CWR Vorleiststung 04

Mohamad Al Farhan

June 2021

Aufgabe 28

1)

Mit $\omega = \hbar = m = 1$ ist der analytische Wert des n-ten Eigenwerts λ_n des ungestörten harmonischen Oszillators gegeben durch:

$$\lambda_n = n + \frac{1}{2}. \tag{1}$$

Diese werden nummerisch bestimmt. Dabei wird vorgegangen in der Datei code.c wie in Aufgabe 1 beschrieben. Mit der Diskretisierung von H_0 in der computational Basis, erhält man eine symmetrische Matrix H_0 mit:

$$H_{i,i} = \frac{1}{(\Delta x)^2} + V(x_i) \tag{2}$$

und

$$H_{i,i+1} = \frac{1}{(\Delta x)^2}. \tag{3}$$

In Abbildung 1 werden die ersten 20 Eigenwerte aufgetragen. Die ersten 10 nummerischen und analytischen Werte stimmen fast exakt miteinander überein. Danach tritt eine Abweichung auf, die $\propto n^2$ wächst. Die Abweichung treten bei großen n auf, weil es bei großen Energien wahrscheinlicher ist, dass der sich Teilchen weit vom Ursprung aufhält. Dadurch werden die nummerische Fehler aufgrund der Diskretisierung verstärkt. Im Gegensatz zur Numerik, ist beim analytischen Fall der Raum x nicht durch $(-5, 5)$ beschränkt. Der Quadrat des Betrags der ersten drei Eigenzustände wird in Abhängigkeit des Raums in Abbildung 2 dargestellt.

2)

Nun wird der gestörte Hamilton-Operator mit $g = 0.5$ betrachtet. Die Implementierung befindet sich in der Datei code.c. In Abbildung 3 werden die Resediuen der ersten vier Eigenwerte, welche nach Gleichung 4 bestimmt werden gegen Δx aufgetragen.

$$\text{Res}(\Delta x) = \left| \frac{E_\alpha(\Delta x_i) - E_\alpha(\Delta x_{i-1})}{E_\alpha(\Delta x_i)} \right| \tag{4}$$

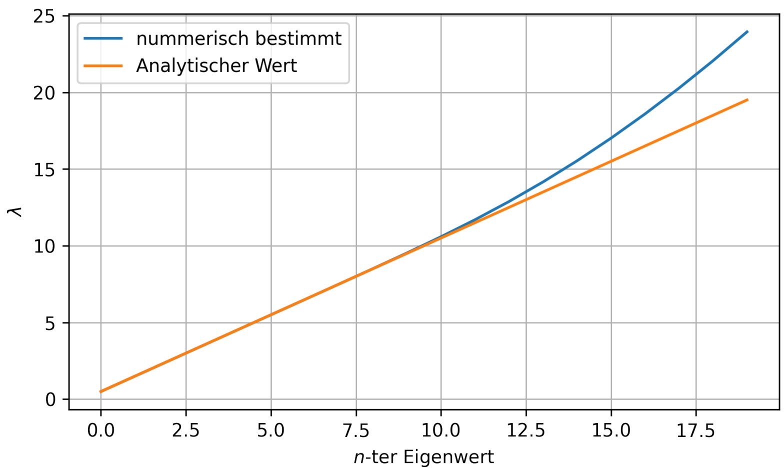

Abbildung 1: Die ersten 20 Eigenwerte des ungestörten Hamilton-Operators.

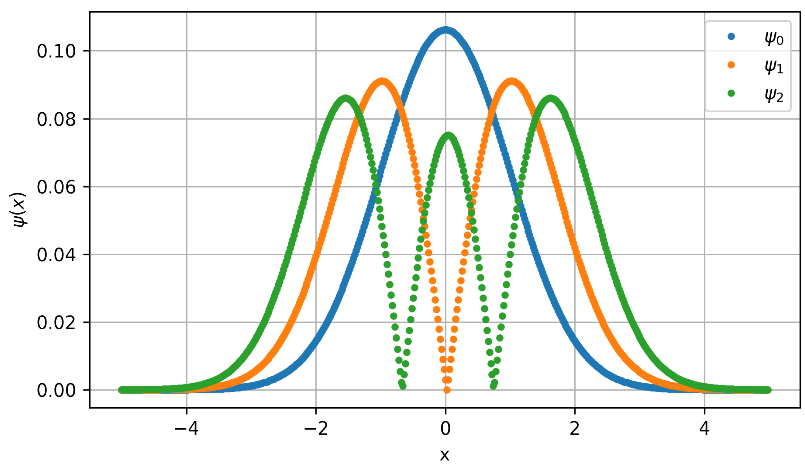

Abbildung 2: Betrag-Quadrat der ersten drei Eigenzustände in Abhängigkeit des Orts x.

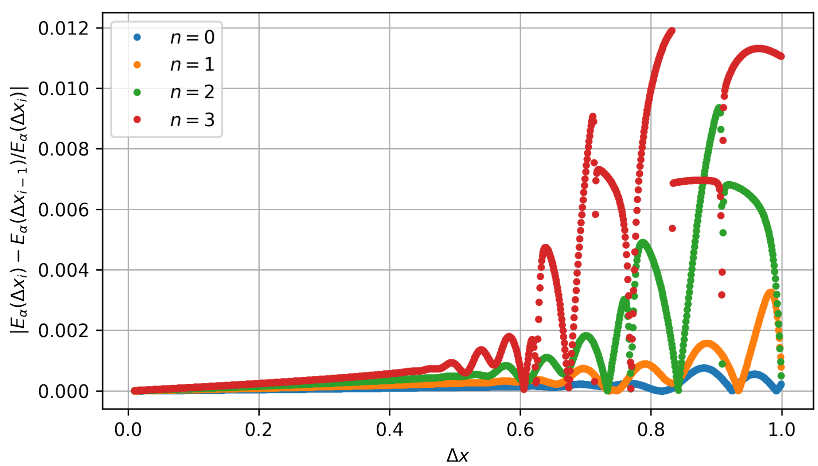

Abbildung 3: Resediuen der ersten vier Eigenwerte E_α in Abhängigkeit von Δx.

Hier ist zu beobachten, dass je näher Δx an $\eta = \sqrt{\frac{\hbar}{\omega m}} = 1$ ist, desto großer ist die Abweichung und damit das Residuum. Dieser Effekt wird zusätzlich je größer der Eigenwert ist, verstärkt.

3)

Die Implementierung befindet sich in der Datei Aufgabe_3.c. Es wird folgender Maßen vorgegangen: Zuerst wird die diskrete ungestörte Hamilton-Matrix H_0 und die Hamilton-Matrix bei Störung H wie in **1)** bestimmt. Danach werden die Eigenvektoren u_α von H_0 bestimmt. Anschließend wird mit den ersten M Eigenvektoren eine neue $(M \cdot M)$-Matrix $H_{\alpha,\beta}$ erstellt. Die Einträge dieser Matrix sind zu bestimmen nach folgender Gleichung:

$$H_{\alpha,\beta} = \frac{< u_\alpha | H u_\beta >}{< u_\alpha | u_\beta >}, \tag{5}$$

wobei das Skalarprodukt nummerisch berechnet wird mit:

$$< a | b >= \sum_i a(x_i) \cdot b(x_i) \cdot \Delta x \approx \int_{\mathbb{R}} a(x) \cdot b(x) dx \tag{6}$$

zu beachten ist, dass beide Funktionen reelwertig sind, weshalb das Komplex-Konjugieren hier nicht notwendig ist. Nun wird die Matrix $H_{\alpha,\beta}$ diagonalisiert. Deren Eigenwerte ergeben E^*_α. Die jeweiligen ersten vier Eigenwerte werden für $M \in \{4{,}8{,}16{,}32{,}64{,}128\}$ bestimmt und in der Datei A3_Eigenvalues gespeichert. Die erhaltenen Werte weisen sehr große Abweichung zu den analytischen Werten auf. Es ist keinerlei Konvergenzverhalten zu erkennen. Die Genauigkeit wird schlechter je mehr Eigenvektoren verwendet werden. Vermutlich liegt dies an dem diskreten Skalarprodukt, der wegen dem großen Δx zu sehr von dem Wert des Integrals abweicht. Möglich ist auch ein systematischer Fehler bei der Erfassung der Eigenvektoren von H_0. Eventuell eignet sich eine analytische Bestimmung der ersten M Eigenzustände des ungestörten Hamilton-Operators und deren Skalarprodukte besser. Dies ist allerdings aus der Aufgabenstellung wahrscheinlich ungewollt.