



Univerza v Ljubljani  
Fakulteta za matematiko  
in fiziko

## Matematično-fizikalni praktikum

### Tretja naloga: *Anharmonski oscilator*

Simon Bukovšek, 28211067

Mainz, 27. oktober 2023

**Profesor:** prof. dr. Borut Paul Kerševan

#### Naloga: Anharmonski oscilator

Z diagonalizacijo poišči nekaj najnižjih lastnih vrednosti in lastnih valovnih funkcij za moteno Hamiltonko  $H = H_0 + \lambda q^4$  ob vrednostih parametra  $0 \leq \lambda \leq 1$ .

## 1 Uvod

Nerelativistično kvantno mehaniko lahko formuliramo na dva načina: valvnofunkcijski (Schrödingerjev) in matrični (Heisenbergov) opis. V obeh formulacijah je osnovna enačba stacionarna Schrödingerjeva enačba, ki jo zapišemo kot

$$\hat{H}\psi = E\psi.$$

V osnovi je to problem lastnih vrednosti, ki ga seveda lahko vidimo na dva popolnoma različna načina. V primeru valvnofunkcij je pogosto to neke vrste Sturm-Liouvilleov problem, kjer iščemo lastne funkcije in lastne vrednosti operatorja  $\hat{H}$ . V matrični formulaciji pa je to problem diagonalizacije matrike  $\hat{H}$ . Lastna stanja so v prvem primeru funkcije v drugem pa vektorji, ampak z nekoliko bolj oddaljene matematične perspektive so to popolnoma ekvivalentni objekti. V tej nalogi se bomo osredotočili na perturbiran kvantnomehanski harmonični oscilator, ki ga podaja potencial:

$$V(q) = \frac{1}{2}q^2 + \lambda q^4.$$

Zaradi zgladnosti zapisa merimo energijo v enotah  $\hbar\omega$ , gibalne količine v enotah  $(\hbar m\omega)^{1/2}$  in dolžine v enotah  $(\hbar/m\omega)^{1/2}$ . Hamiltonian lahko zapišemo kot

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

kjer  $H_0 = (p^2 + q^2)/2$  predstavlja neperturbiran Hamiltonian harmonskega oscilatorja. Lastne funkcije le-tega so ( $n \in \mathbb{N}_0$ )

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

pri čemer je  $\mathcal{H}_n$   $n$ -ti Hermiteov polinom. Lastne energije so  $E_n^0 = n + 1/2$ . Na tej točki se lahko prestavimo v matrični opis. Poljubno valvno funkcijo lahko zapišemo v bazi lastnih funkcij harmonskega oscilatorja (zahvaljujoč dejstvu, da so Hermiteovi polinomi ortogonalni) kot

$$\psi = \sum_{n=0}^{\infty} c_n |n\rangle,$$

torej nam neskončno-dimenzionalni vektor  $(c_0, c_1, \dots)$  enolično opisuje poljubno valvno funkcijo. Še več, velja

$$H_0\psi = E\psi,$$

kjer je  $H_{0,i,j} = (i + 1/2)\delta_{i,j}$ , in posebej

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

Sedaj dodamo anharmonski člen in rešujemo problem lastnih vrednosti:

$$(H_0 + \lambda H')\psi = E\psi.$$

Pri tem je  $H'$  matrika z elementi:

$$H'_{m,n} = \langle m|q^4|n\rangle.$$

Velja še

$$H'_{m,n} = \frac{1}{4} \left( 3(2n^2 + 2n + 1)\delta_{m,n} + 2\sqrt{(n+1)(n+2)}(2n+3)(\delta_{m+2,n} + \delta_{m,n+2}) + \sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)(n+4)}(\delta_{m+4,n} + \delta_{m,n+4}) \right).$$

Ta enačba je mnogo boljša od tiste, ki je podana v navodilih, saj ne vsebuje fakultet, ki pri velikih vrednostih otežijo računanje. Lahko pa namesto matričnih elementov  $[q^4]$  računamo kar matrične elemente  $[q^2]$  ali  $[q]$  ter jih nato matrično potenciramo. Matrike si lahko vizualiziramo takole:

$$[q] = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & 0 & \sqrt{2} & \cdots & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \ddots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \sqrt{n} \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{n} & 0 \end{bmatrix}, \quad [q^2] = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 3 & 0 & \sqrt{6} & \cdots & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 5 & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & \sqrt{6} & 0 & 7 & \ddots & a(n-2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a(n-2) & 0 & 2n+1 \end{bmatrix},$$

$$[q^4] = \frac{1}{4} \begin{bmatrix} 3 & 0 & 6\sqrt{2} & 0 & 2\sqrt{6} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 15 & 0 & 10\sqrt{6} & 0 & 2\sqrt{30} & \cdots & 0 \\ 6\sqrt{2} & 0 & 39 & 0 & 28\sqrt{3} & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 10\sqrt{6} & 0 & 75 & 0 & 36\sqrt{5} & \ddots & d(n-4) \\ 2\sqrt{6} & 0 & 28\sqrt{3} & 0 & 123 & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 2\sqrt{30} & 0 & 36\sqrt{5} & 0 & 183 & \ddots & c(n-2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & d(n-4) & 0 & c(n-2) & 0 & b(n) \end{bmatrix}.$$

Funkcije  $a, b, c$  in  $d$  so definirane kot:

$$a(k) = \sqrt{(k+1)(k+2)},$$

$$b(k) = 3(2k^2 + 2k + 1),$$

$$c(k) = 2\sqrt{(k+1)(k+2)}(2k+3),$$

$$d(k) = \sqrt{(k+1)(k+2)(k+3)(k+4)},$$

kjer je  $k$  indeks, ki se začne na začetku diagonale z ničlo. Pomembno je omeniti, da v principu sicer velja  $[q]^4 = [q^2]^2 = [q^4]$ , vendar potenciranje končnih matrik pusti robne defekte. Zato je boljše računati kar matrične elemente  $[q^4]$ .

## 2 Anharmonski oscilator

### 2.1 Hitrost izračuna lastnih vrednosti

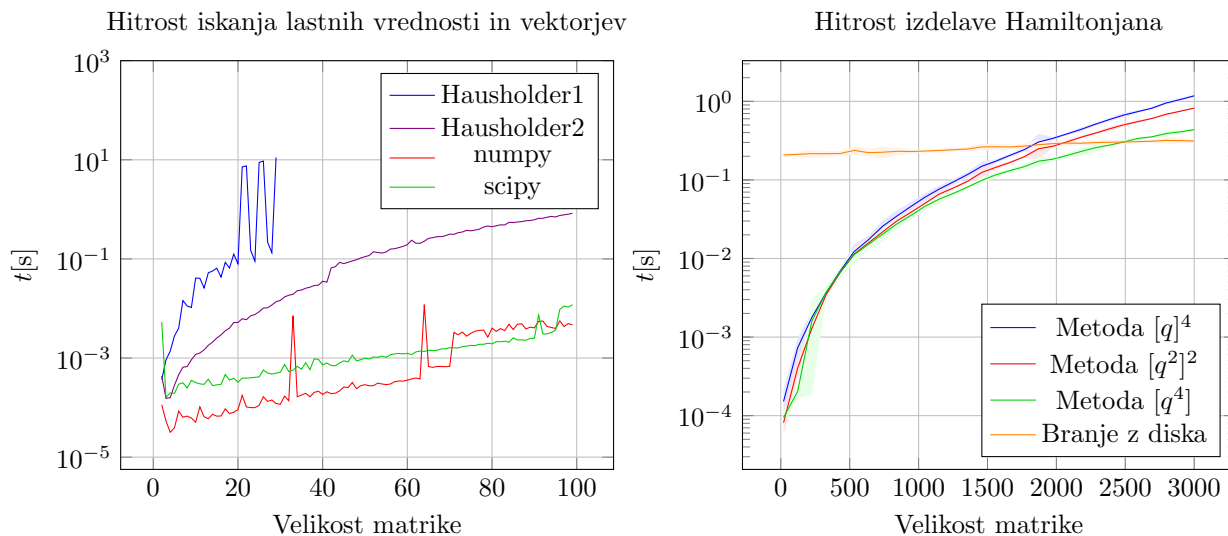
Preden se lotimo računanja energij in valovnih funkcij, je potrebno sestaviti samo Hamiltonko. Kot že omenjeno v uvodu lahko to storimo na več načinov:

- izračun  $[q]$  ter dvakrat zaporedoma matrično kvadriranje;
- izračun  $[q^2]$  ter matrično kvadriranje;
- direkten izračun  $[q^4]$ ;
- branje že izračunane matrike velikosti  $5000 \times 5000$  iz trajnega spomina.

Zadnja metoda zahteva vnaprejšnji izračun, ki pa se na dolgi rok lahko izplača, sploh če je potrebno večkrat računati Hamiltonke velikih velikosti. Po izračunu  $[q^4]$  sem to matriko pomnožil z  $\lambda$  in jo prištel h  $H_0$ . Graf 1a prikazuje hitrost posamezne metode za različne velikosti matrike. Izkaže se, da je najučinkovitejša metoda direkten izračun  $[q^4]$ , sploh po tem, ko sem sam izpeljal izraz, ki ne vsebuje fakultet. Pri približno  $N = 2500$  postane branje iz datoteke hitrejše kot izračun. Metodo bi lahko še bolj optimiziral, tako da bi vnaprej izračunal različne velikosti matrik in iz pomnilnika bral tisto, ki je najbližje velikosti, ki jo potrebujem.

Naslednji korak je diagonalizacija in izračun lastnih energij ter vektorjev. Zaradi velike dimenzije matrike metoda s karakterističnim polinomom popolnoma odpove, zato se je potrebno lotiti drugače. Preveril sem štiri metode:

- lastna implementacija Householderjeve metode;
- implementacija Householderjeve metode iz spletne učilnice;
- funkcija `eigh` iz knjižnice `numpy.linalg`, ta je namenjena diagonalizaciji simetričnih matrik;
- funkcija `eigsh` iz knjižnice `scipy.sparse.linalg`, ta je namenjena iskanju prvih nekaj lastnih vrednosti "redkih" matrik, torej takih, ki imajo skoraj povsod ničle.



(a) Primerjava hitrosti izračuna lastnih vrednosti z naslednjimi metodami: lastna implementacija Householderjeve metode, program iz spletne učilnice, `numpy.linalg.eigh` ter `scipy.sparse.linalg.eigsh`. Lastna implementacija je seveda najmanj učinkovita. Zaradi dolgotrajnosti izračuna, je lastna implementacija preverjena le do mizernih 30 dimenzij.

(b) Hitrost izračuna Hamiltonove matrike za različne velikosti matrike pri štirih različnih metodah: izračun  $[q]$  z dvojnim kvadriranjem, izračun  $[q^2]$  z kvadriranjem, direkten izračun  $[q^4]$  ter branje že izračunane matrike velikosti  $5000 \times 5000$  iz trajnega spomina. V svetlejših barvah je prikazana statistična napaka izračuna.

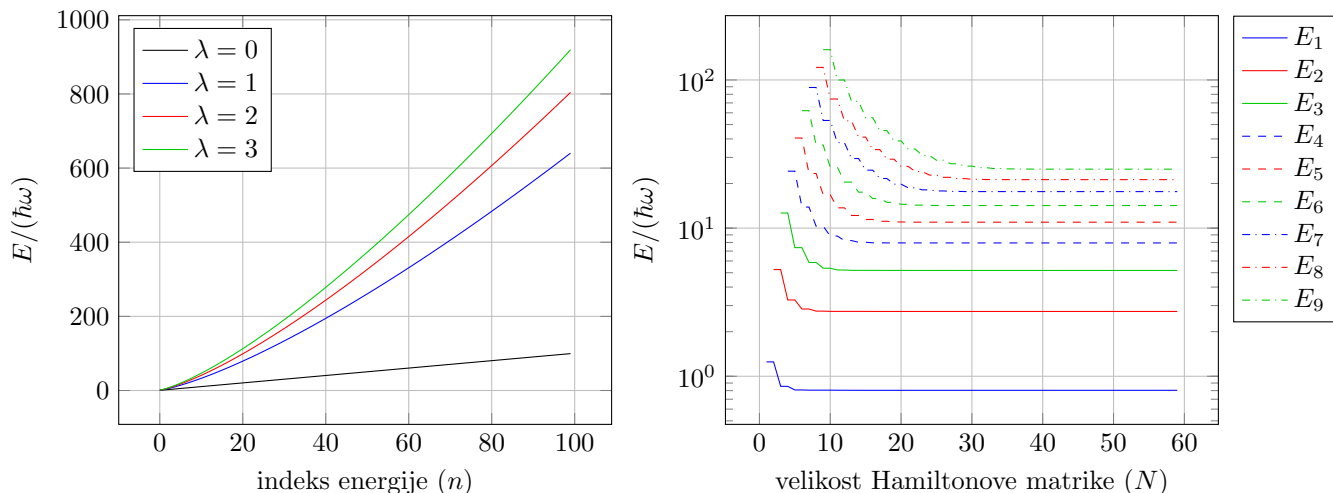
Slika 1: Izračuni hitrosti algoritmov.

Rezultati so prikazani na grafu 1a. Razvidno je, da je lastna implementacija krepko najpočasnejša od testiranih. To je popolnoma pričakovano, saj nimam dovoljšnjih izkušenj v programiranju in časa, da bi lahko razvil karseda optimalno metodo. Prav tako lahko opazimo, da za matrike podobne velikosti lahko porabi zelo veliko časa. To je najbrž problem v preverjanju števila iteracij v QR metodi in bi se najbrž z več časa lahko to optimiziralo. Na drugem mestu je implementacija v Pythonu iz spletne učilnice. Tudi to je razumljivo, saj večina računanja še vedno teče v Pythonu, ki je interpretiran jezik, medtem ko sta knjižnici `numpy` in `scipy` napisani v C-ju, ki je preveden jezik in zato deluje hitreje. Prav tako so v te knjižnice najverjetneje vgrajene funkcije, ki preverijo tip matrike in izberejo najučinkovitejšo metodo. Presenetljivo je, da je `scipy`-jeva metoda večinoma delovala počasneje kot `numpy`-jeva. Za to vidim dve možni razlagi. `Scipy` knjižnica `sparse` je namenjena redkim matrikam (kakršne so tudi naše), vendar je optimizirana za iskanje samo prvih nekaj najmanjših lastnih vrednosti. Ker smo v zgornjem testu želeli ugotoviti vse lastne vrednosti, je zato program deloval manj optimalno. Druga možnost je ta, da metoda `eigh` iz `numpy`-ja ugotovi, da so matrike redke in zato uporabi podobno metodo kot `eigsh` iz `scipy`-ja. Opaziti je tudi precejšen skok v času izvajanja pri velikosti  $N = 70$  za `numpy`, kar namiguje na spremembo algoritma (lahko pa je tudi kakšna druga nevšečnost, recimo “garbage collection”). Glede na to da je bila `numpy` metoda povečini najhitrejša, sem jo uporabil za vse nadaljnje izračune.

## 2.2 Lastne energije

Lotimo se računanja lastnih energij. Ker sem slabo prebral navodila, se vsa analiza zadeva razpona  $0 \leq \lambda \leq 10$ . V kolikor govorim o matriki, veliki  $n$  ali dimenzije  $n$ , imam v mislih matriko velikosti  $n \times n$ , saj so vse kvadratne. Že takoj na začetku naletimo na vprašanje natančnosti: kako veliko moramo vzeti Hamiltonovo matriko, da dobimo zadostno natančnost za  $n$ -to energijo? Začeti je najlažje s preprostim grafom, kjer na eno os rišemo velikost matrik, na drugo pa izračunane energije. Ta graf je predstavljen na Sliki 2b. Ob njem se lahko naučimo nekaj ugotovitev. Najočitnejša je ta, da lahko  $n$ -to energijo pridobimo z matriko, ki je velika vsaj  $n$  – jasno, matrika ima natanko toliko lastnih vrednosti kot ima dimenzijo. Večje energije, kot kaže, potrebujejo več dodatnih dimenzij, da se ustalijo pri končni vrednosti. Tako je za natančen izračun prve energije potrebna matrika velikosti 6, za deveto energijo pa še trideset dimenzij ni zadosti. Zadnje opažanje je nenavadna stopničastost krivulj. Natančneje, velikokrat se zgodi, da je

določena lastna vrednost pri dveh sosednjih dimenzijah popolnoma enaka. Tega sam ne znam razložiti, saj se ne spoznam dovolj na uporabljene algoritme.



(a) Na grafu je prikazano spreminjanje energij po indeksih za različne vrednosti parametra  $\lambda$ .

(b) Prikaz spreminjanja izračunanih lastnih energij z dimenzijo Hamiltonove matrike.

**Slika 2:** Lastne energije.

Poskusimo sedaj bolj kvantitativno določiti zadostno velikost Hamiltoniana. Poglejmo si grafa 3a in 3b. Predstavljata potrebne dimenzije matrike, da je pri dani energiji (oziroma indeksu energije) dosežena določena natančnost ( $10^{-2}$ ,  $10^{-4}$  in  $10^{-6}$ ). Za “točne” vrednosti sem vzel tiste, ki sem jih izračunal iz matrike velike 2000. S pomočjo tega lahko približno ocenimo, kako veliko matriko naj vzamemo, če želimo natančno izračunati recimo stoto energijo. Za natančnost  $\varepsilon = 10^{-6}$  pri  $\lambda = 1$  je to okrog  $N = 700$ , za  $\lambda = 10$  pa okrog  $N = 1600$ . Zanimivo je, da čeprav se potrebne dimenzije pri  $\lambda = 10$  višajo mnogo hitreje kot pri  $\lambda = 1$ , je eksponent potenčne odvisnosti pri obeh enak (glej Tabelo 1). To seveda predpostavlja potenčno odvisnost, kar ni nujno res; vseeno pa je zanimiva opazka, ki je nisem pričakoval in je ne znam dobro pojasniti.

$\lambda$	eksponent
1	$1,225 \pm 0,002$
2	$1,223 \pm 0,002$
10	$1,221 \pm 0,006$

**Tabela 1:** Eksponent potenčne odvisnosti potrebne dimenzije matrike od indeksa energije za natančnost  $\varepsilon = 10^{-6}$ .

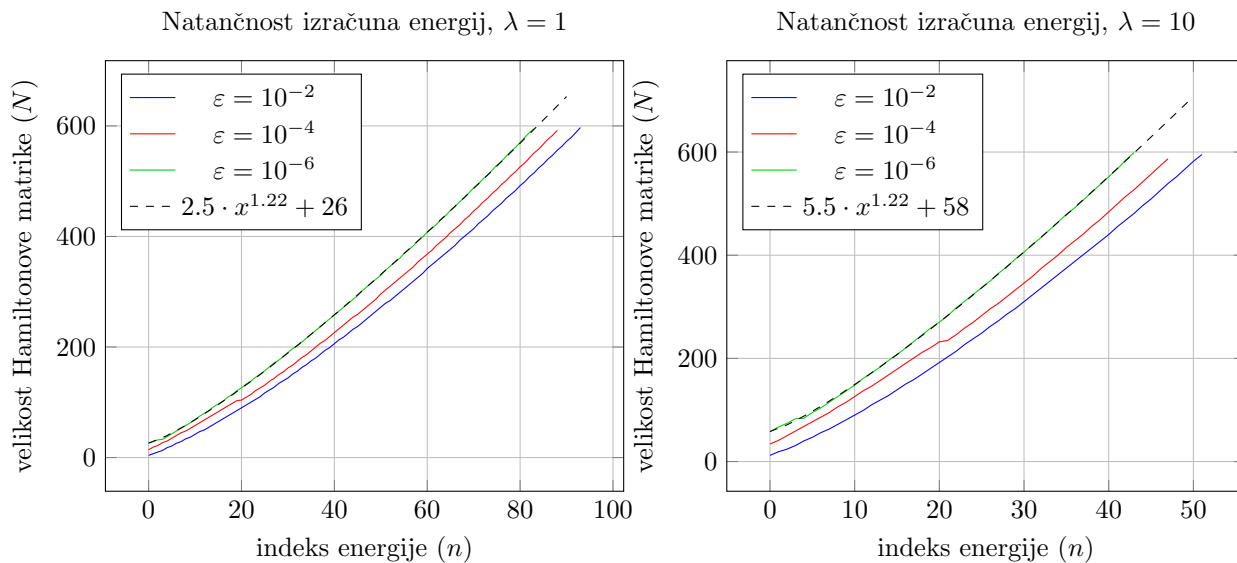
Vrnimo se nazaj k računanju energij. Na Grafu 2a so prikazane velikosti energij v odvisnosti od indeksa energije za štiri različne  $\lambda$ . Pri  $\lambda = 0$  opazimo linearno odvisnost oblik  $E(n) = n + 1/2$ , pri ostalih  $\lambda$  pa gre za hitreje naraščajoč trend. Zdi se, kot da vse krivulje predstavljajo neko potenčno odvisnost  $E(n) \propto n^\alpha$ . Zanimivo bi bilo raziskati odvisnost  $\alpha(\lambda)$ , vendar je že zdaj poročilo zadosti obsežno.

Glede lastnih energij se mi pojavita še dve možni poglobitvi: kako se prvih nekaj energij spreminja z  $\lambda$  in kako dobro lahko to spreminjanje opišemo s perturbacijsko teorijo. Na Sliki 4a je prikazana odvisnost prvih treh energij od  $\lambda$ . Vidimo, da se energije sprva spreminjajo zelo hitro, kasneje pa preidejo v približno logaritemsko rast. Če pa želimo preveriti teorijo motenj oziroma s teorijo motenj preveriti naše izračune se moramo omejiti na mnogo manjše  $\lambda$ , natančneje na interval  $[0, 0,2]$ . Poglejmo si najprej nekaj teorije. Začnimo z osnovno enačbo:

$$H = H_0 + \lambda H'.$$

V perturbacijski teoriji iščemo lastne energije v obliki:

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots,$$



(a) Natančnost izračuna lastnih energij za različne velikosti Hamiltoniana pri  $\lambda = 1$ .

(b) Natančnost izračuna lastnih energij za različne velikosti Hamiltoniana pri  $\lambda = 10$ .

**Slika 3:** Natančnost izračunanih energij. Po ekstrapolaciji lahko ocenimo, da za izračun stote energije pri  $\lambda = 1$  in  $\varepsilon = 10^{-6}$  potrebujemo velikost nekaj več kot 700, za  $\lambda = 10$  pa okrog 1600.

kjer so  $E_n^{(i)}$  energije  $i$ -tega reda. V našem primeru je  $H_0$  diagonalna, zato je  $E_n^{(0)} = n + 1/2$ . Za prvi red perturbacije velja:

$$E_n^{(1)} = \langle n | H' | n \rangle,$$

kar smo že izračunali:

$$E_n^{(1)} = \frac{3}{4}(2n^2 + 2n + 1).$$

Popravek drugega reda je

$$E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle m | H' | n \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} = -\frac{(2n+1)(21+17n+17n^2)}{8}.$$

Skupni rezultat je torej

$$E_n = n + \frac{1}{2} + \frac{3}{4}(2n^2 + 2n + 1)\lambda - \frac{(2n+1)(21+17n+17n^2)}{8}\lambda^2 + \mathcal{O}(\lambda^3).$$

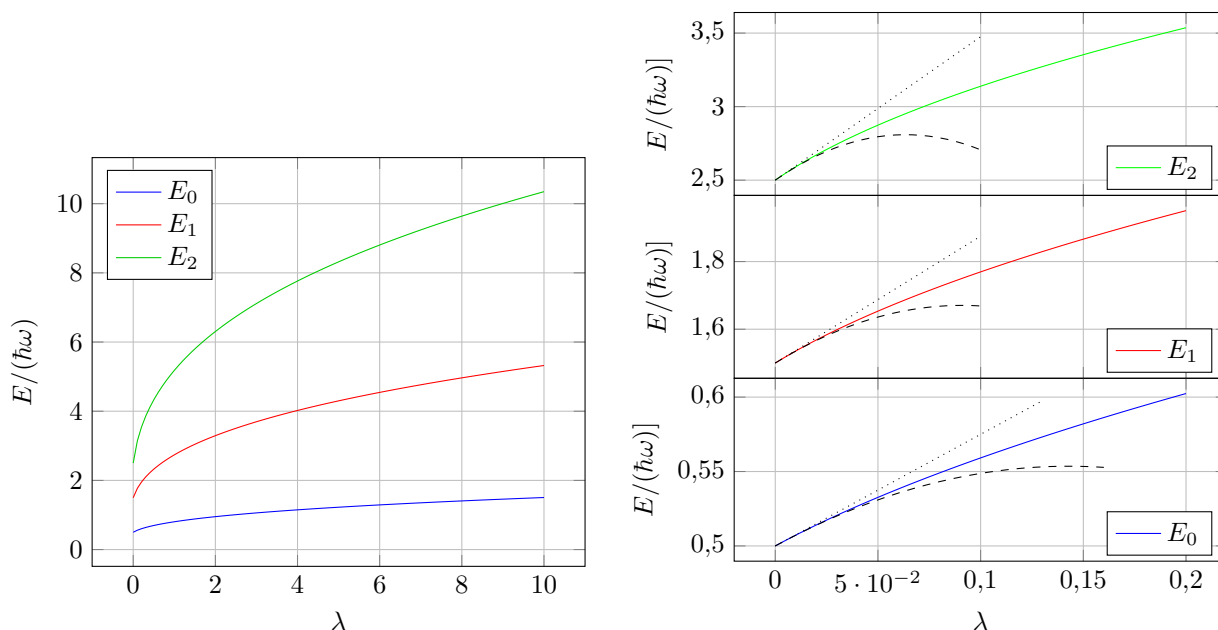
Za prve tri nivoje energije dobimo:

$$\begin{aligned} E_0 &= \frac{1}{2} + \frac{3}{4}\lambda - \frac{21}{8}\lambda^2 + \mathcal{O}(\lambda^3), \\ E_1 &= \frac{3}{2} + \frac{15}{4}\lambda - \frac{165}{8}\lambda^2 + \mathcal{O}(\lambda^3), \\ E_2 &= \frac{5}{2} + \frac{39}{4}\lambda - \frac{615}{8}\lambda^2 + \mathcal{O}(\lambda^3). \end{aligned}$$

Ustreznost izračunanih približkov je prikazana na Grafu 4b. Prvi red je zagotovo pravilno izračunan, saj pikčasta črta v vseh primerih kaže tangento na graf. Drugi približek je pa nekoliko vprašljiv, saj zelo močno zavije stran od grafa.

## 2.3 Lastne funkcije

Namenimo še nekaj energije prikazu lastnih funkcij. Tokrat sem izbral dve možnosti – direkten prikaz in sestavo iz Hermiteovih polinomov. Zaradi velikosti sem te prikaze vključil v dodatek, saj ne želim, da je



(a) Odvisnost prvih treh energij anharmonskega oscilatorja od parametra  $\lambda$  na intervalu  $[0, 10]$ .

(b) Primerjava izračunov s perturbacijo prvega (pikčasto) in drugega (črtkano) reda.

**Slika 4:** Odvisnost energij od parametra  $\lambda$ .

branje poročila prekinjeno s celo stranjo grafov. Graf 6 prikazuje kako so lastne funkcije motenega harmonskega oscilatorja sestavljene iz lastnih funkcij nemotenega oscilatorja. Na osi  $x$  (vodoravno) je prikazan indeks lastne funkcije anharmonskega potenciala, na osi  $y$  (navpično) pa indeks lastne funkcije nemotenega harmoničnega oscilatorja. Barva prikazuje velikost komponente lastnega vektorja (rdeča negativno, modra pozitivno). V teoriji bi ta prikaz moral biti neskončen, vendar je zaradi očitnih praktičnih razlogov omejen samo na prvih 100 lastnih funkcij obeh vrst oscilatorjev. To pa seveda ne pomeni, da se prispevki lastnih funkcij nemotenega oscilatorja končajo pri 100. Celoten izračun je bil izveden do velikosti 1600, kolikor smo v prejšnjem poglavju ocenili, da je potrebno za  $10^{-6}$  natančnost pri stoti lasni vrednosti pri  $\lambda = 10$ . Pri  $\lambda = 0$  vidimo samo diagonalo, kar je edino pravilno (nemotena lastna funkcija je sestavljena samo sama iz sebe). Pri zelo majhni vrednosti  $\lambda$  so prispevki še vedno v okolici diagonale, vendar se ta debelina z  $\lambda$  večja. Ob podrobnejšem pogledu lahko opazimo šahovski vzorec (belo-barvno), kar je posledica tega, da sta tako harmonski kot anharmonski potencial sodi funkciji. Posledica so izmenjujoče sode in lihe lastne funkcije v obeh primerih in zato so sode funkcije anharmonskega oscilatorja sestavljene samo iz vsake druge (samo iz sodih) funkcije harmonskega oscilatorja. Podobno velja za lihe. Druga opazka je nekoliko močnejša barva ob robu pobarvanega območja. Z ene strani to pomeni, da so pomembni prispevki najnižjih uporabljenih lastnih funkcij, hkrati pa tudi nekaterih visokih lastnih funkcij. Obenem gre opaziti bele proge.

Na Grafu 7 so lastne funkcije prikazane kot funkcije parametra  $q$ . Z vseh grafov lahko sklepamo, da so funkcije pri večjih  $\lambda$  bolj "stisnjene" proti sredini in bolj divje valovijo. Stisnjenost proti sredini je posledica zelo hitre rasti  $q^4$  v anharmonskem potencialu. Večja višina valov pa je hkrati posledica stisnjenosti in dejstva, da so energije višje. To tudi razloži, zakaj se debelina obarvanega območja okoli diagonale na grafih 6 večja z lambda.

## 2.4 Dodatna naloga

Za konec si pogledjmo še dodatni izziv. Naj bo potencial oblike

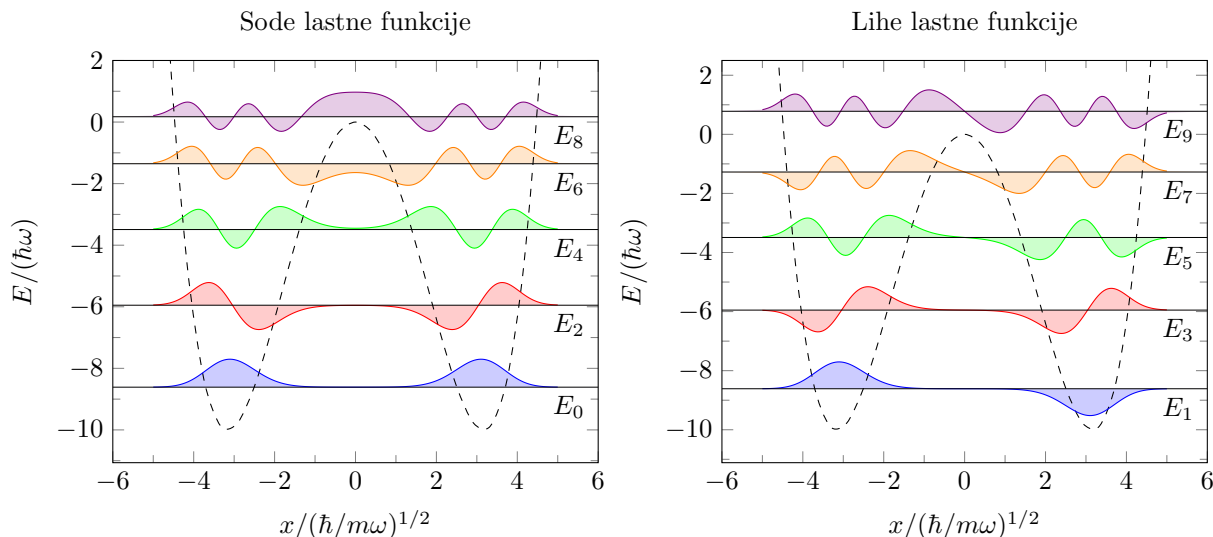
$$V(q) = -2q^2 + \frac{1}{10}q^4.$$

Tak potencial ima dva minimuma. Lastne energije so v Tabeli 2.

Čeprav se mogoče zdi, da je prvih nekaj stanj dvakrat degeneriranih, natančnejši račun pokaže, da ni tako. Razlika med osnovnim in prvim vzbujenim stanjem znaša  $2,1 \cdot 10^{-7} \hbar\omega$ . Razlike med sodim in naslednjim lihim stanjem se z energijo večajo. Zaradi simetričnosti potenciala pa lahko lastne funkcije razdelimo na sode in lihe (glej Graf 5).

$n$	$E/(\hbar\omega)$	$n$	$E/(\hbar\omega)$
0	-8,611 880 72	5	-3,488 990 03
1	-8,611 880 51	6	-1,353 827 23
2	-5,949 734 59	7	0,172 289 64
3	-5,949 697 6	8	0,780 520 92
4	-3,491 559 45	9	0,780 520 92

**Tabela 2:** Prvih deset lastnih energij za potencial z dvema minimumoma.



**Slika 5:** Lastne funkcije potenciala z dvema minimumoma, prikazane kot sode in lihe.

### 3 Zaključek

Naloga je od nas zahtevala razmislek o numeričnem reševanju problema lastnih vrednosti in nas k temu motivirala s pomočjo problema kvantnomehanskega anharmonskega oscilatorja. Ta primer po mojem mnenju služi dvojnemu namenu – kot primer za učenje iskanja lastnih vrednosti in hkrati vpogled v drugačen opis kvantne mehanike, ki se bolj redko pojavi v začetniških učbenikih (izjema so *Feynman's lectures on physics*).

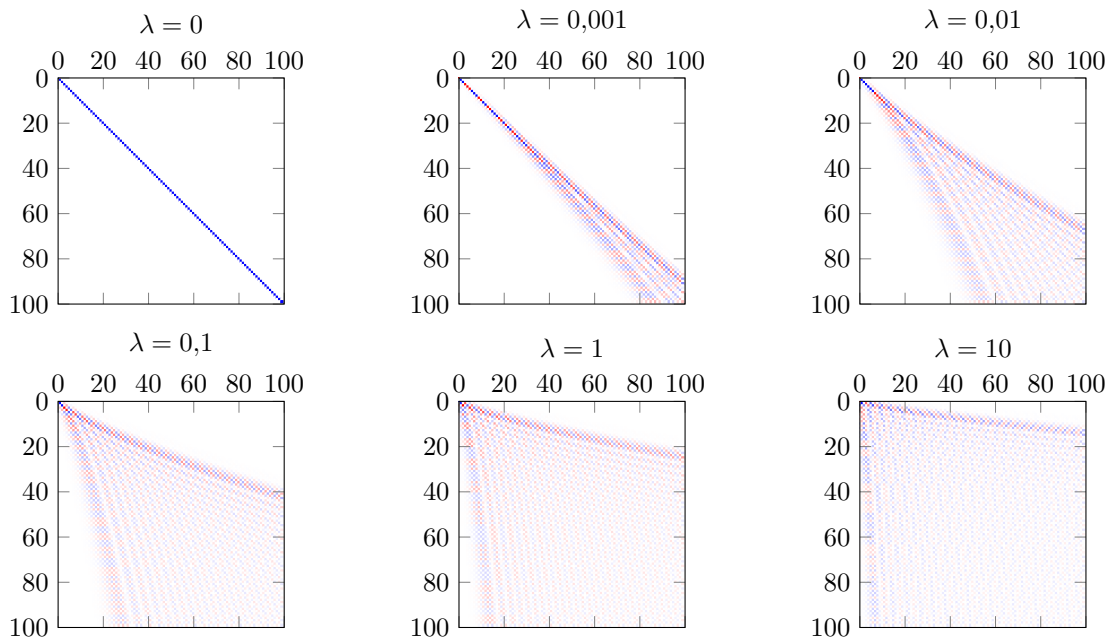
Ker je bilo navodilo dokaj odprte narave, sem več časa posvetil raziskovanju različnih odvisnosti med energijami in parametrom  $\lambda$  in pa risanju grafov. Ker za risanje grafov pretirano trmasto vztrajam pri orodju  $\text{\LaTeX}$  in knjižnici  $\text{PGFPLOTS}$ , sem naletel na nekaj težav v zvezi s količino podatkov, ki jih lahko  $\text{\LaTeX}$  obdela. Do sedaj sem se vedno trudil podatke čim bolj predelati v Pythonu, tako da za  $\text{\LaTeX}$  ostane res samo še risanje, vendar je v primeru Grafov 6 to še vedno pomenilo risanje 10 000 točk. Rešitev:  $\text{Lua}\text{\LaTeX}$ , ki nima takšne prostorske omejitve kot navadni  $\text{\LaTeX}$ . Na omenjeni problem sem že večkrat naletel in sem ga vedno smatral za nerešljivega, zato sem prepričan, da mi bo pridobljeno znanje o  $\text{Lua}\text{\LaTeX}$ u v prihodnosti prišlo še kako prav.

Če strnem zaključne misli, lahko rečem, da se lastna implementacija že obstoječih algoritmov tipično ne splača, razen če smo zelo prepričani, da je naš primer dovolj poseben, da lahko na podlagi te posebnosti bistveno izboljšamo hitrost. Vseeno pa je potrebno vedeti vsaj nekaj osnov za primer, ko knjižnica ni na voljo.

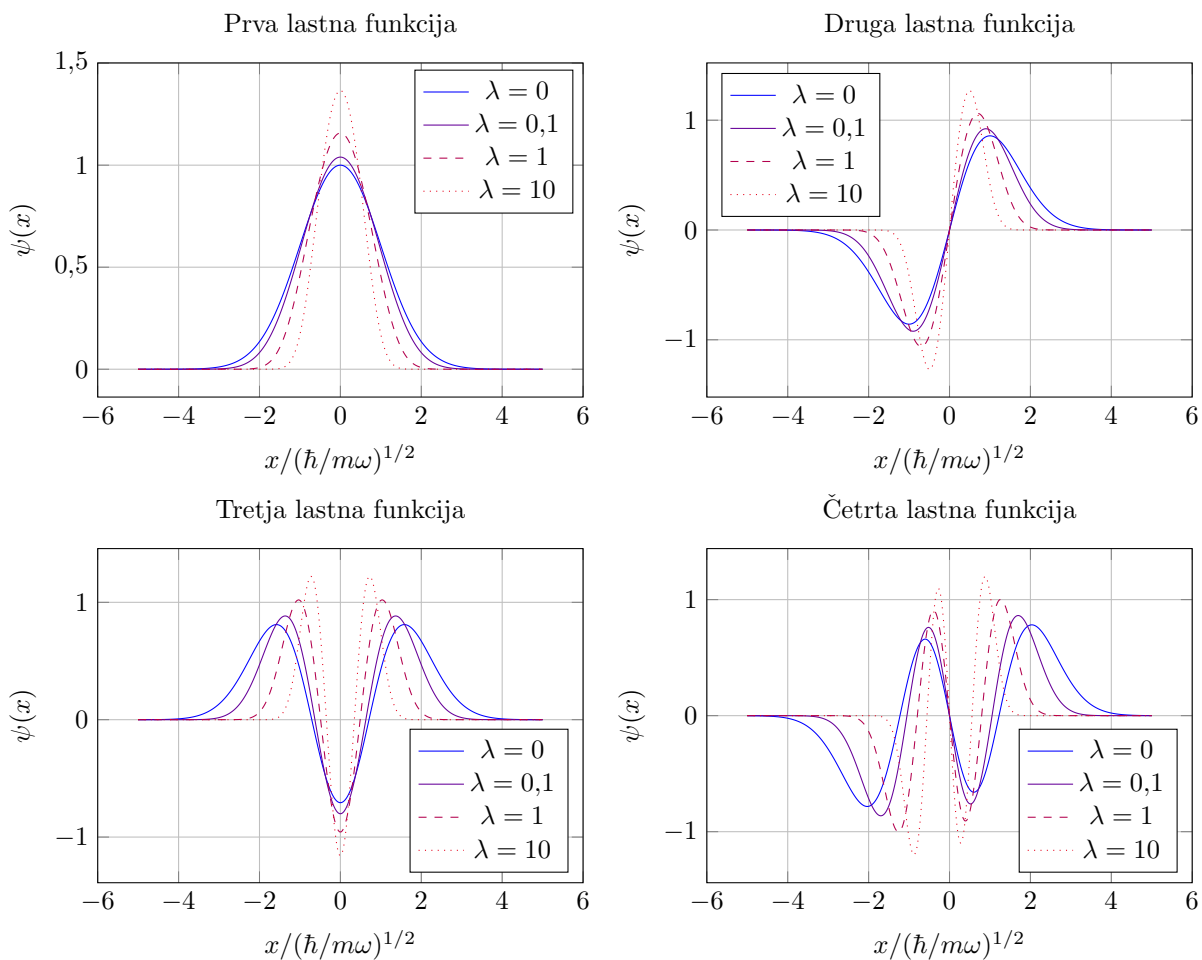
### Dodatek

Spodaj so prikazi lastnih valovnih funkcij za anharmonski oscilator.





**Slika 6:** Eden od načinov prikaza lastnih vektorjev. Na osi  $x$  je prikazan indeks lastne funkcije, na osi  $y$  pa indeks lastne funkcije harmoničnega oscilatorja. Barva prikazuje velikost komponent.



**Slika 7:** Prikazi prvih štirih lastnih funkcij za  $\lambda \in [0, 0.1, 1, 10]$ .