

# Progetto Finale per Fisica Computazionale 1: Equazione di Schroedinger in una dimensione

In questo progetto vogliamo risolvere numericamente l'equazione di Schroedinger in una dimensione

$$i\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} = \left[-\frac{1}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right]\Psi(x,t) \\ = H\Psi(x,t) , \quad (1)$$

dove abbiamo preso unità con  $\hbar = 1$ ,  $m$  é la massa della particella e  $V(x)$  un energia potenziale. La soluzione  $\Psi(x,t)$  é data specificando una configurazione iniziale  $\Psi(x,t)$  e condizioni al contorno

$$\Psi(-L,t) = f(t) \quad \Psi(L,t) = g(t) , \quad (2)$$

dove abbiamo preso l'intervallo spaziale  $[-L, L]$ . Per comodità in questo progetto prenderemo  $m = 1$  e  $f(t) = g(t) = 0$ . Questa equazione può essere risolta in più modi, in particolare ne esploreremo 3:

- metodo di Eulero esplicito: questo é equivalente al metodo esplicito per l'equazione di diffusione che abbiamo visto a lezione ma con un tempo complesso  $\tau = -it$ . Un modo conveniente per esprimere il passo temporale é il seguente

$$\vec{\Psi}(t + \Delta t) = (\mathbf{1} + i\Delta t H) \vec{\Psi}(t) , \quad (3)$$

dove  $\vec{\Psi}(t)$  é un vettore che rappresenta la soluzione al tempo  $t$  su una griglia spaziale,  $\mathbf{1}$  é la matrice identità,  $\Delta t$  il passo temporale e  $H$  la matrice Hamiltoniana ottenuta discretizzando la derivata seconda sulla griglia spaziale. In modo simile all'equazione di diffusione vista a lezione, la matrice  $(\mathbf{1} + i\Delta t H)$  é tridiagonale e la moltiplicazione può essere fatta in modo efficiente.

- metodo di Crank-Nicolson: questo può essere pensato come un'estensione dei metodi di Eulero implicito ed esplicito. Ricorda che il metodo implicito, visto a lezione per l'equazione di diffusione, corrisponde a modificare il passo temporale passando dalla moltiplicazione di una matrice alla soluzione di un sistema lineare (o equivalentemente alla moltiplicazione di una matrice inversa). Nel caso dell'equazione di Schroedinger questo può essere scritto come

$$(\mathbf{1} - i\Delta t H) \vec{\Psi}(t + \Delta t) = \vec{\Psi}(t) . \quad (4)$$

Questo metodo ha una patologia simile a quello esplicito che può però essere rimossa usando il metodo di Crank-Nicolson che combina entrambi i metodi in un passo temporale del tipo

$$\left(1 - i\frac{\Delta t}{2}H\right) \vec{\Psi}(t + \Delta t) = \left(1 - i\frac{\Delta t}{2}H\right) \vec{\Psi}(t) . \quad (5)$$

Per fare un passo intero va fatto prima il passo esplicito per la parte di destra

$$\vec{\Psi}\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right) = \left(1 + i\frac{\Delta t}{2}H\right) \vec{\Psi}(t) , \quad (6)$$

e poi il passo implicito risolvendo il sistema lineare

$$\left(1 - i\frac{\Delta t}{2}H\right) \vec{\Psi}(t + \Delta t) = \vec{\Psi}\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right) . \quad (7)$$

La soluzione del sistema lineare può essere fatta in modo efficiente sfruttando il fatto che la matrice è tridiagonale. Se prendiamo una matrice  $M$  scritta come

$$M = \begin{pmatrix} a_1 & c_1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ e_2 & a_2 & c_2 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & e_3 & a_3 & c_3 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & e_4 & a_4 & c_4 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & e_N & a_N \end{pmatrix} \quad (8)$$

possiamo innanzitutto riscriverla come il prodotto di due matrici  $M = LU$  con  $L$  zero sopra la diagonale e  $U$  zero sotto la diagonale

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \beta_2 & 1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \beta_3 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \beta_4 & 1 & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \beta_N & 1 \end{pmatrix} \quad (9)$$

$$U = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \gamma_1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \alpha_2 & \gamma_2 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \alpha_3 & \gamma_3 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \alpha_4 & \gamma_4 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & \alpha_N \end{pmatrix} \quad (10)$$

Questa decomposizione può essere trovata in modo ricorsivo partendo da

$$\alpha_1 = a_1 \quad \gamma_1 = c_1 , \quad (11)$$

e facendo per  $i > 1$

$$\begin{aligned}\beta_i &= \frac{e_i}{\alpha_{i-1}} \\ \gamma_i &= c_i \\ \alpha_i &= a_i - \beta_i \gamma_{i-1}\end{aligned}\tag{12}$$

A questo punto possiamo risolvere il sistema lineare  $Mx = b$ , equivalente a  $LUx = b$ , in due passi:

- per prima cosa troviamo  $y$  risolvendo  $Ly = b$ . Questo vettore può essere trovato esplicitamente partendo con  $y_1 = b_1$  e usando la ricorrenza per  $i > 1$

$$y_i = b_i - \beta_i y_{i-1}\tag{13}$$

- a questo punto possiamo trovare  $x$  dalla soluzione di  $Ux = y$  facendo una ricorsione inversa partendo da  $x_N = y_N/\alpha_N$  e andando indietro

$$x_i = y_i/\alpha_i - x_{i+1}\gamma_i/\alpha_i\tag{14}$$

- [BONUS] metodo di Trotter-Suzuki: usando la matrice Hamiltoniana usata nei metodi precedenti, la soluzione esatta (temporale) dell'equazione di Schroedinger può essere scritta in forma chiusa come

$$\vec{\Psi}(t + \Delta t) = \exp(i\Delta t H) \vec{\Psi}(t).\tag{15}$$

Il metodo di Eulero implicito usa un'espansione al primo ordine per approssimare questo passo temporale con un errore di ordine  $\Delta t$ . Applicare direttamente l'esponenziale dell'Hamiltoniana non è semplice, un metodo per aggirare il problema è usare l'approssimazione di Trotter-Suzuki

$$\exp(i\Delta t H) = \exp\left(i\frac{\Delta t}{2}V\right) \exp(i\Delta t T) \exp\left(i\frac{\Delta t}{2}V\right) + O(\Delta t^3),\tag{16}$$

dove  $V$  è il potenziale e  $T$  l'energia cinetica. L'esponenziale con  $V$  è facile visto che la matrice è diagonale, mentre per l'esponenziale con  $T$  possiamo usare il fatto che conosciamo gli autovalori e autovettori di una matrice tridiagonale e possiamo quindi diagonalizzare la matrice centrale. In particolare, usando la stessa notazione usate sopra per una matrice tridiagonale e specializzandoci al caso  $a_i = a$ ,  $c_i = e_i = c$  per ogni  $i$ , gli autovalori sono

$$\lambda_n = a + s|c| \cos\left(\frac{n\pi}{N+1}\right)\tag{17}$$

mentre le componenti dell'autovettore corrispondente all'autovalore  $\lambda_n$  sono

$$v_k^{(n)} = \sin\left(\frac{nk\pi}{N+1}\right).\tag{18}$$

Se vuoi fare questo punto bonus e vuoi simulare un sistema grande scrivi che posso mandarti un metodo efficiente per calcolare tutte quelle funzioni trigonometriche.

1. ricava le espressioni esplicite per il metodo di Eulero e quello di Crank-Nicolson mantenendo generico il potenziale.
2. implementa entrambi i metodi per il caso in cui  $V(x) = 0$ , corrispondente alla particella libera, e controlla la tua implementazione partendo da una condizione iniziale uguale a  $\Psi(0) = 1$  e zero nel resto della scatola. Calcola la normalizzazione della funzione d'onda in funzione del tempo: che problema vedi con il metodo di Eulero esplicito? Per controllare che l'implementazione sia corretta con il metodo di Crank-Nicolson puoi calcolare il valore medio di  $x$  e di  $x^2$  e confrontarlo con la soluzione esatta trovata analiticamente ( $\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle$  cresce linearmente con il tempo).
3. usa il metodo di Crank-Nicolson per studiare la frequenza di oscillazione per un potenziale a doppia buca

$$V(x) = V_0 (x^2 - a)^2, \quad (19)$$

puoi prendere ad esempio  $V_0 = 1$  e  $a = 0.25$  con un lato della scatola  $L = 1$ . Come condizione iniziale prendi la particella in una delle due buche a  $x = \pm 1/2$  e calcola la probabilità di restare nel minimo in cui sei partito in funzione del tempo.

- Puoi cambiare la frequenza modificando i parametri del potenziale.
4. verifica che i risultati siano stabili al variare dei passi temporale e spaziale.
  5. [BONUS] risolvi il problema usando il metodo di Trotter-Suzuki