Verkefni 1
Tölvueðlisfræði

Emil Gauti Friðriksson
Valtýr Kári Daníelsson

Október 2018

1 Truflaður kjörsveifill

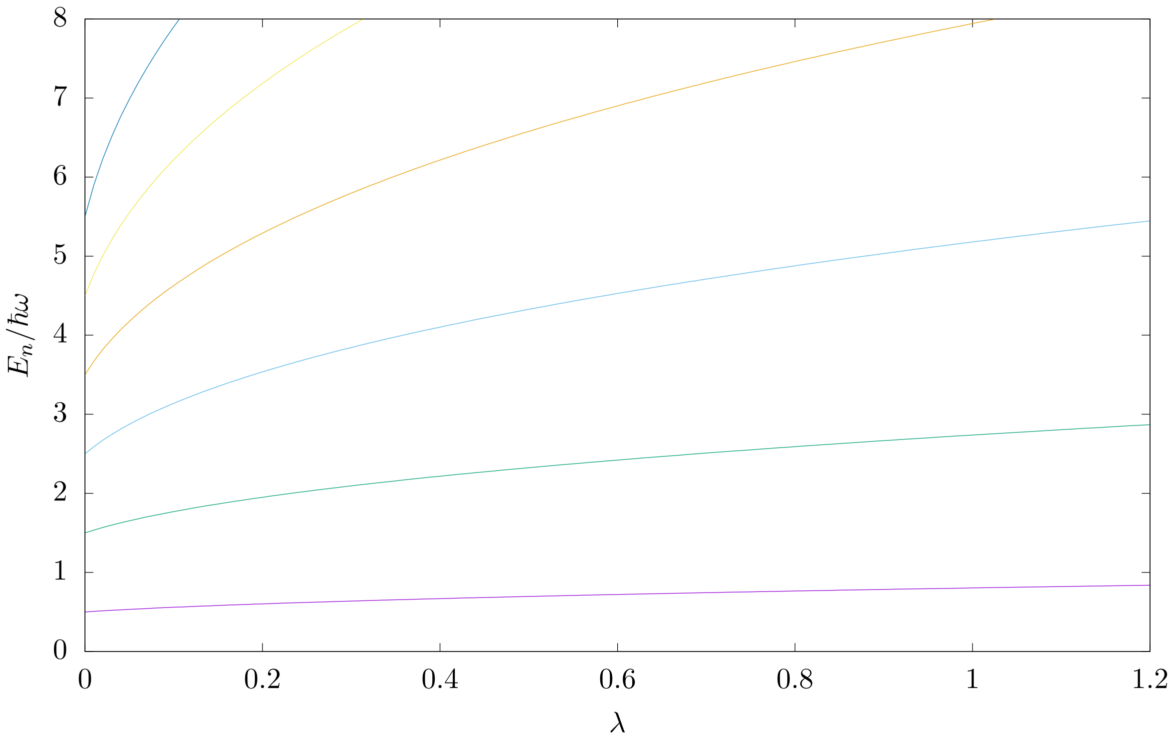
Skammtakjörsveifillinn hefur einstaklega einfalt orkuróf, $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$. Köllum Hamiltonvirkja kjörsveifilsins H_0. Við athugum hvað gerist ef kjörsveifillinn er truflaður, með því að bæta við mætti $V(x) = \lambda\hbar\omega\left(\frac{x}{a}\right)^4$ þar sem $\lambda \in [0, 1.2]$. Þá fáum við Hamiltonvirkjann:

$$H = H_0 + \lambda\hbar\omega\left(\frac{x}{a}\right)^4$$

Til þess að framkvæma þessa reikninga þarf að smíða viðeigandi fylki. Þar sem við getum ekki reiknað með óendanlega mörgum grunnvigrum notum við 128 grunnvigra í reikningum og hundsum rest. Byrjum á að smíða fylkið `xmat` sem er reiknað skv.

$$\left\langle n \left| \frac{x}{a} \right| m \right\rangle = \frac{1}{2}\sqrt{n + m + 1} \cdot \delta_{|n-m|,1}$$

Þar sem $|n\rangle, |m\rangle$ eru eiginvigrar H_0. Til þess að leysa $\left\langle n \left| \left(\frac{x}{a}\right)^2 \right| m \right\rangle$ þá þarf einfaldlega að margfalda fylkið hér fyrir ofan við sjálft sig með `matmul(xmat,xmat)`. Í framhaldi af þessu er hægt að sjá að til þess að leysa $\left\langle n \left| \left(\frac{x}{a}\right)^4 \right| m \right\rangle$ þarf einfaldlega að framkvæma skipunina `matmul(matmul(xmat,xmat),matmul(xmat,xmat))`. Við finnum eigingildi Hamilton fylkisins með `heevr` fallinu. Teiknum síðan upp orkurófið í mynd 1 fyrir grunnástandið ásamt fyrstu fimm örvuðu ástöndunum fyrir $\lambda \in [0, 1.2]$. Orkuástöndin eru misviðkvæm fyrir breytingu í λ, við sjáum að hærri orkuástönd vaxa hraðar með vaxandi λ.



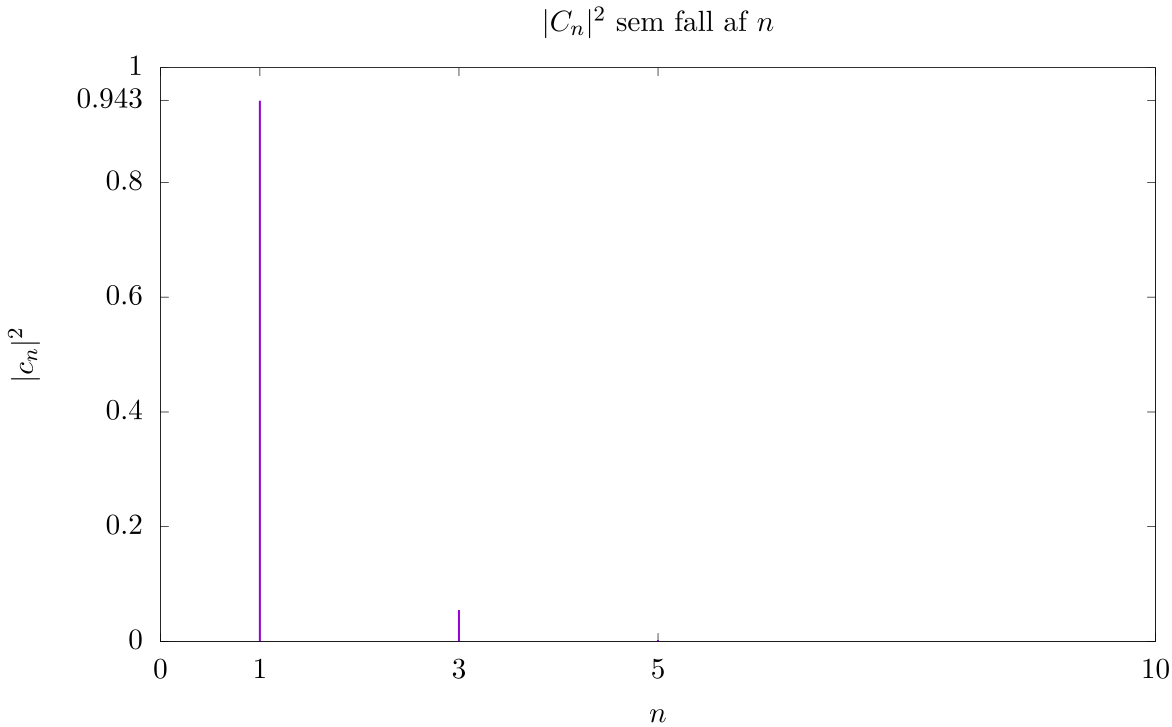
Mynd 1: Fyrstu 6 orkustig truflaða kjörsveifilsins sem föll af λ

2 Eiginástönd truflaða kjörsveifilsins í eigingrunni kjörsveifilsins

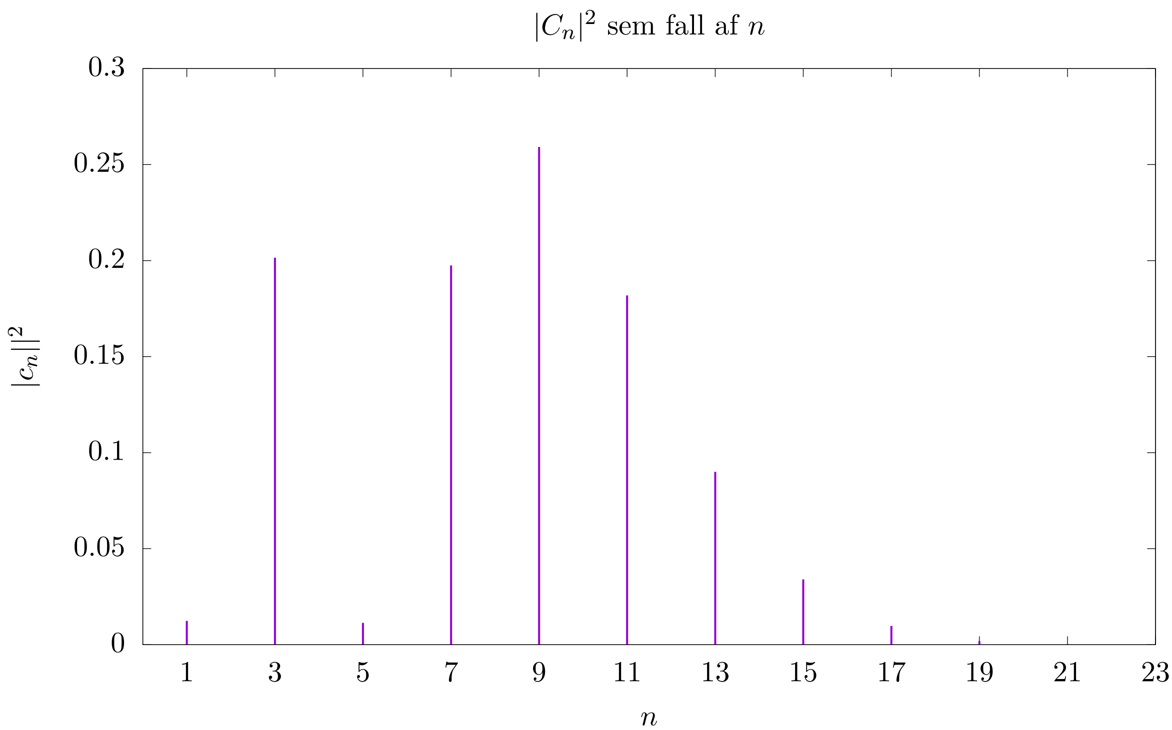
Eiginástöndin $|\alpha\rangle$ af H eru línulegar samantektir af upphaflega grunninum

$$|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_{\alpha n} |n\rangle$$

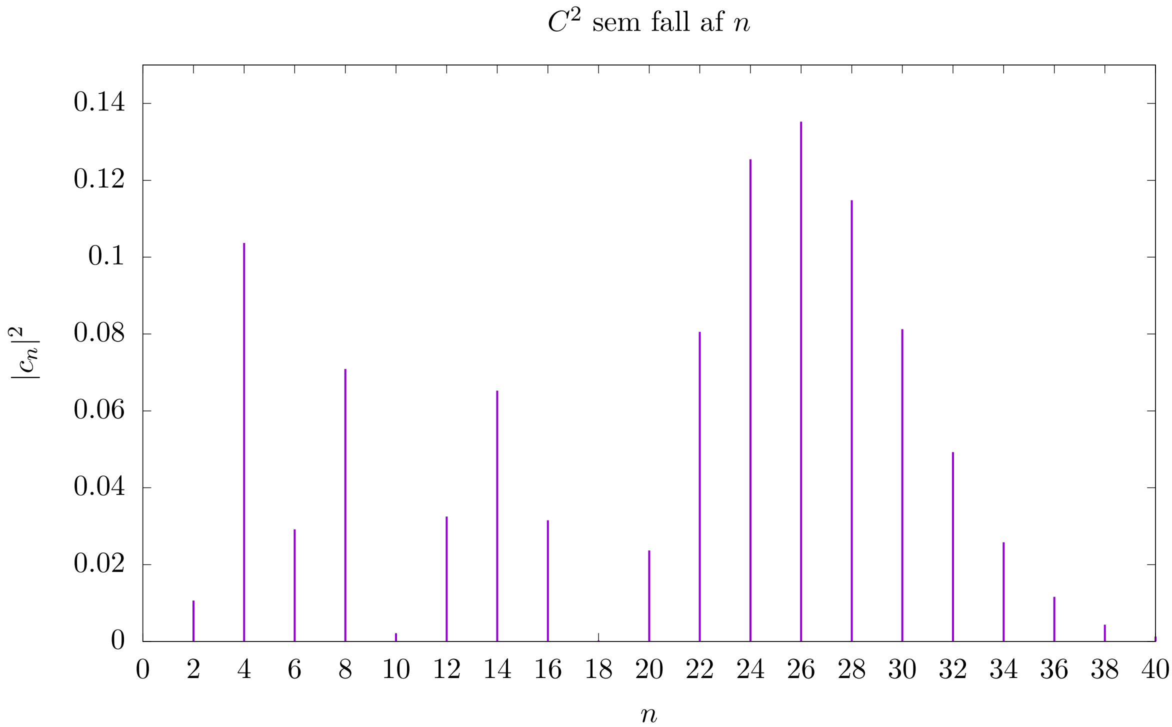
þar sem stuðlarnir $c_{\alpha n}$ koma frá eiginvigrum H. Við reiknum út eiginvigra Hamilton fylkisins með `heevr` fallinu. Við söfnum eiginvigrunum saman í gagnaskrá og teiknum stuðla þeirra í öðru veldi, $|c_{\alpha n}|^2$, sem fall af n í stuðla-grafi. Í þessum hluta notum við gildið $\lambda = 1$. Við gerum slík rit fyrir grunnástand, fjórða örvaða ástand og níunda örvaða ástand í myndum 2, 3 og 4.



Mynd 2: Hlutdeild eiginástanda H_0 í grunnástandi H



Mynd 3: Hlutdeild eiginástanda H_0 í fjórða örvaða ástandi H



Mynd 4: Hlutdeild eiginástanda H_0 í níunda örvaða ástandi H

3 Orkuróf í V laga mætti

Prófum nú að finna orkurófið fyrir V laga mætti, sýnt á mynd 5, í staðinn fyrir fleygbogamætti. Við getum fundið slíkan Hamiltonvirkja með

$$H = H_0 + V(x)$$

þar sem

$$V(x) = \hbar\omega \left[\frac{1}{2} \left(\frac{x}{a} \right) \tanh \left(\frac{x}{a} \right) - \frac{1}{2} \left(\frac{x}{a} \right)^2 \right]$$

Til að finna $\tanh\left(\frac{x}{a}\right)$ notum við fallið `heevr` til að fá einoka hnitaskiptafylkið, U, og hornalínuform fylkisins $\frac{x}{a}$, sem við köllum X. Notum hornalínuformið til að finna $\tanh(X)$ og vörpum því aftur í eigingrunn kjörsveifilsins með $U \tanh(X) U^\dagger$. Þaðan er einfalt að reikna H.

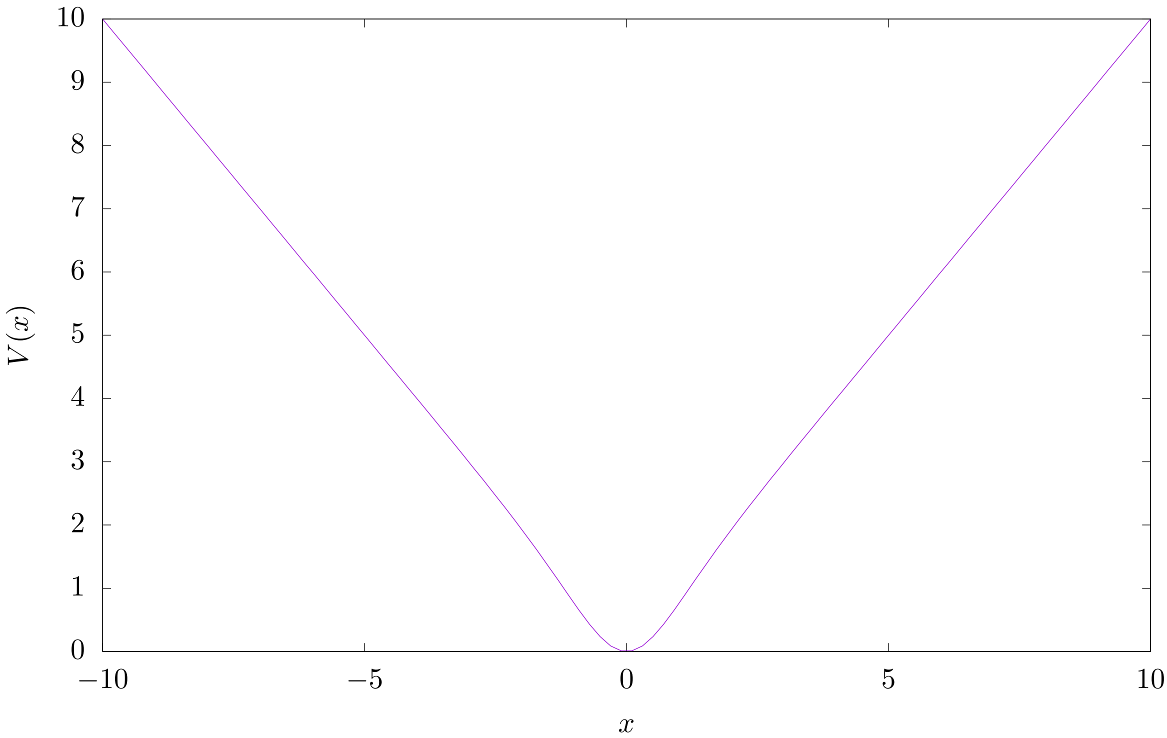
Við fáum orkuróf sem er í byrjun líkt orkurófi kjörsveifilsins, en síðan lækkar bilið á milli orkustiga með vaxandi n. Vegna lélegrar skilyrðingar byrja þó bilin milli orkugilda að vaxa mjög hratt eftir vaxandi n. Afskorið orkuróf með samanburði við orkuróf kjörsveifilsins er sýnt á mynd 6. Orkurófið var reiknað með 1024×1024 fylki.

Til að fá 10 sæmilega nákvæm orkustig þarf aðeins að nota 128-víðan grunn, sýnt á mynd 7.

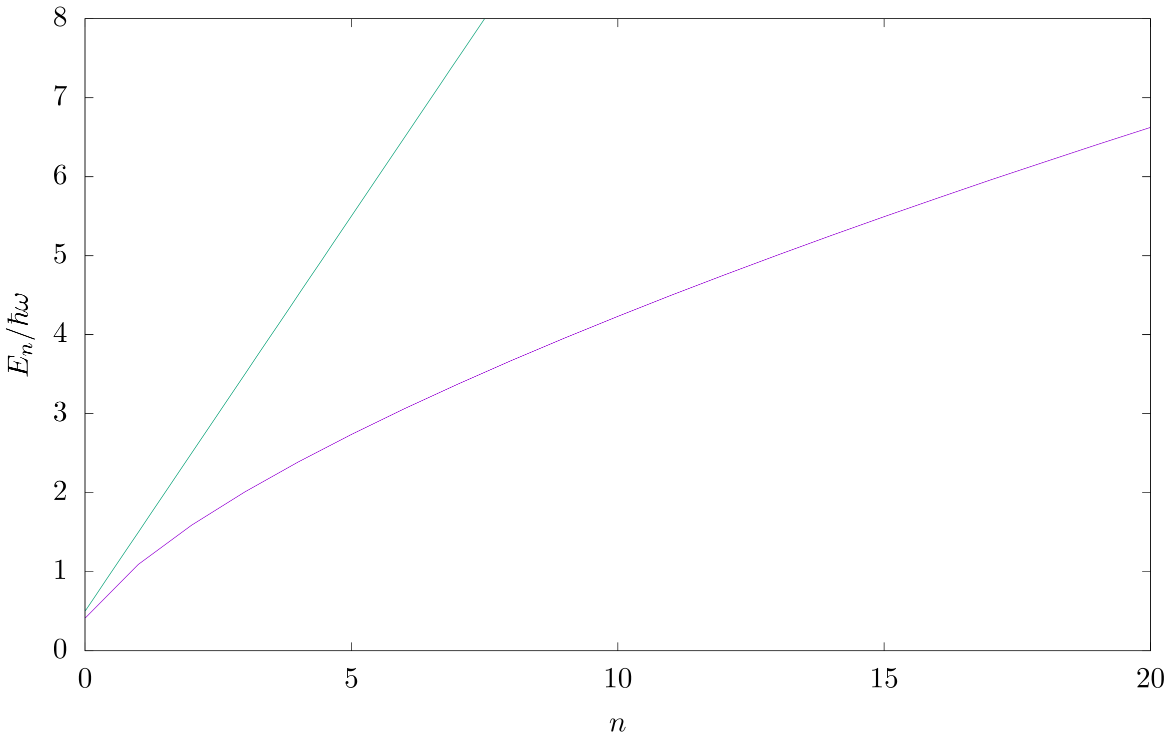
4 Frumkóði

Kóðann má nálgast á https://gitlab.com/Jaktrep/te

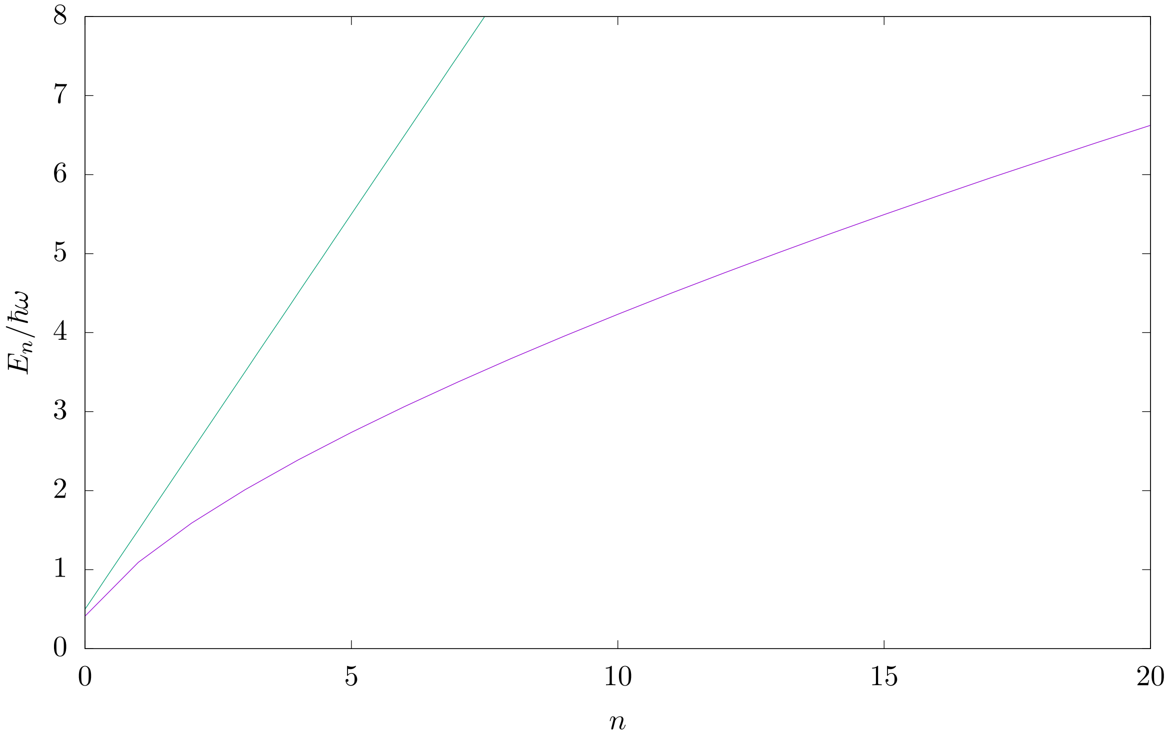
Til að klóna skrárnar með Git má skrifa `git clone https://gitlab.com/Jaktrep/te.git` í skipanaglugga.



Mynd 5: Mættið $V(x)$



Mynd 6: Orkuróf H í fjólubláu, orkuróf kjörsveifils í grænu. Vídd fylkis er 1024



Mynd 7: Orkuróf H í fjólubláu, orkuróf kjörsveifils í grænu. Vídd fylkis er 128