Verkefni 2
Tölvueðlisfræði

Valtýr Kári Daníelsson
Emil Gauti Friðriksson

Nóvember 2018

1 Tímaþróun kerfis með Liouville-Von Neumann jöfnunni

Við viljum beita tölulegum aðferðum til þess að meta hvernig ástandið þróast með tíma. Til þess þurfum að leysa Liouville-Von Neumann jöfnuna:

$$i\hbar\dot{\rho} = [H(t), \rho(t)] = i\Lambda[\rho(t)] \tag{1}$$

Þar sem $H(t)$ er tímaháði Hamiltonvirkinn og Λ er skilgreint sem $\Lambda[\rho(t)] = -i[H(t), \rho(t)]$. Einkenni $\rho(t)$ virkjans er að hornalínustök hans gefa sætni ástanda. Það er einnig hægt að nota hann til að reikna út væntigildi á staðsetningu $\langle x \rangle$ og $\langle x^2 \rangle$:

$$\langle x \rangle = tr\{x\rho\} \tag{2}$$

$$\langle x^2 \rangle = tr\{x^2\rho\} \tag{3}$$

Hamiltonvirkinn sem við fáumst við er

$$H = H_0 + \Omega\theta(t)x \tag{4}$$

þar sem θ er Heaviside fallið og Ω er einhver tala.

1.1 Truflaður kjörsveifill án deyfingar

Aðferðin sem við beitum til þess að reikna út fylkið $\rho(t)$ byggir á eftirfarandi jöfnum:

$$\{\rho(t_{n+1}) - \rho(t_n)\} \approx \frac{\Delta t}{\hbar}\Lambda\left[\rho(t_n)\right] \tag{5}$$

$$\{\rho(t_n) - \rho(t_{n-1})\} \approx \frac{\Delta t}{\hbar}\Lambda\left[\rho(t_n)\right] \tag{6}$$

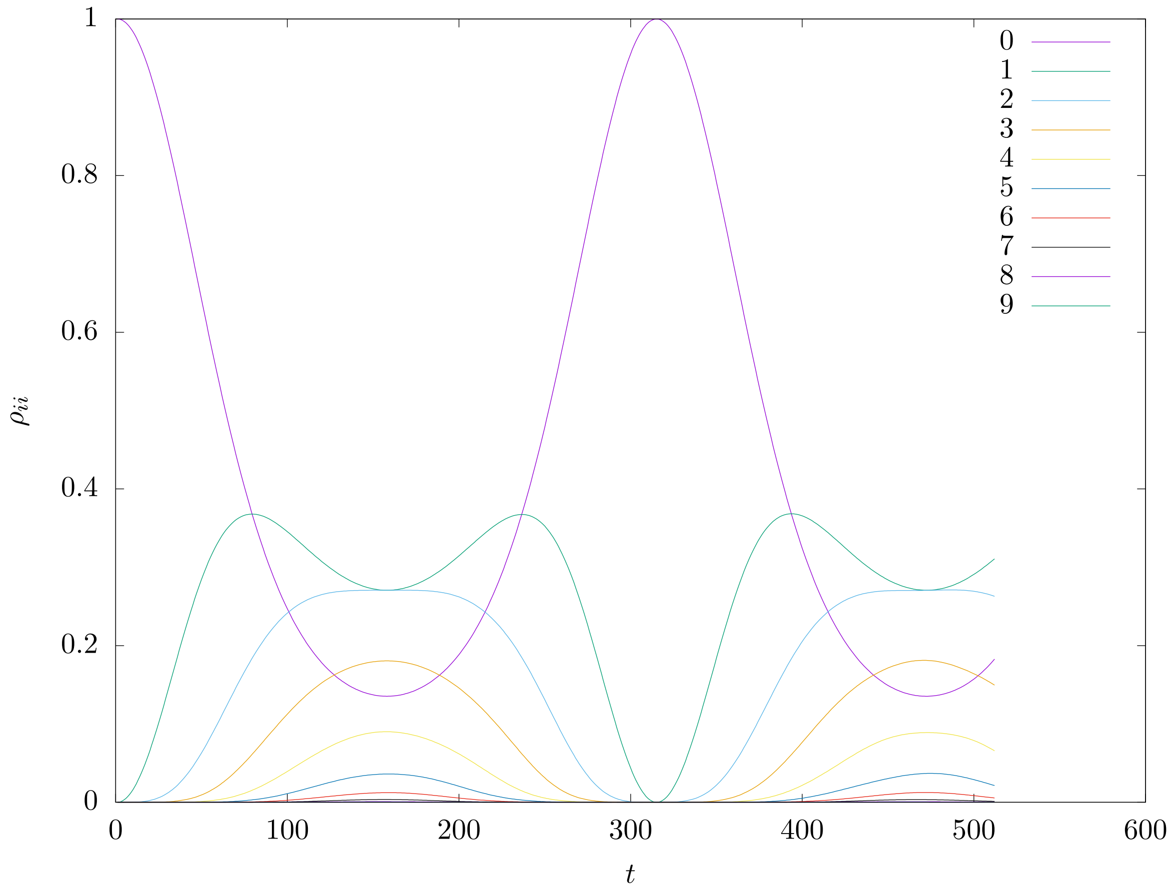
$$\tag{7}$$

Þar sem Δt er tímaskrefið sem við tökum og þarf að vera nógu lítið svo þessi nálgun gildi. Þessar jöfnur gefa svo að lokum þá jöfnu sem við notum í forritinu okkar í útreikningum á $\rho(t)$:

$$\rho(t_{n+1}) = \rho(t_n) + \frac{\Delta t}{2\hbar}\left\{\Lambda[\rho(t_n)] + \Lambda[\rho(t_{n+1})]\right\} \tag{8}$$

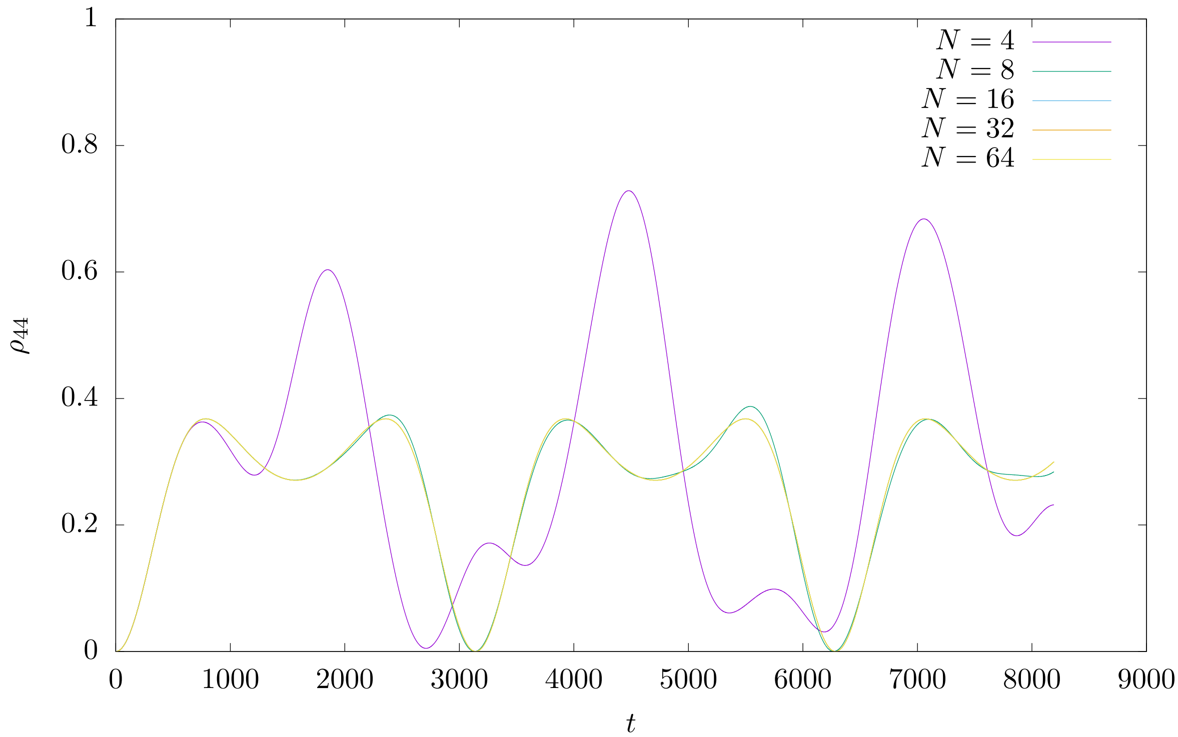
Athugum að við skilgreinum $\rho(t_{n+1})$ sem fall af sjálfu sér, við leysum það vandamál með því að ítra jöfnuna og nota alltaf nýja gildið á $\rho(t_{n+1})$ í næstu ítrun. Í fyrstu ítrun látum við $\rho(t_{n+1}) = \rho(t_n)$.

Við athugum því næst sætni nokkurra lægstu ástandanna sem fall af tíma og teiknum þær á mynd 1. Notaður var grunnur af stærð $N = 10$, $\Omega = 1$ og $\Delta t = 0.02$.



Mynd 1: Sætni fyrstu 10 ástanda truflaða kjörsveifilsins

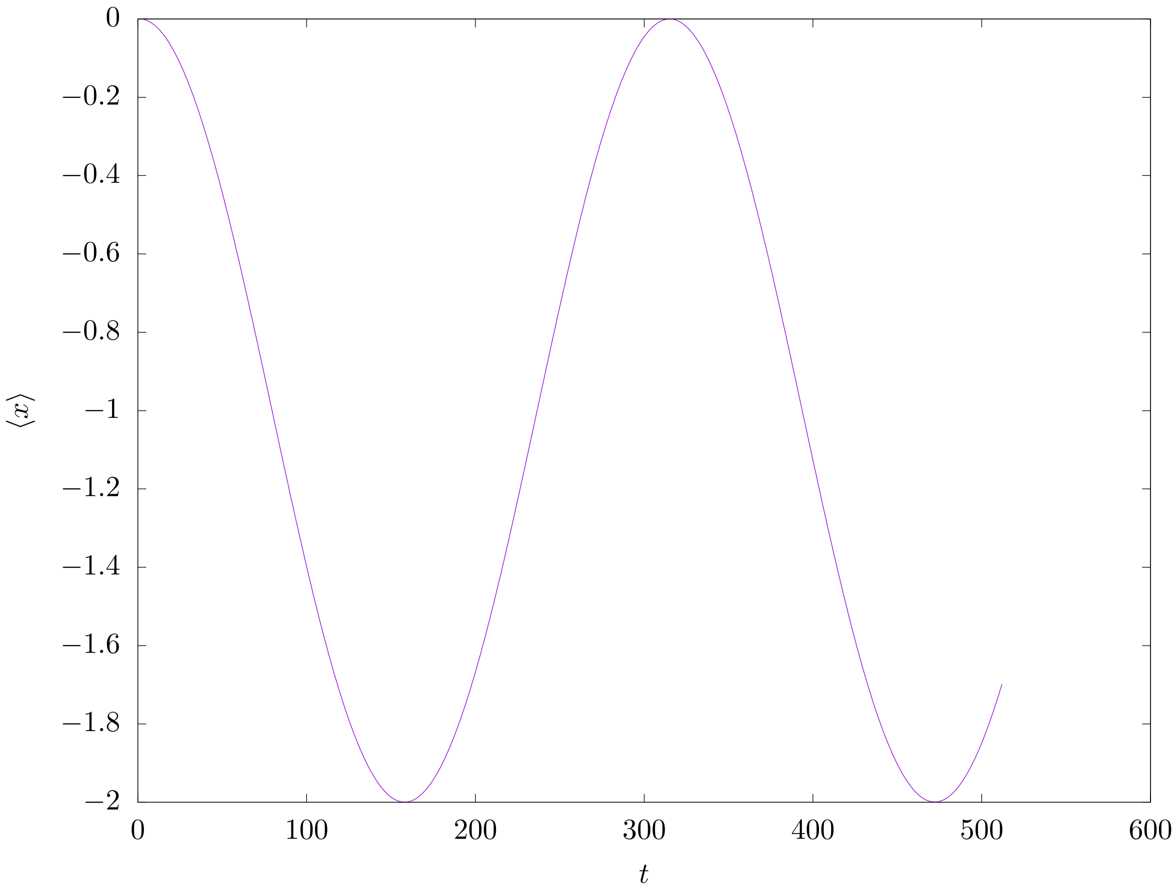
Síðan getum við athugað hversu góðar mismunandi stærðir af grunnum N eru í hlutfalli við $\frac{\hbar\Omega}{\hbar\omega}$ á mynd 2:



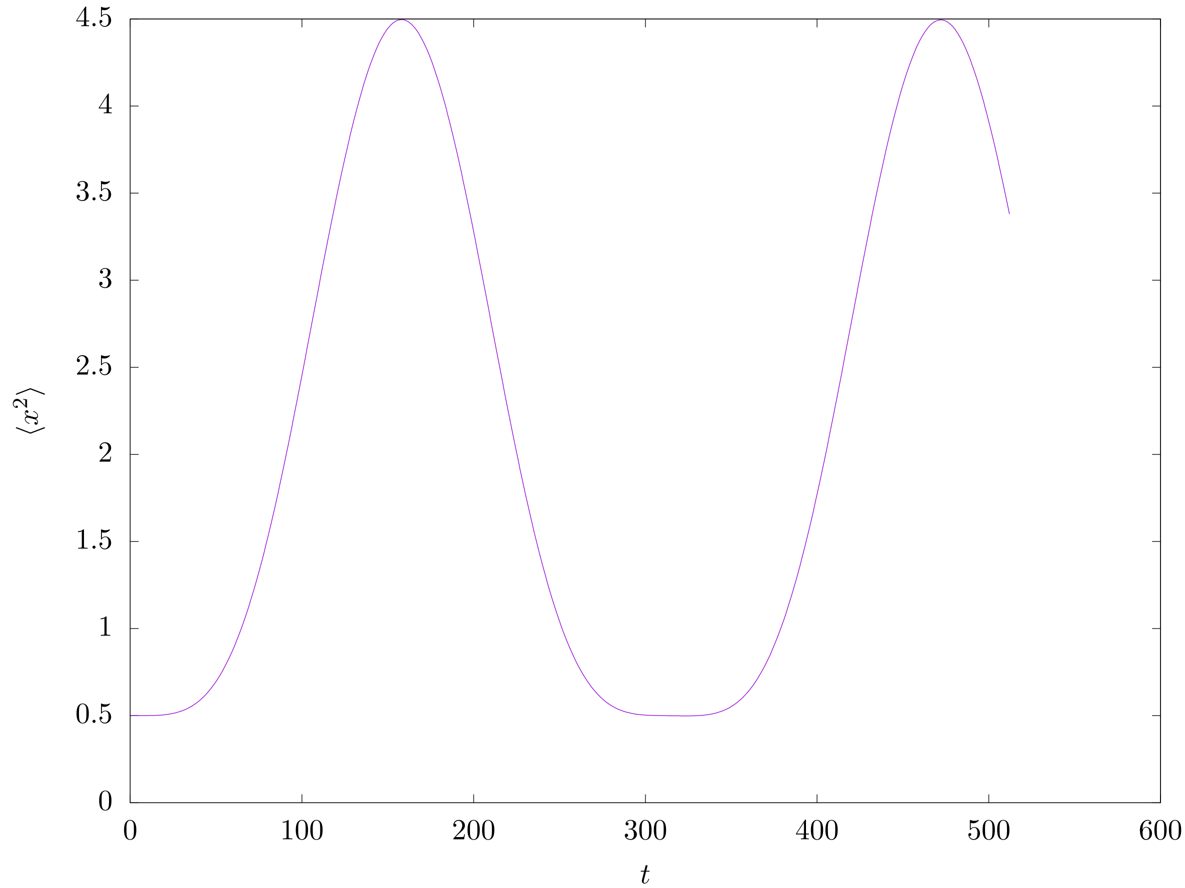
Mynd 2: fjórða orkuástand reiknað í misstórum grunnum

Við tökum eftir að lausnirnar fyrir $N = 32$ og $N = 64$ falla eiginlega alveg saman, og lausnirnar eru samleitnar með hækkandi stærð á grunni.

Reiknum síðan og teiknum upp $\langle x \rangle$ og $\langle x^2 \rangle$ á myndum 3 og 4.



Mynd 3: Væntigildi á x, $\Delta t = 0.02$, $N = 10$, $\Omega = 1$



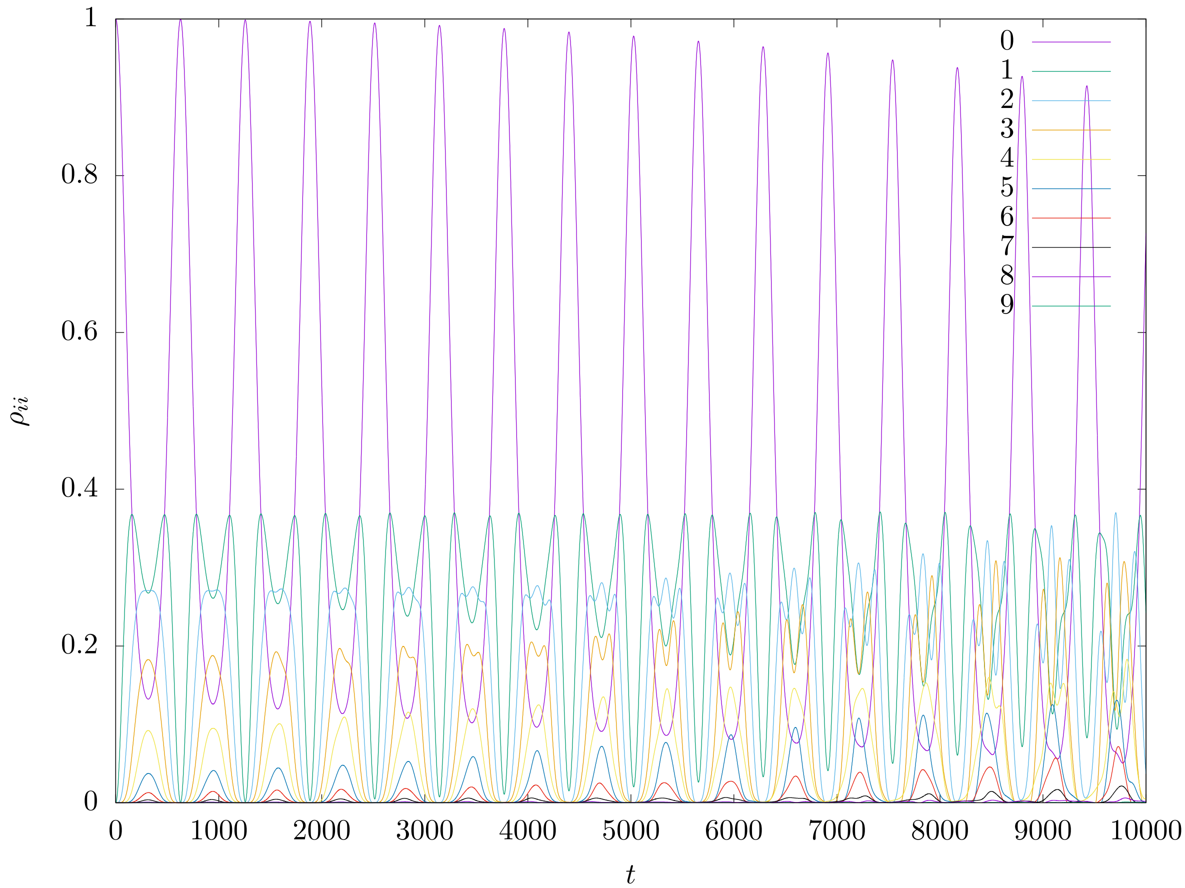
Mynd 4: Væntigildi á x^2, $\Delta t = 0.02$, $N = 10$, $\Omega = 1$

1.2 Truflaður og deyfður kjörsveifill

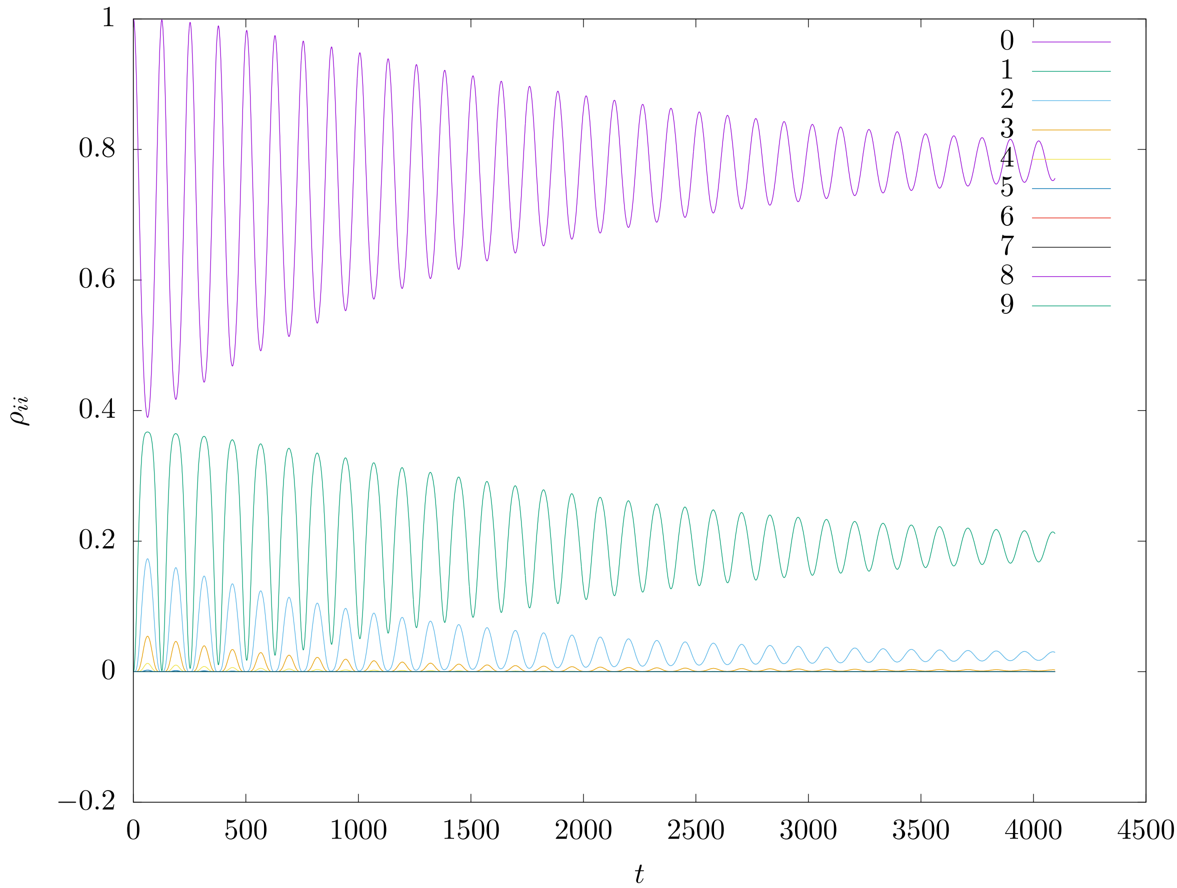
Þegar hér kemur að sögu er rökrétta næsta skref að bæta við deyfilið í sveifilinn okkar. Við gerum það á eftirfarandi hátt:

$$i\hbar\dot{\rho} = [H, \rho] - \frac{ik}{2}\left\{[a\rho, a^+] + [a, \rho a^+]\right\} \tag{9}$$

Þar sem a er lækkunarvirkinn góðkunni og a^+ hækkunarvirkinn. Þeir eru smíðaðir úr `xmat` þar sem a er neðra þríhyrningsfylki þess og a^+ er efra þríhyrningsfylki þess. Við skulum nú aftur teikna mynd af sætni fyrstu 10 ástandanna með þesum breytta sveifli á myndum 5 og 6.

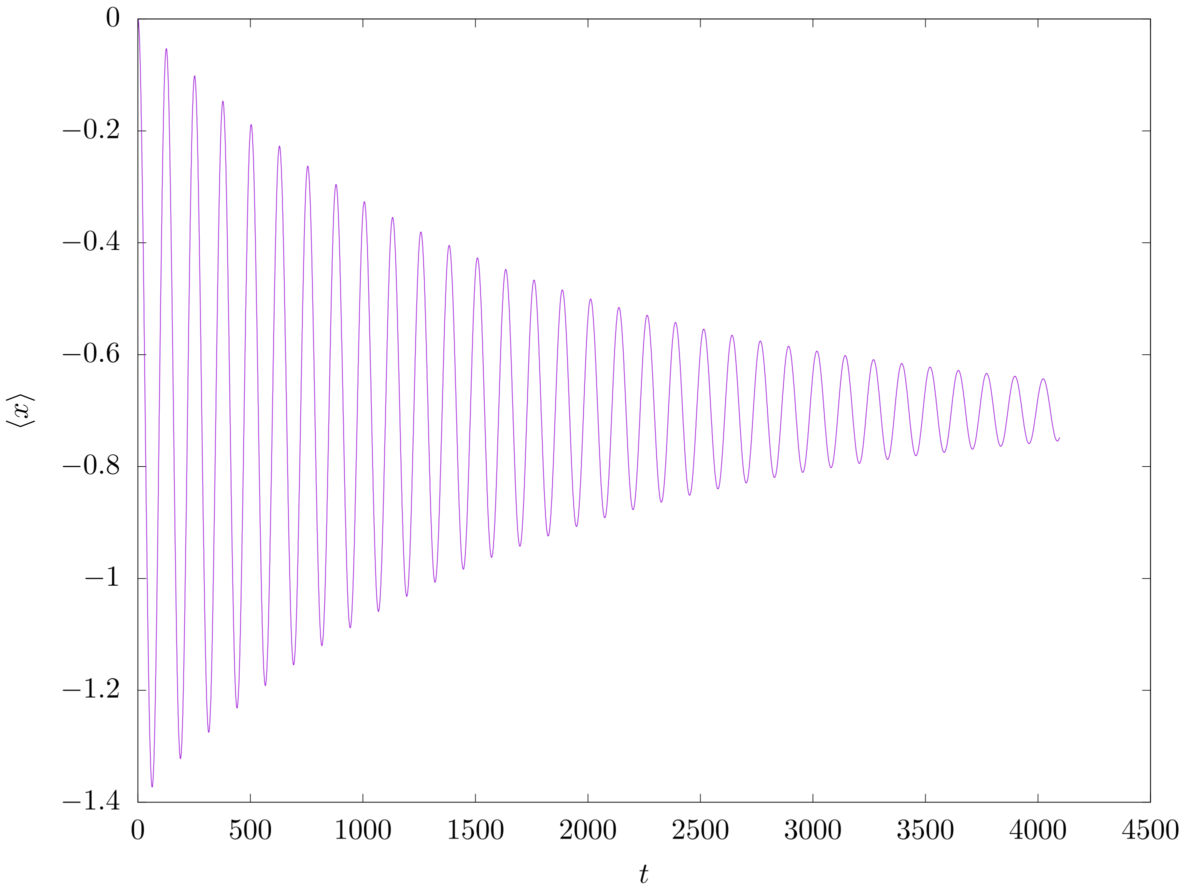


Mynd 5: Sætni fyrstu 10 ástanda með dempunarstuðli $k = 0.015$, $\Omega = 1$, tímaskrefi $\Delta t = 0.01$

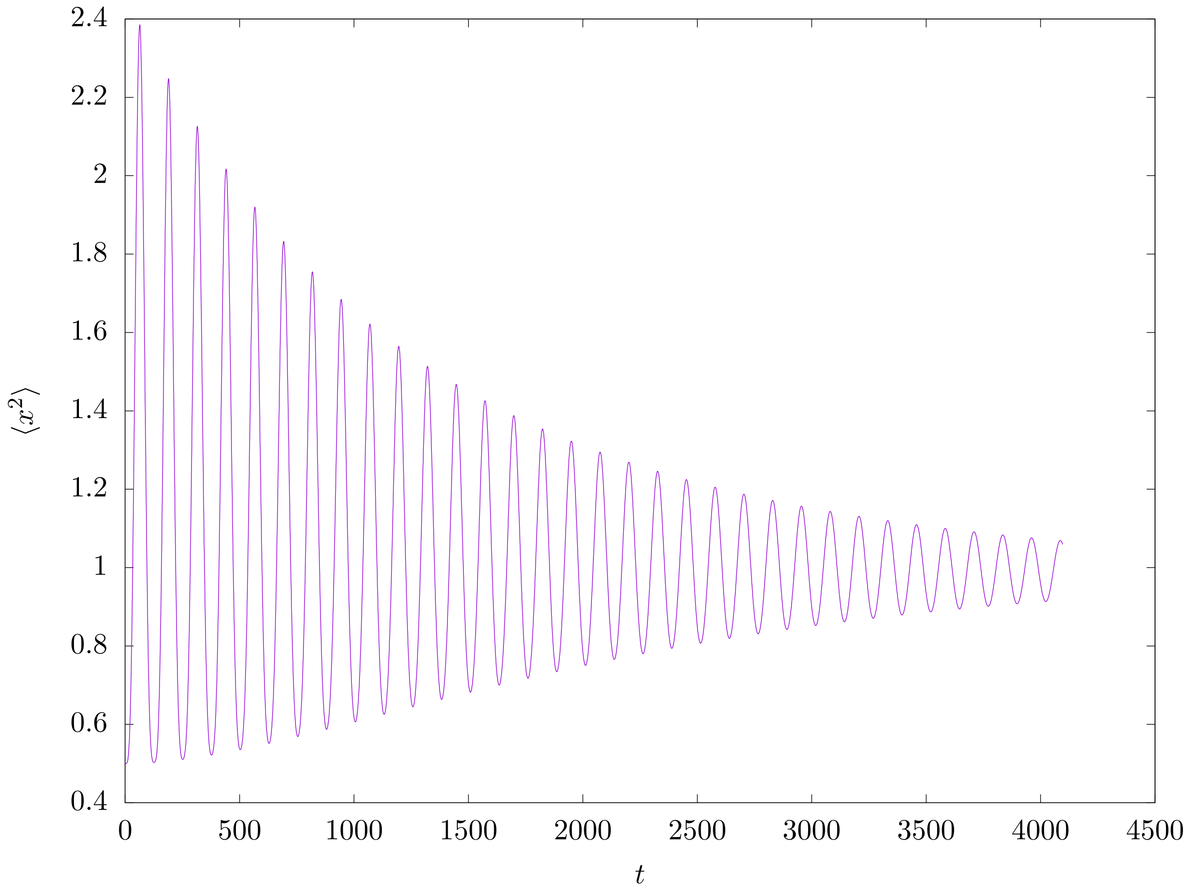


Mynd 6: Sætni fyrstu 10 ástanda með dempunarstuðli $k = 0.05$, $\Omega = 0.7$, tímaskrefi $\Delta t = 0.05$

Við endurtökum nú aftur reikningana fyrir $\langle x \rangle$ og $\langle x^2 \rangle$ með dempunarstuðlinum og teiknum myndir 7 og 8 líkt og áður:



Mynd 7: Meðalgildi x fyrir $(k, \Omega, \Delta t) = (0.015, 1, 0.01)$



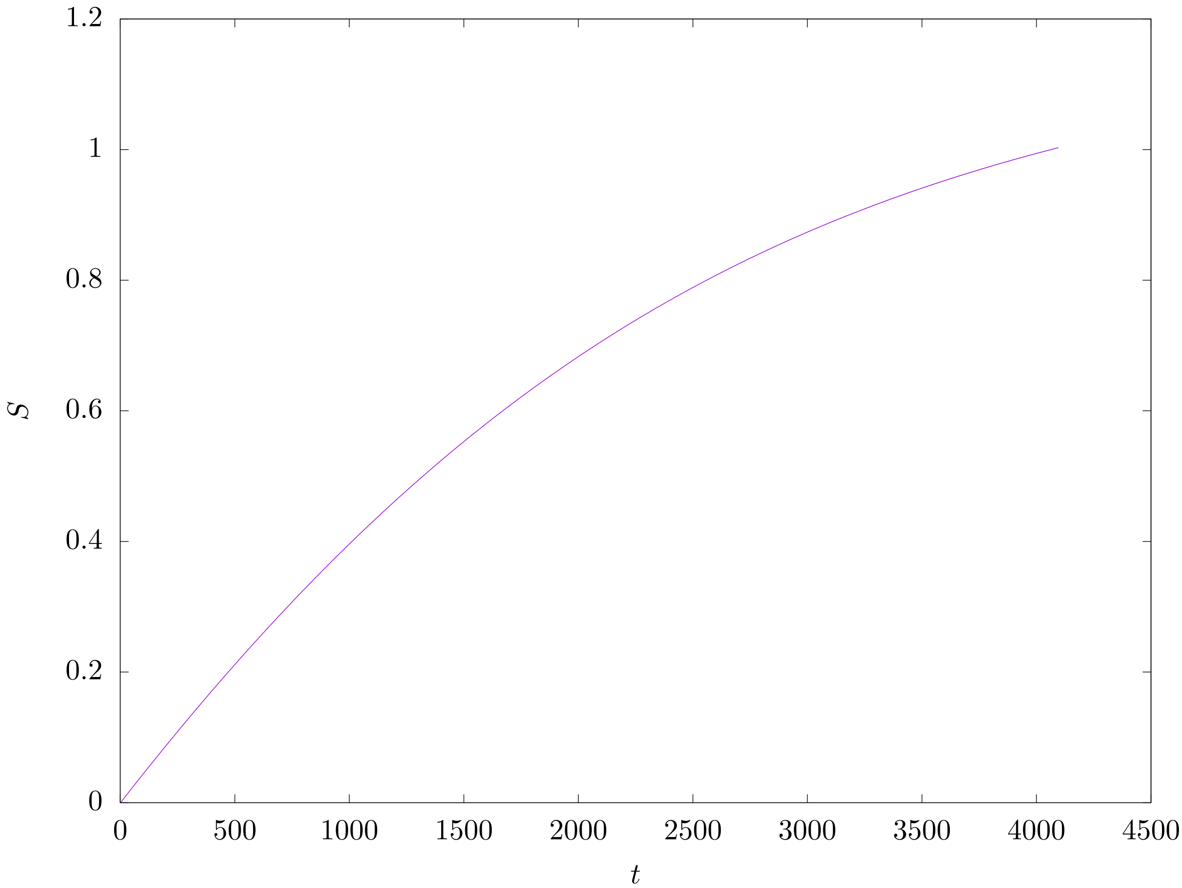
Mynd 8: Meðalgildi x^2 fyrir $(k, \Omega, \Delta t) = (0.015, 1, 0.01)$

1.2.1 Óreiða kerfisins

Því næst reiknum við tímaháðu óreiðuna í kerfinu sem:

$$S(t) = -k_B \ln \left\{ \mathrm{tr} \left(\rho^2 \right) \right\} \tag{10}$$

Teiknum upp niðurstöðurnar í mynd 9



Mynd 9: Óreiða sem fall af tíma

Athugum að óreiðan eykst sem fall af tíma en virðist nálgast jafnvægi þegar $t \to \infty$.

1.2.2 Væntigildi orkunnar

Hér reiknum við væntigildi orkunnar sem fall af tíma með venslunum

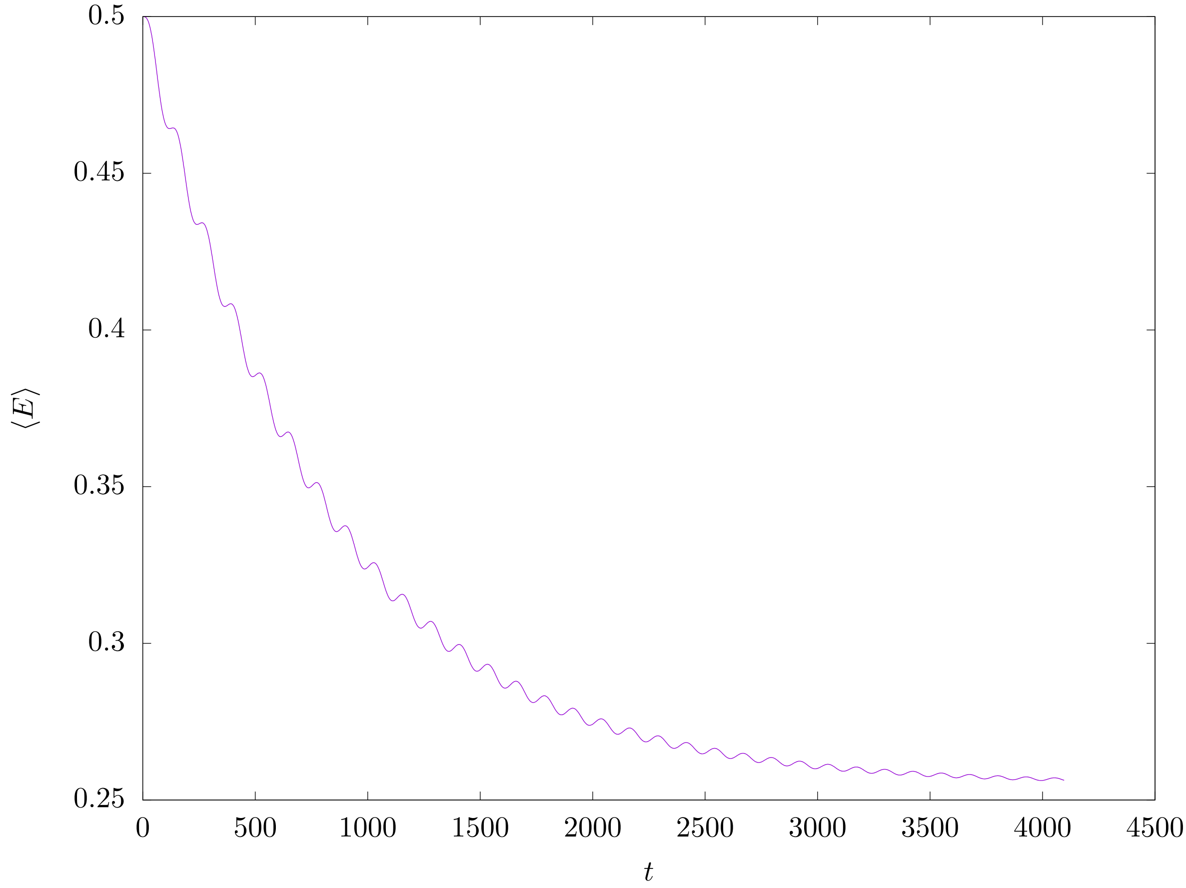
$$\langle E \rangle = \mathrm{tr}(\rho H) \tag{11}$$

Væntigildið er teiknað sem fall af tíma í mynd 10.

2 Frumkóði

Kóðann má nálgast á https://gitlab.com/Jaktrep/te í möppunni `v2`

Til að klóna skrárnar með Git má skrifa `git clone https://gitlab.com/Jaktrep/te.git` í skipanaglugga.



Mynd 10: Væntigildi orkunnar, $(\Delta t, k, \Omega, N) = (0.05, 0.05, 0.7, 10)$