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:

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

Per semplicità, si sono posti $\hbar = m = 1$. Si è interessati alla regione $x \in [-L, L]$ e si impongono le condizioni al contorno $\psi(-L,t) = \psi(L,t) = 0$. Si vogliono studiare i casi di particella libera $V(x) = 0$ e di potenziale a doppia buca $V(x) = V_0(x^2 - a^2)^2$.

1.1 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:

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

L'equazione di Schrödinger diventa quindi:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

e l'equazione (2) diventa

$$\boldsymbol{\psi}_{k+1} = A\boldsymbol{\psi}_k \tag{3}$$

con

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

La matrice A è tridiagonale: ciò semplifica molto la computazione della moltiplicazione matrice per vettore. Inoltre, scrivendo $A = \mathbb{1} + i\Delta t H$, si ottiene direttamente la matrice Hamiltioniana, che è indipendente dal passo temporale Δt.

1.2 Metodo di Crank-Nicolson

Il metodo di Crank-Nicolson combina mezzo passo del metodo di Eulero esplicito con mezzo passo del metodo implicito. Utilizzando la matrice H appena calcolata, il passo esplicito da fare è [1]

$$\psi_{k+1/2} = \left(\mathbb{1} + i\frac{\Delta t}{2}H\right)\psi_k\,,$$

seguito dal passo implicito, cioè

$$\left(\mathbb{1} - i\frac{\Delta t}{2}H\right)\psi_{k+1} = \psi_{k+1/2}\,.$$

Per risolvere il passo implicito, sia $M = \left(\mathbb{1} - i\frac{\Delta t}{2}H\right)$. Come si è già visto, questa matrice è tridiagonale e può essere fattorizzata nel seguente modo:

$$M = \begin{pmatrix} a_1 & c_1 & 0 & 0 & \cdots \\ e_2 & a_2 & c_2 & 0 & \cdots \\ 0 & e_3 & a_3 & c_3 & \cdots \\ 0 & 0 & e_4 & a_4 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \beta_2 & 1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \beta_3 & 1 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \beta_4 & 1 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 & \gamma_1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \alpha_2 & \gamma_2 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \alpha_3 & \gamma_3 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \alpha_4 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} = LU\,.$$

Nel caso considerato, i coefficienti di M sono

$$a_i = 1 + \eta - V_i\frac{\Delta\tau}{2}\,, \qquad c_i = e_i = -\frac{\eta}{2}$$

e da questi si possono ricavare quelli di L e U partendo da $\alpha_1 = a_1$:

$$\beta_i = -\frac{\eta}{2\alpha_{i-1}}\,, \qquad \gamma_i = -\frac{\eta}{2}\,, \qquad \alpha_i = a_i - \frac{\eta^2}{4\alpha_{i-1}}\,. \tag{4}$$

Infine, per risolvere $LU\mathbf{x} = \mathbf{b}$, con $\mathbf{x} = \psi_{k+1}$ e $\mathbf{b} = \psi_{k+1/2}$, si risolve prima ricorsivamente $L\mathbf{y} = \mathbf{b}$:

$$y_1 = b_1 \qquad y_i = b_i - \beta_i y_{i-1} \qquad i = 2, \ldots, N \tag{5}$$

e poi ricorsivamente $U\mathbf{x} = \mathbf{y}$:

$$x_N = \frac{y_N}{\alpha_N} \qquad x_i = \frac{y_i}{\alpha_i} - \frac{x_{i+1}\gamma_i}{\alpha_i} \qquad i = N-1, \ldots, 0\,. \tag{6}$$

2 Simulazione di particella libera

Il caso in cui $V(x) = 0$ è quello di particella libera. Si usa come condizione iniziale

$$\psi(x=0,0) = \frac{1}{\sqrt{\Delta x}}\,, \qquad \psi(x,0) = 0\ \forall x \neq 0\,.$$

Si fanno andare le simulazioni con $N = 199$ divisioni spaziali, $\Delta x = 1\times10^{-2}$, $L = 1$, $M = 3\times10^4$ passi temporali, $\Delta t = 1\times10^{-6}$.

La struttura delle simulazioni con i due metodi è semplice:

- Nel caso del metodo di Eulero esplicito, ad ogni passo basta effettuare la moltiplicazione matrice per vettore di equazione (3). Come già accennato, siccome la matrice è tridiagonale, la computazione è meno dispendiosa: si tratta di un algoritmo $\mathcal{O}(N)$ invece che $\mathcal{O}(N^2)$, dove la matrice è $N\times N$.

[1] Mentre la notazione ψ_k corrisponde a $\psi(t)$, la notazione $\psi_{k+1/2}$ corrisponde a $\psi(t+\Delta t/2)$

- Per il metodo di Crank-Nicolson invece, per ogni passo della simulazione si esegue il mezzo passo esplicito allo stesso modo di Eulero e poi si inverte la matrice del passo implicito con le regole di ricorsione (4), (5) e (6), che sono anch'esse implementabili in $\mathcal{O}(N)$.

Per studiare il comportamento di entrambi i metodi, si calcola ad ogni passo temporale la normalizzazione della funzione d'onda, cioè

$$\mathcal{N}(t) = \int_{-L}^{L} |\psi(x,t)|^2 \, \mathrm{d}x \, .$$

Naturalmente ci si aspetta di avere $\mathcal{N}(t) = 1$, ma come si può notare in figura 1 il metodo di Eulero viola questa condizione e $\mathcal{N}(t)$ cresce esponenzialmente! Il problema risiede proprio nel fatto che il metodo è di tipo esplicito e, come per le equazioni differenziali ordinarie, la convergenza non è garantita.

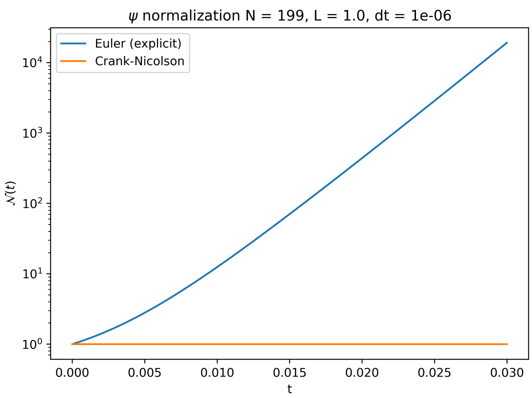

Figura 1: Evoluzione temporale della normalizzazione della funzione d'onda nei due metodi

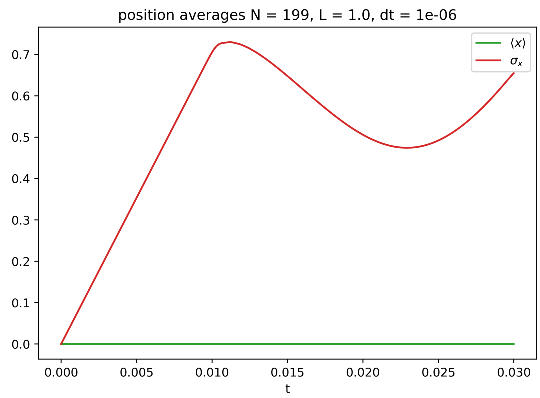

Figura 2: Evoluzione temporale del valore di aspettazione $\langle x \rangle$ e di σ_x nella simulazione con Crank-Nicolson

È conveniente dunque affidarsi al metodo di Crank-Nicolson, del quale si verifica la corretta implementazione mostrando l'evoluzione temporale del valor medio $\langle x \rangle$ e della deviazione standard $\sigma_x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$ in figura 2. Come ci si aspetta (si veda l'appendice A), il valor medio della posizione x è nullo e la deviazione standard cresce linearmente nel tempo, almeno fino al raggiungimento dei lati della scatola.

3 Simulazione con potenziale a doppia buca

A Evoluzione temporale e valori di aspettazione

Data l'equazione di Schrödinger

$$i\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = H|\psi(t)\rangle \qquad \text{con} \qquad H = -\frac{\partial^2}{\partial x^2} = \frac{p^2}{2} \, ,$$

si vogliono calcolare i valori di aspettazione $\langle \psi(t)|x|\psi(t)\rangle$ e $\langle \psi(t)|x^2|\psi(t)\rangle$. Lo stato all'istante t è determinato dall'operatore di evoluzione temporale:

$$|\psi(t)\rangle = U(t)|\psi(t)\rangle = e^{-itH}|\psi(0)\rangle \, .$$

Il valore di aspettazione di x risulta perciò

$$\langle \psi(t)|x|\psi(t)\rangle = \langle \psi(0)|U^\dagger(t) x U(t)|\psi(0)\rangle = \langle \psi(0)|x_H(t)|\psi(0)\rangle \, , \tag{7}$$

dove si è definito l'operatore $x_H(t)$ in rappresentazione di Heisenberg. La sua evoluzione è dettata dall'equazione di Heisenberg per gli operatori:

$$i\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} x_H(t) = [x_H(t), H] \, .$$

È facile far vedere che il commutatore a destra dell'equazione è $[x_H(t), H] = ip$, e quindi l'operatore posizione è

$$x_H(t) = x_H(0) + pt\,.$$

Ora si può usare l'equazione (7) sostituendo la forma dell'operatore $x_H(t)$ e si ottiene

$$\langle x\rangle = \langle\psi(0)|x(0)|\psi(0)\rangle + \langle\psi(0)|p|\psi(0)\rangle t\,,$$

dove si è sfruttato il fatto che $x_H(0) = x(0)$. Il primo termine si annulla prendendo come stato iniziale l'autostato della posizione $|x = 0\rangle$. Il secondo termine è nullo perché l'operatore p è dispari e lo stato iniziale, invece, è pari. Quindi, in queste condizioni, $\langle x\rangle = 0$. Allo stesso modo si calcola il valore di aspettazione di x^2:

$$\langle x^2\rangle = \langle\psi(0)|p^2|\psi(0)\rangle t^2\,,$$

che non si annulla perché p^2 è pari. Infine, la deviazione standard è

$$\sigma_x = \sqrt{\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2} = \sqrt{\langle x^2\rangle} \propto t\,.$$