

# Schrödingerjeva enačba, stacionaren problem

Miha Čančula

11. marec 2013

## 1 Matrika hamiltoniana

Za izračun lastnih energij sistema s hamiltonovim operatorjem  $\hat{H}$  potrebujemo matrične elemente  $H_{ij} = \langle \psi_i | H | \psi_j \rangle$  v neki ortonormirani bazi  $|\psi_i\rangle$ . Logična izbira za naš problem so lastna stanja harmonskega oscilatorja  $|n\rangle$ . Matrične elemente bi lahko izračunali neposredno iz lastnih stanja in hamiltonove matrike, dobljene z diskretizacijo prostora. Težava se pojavi, ko nas zanimajo višja vzbujena stanja. Pri rekurzivnem ali eksplisitem računanju Hermitovih polinomov  $H_n$  za velike  $n$  (večje od 50) namreč hitro pridemo do odštevanja velikih števil, kar zaradi končne računalniške natančnosti privede do velikih napak. Dodatno ta stanja zelo hitro nihajo v prostoru, zato moramo za dober opis uporabiti zelo fino diskretizacijo.

Obema težavam se lahko v našem primeru izognemo, če matrične elemente izrazimo analitično. Vemo, da se hamiltonov operator za harmonski oscilator v bazi lastnih stanj  $|n\rangle$  glasi

$$\hat{H}_0 = \frac{p^2}{2} + \frac{x^2}{2} = a^\dagger a + \frac{1}{2} \quad (1)$$

Drugi del potenciala,  $x^4$ , tudi lahko izrazimo s kreacijskim in anihilacijskim operatorjem

$$x = \frac{1}{\sqrt{2}}(a^\dagger + a) \quad (2)$$

$$x^4 = \frac{1}{4}(a^\dagger + a)^4 = \frac{1}{4} \left( a^{\dagger 2} + 1 + 2n + a^2 \right)^2 \quad (3)$$

$$= \frac{1}{4} \left( a^{\dagger 4} + 1 + 4n^2 + a^4 + 2a^{\dagger 2} + 4n + 2a^2 + \right. \quad (4)$$

$$\left. + 2a^{\dagger 2}n + 2na^{\dagger 2} + 2a^2n + 2na^2 + a^{\dagger 2}a^2 + a^2a^{\dagger 2} \right) \quad (5)$$

kjer je  $n = a^\dagger a$ , oznake za operatorje pa sem spuščal. Matrične elemente kreacijskega in anihilacijskega operatorja poznamo

$$\langle m | \hat{a}^\dagger | n \rangle = \sqrt{n+1} \delta_{m,n+1} \quad (6)$$

$$\langle m | \hat{a} | n \rangle = \sqrt{n} \delta_{m,n-1} \quad (7)$$

$$\langle m | \hat{n} | n \rangle = n \delta_{m,n} \quad (8)$$

Če to vstavimo v izraz za  $x$  in združimo člene z enakimi  $\delta_{ij}$ , dobimo rezultat

$$4\langle m | \hat{x}^4 | n \rangle = \sqrt{n(n-1)(n-2)(n-3)} \delta_{m,n-4} \quad (9)$$

$$+ 2(n-2+n+1)\sqrt{n(n-1)} \delta_{m,n-2} \quad (10)$$

$$+ (1+4n+4n^2+(n+1)(n+2)+n(n-1)) \delta_{m,n} \quad (11)$$

$$+ 2(n+2+n+1)\sqrt{(n+1)(n+2)} \delta_{m,n+2} \quad (12)$$

$$+ \sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)(n+4)} \delta_{m,n+4} \quad (13)$$

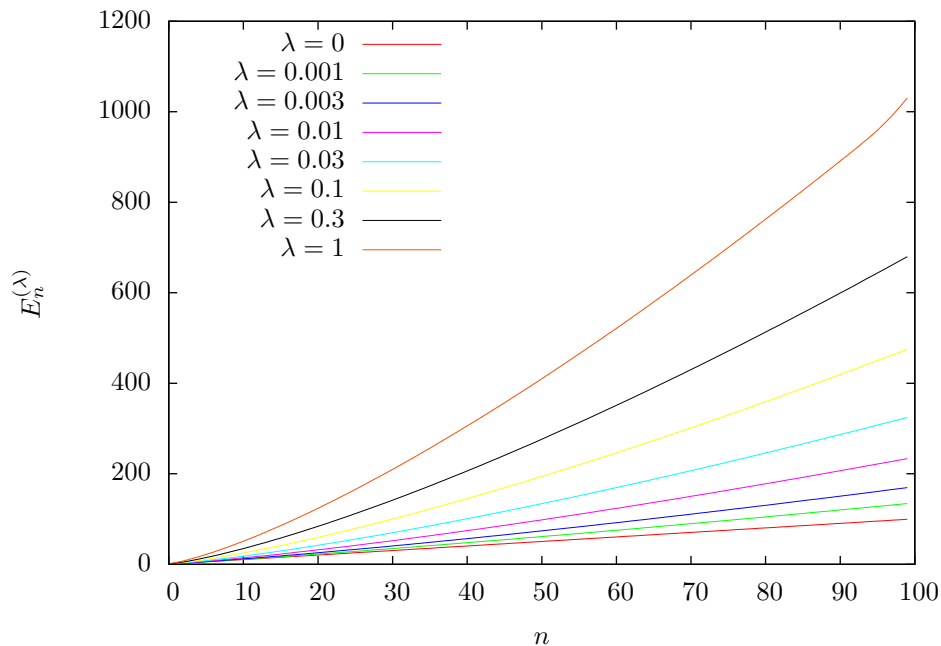
in končen izraz za matrični element  $H$  v bazi  $|n\rangle$

$$H_{mn} = \left( n + \frac{1}{2} \right) \delta_{m,n} + \lambda \langle m | \hat{x}^4 | n \rangle \quad (14)$$

Matrika  $H$  ima pet neničelnih diagonal.

## 2 Lastne energije

Izračunal sem prvih 100 lastnih energij oscilatorja, ki so enake najnižjih lastnim vrednostim zgoraj opisane matrike. Uporabil sem matriko velikosti  $1000 \times 1000$ , nato pa z uporabo rutin iz paketa ARPACK izračunal 100 najnižjih lastnih vrednosti. Uporaba 1000 baznih stanj se mi je zdela primerna, ker pri največjih obravnavani motnji  $\lambda = 1$  energija stanja ravno doseže energijo tisočega lastnega stanja.

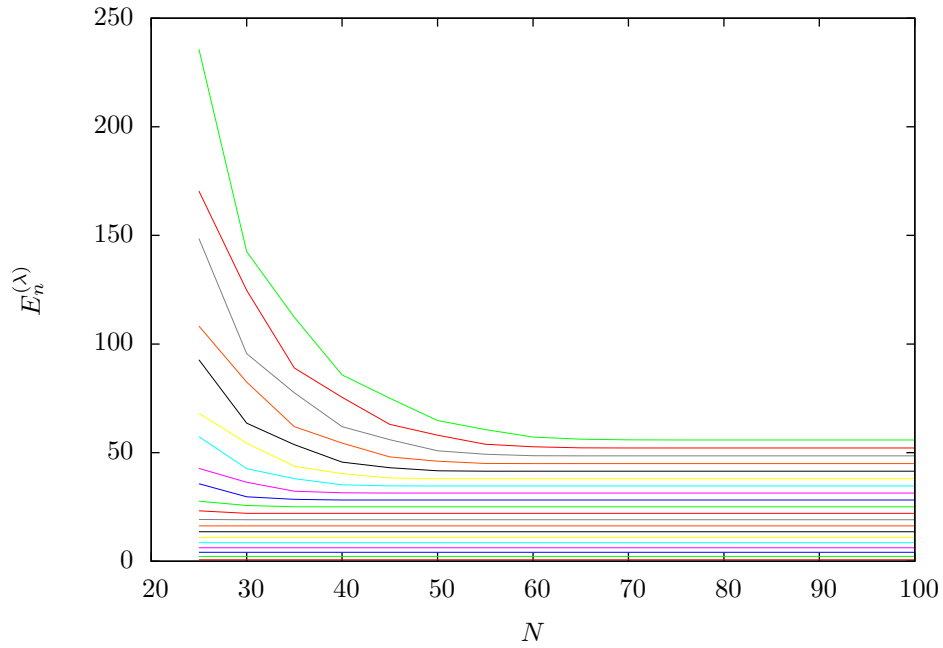


Slika 1: Odvisnost prvih 100 lastnih energij anharmonskega oscilatorja od motnje  $\lambda$

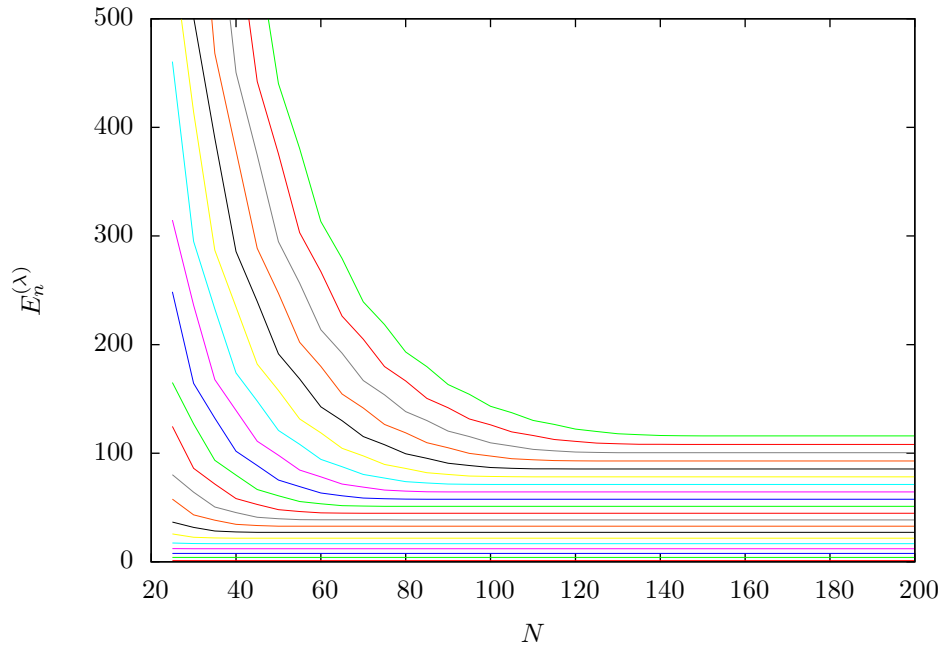
V primeru brez motnje energija je  $n$ -tega stanja linearno narašča z  $n$ , kar seveda pričakujemo po enačbi  $E_n^{(0)} = n + 1/2$ . Pri povečevanju motnje odvisnost postaja superlinearna, povečajo pa se tudi lastne energije najnižjih stanj. Odvisnost pri  $\lambda = 1$  lahko približno opišemo kot  $E_n^{(1)}(n) = 2.6 + 2.28 \cdot n^{1.33}$ .

## 3 Konvergenca lastnih energij

Opazoval sem tudi, kako se energije lastnih stanj približujejo konstanti vrednosti, ko povečujemo velikost matrike. V ta namen se študiral le prvih 20 lastni stanj. Še vedno sem uporabil matriko, skonstruirano po postopku iz prvega poglavja.



Slika 2: Konvergenca stanj s konstruirano matriko in  $\lambda = 0.1$

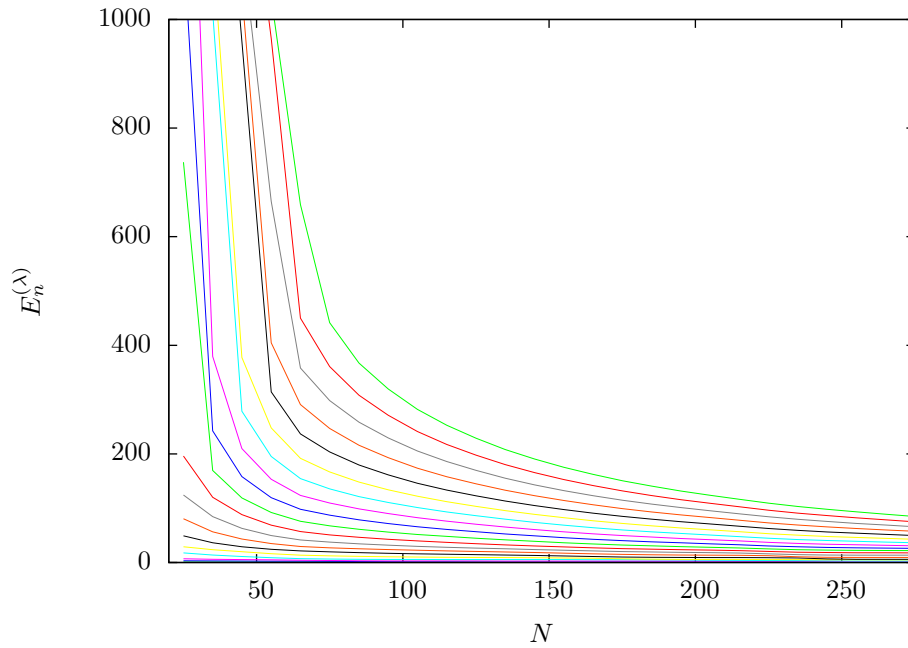


Slika 3: Konvergenca stanj s konstruirano matriko in  $\lambda = 1$

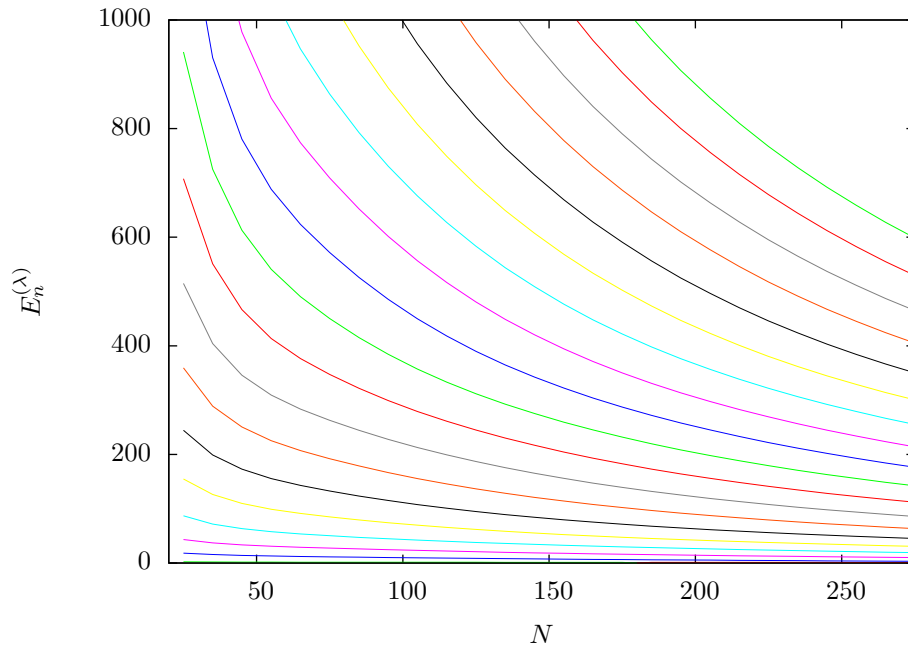
Opazimo, da so pri uporabi premajhnih matrik lastne energije vedno prevelike. Pri povečevanju  $N$ , torej pri dodatku večjega števila osnovnih stanj harmonskega oscilatorja, lastne vrednosti padejo in se počasi približujejo končnim vrednostim.

Enak postopek sem ponovil tudi z baznimi stanji, dobljenimi po Lanczosevem algoritmu. Najprej sem poskusil za začetno stanje vzeti osnovno stanje HO. Pri tem sem zašel v težave, saj je pri majhni motnji to stanje blizu lastnega stanja hamiltoniana. Rezultati so dosti boljši, če za začetno stanje uporabim produkt po elementih med osnovnim stanjem in naključnim vektorjem. Takšno

stanje ima še vedno Gaussovo envelopo in gre na obeh koncih proti nič, zato nimamo težav zaradi robnih efektov. Hkrati pa zaradi naključnosti ni blizu nobenemu lastnemu stanju hamiltoniana.

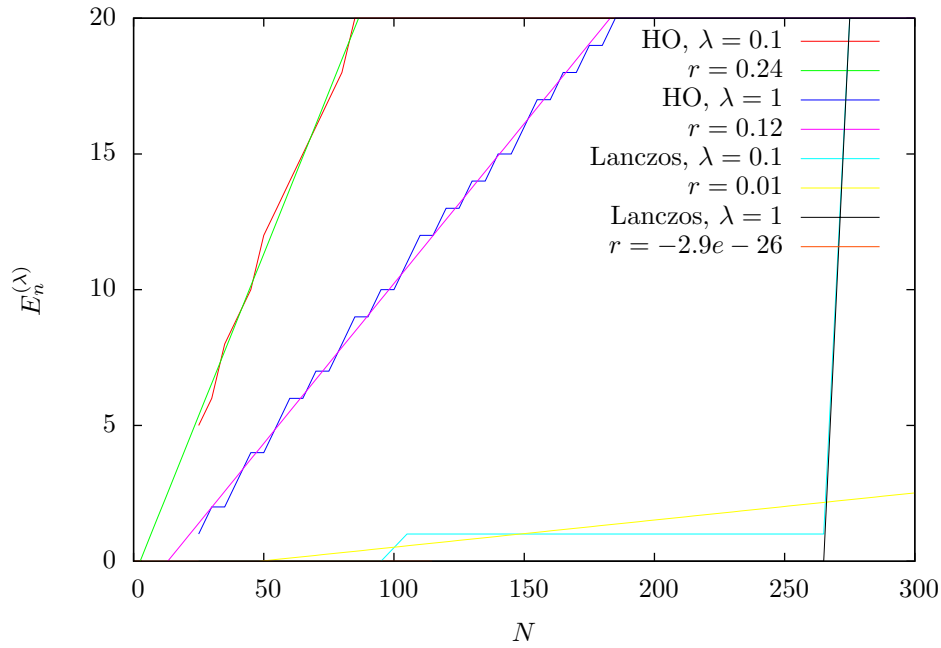


Slika 4: Konvergenca stanj z Lanczosevim algoritmom in  $\lambda = 0.1$



Slika 5: Konvergenca stanj z Lanczosevim algoritmom in  $\lambda = 1$

Lanczosev algoritem se v tem primeru izkaže za slabšega, saj tudi pri zelo velikih matrikah ( $250 \times 250$ ) energije ne skonvergirajo. Napake lahko pripišemo numerični nenatančnosti, saj pri Lanczosevem postopku pogosto odštevamo vektorje med seboj. Poleg tega je natančnost omejena z diskretizacijo. Če želimo  $N$  ortogonalnih baznih stanj, mora biti prostor diskretiziran na vsaj



Slika 6: Konvergenca in delež natančno izračunanih lastnih energij

$N$  enot, še boljša pa je bolj fina diskretizacija. V našem primeru ima konstrukcija matrike iz prvega poglavja odločilno prednost, saj se izognemo tako diskretizaciji prostora kot numeričnemu odštevanju vektorjev.

Nazadnje sem preverjal še število stanj, ki so dovolj blizu njihove končne vrednosti, v odvisnosti od velikosti matrike  $N$ . Mera za dovolj blizu je bila, da se je energija razlikovala od končne vrednosti za največ  $\varepsilon = 0.001$ . Ket končno vrednost sem uporabil vrednosti pri  $N = 1000$ . S kontruirano matriko opazimo lepo linearno naraščanje, naklon premice pa je kar enak iskanemu številu  $r$ .

Za  $\lambda = 1$  je vrednost  $r$  malo nad  $1/10$ . Iz tega lahko sklepamo, da so lastne energije na sliki 1, kjer sem za izračun 100 energij uporabil 1000 lastnih stanj, izračunane z natančnostjo ravno  $\varepsilon$ , torej  $1/1000$ .