Matematično-fizikalni praktikum

3. naloga: Lastne vrednosti in lastni vektorji

Tadej Tomažič

19. oktober 2024

Kazalo

Slike

1 Naloga

Enodimenzionalni linearni harmonski oscilator (delec mase m s kinetično energijo $T(p) = p^2/2m$ v kvadratičnem potencialu $V(q) = m\omega^2 q^2/2$) opišemo z brezdimenzijsko Hamiltonovo funkcijo

$$H_0 = \frac{1}{2}\left(p^2 + q^2\right) ,$$

tako da energijo merimo v enotah $\hbar\omega$, gibalne količine v enotah $(\hbar m\omega)^{1/2}$ in dolžine v enotah $(\hbar/m\omega)^{1/2}$. Lastna stanja $|n\rangle$ nemotenega Hamiltonovega operatorja H_0 poznamo iz osnovnega tečaja kvantne mehanike [Strnad III]: v koordinatni reprezentaciji so lastne valovne funkcije

$$|n\rangle = (2^n n! \sqrt{\pi})^{-1/2} \mathrm{e}^{-q^2/2} \mathcal{H}_n(q) ,$$

kjer so $\mathcal{H}_n$ Hermitovi polinomi. Lastne funkcije zadoščajo stacionarni Schrödingerjevi enačbi

$$H_0|n^0\rangle = E_n^0|n^0\rangle$$

z nedegeneriranimi lastnimi energijami $E_n^0 = n + 1/2$ za $n = 0, 1, 2, \ldots$. Matrika $\langle i|H_0|j\rangle$ z $i, j = 0, 1, 2, \ldots, N-1$ je očitno diagonalna, z vrednostmi $\delta_{ij}(i+1/2)$ po diagonali. Nemoteni Hamiltonki dodamo anharmonski člen

$$H = H_0 + \lambda q^4 .$$

Kako se zaradi te motnje spremenijo lastne energije? Iščemo torej matrične elemente $\langle i|H|j\rangle$ *motenega* Hamiltonovega operatorja v bazi *nemotenih* valovnih funkcij $|n^0\rangle$, kar vemo iz perturbacijske teorije v najnižjem redu. Pri računu si pomagamo s pričakovano vrednostjo prehodnega matričnega elementa za posplošeno koordinato

$$q_{ij} = \langle i|q|j\rangle = \frac{1}{2}\sqrt{i+j+1}\ \delta_{|i-j|,1} ,$$

ki, mimogrede, uteleša izbirno pravilo za električni dipolni prehod med nivoji harmonskega oscilatorja. V praktičnem računu moramo seveda matriki q_{ij} in $\langle i|H|j\rangle$ omejiti na neko končno razsežnost N.

Naloga: Z diagonalizacijo poišči nekaj najnižjih lastnih vrednosti in lastnih valovnih funkcij za moteno Hamiltonko $H = H_0 + \lambda q^4$ ob vrednostih parametra $0 \le \lambda \le 1$. Rešujemo torej matrični problem lastnih vrednosti

$$H|n\rangle = E_n|n\rangle .$$

Nove (popravljene) valovne funkcije $|n\rangle$ so seveda linearna kombinacija starih (nemotenih) valovnih funkcij $|n^0\rangle$. Matrike velikosti do $N = 3$ ali $N = 4$ lahko za silo diagonaliziramo peš; za diagonalizacijo pri večjih N uporabi enega ali več numeričnih postopkov, na primer rutine `tred2` in `tqli` iz zbirke Numerical Recipes ali iz kakega drugega vira (npr Python). Vsaj enega izmed postopkov izvedi 'ročno' (sprogramiraj, uporabi izvorno kodo). Preveri, da v limiti $\lambda \to 0$ velja $E_n \to E_n^0$ (če ne velja, je verjetno nekaj narobe s programom). Razišči, kako so rezultati odvisni od razsežnosti N matrik H_0 oziroma q^4. Kakšna je konvergenca lastnih vrednosti pri velikih N?

Namesto da računamo matrične elemente $q_{ij} = \langle i|q|j\rangle$ in perturbacijsko matriko razumemo kot $[q_{ij}]^4$, bi lahko računali tudi matrične elemente kvadrata koordinate

$$q_{ij}^{(2)} = \langle i|q^2|j\rangle$$

in motnjo razumeli kot kvadrat ustrezne matrike,

$$\lambda q^4 \to \lambda \left[q_{ij}^{(2)} \right]^2 ,$$

ali pa bi računali matrične elemente četrte potence koordinate

$$q_{ij}^{(4)} = \langle i|q^4|j\rangle$$

in kar to matriko razumeli kot motnjo,

$$\lambda q^4 \to \lambda \left[q_{ij}^{(4)} \right] .$$

Kakšne so razlike med naštetimi tremi načini izračuna lastnih vrednosti in funkcij? Pri računu poleg enačbe za $\langle i|q|j\rangle$ uporabi še enačbi

$$\langle i|q^2|j\rangle = \frac{1}{2}\left[\sqrt{j(j-1)}\,\delta_{i,j-2} + (2j+1)\,\delta_{i,j} + \sqrt{(j+1)(j+2)}\,\delta_{i,j+2}\right]$$

ter

$$\begin{aligned}\langle i|q^4|j\rangle = \frac{1}{2^4}\sqrt{\frac{2^i\,i!}{2^j\,j!}}\Big[&\quad \delta_{i,j+4} + 4\,(2j+3)\,\delta_{i,j+2} + 12\left(2j^2+2j+1\right)\,\delta_{i,j} \\ &+ \quad 16j\left(2j^2-3j+1\right)\,\delta_{i,j-2} + 16j\left(j^3-6j^2+11j-6\right)\,\delta_{i,j-4}\Big] ,\end{aligned}$$

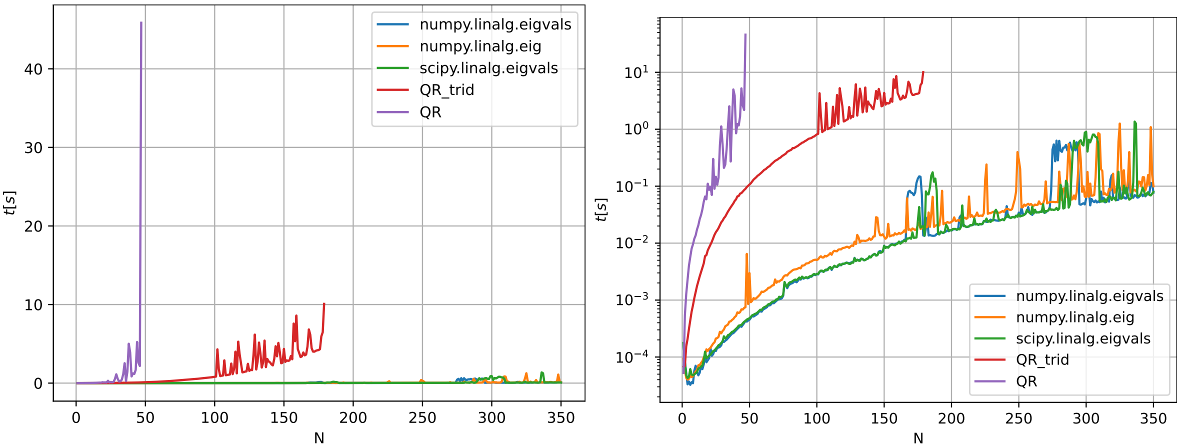
ki ju ni težko izpeljati iz rekurzijskih zvez za Hermitove polinome.

Dodatna naloga: Poišči še nekaj najnižjih lastnih energij in lastnih funkcij za problem v potencialu z dvema minimumoma

$$H = \frac{p^2}{2} - 2q^2 + \frac{q^4}{10} .$$

2 Rešitev

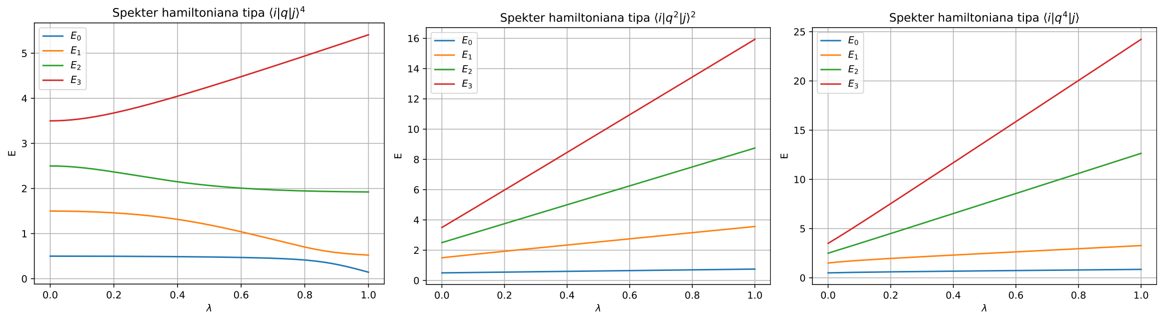
Najprej si poglejmo hitrost različnih funkciji. Funkciji `QR` in `QR_trid` so napisane s pomočjo primera na spletni učilnici. Postopek `QR` uporablja razcep QR in iterativno dobimo lastne vrednosti po diagonali, če spremenimo začetno matriko v $A = RQ$. Druga metoda, pa je deluje preko tridiagonalizacije in Hausholderjevih zrcaljen. Slednja metoda deluje le ko je matrika simetrična.



Slika 1: Hitrost algoritmov v odvisnosti velikosti matrike

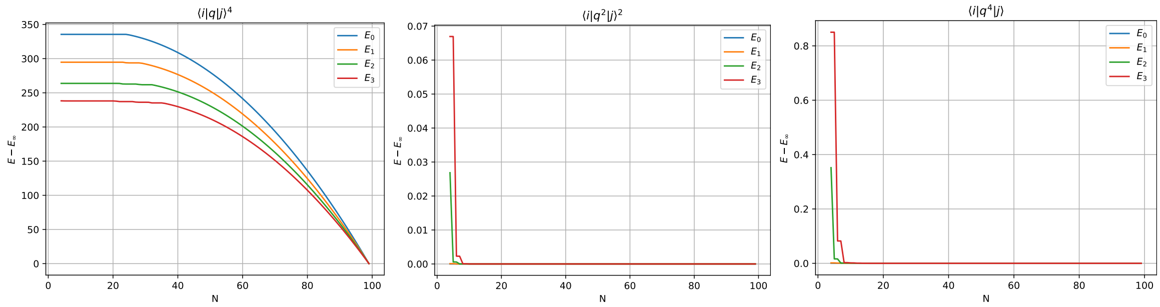
Vidimo, da je najhitrejša metoda `scipy.linalg.eigvals()`, zato jo v nadeljevanju uporabimo.

Poglejmo si še odvisnost najnižjih energijskih spektrov od parametra λ in kako smo definirali matrične elemente hamiljtonjanke.



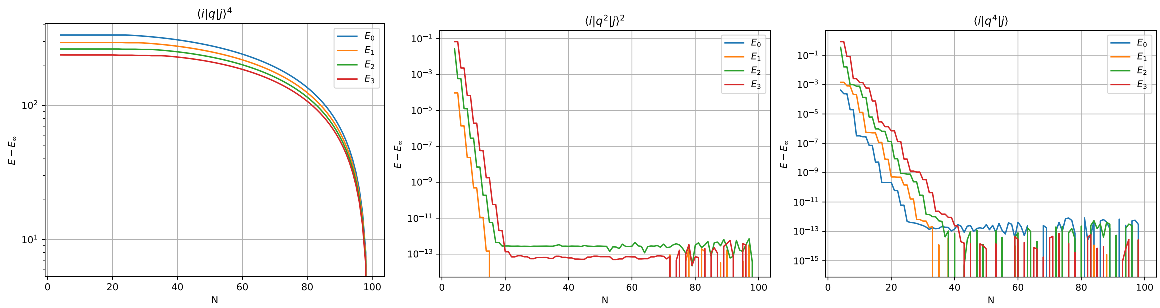
Slika 2: Energijski spekter v odvisnosti parametra λ

Kako pa lastne energije konvergirajo s povečavo hamiltonjana? Ker dva grafa nista najbolj



Slika 3: Spreminjanje energijskega spektra prvih štirih energij v odvisnosti velikosti hamiltonjana

pregledna si poglejmo še logaritemsko skalo. Vidimo, da najhitreje konvergira matrika z



Slika 4: Spreminjanje energijskega spektra prvih štirih energij v odvisnosti velikosti hamiltonjana v logaritemski skali

elementi $H_{ij} = \langle i|q^2|j\rangle^2$.