



Università degli Studi di Genova

FACOLTÀ DI SCIENZE MATEMATICHE, FISICHE E NATURALI
CORSO DI LAUREA MAGISTRALE IN FISICA

Risoluzione dell'equazione di Schrödinger mediante la simulazione di un pacchetto d'onda gaussiano

Tesina per Fisica Computazionale 2

Daniele Rapetti

Sommario

Ho sviluppato e generalizzato il metodo di Crank-Nicolson per adattarlo all'equazione di Schrödinger . Ho quindi analizzato i risultati e provato l'evoluzione con un salto di potenziale e una barriera rettangolare.

Indice

I	Teoria	3
1	Introduzione: matematica	4
1.1	Derivate numeriche	4
1.2	Equazione del calore	4
1.2.1	Eulero esplicito, “in avanti”	4
1.2.2	Eulero implicito, “all’indietro”	4
1.3	Un esempio di come ricavare il metodo di Crank Nicolson: l’equazione del calore	5
2	Costruzione dell’algoritmo	6
2.1	Ottenere il sistema	6
2.2	La matrice Tridiagonale: soluzione	6
3	Condizioni al contorno	9
3.1	Dirichlet	9
3.2	Neumann	9
3.3	Robin	9
3.4	Osservazione	11
4	Applicazioni	12
4.1	Equazione del calore	12
4.2	Equazione di Schrödinger	12
II	Simulazione	15
5	Dati e analisi	16
5.1	Il salto di potenziale	16
5.2	La barriera rettangolare	18
III	Appendice	22
A	Tabelle	23

Parte I
Teoria

1 Introduzione: matematica

1.1 Derivate numeriche

Prima di tutto faccio un piccolo elenco di metodi di calcolo per le derivate, usando il metodo delle differenze finite:

La derivata prima (in avanti) è:

$$\frac{\partial F}{\partial x}(a) \simeq \frac{F(a+h) - F(a)}{h} + O(h) \quad (1.1.1)$$

Ma la sua precisione è al primo ordine, per cui si può utilizzare la cosiddetta definizione “centrale”:

$$\frac{\partial F}{\partial x}(a) \simeq \frac{F(a+h) - F(a-h)}{2 * h} + O(h^2) \quad (1.1.2)$$

Per la derivata seconda il discorso è simile ma in entrambi i casi la precisione è sempre al secondo ordine:

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x^2}(a) \simeq \frac{\frac{\partial F}{\partial x}(a+h) - \frac{\partial F}{\partial x}(a)}{h} = \frac{F(a+2h) + F(a) - 2F(a+h)}{h^2} + O(h^2) \quad (1.1.3)$$

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x^2}(a) \simeq \frac{F(a+h) + F(a-h) - 2F(a)}{h^2} + O(h^2) \quad (1.1.4)$$

Definito come si calcolano le derivate si può iniziare a pensare di risolvere delle equazioni differenziali in maniera numerica.

1.2 Equazione del calore

Il metodo che voglio illustrare inizialmente è stato concepito per la risoluzione di equazioni differenziali iperboliche, come quella del calore:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = K \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad (1.2.1)$$

La prima cosa da fare è calcolare i valori delle derivate:

$$\frac{\partial T}{\partial t}(x, t) = \frac{T(x, t + \Delta t) - T(x, t)}{\Delta t} \quad (1.2.2)$$

e

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}(x, t) = \frac{T(x + \Delta x, t) + T(x - \Delta x, t) - 2T(x, t)}{\Delta x^2} \quad (1.2.3)$$

1.2.1 Eulero esplicito, “in avanti”

Quindi prendo i risultati e li sostituisco nell’equazione le derivate (con queste definizioni si ha precisione Δx^2 nello spazio e Δt nel tempo):

$$\frac{T(x, t + \Delta t) - T(x, t)}{\Delta t} = k \frac{T(x + \Delta x, t) + T(x - \Delta x, t) - 2T(x, t)}{\Delta x^2} \quad (1.2.4)$$

e andando avanti:

$$T(x, t + \Delta t) = k \frac{\Delta t}{\Delta x^2} (T(x + \Delta x, t) + T(x - \Delta x, t) - 2T(x, t)) + T(x, t) \quad (1.2.5)$$

A questo punto calcolo ogni punto conoscendo il corrispondente e i due primi vicini del passo precedente.

1.2.2 Eulero implicito, “all’indietro”

Posso, volendo, calcolare la derivata spaziale nell’istante temporale successivo:

$$\frac{T(x, t + \Delta t) - T(x, t)}{\Delta t} = k \frac{T(x + \Delta x, t + \Delta t) + T(x - \Delta x, t + \Delta t) - 2T(x, t + \Delta t)}{\Delta x^2} \quad (1.2.6)$$

proseguo:

$$T(x, t + \Delta t) - k \frac{\Delta t}{\Delta x^2} (T(x + \Delta x, t + \Delta t) + T(x - \Delta x, t + \Delta t) - 2T(x, t + \Delta t)) = T(x, t) \quad (1.2.7)$$

Anche in questo caso non approfondisco, l’approccio è simile al metodo di Crank-Nicolson, ma preferisco parlarne direttamente di quest’ultimo per poi generalizzarlo e descriverne l’algoritmo utilizzato per la risoluzione dell’equazione di Schrödinger

1.3 Un esempio di come ricavare il metodo di Crank Nicolson: l'equazione del calore

Innanzitutto utilizziamo la definizione centrale della derivata prima in modo da avere una precisione di Δt^2 anche per quanto riguarda il tempo, ma calcolandola in $t + \Delta t/2$ con incremento $\Delta t/2$:

$$\frac{\partial T}{\partial t}(x, t + \Delta t/2) \simeq \frac{T(x, t + \Delta t/2 + \Delta t/2) - T(x, t - \Delta t/2 + \Delta t/2)}{2\Delta t/2} = \frac{T(x, t + \Delta t) - T(x, t)}{\Delta t} \quad (1.3.1)$$

Per lo spazio utilizziamo le derivate calcolate negli esempi precedenti. A questo punto abbiamo $\frac{\partial T}{\partial t}(x, t + \Delta t/2)$, $\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}(x, t)$ e $\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}(x, t + \Delta t)$ per calcolare l'equazione facciamo la media delle due derivate spaziali ai tempi t e $t + \Delta t$.

$$\begin{aligned} \frac{T(x, t + \Delta t) - T(x, t)}{\Delta t} = \frac{K}{2} & \left(\frac{T(x + \Delta x, t) + T(x - \Delta x, t) - 2T(x, t)}{\Delta x^2} \right. \\ & \left. + \frac{T(x + \Delta x, t + \Delta t) + T(x - \Delta x, t + \Delta t) - 2T(x, t + \Delta t)}{\Delta x^2} \right) \end{aligned} \quad (1.3.2)$$

In pochi passaggi si arriva a separare le parti a tempo differente, con $\eta = K \frac{\Delta t}{\Delta x^2}$:

$$\left(\frac{2}{\eta} + 2 \right) T(x, t + \Delta t) - T(x + \Delta x, t + \Delta t) - T(x - \Delta x, t + \Delta t) = \left(\frac{2}{\eta} - 2 \right) T(x, t) + T(x + \Delta x, t) + T(x - \Delta x, t) \quad (1.3.3)$$

Per ogni istante di tempo ho una matrice tridiagonale per il passo temporale che conosco e una per quello successivo. In sottosezione 2.2 descriverò come si risolve una di queste matrici.

2 Costruzione dell'algoritmo

2.1 Ottenere il sistema

Ho fatto un esempio con l'equazione del calore. Prima di procedere alla spiegazione su come si semplifica e si risolve il sistema di equazioni riconducibile ad una matrice tridiagonale spiegherò come condurre la PDE più generale ad un sistema del genere.

Scrivo la più generica equazione risolvibile con questo metodo:

$$\partial_t F = D_2 \partial_x^2 F + D_1 \partial_x F + V(x, t) F + U(x, t) \quad (2.1.1)$$

Il coefficiente della derivata temporale è ignorato perché è incluso negli altri coefficienti e deve essere diverso da 0, ovviamente anche D_2 , il coefficiente della derivata seconda spaziale non deve essere mai uguale a zero! Inoltre preferisco lasciare D_1 e D_2 come costanti nel tempo e nello spazio, ma cambiare le costanti costa poco a livello di complessità del calcolo, ma lascio però la dipendenza temporale e spaziale a V e U .

In seguito indicherò la il passo nello spazio a pedice con i e quello nel tempo in apice con j . Discretizzo l'equazione, calcolando la derivata temporale in $j + 1/2$ con passo $\Delta t/2$ e usando la definizione centrale, per quanto riguarda le derivate spaziali faccio la media tra quelle calcolate in j e in $j + 1$. I potenziali sono noti.

$$\begin{aligned} \frac{F_i^{j+1} - F_i^j}{\Delta t} = \frac{1}{2} \left(D_2 \frac{F_{i+1}^j + F_{i-1}^j - 2F_i^j}{\Delta x^2} + D_1 \frac{F_{i+1}^j - F_{i-1}^j}{2\Delta x} + F_i^j V_i^{j+1} + U_i^{j+1/2} + \right. \\ \left. D_2 \frac{F_{i+1}^{j+1} + F_{i-1}^{j+1} - 2F_i^{j+1}}{\Delta x^2} + D_1 \frac{F_{i+1}^{j+1} - F_{i-1}^{j+1}}{2\Delta x} + F_i^j V_i^j + U_i^{j+1/2} \right) \end{aligned} \quad (2.1.2)$$

ho usato la definizione di derivata centrale anche per ∂_x in modo da mantenere la precisione Δx^2 .

Non mostro i passaggi che portano al risultato. Per comodità indico $\eta = \frac{D_2 \Delta t}{\Delta x^2}$ e scrivo:

$$\begin{aligned} \left(-\eta + D_1 \frac{\Delta t}{2\Delta x} \right) F_{i-1}^{j+1} + \left(2 + 2\eta - \Delta t V_i^{j+1/2} \right) F_i^{j+1} + \left(-\eta - D_1 \frac{\Delta t}{2\Delta x} \right) F_{i+1}^{j+1} - \Delta t U_i^{j+1/2} = \\ \left(\eta - D_1 \frac{\Delta t}{2\Delta x} \right) F_{i-1}^j + \left(2 - 2\eta + \Delta t V_i^{j+1/2} \right) F_i^j + \left(\eta + D_1 \frac{\Delta t}{2\Delta x} \right) F_{i+1}^j + \Delta t U_i^{j+1/2} \end{aligned} \quad (2.1.3)$$

Per rendere più chiara spiegazione e risoluzione della matrice tridiagonale riassumo l'equazione precedente in:

$$a_i^j F_{i-1}^{j+1} + d_i^j F_i^{j+1} + c_i^j F_{i+1}^{j+1} + e_i^j = a k_i^j F_{i-1}^j + d k_i^j F_i^j + c k_i^j F_{i+1}^j + e k_i^j \quad (2.1.4)$$

con:

$$\begin{aligned} a_i^j &= -1 + \frac{D_1}{D_2} \frac{\Delta x}{2} & a k_i^j &= 1 - \frac{D_1}{D_2} \frac{\Delta x}{2} & \text{parametri dei } (F_{i-1}^*) \\ d_i^j &= \frac{1}{\eta} \left(2 - \Delta t V_i^{j+1/2} \right) + 2 & d k_i^j &= \frac{1}{\eta} \left(2 + \Delta t V_i^{j+1/2} \right) - 2 & \text{parametri dei } (F_i^*) \\ c_i^j &= -1 - \frac{D_1}{D_2} \frac{\Delta x}{2} & c k_i^j &= 1 + \frac{D_1}{D_2} \frac{\Delta x}{2} & \text{parametri dei } (F_{i+1}^*) \\ e_i^j &= -\frac{\Delta x^2}{D_2} U_i^{j+1/2} & e k_i^j &= \frac{\Delta x^2}{D_2} U_i^{j+1/2} & \text{funzioni esterne} \end{aligned} \quad (2.1.5)$$

In realtà i parametri e_i^j e $e k_i^j$ dato che non moltiplicano la funzione possono essere accorpati. Ho preferito mantenerli separati perché mi sembrava che in questo modo fosse più chiaro capirne la provenienza. Per lo stesso motivo ho preferito mantenere separati i valori che moltiplicano la funzione nota e quelli che moltiplicano il passo successivo.

2.2 La matrice Tridiagonale: soluzione

D'ora in avanti ometto la dipendenza temporale delle componenti della matrice. Per ogni istante di tempo j ho un sistema di N equazioni nella forma:

$$a_i F_{i-1}^{j+1} + d_i F_i^{j+1} + c_i F_{i+1}^{j+1} + e_i = a k_i F_{i-1}^j + d k_i F_i^j + c k_i F_{i+1}^j + e k_i \quad (2.2.1)$$

Dove j rappresenta l'istante di tempo che conosco e $j + 1$ quello che sto calcolando. La prima cosa da fare è portare nel membro a destra tutti i parametri noti, dando per scontato che l'unica incognita dell'equazione è la funzione:

$$a_i F_{i-1}^{j+1} + d_i F_i^{j+1} + c_i F_{i+1}^{j+1} = a k_i F_{i-1}^j + d k_i F_i^j + c k_i F_{i+1}^j + e k_i - e_i \quad (2.2.2)$$

Per proseguire con la risoluzione è meglio passare alla rappresentazione matriciale del sistema (rappresento gli N punti rispettando le convenzioni del C, quindi $i = 0 \rightarrow N - 1$):

$$\begin{pmatrix} d_0 & c_0 & & & \\ a_1 & d_1 & c_1 & & \\ & & \dots & & \\ & & & a_{N-2} & d_{N-2} & c_{N-2} \\ & & & & a_{N-1} & d_{N-1} \end{pmatrix} \mathbf{F}^{j+1} = \begin{pmatrix} dk_0 & ck_0 & & & \\ ak_1 & dk_1 & ck_1 & & \\ & & \dots & & \\ & & & ak_{N-2} & dk_{N-2} & ck_{N-2} \\ & & & & ak_{N-1} & dk_{N-1} \end{pmatrix} \mathbf{F}^j + \begin{pmatrix} ek_0 - e_0 \\ ek_1 - e_1 \\ \dots \\ ek_{N-2} - e_{N-2} \\ ek_{N-1} - e_{N-1} \end{pmatrix} \quad (2.2.3)$$

Per comodità compatto il lato conosciuto in un vettore \mathbf{B}^j le cui componenti sono:

$$b_i^j = ak_i F_{i-1}^j + dk_i F_i^j + ck_i F_{i+1}^j + ek_i - e_i \quad (2.2.4)$$

$$\begin{pmatrix} d_0 & c_0 & & & \\ a_1 & d_1 & c_1 & & \\ & & \dots & & \\ & & & \dots & \\ & & & a_{N-2} & d_{N-2} & c_{N-2} \\ & & & & a_{N-1} & d_{N-1} \end{pmatrix} \mathbf{F}^{j+1} = \mathbf{B}^j \quad (2.2.5)$$

A questo punto procedo con il trasformare la matrice nella somma di una matrice identità e di una matrice con valori non nulli solo nelle celle sopra alla diagonale. Svolgo i primi passaggi:

$$\begin{pmatrix} d_0 & c_0 & 0 & \dots & 0 \\ a_1 & d_1 & c_1 & \dots & 0 \\ & . & . & . & . \end{pmatrix} \mathbf{F}^{j+1} = \begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \\ \dots \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & \frac{c_0}{d_0} & 0 & \dots & 0 \\ a_1 & d_1 & c_1 & \dots & 0 \\ & . & . & . & . \end{pmatrix} \mathbf{F}^{j+1} = \begin{pmatrix} \frac{b_0}{d_0} \\ b_1 \\ \dots \end{pmatrix} \quad (2.2.6)$$

Proseguendo, chiamando $h_0 = \frac{c_0}{d_0}$ e $p_0 = \frac{b_0}{d_0}$, multiplico la prima riga per a_1 e la sottraggo alla seconda, in modo da eliminare a_1 dalla seconda riga:

$$\begin{pmatrix} 1 & h_0 & 0 & \dots & 0 \\ a_1 - a_1 & d_1 - a_1 h_0 & c_1 & \dots & 0 \\ & . & . & . & . \end{pmatrix} \mathbf{F}^{j+1} = \begin{pmatrix} p_0 \\ b_1 - a_1 p_0 \\ \dots \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & h_0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \frac{c_1}{d_1 - a_1 h_0} & \dots & 0 \\ & . & . & . & . \end{pmatrix} \mathbf{F}^{j+1} = \begin{pmatrix} p_0 \\ \frac{b_1 - a_1 p_0}{d_1 - a_1 h_0} \\ \dots \end{pmatrix} \quad (2.2.7)$$

A questo punto chiamo $h_1 = \frac{c_1}{d_1 - a_1 h_0}$ e $p_1 = \frac{b_1 - a_1 p_0}{d_1 - a_1 h_0}$ e ripeto il ragionamento precedente sottraendo la seconda riga alla terza:

$$\begin{pmatrix} 1 & h_0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & h_1 & \dots & 0 \\ 0 & a_3 - a_3 & d_3 - a_3 h_1 & c_3 & \dots \\ & . & . & . & . \end{pmatrix} \mathbf{F}^{j+1} = \begin{pmatrix} p_0 \\ p_1 \\ b_3 - a_3 p_1 \\ \dots \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & h_0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & h_1 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \frac{c_3}{d_3 - a_3 h_1} & \dots \\ & . & . & . & . \end{pmatrix} \mathbf{F}^{j+1} = \begin{pmatrix} p_0 \\ p_1 \\ \frac{b_3 - a_3 p_1}{d_3 - a_3 h_1} \\ \dots \end{pmatrix} \quad (2.2.8)$$

A questo punto chiamo $h_3 = \frac{c_3}{d_3 - a_3 h_1}$ e $p_3 = \frac{b_3 - a_3 p_1}{d_3 - a_3 h_1}$ e proseguo, ottengo così le regole:

$$h_i = \frac{c_i}{d_i - a_i h_{i-1}} \quad (2.2.9)$$

e

$$p_i = \frac{b_i - a_i p_{i-1}}{d_i - a_i h_{i-1}} \quad (2.2.10)$$

A questo punto ho semplificato il sistema:

$$\begin{pmatrix} 1 & h_0 & & & \\ & 1 & h_1 & & \\ & & \ddots & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & 1 & h_{N-2} \\ & & & & & 1 \end{pmatrix} \mathbf{F}^{j+1} = \mathbf{P} \quad (2.2.11)$$

(2.2.12)

Per risolvere il sistema devo calcolare il vettore delle \mathbf{P} per poi ottenere i valori di F^{j+1} a partire dall'ultimo $F_{N-1}^{j+1} = p_{N-1}$ con la formula:

$$F_i^{j+1} = p_i + h_i F_{i+1}^{j+1} \quad (2.2.13)$$

A questo punto ho bisogno di conoscere come trattare le condizioni al contorno.

3 Condizioni al contorno

In seguito espongo come è possibile adottare alcune condizioni al contorno:

- Dirichlet: Conosco i valori della funzione negli estremi del dominio
- Neumann: Conosco i valori della derivata della funzione negli estremi del dominio
- Robin: Conosco una combinazione lineare tra il valore della funzione e la sua derivata negli estremi del dominio
- Miste: Negli estremi ho tipi differenti di condizioni al contorno

3.1 Dirichlet

Conosco il valore della funzione negli estremi del dominio.

$$F(x, t) = f(x, t) \forall x \in \partial D \quad (3.1.1)$$

Assegno a F_0^{j+1} e F_{N-1}^{j+1} il valore noto, e' quindi inutile calcolare la prima e l'ultima riga della matrice $N \times N$ e posso trattare tutto come se la matrice fosse $N - 2 \times N - 2$, con indici da 1 a $N - 2$. Per tenere conto delle condizioni, senza dover apportare modifiche all'algoritmo devo cambiare i valori:

$$\begin{array}{cc|cc} a'_0 = 0 & ak'_0 = 0 & a'_1 = 0 & ak'_1 = ak_1 \\ d'_0 = 1 & dk'_0 = 0 & d'_1 = d_1 & dk'_1 = dk_1 \\ c'_0 = 0 & ck'_0 = 0 & c'_1 = c_1 & ck'_1 = ck_1 \\ e'_0 = -F_0^{j+1} & ek'_0 = 0 & e'_1 = e_1 + a_1 F_0^{j+1} & ek'_1 = ek_1 \end{array} \quad (3.1.2)$$

Che equivale a scrivere:

$$\begin{array}{ccc} b'_0 = F_0^{j+1} & h'_0 = 0 & p'_0 = F_0^{j+1} \\ b'_1 = b_1 - a_1 F_0^{j+1} & h'_1 = \frac{c_1}{d_1} & p'_1 = \frac{b'_1}{d'_1} \end{array} \quad (3.1.3)$$

Di conseguenza $F_1^{j+1} = p'_1 + h'_1 F_2^{j+1}$ e $F_0^{j+1} = p'_0 + h'_0 F_1^{j+1} = F_0^{j+1}$.

Mentre se la condizione si presenta come l'ultimo punto del dominio:

$$\begin{array}{cc|cc} a'_{N-2} = a_{N-2} & ak'_{N-2} = ak_{N-2} & a'_{N-1} = 0 & ak'_{N-1} = 0 \\ d'_{N-2} = d_{N-2} & dk'_{N-2} = dk_{N-2} & d'_{N-1} = 1 & dk'_{N-1} = 0 \\ c'_{N-2} = 0 & ck'_{N-2} = ck_{N-2} & c'_{N-1} = 0 & ck'_{N-1} = 0 \\ e'_{N-2} = e_{N-2} + c_{N-2} F_{N-1}^{j+1} & ek'_{N-2} = ek_{N-2} & e'_{N-1} = -F_{N-1}^{j+1} & ek'_{N-1} = 0 \end{array} \quad (3.1.4)$$

Che posso riscrivere:

$$\begin{array}{ccc} b'_{N-2} = b_{N-2} - c_{N-2} F_{N-1}^{j+1} & h'_{N-2} = 0 & p'_{N-2} = p_{N-2} \\ b'_{N-1} = F_{N-1}^{j+1} & h'_{N-1} = 0 & p'_{N-1} = F_0^{j+1} \end{array} \quad (3.1.5)$$

e di conseguenza $F_{N-1}^{j+1} = p'_{N-1} = F_{N-1}^{j+1}$ e $F_{N-2}^{j+1} = p'_{N-2} + h'_{N-2} F_{N-1}^{j+1} = p'_{N-2}$.

3.2 Neumann

Conosco il valore della derivata negli estremi del dominio.

$$\frac{\partial F}{\partial x}(x, t) = f(x, t) \forall x \in \partial D \quad (3.2.1)$$

La spiegazione e l'esempio per questa risoluzione lo fornisco nel paragrafo dedicato a Robin.

3.3 Robin

Conosco una combinazione lineare tra la derivata e il valore della funzione negli estremi del dominio.

$$\frac{\partial F}{\partial x}(x, t) + r(x, t)F(x, t) = g(x, t) \forall x \in \partial D \quad (3.3.1)$$

Come prima, per mantenere la precisione del metodo (Δx^2) non posso usare la definizione centrale, ho quindi bisogno di inventarmi un "nodo fantasma" F_{-1}^{j+1} (o F_N^{j+1} se fosse la condizione nell'ultimo punto del dominio):

$$\frac{\partial F}{\partial x}(x(i=0), t(j=j+1)) = \frac{F_1^{j+1} - F_{-1}^{j+1}}{2\Delta x} \quad (3.3.2)$$

Sostituisco nella (3.3.1) per $i=0$ e al tempo geerico $j=n$:

$$\frac{F_1^n - F_{-1}^n}{2\Delta x} + R_0^n F_0^n = g_0^n \rightarrow F_{-1}^n = F_1^n + 2\Delta x (R_0^n F_0^n - g_0^n) \quad (3.3.3)$$

Partendo dalla forma matriciale del problema generico:

$$a_0 F_{-1}^{j+1} + d_0 F_0^{j+1} + c_0 F_1^{j+1} + e_0 = a k_0 F_{-1}^j + d k_0 F_0^j + c k_0 F_1^j + e k_0 \quad (3.3.4)$$

e sostituendo F_{-1}^n :

$$a_0 \left(F_1^{j+1} + 2\Delta x \left(R_0^{j+1} F_0^{j+1} - g_0^{j+1} \right) \right) + d_0 F_0^{j+1} + c_0 F_1^{j+1} = a k_0 \left(F_1^j + 2\Delta x \left(R_0^j F_0^j - g_0^j \right) \right) + d k_0 F_0^j + c k_0 F_1^j \quad (3.3.5)$$

A questo punto raccolgo i termini dello stesso punto della funzione:

$$\left(d_0 + 2a_0 R_0^{j+1} \Delta x \right) F_0^{j+1} + (c_0 + a_0) F_1^{j+1} - 2a_0 g_0^{j+1} \Delta x = \left(d k_0 + 2a k_0 R_0^j \Delta x \right) F_0^j + (c k_0 + a k_0) F_1^j - 2a k_0 g_0^j \Delta x \quad (3.3.6)$$

E quindi i parametri interessati della matrice diventano:

$$\begin{aligned} a'_0 &= 0 & a k'_0 &= 0 \\ d'_0 &= d_0 + 2a_0 R_0^{j+1} \Delta x & d k'_0 &= d k_0 + 2a k_0 R_0^j \Delta x \\ c'_0 &= a_0 + c_0 & c k'_0 &= a k_0 + c k_0 \\ e'_0 &= e_0 - 2a_0 g_0^{j+1} \Delta x & e k'_0 &= e k_0 - 2a k_0 g_0^j \Delta x \end{aligned} \quad (3.3.7)$$

Che equivale a scrivere:

$$\begin{aligned} b'_0 &= d k'_0 F_0^j + c k'_0 F_1^j + 2\Delta x \left(a_0 g_0^{j+1} - a k_0 g_0^j \right) + e k_0 - e_0 \\ h'_0 &= \frac{c'_0}{d'_0} \\ p'_0 &= \frac{b'_0}{d'_0} \end{aligned} \quad (3.3.8)$$

e di conseguenza $F_0^{j+1} = p'_0 + h'_0 F_1^{j+1}$.

Mentre se la condizione si presenta come ultimo punto del dominio:

$$\frac{F_N^n - F_{N-2}^n}{2\Delta x} + R_{N-1}^n F_{N-1}^n = g_{N-1}^n \rightarrow F_N^n = F_{N-2}^n - 2\Delta x (R_{N-1}^n F_{N-1}^n - g_{N-1}^n) \quad (3.3.9)$$

Salto i passaggi, molto simili a quelli della spiegazione precedente, per il calcolo di b'_{N-1} andranno usati i seguenti parametri:

$$\begin{aligned} a'_{N-1} &= a_{N-1} + c_{N-1} & a k'_{N-1} &= a k_{N-1} + c k_{N-1} \\ d'_{N-1} &= d_{N-1} - 2c_{N-1} R_{N-1}^{j+1} \Delta x & d k'_{N-1} &= d k_{N-1} - 2c k_{N-1} R_{N-1}^j \Delta x \\ c'_{N-1} &= 0 & c k'_{N-1} &= 0 \\ e'_{N-1} &= e_{N-1} + c_{N-1} g_{N-1}^{j+1} \Delta x & e k'_{N-1} &= e k_{N-1} + c k_{N-1} g_{N-1}^{j+1} \Delta x \end{aligned} \quad (3.3.10)$$

Che equivale a scrivere:

$$\begin{aligned} b_{N-1} &= a k'_{N-1} F_{N-2}^j + d k'_{N-1} F_{N-1}^j - 2\Delta x \left(c_{N-1} g_{N-1}^{j+1} - c k_{N-1} g_{N-1}^j \right) + e k_{N-1} - e_{N-1} \\ h'_{N-1} &= 0 \\ p'_{N-1} &= \frac{b'_{N-1} + a'_{N-1} p_{N-2}}{d'_{N-1} - a'_{N-1} h_{N-2}} \end{aligned} \quad (3.3.11)$$

e di conseguenza $F_{N-1}^{j+1} = p'_{N-1}$, anche perchè è il primo punto da cui si parte per calcolare il valore della funzione in $j+1$.

Se faccio in modo di eliminare il coefficiente che moltiplica il valore della funzione (gli R) ottengo le condizioni a contorno di Neuman.

3.4 Osservazione

Il modo in cui ho trattato i parametri per quanto riguarda le condizioni al contorno di Dirichlet nei punti 0 e $N - 1$, non è matematicamente corretto infatti i parametri andrebbero messi tutti a 0 in quanto quei punti non fanno parte dell'algoritmo.

Ho impostato i valori per avere un algoritmo che possa svolgere il calcolo rispettando le condizioni al contorno senza sapere quali siano, mettendo nelle mani dell'utente, che si occuperà di impostare i corretti parametri della matrice, la gestione delle condizioni.

4 Applicazioni

4.1 Equazione del calore

Riprendiamo l'equazione del calore:

$$\frac{\partial T}{\partial t}(x, t) = k \frac{\partial^2}{\partial x^2} T(x, t) \quad (4.1.1)$$

Per rispettare la convenzione che ho scelto $D_2 = k$, $D_1 = U = V(x, t) = 0$.

A questo punto posso sostituire, con $\eta = k \frac{\Delta t}{\Delta x^2}$:

$$\begin{aligned} a_i^j &= -1 & ak_i^j &= 1 \\ d_i^j &= \frac{2}{\eta} + 2 & dk_i^j &= \frac{2}{\eta} - 2 \\ c_i^j &= -1 & ck_i^j &= 1 \\ e_i^j &= 0 & ek_i^j &= 0 \end{aligned} \quad (4.1.2)$$

sostituire i parametri nella matrice, scegliere le condizioni al contorno e procedere con i calcoli.

4.2 Equazione di Schrödinger

Lavoriamo con l'equazione di Schrödinger dipendente dal tempo:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}(x, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, t) \right] \psi(x, t) \quad (4.2.1)$$

prima di tutto portiamola in una forma tale che non ci sia nulla a moltiplicare la derivata temporale:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t}(x, t) = \left[i \frac{\hbar}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\Lambda(x, t)}{i\hbar} \right] \psi(x, t) \quad (4.2.2)$$

Ho usato Λ per indicare il potenziale per rispettare la convenzione. $D_2 = i \frac{\hbar}{2m}$, $D_1 = U = 0$ e $V(x, t) = \frac{\Lambda(x, t)}{i\hbar}$.

A questo punto, con $\eta = i \frac{\hbar}{2m} \frac{\Delta t}{\Delta x^2}$, posso sostituire, usando k come indice spaziale:

$$\begin{aligned} a_k^j &= -1 & ak_k^j &= 1 \\ d_k^j &= \frac{1}{\eta} \left(2 - \Delta t V_k^{j+1} \right) + 2 & dk_k^j &= \frac{1}{\eta} \left(2 + \Delta t V_k^j \right) - 2 \\ c_k^j &= -1 & ck_k^j &= 1 \\ e_k^j &= 0 & ek_k^j &= 0 \end{aligned} \quad (4.2.3)$$

subsectionStabilità Per mostrare che lo schema proposto è stabile utilizzo il principio di Von Neumann: perché un metodo si riveli stabile non deve propagare eventuali errori che nascono dal calcolo. Definiamo l'errore come:

$$E_k^j = F_k^j - u_k^j \quad (4.2.4)$$

Dove ho usato k invece che i per non creare confusione con l'unità immaginaria. F_k^j è il valore della soluzione calcolata con l'algoritmo mentre u_k^j è il valore reale della funzione nel punto (k, j) .

Si definisce il fattore crescita:

$$G = \left| \frac{E_k^{j+1}}{E_k^j} \right| \quad (4.2.5)$$

che serve come criterio per comprendere la stabilità dello schema. Come vedremo più avanti è comodo studiare G in funzione delle frequenze spaziali. Per ogni frequenza:

- $G < 1$: l'algoritmo è stabile e gli errori vengono attenuati passo per passo.
- $G > 1$: l'algoritmo non è stabile e gli errori vengono amplificati passo per passo.
- $G = 1$: gli errori non vengono né amplificati né ridotti dall'evoluzione, è stabile.

se $G < 1$ per tutte le frequenze allora il l'algoritmo si considera incondizionatamente stabile.

Per fare l'analisi in frequenza faccio la trasformata di Fourier spaziale dell'errore della funzione:

$$E_k^j = \sum_{\omega} \hat{\epsilon}_{\omega}^j e^{i\omega x} \quad (4.2.6)$$

Della trasformata prendiamo un solo termine per una data ω . Mi aspetto che la propagazione dell'errore soddisfi la stessa equazione che sto simulando e quindi procedo sostituendo l'espressione nello schema, a partire da (2.2.2), e ignorando per semplicità i termini e e ek ottengo:

$$\left(a_k e^{i\omega(k-1)\Delta x} + d_k e^{i\omega k \Delta x} + c_k e^{i\omega(k+1)\Delta x} \right) \hat{\epsilon}_{\omega}^{j+1} = \left(a k_i e^{i\omega(k-1)\Delta x} + d k_i e^{i\omega k \Delta x} + c k_k e^{i\omega(k+1)\Delta x} \right) \hat{\epsilon}_{\omega}^j \quad (4.2.7)$$

abbiamo:

$$\frac{\hat{\epsilon}_{\omega}^{j+1}}{\hat{\epsilon}_{\omega}^j} = \frac{a k_i e^{-i\omega \Delta x} + d k_i + c k_k e^{i\omega \Delta x}}{a_k e^{-i\omega \Delta x} + d_k + c_k e^{i\omega \Delta x}} \quad (4.2.8)$$

dalla (2.1.5) deduco:

$$\begin{aligned} a_k^j &= -a k_k^j \\ c_k^j &= -c k_i^j \\ c_k^j &= -a_k^j - 2 \end{aligned}$$

e sostituisco nell'uguaglianza:

$$\frac{\hat{\epsilon}_{\omega}^{j+1}}{\hat{\epsilon}_{\omega}^j} = - \left(1 - \frac{d + dk}{d - 2 \cos(\omega \Delta x) - 2i(1+a) \sin(\omega \Delta x)} \right) \quad (4.2.9)$$

da cui ricavo G :

$$G = \left| 1 - \frac{d + dk}{d - 2 \cos(\omega \Delta x) - 2i(1+a) \sin(\omega \Delta x)} \right| \quad (4.2.10)$$

Non posso più essere generale. Per fare il valore assoluto devo conoscere se a , d e dk sono reali o complessi. Per esempio, sostituendo i valori che trovo in (4.1.2) per l'equazione del calore, dopo le sostituzioni e varie semplificazioni trovo che:

$$G = \frac{|\Delta x^2 - \Delta t k (1 - \cos(\omega \Delta t))|}{\Delta x^2 + \Delta t k (1 - \cos(\omega \Delta t))} \quad (4.2.11)$$

In cui si vede che $G < 1$ per tutte le frequenze diverse dai multipli di $\omega = 2\pi/\Delta x$, in quei casi $G = 1$ e quindi tenderanno a rimanere delle oscillazioni nella soluzione.

Mentre usando i valori di (4.2.3) che uso per la risoluzione dell'equazione di Schrödinger , utilizzando le stesse notazioni ottengo:

$$G = \left| \frac{(\Delta x^2 \Lambda m - \hbar^2 (1 - \cos(\omega \Delta x))) \Delta t + 2i \Delta x^2 \hbar m}{(\Delta x^2 \Lambda m - \hbar^2 (1 - \cos(\omega \Delta x))) \Delta t - 2i \Delta x^2 \hbar m} \right| \quad (4.2.12)$$

Si nota facilmente che $G = 1$ per tutte le frequenze; vuol dire l'algoritmo propagherà gli errori, ma senza amplificarli.

Parte II

Simulazione

5 Dati e analisi

Con le impostazioni che ho ricavato nella sezione precedente ho quindi proceduto con la simulazione del comportamento delle onde in presenza di vari potenziali.

5.1 Il salto di potenziale

Il primo potenziale che analizzo è il salto di potenziale, posiziono un gradino a metà del dominio e variandone l'altezza ne calcolo il coefficiente di trasmissività.

$$\begin{cases} V_0 & x > a \\ 0 & \text{altrove} \end{cases} \quad (5.1.1)$$

Prima di tutto farò una piccola parentesi teorica sul risultato che mi aspetto. Prendiamo un dominio infinito con in 0 il salto di potenziale, l'equazione, indipendente dal tempo, avrà la forma:

$$E\psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_0 H(x) \right) \psi \quad (5.1.2)$$

Divido lo spazio in due porzioni ($x < 0$ e $x > 0$) in cui:

$$\begin{aligned} k_1 &= \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} & x < 0 \\ k_2 &= \sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}} & x > 0 \end{aligned} \quad (5.1.3)$$

Dato che il potenziale ha una discontinuità finita in 0, funzione e derivata devono essere continue. Se per esempio avessimo delle onde piane in ciascuna porzione dello spazio ne avrei una che si muove verso destra (ψ_{\rightarrow}) e una verso sinistra (ψ_{\leftarrow}) e quindi in 0 avrei, chiamando i coefficienti delle onde piane A per il lato sinistro e B quello destro:

$$\begin{cases} A_{\rightarrow} e^{ik_1 x} + A_{\leftarrow} e^{-ik_1 x} & x < 0 \\ B_{\rightarrow} e^{ik_2 x} + B_{\leftarrow} e^{-ik_2 x} & x > 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} A_{\rightarrow} + A_{\leftarrow} = B_{\rightarrow} + B_{\leftarrow} \\ k_1 (A_{\rightarrow} - A_{\leftarrow}) = k_2 (B_{\rightarrow} - B_{\leftarrow}) \end{cases} \quad (5.1.4)$$

nel caso più generico. Nel nostro caso consideriamo un'onda piana da $-\infty$ che si muove verso destra prima di incontrare la barriera:

$$\begin{cases} A_{\rightarrow} = 1 & , & A_{\leftarrow} = r \\ B_{\rightarrow} = t & , & B_{\leftarrow} = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} 1 + r = t \\ k_1 (1 - r) = k_2 t \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} r = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \\ t = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} \end{cases} \quad (5.1.5)$$

Quelli che mi interessano sono però il coefficiente di riflessione e trasmissione, dato che stiamo parlando di funzioni con norma L2 sono:

$$\begin{cases} R = |r|^2 = \frac{(k_1 - k_2)^2}{(k_1 + k_2)^2} \\ T = 1 - R = |t|^2 \frac{k_2}{k_1} = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2} \end{cases} \quad (5.1.6)$$

Quindi proseguiamo ed eseguiamo delle simulazioni.

Nelle simulazioni i lanci sono stati fatti con pacchetti gaussiani inizialmente con $\sigma = 0.5$, energia 100 e massa 10. Il potenziale è stato impostato perché il salto fosse al centro del dominio e con altezza diversa per ogni lancio e ho analizzato l'andamento temporale del rapporto tra l'integrale su tutto il dominio e quello fatto nella prima metà. Ho deciso di usare come coefficiente di riflessione il valore del peso dell'integrale quando questo si è stabilizzato. Dall'andamento nel tempo si può vedere un piccolo abbassamento quando l'onda impatta il potenziale per le barriere più alte, prima di venire riflessa all'indietro penetra leggermente nell'area classicamente vietata.

Come si può notare dalla Tabella A.2 sebbene stia simulando un pacchetto d'onda in movimento e non un'onda piana il peso dei coefficienti ricalca abbastanza bene i coefficienti teorici, e sembra avvicinarli di più man mano che allargo il pacchetto. Notare che la simulazione si allontana dalla teoria per le onde piane più si è vicini al regime in cui il potenziale è maggiore dell'energia dell'onda.

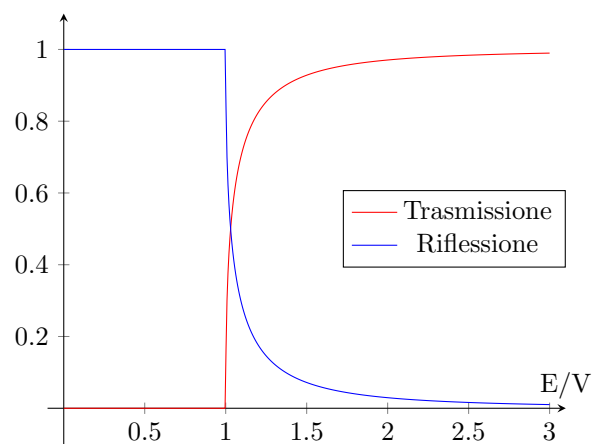


Figura 5.1: Coefficienti di trasmissione in rosso e riflessione in blu

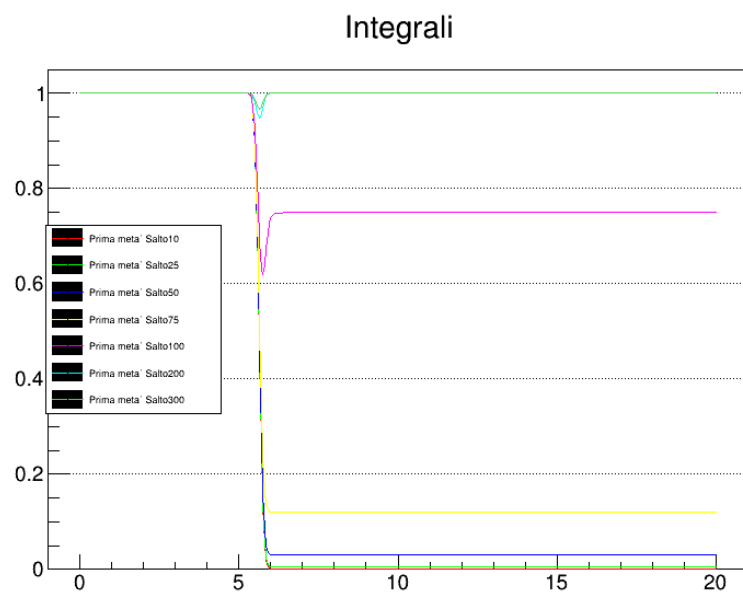


Figura 5.2: I pesi dell'integrale della prima metà del dominio per $\sigma = 0.5$

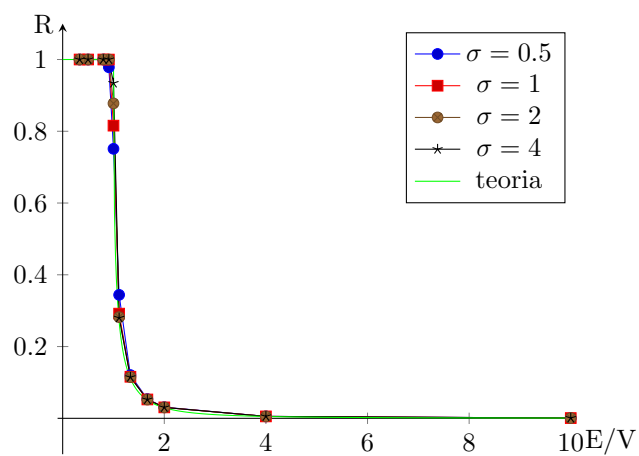


Figura 5.3: La visualizzazione dei dati e il confronto con la teoria

5.2 La barriera rettangolare

Similmente a prima usiamo le definizioni dei k in (5.1.3). Il potenziale avrà la forma:

$$\begin{cases} V_0 & 0 < x < a \\ 0 & \text{altrove} \end{cases} \quad (5.2.1)$$

Per l'esempio $x_0 = 0$.

Dato che il potenziale ha una discontinuità finita in 0 e in a , funzione e derivata devono essere continue. Come prima:

$$\begin{cases} A_{\rightarrow} e^{ik_1 x} + A_{\leftarrow} e^{-ik_1 x} & x < 0 \\ C_{\rightarrow} e^{ik_2 x} + C_{\leftarrow} e^{-ik_2 x} & 0 < x < a \\ B_{\rightarrow} e^{ik_1 x} + B_{\leftarrow} e^{-ik_1 x} & x > a \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} A_{\rightarrow} + A_{\leftarrow} = C_{\rightarrow} + C_{\leftarrow} & \text{in } 0 \\ C_{\rightarrow} e^{ik_2 a} + C_{\leftarrow} e^{-ik_2 a} = B_{\rightarrow} e^{ik_1 a} + B_{\leftarrow} e^{-ik_1 a} & \text{in } a \\ k_1 (A_{\rightarrow} e^{-ik_1 a} - A_{\leftarrow} e^{ik_1 a}) = k_2 (C_{\rightarrow} e^{-ik_2 a} - C_{\leftarrow} e^{ik_2 a}) & \text{in } 0 \\ k_2 (C_{\rightarrow} e^{ik_2 a} - C_{\leftarrow} e^{-ik_2 a}) = k_1 (B_{\rightarrow} e^{ik_1 a} - B_{\leftarrow} e^{-ik_1 a}) & \text{in } a \end{cases} \quad (5.2.2)$$

nel caso più generico. Nel nostro caso invece consideriamo un'onda piana da $-\infty$ che si muove verso destra prima di incontrare la barriera:

$$\begin{cases} A_{\rightarrow} = 1 & , & A_{\leftarrow} = r \\ B_{\rightarrow} = t & , & B_{\leftarrow} = 0 \\ C_{\rightarrow} = m_1 & , & C_{\leftarrow} = m_2 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} 1 + r = m_1 + m_2 \\ m_1 e^{ik_2 a} + m_2 e^{-ik_2 a} = t e^{ik_1 a} \\ k_1 (1 - r) = k_2 (m_1 - m_2) \\ k_2 (m_1 e^{ik_2 a} - m_2 e^{-ik_2 a}) = k_1 t e^{ik_1 a} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} r = \frac{(e^{2iak_2} - 1)(k_1^2 - k_2^2)}{(k_1 - k_2)^2 e^{2iak_2} - (k_1 + k_2)^2} \\ t = \frac{4e^{-ia(k_1 - k_2)} k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2 - (k_1 - k_2)^2 e^{2iak_2}} \\ m_1 = \frac{2k_1(k_1 + k_2)}{(k_1 + k_2)^2 - (k_1 - k_2)^2 e^{2iak_2}} \\ m_2 = \frac{2e^{2iak_2} k_1(k_2 - k_1)}{(k_1 + k_2)^2 - (k_1 - k_2)^2 e^{2iak_2}} \end{cases} \quad (5.2.3)$$

ma a noi interessano:

$$\begin{cases} R = |r|^2 = \left| \frac{\sin(ak_2)(k_1^2 - k_2^2)}{(k_1 + k_2)^2 \sin(ak_2) + 2ik_1 k_2 \cos(ak_2)} \right|^2 = \frac{(k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2(ak_2)}{4k_1^2 k_2^2 \cos^2(ak_2) + (k_1^2 + k_2^2)^2 \sin^2(ak_2)} \\ T = |t|^2 = \left| \frac{2e^{-ia k_1} k_1 k_2}{i(k_1 + k_2)^2 \sin(ak_2) - 2k_1 k_2 \cos(ak_2)} \right|^2 = \frac{4k_1^2 k_2^2}{4k_1^2 k_2^2 \cos^2(ak_2) + (k_1^2 + k_2^2)^2 \sin^2(ak_2)} \end{cases} \quad (5.2.4)$$

Che messi in termini di E e V ed m :

$$\begin{cases} R = \frac{V_0^2 \sin^2(a\sqrt{2m(E-V_0)})}{4(E^2 - EV_0) + V_0^2 \sin^2(a\sqrt{2m(E-V_0)})} \\ T = \frac{4E(E-V_0)}{4(E^2 - EV_0) + V_0^2 \sin^2(a\sqrt{2m(E-V_0)})} \end{cases} \quad (5.2.5)$$

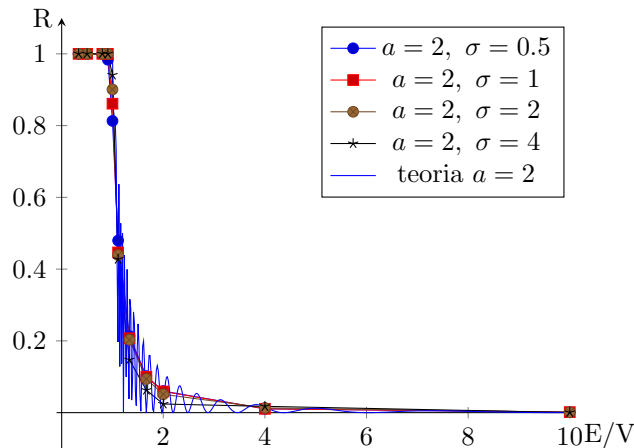


Figura 5.4: La visualizzazione dei dati e il confronto con la teoria

Dai dati sembra che più la barriera è grande rispetto alla larghezza del treno più la simulazione si allontana dalla teoria per le onde piane. Probabilmente questo è dovuto al fatto che con una barriera più grande del pacchetto questo si comporta con essa come se fosse in presenza di un salto di potenziale.

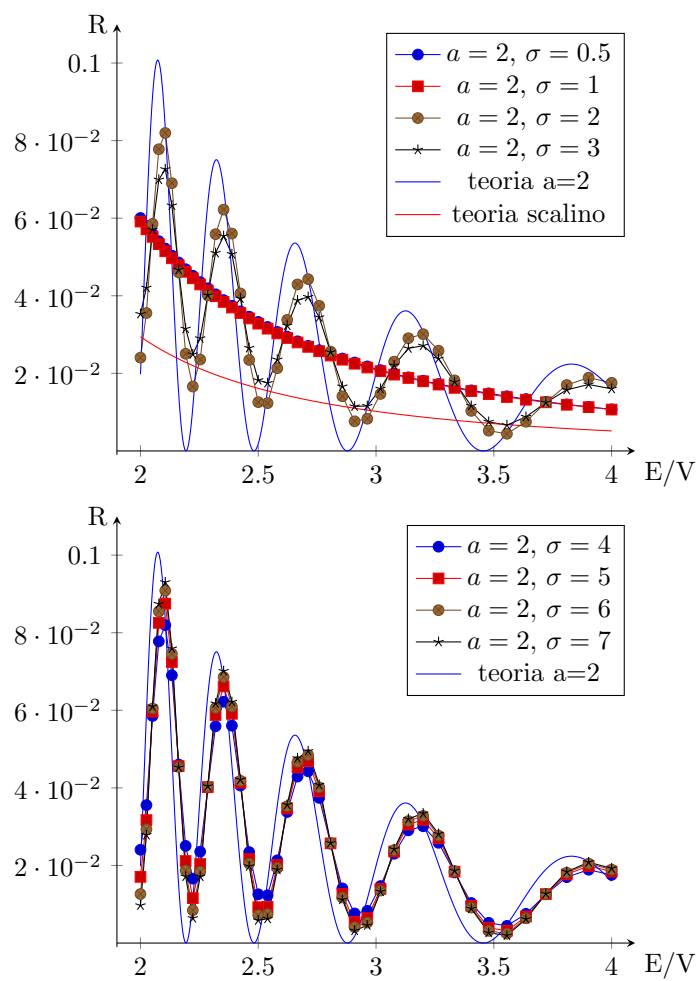


Figura 5.5: I dati tra 2 e 4 per una barriera larga 2

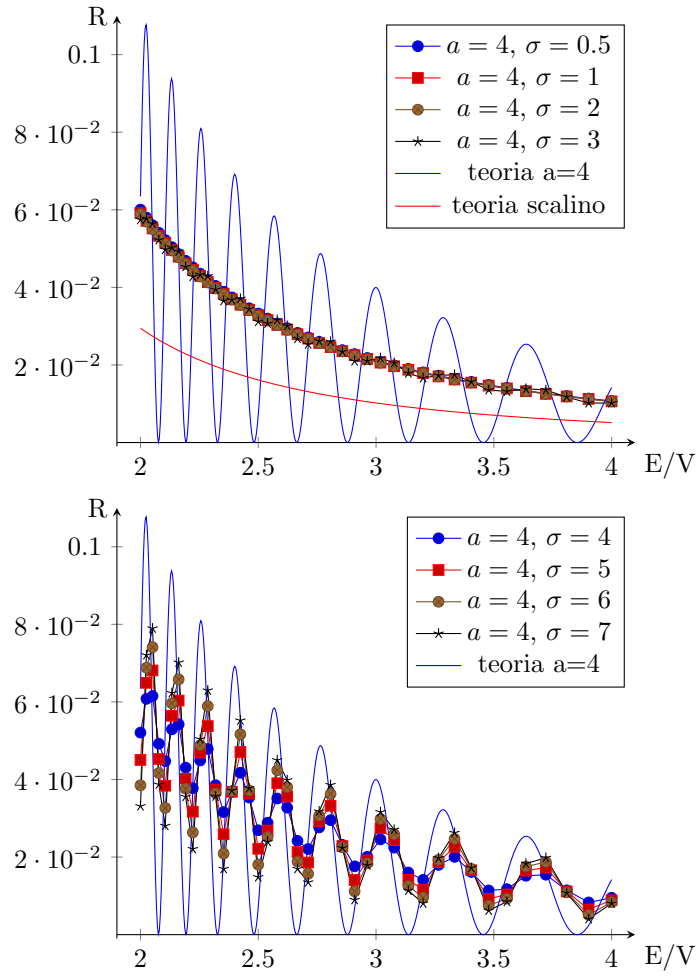


Figura 5.6: I dati tra 2 e 4 per una barriera larga 4

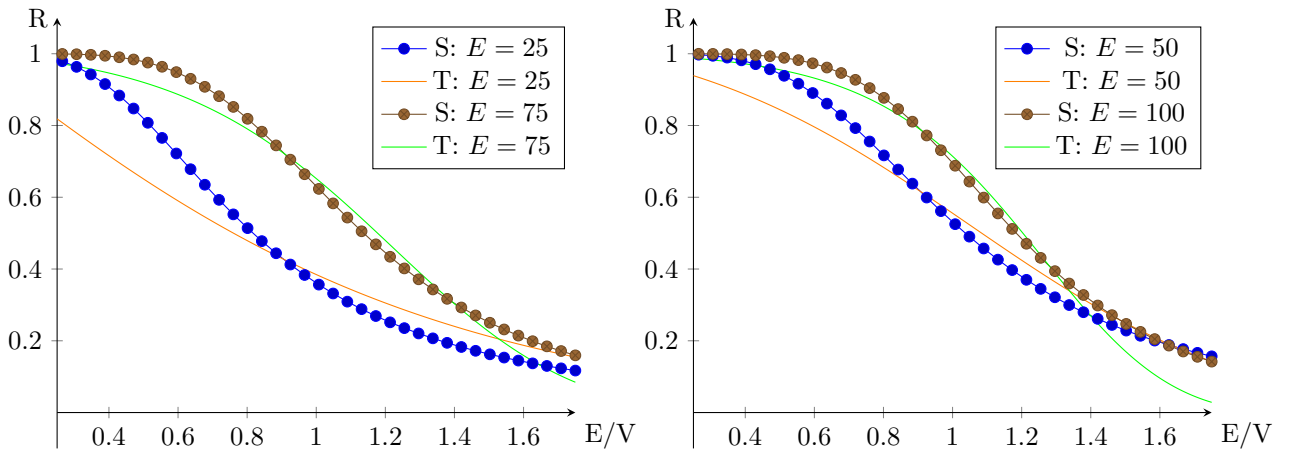


Figura 5.7: Provo a simulare l'effetto tunnel, impiegando un pacchetto con $\sigma = 4$, con massa delle particelle 5 e spessore della barriera $a = 0.1$

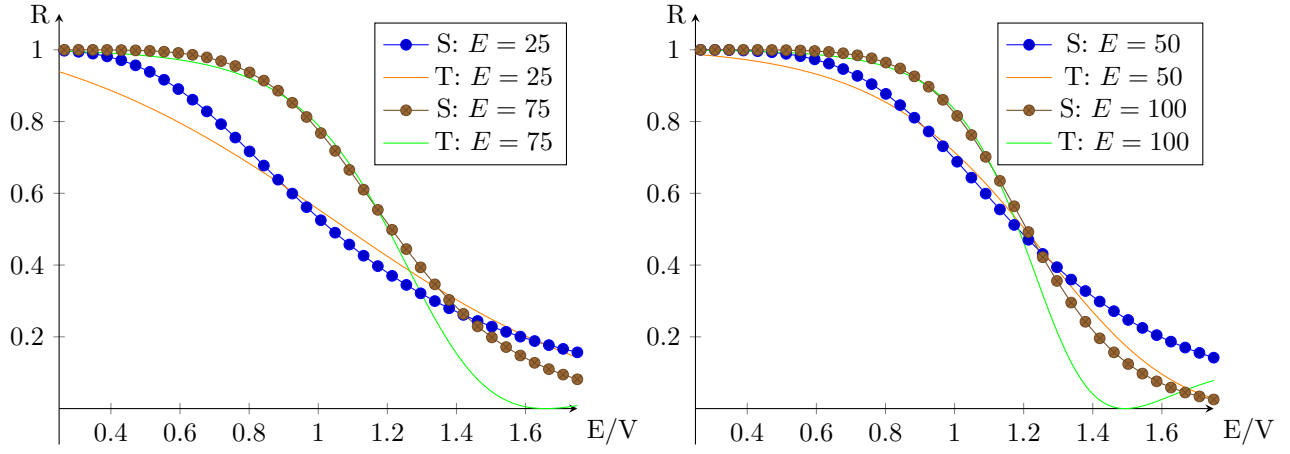


Figura 5.8: Provo a simulare l'effetto tunnel, impiegando un pacchetto con $\sigma = 4$, con massa delle particelle 10 e spessore della barriera $a = 0.1$

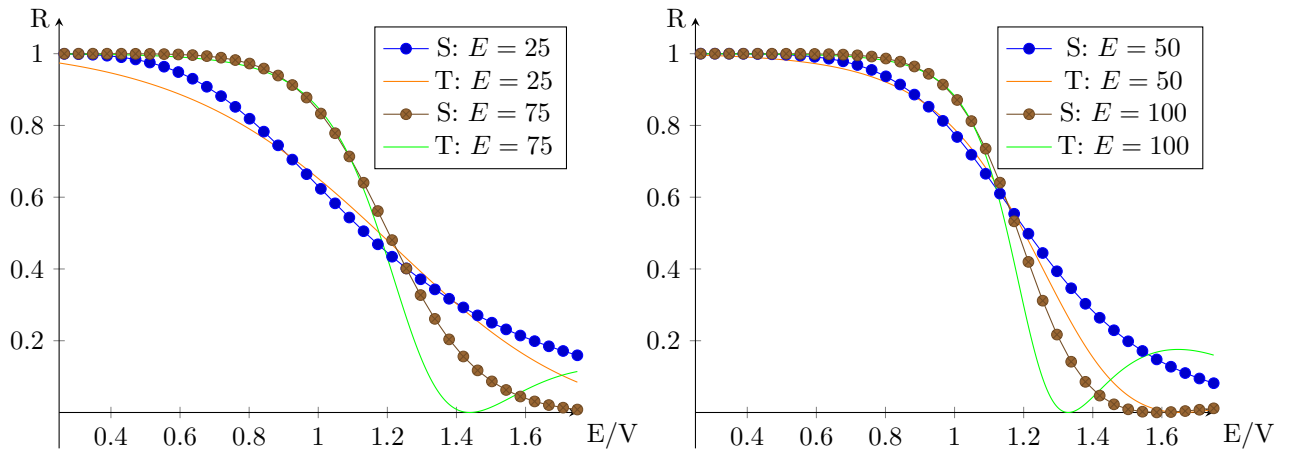


Figura 5.9: Provo a simulare l'effetto tunnel, impiegando un pacchetto con $\sigma = 4$, con massa delle particelle 15 e spessore della barriera $a = 0.1$

Parte III

Appendice

A Tabelle

t	α	\bar{x}	σ	t	α	\bar{x}	σ
0	1	40	1	5.5	0.422955	40	5.59001
0.5	0.94574	40	1.11803	6	0.405467	40	6.08259
1	0.840898	40	1.4142	6.5	0.389951	40	6.57628
1.5	0.744796	40	1.80272	7	0.376066	40	7.07086
2	0.668766	40	2.23596	7.5	0.363549	40	7.56615
2.5	0.609451	40	2.69242	8	0.352191	40	8.06202
3	0.562349	40	3.16219	8.5	0.341825	40	8.55837
3.5	0.524146	40	3.63995	9	0.332317	40	9.05512
4	0.492486	40	4.12299	9.5	0.323555	40	9.55221
4.5	0.465765	40	4.60964	10	0.315447	40	10.0496
5	0.442856	40	5.09887				

Tabella A.1: I dati di una simulazione, con $\alpha = 1$, $\sigma = 1$ e $m = 1$

E/V	simulazione σ				teoria
	0.5	1	2	4	
10	0.000724389	0.000718394	0.000716913	0.000716543	0.000693482
4	0.00539149	0.00533663	0.00532312	0.00531976	0.00515478
2	0.0309848	0.0304801	0.0303576	0.0303272	0.0294373
1.66	0.0536892	0.0525454	0.0522718	0.0522041	0.0506914
1.33	0.120552	0.1158	0.114741	0.114483	0.111112
1.11	0.344071	0.291725	0.281975	0.279959	0.269876
1	0.751078	0.815668	0.8777	0.934287	1
0.9090	0.978315	0.999843	1	1	1
0.8	0.999979	1	1	1	1
0.5	1	1	1	1	1
0.33	1	1	1	1	1

Tabella A.2: Alcuni dati delle simulazioni per il salto di potenziale