



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:

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

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

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

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

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

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 $M = \left(\mathbb{1} - i \frac{\Delta t}{2} H \right)$. 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. Al fine di normalizzare la funzione d'onda, 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 $N \times N$.

¹Mentre 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 (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 ψ_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!² 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.

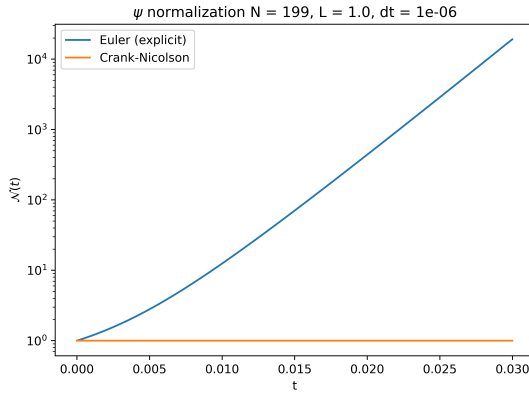


Figura 1: Evoluzione temporale della normalizzazione della funzione d'onda nei due metodi (asse verticale in scala logaritmica)

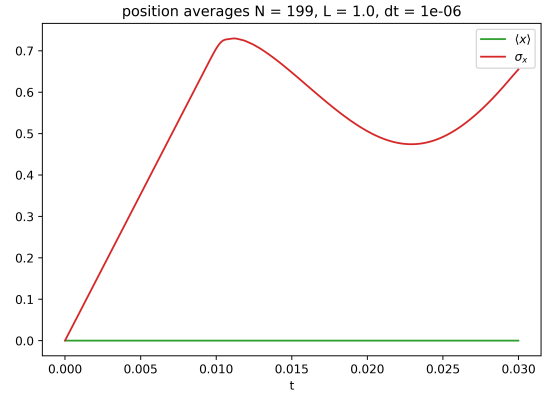


Figura 2: Evoluzione temporale del valore di aspettazione $\langle x \rangle$ e di σ_x nella simulazione con Crank-Nicolson

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

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).

3.1 Frequenza di oscillazione

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.

²Questa è solo una stima visiva dal grafico.

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, 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

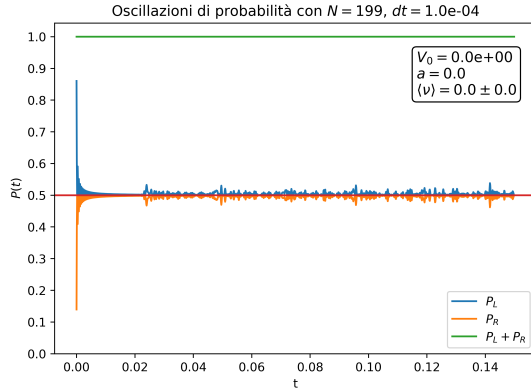


Figura 3: Oscillazione di probabilità nella simulazione con doppia buca di potenziale. Quando $V_0 = 0$ e $a = 0$, non c'è oscillazione.

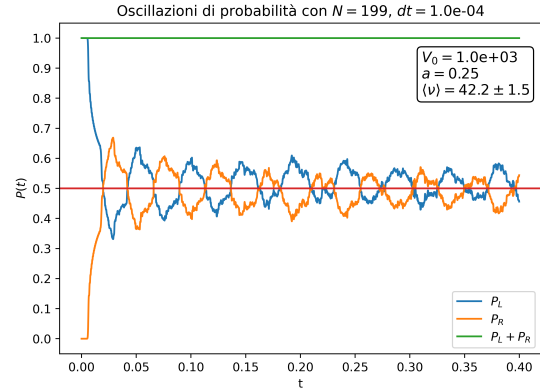


Figura 4: Oscillazione di probabilità nella simulazione con doppia buca di potenziale. Quando il potenziale è basso, la particella non è confinata nella buca di partenza, e oscilla tra le due in modo simile al caso $V_0 = 0$, $a \neq 0$.

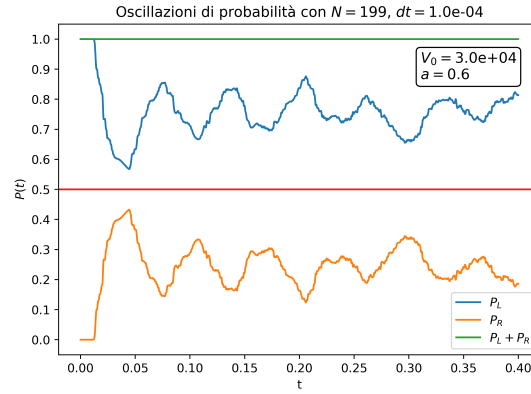


Figura 5: Oscillazione di probabilità nella simulazione con doppia buca di potenziale. Quando il potenziale è alto, la particella è quasi completamente confinata nella buca di partenza.

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 ~ 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 calcolando la media degli intervalli tra questi istanti. Una stima dell'incertezza sul valor medio del periodo può essere fatta con la deviazione standard dei periodi (diviso la radice del numero di periodi). Quando il potenziale è troppo alto, invece, le probabilità non oscillano più attorno a 0.5 e diventa difficile stimare i periodi. Per questo motivo, si decide di studiare solo i casi in cui il potenziale è basso. I risultati, mostrati in figura 6 al variare di a e in figura 7 al variare di

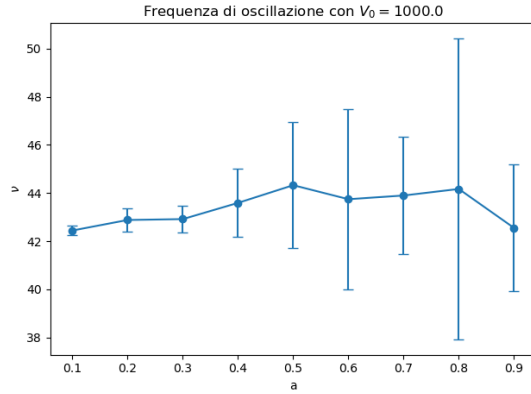


Figura 6: Stima della frequenza di oscillazione ν in funzione del parametro a della doppia buca.

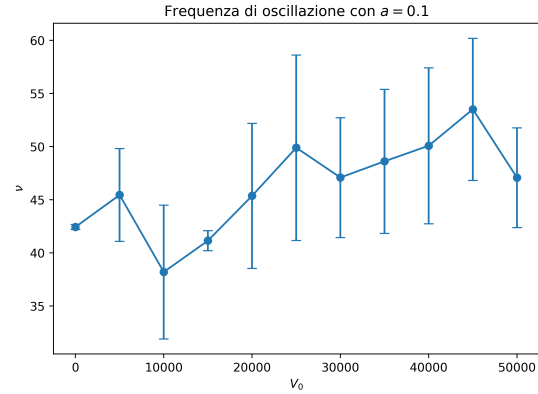


Figura 7: Stima della frequenza di oscillazione ν in funzione del parametro V_0 della doppia buca.

V_0 , mostrano una bassa variazione della frequenza di oscillazione. Tuttavia, si nota immediatamente che i dati sono dominati dall'incertezza ed è difficile stabilire un andamento anche solo qualitativo della frequenza.

3.2 Pacchetto gaussiano

Per provare a migliorare i risultati della simulazione, si può provare ad implementare una diversa condizione iniziale. Il problema della funzione d'onda di equazione (2.1) è la discontinuità. Infatti, sebbene l'evoluzione con il metodo di Crank-Nicolson fornisca risultati fisici (la normalizzazione è conservata), la simulazione è molto influenzata dal passo spaziale Δx . Si decide dunque di utilizzare all'istante iniziale un pacchetto gaussiano del tipo:

$$\psi(x, 0) = \left(\frac{1}{2\pi\sigma^2} \right)^{1/4} \exp \left\{ -\frac{(x - x_1)^2}{4\sigma^2} \right\}.$$

Si noti che questa scelta fa sì che $\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x, 0)|^2 dx = 1$ e, in generale, la funzione d'onda è non nulla anche al di fuori della scatola. Tuttavia, si può prendere una larghezza piccola della funzione gaussiana, corrispondente ad un pacchetto ben localizzato attorno a $x = x_1$, e i contributi esterni alla scatola diventano trascurabili.³ Si decide quindi di prendere $\sigma = \sqrt{\Delta x}$.

Si mostrano i risultati di una simulazione con $N = 199$, $\Delta t = 1 \times 10^{-3}$, $V_0 = 100$, $a = 0.25$. In figura 8, si mostrano le oscillazioni di probabilità: rispetto alla simulazione precedente, l'ampiezza è aumentata, ciò significa che ci sono degli istanti periodici in cui la particella è quasi totalmente localizzabile in una delle due buche. Per verificare ulteriormente la correttezza della simulazione, in figura 9 si mostrano i valori di aspettazione dell'energia del sistema in funzione del tempo. Sono calcolati nel seguente modo:

$$\begin{aligned} \langle K \rangle &= \langle \psi(x, t) | K | \psi(x, t) \rangle = \int_{-L}^L \psi^*(x, t) \left(-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \psi(x, t) dx, \\ \langle V \rangle &= \langle \psi(x, t) | V | \psi(x, t) \rangle = \int_{-L}^L \psi^*(x, t) V(x) \psi(x, t) dx = \int_{-L}^L V(x) |\psi(x, t)|^2 dx. \end{aligned}$$

In figura si nota che l'energia, entro un piccolo scarto, è conservata nel tempo.

³Il problema persiste se si prende $a \rightarrow 1$ e quindi $x_1 \rightarrow -1$. In questo caso il pacchetto gaussiano non è normalizzato.

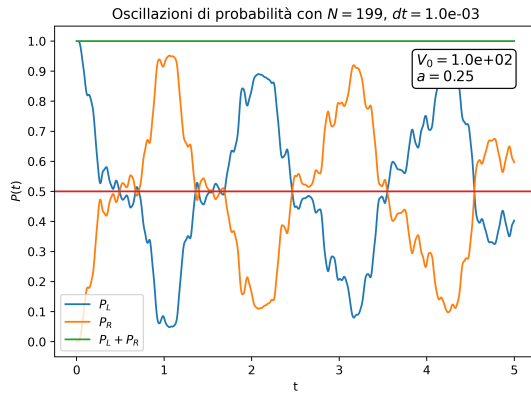


Figura 8: Oscillazioni di probabilità nella simulazione con pacchetto gaussiano come condizione iniziale. Le oscillazioni sono più ampie e la particella si muove effettivamente tra le due buche.

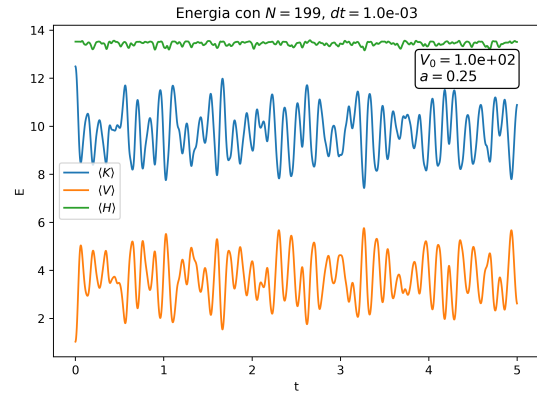


Figura 9: Energia del sistema nella simulazione con pacchetto gaussiano come condizione iniziale. Entro un piccolo scarto, l'energia totale è conservata.

4 Conclusioni

In questo progetto si è studiata l'equazione di Schrödinger in una dimensione utilizzando due metodi numerici: il metodo di Eulero esplicito e il metodo di Crank-Nicolson. Entrambi i metodi sono stati implementati e i loro risultati confrontati attraverso simulazioni di una particella libera e di una particella in un potenziale a doppia buca.

Le simulazioni hanno mostrato che il metodo di Eulero esplicito non conserva la normalizzazione della funzione d'onda, portando a risultati non fisici. Al contrario, il metodo di Crank-Nicolson ha dimostrato di essere stabile e di conservare la normalizzazione, rendendolo più adatto per questo tipo di problemi.

Nel caso della particella libera, si è verificato che il valor medio della posizione rimane nullo e la deviazione standard cresce linearmente nel tempo, come previsto teoricamente. Questo conferma la corretta implementazione del metodo di Crank-Nicolson.

Per il potenziale a doppia buca, si è osservato che la particella oscilla tra le due buche quando il potenziale è basso, mentre rimane parzialmente confinata nella buca di partenza quando il potenziale è alto. Si è anche studiata la frequenza di oscillazione della particella in funzione dei parametri del potenziale, trovando che la frequenza è dominata dall'incertezza e non mostra un andamento chiaro.

Il metodo di Crank-Nicolson si è perciò rivelato efficace per la simulazione dell'equazione di Schrödinger in una dimensione, permettendo di studiare il comportamento di una particella in diversi potenziali. Tuttavia, ulteriori studi sono necessari per comprendere meglio l'andamento della frequenza di oscillazione nel caso del potenziale a doppia buca.

A Evoluzione temporale e valori di aspettazione

Data l'equazione di Schrödinger

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

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

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