

# CWR Vorleistungung 04

Mohamad Al Farhan

June 2021

## Aufgabe 28

1)

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

$$\lambda_n = n + \frac{1}{2}. \quad (1)$$

Diese werden numerisch 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:

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

und

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

In Abbildung 1 werden die ersten 20 Eigenwerte aufgetragen. Die ersten 10 numerischen 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 numerische 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 Residuen der ersten vier Eigenwerte, welche nach Gleichung 4 bestimmt werden gegen  $\Delta x$  aufgetragen.

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

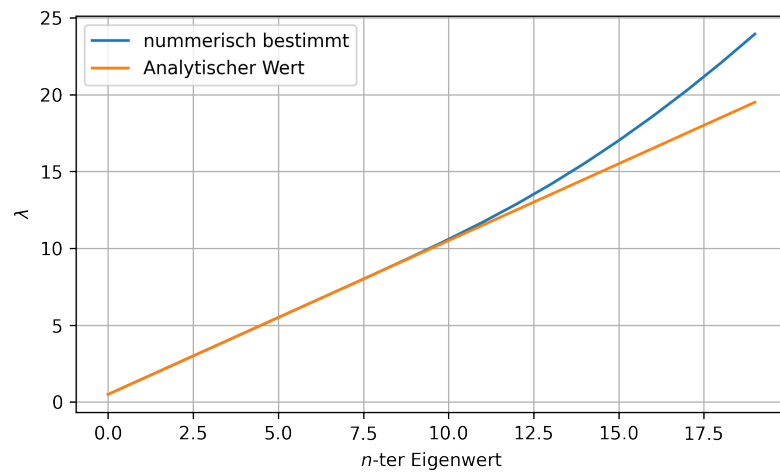


Abbildung 1: Die ersten 20 Eigenwerte des ungestörten Hamilton-Operators.

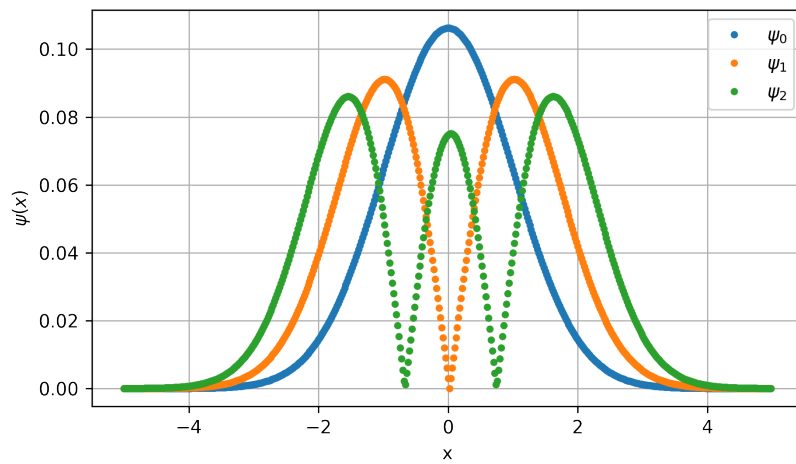


Abbildung 2: Betrag-Quadrat der ersten drei Eigenzustände in Abhängigkeit des Orts  $x$ .

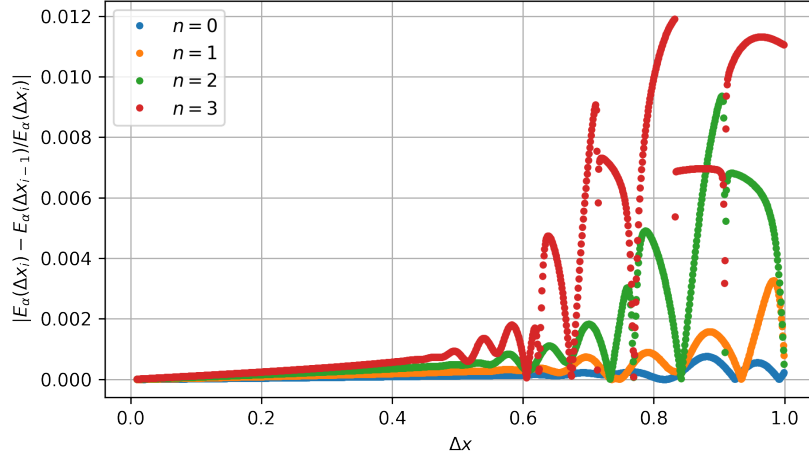


Abbildung 3: Residuen der ersten vier Eigenwerte  $E_\alpha$  in Abhängigkeit von  $\Delta x$ .

Hier ist zu beobachten, dass je näher  $\Delta x$  an  $\eta = \sqrt{\frac{\hbar}{\omega m}} = 1$  ist, desto größer 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 a3.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  $u_\alpha$  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:

$$H_{\alpha,\beta} = \langle u_\alpha | H | u_\beta \rangle, \quad (5)$$

wobei das Skalarprodukt numerisch berechnet wird mit:

$$\langle a | b \rangle = \sum_i a(x_i) \cdot b(x_i). \quad (6)$$

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  $E_\alpha^*$ . Die jeweiligen ersten vier Eigenwerte werden für  $M \in \{4, 8, 16, 32, 64, 128\}$  bestimmt, in der Datei A3\_Eigenvalues gespeichert und in Abbildung 4 aufgetragen. Die erhaltenen Werte sind in der Größenordnung der analytischen Werte und konvergieren relativ schnell.

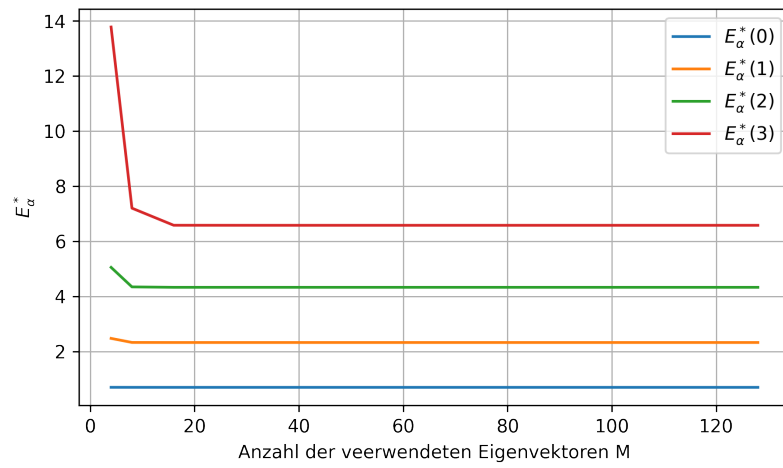


Abbildung 4: Die ersten vier Energien des gestörten Hamilton-Operators in Abhängigkeit der Anzahl der verwendeten Eigenvektoren beim Variationsansatz.