \psi(\xi)$$

- Se l'oscillatore ha autovalori $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$ quello riscalato ha autovalori $\varepsilon_n = 2n + 1$
- calcolando separatamente gli autovalori relativi ad autovettori pari e dispari, mi aspetto le sequenze 3,7,11,... oppure 1,5,9...

Test

Si possono fare alcune verifiche ed esercizi

- per $\omega = 0$ gli elementi di matrice diversi da zero sono solo quelli diagonali
- i valori di L sono arbitrari, come pure l'ordine N della matrice che diagonalizziamo. È necessario verificare che il risultato finale non cambia se si incrementano L e N , purché abbastanza grandi.
- posso cercare di calcolare anche gli autovettori
- quando ho trovato un autovettore seleziono quello più basso che so comportarsi come $e^{-\xi^2/2}$
- faccio un grafico dell'autofunzione in funzione di x
- ripeto tutto il procedimento per il potenziale

$$V(x) = -U_0 \quad -b/2 \leq x \leq b/2$$

ora l'aver risolto l'oscillatore armonico funge da test!