

Univerza *v Ljubljani*  
Fakulteta *za matematiko in fiziko*



VRM  
**Druga naloga**

**Andrej Kolar - Požun**

19. 2. 2019

Spet rešujemo 1D Schrödingerjevo enačbo v brezdimenzijskih enotah, tokrat s spektralnimi metodami:

$$-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t) + V(x) \Psi(x, t) = i \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t)$$

## Opis metode

Ves čas bomo obravnavali potencial

$$V(x) = \frac{1}{2}x^2 + \lambda x^4$$

Hamiltonjan razdelimo na znan, rešen del in pertrubacijo:

$$H = H_0 + \lambda H_1$$

$$H_1 = x^4$$

$H_0$  je harmonski oscilator, katerega lastne funkcije  $\phi_n^0$  in energije  $E_n^0$  poznamo:

$$\phi_n^0(x) = \frac{1}{\pi^{1/4} \sqrt{2^n n!}} H_n(x) \exp(-x^2/2)$$

$$E_n^0 = n + \frac{1}{2}$$

V tej bazi izračunamo matriko  $H$  kot  $H_{jk} = \langle \phi_j^0 | H | \phi_k^0 \rangle$   $j, k = 0, 1, \dots, K$  za nek  $K$ .

Lastno rešitev za celoten potencial nastavimo kot

$$\Psi = \sum_{n=0}^K c_n \phi_n^0$$

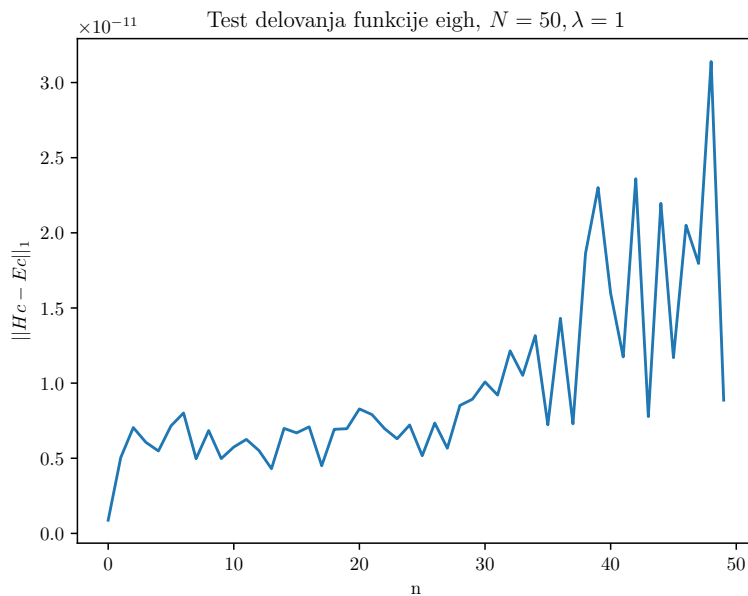
Koeficiente razvoja in energijo pridobimo z diagonalizacijo  $H$ :

$$H\vec{c} = E\vec{c}$$

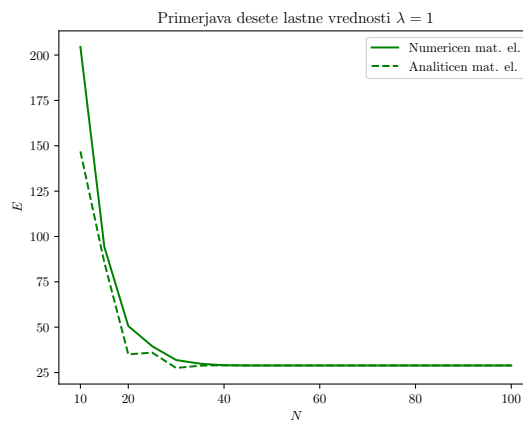
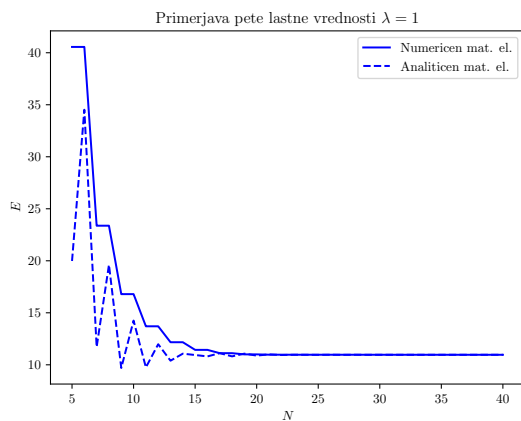
Potrebovali bomo torej vrednost matričnega elementa  $\langle \phi_j^0 | x^4 | \phi_k^0 \rangle$ . Spomnimo se, da to lahko zapisemo s pomočjo bozonskih operatorjev  $x = \frac{1}{\sqrt{2}}(a + a^\dagger)$ . Z uporabo lastnosti bozonskih operatorjev vidimo, da velja  $x_{ij} = \langle \phi_j^0 | x | \phi_k^0 \rangle = \frac{1}{2} \sqrt{j+k+1} \delta_{|i-j|,1}$ . Če vmes vrnemo identiteto, vidimo, da lahko matrični element  $\langle \phi_j^0 | x^4 | \phi_k^0 \rangle$  dobimo s potenciranjem te matrike na četrto.

## Prva naloga

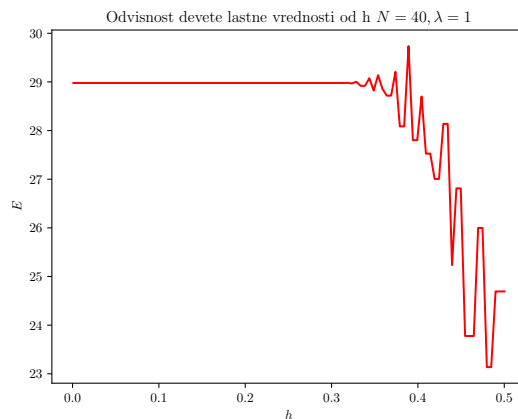
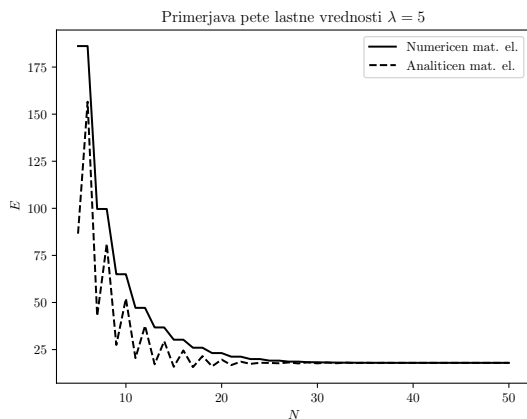
Lotimo se računanja lastnih stanj in energij motenega hamiltonjana z  $\lambda \neq 0$ . Diagonalizirali bomo matriko  $H_{ij}$  v bazi osnovnih stanj nemotenega hamiltonjana  $\lambda = 0$ . Uporabljal bom Scipy metodo `eigh`, ki diagonalizira hermitske matrike. Vemo, da mora biti hamiltonjan hermitski, zato bom vedno računal le zgornje trikotni del in ga primerno preslikal.



Za začetek sem preveril, kako se obnese metoda eigh. Na y osi je napaka različnih lastnih vektorjev/vrednosti  $\|Hc - Ec\|_1$ , na x osi pa zaporedna lastna vrednost in vektor.  $N$  predstavlja velikost matrike  $H$ . Napaka je praktično nič.

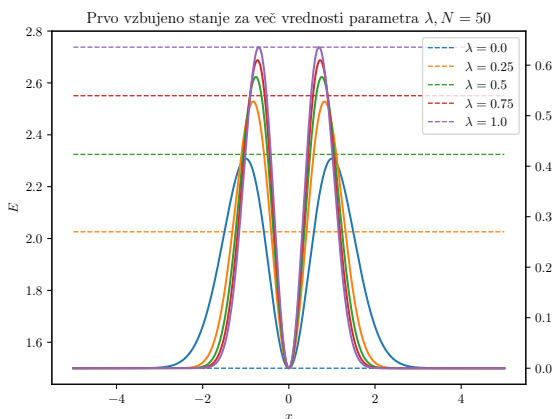
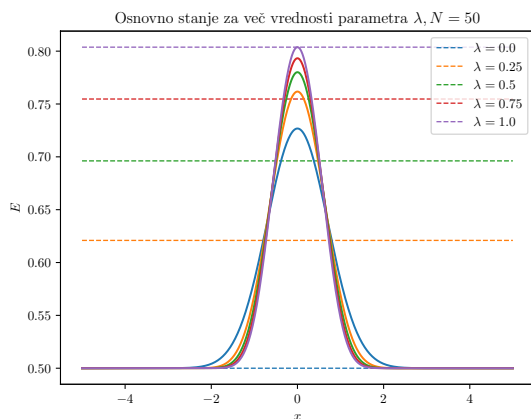


Tu sem gledal, kako se peta oz. deseta najnižja lastna vrednost spreminja z povečevanjem velikosti matrike. Grobo izgleda, da bomo varni, če je naša matrika približno štirikrat večja. Opazimo tudi, da ima analitični izračun matričnih elementov manjšo napako pri premajhnem  $N$ , k neki konstantni vrednosti pa skonvergirata približno enako hitro.

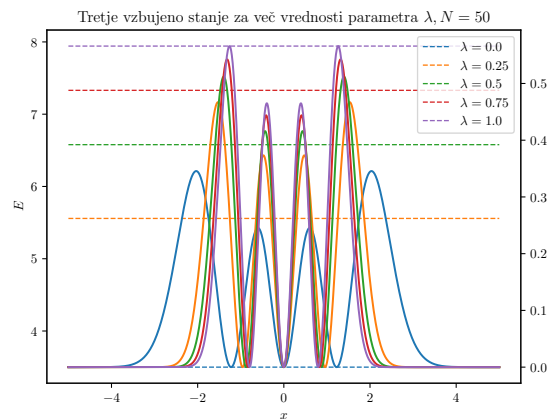
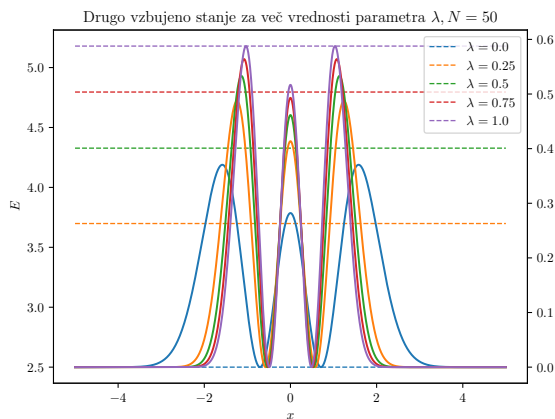


Na levi sem gledal še primer  $\lambda = 5$ . Po pričakovanjih je v tem primeru potrebna še večja matrika, vendar tukaj tako velikih  $\lambda$  ne bom gledal in se v to odvisnost ne bom poglobljaj. Na desni sem gledal še odvisnost od  $h$ , pri fiksnem  $L = 10$ . Odvisnost od  $h$  se pojavi v numeričnem izračunu matričnih elementov. Izgleda, da je tu že  $h = 0.3$  dovolj vendar bom zaradi varnosti kot do zdaj ostal pri  $h = 0.005$ , saj dela metoda dovolj hitro.

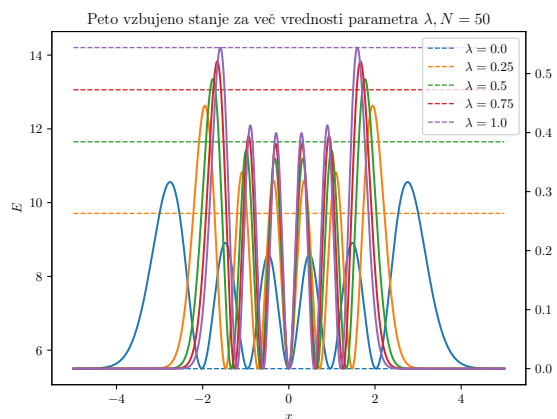
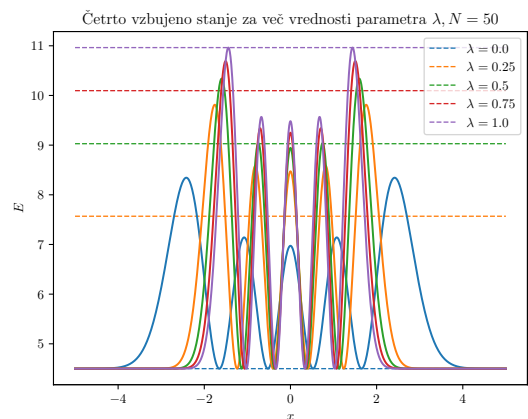
Poglejmo si sedaj še nekaj lastnih stanj anharmonskega oscilatorja:



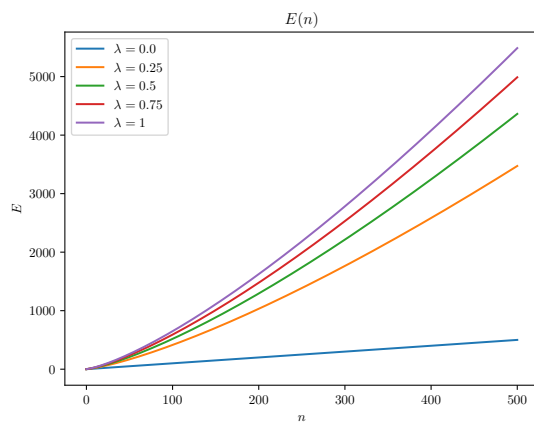
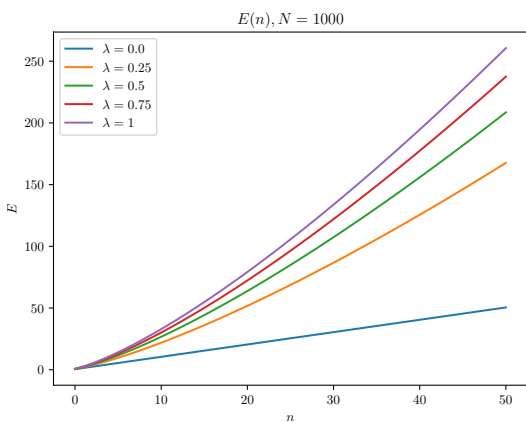
S črtkanimi črtami so prikazane energije (leva y os) s polnimi pa  $|\Psi|^2$  (desna y os). Večanje parametra  $\lambda$  seveda seveda viša energije, lastne funkcije pa se grobo rečeno ožajo in višajo.



Podobno opazimo tudi za naslednji vzbujeni stanji.



In še naslednji.

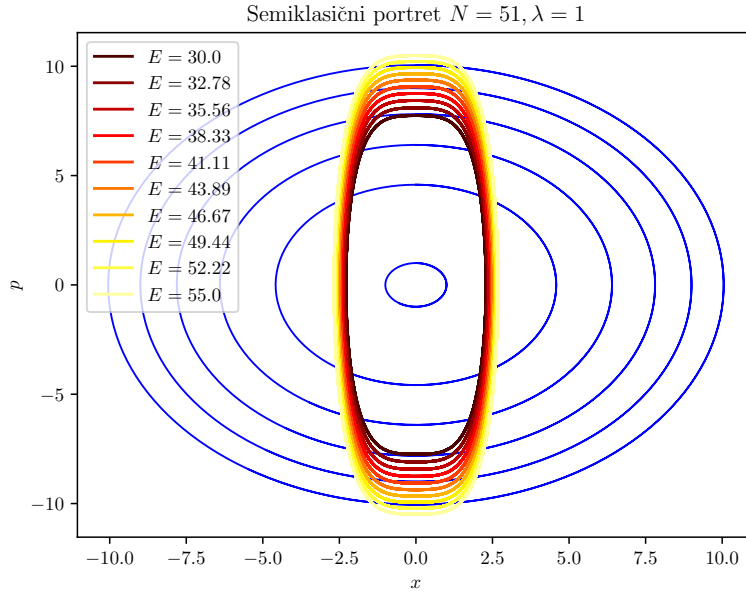


Še odvisnost energij od zaporedne številke vzbujenih stanj za več  $\lambda$ . Tudi za majhne vrednosti  $\lambda$  je energija takoj veliko višja in strmeje narašča. Pri velikih  $n$  opazimo, da celo nekako spremeni obliko.

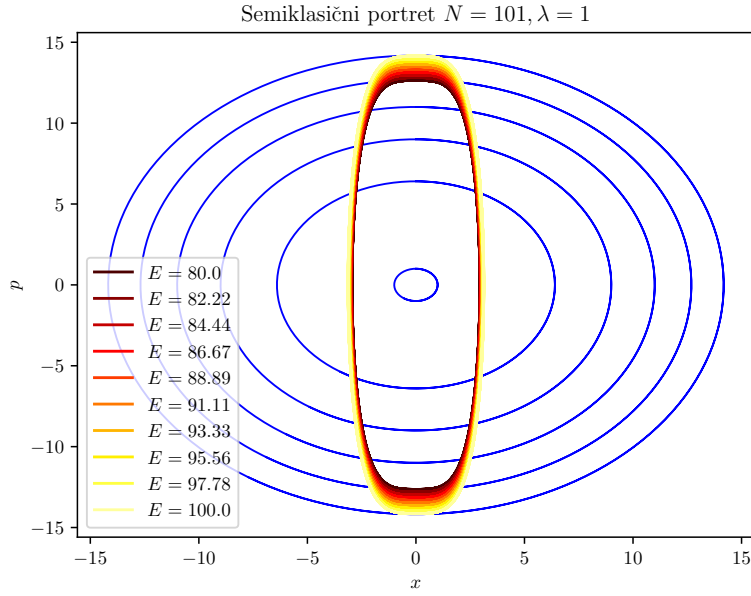
Poglejmo še, kaj nam da klasičen izračun. Hamiltonove enačbe se glasijo:

$$\begin{aligned}\dot{p} &= -x - 4\lambda x^3 \\ \dot{x} &= p\end{aligned}$$

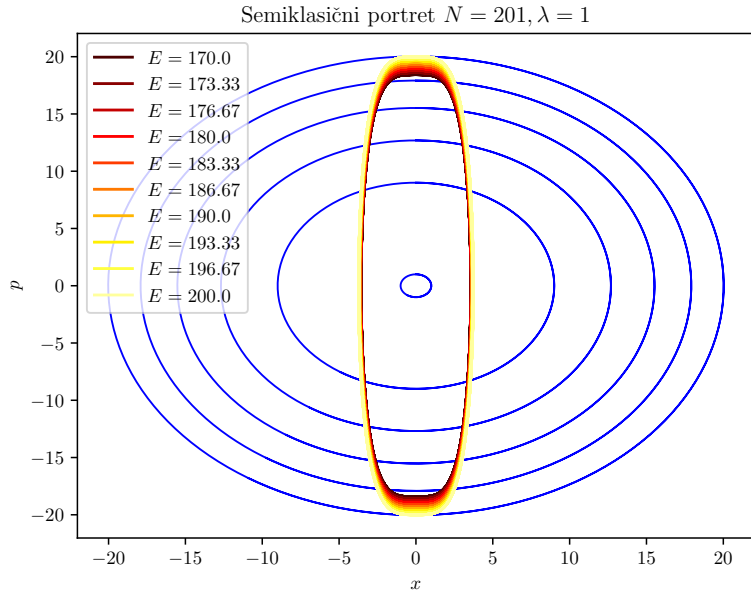
S pomočjo Thomas-Fermijevega pravila lahko zdaj semiklasično ocenimo število skonvergiranih stanj.



Modri krogi predstavljajo nivojnice harmonskega oscilatorja, največja usteza energiji, ki pripada 50. vzbujenem stanju torej  $N = 51$ . Ploščina le-te je  $2\pi 50.5$ . Hkrati je prikazano več nivojnic za anharmonski oscilator z  $\lambda = 1$ . Notri še pride tista, ki ima energijo približno 49.5 (slika je vektorska, lahko preverimo). Numerično lahko izračunamo, da je njena ploščina približno 89. Delež skonvergiranih stanj je torej približno 0.28.



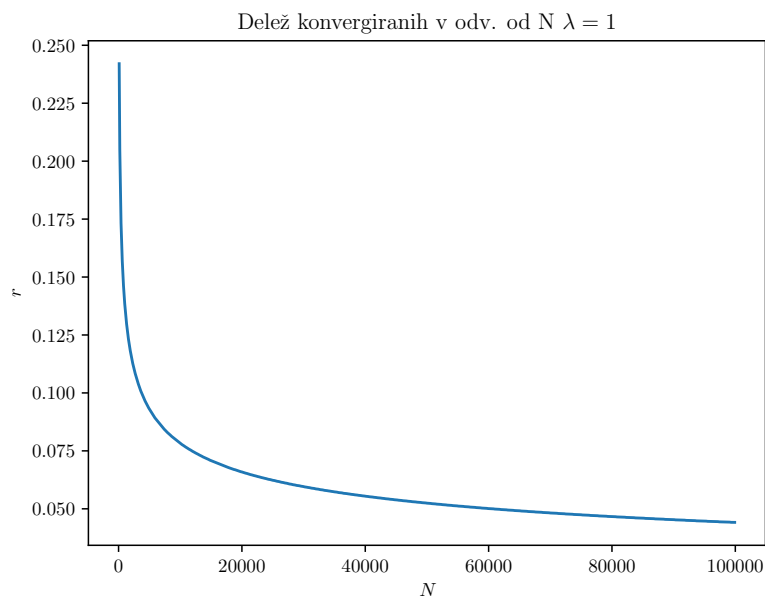
Tokrat največji krog pripada stotem vzbujenem stanju torej  $N = 101$ . Ploščina le-tega je  $2\pi 100.5$ . Nivojnica za anharmonski oscilator z  $E = 100$  se praktično dodakne tega kroga in ima ploščino približno 153. Delež skonvergiranih stanj je torej približno 0.24.



Tokrat največji krog pripada stotem vzbujenem stanju torej  $N = 201$ . Ploščina le-tega je  $2\pi 200.5$ . Nivojnica za anharmonski oscilator z  $E = 200$  se spet praktično dodakne tega kroga in ima ploščino približno 259. Delež skonvergiranih stanj je torej približno 0.2.

Glede na geometrijo faznega portreta izgleda, da bo tisti, ki se še ravno dotika kroga ustrezal začetnem pogoju  $p_0^2 = 2E, x_0 = 0$ , kjer je  $E$  energija, ki določa krog, saj v tej točki energiji sovpadata ( $\lambda$  pri  $x = 0$

ni pomemben) in izgleda, da je portret bolj blizu krožnico bolj ukrivljen in je ne seka. S pomočjo te opazke lahko narišemo naslednjo odvisnost:



Delež skonvergiranih stanj torej vztrajno pada, ko  $N$  povečujemo. Pri  $N = 100000$  pade že na zgolj 5%, pri manjših  $N$  (katere sem v nalogi uporabljal) pa je od 10% do tudi 20 %

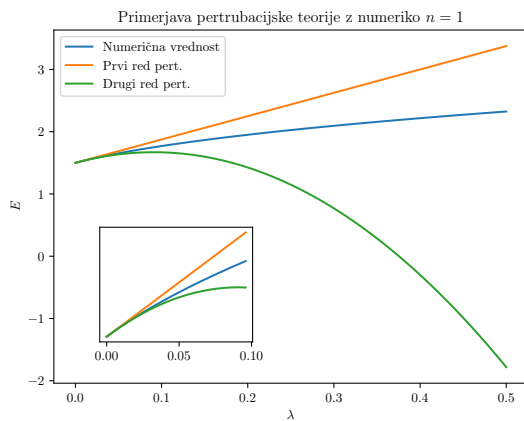
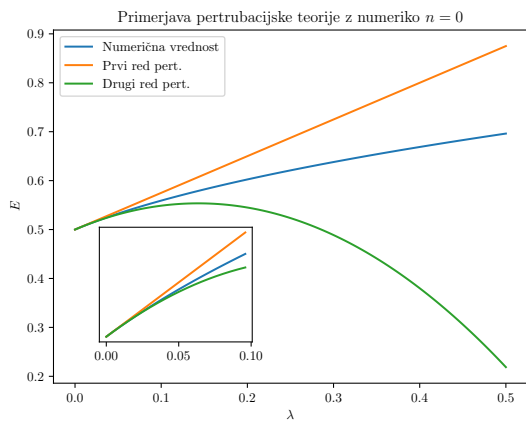
Rezultate diagonalizacije lahko primerjamo še z rezultati perturbacijske teorije, kjer so popravki:

$$E_n^{(1)} = \lambda \langle n | x^4 | n \rangle$$

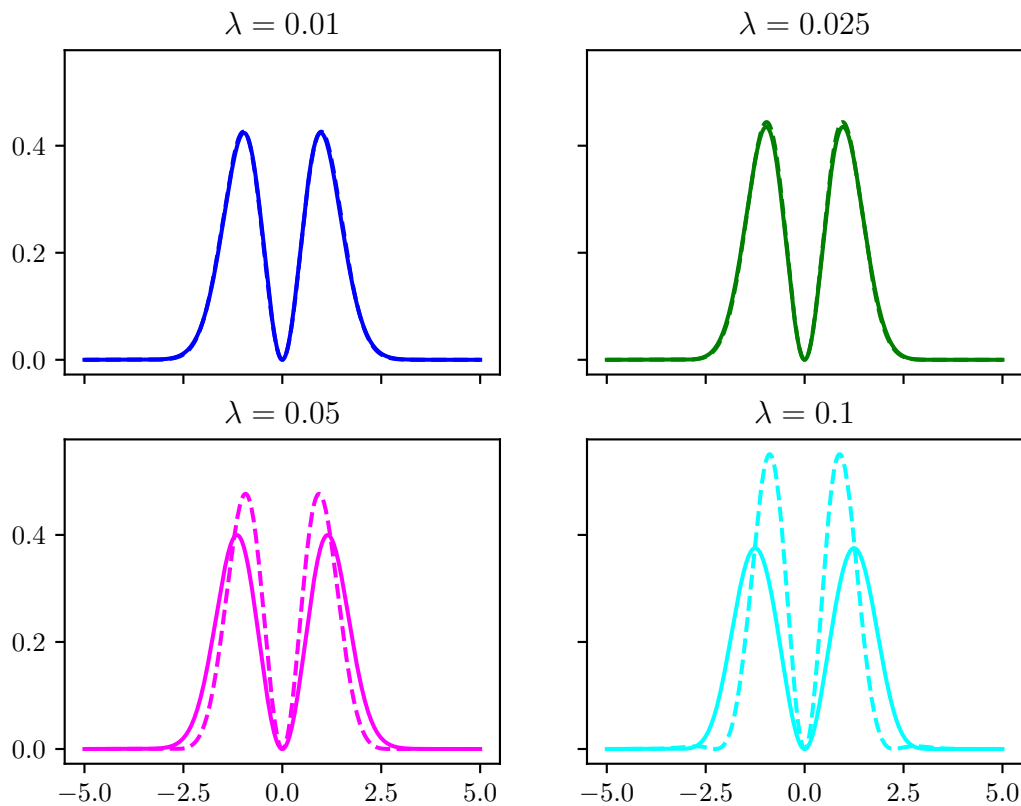
$$E_n^{(2)} = \lambda^2 \sum_{k \neq n} \frac{|\langle k | x^4 | n \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}$$

$$|n^{(1)}\rangle = \lambda \sum_{k \neq n} \frac{\langle k | x^4 | n \rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} |k\rangle$$





Tukaj je primerjava numeričnih (lahko rečemo kar pravih) rezultatov za  $\lambda \neq 0$  z rezultati, ki jih da teorija pertrubacij. Opazimo, da ta v tem redu odpove pri približno  $\lambda = 0.1$ . Hkrati vidimo, da drugi red pertrubacije ne prinese velike razlike v natančnosti, kot bi morda sprva mislili. Za večje  $\lambda$  seveda oba reda odpovesta, drugi deluje potem celo slabše tudi, ko  $\lambda < 1$ . Pri pertrubacijskem računu sem upošteval  $N = 1000$  stanj HO.



Kako pa nam kaj perturbacija popravi funkcijo? Tukaj sem gledal samo prvi red, ki je lažji za izračunati. Vidimo, da potrebujemo za zadovoljivo obliko funkcij tukaj še manjšo  $\lambda$  kot pri energijah in sicer največ nekje 0.05.

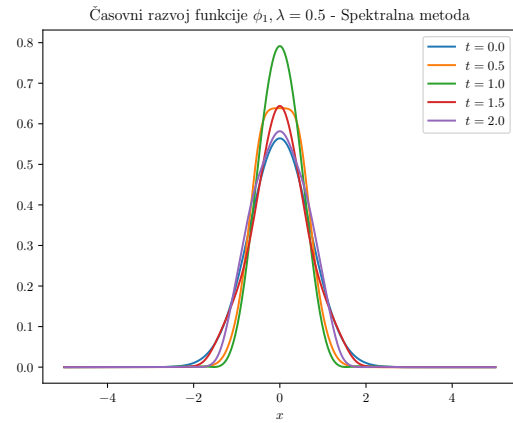
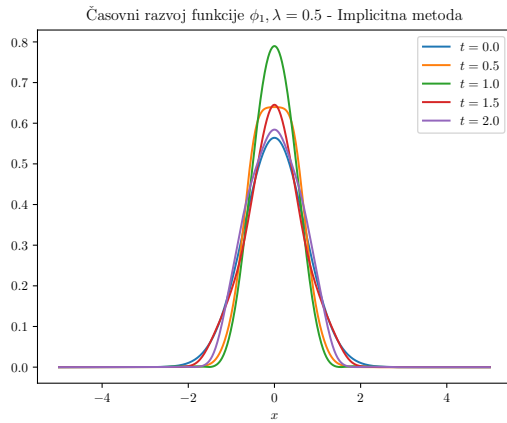
## Druga naloga

Primerjajmo časovni razvoj stanj iz prejšnje naloge z današnjo metodo. Začetno stanje bomo razvili bo lastnih stanjih anharmonskega oscilatorja  $|n\rangle$ :

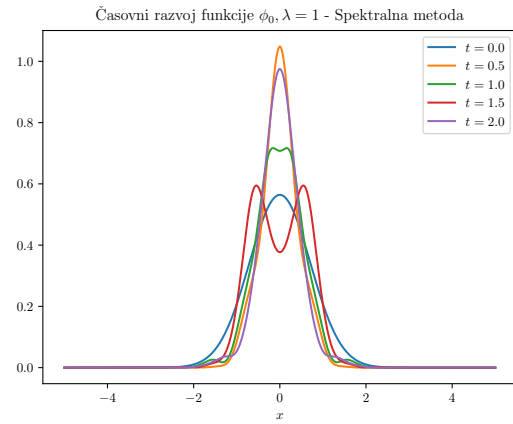
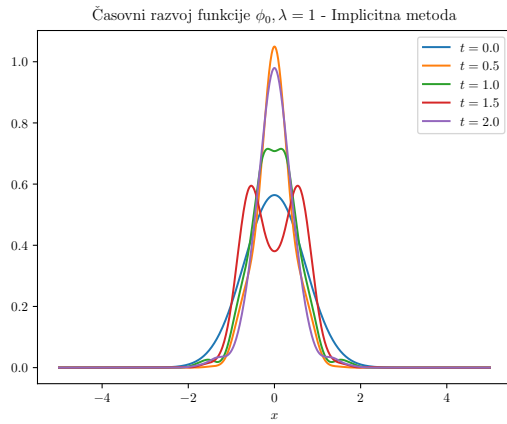
$$|\Psi(0)\rangle = \sum_n |n\rangle \langle n|\Psi(0)\rangle$$

Časovni razvoj se enostavno izraža z energijami lastnih stanj  $E_n$ :

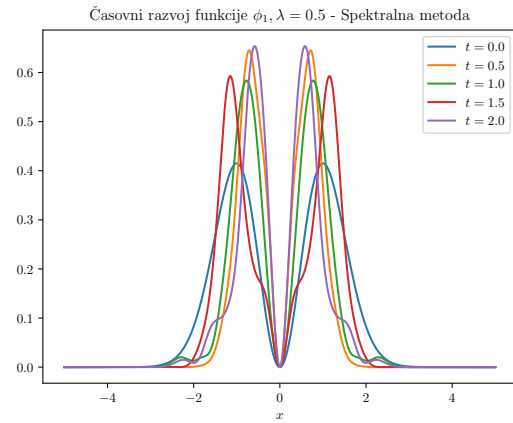
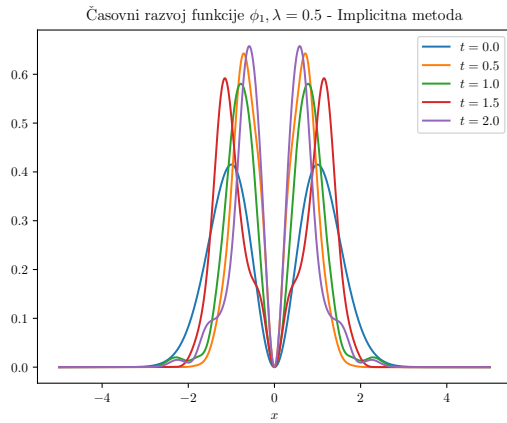
$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n |n\rangle \langle n|\Psi(0)\rangle e^{-iE_n t}$$



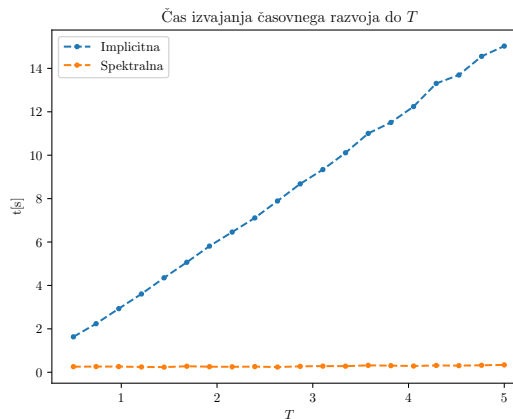
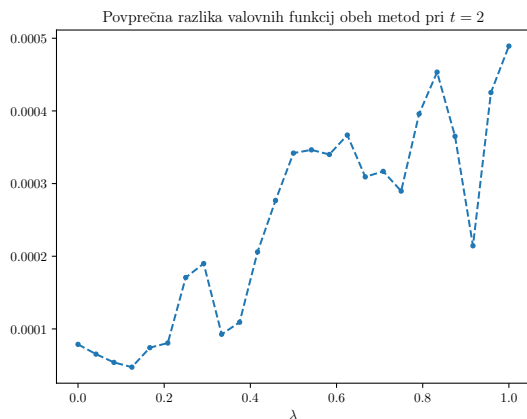
Časovni razvoj osnovnega stanja harmonskega oscilatorja, pridobljen z implicitno (levo) metodo in z diagonalizacijo (desno). Vidimo, da sta funkciji praktično enaki.



Enaka zgodba je pri malo večjem  $\lambda$ .



Metodi data isto rešitev tudi, če začnemo z začetnim stanjem  $\phi_1$ .

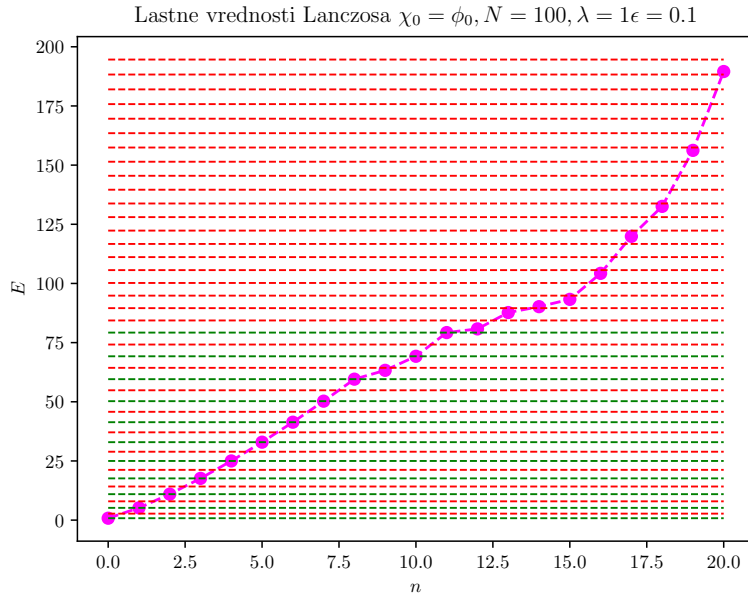


Na levi sem prikazal še povprečno razliko med obema metodama in vidimo, da ta nima kakšne lepe odvisnosti, vendar zgleda da z  $\lambda$  vseeno trend narašča. Na desni sem primerjal se časovno zahtevnost obeh metod in tukaj spektralna metoda povsem zmaga, kar smo pričakovali, saj z eno diagonalizacijo dobimo parametre, ki nam funkcijsko opišejo časovni razvoj, medtem ko mora implicitna metoda za vsak majhen časovni korak znova reševati sistem.

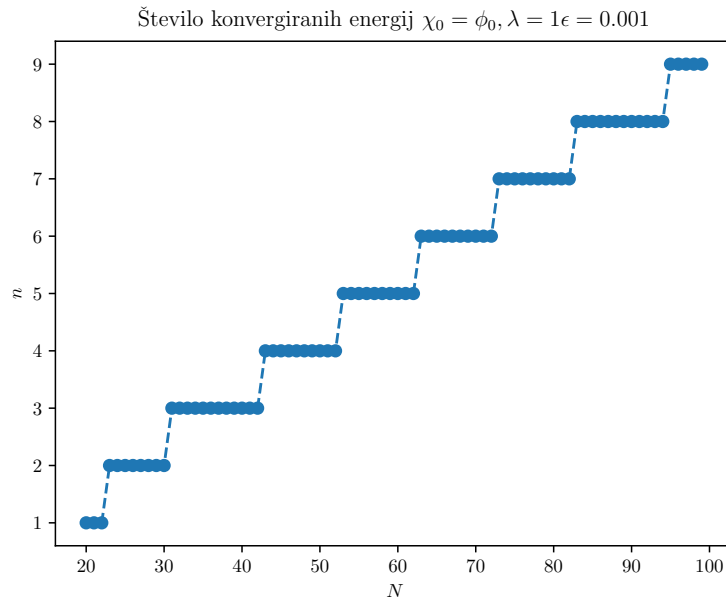
## Tretja naloga

Poglejmo si še Lanczosev algoritem, ki nam pretvori Hamiltonjan v tridiagonalno obliko (V tem primeru ne pridobimo veliko, saj je  $H$  že tako petdiagonalen).

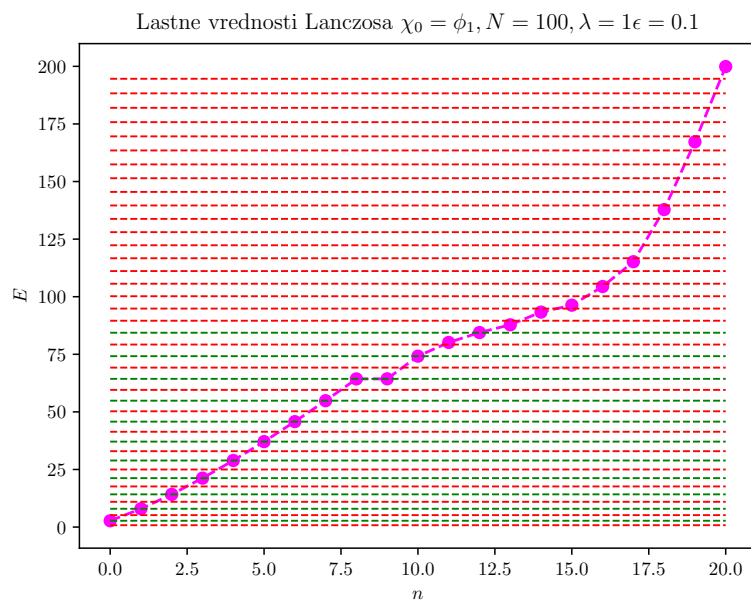
Odločiti se moramo za nek začetni vektor  $\chi_0$  iz katerega potem po Lanczosu zgradimo celotno bazo. Izkazalo se je, da so rezultati zelo odvisni od izbire tega začetnega vektorja:



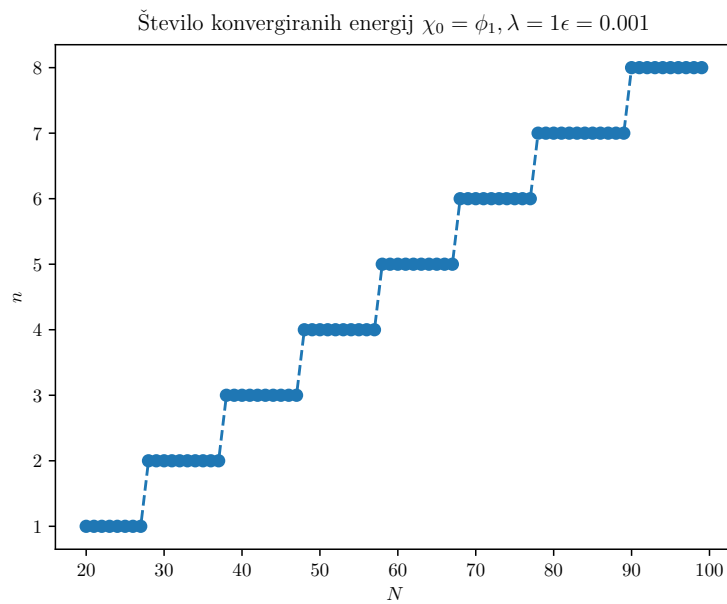
Z roza so tukaj prikazane lastne energije, ki jih dobimo z Lanczosovim algoritmom. S horizontalnimi črtami so lastne energije, pridobljene po direktni diagonalizaciji. Te, ki se z Lanczosom ujemajo na natančnost  $\epsilon$  so prikazane z zeleno barvo. Vidimo, da Lanczos da le nekaj prvih lastnih vrednosti in sicer samo tiste, ki ustrezajo sodem  $n$ . Vmes pa da veliko lastnih vrednosti, ki sploh niso lastne vrednosti originalnega  $H$ . To je verjetno posledica numeričnih napak, na katere je Lanczos zelo občutljiv.



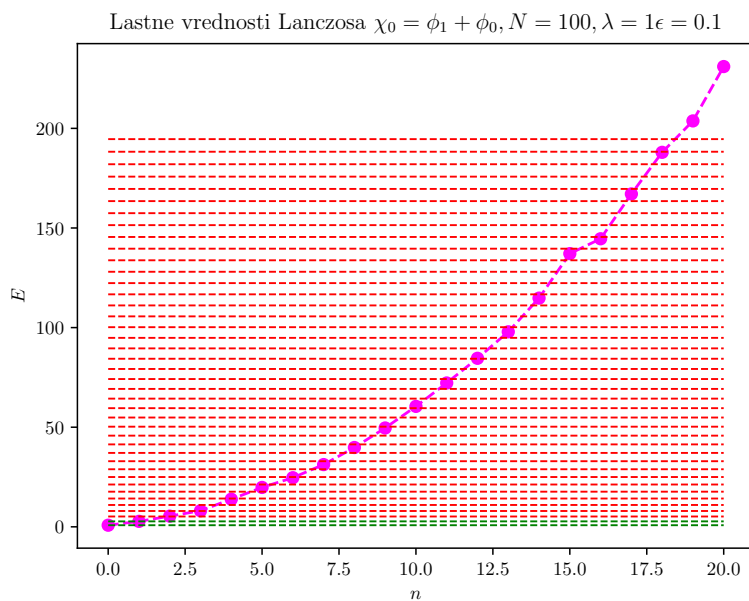
Tukaj sem pogledal, koliko izmed lastnih energij, pridobljenih po Lanczosu, je tudi lastna energija Hamiltonjana (Pridobljena po direktni diagonalizaciji z  $N = 5000$ ). Opazimo nekakšno stopničasto odvisnost. Delež pa je majhen - pod 10%



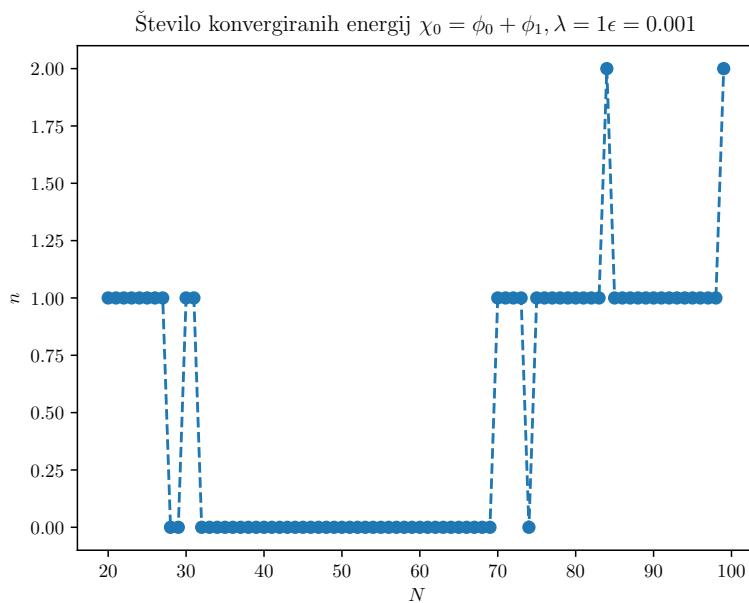
Ista slike še za primer, ko začnemo z vektorjem  $\phi_1$ . Tokrat, dobimo le lastne energije, ki ustrezajo lihim  $n$ .



Graf napake je zelo podobnem prejšnjemu.



Še primer, ko za začetni vektor vzamemo (normirano) vsoto prvih dveh  $\phi$ . Tokrat dobimo lasne vrednosti za lihe in sode  $n$ , vendar so te veliko bolj nenatančne.



Zelo slabo natančnost vidimo tudi iz tega grafa.