

# Matlab e meccanica quantistica:

## Breve introduzione all'uso di Matlab per la risoluzione di semplici problemi quantistici

Fantasia Andrea

Ghezzi Matteo

Maconi Efrem

### Sommario

In meccanica quantistica sono pochi i problemi risolvibili esattamente (e.g. particella libera, oscillatore armonico, atomo di idrogeno...) e non molti quelli che possono essere trattati in modo semplice con, ad esempio, la teoria delle perturbazioni: per questo motivo è indispensabile procedere con la risoluzione numerica dei problemi che, anche nei casi più banali, richiede comunque degli astuti accorgimenti.

La breve dissertazione affronterà per prima cosa il problema legato alla discretizzazione imposta necessariamente dall'uso di un computer (non è possibile, infatti, lavorare con funzioni d'onda continue ed infinite ecc.) mostrando come discretizzare il laplaciano e come imporre condizioni al bordo periodiche e di Dirichlet; trovata la miglior rappresentazione dell'hamiltoniana, verrà poi mostrato come risolvere un problema quantistico in cui  $V \propto |x|^\alpha$  e saranno messi in luce i limiti della risoluzione numerica; infine si parlerà di come trattare l'evoluzione temporale dell'equazione di Schrodinger.

Verranno considerate hamiltoniane indipendenti dal tempo e problemi unidimensionali; costanti quali  $\hbar$ , massa, ... saranno poste uguali ad 1.

# Indice

<b>1</b>	<b>Discretizzare l'hamiltoniana</b>	<b>3</b>
1.1	Autovalori e Autovettori . . . . .	3
1.2	Discretizzazione di Hamiltoniane e condizioni al bordo . . . . .	3
<b>2</b>	<b>Particella in una scatola</b>	<b>5</b>
2.1	Caso continuo . . . . .	5
2.2	Caso discreto . . . . .	5
<b>3</b>	<b>Problemi noti - confronto delle hamiltoniane</b>	<b>7</b>
3.1	Particella in una scatola . . . . .	7
3.2	Oscillatore armonico . . . . .	7
<b>4</b>	<b>Sistema con <math>V(x) \propto  x ^\alpha</math></b>	<b>8</b>
4.1	Formula semiclassica . . . . .	9
4.2	Confronto tra metodo numerico e formula semiclassica . . . . .	9
<b>5</b>	<b>Equazione di Schrodinger dipendente dal tempo</b>	<b>10</b>
5.1	Risoluzione mediante un odesolver . . . . .	11
5.2	Esponenziale di matrice . . . . .	11
5.3	Operator splitting . . . . .	11
5.4	Confronto tra i tre metodi . . . . .	12
<b>6</b>	<b>Studio evoluzione temporale per un potenziale specifico</b>	<b>13</b>
6.1	Buca finita di potenziale . . . . .	14
6.2	Barriera finita di potenziale . . . . .	15
6.3	Barriera a forma di $\delta$ . . . . .	16

# 1 Discretizzare l'hamiltoniana

## 1.1 Autovalori e Autovettori

In meccanica quantistica il problema principale che si affronta è trovare autovalori ed autofunzioni dell'hamiltoniana  $H$  che descrive il sistema.

Poiché il computer ha una memoria limitata e, inoltre, non può trattare i numeri irrazionali (e dunque il continuo), le funzioni d'onda si traducono in vettori  $N$  dimensionali e l'hamiltoniana in una matrice  $N \times N$ . Una parte importante del problema risiede, perciò, nella determinazione di  $H$  la quale deve essere trovata nel modo più preciso possibile e meno dispendioso dal punto di vista computazionale; trovata  $H$ , ricavarne autovalori ed autovettori è semplice: si utilizza il comando di Matlab

$$[u, E] = \text{eig}(H)$$

La parte più difficile risiede nell'analisi dei dati ottenuti, cioè nel discernere quando l'errore computazione diviene preponderante.

## 1.2 Discretizzazione di Hamiltoniane e condizioni al bordo

L'hamiltoniana per un problema unidimensionale avente potenziale non dipendente dal tempo ha la seguente forma:

$$H = -\frac{\hbar}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)$$

Per discretizzare l'hamiltoniana si introduce una retta di lunghezza  $L$ , divisa in  $N$  segmenti ciascuno di lunghezza  $a = \frac{L}{N}$  dove  $a$  è il *passo reticolare*. Variando  $L$  ed  $N$  varia l'accuratezza della soluzione e il costo computazionale del problema (questo argomento verrà analizzato più avanti).

Si ambienta il problema nello *spazio degli stati*, nel quale il potenziale è diagonale.

Si concentri dunque l'attenzione sulla discretizzazione della derivata seconda.

Si consideri la funzione  $f(x)$ ; per approssimare la derivata seconda si utilizza il seguente metodo:

$$a^2 f''(x) + O(a^{2p}) = a_0 f(x) + a_1 [f(x+a) + f(x-a)] + a_2 [f(x+2a) + f(x-2a)] + \dots$$

Si consideri il caso  $P = 2$ :

$$f(x \pm a) = f(x) \pm a f'(x) + \frac{1}{2} a^2 f''(x) + \dots$$

Che inserito nella precedente formula fornisce:

$$a^2 f''(x) = a_0 f(x) + a_1 [2f(x) + a^2 f''(x)]$$

E risolvendo questa equazione si trovano i coefficienti  $a_0$  e  $a_1$

$$a_0 = -2 \quad a_1 = 1$$

Pertanto in questa approssimazione si ottiene

$$a^2 f''(x) = -2f(x) + f(x+a) + f(x-a)$$

Si sta però trattando il caso in cui  $f(x)$  è discreta:  $x = na$

$$a^2 f''_n = f_{n+1} + f_{n-1} - 2f_n$$

Dove  $f_n$  è l' $n$ -esima componente del vettore  $f$ . Matricialmente si traduce in una matrice tridiagonale

$$-\frac{\hbar}{2m} \frac{d^2}{dx^2} = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} = \frac{1}{2a^2} \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & \dots \\ -1 & 2 & -1 & \ddots \\ 0 & -1 & 2 & \ddots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix}$$

Si consideri ora il caso  $P = 3$ :

$$f(x \pm a) = \dots \pm \frac{1}{3!} a^3 f'''(x) + \frac{1}{4!} a^4 f''''(x)$$

$$f(x \pm 2a) = f \pm 2a f' + \frac{1}{2} (2a)^2 f'' \pm \frac{1}{3!} (2a)^3 f''' + \frac{1}{4!} (2a)^4 f''''$$

E procedendo come nel caso  $P = 2$  si trova

$$\begin{cases} a_0 + 2a_1 + a_2 = 0 \\ a_1 + 4a_2 = 1 \\ a_1 + 16a_2 = 0 \end{cases} \implies \begin{cases} a_0 = -\frac{5}{2} \\ a_1 = \frac{4}{3} \\ a_2 = -\frac{1}{2} \end{cases}$$

Si ottiene così una matrice pentadiagonale

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} \approx \frac{1}{2a^2} \begin{pmatrix} \frac{5}{2} & -\frac{4}{3} & \frac{1}{12} & 0 & \dots \\ -\frac{4}{3} & \frac{5}{2} & -\frac{4}{3} & \frac{1}{12} & \ddots \\ \frac{1}{12} & -\frac{4}{3} & \frac{5}{2} & -\frac{4}{3} & \ddots \\ 0 & \frac{1}{12} & -\frac{4}{3} & \frac{5}{2} & \ddots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix}$$

Andando a valutare i casi con  $P$  maggiore è possibile dare un'approssimazione ancora migliore della derivata seconda.

Costruita l'hamiltoniana nell'approssimazione scelta, le condizioni al bordo si impongono nel seguente modo:

- Condizioni di Dirichlet (condizioni di annullamento al bordo):  
in questo caso l'hamiltoniana ha elementi non nulli solo sulla tri, penta, ..., diagonale.  
A titolo esemplificativo, si riporta il codice per la definizione della matrice tridiagonale:

```
H0 = (1/a^2/2)*(diag(ones(N,1))-diag(ones(N-1,1),1));
H0 = H0+H0';
H = H0+diag(V); % nel caso ci fosse anche il potenziale
```

- Condizioni periodiche:  
Per capire meglio si consideri il caso di  $H$  tridiagonale (per ora il potenziale non c'è, dunque  $H$  si riduce ad essere proporzionale alla derivata seconda) che agisce su di un vettore: la derivata seconda è:

$$a^2 f_n'' = f_{n+1} + f_{n-1} - 2f_n$$

dal momento che si considerano PBC l'elemento che precede la prima entrata del vettore è l'ultima componente dello stesso, e l'elemento che segue l'ultima entrata è la prima componente.

Per questo motivo l'hamiltoniana va modificata in questo modo:

```
H0 = (1/a^2/2)*(diag(ones(N,1))-diag(ones(N-1,1),1));
H0 = H0+H0';
H0(1,N) = -(1/a^2/2);
H0(N,1) = -(1/a^2/2);
```

Esistono metodi migliori e più accurati per discretizzare il laplaciano: prima di trattarli però è utile soffermarsi a studiare il problema agli autovalori di una particella in una scatola.

## 2 Particella in una scatola

Si calcolano autovalori e autovettori di una particella in una scatola

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2 u}{dx^2} = Eu(x) \quad \implies \quad \frac{d^2 u}{dx^2} = -2Eu(x)$$

E ponendo  $\lambda^2 = 2E \rightarrow \lambda = \pm i\sqrt{2E}$  quindi la soluzione generale di questa equazione differenziale è:

$$u(x) = Ae^{\pm i\sqrt{2E}x} \quad (1)$$

### 2.1 Caso continuo

Utilizziamo le *condizioni al bordo periodiche (PDC)*  $u(0) = u(L)$  dove  $L$  è la larghezza della scatola. Applicando queste condizioni a (1) si trova:

$$A = Ae^{\pm i\sqrt{2E}L}$$

Risolvendo per  $E$  si trovano le energie permesse

$$E = \frac{1}{2} \left( \frac{2\pi}{L} \right)^2 q^2 \quad q \in \mathbb{Z}$$

Per determinare la costante  $A$  si procede a normalizzare  $u(x)$ :

$$|A|^2 \int_0^L |e^{\pm i\sqrt{2E}x}|^2 dx = 1$$

L'integrazione determina quindi  $A = \frac{1}{\sqrt{L}}$

Sostituendo quanto trovato in (1) si trova quindi:

$$u(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i \frac{2\pi}{L} qx} \quad (2)$$

### 2.2 Caso discreto

Traduciamo  $u(x)$  nel caso discreto utilizzando il passo reticolare  $a$ :

$$u(x) \rightarrow u(n, a) \quad L = Na$$

Facendo riferimento a (2):

$$u_{n,k}(x) = (Norm) e^{ikna} \quad \text{dove } k = \frac{2\pi}{Na} q$$

Calcoliamo ora la norma di  $u_n$  (che adesso è un vettore):

$$\|u_n\| = \sqrt{u_n^* u_n} = \sqrt{N}$$

Da cui segue:

$$u_{n,k} = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{ikna}$$

Dove per convenzione si usa:

$$\begin{cases} q = -\frac{N}{2}, \dots, 0, \dots, \frac{N}{2} - 1 & \text{per } N \text{ pari} \\ q = -\frac{N-1}{2}, \dots, 0, \dots, \frac{N-1}{2} & \text{per } N \text{ dispari} \end{cases}$$

Quindi nel caso discreto per PBC le energie sono

$$E_{PBC} = \frac{1}{2} \left( \frac{2\pi}{Na} \right)^2 q^2$$

Si calcolano ora gli autovalori utilizzando l'hamiltoniana tridiagonale:

$$-\frac{1}{2a^2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = -\frac{1}{2a^2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} [2 - e^{ika} - e^{-ika}] \frac{e^{ikna}}{\sqrt{N}} = -\frac{1}{2a^2} \left[ 2i \sin\left(\frac{ka}{2}\right) \right] u_{nk}$$

$$\Rightarrow E_k = \frac{1}{2a^2} \left[ 2i \sin\left(\frac{ka}{2}\right) \right]$$

E si verifica che gli autovalori trovati usando l'hamiltoniana tridiagonale sono un'approssimazione del caso continuo:

$$E_k = \frac{1}{2a^2} \left[ 2 \sin\left(\frac{2\pi}{aN} q\right) \right] \xrightarrow[N \rightarrow \infty]{a \rightarrow 0} \frac{1}{2} \left( \frac{2\pi q}{L} \right)^2$$

In modo simile si possono ricavare i seguenti risultati utilizzando le *condizioni di Dirichlet* (DBC):

$$f(0) = f(L+a) = 0 \rightarrow f_0 = f_{N+1} = 0 \quad \text{dove } L = (N+1)a$$

$$k = \frac{\pi q}{(N+1)a} \quad u_{k,n} = \sqrt{\frac{2}{N+1}} \sin(kna) \quad \text{con } q = 0, 1, 2, \dots, N$$

E le energie sono con queste condizioni al bordo sono:

$$E_{DBC} = \frac{1}{2} \left( \frac{\pi q}{(N+1)a} \right)^2$$

Si noti che anche nel caso più semplice,  $V(x) = 0$ , gli autovalori dell'hamiltoniana approssimata non coincidono con quelli del caso continuo: per migliorare l'accuratezza degli autovalori bisogna aumentare  $N$  (e dunque diminuire il passo reticolare), cambiare la lunghezza della retta  $L$  (aumentando  $L$  si spostano i problemi legati al bordo ad autovalori più alti) o passare dall'uso di  $H$  tridiagonale ad  $H$  pentadiagonale e così via. Cambiare i parametri in gioco  $N$ ,  $L$  o l'hamiltoniana utilizzata non è il modo migliore di procedere: per  $N$  grandi infatti si ha un alto costo computazionale, ricavare hamiltoniana più accurate è tedioso e l'accuratezza non migliora molto.

La miglior approssimazione del laplaciano si ottiene con l'introduzione della *trasformata di Fourier*; l'idea è la seguente: l'hamiltoniana del sistema è data da  $H = T + V$  dove  $V$  rappresenta il potenziale che, nello spazio degli stati, è diagonale; l'energia cinetica  $T$  è, invece, diagonale nello spazio dei momenti e i relativi autovalori di  $T$  discreta corrispondono a  $E_{PBC}$  e  $E_{DBC}$ .

Computazionalmente si può procedere in due modi:

- Quando si applica  $T$  alla funzione d'onda si rimane dello spazio degli stati: si utilizza dunque un'approssimazione di questo operatore;
- Si fa la trasformata di Fourier della funzione d'onda, le si applica l'operatore  $T$  (che nello spazio dei momenti è diagonale e gli autovalori sono noti) e poi si esegue la trasformata inversa di Fourier.

Il secondo modo è il più accurato.

Le funzioni d'onda in gioco sono vettori  $N$ -dimensionali e per tale motivo la trasformata di Fourier che si usa è la *fft* (Finite Fourier Transform): eseguire tale trasformata equivale ad applicare al vettore una matrice che su matlab può essere velocemente definita in questo modo: *fft(eye(N))*

Di seguito è riportato il codice matlab da utilizzare per la miglior approssimazione di  $H$ :

- Condizioni periodiche
- ```

x = a*(-(N-1)/2 : (N-1)/2)';
n = floor(N/2);
nn = floor((N-1)/2);
k = (2*pi/N/a)*(-n:nn)';
k = fftshift(k);
T = ifft(diag(k.^2/2)*fft(eye(N)))';
T = real(T+T')/2;
H = T + diag(V); % V ovviamente deve essere definito

```

- Condizioni di Dirichlet

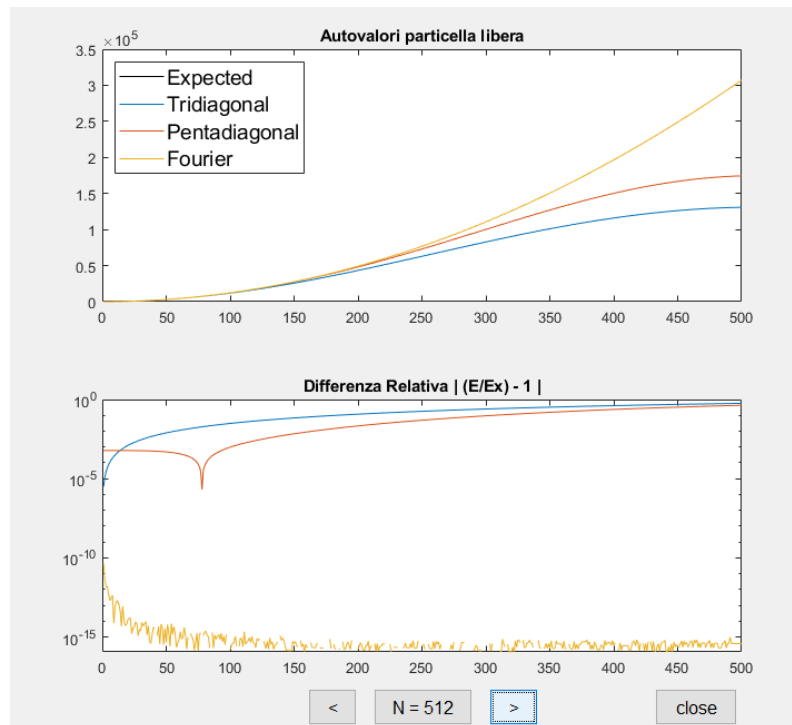
```
x = a*(-(N-1)/2 : (N-1)/2)';
k = (pi/a/(N+1))*(1:N)';
T = sinft(diag(k.^2/2)*sinft(eye(N)));
T = real(T+T')/2;
H = T + diag(V);
```

Per capire quale possa essere la miglior approssimazione della derivata seconda discreta bisogna fare riferimento a problemi noti, risolvibili analiticamente: si calcolano così gli autovalori delle diverse  $H$  e si seleziona la migliore che poi verrà utilizzata per problemi affrontabili solo computazionalmente. Se ne riportano alcuni esempi di seguito.

### 3 Problemi noti - confronto delle hamiltoniane

#### 3.1 Particella in una scatola

Nelle seguenti immagini si riportano gli autovalori della particella in una scatola ottenuti con hamiltoniana tridiagonale, pentadiagonale e col metodo di Fourier:



Questi grafici sono ottenuti utilizzando **discH.m**, una funzione che mostra differenti metodi di discretizzazione dell'hamiltoniana, plottando l'energia degli autostati della buca di potenziale. Si nota che gli autovalori ottenuti usando la *fft* coincidono con quelli attesi, con un errore dell'ordine di  $10^{-15}$ . Negli altri due casi gli autovalori si discostano con un errore significativo.

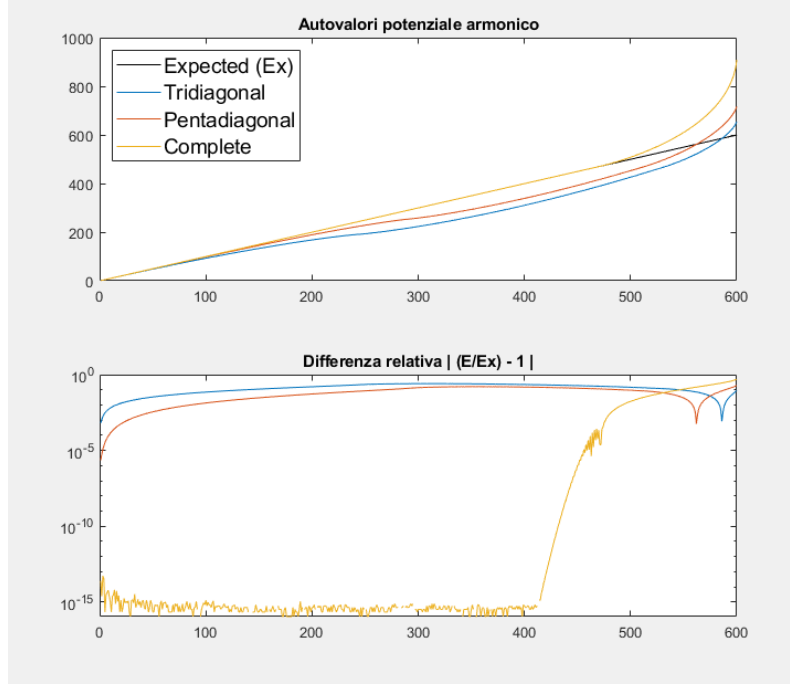
#### 3.2 Oscillatore armonico

In questo caso è necessario introdurre un'accortezza: l'approccio ottimale al problema si ha quando si diagonalizza l'hamiltoniana in cui l'energia cinetica ed il potenziale sono del medesimo ordine di grandezza; per fare ciò, il miglior passo reticolare non è scelto a priori ma nel seguente modo:

$$\max T = \frac{T_0}{a^2} \quad ; \quad \max V = V_0 a^2$$

$$\max T = \max V \quad \Rightarrow \quad \frac{T_0}{a^2} = V_0 a^2 \quad \Rightarrow \quad a^4 = \frac{T_0}{V_0}$$

I seguenti grafici sono ottenuti usando **potx2.m** (ponendo  $a=2$ ), programma che sarà spiegato nella prossima sezione.



Anche in questo caso si evince che il migliore approccio è utilizzare  $H$  in cui l'energia cinetica è stata definita con il metodo della *fft*.

Dal grafico si osserva che per bassi autovalori l'accordo dell'hamiltoniana completa è ottimo; per alti autovalori, essi non corrispondono a quelli aspettati perché le rispettive autofunzioni hanno molti nodi, la cui distanza è dell'ordine del passo reticolare.

Per alti autovalori, oltre al fatto che le autofunzioni eseguono molte oscillazioni, nel caso di DBC emerge un altro fenomeno: Si consideri, a titolo esemplificativo, un potenziale armonico definito in una scatola di lato  $L$ . Per bassi autovalori la funzione d'onda corrispondente ha valore nullo in un intorno abbastanza grande del bordo; per alte energie, invece, essa ha valore non nullo in un intorno del bordo che, dunque, influisce. Per spostare gli effetti al bordo ad autovalori più alti bisogna aumentare  $L$ : questo vale non solo per l'oscillatore armonico, ma per tutti i potenziali in una scatola di lato  $L$ .

## 4 Sistema con $V(x) \propto |x|^\alpha$

Si andrà ora a studiare un problema in cui la particella è soggetta ad un potenziale  $V(x) \propto |x|^\alpha$  (con  $\alpha > 0$ ) che, tranne per il caso  $\alpha = 2$ , non è risolubile analiticamente; si andranno poi a confrontare i risultati ottenuti con la quantizzazione semiclassica, in particolare con la *formula di Bohr-Sommerfeld*.

L'hamiltoniana del sistema è:

$$H = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} g |x|^\alpha$$

Sfruttando i risultati precedentemente ottenuti, si utilizza l'hamiltoniana in cui  $T$  è definita con la *fft*; il potenziale è elevato ad  $\alpha$ , pertanto il miglior passo reticolare è:

$$\frac{T_0}{a^2} = V_0 a^\alpha \quad \Rightarrow \quad a = \left( \frac{T_0}{V_0} \right)^{\frac{1}{\alpha+2}}$$



## 4.1 Formula semiclassica

Dal metodo WKB (si impone che la funzione d'onda sia scritta in forma esponenziale e tale esponente viene sviluppato in serie di potenze della costante di Planck) si eredita il seguente risultato:

$$\oint p(x) dx = 2\pi\hbar\left(n + \frac{1}{2}\right) \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Dove l'integrale è esteso su un intero periodo del moto classico della particella:

$$p(x) = \sqrt{2m(E - V(x))} \quad \text{e si suppone } E > V(x)$$

Nel caso in esame si ha  $V(x) = \frac{1}{2}|x|^\alpha$  e  $E = \frac{1}{2}|x_0|^\alpha$

Pertanto si ottiene:

$$\oint p(x) dx = 4 \int_0^{x_0} \sqrt{x_0^\alpha - x^\alpha} dx = 4x_0^{1+\frac{\alpha}{2}} \int_0^1 \sqrt{1 - \lambda^\alpha} d\lambda$$

Si ottiene:

$$\frac{4}{\alpha}(2E)^{\frac{\alpha+2}{2\alpha}} \beta\left(\frac{3}{2}, \frac{1}{\alpha}\right) = 2\pi\left(n + \frac{1}{2}\right)$$

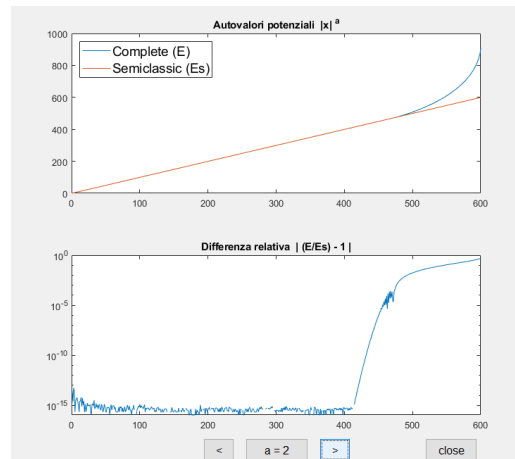
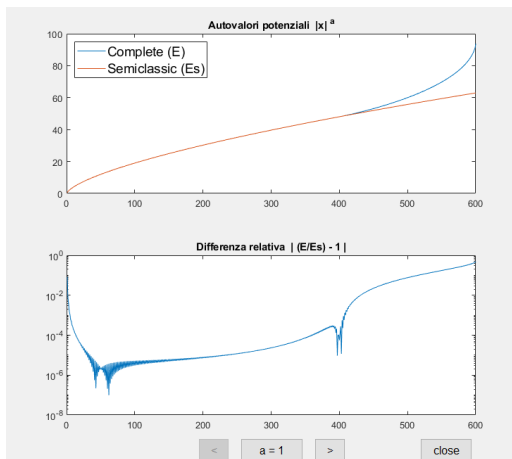
In cui  $\beta(z, w) = \frac{\Gamma(z)\Gamma(w)}{\Gamma(z+w)}$  e  $\Gamma(x)$  è la funzione gamma di Eulero. Risolvendo questa equazione per  $E$  si trova:

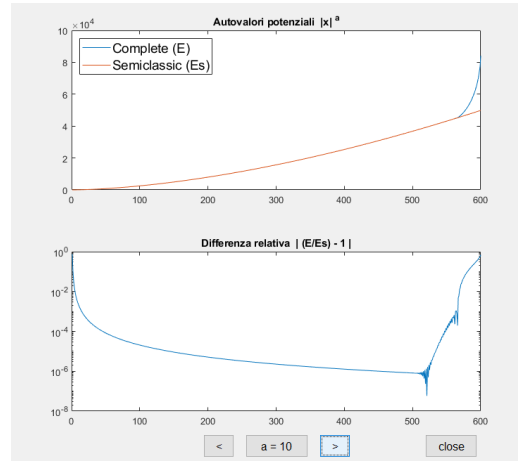
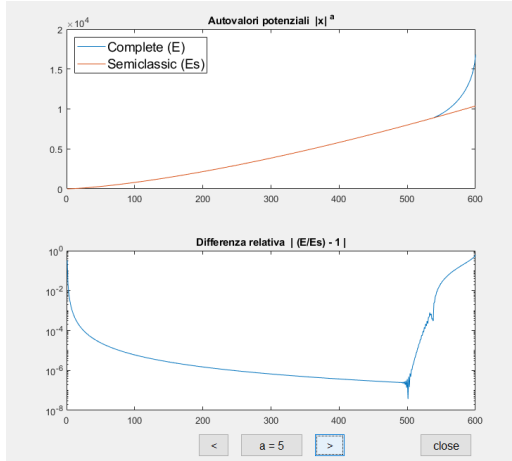
$$E_n = \frac{1}{2} \left( \frac{\pi\alpha}{2\beta\left(\frac{3}{2}, \frac{1}{\alpha}\right)} \right)^{\frac{2\alpha}{\alpha+2}} \left( n + \frac{1}{2} \right)^{\frac{2\alpha}{\alpha+2}} \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Il problema può essere risolto sia numericamente sia utilizzando la formula semiclassica: entrambi i metodi non sono esatti e dunque gli autovalori saranno approssimati.

## 4.2 Confronto tra metodo numerico e formula semiclassica

Nei seguenti grafici è riportato il confronto tra gli autovalori ottenuti per via numerica e quelli calcolati con la formula semiclassica.





Si osserva che si ha una notevole discrepanza per bassi e per alti autovalori; per piccoli autovalori si considerano esatti quelli forniti dalla risoluzione numerica. Questo è stato verificato per l'oscillatore armonico, problema semplice da risolvere ma che per il computer non ha nulla di speciale. Per questi autovalori la formula semiclassica, che vale per alti numeri quantici, non va applicata.

Per autovalori "intermedi" si osserva un buon accordo tra i due differenti metodi di risoluzione. Considerando autovalori sempre più grandi si vede che il metodo numerico sbaglia, in quanto le relative autofunzioni eseguono parecchie oscillazioni: in questo caso ad essere accurata è la formula di Bohr-Sommerfeld.

Si noti che la formula classica diviene tanto più inaccurata tanto più si aumenta  $\alpha$ : infatti, per  $\alpha$  che tende ad infinito, (computazionalmente non è fattibile) il potenziale  $|x|^\alpha$  si traduce nel problema di particella in una scatola (definita tra  $-1$  ed  $1$ ): facendo però tale limite si osserva che l'energia trovata con la formula di Bohr-Sommerfeld tende a  $(n + 0.5)$  e non a  $(n + 1)$  (l'approssimazione semiclassica è dunque inesatta per la particella in una scatola).

## 5 Equazione di Schrodinger dipendente dal tempo

L'equazione di Schrodinger, se si considera un potenziale indipendente dal tempo, è:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(t)}{\partial t} = H\psi(t)$$

Dal momento che si stanno trattando problemi discretizzati, questa diventa un'equazione scritta in forma matriciale:

$$\dot{\psi} = -i \sum n' H_{nn'} \psi_{n'}$$

Si affronterà ora il seguente problema: data l'hamiltoniana  $H$  indipendente dal tempo e la funzione d'onda al tempo  $t = 0$ , studiare l'evoluzione temporale di  $\psi$ .

Ci sono diversi approcci numerici per la risoluzione di questo problema:

- Utilizzo di programmi per risolvere equazioni differenziali ordinarie (odesolver);
- sfruttare l'unitarietà dell'evoluzione dell'equazione di Schrodinger ed eseguire l'esponenziale di matrice;
- sfruttare l'unitarietà e la logica degli algoritmi simplettici applicando il metodo dell'operator splitting.

## 5.1 Risoluzione mediante un odesolver

L'equazione di Schrodinger è un'equazione differenziale del primo ordine nel tempo: è possibile, data  $\psi(0)$  procedere nel calcolo di  $\psi(t)$  usando un ode solver.

Di seguito è riportato parte del codice da usare con questo approccio:

Questo modo di risolvere il problema non è il miglior approccio possibile per i seguenti motivi:

- ha un alto costo computazionale: infatti bisogna usare piccoli valori di  $N$  per evitare lunghe attese;
- per la diminuzione del tempo di computazione bisogna ridurre la tolleranza con cui si desidera risolvere l'equazione;
- non tiene in considerazione il fatto che l'evoluzione sia unitaria, ossia che l'evoluzione temporale del sistema possa essere ottenuta mediante l'applicazione di un operatore unitario sullo stato iniziale.

Tale metodo è alla base del codice **schrodes.m**.

## 5.2 Esponenziale di matrice

Questo metodo è il migliore dal punto di vista della precisione, anche se il terzo metodo che sarà trattato più avanti sarà migliore per quanto riguarda il costo computazionale.

Si sfrutta il fatto che l'evoluzione temporale sia unitaria:

$$\dot{\psi} = -iH\psi$$

La cui soluzione è:

$$\psi(t) = e^{-iHt}\psi(0)$$

Per ottenere l'evoluzione temporale di  $\psi$  è sufficiente quindi applicare alla funzione d'onda al tempo  $t = 0$  l'operatore evoluzione temporale  $U(t) = e^{-iHt}$ .

Matlab permette di eseguire l'esponenziale di matrice utilizzando il comando '*expm*(...)' ; definita  $H$ , si procede nel seguente modo per ottenere la funzione d'onda al tempo  $t$ :

```
Uexact = expm(-1i*dt*H);  
psi = Uexact*psi0;
```

Per la definizione dell'hamiltoniana si può utilizzare l'energia cinetica tridiagonale (o approssimazioni migliori): l'evolutore temporale ottenuto sarà esatto e soffrirà unicamente della discretizzazione dello spazio; è possibile anche usare l'energia cinetica definita mediante la *fft*, ma non si avrebbe alcun vantaggio se non migliorare l'errore dovuto alla discretizzazione spaziale.

Il vantaggio che si ha nell'applicare l'evolutore temporale appena definito è l'elevata accuratezza che permette di ottenere; lo svantaggio, invece, risiede nel costo computazionale: è costoso eseguire l'esponenziale di una matrice (tanto più se è piena) ed il costo di applicazione di  $U$  ad una funzione d'onda è dell'ordine di  $n^2$ .

## 5.3 Operator splitting

Il seguente metodo per la costruzione dell'evolutore temporale permette di bilanciare accuratezza e velocità di esecuzione del programma:

$$U(t) = e^{-iHt} = \lim_{n \rightarrow \infty} \left( e^{-iH \frac{t}{n}} \right)^n \quad \text{si pone } \frac{t}{n} = \tau$$

In generale  $e^{A+B} \neq e^A e^B$ . Vale però la *formula di Baker-Campbell-Hausdorff*:

$$e^A e^B = e^{A+B + \frac{1}{2}[A,B] + \frac{1}{12}([A,[A,B]] - [B,[A,B]]) + \dots}$$

Se  $n \rightarrow \infty$  allora  $\tau \rightarrow 0$  pertanto:

$$e^{-iH\tau} \approx e^{-iT\tau} e^{-iV\tau} \approx e^{-iV\tau} e^{-iT\tau}$$

A meno di un  $O(\tau^2)$ .

Si definisce  $U(\tau) = e^{-iT\tau} e^{-iV\tau}$  Si vuole inoltre che l'inverso dell'evolutore temporale coincida con l'inversione del tempo ( $t \rightarrow -t$ )

$$[U(\tau)]^{-1} = U(-\tau)$$

Ma:

$$[e^{-iHt}]^{-1} \approx [e^{-iT\tau} e^{-iV\tau}]^{-1} = e^{iV\tau} e^{iT\tau} \neq U(-\tau)$$

Si definisce quindi:

$$\tilde{U}(\tau) = e^{-iV\frac{\tau}{2}} e^{-iT\tau} e^{-iV\frac{\tau}{2}}$$

In questo modo si ha che  $\tilde{U}(-\tau) = [\tilde{U}(\tau)]^{-1}$ . Utilizzando quindi  $\tilde{U}$  e la *fft* si ottiene un costo computazionale più basso rispetto al precedente metodo (qui è dell'ordine di  $n \ln(n)$ ) a scapito però di un'approssimazione:

$$[\tilde{U}(\tau)]^n = U(t) + O(\tau^2)$$

Col precedente metodo l'operatore  $U$  si otteneva eseguendo l'esponenziale di una matrice e si applicava ad una funzione d'onda definita nello spazio degli stati; bisognava dunque eseguire un prodotto matrice per vettore (con la matrice che non era diagonale).

Con questo metodo, invece, l'idea è la seguente:  $U$  è costruito come appena mostrato; il potenziale è ora diagonale nello spazio degli stati e l'esponenziale di una matrice diagonale ha costo computazionale minore (rispetto all'esponenziale di matrice non diagonale); dopo aver applicato  $e^{-idt \frac{V}{2}}$  si esegue la trasformata di Fourier della funzione d'onda, passando quindi nello spazio dei momenti, nel quale l'energia cinetica  $T$  è diagonale. Si applica adesso l'operatore  $e^{-idt T}$  e si riporta la funzione d'onda nello spazio degli stati applicandole nuovamente  $e^{-idt \frac{V}{2}}$ .

Di seguito è riportato il codice Matlab per fare quanto appena descritto:

- Condizioni di Dirichlet:

```
Usplit = diag(exp(-1i*V*dt/2)) * sinft( diag(exp(-1i*(0.5*k.^2)
*dt))* sinft(eye(N)) ) * diag(exp(-1i*V*dt/2));
```

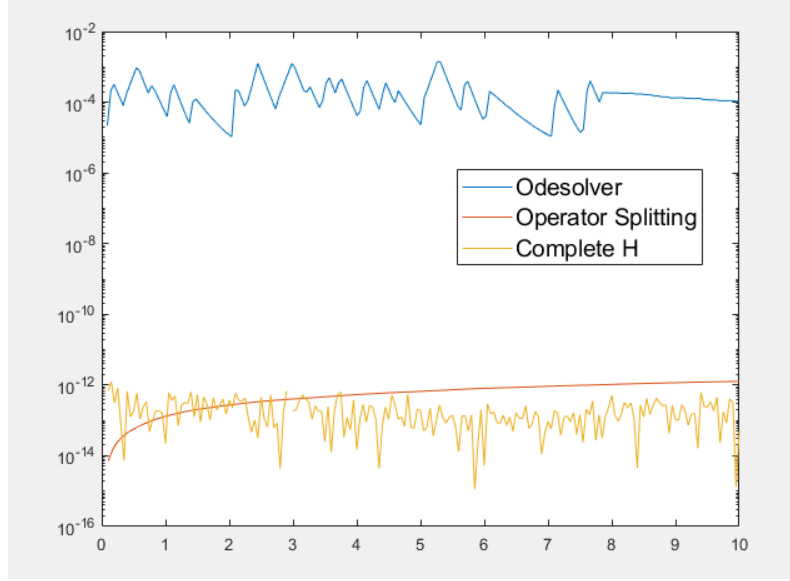
- Condizioni periodiche:

```
Usplit = diag(exp(-1i*V*dt/2)) * ifft( diag(exp(-1i*(0.5*k.^2)*
dt))* fft(eye(N)) ) * diag(exp(-1i*V*dt/2));
```

## 5.4 Confronto tra i tre metodi

Quanto appena illustrato è alla base del programma **schructure.m** (si veda l'ultima sezione per una breve spiegazione del suo funzionamento).

Si riportano ora i grafici con il confronto tra i tre metodi analizzati fino ad ora:



In tali grafici si calcola il valore di aspettazione di  $H$  a  $t = 0$ . Il valore di aspettazione di  $H$  nel caso discreto è:

$$\langle H \rangle = \frac{\psi'(t)(H\psi(t))}{\psi'(t)\psi(t)}$$

Si fa poi evolvere il sistema applicando  $U$  a  $\psi(0)$  e si va a confrontare il nuovo valore di aspettazione di  $H$  con quello calcolato al tempo  $t = 0$ ; a livello teorico i due valori dovrebbero coincidere, infatti:

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [H, A] \rangle + \frac{\partial \langle A \rangle}{\partial t}$$

Ponendo  $A = H$  il termine con la derivata parziale temporale si annulla, poichè stiamo lavorando con hamiltoniane indipendenti nel tempo; inoltre  $H$  commuta con se stessa, si ottiene quindi:

$$\frac{d}{dt} \langle H \rangle = 0$$

Nel grafico riportato si è usato  $\psi(0) = e^{-(x-4)^2}$  e  $V(x) = 0$ .

Si conferma che il metodo con *odesolver* è meno accurato dell'*operator splitting* che, a sua volta, è meno preciso dell'*esponenziale di matrice*.

## 6 Studio evoluzione temporale per un potenziale specifico

In quest'ultima parte si applicano i risultati precedentemente trovati a dei potenziali specifici; per studiare l'evoluzione temporale del sistema si può usare **schructure.m**.

Chiamando tale programma senza argomenti viene restituita una struttura con 6 campi:

- Funzione d'onda a  $t = 0$ : di default è  $\psi(0) = e^{-(x-4)^2}$ ;
- Condizioni al bordo: 0 per DBC (default), 1 per PBC;
- Potenziale: di default è nullo;
- Metodo: di default è Operator splitting ('OpS'); è possibile poi scegliere anche Hamiltoniana completa ('Com'), hamiltoniana tridiagonale ('Tri') o hamiltoniana pentadiagonale ('Pen');
- Numero di punti: 1024 punti di default;
- Step temporale: 0.05 di default.

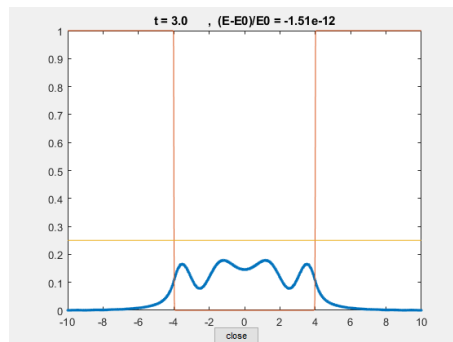
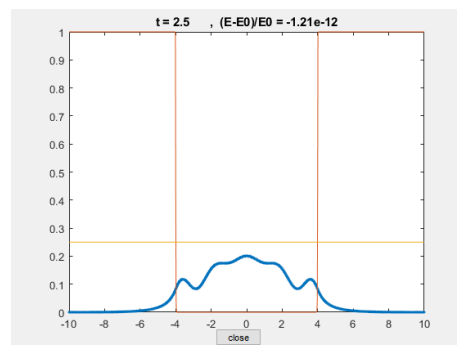
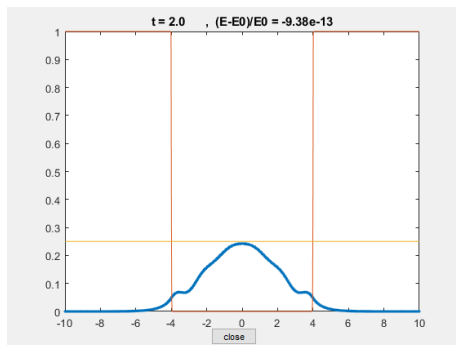
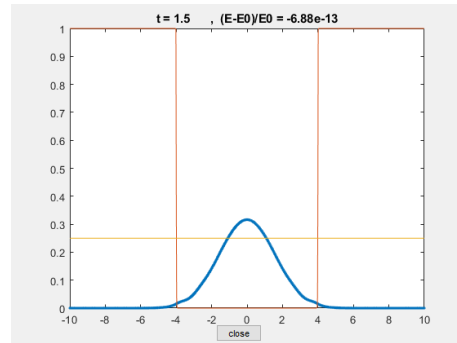
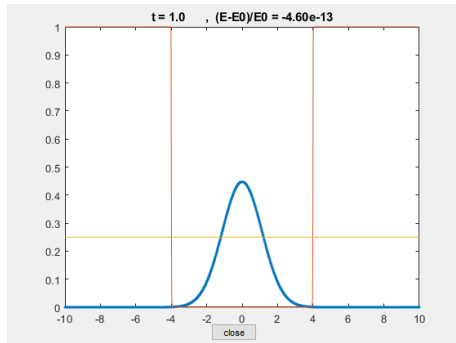
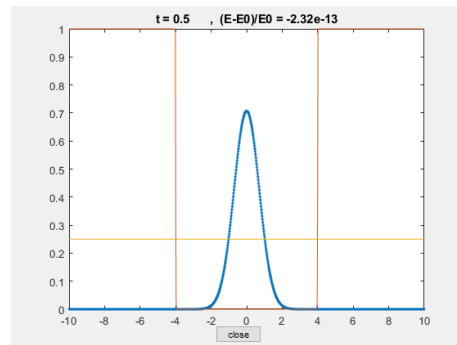
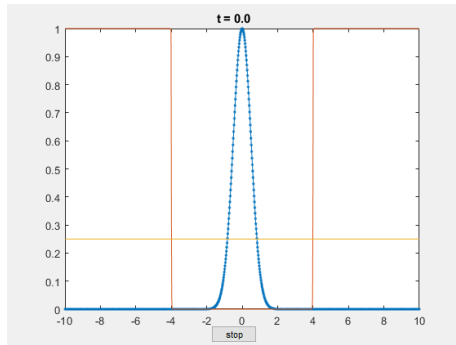
Richiamando il programma dandogli come input la struttura viene mostrato il grafico dell'evoluzione temporale del modulo quadro della funzione d'onda, il valor medio dell'energia e il potenziale; interrompendo l'evoluzione temporale viene plottato l'errore relativo dell'energia in funzione del tempo.

Si riportano, a titolo esemplificativo, i grafici di due potenziali

## 6.1 Buca finita di potenziale

Utilizzando le seguenti condizioni iniziali:

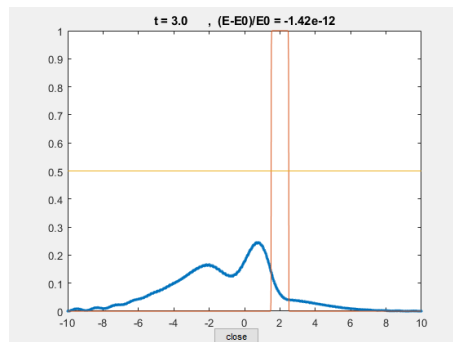
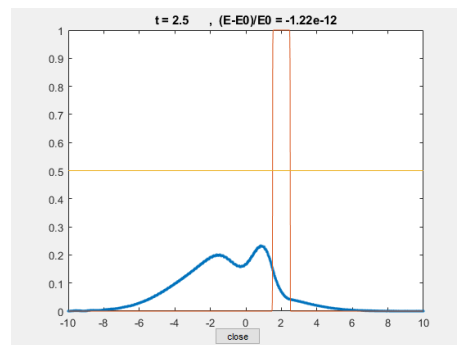
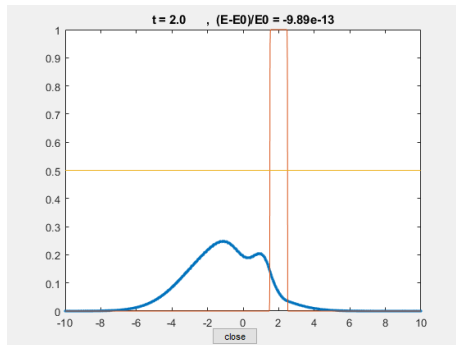
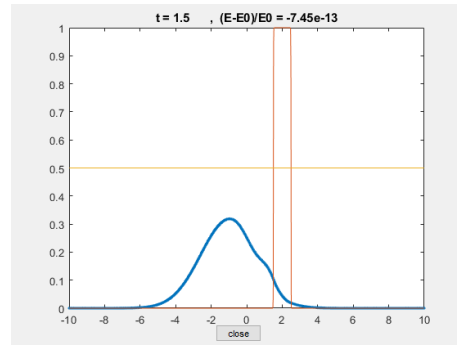
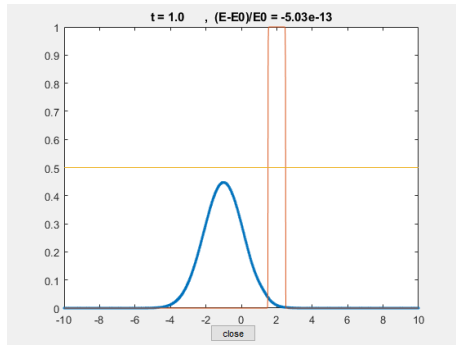
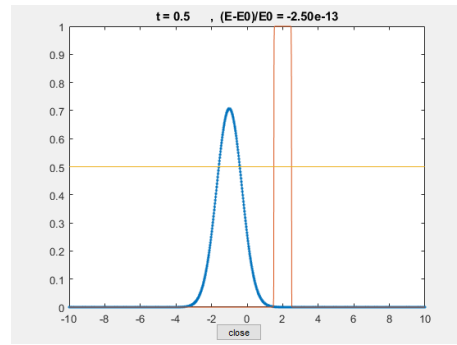
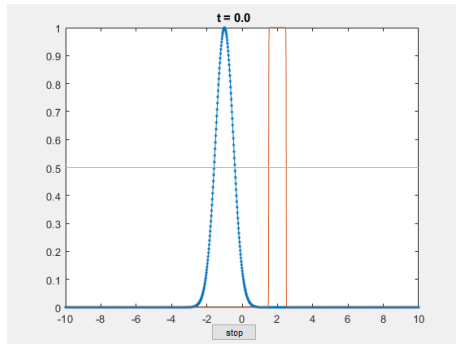
```
psi0: @(x) exp(-(x).^2)
BC: 0
V: @(x) -2*exp(-(x/4).^500)+2
method: '0pS'
N: 1024
dt: 0.0100
```



## 6.2 Barriera finita di potenziale

Utilizzando le seguenti condizioni iniziali:

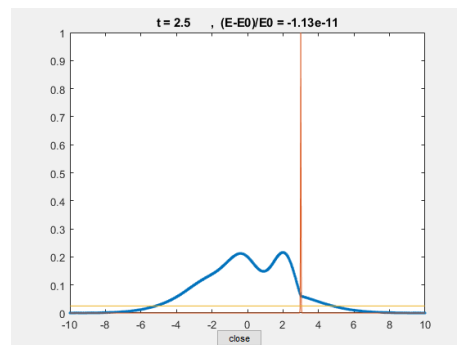
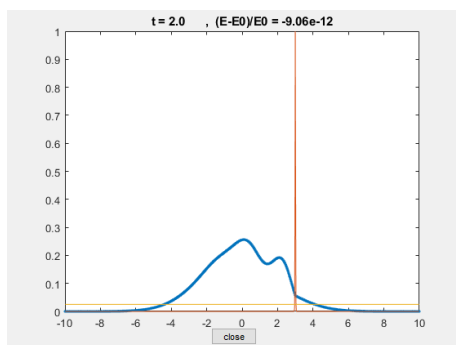
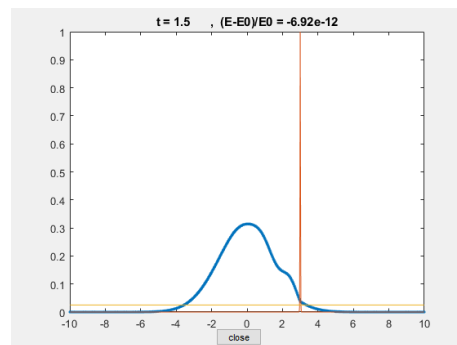
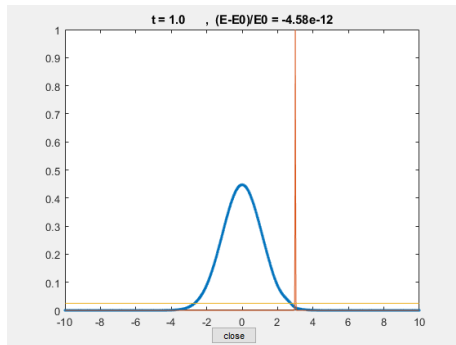
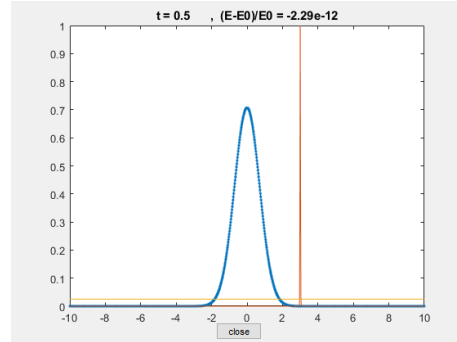
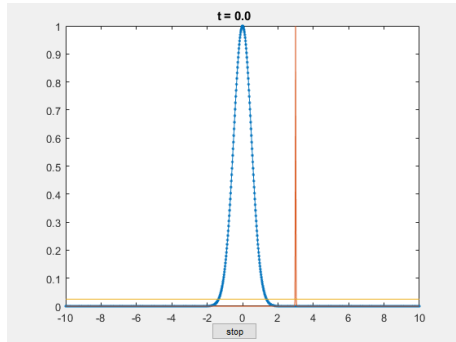
```
psi0: @(x) exp(-(x+1).^2)
BC: 0
V: @(x) exp(-((x-2)*2).^100)
method: 'OpS'
N: 1024
dt: 0.0100
```



### 6.3 Barriera a forma di $\delta$

Utilizzando le seguenti condizioni iniziali:

```
psi0: @(x) exp(-x.^2)
BC: 0
V: @(x) 50/sqrt(2*pi)*exp(-(50*(x-3)).^2)
method: 'OpS'
N: 1024
dt: 1.0000e-03
```



Si nota che per ottenere un buon risultato bisogna utilizzare uno step temporale molto minore rispetto ai due esempi precedenti: l'accuratezza del metodo operator splitting dipende infatti da  $dt$ .

Un'altra caratteristica interessante è che la  $\delta$ , a livello teorico, ha una larghezza nulla: questo è impossibile realizzarlo al calcolatore, la migliore approssimazione che si può ottenere è avere la larghezza della  $\delta$  pari al passo reticolare  $a$ .

Si nota infine una caratteristica peculiare dei potenziali infiniti, ossia la discontinuità della derivata prima del modulo quadro della funzione d'onda.