Prof. Jan Kierfeld
jan.kierfeld@tu-dortmund.de

Sommersemester 2016
Technische Universität Dortmund

Computational Physics
Übungsblatt 9

Ausgabe: 17.06.2016 Abgabe: 24.06.2016

Aufgabe 1. Matrixdiagonalisierung (10 P.)

Gegeben sei die symmetrische 4x4 Matrix

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & -2 & 2 & 4 \\ -2 & 3 & -1 & 0 \\ 2 & -1 & 6 & 3 \\ 4 & 0 & 3 & 5 \end{pmatrix} \tag{1}$$

a) Bestimmen Sie die Eigenwerte der symmetrischen Matrix **A** mit Hilfe der C++ library **Eigen** (Eigen: `http://www.eigen.tuxfamily.org`).

Als Lösung Eigenwerte einschicken.

b) Bestimmen Sie die Eigenwerte

entweder mit der Potenzmethode: Wählen Sie dazu selbstständig einen Startvektor $\boldsymbol{v}_0$ sowie eine geeignete Anzahl an Iterationen.

oder mit der Jacobi-Rotation: Iterieren Sie dabei solange, bis für die Summe der Betragsquadrate der Nicht-Diagonalelemente gilt:

$$\mathrm{off}(\mathbf{A}') = \sum_{r \neq s} |a_{rs}|^2 < 10^{-6}. \tag{2}$$

Vergleichen Sie anschließend Ihr Ergebnis mit dem Resultat aus a).

Als Lösung Eigenwerte einschicken.

(Kontrollergebnis: betragsmäßig größter Eigenwert $\lambda_1 \simeq 10.6993$)

Aufgabe 2. Anharmonischer Oszillator (20 P.)

In der Quantenmechanik kann die numerische Lösung der stationären Schrödingergleichung auf die Diagonalisierung einer endlich-dimensionalen Matrix zurückgeführt werden, indem man das quantenmechanische System in einem geeigneten endlich-dimensionalen Unterraum seines Hilbertraumes betrachtet.

Hier sollen Sie auf diese Weise die Energieeigenwerte des anharmonischen Oszillators mit dem Hamiltonoperator

$$\hat{H} \quad = \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 + \lambda x^4 \tag{3}$$

numerisch berechnen.

a) In welchen Einheiten müssen Sie Längen ($x = \alpha\xi$) und Energien ($E = \beta\epsilon$) messen, um die stationäre Schrödingergleichung in die dimensionslose Form

$$\left[-\partial_\xi^2 + \xi^2 + \tilde{\lambda}\xi^4\right]\psi(\xi) = \epsilon\psi(\xi) \tag{4}$$

zu bringen? Wie lautet die resultierende Beziehung zwischen dem dimensionslosen Störungsparameter $\tilde{\lambda}$ und dem ursprünglichen λ?

Man kann nun eine Matrixdarstellung in einem endlich-dimensionalen Unterraum auf verschiedene Arten, d.h. in verschiedenen Darstellungen gewinnen. Wir betrachten in b) die Ortsdarstellung und in c) die Besetzungszahldarstellung (bezüglich des ungestörten Problems):

b) Um aus der Ortsdarstellung eine endlich-dimensionale Darstellung zu bekommen, müssen wir (i) den Ortsraum diskretisieren mit $\xi_n = n\Delta\xi$ und (ii) die Koordinate ξ nur auf einem endlichen Intervall $\xi \in [-L, L]$ betrachten. Diese beiden Schritte wurden auch in Übung 6, Aufgabe 1 durchgeführt. Der Hamiltonoperator nimmt dann die Matrixform

$$\begin{aligned} H_{nm} &= \langle \xi_n|\hat{H}|\xi_m\rangle \\ &= -\frac{1}{(\Delta\xi)^2}\left(\delta_{n,m-1} + \delta_{n,m+1} - 2\delta_{nm}\right) + \left[(\Delta\xi)^2 n^2 + \tilde{\lambda}(\Delta\xi)^4 n^4\right]\delta_{nm} \end{aligned} \tag{5}$$

an, wobei die Indizes n, m nun endlich viele Werte $n, m = -L/\Delta\xi, ..., L/\Delta\xi$ annehmen können.

Bestimmen Sie die 10 niedrigsten Energieeigenwerte für $\tilde{\lambda} = 0.2$ näherungsweise numerisch, indem Sie die Matrix (5) diagonalisieren auf einem durch $L = 10$ gegebenen Intervall und mit $\Delta\xi = 0.1$ wie in Übung 6, Aufgabe 1. Sie sollen dazu wieder die entsprechenden Routinen aus dem Eigen-Paket verwenden. Betrachten Sie zuerst zur Kontrolle den Fall $\lambda = 0$, der das bekannte Resultat $\epsilon_n = 2(n + 1/2)$ liefern sollte.

Als Lösung Eigenwerte einschicken.

c) Nun wollen wir für den gleichen Hamiltonoperator eine endlich-dimensionale Darstellung aus der Besetzungszahldarstellung gewinnen. Dazu verwenden wir die Besetzungszahl-Eigenzustände $|n\rangle$ des ungestörten Oszillators ($\lambda = 0$). Wir berechnen dazu zunächst die Matrixelemente

$$H_{nm} = \langle n|\hat{H}|m\rangle \tag{6}$$

Wir verwenden Erzeuger $\hat{a}^+ = (\xi - \partial_\xi)/\sqrt{2}$ und Vernichter $\hat{a} = (\xi + \partial_\xi)/\sqrt{2}$ und schreiben die Anharmonizität mittels $\xi = (\hat{a} + \hat{a}^+)/\sqrt{2}$ um. Nach längerer Rechnung (wer möchte, kann selbst nachrechnen...) erhält man folgendes Ergebnis für den ξ^4-Term:

$$
\begin{aligned}
\langle n|\xi^4|m\rangle \quad = \quad & \frac{1}{4}\Bigg([m(m-1)(m-2)(m-3)]^{1/2}\,\delta_{n,m-4} \\
& + [(m+1)(m+2)(m+3)(m+4)]^{1/2}\,\delta_{n,m+4} \\
& + [m(m-1)]^{1/2}\,(4m-2)\delta_{n,m-2} + [(m+1)(m+2)]^{1/2}\,(4m+6)\delta_{n,m+2} \\
& + (6m^2+6m+3)\delta_{n,m}\Bigg)
\end{aligned}
\tag{7}
$$

Prüfen Sie zuerst nach, dass die durch (7) gegebene Matrix wirklich hermitesch bzw. symmetrisch ist. Wie lauten dann die Matrixelemente H_{nm} für den gesamten Hamiltonoperator in dieser Darstellung?

Man berechnet nun die Energieeigenwerte für $\tilde{\lambda} = 0.2$ näherungsweise numerisch, indem man H_{nm} in einem endlich-dimensionalen Unterraum $n = 0, 1, ..., N$ diagonalisiert. Berechnen Sie auf diese Art die 10 niedrigsten Energieeigenwerte für $N = 50$ mit Hilfe der Eigen-Routinen.

Als Lösung Eigenwerte einschicken.

d) Vergleichen Sie die Ergebnisse aus b) und c). Welche Ergebnisse halten Sie für genauer und warum? (Tipp: Dazu bei b) die Diskretisierung verändern bzw. bei c) N verändern und beobachten, wie sich die Ergebnisse ändern.)

Als Lösung Eigenwerte für verschiedene Diskretisierungen bzw. N und einen Satz zur Interpretation Ihres Ergebnisses einschicken.