

Matematično-fizikalni praktikum

**3. naloga: Lastne vrednosti in lastni vektorji**

Tadej Tomažič

17. oktober 2024

## Kazalo

1	Naloga	2
2	Rešitev	4

## 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

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

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

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

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  $n = 0, 1, 2, \dots$ . Matrika  $\langle i | H_0 | j \rangle$  z  $i, j = 0, 1, 2, \dots, N-1$  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 *nemotnih* 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  $0 \leq \lambda \leq 1$ . Rešujemo torej matrični problem lastnih vrednosti

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

Nove (popravljenе) valovne funkcije  $|n\rangle$  so seveda linearna kombinacija starih (nemotnih) 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 izvirno kodo). Preveri, da v limiti  $\lambda \rightarrow 0$  velja  $E_n \rightarrow E_n^0$  (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,

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

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,

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

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

$$\begin{aligned} \langle i|q^4|j \rangle = \frac{1}{24} \sqrt{\frac{2^i i!}{2^j j!}} \left[ \right. & \delta_{i,j+4} + 4(2j+3) \delta_{i,j+2} + 12(2j^2+2j+1) \delta_{i,j} \\ & + 16j(2j^2-3j+1) \delta_{i,j-2} + 16j(j^3-6j^2+11j-6) \delta_{i,j-4} \left. \right], \end{aligned}$$

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

Test123