



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:

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

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

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

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 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 $\eta = -\Delta\tau/2\Delta x^2$. L'equazione (2) rappresenta l'evoluzione temporale della funzione d'onda. Come ultimo passaggio, si può definire il vettore

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

e l'equazione (2) diventa

$$\boldsymbol{\psi}_{k+1} = A \boldsymbol{\psi}_k \quad (3)$$

con

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

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 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 $M = (\mathbb{1} - i \frac{\Delta t}{2} H)$. 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 $\alpha_1 = a_1$:

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

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

$$y_1 = b_1 \quad y_i = b_i - \beta_i y_{i-1} \quad i = 2, \dots, N \quad (5)$$

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

$$x_N = \frac{y_N}{\alpha_N} \quad x_i = \frac{y_i}{\alpha_i} - \frac{x_{i+1}\gamma_i}{\alpha_i} \quad i = N-1, \dots, 0. \quad (6)$$

2 Simulazione di particella libera

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

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

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 (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 $N \times N$.
- 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 $\mathcal{O}(N)$.

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

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

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

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.

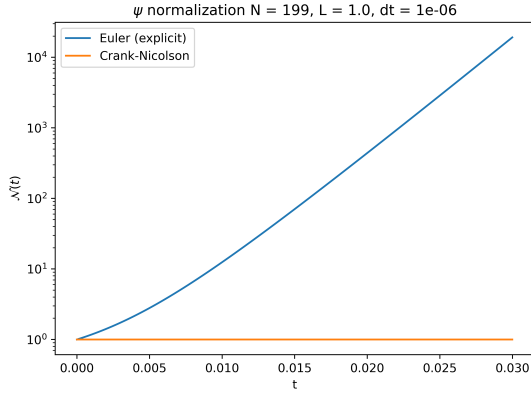


Figura 1: Evoluzione temporale della normalizzazione della funzione d'onda nei due metodi

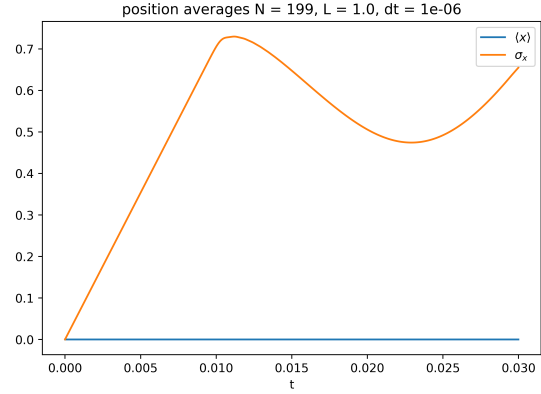


Figura 2: Evoluzione temporale del valore di aspettazione $\langle x \rangle$ e di σ_x nella simulazione con Crank-Nicolson

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.

3 Simulazione con potenziale a doppia buca