Tesi Triennale in Fisica

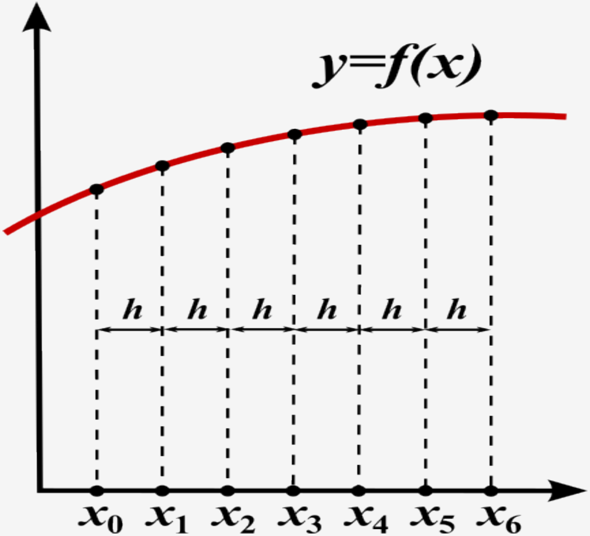
Analisi Numerica dell'Equazione di Schrodinger

Cheyenne Leo
Università degli Studi di Torino - Dipartimento di Fisica
2 settembre 2023

Contenuti

Metodo delle Differenze Finite

- Partizione del dominio nel problema di Sturm-Liouville
- Approssimazione delle derivate tramite Taylor
- Costruzione di un sistema lineare
- Individuazione di autovalori e autovettori del sistema



N Grande $\implies$
Grande Accuratezza *ma* computazione costosa

N Piccolo $\implies$
Bassa Accuratezza *ma* semplice da computare

Approssimazione delle Derivate

Si tratta di un'approssimazione di $\phi(x_0 + h)$ tramite rimozione del termine di errore $O(h^n)$.
Manipolando semplicemente Taylor:

- **Formula differenza in avanti**: $\phi'(x_0) \approx \frac{\phi(x_0+\Delta x)-\phi(x_0)}{\Delta x} + O(\Delta x)$
- **Formula differenza all'indietro**: $\phi'(x_0) \approx \frac{\phi(x_0)-\phi(x_0-\Delta x)}{\Delta x} + O(\Delta x)$

Possono essere sommate per ottenere:

- **Formula differenza centrale**: $\phi'(x_0) \approx \frac{\phi(x_0+\Delta x)-\phi(x_0-\Delta x)}{2\Delta x} + O(\Delta x)$

Sostituendo nella formula di Taylor al secondo ordine otteniamo infine:

$$\phi''(x_0) \approx \frac{\phi(x_0 + \Delta x) - 2\phi(x_0) + \phi(x_0 - \Delta x)}{\Delta x^2} + O(\Delta x^2)$$

Nella nostra partizione x_j questo significa:

$$\phi''(x_j) \approx \frac{\phi(x_{j+1}) - 2\phi(x_j) + \phi(x_{j-1})}{h^2} \tag{1}$$

ovvero abbiamo ottenuto una formula per approssimare le derivate fino al secondo ordine.

Applicazione in MQ

1. Scegliamo un intero N
2. Definiamo $\Delta x = h = \frac{b-a}{N}$
3. Rendiamo il sistema adimensionale imponendo vincoli sulle costanti

Nel nostro caso, ovvero l'equazione di Schrödinger, questo significa assumere che $\frac{\hbar^2}{2m} = 1$

Abbiamo dunque ottenuto un'equazione sulla partizione x_n:

$$\begin{aligned}
&\hat{H}_j \psi(x_j) = E\psi(x_j) \\
\implies\ & -\psi''(x_j) + V(x_j)\psi(x_j) = E\psi(x_j) \\
\implies\ & -\frac{1}{h^2}\psi(x_{j-1}) + [V(x_j) + \frac{2}{h^2}]\psi(x_j) - \frac{1}{h^2}\psi(x_{j+1}) = E\psi(x_j)
\end{aligned}$$

Considerando la nostra partizione x_n con $n = 0m, ..., N$ abbiamo ridotto l'equazione differenziale ad un problema di algebra lineare, che possiamo semplicemente risolvere con il nostro calcolatore.
Ad esempio, per N=4:

$$H\vec{\psi} = E\vec{\psi}$$

$$-\frac{1}{2h^2}\begin{bmatrix} -2+V_1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & -2+V_2 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & -2+V_3 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & -2+V_4 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} E_1 \\ E_2 \\ E_3 \\ E_4 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{bmatrix}$$

Che è un problema agli autovalori