

Ćwiczenie 3

Metoda Hartree-Focka dla atomu berylu

Celem ćwiczenia jest zastosowanie metody Hartree-Focka (HF) do znalezienia przybliżonej nierelatywistycznej energii i funkcji falowej dla stanu podstawowego atomu berylu — kwantowego układu składającego się z jednego jądra o ładunku $Z = 4$ i czterech elektronów.

Hamiltonian elektronowy dla atomu berylu ma postać

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^4 h(i) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^4 \sum_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^4 g(i, j). \quad (1)$$

gdzie $h(i)$ jest operatorem opisującym energię kinetyczną i energię potencjalną (w polu jądra) elektronu i , a $g(i, j)$ opisuje wzajemne oddziaływanie (kulombowskie odpychanie) elektronów i i j . Każdy z operatorów $h(i)$ i $g(i, j)$ ma podobną postać, wystarczy więc znajomość $h(1)$ i $g(1, 2)$

$$h(1) = -\frac{1}{2} \Delta_1 - \frac{4}{r_1}, \quad (2)$$

$$g(1, 2) = \frac{1}{r_{12}}, \quad (3)$$

gdzie $r_1 = |\mathbf{r}_1|$ to odległość elektron-jądro (dla uproszczenia jądro zostało umieszczone w środku układu współrzędnych), a $r_{12} = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ to odległość między dwoma elektronami. Przy definicji $h(1)$ i $g(1, 2)$ zostały użyte jednostki atomowe.

Dla atomu berylu odpowiednia znormalizowana czteroelektronowa funkcja falowa Φ^{HF} , zbudowana z czterech znormalizowanych i wzajemnie ortogonalnych, ale poza tym dowolnych, funkcji jednoelektronowych $\{\psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4\}$, ma postać pojedynczego wyznacznika Slatera

$$\Phi^{\text{HF}}(1, 2, 3, 4) = \sqrt{24} \mathcal{A}_4 [\psi_1(1)\psi_2(2)\psi_3(3)\psi_4(4)], \quad (4)$$

gdzie \mathcal{A}_4 to antysymetryzator działający na elektrony (lub, alternatywnie, na funkcje ψ). Korzystając z pierwszej reguły Slatera-Condona możemy łatwo wyprowadzić wartość oczekiwaną hamiltonianu (1) z funkcją wyznacznikową (4) otrzymując wyrażenie na energię Hartree-Focka układu

$$\begin{aligned} E^{\text{HF}}[\psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4] &= \sum_{i=1}^4 \int \psi_i^*(\mathbf{x}_1) h(1) \psi_i(\mathbf{x}_1) d\mathbf{x}_1 \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{i=1}^4 \sum_{j=1}^4 \left(\iint \psi_i^*(\mathbf{x}_1) \psi_j^*(\mathbf{x}_2) g(1, 2) \psi_i(\mathbf{x}_1) \psi_j(\mathbf{x}_2) d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2 \right. \\ &\quad \left. - \iint \psi_i^*(\mathbf{x}_1) \psi_j^*(\mathbf{x}_2) g(1, 2) \psi_j(\mathbf{x}_1) \psi_i(\mathbf{x}_2) d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2 \right). \end{aligned} \quad (5)$$

Do wykonania obliczeń przy pomocy tego wyrażenia wciąż brakuje nam dokładnej znajomości postaci funkcji jednoelektronowych — fakt ten został przedstawiony w równaniu (5) przez zapisanie energii jako funkcjonału zależnego od zbioru funkcji $\{\psi_i\}$.

Przyjmujemy, że jednoelektronowe funkcje ψ to spinorbitale będące w ogólności skomplikowanymi funkcjami współrzędnych przestrzennych i spinowych elektronu, $\mathbf{x} = (\mathbf{r}, \sigma)$. W podejściu nierelatywistycznym, w którym dodatkowo nie interesują nas własności magnetyczne układu, możemy założyć, że spinorbitale te separują się na iloczyn rzeczywistych funkcji przestrzennych czyli orbitali $\varphi(\mathbf{r})$ i funkcji spinowych $\omega(\sigma)$, $\psi(\mathbf{x}) = \varphi(\mathbf{r})\omega(\sigma)$. Funkcje $\omega(\sigma)$ są w ogólności kombinacjami funkcji α i β o określonym rzucie spinu na oś z . Następnie uproszczenie wynika z faktu, że atom berylu w stanie podstawowym ma konfigurację elektronową $1s^2 2s^2$. Dwa z jego elektronów całkowicie zapełniają powłokę $1s$, a dwa kolejne powłokę $2s$. Układy takiego typu to układy zamkniętopowłokowe, dla których możemy przyjąć, że jedna para spinorbitali tworzona jest z iloczynu jednego orbitala (wciąż jeszcze nieznanego) i czystej funkcji spinowej α lub β . Ten szczególny przypadek metody Hartree-Focka nazywamy ograniczoną metodą Hartree-Focka (RHF — *Restricted Hartree-Fock*). Podejście metody RHF zastosowane do atomu berylu daje nam następujące spinorbitale

$$\psi_1(\mathbf{x}) = \varphi_1(\mathbf{r})\alpha(\sigma), \quad \psi_2(\mathbf{x}) = \varphi_1(\mathbf{r})\beta(\sigma), \quad \psi_3(\mathbf{x}) = \varphi_2(\mathbf{r})\alpha(\sigma), \quad \psi_4(\mathbf{x}) = \varphi_2(\mathbf{r})\beta(\sigma). \quad (6)$$

W ten sposób problem znalezienia czterech spinorbitali ψ redukuje się do problemu znalezienia dwóch orbitali φ (znormalizowanych i wzajemnie ortogonalnych). Po podstawieniu funkcji z równania (6) do wyrażenia na energię z równania (5), przesumowaniu po współrzędnych spinowych, skorzystaniu z faktu że orbitale φ są rzeczywiste i przestawieniu czynników, otrzymujemy

$$\begin{aligned} E^{\text{RHF}}[\varphi_1, \varphi_2] &= 2 \sum_{i=1}^2 \int \varphi_i(\mathbf{r}_1) h(1) \varphi_i(\mathbf{r}_1) d\mathbf{r}_1 \\ &+ 2 \sum_{i=1}^2 \sum_{j=1}^2 \left(\iint \varphi_i(\mathbf{r}_1) \varphi_i(\mathbf{r}_1) g(1, 2) \varphi_j(\mathbf{r}_2) \varphi_j(\mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{2} \iint \varphi_i(\mathbf{r}_1) \varphi_j(\mathbf{r}_1) g(1, 2) \varphi_j(\mathbf{r}_2) \varphi_i(\mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \right). \end{aligned} \quad (7)$$

Kolejnym, bardzo popularnym, przybliżeniem jest przyjęcie, że orbitale można przedstawić jako rozwinięcia w pewnej skończonej, M -elementowej bazie funkcji

$$\varphi_1(\mathbf{r}) = \sum_{\mu=1}^M c_{\mu,1} \chi_{\mu}(\mathbf{r}), \quad \varphi_2(\mathbf{r}) = \sum_{\mu=1}^M c_{\mu,2} \chi_{\mu}(\mathbf{r}). \quad (8)$$

Aby poprawnie opisać zachowanie się orbitala dla małych (ostrze) i dużych (odpowiednio szybko znikanie) odległości elektron-jądro, należałoby użyć jako funkcji bazy prymitywnych orbitali Slaterowskich, ale dla uproszczenia obliczeń najczęściej wykorzystuje się w tym celu prymitywne orbitale Gaussowskie. Dla atomu berylu wystarczą funkcje o symetrii $1s$ (znormalizowane) scentrowane na jądrze

$$\chi_{\mu}(\mathbf{r}) = \chi(\alpha_{\mu}, \mathbf{r}) = \left(\frac{2\alpha_{\mu}}{\pi} \right)^{\frac{3}{4}} e^{-\alpha_{\mu} r^2} \quad (9)$$

o odpowiednio szerokim zakresie wykładników α_{μ} . Funkcje tej bazy nie są wzajemnie ortogonalne! W kolejnym przybliżeniu założymy, że α_{μ} nie są zupełnie dowolne, ale że tworzą ciąg geometryczny (na to przybliżenie używa się określenia *even tempered*)

$$\alpha_{\mu} = ab^{\mu-1}, \quad \mu = 1, \dots, M. \quad (10)$$

Dla ustalonej długości rozwinięcia M oraz wartości parametrów a i b otrzymujemy ostateczne wyrażenie na energię Hartree-Focka w skończonej bazie funkcyjnej

$$E^{\text{RHF}}[\{c_{\mu,1}\}, \{c_{\mu,2}\}] = \sum_{\mu=1}^M \sum_{\nu=1}^M \left(2 \sum_{i=1}^2 c_{\mu,i} c_{\nu,i} \right) h_{\mu\nu} + \frac{1}{2} \sum_{\mu=1}^M \sum_{\nu=1}^M \sum_{\rho=1}^M \sum_{\sigma=1}^M \left(2 \sum_{i=1}^2 c_{\mu,i} c_{\nu,i} \right) \left[(\mu\nu|\rho\sigma) - \frac{1}{2}(\mu\sigma|\rho\nu) \right] \left(2 \sum_{j=1}^2 c_{\rho,j} c_{\sigma,j} \right), \quad (11)$$

gdzie

$$h_{\mu\nu} = \int \chi_{\mu}(\mathbf{r}_1) h(1) \chi_{\nu}(\mathbf{r}_1) d\mathbf{r}_1, \quad (12)$$

$$(\mu\nu|\rho\sigma) = g_{\mu\nu\rho\sigma} = \iint \chi_{\mu}(\mathbf{r}_1) \chi_{\nu}(\mathbf{r}_1) g(1,2) \chi_{\rho}(\mathbf{r}_2) \chi_{\sigma}(\mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2. \quad (13)$$

Jedynymi nieznanymi parametrami wariacyjnymi pozostają liniowe współczynniki rozwinięcia orbitali.

Bazując na równaniu (11), w obliczeniach będziemy używali sformułowania metody RHF wykorzystującego macierz gęstości. Dla atomu berylu jest ona zdefiniowana jako

$$\mathbf{D} = 2(\mathbf{c}_1 \mathbf{c}_1^T + \mathbf{c}_2 \mathbf{c}_2^T) \quad \text{czyli} \quad D_{\mu\nu} = 2(c_{\mu,1} c_{\nu,1} + c_{\mu,2} c_{\nu,2}), \quad (14)$$

gdzie \mathbf{c}_i to kolumna współczynników definiująca orbital φ_i w równaniu (8). Przy pomocy \mathbf{D} definiujemy macierz operatora kulombowskiego

$$J(\mathbf{D})_{\mu\nu} = \sum_{\rho=1}^M \sum_{\sigma=1}^M (\mu\nu|\rho\sigma) D_{\rho\sigma} \quad (15)$$

i wymiennego

$$K(\mathbf{D})_{\mu\nu} = \sum_{\rho=1}^M \sum_{\sigma=1}^M (\mu\sigma|\rho\nu) D_{\rho\sigma}, \quad (16)$$

gdzie $(\mu\nu|\rho\sigma)$ to, zgodnie z równaniem (13), odpowiednie całki dwuelektronowe. Macierze $\mathbf{J}(\mathbf{D})$ i $\mathbf{K}(\mathbf{D})$ wspólnie tworzą operator efektywnego pola generowanego przez gęstość elektronową

$$\mathbf{G}(\mathbf{D}) = \mathbf{J}(\mathbf{D}) - \frac{1}{2}\mathbf{K}(\mathbf{D}). \quad (17)$$

Służą on do znalezienia energii układu

$$E = \text{tr} \left(\mathbf{D} \left(\mathbf{h} + \frac{1}{2}\mathbf{G}(\mathbf{D}) \right) \right), \quad (18)$$

gdzie $\text{tr}(\mathbf{A})$ oznacza ślad macierzy \mathbf{A} , i stworzenia macierzy operatora Focka

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}(\mathbf{D}) = \mathbf{h} + \mathbf{G}(\mathbf{D}). \quad (19)$$

Przez rozwiązanie uogólnionego problemu własnego dla macierzy operatora Focka

$$\mathbf{F}\mathbf{c}_i = \varepsilon_i \mathbf{S}\mathbf{c}_i, \quad (20)$$

gdzie \mathbf{S} to macierz nakrywania

$$S_{\mu\nu} = \int \chi_\mu(\mathbf{r}_1)\chi_\nu(\mathbf{r}_1) d\mathbf{r}_1, \quad (21)$$

otrzymujemy nowe (prawdopodobnie lepsze) przybliżenie do rozwinięcia orbitali φ_1 i φ_2 w zadanej bazie (czyli wektory współczynników \mathbf{c}_1 i \mathbf{c}_2 odpowiadające najniższym wartościom własnym ε_1 i ε_2). Macierze \mathbf{J} , \mathbf{K} , \mathbf{G} i \mathbf{F} oraz energia E zależą od macierzy gęstości \mathbf{D} z równania (14), która jest konstruowana z rozwiązań problemu własnego (20) dla macierzy operatora Focka, więc rozwiązań musimy poszukiwać iteracyjnie aż do uzgodnienia się wyników z dwóch kolejnych iteracji (jest to tak zwana metoda pola samouzgodnionego — SCF, czyli *self consistent field*). Najprostszym warunkiem samouzgodnienia jest równość energii (18) w dwóch kolejnych iteracjach. Procedurę można wystartować z dwóch wektorów własnych odpowiadających najniższym energiom własnym z diagonalizacji macierzy hamiltonianu jednoelektronowego

$$\mathbf{h}\mathbf{c}_i = \varepsilon_i\mathbf{S}\mathbf{c}_i. \quad (22)$$

Uogólnione problemy własne z równań (20) i (22) mają podobną postać

$$\mathbf{A}\mathbf{c}_i = \varepsilon_i\mathbf{B}\mathbf{c}_i. \quad (23)$$

Dokonując rozkładu Choleskiego symetrycznej i dodatniookreślonej macierzy \mathbf{B}

$$\mathbf{B} = \mathbf{L}\mathbf{L}^T, \quad (24)$$

gdzie \mathbf{L} jest macierzą dolnotrójkątną, możemy uogólniony problem (23) zamienić na zwykły problem własny

$$\mathbf{A}'\mathbf{d}_i = \varepsilon_i\mathbf{d}_i, \quad (25)$$

gdzie

$$\mathbf{A}' = \mathbf{L}^{-1}\mathbf{A}(\mathbf{L}^{-1})^T. \quad (26)$$

Macierz \mathbf{A}' jest symetryczna, jeśli \mathbf{A} jest symetryczna, więc problem (25) możemy rozwiązać stosując na przykład metodę obrotów Jacobiego. Wartości własne ε_i problemu (23) i (25) są takie same, a szukane wektory własne znajdziemy dokonując transformacji

$$\mathbf{c}_i = (\mathbf{L}^{-1})^T\mathbf{d}_i. \quad (27)$$

Wykonanie zadania/wskazówki:

W programie wxMaxima możliwe jest wykonywanie obliczeń używając liczb zmiennoprzecinkowych podwójnej precyzji. Skorzystamy z tej możliwości.

1. Korzystając z wyników z zadania 2 z ćwiczenia 2 zdefiniować wyrażenia na całki nakrywania (21), elementy macierzowe hamiltonianu jednoelektronowego (12) i całki dwuelektronowe (13) w zależności od wartości wykładników funkcji gaussowskich $1s$ o postaci (9)


```

sij(a1,a2):=bfloat(...);
hij(a1,a2):=bfloat(...);
gijkl(a1,a2,a3,a4):=bfloat(...);

```
2. Ustalić ładunek jądra na $Z = 4$.

3. Ustalić parametry M , a , b definiujące wykładniki bazy gaussowskiej. Na etapie testowania programu lepiej użyć mniejszego M , ale ostateczne obliczenia powinny być wykonane dla większej wartości.

M	a	b	energia E^{RHF} (program DALTON)	
			pierwsza iteracja	uzbieżniona
3	0.221217	8.39208	-13.582606595479	-13.710885046888361
10	0.061811	3.12682	-13.712190916012	-14.571737929385538

4. Wygenerować listę wykładników, korzystając ze wzoru (10), i zachować ją w zmiennej `wykl` (\rightarrow `makelist`).
5. Wygenerować macierze \mathbf{S} i \mathbf{h} i zachować je w zmiennych, odpowiednio, `matS` i `matH` (\rightarrow `genmatrix`).
6. Dokonać rozkładu Choleskiego [równanie (24)] macierzy \mathbf{S} i zachować wynik, macierz \mathbf{L} , w zmiennej `matL` (\rightarrow `cholesky`). Obliczyć \mathbf{L}^{-1} i zachować wynik w zmiennej `invL` (\rightarrow `invert`).
7. Dokonać transformacji (26) macierzy \mathbf{h} (mnożenie macierzy $i \rightarrow$ `transpose`) i przekonać się, że wynik z dokładnością numeryczną jest macierzą symetryczną. Dosymetryzować wynik $[\frac{1}{2}(\mathbf{h}' + \mathbf{h}'^T)]$, rozwiązać problem własny (\rightarrow `eigens_by_jacobi`), zachować listę wartości własnych w zmiennej `val`, a przetransformowaną zgodnie z równaniem (27) macierz wektorów własnych w zmiennej `vec`.
8. POCZĄTEK PROCEDURY ITERACYJNEJ
Zainicjować licznik iteracji `iter:0`; i listę energii `listE:[]`;
9. Obliczenie energii
- Zachować w zmiennych `coeff1` i `coeff2` kolumny macierzy `vec` (\rightarrow `col`) odpowiadające najniższym wartościom własnym z listy `val`. Uwaga, nie muszą to być dwie pierwsze wartości!!!
 - Wygenerować macierz \mathbf{D} zgodnie z równaniem (14) i zachować w zmiennej `matD`.
 - Wygenerować macierz $\mathbf{J}(\mathbf{D})$ zgodnie z równaniem (15) i zachować w zmiennej `matJ`
 - prostszy sposób: zagnieżdżone użycie jednego \rightarrow `genmatrix` i dwóch \rightarrow `sum`,
 - trudniejszy sposób: zagnieżdżone użycie dwóch \rightarrow `genmatrix`, skombinowane ze sprytnym zastosowaniem \rightarrow `mat_trace`.
 - Analogicznie wygenerować macierz $\mathbf{K}(\mathbf{D})$ zgodnie z równaniem (16) i zachować w zmiennej `matK`.
 - Obliczyć macierz $\mathbf{G}(\mathbf{D})$ zgodnie z równaniem (17) i zachować w zmiennej `matG`.
 - Obliczyć energię zgodnie z równaniem (18) i zachować w zmiennej `E`.
 - Zwiększyć licznik `iter` o jeden i dołączyć `E` do listy `listE` (\rightarrow `append`).
10. Jeśli energia w porównaniu z poprzednią iteracją nie zmieniła się — zakończ, jeśli nie — kontynuuj.
11. Obliczyć macierz \mathbf{F} zgodnie z równaniem (19). Dalsze postępowanie tak jak w punkcie 7 z macierzą \mathbf{h} zastąpioną przez \mathbf{F} .
12. Powrót do punktu 9.

Zagadnienia do opisu:

1. Pokazać, że uogólniony problem własny (23) jest równoważny problemowi własnemu (25), przy założeniu transformacji (26) i (27) wykonanych przy użyciu macierzy \mathbf{L} zdefiniowanej w równaniu (24).

Wskazówka: Dla dowolnej macierzy kwadratowej \mathbf{A} mamy $\mathbf{A}\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{A} = \mathbf{1}$, oraz $(\mathbf{A}^{-1})^T = (\mathbf{A}^T)^{-1}$.

2. W punkcie 7 z listy **Wykonanie zadania/wskazówki** diagonalizujemy macierz hamiltonianu jednoelektronowego (energia kinetyczna i oddziaływanie z jądrem) bez uwzględnienia oddziaływania pojedynczego elektronu z gęstością elektronową generowaną przez pozostałe elektrony. Efektywnie jest to więc rozwiązanie problemu dla jonu wodoropodobnego Be^{3+} .

(a) Porównać znalezione energie orbitalne z energiami dokładnymi (ilość, dokładność odtworzenia wartości).

(b) Dokładne funkcje falowe orbitali 1s i 2s mają postać

$$\varphi_{1s}(Z, \mathbf{r}) = \frac{Z^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{\pi}} e^{-Zr}, \quad \varphi_{2s}(Z, \mathbf{r}) = \frac{Z^{\frac{3}{2}}}{4\sqrt{2\pi}} (2 - Zr) e^{-\frac{Zr}{2}}. \quad (28)$$

Porównać (rysunek jest tu bardzo wskazany!) radialne gęstości prawdopodobieństwa związane ze znalezionymi orbitalami z dokładnymi radialnymi gęstościami prawdopodobieństwa (ilość i położenie węzłów, położenie globalnego maksimum, ogólne podobieństwo funkcji znalezionej i dokładnej — na przykład, czy bardziej skupiona, czy też bardziej rozciągnięta).

Wskazówki:

Orbitale znalezione konstruujemy korzystając z równań (8) i (9) (\rightarrow sum). Dla porządku możemy wektory współczynników \mathbf{c}_1 i \mathbf{c}_2 , będące odpowiednimi kolumnami macierzy \mathbf{vec} , przechować w wektorach `coeff1` i `coeff2` (\rightarrow `col`). i -ty wykładnik dostajemy jako `wykl[i]`, a i -ta składowa wektora \mathbf{c}_1 to `coeff1[i][1]` (jedynka w drugim nawiasie kwadratowym potrzebna jest ze względu na składnię programu `wxMaxima` i sposób przechowywania przez nią wektorów).

Dla funkcji zależnej tylko od odległości elektron-jądro a niezależnej od kątów (jak wszystkie rozpatrywane w zadaniu funkcje), $f(\mathbf{r}) = f(r)$, radialna gęstość prawdopodobieństwa jest zdefiniowana jako

$$P_f(r) = 4\pi r^2 f(r)^2. \quad (29)$$

3. Podać wartość energii E_i w kolejnych iteracjach i procedury SCF. Naszkicować wykres (w skali logarytmicznej na osi energii) wielkości $\Delta E_i = |E_i - E_\infty|$ — różnicy energii otrzymanej w danej iteracji i energii uzbieźnionej otrzymanej z obliczeń programem DALTON. Przedyskutować wyniki.

4. Rozpatrzmy energie orbitalne i postać funkcyjną orbitali.

(a) Jak zmieniły się (jak bardzo i w którą stronę) energie orbitalne w porównaniu z wartościami uzyskanymi z diagonalizacji macierzy \mathbf{h} ?

(b) Które prymitywne funkcje gaussowskie dominują [mają najwyższe, co do modułu, wartości współczynników w rozwinięciach (8)] w orbitalu φ_1 , a które w orbitalu φ_2 ?

(c) Porównać, podobnie jak w punkcie 2b, radialne gęstości prawdopodobieństwa związane z uzbieźnionymi orbitalami z dokładnymi radialnymi gęstościami prawdopodobieństwa dla jonu wodoropodobnego Be^{3+} . Czy uwzględnienie przybliżonego oddziaływania elektronu z pozostałymi elektronami w układzie bardzo zmieniło kształt radialnych gęstości prawdopodobieństwa?

- (d) Oszacować (dwie cyfry znaczące), jaki powinien być ładunek $Z = Z_1$ funkcji $\varphi_{1s}(Z, \mathbf{r})$ z równania (28) aby radialna gęstość prawdopodobieństwa związana z tą funkcją miała maksimum w tym samym miejscu co radialna gęstość prawdopodobieństwa związana z $\varphi_1(\mathbf{r})$. Podobnie znaleźć ładunek $Z = Z_2$ taki, aby globalne maksima radialnej gęstości prawdopodobieństwa dla $\varphi_{2s}(Z, \mathbf{r})$ i $\varphi_1(\mathbf{r})$ znajdowały się w tym samym miejscu.

Czy radialne gęstości prawdopodobieństwa dla $\varphi_{1s}(Z_1, \mathbf{r})$ i φ_1 , oraz $\varphi_{2s}(Z_2, \mathbf{r})$ i φ_2 mają podobny przebieg także dla innych odległości?

Jak Z_1 i Z_2 porównują się z wartością $Z = 4$. Zinterpretować wyniki.

Przyspieszony kurs programu wxMaxima

Enter — wykonanie instrukcji

Shift+Enter — przejście do następnej linii w jednej komórce

; — zakończenie instrukcji/oddzielenie kolejnych instrukcji, wypisuje wynik

\$ — zakończenie instrukcji/oddzielenie kolejnych instrukcji, NIE wypisuje wyniku

tworzenie listy, której elementy generowane są ze wzoru

`makelist(wzór zależny od zmiennej, zmienna całkowita, początek przedziału, koniec przedziału)`

`makelist(i^2, i, 1, 3)` — wynik [1, 4, 9]

odniesienie się do istniejącego elementu listy: `lista[3]`

tworzenie listy pustej/czyszczenie listy: `lista: []`

dodawanie elementu (w ogólności innej listy) na końcu listy: `append(lista, [-2.56])`

działania matematyczne na liście wykonywane są element po elemencie: `log(lista)`

tworzenie macierzy, której elementy generowane są ze wzoru

`genmatrix(wyrażenie lambda, ilość wierszy, ilość kolumn)`

gdzie *wyrażenie lambda* to

`lambda([zmienna1 (nr wiersza), zmienna2 (nr kolumny)], wzór zależny od zmiennej1 i zmiennej2)`

`genmatrix(lambda([i, j], i^2+j) , 2, 2)` — wynik $\begin{bmatrix} 2 & 3 \\ 5 & 6 \end{bmatrix}$

dodawanie macierzy, operator +: `A+B`

mnożenie macierzy przez liczbę, operator *: `2*A`

mnożenie macierzy (odpowiednie wymiary muszą być zgodne), operator .: `A.B`

obliczanie macierzy odwrotnej: `invert(A)`

transponowanie macierzy: `transpose(A)`

obliczanie śladu macierzy: `mat_trace(A)`

pojedynczy wiersz macierzy: `row(A, 2)`

pojedyncza kolumna macierzy: `col(A, 1)`

rozkład Choleskiego symetrycznej macierzy kwadratowej w wysokiej precyzji zmiennoprzecinkowej

`cholesky(A, bigfloatfield)` — wynikiem jest lista dwuelementowa

rozwiązanie problemu własnego dla symetrycznej macierzy kwadratowej metodą Jacobiego w wysokiej precyzji zmiennoprzecinkowej

`eigens_by_jacobi(A, bigfloatfield)` — wynikiem jest lista dwuelementowa

element 1 — lista wartości własnych

element 2 — macierz, której kolumnami są wektory własne

obliczanie sumy, której składniki generowane są ze wzoru

`sum(wzór zależny od zmiennej, zmienna całkowita, początek przedziału, koniec przedziału)`

`sum(x^i, i, 1, 3)` — wynik $x+x^2+x^3$