

Soluzione dell'equazione di Schrödinger con potenziale di Malfliet-Tjon attraverso sviluppo sulla base dell'oscillatore armonico

Simone Orioli

Anno accademico 2013/2014

1 Introduzione

Si consideri la seguente hamiltoniana per il deuterio:

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + \frac{\hbar c}{r}(7.39e^{-3.11r/\text{fm}} - 3.22e^{-1.555r/\text{fm}}) \quad (1)$$

Lo scopo di questo lavoro è quello di ricavare l'energia del ground state del deuterio con questo potenziale, risolvendo l'equazione di Schrödinger tramite sviluppo sulla base completa fornita dalle autofunzioni dell'oscillatore armonico quantistico.

1.1 Risultati preliminari

Prima di addentrarci nel metodo vero e proprio è utile cercare di risolvere il problema con altri metodi più semplicemente implementati e più rapidamente convergenti, come il metodo della diagonalizzazione dell'equazione di Schrödinger ed il metodo di Numerov. Il primo prevede di esprimere l'equazione di Schrödinger in una maniera tale da rendere esplicita una sua possibile implementazione matriciale, e successivamente diagonalizzarla; il secondo metodo invece è dato da un algoritmo dovuto a Numerov che fornisce un metodo diretto per integrare (con le dovute precauzioni dovute all'esistenza di soluzioni divergenti) l'equazione di Schrödinger. Senza dilungarsi ulteriormente nei dettagli di questi metodi, mostriamo i valori dell'energia del GS ottenuta con questi due metodi:

Numerov	$E_{GS} = (-2.241 \pm 0.001)\text{MeV}$
Diagonalizzazione	$E_{GS} = (-2.239 \pm 0.001)\text{MeV}$

Questi valori di riferimento (tra loro compatibili) ci permetteranno di verificare la bontà dell'equazione ottenuta.

1.2 Sviluppo su una base completa

Consideriamo il generico problema di dover ricavare il ground state della seguente Hamiltoniana:

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V(r)$$

Ovviamente, essendo il potenziale radiale, ogni suo autostato potrà essere espresso come

$$\psi(\mathbf{r}) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\Omega) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}R_n(r) \quad (2)$$

poichè il ground state è caratterizzato da $l = m = 0$. La parte radiale può essere descritta espandendola su un'opportuna base completa dello spazio di Hilbert:

$$R_n(r) = \sum_{i=1}^{\infty} c_i B_i(r) \sim \sum_{i=1}^N c_i B_i(r) \quad (3)$$

dove N è scelto sufficientemente grande da generare un sottospazio di Hilbert che fornisca una buona approssimazione della soluzione (questo poichè computazionalmente è impossibile raggiungere $N \rightarrow \infty$). Fissato il formalismo generale, consideriamo ora la funzione d'onda del deuterio in onda s:

$$\psi_d = \frac{1}{\sqrt{3}} \sum_m R(r) |(l=0 \ s=1) \ j=1 \ m\rangle |T=0 \ M_T=0\rangle \quad (4)$$

La parte orbitale è data semplicemente dall'armonica sferica $Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$, mentre gli stati di spin e isospin possono essere scritti in una maniera più compatta, ottenendo

$$\psi_d = \frac{1}{\sqrt{12\pi}} \sum_m R(r) \chi_m^{s=1} \chi_{M_T=0}^{T=0}$$

Possiamo dunque scrivere l'equazione di Schrödinger:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) + V(r) - E \right] \frac{1}{\sqrt{12\pi}} \sum_m u(r) \chi_m^{s=1} \chi_{M_T=0}^{T=0} = 0 \quad (5)$$

A questo punto utilizziamo l'espansione sulla base completa:

$$(\hat{\mathcal{H}} - E) \frac{1}{\sqrt{12\pi}} \sum_m \sum_{i=1}^N c_i B_i(r) \chi_m^{s=1} \chi_{M_T=0}^{T=0} = 0 \quad (6)$$

Per calcolare i coefficienti dell'espansione, proiettiamo l'equazione sul seguente stato:

$$(\sqrt{12\pi}) \langle (l=0 \ s=1) \ j=1 \ m=0 | \langle T=0 \ M_T=0 | g_1(r) \equiv \sqrt{12\pi} (\chi_{m=0}^{s=1})^\dagger (\chi_{M_T=0}^{T=0})^\dagger g_1(r) \quad (7)$$

Attraverso questa proiezione otteniamo N termini, tra cui:

- *primo termine:*

$$\int dr g_1(r) (\mathcal{H} - E) c_1 g_1(r) = \int dr g_1(r) \mathcal{H} c_1 g_1(r) - \int dr g_1(r) E c_1 g_1(r) \equiv c_1 (H_{11} - E)$$

- *secondo termine:*

$$\int dr g_1(r) (\mathcal{H} - E) c_2 g_2(r) = \int dr g_1(r) \mathcal{H} c_2 g_2(r) - \int dr g_1(r) E c_2 g_2(r) \equiv c_2 H_{12}$$

- *N-esimo termine:*

$$\int dr g_1(r) (\mathcal{H} - E) c_N g_N(r) = \int dr g_1(r) \mathcal{H} c_N g_N(r) - \int dr g_1(r) E c_N g_N(r) \equiv c_N H_{1N}$$

Per ottenere gli altri termini dobbiamo proiettare sugli stati $g_j(r)$ per tutti gli altri $j > 1$, ricavando un set di equazioni che possono essere poste in forma matriciale:

$$\begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} & \dots & H_{1N} \\ H_{21} & H_{21} & \dots & H_{2N} \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ H_{N1} & H_{N2} & \dots & H_{NN} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_N \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_N \end{pmatrix} \quad (8)$$

Quindi, con questa tecnica di risoluzione dell'equazione di Schrödinger, l'equazione si riduce al problema più semplice di diagonalizzare una matrice.

2 Implementazione

2.1 Hamiltoniana in unità ridotte

Prima di poter effettivamente implementare il metodo di sviluppo su una base, è necessario riscrivere l'Hamiltoniana in unità ridotte, ovvero riscalandolo le quantità dimensionali in modo che l'hamiltoniana che andremo a considerare risulti a tutti gli effetti adimensionale. Scriviamo allora (considerando $l = 0$ ed indicando con una tilda le quantità riscalate):

$$\begin{aligned}\mathcal{H} &= -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + \frac{\hbar c}{r}(7.39e^{-3.11r/\text{fm}} - 3.22e^{-1.555r/\text{fm}}) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr}\right) + \frac{\hbar c}{r}(7.39e^{-3.11r/\text{fm}} - 3.22e^{-1.555r/\text{fm}}) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2\mu(1\text{fm})^2}\left(\frac{d^2}{d\tilde{r}^2} + \frac{2}{\tilde{r}}\frac{d}{d\tilde{r}}\right) + \frac{\hbar c}{(1\text{fm})\tilde{r}}(7.39e^{-3.11\tilde{r}} - 3.22e^{-1.555\tilde{r}})\end{aligned}$$

Indicando con $V(\tilde{r})$ il nuovo potenziale adimensionale, otteniamo

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu(1\text{fm})^2}\left(\frac{d^2}{d\tilde{r}^2} + \frac{2}{\tilde{r}}\frac{d}{d\tilde{r}}\right) + \frac{\hbar c}{(1\text{fm})}V(\tilde{r})$$

Ora, il coefficiente $\frac{\hbar^2}{\mu(1\text{fm})^2}$ ha le dimensioni di un'energia: infatti

$$\frac{\hbar^2}{\mu(1\text{fm})^2} = \frac{\hbar^2 c^2}{\mu c^2 (1\text{fm})^2} = \frac{(\hbar c)^2}{\tilde{\mu}} \frac{\text{MeV}^2 \text{fm}^2}{\text{MeV fm}} = \frac{(\hbar c)^2}{\tilde{\mu}} \sim 82.945 \text{MeV}$$

Possiamo allora raccogliere questa quantità per riscaldare dimensionalmente l'Hamiltoniana, ottenendo un'Hamiltoniana ridotta

$$\tilde{\mathcal{H}} = -\frac{1}{2}\frac{d^2}{d\tilde{r}^2} - \frac{1}{\tilde{r}}\frac{d}{d\tilde{r}} + \frac{\mu\hbar c(1\text{fm})^2}{\hbar^2(1\text{fm})}V(\tilde{r})$$

Il coefficiente davanti al potenziale è evidentemente adimensionale e pari a:

$$\frac{\mu\hbar c(1\text{fm})^2}{\hbar^2(1\text{fm})} \sim 2.379$$

Conseguentemente, l'Hamiltoniana che andrà implementata è data in definitiva da

$$\tilde{\mathcal{H}} = -\frac{1}{2}\frac{d^2}{d\tilde{r}^2} - \frac{1}{\tilde{r}}\frac{d}{d\tilde{r}} + \frac{2.379}{\tilde{r}}(7.39e^{-3.11\tilde{r}} - 3.22e^{-1.555\tilde{r}}) \quad (9)$$

2.2 Le funzioni di base

Le funzioni su cui andremo a sviluppare il nostro stato sono date dalle autofunzioni dell'oscillatore armonico, che possiamo esprimere come

$$\psi_{nlm}(\mathbf{r}) = N_{nl}e^{-r^2/2}r^l\mathcal{L}_n^{(l+1/2)}(r^2)Y_{lm}(\Omega) \quad (10)$$

dove N_{nl} è un coefficiente di normalizzazione definito come

$$N_{nl} = \sqrt{\sqrt{\frac{1}{4\pi}} \frac{2^{n+2l+3}n!}{(2n+2l+1)!!}}$$

mentre i $\mathcal{L}_n^{(l+1/2)}$ sono i **polinomi di Laguerre generalizzati** di ordine n . Siccome siamo interessati al ground state, ci sarà sufficiente considerare le funzioni di base con $l = 0$:

$$\psi_{n00}(\mathbf{r}) \equiv \psi_n(\mathbf{r}) = \frac{N_{n0}}{\sqrt{4\pi}} e^{-r^2/2} r^l \mathcal{L}_n^{(1/2)}(r^2) \quad N_{n0} = \sqrt{\sqrt{\frac{1}{4\pi}} \frac{2^{n+3} n!}{(2n+1)!!}}$$

Conseguentemente, gli elementi della matrice saranno costituiti da

$$H_{ij} \equiv \langle \psi_i | \tilde{\mathcal{H}} | \psi_j \rangle = \int dr r^2 \psi_i(\tilde{r}) \left(-\frac{1}{2} \frac{d^2 \psi_j(\tilde{r})}{d\tilde{r}^2} - \frac{1}{\tilde{r}} \frac{d\psi_j(\tilde{r})}{d\tilde{r}} + 2.379 V(\tilde{r}) \psi_j(\tilde{r}) \right) \quad (11)$$

2.3 Librerie

Per l'implementazione del programma con linguaggio C sono state utilizzate alcune librerie matematiche fornite dalla **Gnu Scientific Library** (GSL). In particolare, sono state utilizzate le librerie:

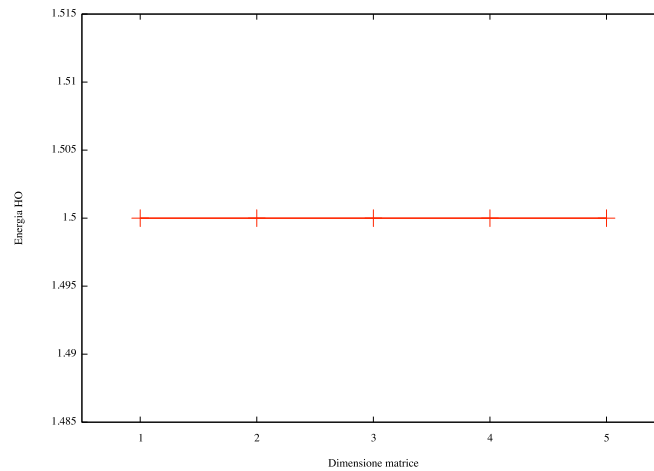
- gsl_sf_gamma.h per il calcolo del fattoriale e del semifattoriale (necessari per i coefficienti di normalizzazione) in maniera non ricorsiva (e dunque molto più rapida);
- gsl_sf_laguerre.h per la generazione dei polinomi di Laguerre generalizzati;
- gsl_sf_eigen.h per l'algoritmo di diagonalizzazione di una matrice.

2.4 Test dell'algoritmo

Il modo più efficace per testare il funzionamento dell'algoritmo è evidentemente quello di calcolare gli autostati dell'oscillatore armonico. E' stata considerata la seguente Hamiltoniana in unità naturali di oscillatore armonico:

$$\tilde{\mathcal{H}}_{HO} = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{d\tilde{r}^2} - \frac{1}{\tilde{r}} \frac{d}{d\tilde{r}} + \frac{1}{2} \tilde{r}^2 \quad (12)$$

Quanto ci si aspetta dalla diagonalizzazione della matrice è un'energia di ground state pari a 3/2 ed autovettore corrispondente con tutti zeri a meno della prima posizione. Di seguito vengono mostrati i risultati del test:

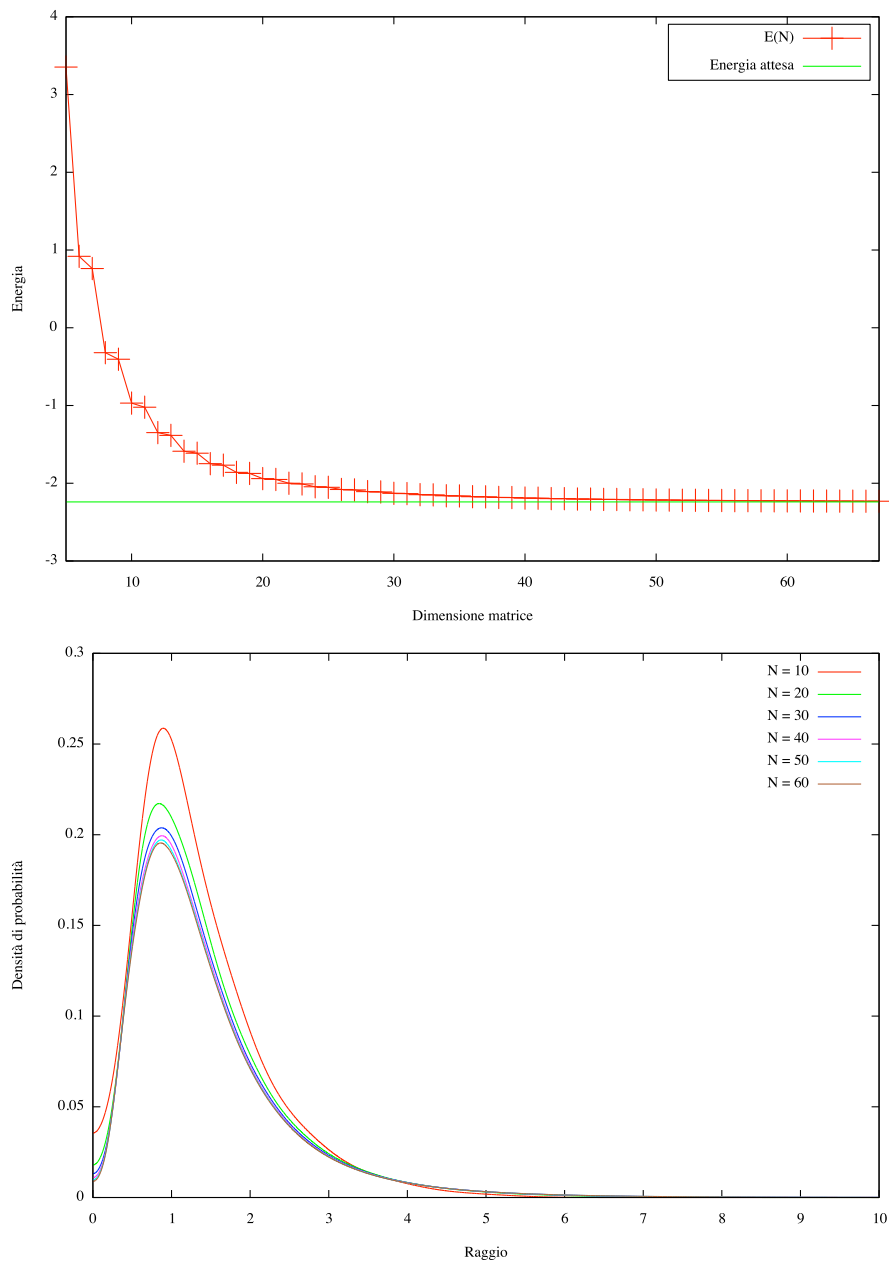


Dimensione	Autovettore
$N = 1$	(1.00)
$N = 2$	(1.00, 0.00)
$N = 3$	(1.00, 0.00, 0.00)
$N = 4$	(1.00, 0.00, 0.00, 0.00)
$N = 5$	(1.00, 0.00, 0.00, 0.00, 0.00)

Dati i positivi risultati del test, è possibile passare alla soluzione del problema in esame.

2.5 Discussione dei risultati

Mostriamo di seguito l'andamento dell'energia e della $|\psi|^2$ in funzione della dimensione della matrice:



dove l'energia attesa è data dalla media dei precedenti risultati $E_{attesa} \sim -2.240$. L'andamento convergente dell'energia e della $|\psi|^2$ è evidente. Più complicato è stabilire un vero e proprio criterio di convergenza, poichè i valori di energia variano sensibilmente dipendentemente dalla dimensione della matrice. Di conseguenza, per avere una stima almeno grossolana dell'energia è stata scelta come richiesta di convergenza che la differenza degli ultimi tre valori calcolati di energia fosse minore di $\varepsilon = 10^{-3}$, ovvero della precisione sull'energia. La scelta di precisioni migliori o di un maggior numero di energie da confrontare ha portato a risultati inconcludenti fino a $N = 70$, dimensione oltre la quale il sistema non è stato indagato per ragioni di tempo computazionale necessario. In ogni caso, con il metodo discusso si raggiunge la convergenza a $N = 67$, valore per il quale l'energia è pari a

$$E = -2.232 \text{ MeV}$$

Il valore risulta non compatibile con quelli precedentemente elencati, ma il problema potrebbe risiedere nella scelta del metodo di convergenza, che non risulta particolarmente efficace nel valutare la terza cifra decimale. In ogni caso, il comportamento convergente dell'energia in funzione della dimensione suggerisce che per N maggiori si possa raggiungere l'energia desiderata.