

UNIVERZA V LJUBLJANI
FAKULTETA ZA MATEMATIKO IN FIZIKO
ODDELEK ZA FIZIKO

MATEMATIČNO-FIZIKALNI PRAKTIKUM
3. naloga: Anharmonski oscilator

Žiga Šinigoj, 28191058

Ljubljana, oktober 2021

1 Uvod

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

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

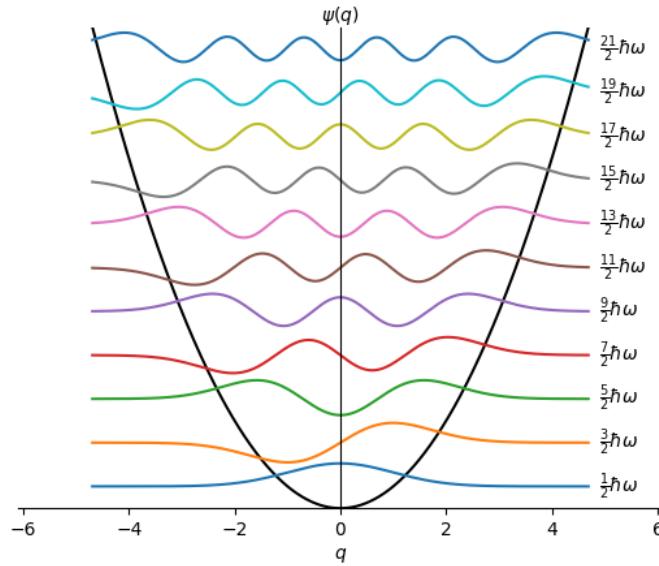
tako da energijo merimo v enotah $\hbar\omega$, gibalne količine v enotah $(\hbar m\omega)^{1/2}$ in dolžine v enotah $(\hbar/m\omega)^{1/2}$. Lastna stanja $|n\rangle$ nemotenega Hamiltonovega operatorja H_0 poznamo iz osnovnega tečaja kvantne mehanike [Strnad III]: v koordinatni reprezentaciji so lastne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



Slika 1: Lastne funkcije harmonskega oscilatorja pri lastnih vrednostih energije.

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

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 . 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,

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

Potrebujemo še rekurzivni zvezi:

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

ter

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

2 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 (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 $\lambda \rightarrow 0$ 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 ? Kakšne so razlike med naštetimi tremi načini izračuna lastnih vrednosti in funkcij?

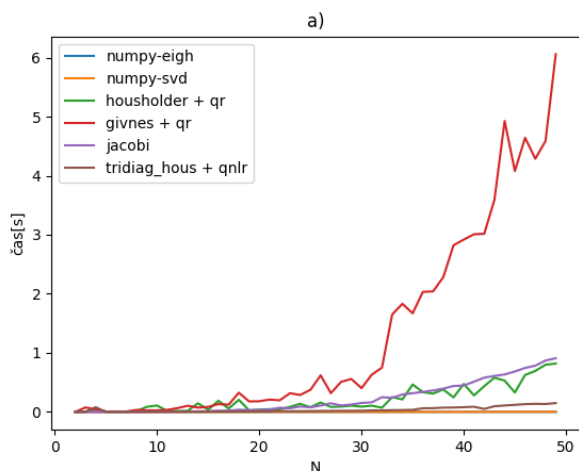
Dodatna naloga: Poišči še nekaj najnižjih lastnih energij in lastnih funkcij za problem v potencialu z dvema minimumoma

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

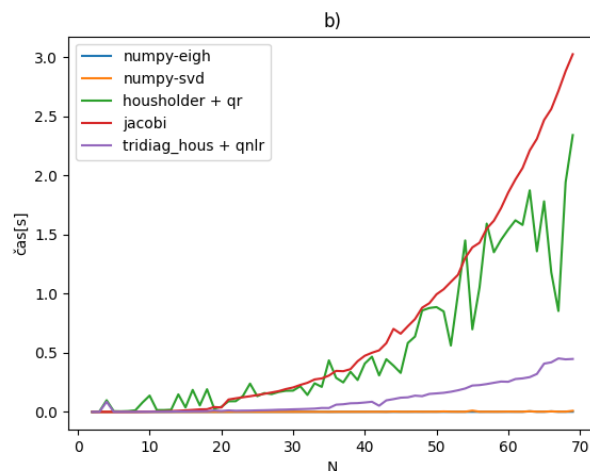
3 Rezultati

3.1 Primerjava metod za diagonalizacijo

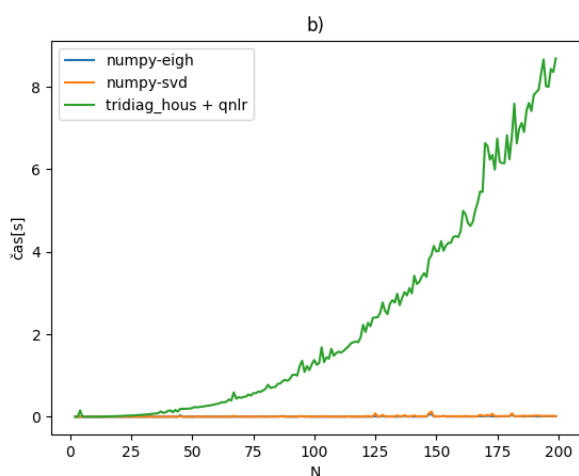
Primerjal sem vgrajeni metodi *svd* in *eigh* iz knjižnice *linalg* programskega paketa NumPy in pa metode iz predavanj. Sam sem dodal še Jacobijevo metodo. Givensove rotacije in Householderjeva zrcaljenja sem uporabil za QR razcep. Z QR iteracijo pa potem do lastnih vrednosti. Ker je časovna zahtevnost QR razcepa reda n^3 , je bolje če matriko spravimo v tridiagonalno in potem nadaljujemo z QR iteracijo. Tukaj sem uporabil funkciji iz predavanj. Meril sem časovno zahtevnost in natančnost, kjer sem vzel lastne vrednosti metode *eigh* za prave. Za parameter λ sem vzel vrednost $\lambda = 0.2$.



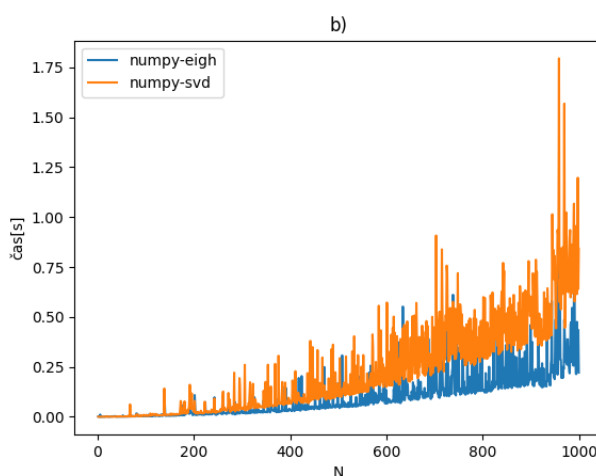
Slika 2: Časovna zahtevnost algoritmov v odvisnosti velikosti kvadratne matrike N .



Slika 3: Časovna zahtevnost algoritmov v odvisnosti velikosti kvadratne matrike N .

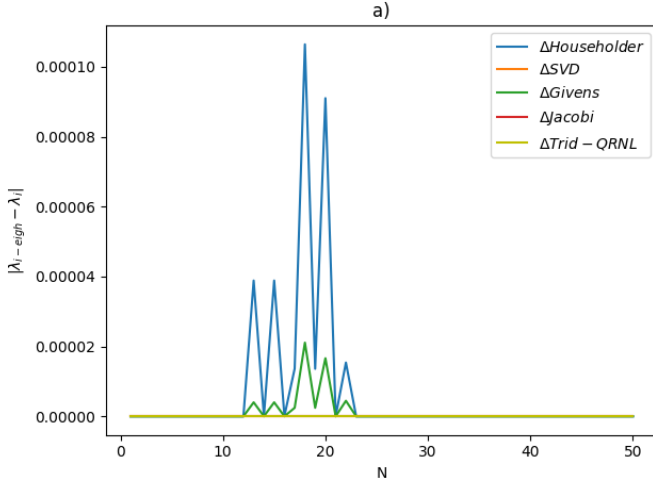


Slika 4: Časovna zahtevnost algoritmov v odvisnosti velikosti kvadratne matrike N .

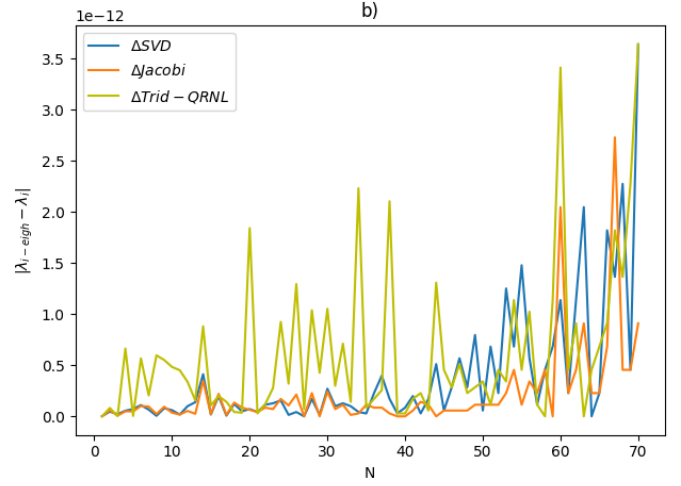


Slika 5: Časovna zahtevnost algoritmov v odvisnosti velikosti kvadratne matrike N .

Metode, ki so implementirane brez optimizacij (moja in iz predavanj) so veliko počasnejše in se ne morejo primerjati z vgrajenimi. Vidimo lahko da je najpočasnejša Givensova, nato Householder in Jacobijeva metoda. Tridiagonalna metoda z QR razcepom je boljša, mogoče bi bilo dobro če bi dodal še vgrajeno metodo za diagonalizacijo tridiagonalnih matrik, ki bi v teoriji morala biti najhitrejša. Za zaustavljajni pogoj pri QR iteraciji sem vzel takrat, ko se lastne vrednosti na diagonali približajo lastnim vrednostim funkcije poljubno natančno ($1e-5$) oz. ko dosežejo maksimalno število iteracij (200). Hitrost je seveda odvisna tudi od teh dveh parametrov. Za merjenje izvajanja funkcije sem uporabljal *default_timer* iz knjižnice *timeit*. Natančnost lastnih vrednosti prikazujejo sliki 6 in 7. Pri primerjavah nisem upošteval konvergence zaradi hilbertovega prostora in neskončnih lastnih funkcij, zato lastne vrednosti po metodi *eigh* lahko odstopajo od pravih lastnih vrednosti. Gre samo za primerjavo natančnosti metod. Slika 7 je pričakovana, odstopanja, ko se bližamo večjim lastnim vrednostim. Na sliki 6 pa nisem ravno prepričan zakaj so vrhi samo pri določenih vrednostih. Kvečjemu bi taka odstopanja pričakoval pri lastnih vrednostih blizu $N = 50$.



Slika 6: Odsopanje lastne vrednosti od *prave* pri N-ti lastni vrednosti.

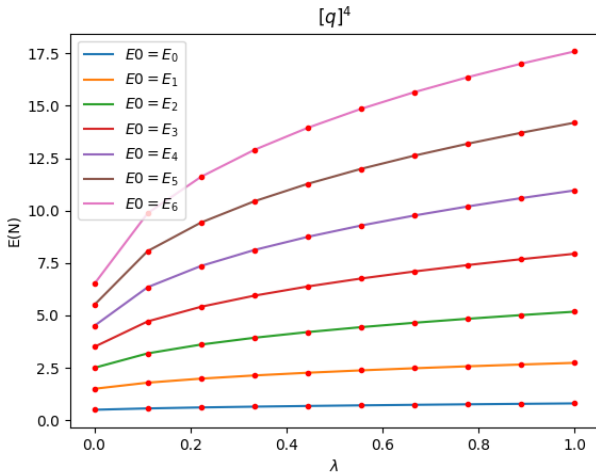


Slika 7: Odsopanje lastne vrednosti od *prave* pri N-ti lastni vrednosti.

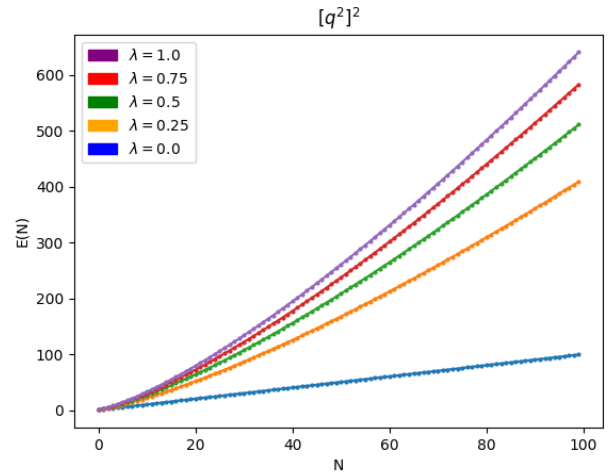
3.2 Anharmonski oscilator

Za nadaljno analizo in primerjavo sem uporabljal vgrajeno metodo `eigh`. Najprej lahko pogledamo energije v odvisnosti od parametra λ (slika 16, 17).

Lastne vrednosti so odvisne od velikosti matrike. Ker smo v Hilbertovem prostoru bi v splošnem morala

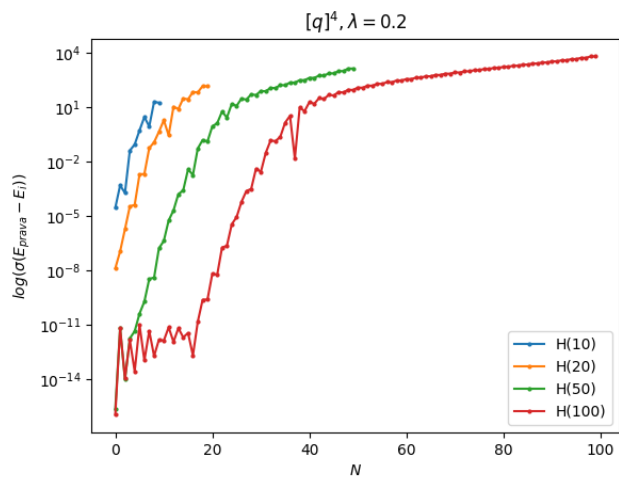


Slika 8: Prvih 7 lastnih energij v odvisnosti od parametra λ , izračunane na način četrte potence koordinate.

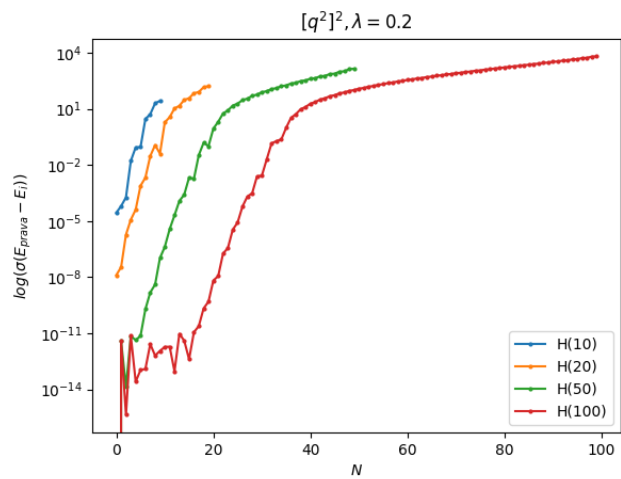


Slika 9: Prvih 100 lastnih energij sistema pri različnih vrednostih parametra λ .

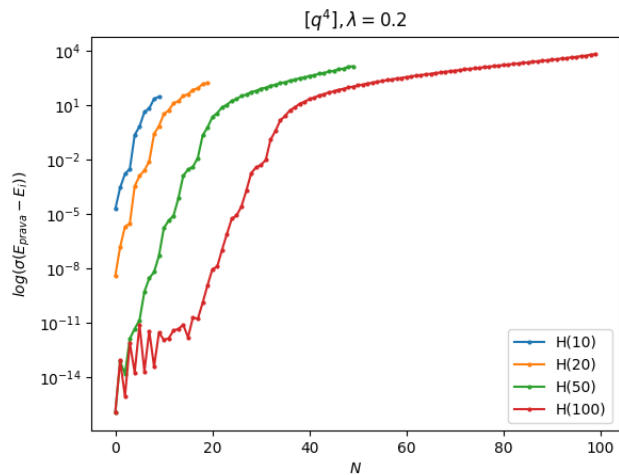
biti matrika neskončna, da bi dobili natančne lastne vrednosti. Ko naredimo matriko končno pa niso nujno več vse lastne vrednosti natančne. Natančnost v odvisnosti od velikosti matrike sem preveril tako, da sem za referenčno matriko oz. lastne vrednosti vzel matriko 1000×1000 in primerjal z lastnimi vrednostimi manjših matrik pri različnih načinih konstrukcije matrike.



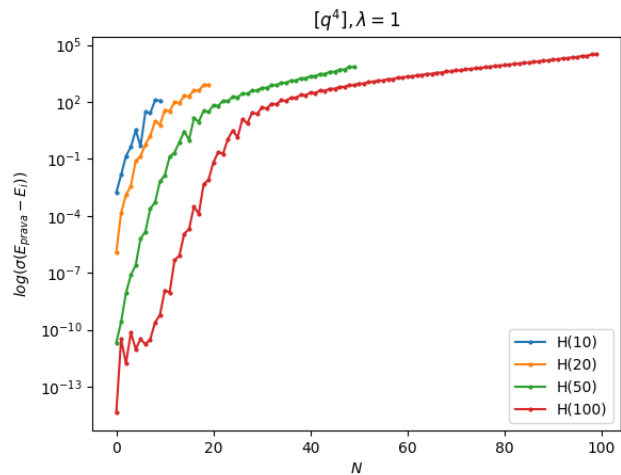
Slika 10: Razlika med pravo in lastno vrednostjo izračunano z $H(i)$



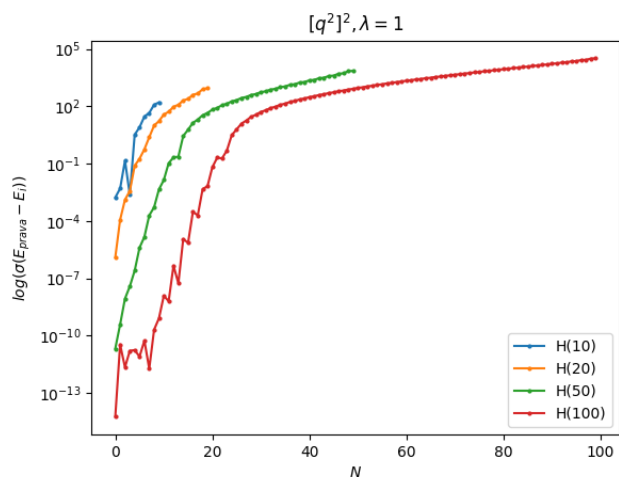
Slika 11: Razlika med pravo in lastno vrednostjo izračunano z $H(i)$



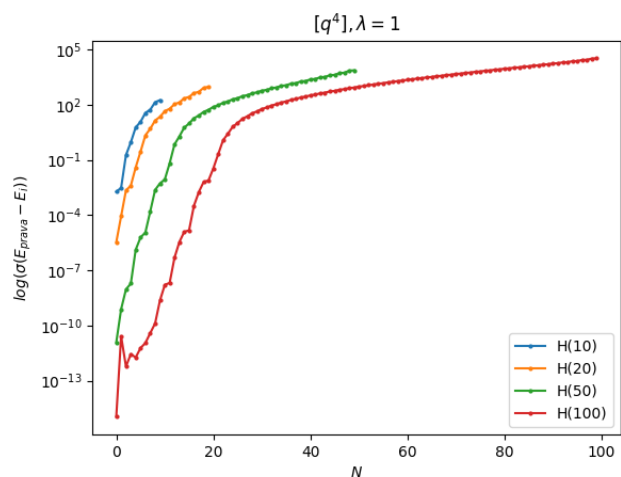
Slika 12: Razlika med pravo in lastno vrednostjo izračunano z $H(i)$



Slika 13: Razlika med pravo in lastno vrednostjo izračunano z $H(i)$



Slika 14: Razlika med pravo in lastno vrednostjo izračunano z $H(i)$

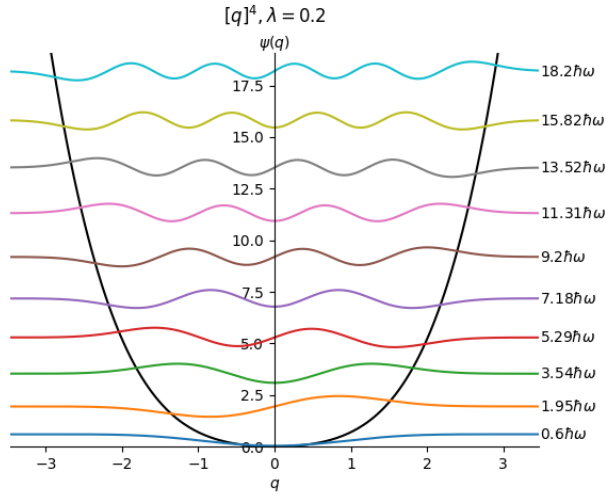


Slika 15: Razlika med pravo in lastno vrednostjo izračunano z $H(i)$

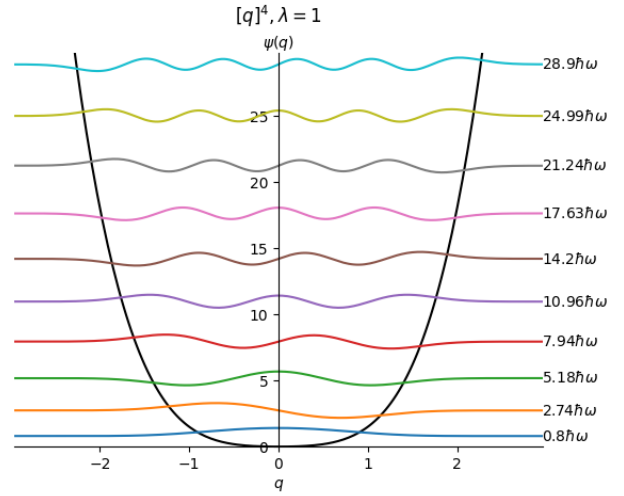
Iz danih slik (10-14) ni opaziti prevelike razlike v natančnosti pri različnem načinu konstrukcije hamiltonke. Da bi pogledal če kakšna metoda odstopa sem naredil simulacijo, ki za lastno vrednost vzame povprečje izračunanih lastnih vrednosti pri različnih konstrukcijah hamiltonke. Animacija prikazuje razliko med dano in povprečno lastno vrednostjo v odvisnosti od λ , kjer se večajo začetne energije od $N = 1 \dots 30$. Iz animacije je tudi razvidno kako z večanjem lastnih energij začnejo le te divergirati, saj je matrika končna.

Hamiltonovo matriko velikosti 1000×1000 lahko konstruiramo na 3 omenjene načine. Najhitreje se konstruira matrika $[q^4]$, $t = 2.4s$, nato $[q^2]^2$, $t = 24.8$ in kot zadnja $[q]^4$, $t = 71.5$.

Lastne funkcije anharmonskega oscilatorja dobimo kot linearno kombinacijo lastnih funkcij harmonskega oscilatorja



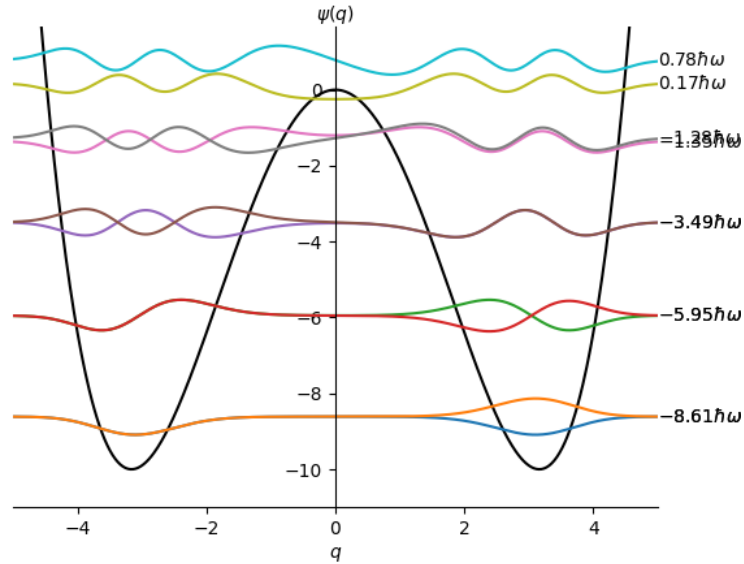
Slika 16: Prvih 10 lastnih funkcij pri $\lambda = 0.2$



Slika 17: Prvih 10 lastnih funkcij pri $\lambda = 1$

3.3 Dodatna naloga

Za izračun lastnih energij in funkcij sem izraz prepisal v obliko $H_0 - 5/2 q^2 + q^4/10$ in z eig izračunal lastne vrednosti in lastne vektorje.



Slika 18: Lastne funkcije anharmonskega oscilatorja pri danem potencialu.

3.4 Zaključek

Za izračun perturbacijske matrike je najboljši način $[q^4]$, saj je najhitrejši. Pri natančnosti pa bi mislil, da potenciranje matrike povzroči numerične napake, ampak večjih odstopanj nisem opazil. Ker smo v Hilbertovem prostoru je cilj vzeti čim večjo matriko, da dobimo največ natančnih lastnih vrednosti in vektorjev. Ko se lastne vrednosti večajo, začnejo v neki točki divergirati.