



GEORG-AUGUST-UNIVERSITÄT
GÖTTINGEN

ÜBUNG: COMPUTERGESTÜTZTES WISSENSCHAFTLICHES
RECHNEN

Hausaufgabe 4

Student: Justus Multhaup
E-Mail: justus.multhaup@stud.uni-goettingen.de
Tutor: Malte Thumann
E-Mail: malte.thumann@stud.uni-goettingen.de
Abgabe am: 04.07.2021

Testat:

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	3
2	Harmonischer Oszillator	3
3	Anharmonischer Oszillator	6
3.1	Diskretisierungsansatz	6
3.2	Variationsansatz	10

1 Einleitung

In dieser Hausaufgabe werden die Eigenwerte und Eigenfunktionen des harmonischen und des gestörten, anharmonischen Oszillators numerisch bestimmt und die Konvergenz untersucht.

2 Harmonischer Oszillator

Es wird zunächst der Hamilton-Operator des ungestörten harmonischen Oszillators in natürlichen Einheiten betrachtet:

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

\hat{p} ist der Impuls- und \hat{x} der Ortsoperator. Zur numerischen Berechnung der Energieeigenwerte und Eigenvektoren wird die x -Achse in $N = 500$ diskrete Punkte im Intervall $x \in [-5, 5]$ eingeteilt. Die analytischen Eigenwerte lauten:

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

In Abbildung 1 sind die numerischen Eigenwerte zusammen mit den Analytischen geplottet. Bei der numerischen Berechnung wird \hat{H}_0 als Matrix \mathbf{H} in der computational basis aufgestellt und mithilfe der Lapack-Bibliothek diagonalisiert.

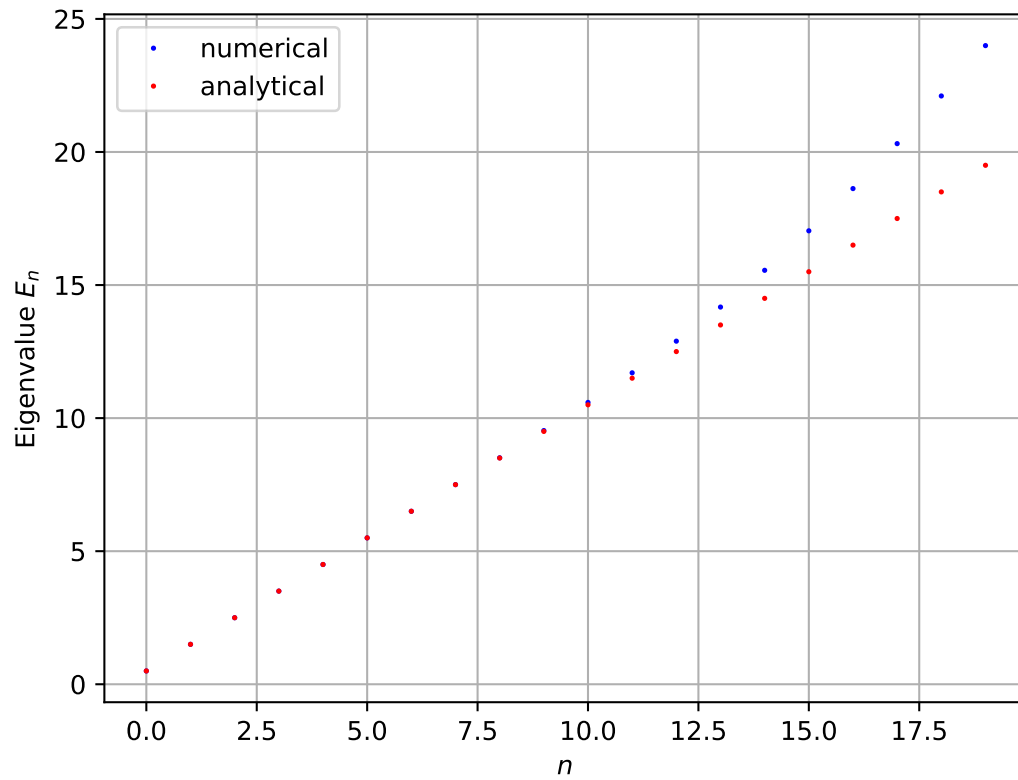


Abbildung 1: Plot der ersten 20 Eigenwerte. Für steigende n wird die Abweichung der numerischen Lösung von der Analytischen deutlich.

In Abbildung 2 sind die numerischen Absolutquadrate der ersten drei Eigenvektoren geplottet.

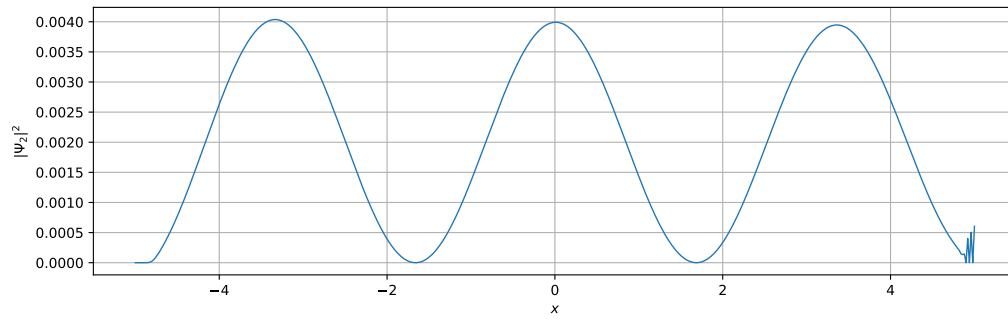
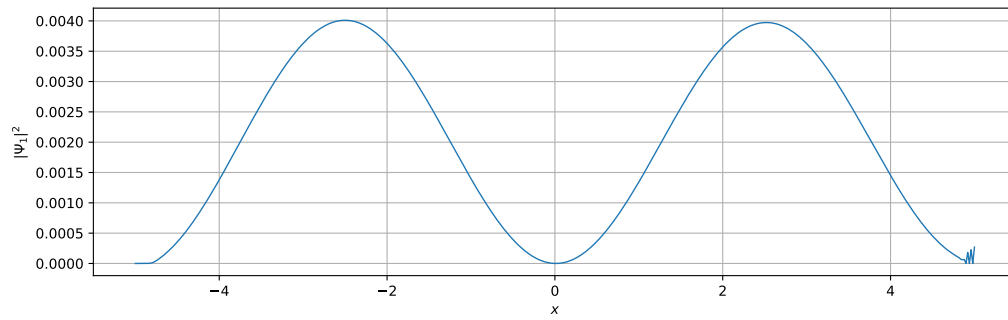
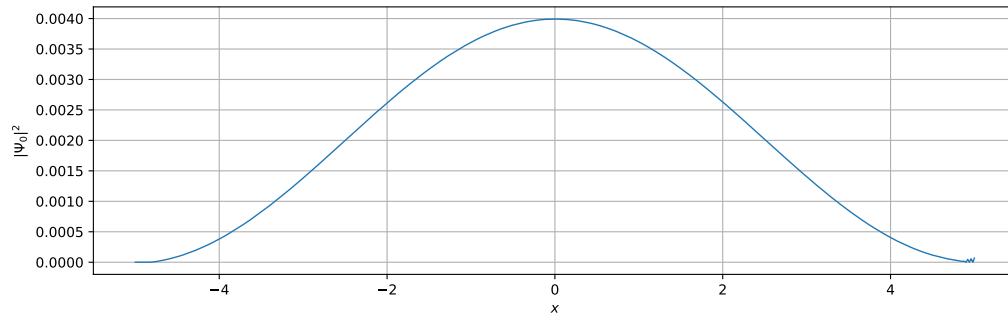


Abbildung 2: Plot der Absolutquadrate der ersten drei Eigenvektoren. Oben: Eigenvektor zu E_0 , Mitte: Eigenvektor zu E_1 , Unten: Eigenvektor zu E_2 . An den rechten Intervallgrenzen scheint die Lösung nicht stabil zu sein.

3 Anharmonischer Oszillator

Betrachtet wird nun eine zusätzliche Störung. Der gestörte Hamilton-Operator lautet:

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \hat{H}_0 + \hat{H}' \\ &= \frac{1}{2}\hat{p}^2 + \frac{1}{2}\hat{x}^2 + g \cdot \hat{x}^4.\end{aligned}\tag{3}$$

Wir wählen $g = 0,5$.

3.1 Diskretisierungsansatz

Mit demselben Verfahren wie im vorherigen Abschnitt werden zunächst die Eigenwerte und Eigenvektoren bestimmt. Die ersten 20 Eigenwerte sind in Abbildung 3 geplottet.

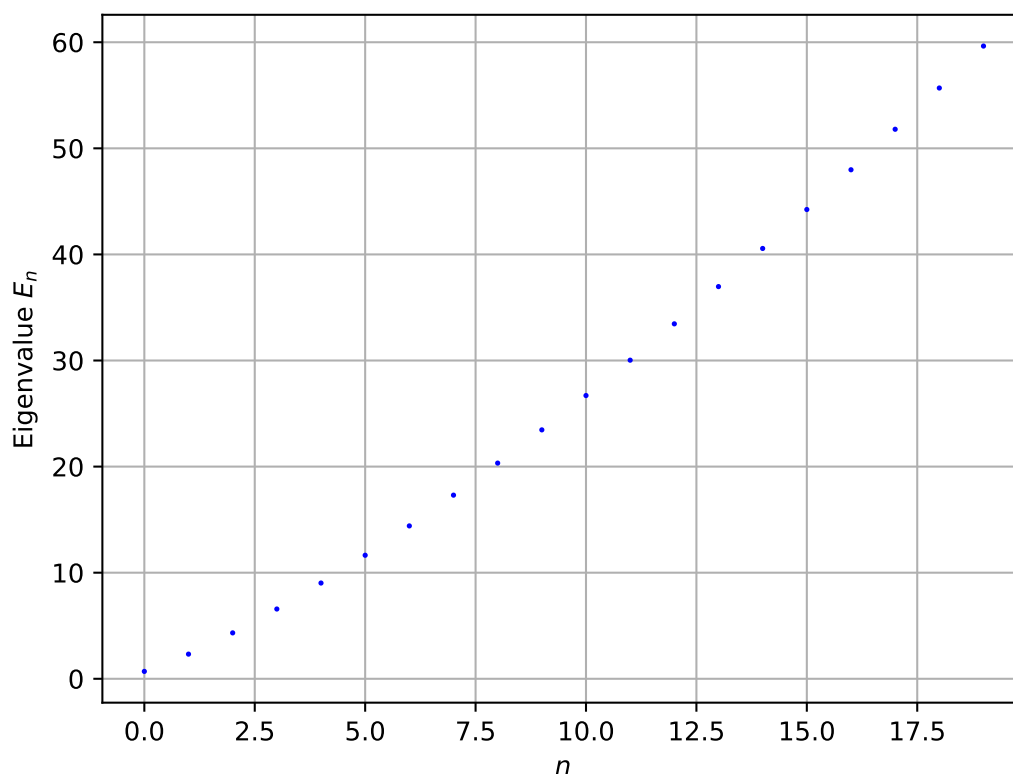


Abbildung 3: Plot der ersten 20 Eigenwerte. Es ist deutlich zu erkennen, dass die Eigenwerte mit steigendem n anders als im ungestörten Fall nicht linear ansteigen.

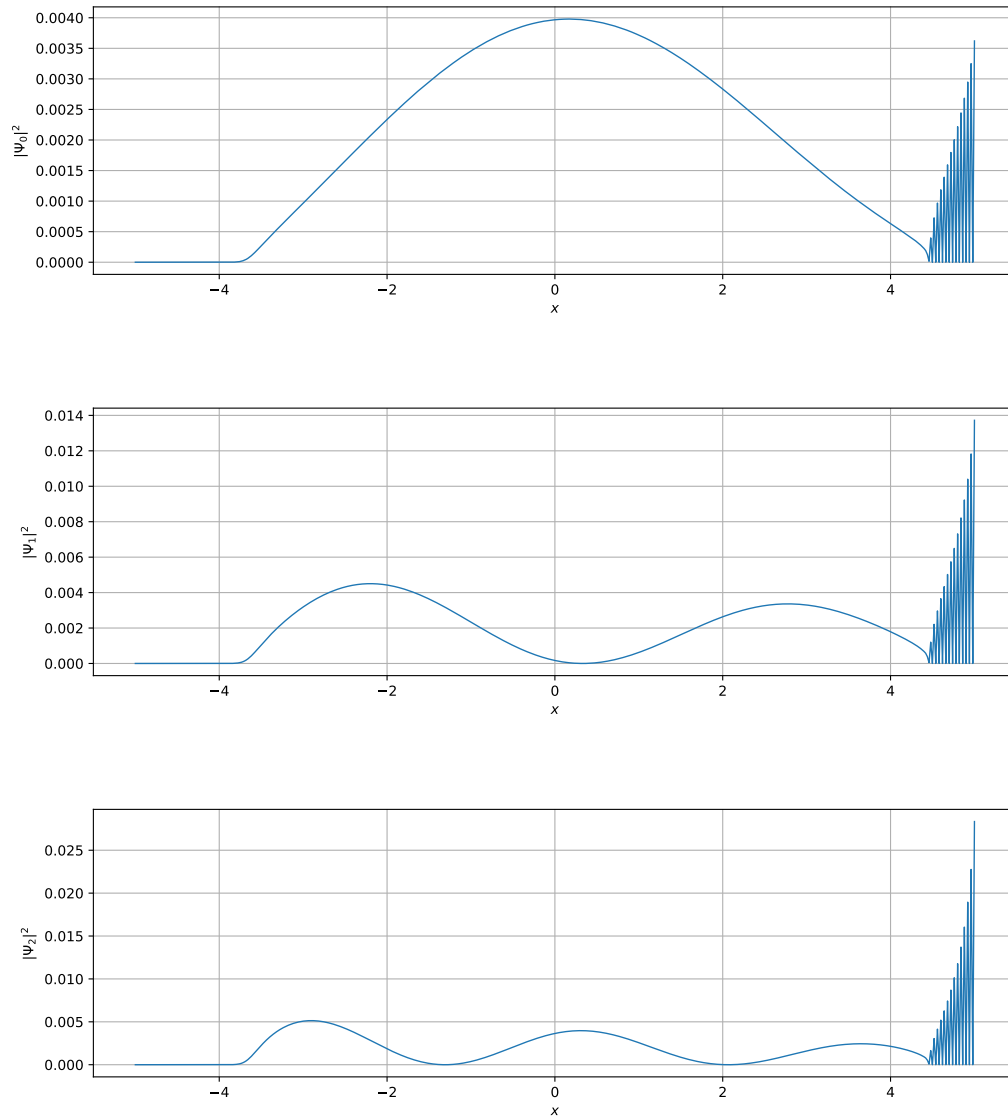


Abbildung 4: Absolutquadrate der ersten drei Eigenvektoren. Oben: Eigenvektor zu E_0 , Mitte: Eigenvektor zu E_1 , Unten: Eigenvektor zu E_2 . Offensichtlich sind die Wellenfunktionen nicht länger symmetrisch. Außerdem gehen sie bereits vor Erreichen der Intervallgrenzen asymptotisch gegen null. Am rechten Intervallrand passieren ganz wilde Sachen.

In Abbildung 4 sind die Absolutquadrate der ersten drei Eigenvektoren geplottet.

Um die Konvergenz zu untersuchen, wird nun der Diskretisierungsschritt Δx zwischen 1 und 10^{-2} variiert und die relativen Residuen $\Delta E_{rel}(\Delta x_i)$ zweier benachbarter Werte Δx_i und Δx_{i-1} für die ersten vier Eigenwerte geplottet:

$$E_{rel}(\Delta x_i) = \left| \frac{E(\Delta x_i) - E(\Delta x_{i-1})}{E(\Delta x_i)} \right|. \quad (4)$$

In Abbildung 5 sind die relativen Residuen für 1000 verschiedenen Δx_i geplottet.

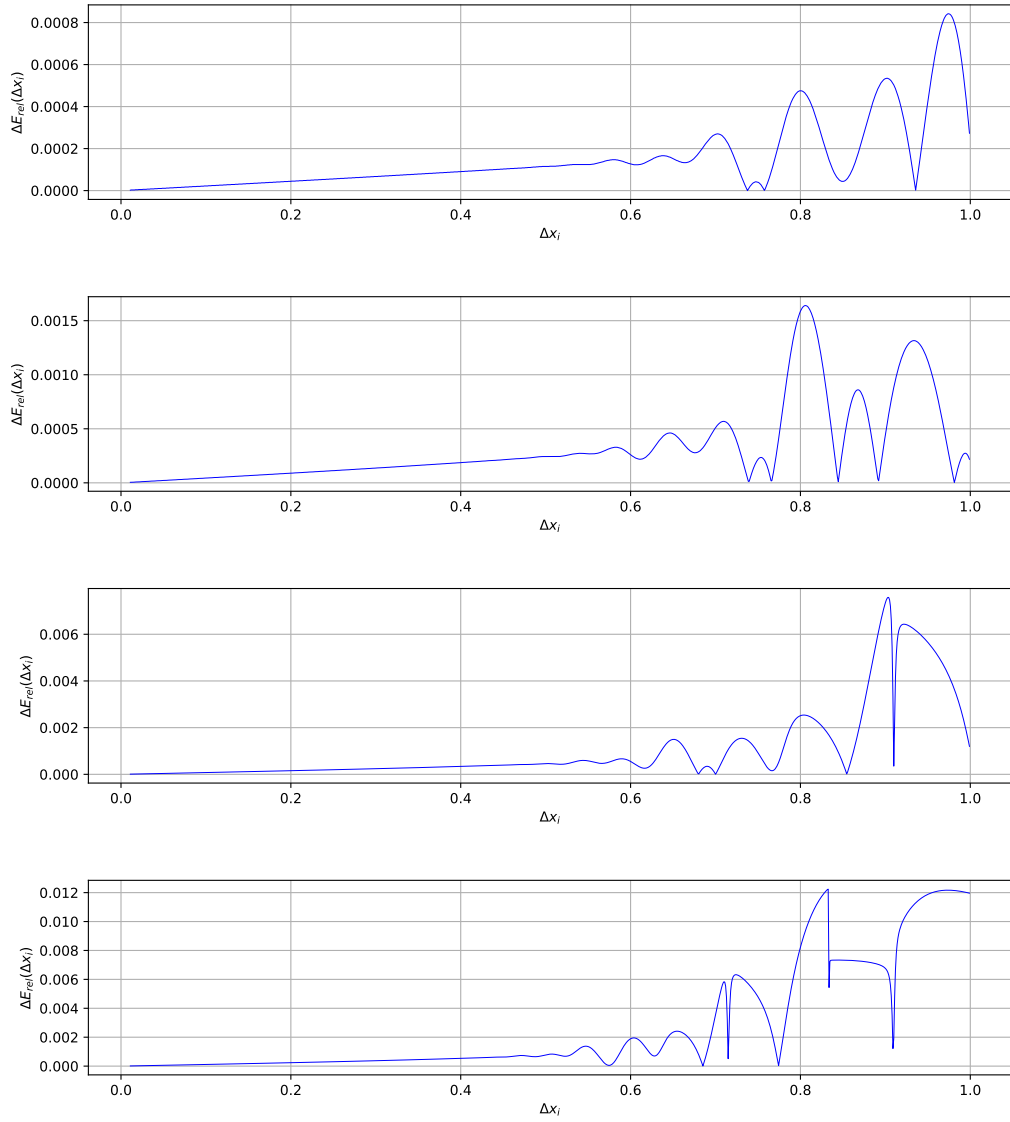


Abbildung 5: Plot der relativen Residuen in Abhängigkeit von Δx_i . Von oben nach unten: E_0 , E_1 , E_2 , E_3 . Bis $\Delta x_i \approx 0,5$ steigen die Residuen linear mit Δx_i , danach ergibt sich ein oszillierender Verlauf.

3.2 Variationsansatz

Alternativ werden nun die Eigenwerte des gestörten Hamilton-Operators (3) mithilfe eines Variationsansatzes bestimmt. Dazu werden zunächst die ersten 128 Eigenvektoren von \hat{H}_0 numerisch bestimmt, wobei eine Diskretisierung in 1000 Punkte gewählt wird. Diese Eigenvektoren $|u_\alpha\rangle$ bilden die Basis eines endlich dimensionalen Unterraumes des Eigenraumes von \hat{H}_0 , der gestörte Hamilton-Operator kann in dieser Basis als Matrix geschrieben werden. Die Matrixelemente lauten:

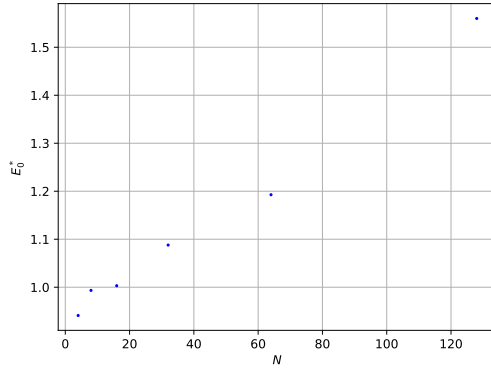
$$H_{\alpha\beta} = \langle u_\alpha | \hat{H} | u_\beta \rangle . \quad (5)$$

Bei den Berechnungen werden nur die ersten $N = 4, 8, 16, 32, 64, 128$ Eigenvektoren berücksichtigt. Das Skalarprodukt (5) lässt sich aufteilen:

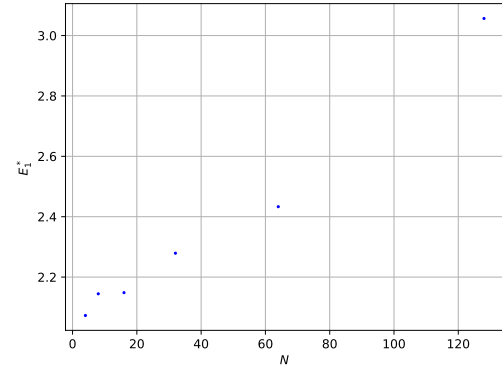
$$\begin{aligned} H_{\alpha\beta} &= \langle u_\alpha | \hat{H}_0 | u_\beta \rangle + \langle u_\alpha | \hat{H}' | u_\beta \rangle \\ &= E_\beta \langle u_\alpha | u_\beta \rangle + \langle u_\alpha | \hat{H}' | u_\beta \rangle \\ &= E_\beta \delta_{\alpha\beta} + \langle u_\alpha | \hat{H}' | u_\beta \rangle . \end{aligned} \quad (6)$$

\hat{H}' kann wie zuvor als Matrix geschrieben werden. Durch Diagonalisieren der Matrix in dieser Basis können nun die Eigenwerte des Operators \hat{H} näherungsweise bestimmt werden. In Abbildung 6 sind die ersten vier Eigenwerte in Abhängigkeit von N geplottet.

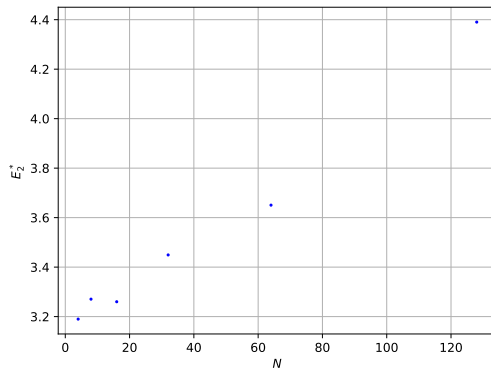
Alternativ lässt sich \hat{H}' auch direkt in tridiagonaler Form aufschreiben, in diesem Fall ist für jeden Eintrag in (5) zunächst das Matrix-Vektorprodukt $\hat{H}' | u_\beta \rangle$ zu bilden. In beiden Fällen konvergieren die Eigenwerte nicht. Ich habe allerdings nach stundenlanger Suche keinen Fehler gefunden. Beide Programmcodes sind auf Gitlab zur Verfügung gestellt, der Leser ist herzlich zur Fehlersuche eingeladen (die Eigenwerte in Abbildung 6 wurden mit `a28_3v1` berechnet).



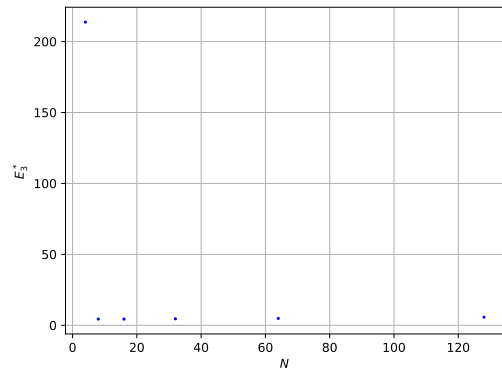
(a) Erster Eigenwert



(b) Zweiter Eigenwert



(c) Dritter Eigenwert



(d) Vierter Eigenwert

Abbildung 6: Plot der ersten vier mithilfe des Variationsansatzes berechneten Eigenwerte. Ein Vergleich mit Abbildung 3 zeigt, dass sich die mit den beiden Ansätzen ermittelten Werte stark voneinander unterscheiden. Außerdem ist keine Konvergenz erkennbar.