

Metodi di soluzione numerica per l'equazione di Schroedinger

Candidato: Matilde Battisti

Ottobre 2024

L'elaborato ha l'intento di esporre due dei metodi più comuni per risolvere numericamente un'equazione di Schrodinger.

L'equazione di Schrodinger agli autovalori è un'equazione differenziale ordinaria al secondo ordine, la cui soluzione non può sempre essere definita analiticamente, come nel caso della particella vincolata all'interno di una buca di potenziale. Questo tipo di equazioni differenziali possono però essere risolte numericamente, per cui in particolare si analizzano due metodi: l'uso delle *differenze finite* e lo *shooting*.

Per rendere più immediato il confronto tra l'analisi numerica e il risultato teorico, si sceglie di studiare il problema dell'oscillatore armonico quantistico in una dimensione, limitato in un certo intervallo spaziale.

Il metodo delle differenze finite consiste nel dividere l'intervallo di spazio in N punti (griglia), per poi approssimare la derivata seconda che appare nell'equazione differenziale secondo la formula per le differenze finite. Si otterrà così un'equazione di Schrodinger per il punto i -esimo della griglia, in funzione dei punti $i+1$ e $i-1$; tale riscrittura permette di identificare la matrice Hamiltoniana come una matrice tridiagonale. Computazionalmente, il pacchetto di *Scipy* per l'algebra lineare ha una funzione che permette di ricavare per tale matrice entrambi i suoi autovalori e autovettori, rispettivamente energie e funzioni d'onda dell'oscillatore armonico quantistico.

Il metodo di shooting ha invece l'intento di risolvere l'ODE trasformando un problema sulle condizioni al contorno in un problema sulle condizioni iniziali. Nel contesto quantistico, è noto che le funzioni d'onda debbano essere normalizzate, motivo per il quale ai bordi del dominio di definizione (in questo caso la griglia di lunghezza fissata) il loro valore deve essere nullo. Si trasforma allora la condizione al bordo sinistro in una condizione iniziale, imponendo cioè che la funzione d'onda sia inizialmente nulla e lo stesso si fa con la sua derivata prima; in pratica si inizializzano con un valore molto piccolo per non avere singolarità in zero. Un pacchetto di *Scipy* per l'integrazione permette di risolvere l'equazione di Schrodinger a partire dai valori iniziali della funzione d'onda e della sua derivata prima; ciò che si ottiene è una lista composta dalle funzioni

d'onda e le sue derivate n-esime in funzione della coordinata x e dell'energia. Di queste funzioni restituite, quella che rispetterà le condizioni al bordo sarà quella che si annulla all'estremo destro della griglia. Per identificarla, si usa il metodo della bisezione: si fornisce come guess iniziale un intervallo di energie in cui si assume che la funzione d'onda si annulli. A seconda che il valore della funzione d'onda all'estremo destro, calcolata nel punto medio dell'intervallo energetico, sia minore o maggiore di zero, si prende tale punto rispettivamente come estremo superiore o inferiore di un nuovo intervallo di energie. Ripetendo iterativamente l'operazione (imponendo una tolleranza come minima grandezza dell'intervallo per evitare che il processo continui indefinitamente), si ottiene infine una stima dell'autovalore per cui la funzione d'onda ha le condizioni al contorno desiderate.