



Università degli Studi di Trento
Fisica Computazionale

Corso di Laurea Triennale in Fisica

Relazione di laboratorio

Progetto finale: Equazione di Schrödinger in 1D

January 10, 2025

Candidato:
Giorgio Micaglio, giorgio.micaglio@studenti.unitn.it
Matricola 227051

Docente:
Prof. Alessandro Roggero

Anno Accademico 2023-2024

1 Introduzione

L'obiettivo di questo progetto è risolvere numericamente l'equazione di Schrödinger in una dimensione:

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

Per semplicità, si sono posti $\hbar = m = 1$. Si è interessati alla regione $x \in [-L, L]$ e si impongono le condizioni al contorno $\psi(-L, t) = \psi(L, t) = 0$.

2 Metodo di Eulero esplicito

Il primo approccio è quello di utilizzare il metodo di Eulero esplicito. Per prima cosa, si usano le differenze finite per stimare le derivate della funzione d'onda che compaiono in (1). Siano $x = x_0 + \Delta x$ e $t = t_0 + \Delta t$, si ottiene:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} &= \frac{\psi(x_0, t_0 + \Delta t) - \psi(x_0, t_0)}{\Delta t} + \mathcal{O}(\Delta t), \\ \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} &= \frac{\psi(x_0 + \Delta x, t_0) - 2\psi(x_0, t_0) + \psi(x_0 - \Delta x, t_0)}{\Delta x^2} + \mathcal{O}(\Delta x^2) \end{aligned}$$

L'equazione di Schrödinger diventa quindi:

$$i \frac{\psi(x_0, t_0 + \Delta t) - \psi(x_0, t_0)}{\Delta t} = - \frac{\psi(x_0 + \Delta x, t_0) - 2\psi(x_0, t_0) + \psi(x_0 - \Delta x, t_0)}{\Delta x^2} + V(x_0) \psi(x_0, t_0).$$

Prendendo $\Delta x = 2L/(N+1)$, si possono definire la funzione d'onda e il potenziale calcolati sui punti della griglia come

$$\begin{aligned} \psi_i^k &= \psi(-L + i\Delta x, t_0 + k\Delta t) & i = 0, 1, \dots, N+1 & \quad k = 0, 1, \dots, M \\ V_i &= V(-L + i\Delta x) & i = 0, 1, \dots, N+1 \end{aligned}$$

e si può scrivere l'equazione in modo più chiaro:

$$i \frac{\psi_i^{k+1} - \psi_i^k}{\Delta t} = - \frac{\psi_{i+1}^k - 2\psi_i^k + \psi_{i-1}^k}{\Delta x^2} + V_i \psi_i^k.$$

Isolando il termine ψ_i^{k+1} e semplificando, si ottiene

$$\psi_i^{k+1} = \eta \psi_{i+1}^k + (1 - 2\eta + \Delta\tau V_i) \psi_i^k + \eta \psi_{i-1}^k, \quad (2)$$

dove $\Delta\tau = -i\Delta t$ e $\eta = -\Delta\tau/\Delta x^2$. L'equazione (2) rappresenta l'evoluzione temporale della funzione d'onda. Come ultimo passaggio, si può definire il vettore

$$\boldsymbol{\psi}_k = (\psi_1^k, \psi_2^k, \dots, \psi_N^k)^T$$

e l'equazione (2) diventa

$$\boldsymbol{\psi}_{k+1} = A \boldsymbol{\psi}_k$$

con

$$A = \begin{pmatrix} 1 - 2\eta + \Delta\tau V_1 & \eta & 0 & \dots & 0 \\ \eta & 1 - 2\eta + \Delta\tau V_2 & \eta & \dots & 0 \\ 0 & \eta & 1 - 2\eta + \Delta\tau V_3 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \eta \\ 0 & 0 & 0 & \eta & 1 - 2\eta + \Delta\tau V_N \end{pmatrix}.$$