



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](mailto: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:

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \left[ -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \psi(x, t). \quad (1.1)$$

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  $V(x) = V_0(x^2 - a)^2$ .

## 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 (1.1). 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:

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

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

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

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

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

Isolando il termine  $\psi_i^{k+1}$  e semplificando, si ottiene

$$\psi_i^{k+1} = \eta \psi_{i+1}^k + (1 - 2\eta + \Delta\tau V_i) \psi_i^k + \eta \psi_{i-1}^k, \quad (1.2)$$

dove  $\Delta\tau = -i\Delta t$  e  $\eta = -\Delta\tau/2\Delta x^2$ . L'equazione (1.2) rappresenta l'evoluzione temporale della funzione d'onda. Come ultimo passaggio, si può definire il vettore

$$\psi_k = (\psi_1^k, \psi_2^k, \dots, \psi_N^k)^T$$

e l'equazione (1.2) diventa

$$\psi_{k+1} = A \psi_k \quad (1.3)$$

con

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

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 Hamiltoniana, che è indipendente dal passo temporale  $\Delta t$ .

## 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 <sup>1</sup>

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

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

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

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

$$\beta_i = -\frac{\eta}{2\alpha_{i-1}}, \quad \gamma_i = -\frac{\eta}{2}, \quad \alpha_i = a_i - \frac{\eta^2}{4\alpha_{i-1}}. \quad (1.4)$$

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  $L\mathbf{y} = \mathbf{b}$ :

$$y_1 = b_1 \quad y_i = b_i - \beta_i y_{i-1} \quad i = 2, \dots, N \quad (1.5)$$

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

$$x_N = \frac{y_N}{\alpha_N} \quad x_i = \frac{y_i}{\alpha_i} - \frac{x_{i+1}\gamma_i}{\alpha_i} \quad i = N-1, \dots, 0. \quad (1.6)$$

## 2 Simulazione di particella libera

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

$$\psi(x=0,0) = \frac{1}{\sqrt{\Delta x}}, \quad \psi(x,0) = 0 \quad \forall x \neq 0. \quad (2.1)$$

Si fanno andare le simulazioni con  $N = 199$  divisioni spaziali,  $\Delta x = 1 \times 10^{-2}$ ,  $L = 1$ ,  $M = 3 \times 10^4$  passi temporali,  $\Delta t = 1 \times 10^{-6}$ .

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 (1.3). 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  $N \times N$ .

<sup>1</sup>Mentre la notazione  $\psi_k$  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 (1.4), (1.5) e (1.6), 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

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

Siccome la simulazione genera valori  $\psi_i^k$  su uno spazio discreto, l'integrale si deve calcolare sommando i contributi di ogni divisione spaziale, ricordandosi che le condizioni al contorno annullano i contributi a  $x = \pm L$ . 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!<sup>2</sup> 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.

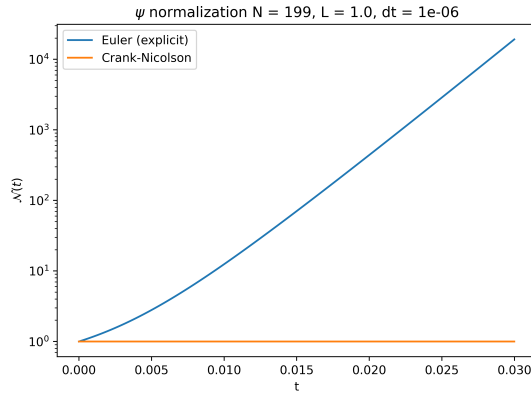


Figura 1: Evoluzione temporale della normalizzazione della funzione d'onda nei due metodi (asse verticale in scala logaritmica)

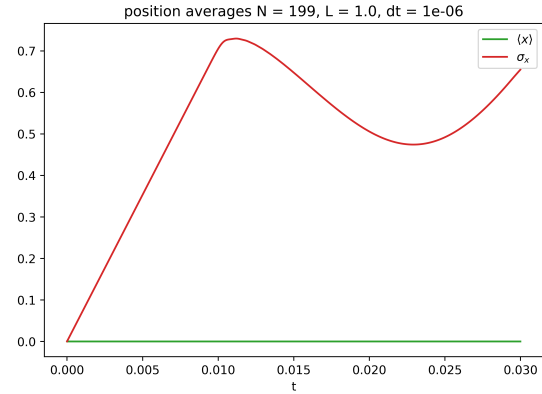


Figura 2: Evoluzione temporale del valore di aspettazione  $\langle x \rangle$  e di  $\sigma_x$  nella simulazione con Crank-Nicolson

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

Ora viene simulato il sistema con potenziale  $V(x) = V_0(x^2 - a)^2$ . In generale, i due minimi del potenziale si trovano a  $x_{1,2} = \pm\sqrt{a}$ , quindi come condizione iniziale si può prendere la stessa di equazione (2.1) ma con la funzione d'onda in  $x_1 = -\sqrt{a}$  (la buca di sinistra).

È di particolare interesse calcolare la probabilità di misurare la particella in ciascuna delle due buche in funzione del tempo, e si può fare semplicemente così:

$$\mathcal{P}_L(t) = \int_{-L}^0 |\psi(x, t)|^2 dx, \quad \mathcal{P}_R(t) = \int_0^L |\psi(x, t)|^2 dx .$$

Prendendo  $N$  dispari, bisogna decidere se inserire il contributo centrale in  $\mathcal{P}_L$  o  $\mathcal{P}_R$ , ma in ogni caso ciò non è rilevante ai risultati della simulazione.

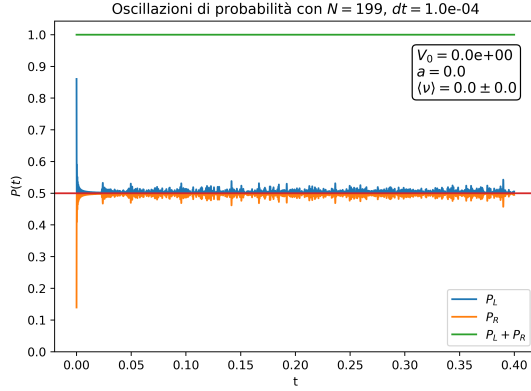
Per quanto riguarda i valori dei parametri  $V_0$  e  $a$ , si può notare che  $V(0) = V_0 a^2$ , e questo stabilisce un ordine di grandezza per la doppia buca. Nel mezzo passo esplicito del metodo di Crank-Nicolson,

<sup>2</sup>Questa è solo una stima visiva dal grafico.

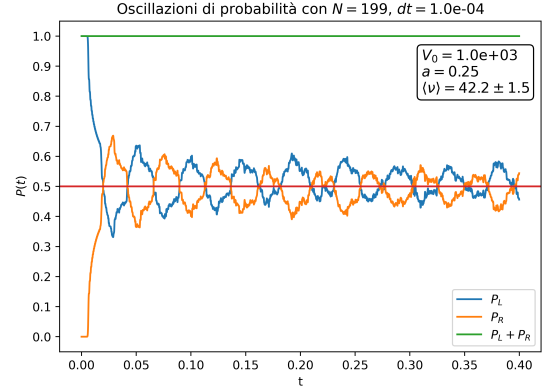
la matrice di evoluzione temporale ha come valori della diagonale  $1 - \eta + \frac{\Delta\tau}{2} V_i$ , e ciò suggerisce che l'ordine di grandezza del potenziale, per avere un contributo significativo, debba essere

$$|\Delta\tau|V_i \sim 1 \quad \Rightarrow \quad V_0 a^2 \sim \frac{1}{\Delta t}. \quad (3.1)$$

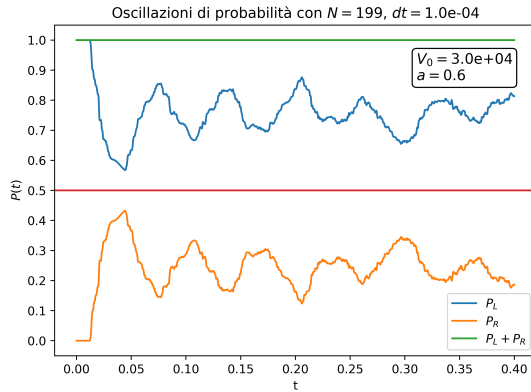
Quindi tenendo il valore  $\Delta t = 1 \times 10^{-6}$ , i valori  $V_0 = 1$  e  $a = 0.25$  produrrebbero un potenziale troppo debole. Si decide quindi di usare un passo  $\Delta t = 1 \times 10^{-4}$  e poi andare a studiare il comportamento della simulazione per diversi valori di  $V_0$  e  $a$ . Nelle figure 3, 4 e 5 si mostrano i risultati in



**Figura 3:** Oscillazione di probabilità nella simulazione con doppia buca di potenziale. Quando  $V_0 = 0$  e  $a = 0$ , non c'è oscillazione.



**Figura 4:** Oscillazione di probabilità nella simulazione con doppia buca di potenziale. Quando il potenziale è basso, la particella non è confinata nella buca di partenza, e oscilla tra le due in modo simile al caso  $V_0 = 0$ ,  $a \neq 0$ .



**Figura 5:** Oscillazione di probabilità nella simulazione con doppia buca di potenziale. Quando il potenziale è alto, la particella è quasi completamente confinata nella buca di partenza.

tre esempi diversi:

- Nel primo caso,  $V_0 = 0$  e  $a = 0$ , quindi il potenziale è nullo e la particella libera si muove nella scatola. Partendo dal centro della scatola, non c'è oscillazione nella probabilità di misurarla a sinistra o destra ed entrambe valgono  $\sim 0.5$ .
- Il secondo caso ha  $V_0 a^2 = 2.5 \times 10^2$ . Ora la particella oscilla tra le due buche, ma il potenziale è ancora troppo basso purché resti confinata in una delle due. Questo caso è molto simile a  $V_0 = 0$ ,  $a \neq 0$ , siccome il potenziale è ancora trascurabile rispetto all'energia cinetica.
- Nel terzo caso,  $V_0 a^2 = 1.8 \times 10^4$ . In accordo con la previsione di equazione (3.1), a questo ordine di grandezza la particella risente del potenziale ed è quasi completamente confinata nella buca di partenza (sinistra).

Studiare la frequenza di oscillazione del moto non è semplice. Quando il potenziale è basso e non c'è confinamento, si può stimare il periodo medio di oscillazione prendendo gli istanti temporali in cui  $\mathcal{P}_L(t) = 0.5$  e facendo una media degli intervalli.

## A Evoluzione temporale e valori di aspettazione

Data l'equazione di Schrödinger

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

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:

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

Il valore di aspettazione di  $x$  risulta perciò

$$\langle \psi(t) | x | \psi(t) \rangle = \langle \psi(0) | U^\dagger(t) x U(t) | \psi(0) \rangle = \langle \psi(0) | x_H(t) | \psi(0) \rangle, \quad (\text{A.1})$$

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:

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

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 (A.1) 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

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