

Meccanica quantistica su MATLAB

L'obiettivo della nostra relazione è lo studio di alcuni problemi di meccanica quantistica con l'utilizzo di MATLAB. Il metodo di quantizzazione più comune di un sistema classico, e anche quello su cui basiamo la nostra analisi, è la quantizzazione canonica, per la quale le parentesi di Poisson classiche della meccanica hamiltoniana vengono sostituite con regole di commutazione. Il sistema dinamico è rappresentato da un vettore di stato, mentre le osservabili classiche, come posizione, momento ed energia, sono rappresentate da operatori che, agendo sul vettore di stato, lo proiettano su uno dei loro possibili autovettori; l'autovalore corrispondente costituisce il risultato della misura.

Con tale formulazione, emergono dalla non commutabilità degli operatori il principio di indeterminazione di Heisenberg e la natura solo probabilistica dei risultati delle misure, ma viene preservata la struttura simplettica della meccanica classica, proprietà che ha permesso lo sviluppo di alcuni algoritmi (tra cui quello di operator splitting) per la risoluzione numerica dei problemi.

Un sistema quantistico è governato dall'equazione di Schrödinger, che nella forma indipendente dal tempo fornisce i possibili livelli energetici del sistema:

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$$

mentre nella forma dipendente dal tempo ne descrive l'evoluzione temporale:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = \hat{H}|\psi\rangle$$

dove $|\psi\rangle$ è il vettore di stato e \hat{H} l'operatore hamiltoniano.

Proiettando queste equazioni sulla base delle posizioni, si ottiene:

$\langle x|\psi\rangle \rightarrow \psi(x)$ che prende il nome di funzione d'onda

$$\langle x|H|\psi\rangle = \langle x|\frac{p^2}{2m} + V|\psi\rangle \rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) + V(x)\psi(x)$$

Si nota dunque quanto l'operatore hamiltoniano sia centrale in questo tipo di descrizione: in particolare la definizione del termine di energia cinetica costituito dal laplaciano, che non è diagonale sulla base delle posizioni, richiede un'attenta analisi.

Inoltre, gli operatori e gli stati della meccanica quantistica vivono in uno spazio, detto spazio di Hilbert, di dimensione infinita, così come infiniti sono i punti dell'asse reale. Per uno studio numerico al computer si rende quindi necessario un processo di discretizzazione di tali operatori e di riduzione al finito: daremo particolare enfasi agli accorgimenti e agli inevitabili errori che questo comporta.

Per maggiore chiarezza espositiva, la relazione è suddivisa in quattro sezioni:

- Costruzione dell'operatore laplaciano per diverse condizioni al bordo;
- Diagonalizzazione dell'hamiltoniana e livelli energetici;
- Evoluzione temporale;
- Approfondimento personale;

Ognuna di esse inizia con un'introduzione teorica, cui seguono analisi svolte al computer corredate da immagini e programmi utilizzati.

1 Discretizzazione del Laplaciano

In Meccanica Quantistica l'operatore associato all'energia cinetica di una particella sulla base delle posizioni è definito come: $\hat{T} = \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta$, ossia coincide, a meno di una costante, all'operatore Laplaciano.

A livello computazionale, per la costruzione degli operatori bisogna tenere conto della discretizzazione dell'asse reale, che per ovvi motivi non può essere trattato come continuo: si può considerare dunque un reticolo di N punti con passo reticolare a .

Procediamo ora alla costruzione del Laplaciano, che in una dimensione corrisponde alla derivata seconda della funzione, quindi data una funzione $f(x)$ possiamo trovare la sua derivata seconda dallo sviluppo di Taylor in un intorno destro e sinistro del punto considerato:

$$f(x \pm a) \cong f(x) \pm af'(x) + \frac{1}{2}a^2 f''(x) + o(a^2)$$

Così facendo sommando le due espressioni troviamo la derivata seconda della funzione nel punto x in relazione ai soli valori della funzione stessa in x e $x \pm a$:

$$f''(x) \cong \frac{1}{a^2} (-2f(x) + f(x+a) + f(x-a))$$

Dai passaggi precedenti si intuisce già l'importanza della scelta del passo reticolare a , difatti uno sviluppo di Taylor approssima tanto meglio una funzione quanto più rimaniamo vicini al punto di partenza. Si potrebbe pensare allora di porre $a \rightarrow 0$ e raggiungere quindi una migliore accuratezza nel calcolo della derivata seconda, se però si mantiene il numero di punti N fissati questa operazione porterebbe ad una riduzione dell'intervallo di valutazione della funzione ($L = Na$). L'ideale è dunque porre $a \rightarrow 0$ e $N \rightarrow \infty$ in modo da mantenere L costante, questo è il cosiddetto limite del continuo, che verrà affrontato in seguito. L'equazione precedente può essere riscritta in forma matriciale e le condizioni al contorno che la rendono simmetrica sono:

- 1) Periodiche (PBC): si ottengono ponendo $f(x+L) = f(x)$;
- 2) Dirichlet (DBC): $f(0) = f(L+a) = 0$;
- 3) Neumann (NBC): $f_n = f\left(na + \frac{1}{2}a\right)$.

Nel risolvere l'equazione degli autovalori per il laplaciano nel discreto si ottiene la seguente uguaglianza:

$$\Delta u_{k,n} = \tilde{k}^2 u_{k,n}$$

Dove $\tilde{k} = 2 \sin \frac{k}{2}$ se consideriamo la forma tridiagonale del laplaciano.

A seconda delle condizioni al contorno utilizzate 'k' e u_k assumono una forma differente:

- PBC: $k = \frac{2\pi q}{N}$ $u_{k,n} = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i k n}$
- DBC: $k = \frac{\pi q}{N+1}$ $u_{k,n} = \sqrt{\frac{2}{N+1}} \sin k n$
- NBC: $k = \frac{\pi q}{N}$ $u_{k,n} = \sqrt{\frac{2}{N}} \cos(k(n - \frac{1}{2}))$

Nel limite del continuo si riproducono le formule della serie di Fourier del seno e del coseno, riscrivendo opportunamente il numero d'onda in relazione alla lunghezza di passo reticolare a in modo che abbia la dimensione corretta di $[L]^{-1}$. In questo modo si ottiene:

$$u_{k,n}(x) = u_{k,n}(na) = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i \frac{k}{a} na} \quad \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx} \quad \text{con } k = \frac{2\pi}{L} q$$

Si può dunque riscrivere la matrice laplaciana attraverso la seguente espressione, sviluppandola sulla base degli autovettori delle onde piane, ossia:

$$\Delta = \frac{F'}{N} \cdot G \cdot F$$

Dove F è una matrice ottenuta applicando la fast Fourier transform sulla matrice identità e F' è la sua trasposta coniugata. G è una matrice diagonale con autovalori ottenuti dalla forma conosciuta di \tilde{k}^2 . La discrete Fourier

transform è qua utilizzata per la forma degli autovettori nel caso di PBC. Se le condizioni al contorno sono invece DBC verrà utilizzata la sine Fourier transform e per le NBC la cosine Fourier transform.

Fino ad ora nel calcolo della derivata seconda è stata fatta un'approssimazione ai primi vicini, si può dunque fare un ragionamento analogo considerando anche i secondi vicini, i terzi e così via.

Si supponga per esempio di ricavare la derivata seconda considerando i punti vicini fino ai p-esimi, questa operazione corrisponde a scrivere:

$$2\alpha_0 f(x) + \alpha_1 [f(x+a) + f(x-a)] + \alpha_2 [f(x+2a) + f(x-2a)] + \dots = \sum_{j=0}^p \alpha_j [f(x+ja) + f(x-ja)]$$

$$\cong -a^2 [f''(x) + O(a^{2p})]$$

Dove gli α_j sono degli opportuni pesi che vengono scelti in modo tale che per $a \rightarrow 0$, sviluppando le funzioni fino all'ordine $O(a^{2p})$, sopravvive solo il termine $-a^2 f''(x)$ più un termine $a^2 O(a^{2p})$.

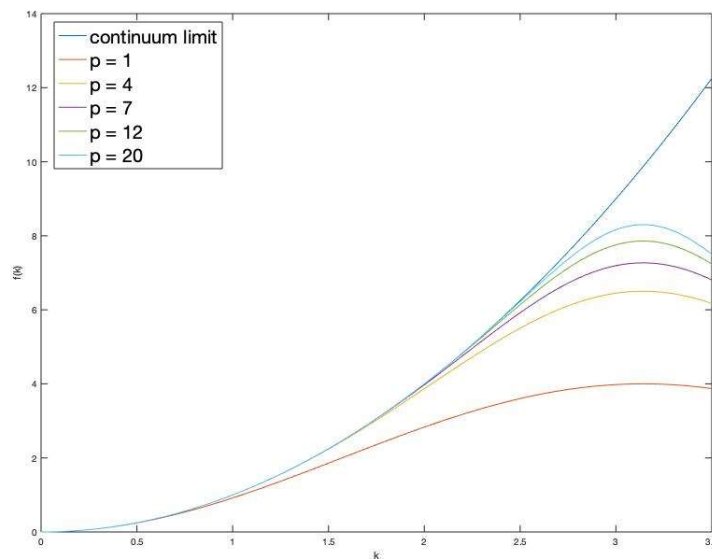
Il problema equivale a risolvere $M\alpha = b$ ovvero:

$$\begin{pmatrix} 2 & 2 & 2 & \dots & 2 \\ 0 & 1 & 2^2 & \dots & p^2 \\ 0 & 1 & 2^4 & \dots & p^4 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ 0 & 1 & 2^{2p} & \dots & p^{2p} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$$

Risolto il sistema, si può scrivere la matrice del Laplaciano, che per $p \neq 1$ risulta essere multidiagonale.

L'approssimazione che porta più errori è quella della forma di \tilde{k} , che dipende infatti dal grado dello sviluppo a cui si è arrivati nella costruzione della matrice laplaciana. Nel caso multidiagonale però, si osserva che sostituendo al posto della funzione l'onda piana, si ottiene una serie di coseni, che all'ordine uno si riportano alla forma scritta in precedenza $\tilde{k} = 2 \sin \frac{k}{2}$.

Ciò che però sappiamo dalla teoria è che nel limite del continuo $\tilde{k} = k$, ed è perciò possibile confrontare la differenza dell'espressione ottenuta per i k per diversi ordini di sviluppo. Nell'esempio che segue si utilizzano le 'PBC' come condizioni al contorno.



Si può osservare come al crescere di p (che corrisponde ad un laplaciano di ordine $2p + 2$) l'approssimazione multidiagonale si avvicini al limite del continuo.

2 Diagonalizzazione dell'Hamiltoniana

Una volta risolto il problema della costruzione del laplaciano discreto è possibile trovare gli autovalori e gli autovettori. Infatti, l'operatore hamiltoniano si scrive nel seguente modo:

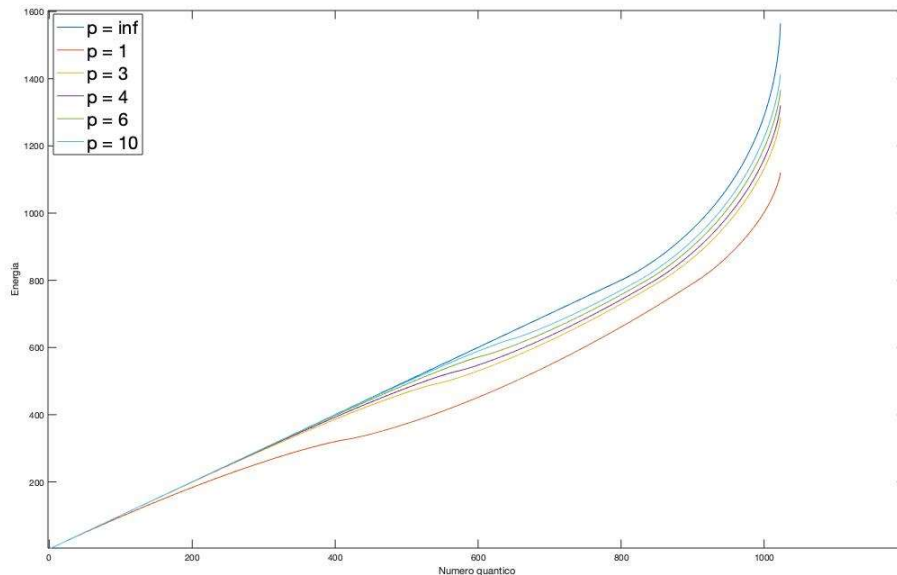
$$H = -\frac{1}{2a^2} \Delta + V$$

Dove V è una matrice diagonale nella rappresentazione della posizione. Una volta nota la forma del potenziale è dunque possibile risolvere computazionalmente il problema agli autovalori.

2.1 Oscillatore armonico

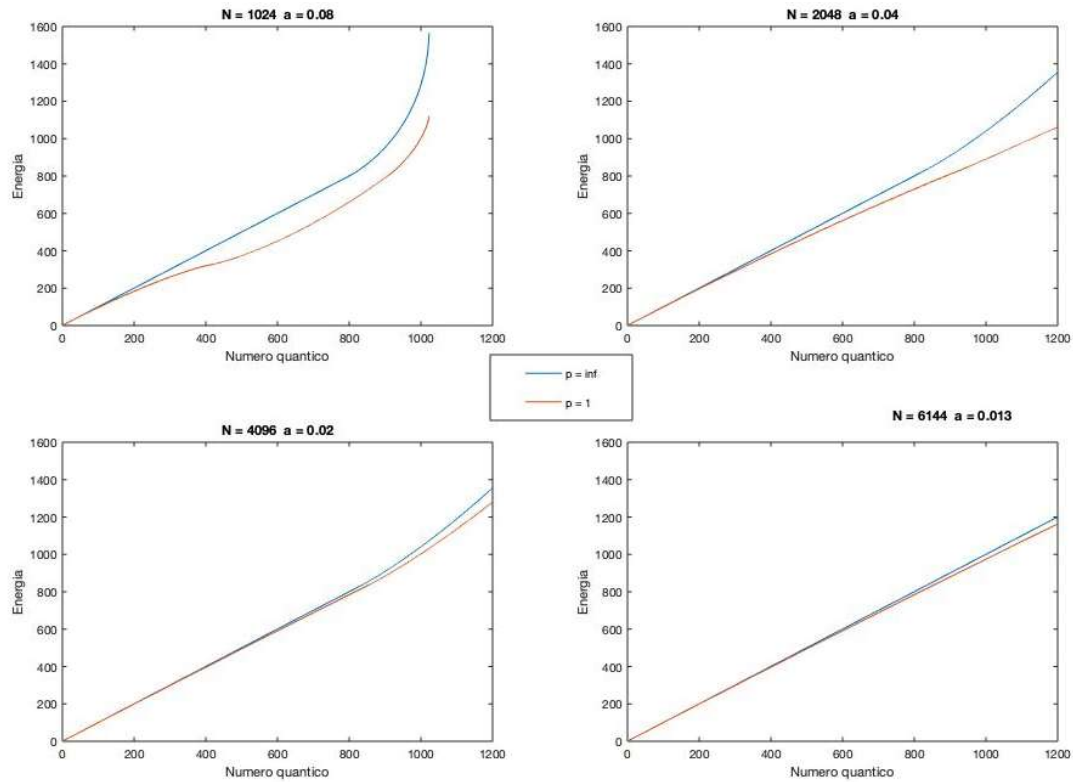
Vediamo dunque come primo esempio quello dell'oscillatore armonico, ossia il caso in cui il potenziale abbia la forma: $V = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$ (porremo $m = \omega = 1$). Il grado di accuratezza delle soluzioni dipende ovviamente da quanto la discretizzazione del laplaciano si avvicini al limite del continuo, e dunque ci aspettiamo che in generale l'utilizzo della FFT con ordine dello sviluppo del laplaciano 'infinito' sia l'approssimazione migliore a parità di passo reticolare e numero di punti del reticolo.

Nel grafico seguente riportiamo gli autovalori per un oscillatore armonico con 'PBC', comparando i risultati ottenuti per diversi ordini di sviluppo.



Come ci aspettavamo all'aumentare di p l'approssimazione si avvicina a quella attesa analiticamente. Si noti l'andamento inizialmente lineare che diventa poi simil-parabolico a causa delle condizioni al bordo.

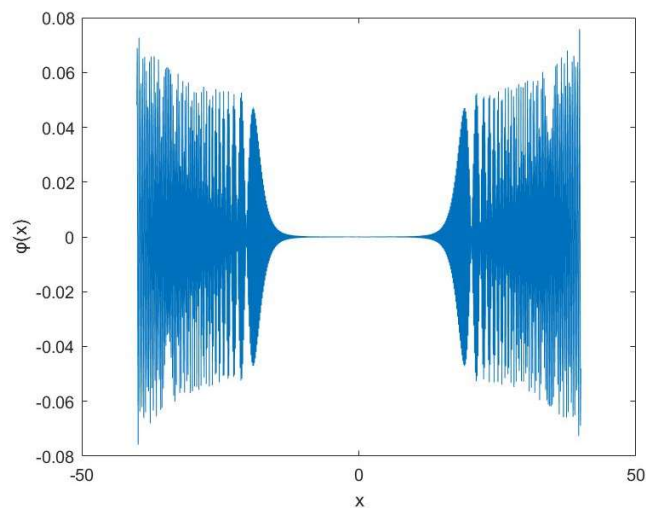
Ci si può chiedere inoltre cosa accadrebbe se si tenesse $p = 1$ aumentando invece il numero dei punti e allo stesso tempo diminuendo proporzionalmente il passo reticolare. Ciò viene analizzato nel grafico che segue:



Ci sono due osservazioni da fare: in primo luogo si nota come nell'avvicinarsi al limite del continuo, il laplaciano tridiagonale sia sempre più vicino al risultato ottenuto con $p = \text{inf}$. È possibile osservare anche come la linearità si mantenga per numeri quantici più grandi, poiché disponendo di un numero maggiore di punti N la matrice diagonalizzata è più grande, e gli effetti di bordo si fanno sentire per livelli energetici più alti.

Per quanto riguarda le autofunzioni risulta interessante andare a osservare quelle con numero quantico n grande. In questi casi per la scelta del reticolo fatto, si osservano due eventi, il primo è il cosiddetto cut-off ultravioletto, ossia le oscillazioni della funzione sono più piccole rispetto al passo del reticolo e il secondo è il cut-off infrarosso dovuto alle condizioni di bordo imposte nel problema.

Si riporta il grafico della funzione d'onda per $n = 900$:



2.2 Limite semiclassico

È interessante andare a verificare il limite semiclassico o principio di corrispondenza, che afferma che per numeri quantici elevati un sistema quantistico assume comportamenti tendenti al caso classico.

Per esempio, considerando l'oscillatore armonico, si può confrontare la distribuzione di probabilità quantistica di trovare la particella lungo l'asse x (modulo quadro della funzione d'onda) con la probabilità classica.

Nel caso classico la probabilità $\rho(x)dx$ di trovare la massa fra x e $x + dx$ è proporzionale al tempo impiegato per attraversare quella regione, ossia inversamente proporzionale alla velocità, espressa in funzione di x :

$$\rho(x)dx \propto \frac{dx}{v(x)}$$

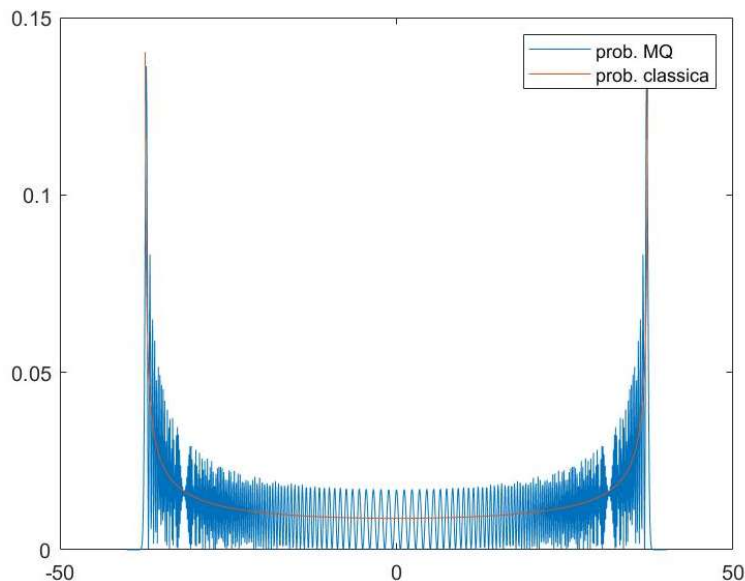
Dato che $v(t) = x_0\omega \cos(\omega t) = \omega\sqrt{x_0^2 - x_0^2 \sin^2(\omega t)}$ si può riscrivere la densità di probabilità come:

$$\rho(x)dx \propto \frac{1}{\sqrt{x_0^2 - x^2}}$$

Con x_0 punto di massima oscillazione.

Per fare un confronto è stata presa l'autofunzione per $n = 700$ con corrispondente autovalore $E_{700} = 700,5$ (con $\omega = 1$ e $\hbar = 1$), mentre per l'analogo oscillatore classico è stato preso un oscillatore con ampiezza massima x_0 in modo che dia lo stesso valore di energia del caso quantistico, ovvero è stato trovato imponendo $\frac{1}{2}x_0^2 = E_{700}$ con costante elastica $k = 1$.

Si riporta il grafico con il confronto tra le due distribuzioni di probabilità:

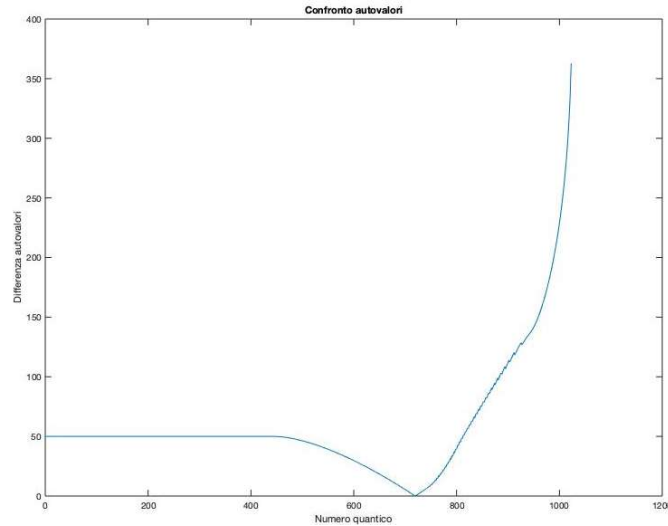


Si osserva che effettivamente la densità di probabilità quantistica segue quella classica, da notare inoltre che nonostante nel caso quantistico si abbia una distribuzione di probabilità su tutto l'asse reale (in realtà in questo caso delimitata tra -40 e 40 per la scelta del reticolo), la probabilità quantistica di trovare la particella al di fuori della regione dell'oscillatore classico (-37.4 e + 37.4) è fortemente soppressa.

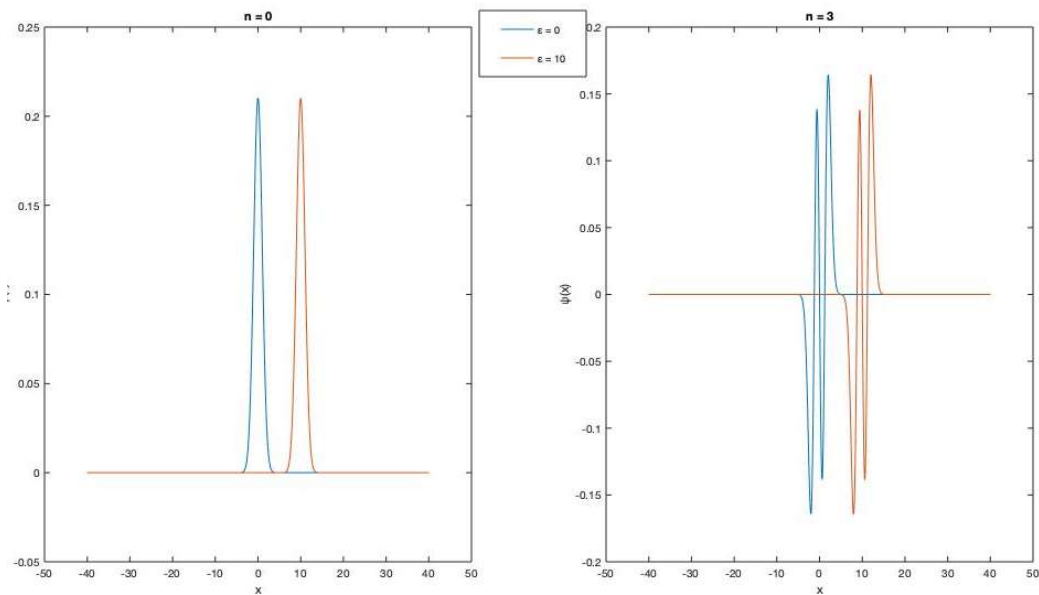
Bisogna ricordare che questo limite è stato ottenuto analizzando un caso con numero quantico grande, se per esempio si facesse il confronto per il caso $n = 0$ si otterrebbe una distribuzione di probabilità classica simile alla precedente mentre per quella quantistica si avrebbe una probabilità maggiore al centro del reticolo.

2.3 Oscillatore con campo elettrico

Vediamo ora un altro esempio, ossia il caso di una particella soggetta ad un potenziale V tale che $V = \frac{1}{2}x^2 - \varepsilon x$, situazione fisicamente rappresentata da un oscillatore armonico immerso in un campo elettrico uniforme. Tale hamiltoniana equivale a quella di un oscillatore armonico traslato in $X_0 = \varepsilon$ e con autovalori $E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) - \frac{\varepsilon^2}{2}$. Infatti, risolvendo l'equazione agli autovalori per $\varepsilon = 10$ e riportando a grafico la differenza in valore assoluto tra la serie con $\varepsilon = 0$ (campo elettrico spento) e con $\varepsilon = 10$ otteniamo:



Prima che gli effetti al bordo diventino preponderanti (da $n \approx 420$ in poi) otteniamo il risultato atteso, ossia $E_n(\varepsilon = 0) - E_n(\varepsilon = 10) = 50$; verifichiamo inoltre che le autofunzioni siano le stesse ma traslate per $n=0$ e $n=3$:

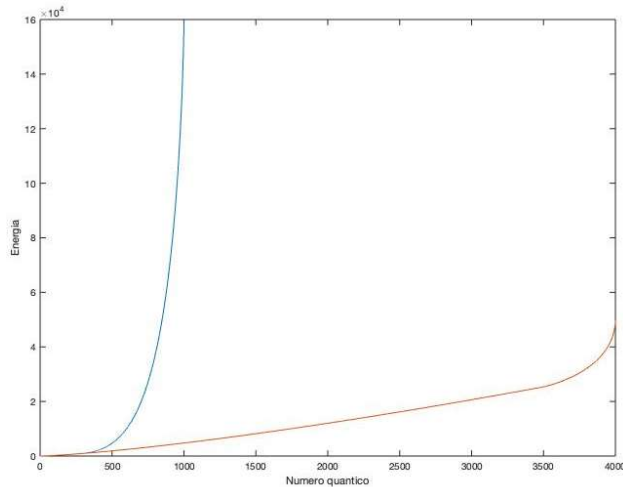


2.4 Oscillatore quartico

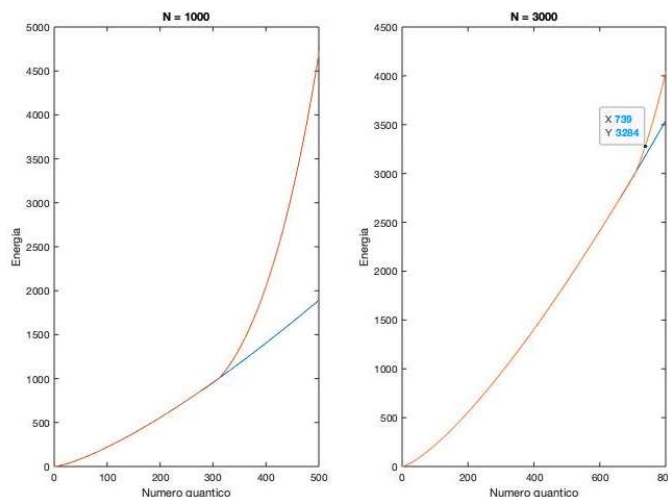
Analizziamo ora il caso dell'oscillatore quartico, ossia un sistema in cui il potenziale è $V = x^4/24$. Come nel caso dell'oscillatore armonico è possibile utilizzare il programma *diagonalization* per ottenere gli autovalori attraverso la diagonalizzazione dell'hamiltoniana. Poiché però non conosciamo una soluzione analitica è utile pensare ad un metodo ulteriore di calcolo, in modo tale da poter confrontare i risultati. Per esempio, possiamo definire due operatori a e a^\dagger , detti di 'creazione' e di 'distruzione' tali che

$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$ e $a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$, dove n indica l'autostato dei due operatori. La costruzione dal punto di vista computazionale è molto semplice, in quanto a è una matrice con \sqrt{n} sulla prima diagonale superiore, e a^\dagger è per definizione la sua trasposta coniugata. Dati questi due operatori, valgono altre due relazioni: $\hat{x} = \frac{a+a^\dagger}{\sqrt{2}}$ e $\hat{p} = -i\frac{a-a^\dagger}{\sqrt{2}}$ e dunque nel caso dell'oscillatore quartico: $H = \frac{\hat{p}^2}{2} + \frac{\hat{x}^4}{24}$. Diagonalizzando poi questa hamiltoniana si potrà verificare la bontà dei due metodi.

Si ottengono dunque i seguenti risultati:



Si può notare come l'accordo sia molto buono solamente fino a $n = 450$ circa, mentre successivamente gli autovalori calcolati con i due metodi sono totalmente diversi. Si può dunque provare ad aumentare il numero N della diagonale con cui si è costruito l'operatore a e vedere se l'accordo cresce:



È chiaro come all'aumentare di N il distacco tra le due curve si sposti più avanti. In generale si nota quindi che il metodo della costruzione della hamiltoniana attraverso il laplaciano discreto è più efficiente nella risoluzione del problema dell'oscillatore quartico.

3 Evoluzione temporale

La meccanica quantistica è una teoria predittiva in quanto l'evoluzione temporale di un sistema quantistico è interamente determinata da un operatore unitario S che, applicato agli stati fisici di un sistema, ne restituisce l'evoluto temporale

$$|\psi(t)\rangle = S(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle$$

L'analogo quantistico delle leggi del moto classico è l'equazione di Schrödinger, che espressa in termini dell'operatore S :

$$i \frac{\partial}{\partial t} S(t, t_0) = H(t) S(t, t_0)$$

la cui soluzione per una hamiltoniana indipendente dal tempo con la convenzione $\hbar = 1$ è

$$S(t, t_0) = \exp -i(t - t_0) H$$

Dal punto di vista computazionale, dal momento che con un calcolatore non si può studiare un sistema a tempo continuo, si utilizza un incremento di tempo discreto, che possiamo identificare con τ . Inoltre, l'operatore hamiltoniano H è rappresentato da una matrice di dimensione finita.

3.1 Operator splitting

Uno degli algoritmi utili per risolvere l'equazione di Schrödinger è quello di operator splitting, che riprende gli algoritmi simplettici tipici delle ODE. Tale analogia è possibile grazie alla struttura simplettica degli operatori con cui è costruita la meccanica quantistica, secondo la quantizzazione canonica.

Sia data una Hamiltoniana del tipo $H = T + V(x)$ e l'operatore di evoluzione temporale $U(t) = e^{-iHt}$. Allora, se consideriamo intervalli di tempo discreti $\tau = t/n$, possiamo approssimare U come $\tilde{U}(t) \approx [\tilde{U}(\tau)]^n$, con $\tilde{U}(\tau)$ dato da:

$$\tilde{U}(\tau) = e^{-iV\tau/2} e^{-iT\tau} e^{-iV\tau/2} \approx U(\tau)(1 + O(\tau^3))$$

In questo modo, si evita di dover calcolare l'esponentiale dell'operatore hamiltoniano, in quanto i termini di potenziale sono già diagonali, mentre quello di energia cinetica, data una griglia uniforme, può essere calcolato tramite la FFT, in modo che all'esponente compaia di nuovo una matrice diagonale:

$$\tilde{U}(\tau) = e^{-iV\tau/2} F^{-1} e^{-i\frac{k^2}{2}\tau} F e^{-iV\tau/2}$$

Dove k^2 è la matrice che ha sulla diagonale il quadrato dei numeri d'onda, dipendenti dalle condizioni al bordo. Poiché si tratta di un algoritmo simplettico del secondo ordine, l'errore che si commette per piccoli τ è dell'ordine di τ^3 , perciò l'algoritmo si rivela particolarmente efficiente e preciso per N grande e τ molto piccolo.

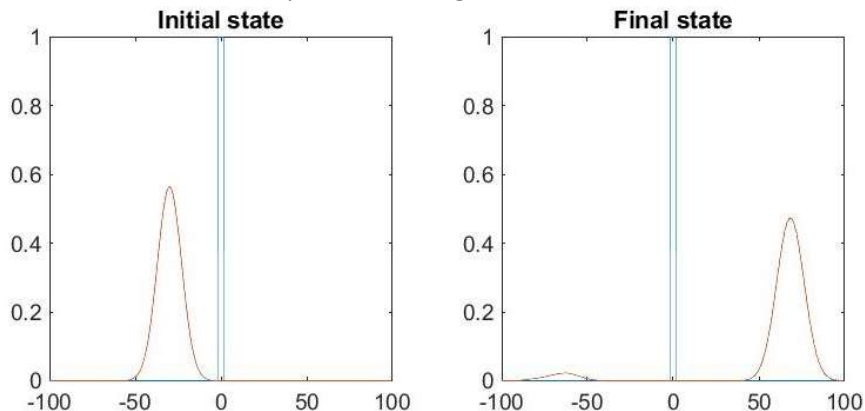
Nel programma *tempEvol* è stato implementato ed è possibile utilizzarlo con l'opportuna scelta dell'input.

3.2 Barriera di potenziale

Studiamo ora il problema della barriera di potenziale con il programma *tempEvol*. Come primo esempio consideriamo una barriera di potenziale con altezza 1 e una funzione d'onda iniziale

$\psi_0(x) = e^{kix} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}}$ con i seguenti valori dei parametri: $x_0 = -30$, $\sigma = 10$, $k_0 = 2$; quindi con un'energia media $E = 2$, maggiore del valore della barriera di potenziale.

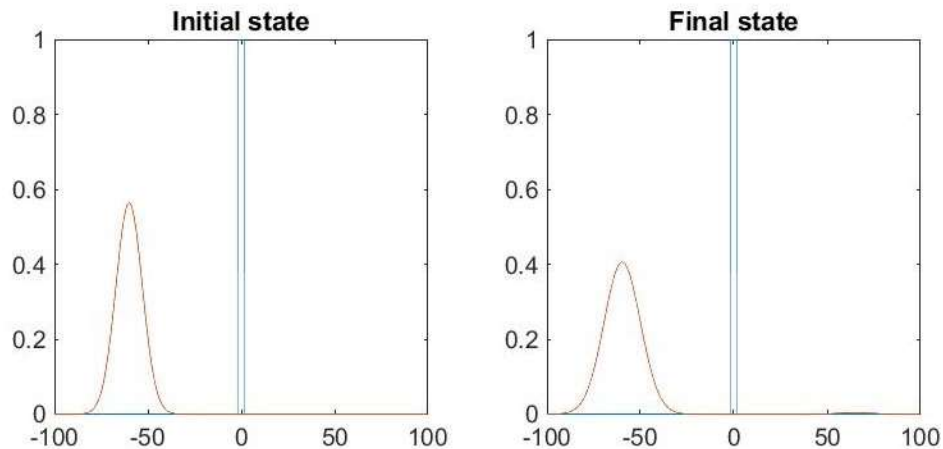
Riportiamo in un grafico la distribuzione di probabilità negli stati iniziale e finale ($t = 50$).



Si può osservare dal grafico che la probabilità che la particella sia trasmessa oltre la barriera di potenziale è molto maggiore rispetto alla probabilità che venga riflessa; ci troviamo quindi in uno stato di scattering. Per una descrizione più quantitativa calcoliamo (nello stato finale) la probabilità di trasmissione (ptQ) e riflessione (prQ):
 $ptQ = 0.9469$; $prQ = 0.0531$

Analizziamo ora il caso in cui la particella abbia un'energia minore del valore della barriera di potenziale; cambiamo quindi il parametro iniziale che caratterizza la quantità di moto della particella, ovvero la fase della funzione d'onda, in modo che l'energia media della particella sia di circa 0.7 ($x_0 = -60$, $\sigma = 10$, $k_0 \cong 1.2$).

I grafici risultanti sono i seguenti:



Si nota che nello stato finale, la probabilità che la particella sia stata riflessa è molto elevata. Analizziamo quantitativamente questi valori e confrontiamo i risultati ottenuti con una distribuzione di probabilità classica. Immaginiamo quindi un ensemble di particelle con energia media

$$E = \langle \psi_0 | H | \psi_0 \rangle = 0.703$$

e deviazione standard

$$\sigma = \sqrt{\langle \psi_0 | H \times H | \psi_0 \rangle - E^2} = 0.084$$

con $|\psi_0\rangle$ che in rappresentazione delle coordinate caratterizza la funzione d'onda normalizzata nello stato iniziale. Dopo aver calcolato autovettori e autovalori della hamiltoniana, e la distribuzione di probabilità dell'energia della particella iniziale, possiamo ricavare i valori che rappresentano la frazione di particelle dell'ensemble che ha superato la barriera e quella che invece è stata riflessa da essa; rispettivamente

$$pt = 5.6584 \times 10^{-4} \quad pr = 0.9994$$

Confrontiamo questi valori con le probabilità quantistiche.

$$ptQ = 0.0093 \quad prQ = 0.9907$$

Nonostante la probabilità di trasmissione ptQ sia piccola anche nel caso del sistema quantistico, risulta molto maggiore rispetto alla probabilità di trasmissione classica pt . Questo dimostra il fenomeno tipicamente quantomeccanico noto come "effetto tunnel".

3.3 Trasmissione e riflessione di un'onda piana

Fino ad ora abbiamo considerato l'evoluzione temporale di un pacchetto gaussiano, in presenza di una barriera di potenziale. Poiché un pacchetto è ottenuto dalla sovrapposizione di onde piane con diverso numero d'onda, è lecito chiedersi come evolva un'onda piana. In particolare, studiamo il caso della riflessione e trasmissione di un'onda piana per diversi valori di k .

$$\text{Dato un potenziale } V = \begin{cases} V_0 & \text{se } x^2 < b^2 \\ 0 & \text{se } x^2 > b^2 \end{cases}$$

La funzione d'onda che descrive il sistema all'esterno della barriera sarà del tipo:

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & \text{se } x < b^2 \\ Ce^{ikx} + De^{-ikx} & \text{se } x > b^2 \end{cases}$$

con le opportune condizioni al bordo e di normalizzazione.

Se V è pari, la relazione tra i coefficienti è la seguente:

$$\begin{bmatrix} C \\ B \end{bmatrix} = S \begin{bmatrix} A \\ D \end{bmatrix} \text{ con } S = \begin{bmatrix} \tau & \rho \\ \rho & \tau \end{bmatrix}$$

Per la conservazione della corrente di probabilità S è unitaria e vale $|\rho|^2 + |\tau|^2 = 1$, dove $R = |\rho|^2$ e

$T = |\tau|^2$ sono i coefficienti di riflessione e di trasmissione. Per un potenziale pari e condizioni al bordo periodiche si ottengono le seguenti relazioni:

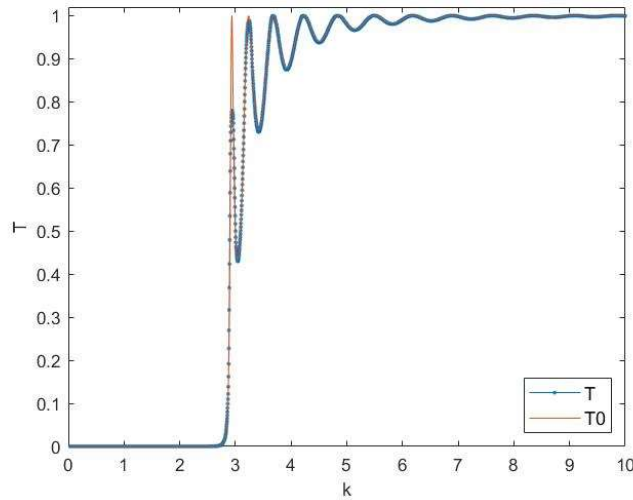
$$\begin{aligned} \tau &= \frac{1}{2}(e^{2i\xi^+} + e^{2i\xi^-}) \\ T &= |\tau|^2 = \cos^2(\xi^+ - \xi^-) \\ e^{ikL + 2i\xi^\pm} &= 1 \end{aligned}$$

Dove $L = Na$ è la lunghezza della griglia e ξ^\pm sono coefficienti reali, a cui corrispondono rispettivamente autofunzioni pari e dispari. Tali coefficienti dipendono da k, in particolare data la relazione $E = k^2/2$, con E autovalori dell'hamiltoniana, si trova:

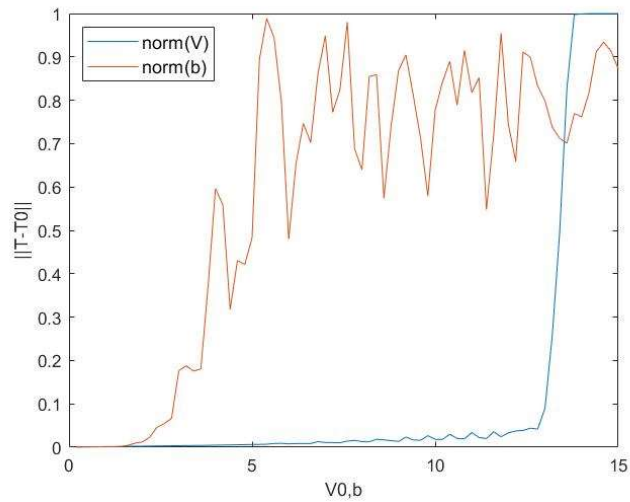
$$\xi^\pm = -\frac{L\sqrt{2E_{n^\pm}}}{2} + \pi n^\pm$$

Dove n sono numeri interi, indici del corrispondente autovalore. Da ξ^\pm è poi possibile ricavare T in funzione di k, come implementato nella funzione *Tcoeff*.

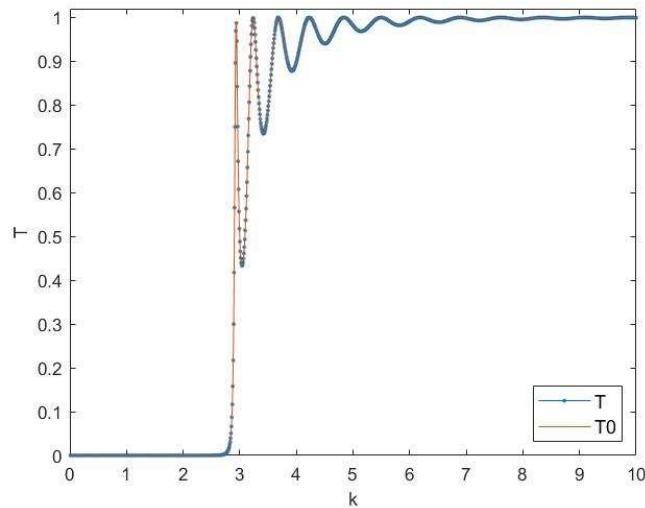
Poiché quello della barriera di potenziale è un problema noto, è possibile confrontare il risultato ottenuto da *Tcoeff* con quello esatto (T0). Ad esempio, per $b = V = 2$, $a = 0.1$, $N = 1024$ il risultato è il seguente:



Come previsto, poiché k è una misura dell'energia dell'onda, all'aumentare di k aumenta anche la probabilità di trasmissione, e dunque T, fino a tendere a 1. Riguardo agli errori, laddove si hanno oscillazioni più rapide per T, il risultato esatto e quello di *Tcoeff* mostrano una certa discrepanza. Plottando la norma infinito di T-T0 in funzione di b e V, ponendo l'altro parametro uguale a 1, si nota come questa aumenti all'aumentare dei due valori: per b in modo più irregolare, per V in modo lineare fino a un valore di soglia, oltre cui diverge.



Il motivo è legato alla forma dei coefficienti ξ^\pm , in cui i valori di n^\pm sono limitati tra 0 e N per una grid discreta e finita. Per ridurre l'errore è necessario quindi aumentare il valore di N (idealmente, dovrebbe tendere a infinito), diminuendo al contempo quello di a per mantenere costante la porzione di asse considerata. Ad esempio, se calcoliamo T con gli stessi valori di b e V di prima, ma ponendo $N = 8 \cdot 1024$, $a = 0.04$, otteniamo:



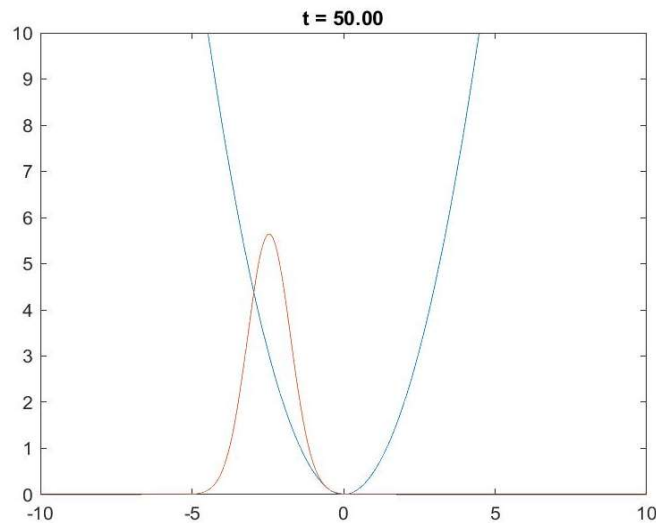
L'accordo con il calcolo esatto è molto maggiore e si può notare anche visivamente. Per avere una misura più quantitativa ora $||T - T_0|| = 0.019$, mentre nel caso precedente $||T - T_0|| = 0.22$, con una differenza di un fattore 10.

3.4 Oscillatore armonico

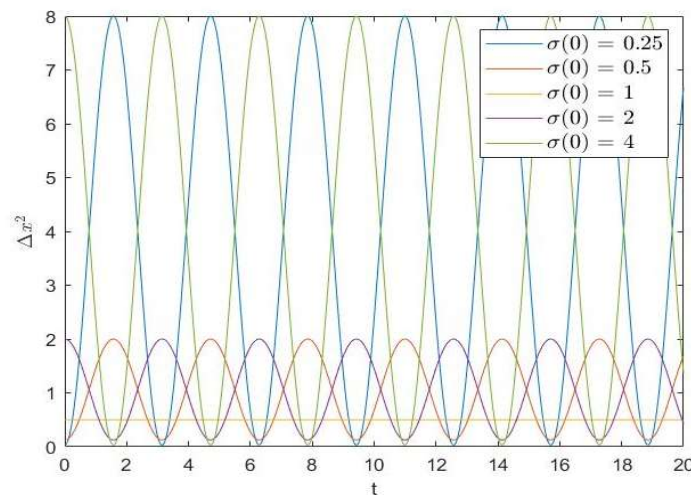
Stati coerenti

Si analizza ora l'evoluzione temporale di un oscillatore armonico quantistico. In particolare, in presenza di questo potenziale è possibile costruire stati coerenti: pacchetti d'onda di minima indeterminazione che non si allargano nel tempo, e tali per cui il centro del pacchetto oscilla con il periodo dell'oscillatore armonico classico. In pratica, sono autostati dell'operatore di distruzione che corrispondono allo stato fondamentale di oscillatore armonico traslato sia nella posizione che nell'impulso.

Costruiamo quindi la funzione d'onda di uno stato coerente nel seguente modo: $\psi_0 = e^{kix} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}}$; con $x_0 = -2$, $\sigma = 1$, $k_0 = 2$. Si può verificare direttamente che questo sia uno stato coerente utilizzando il programma *tempEvol* e osservando la sua evoluzione temporale, di cui di seguito riportiamo il grafico nello stato finale



Alternativamente, si può verificare che la larghezza della gaussiana, che caratterizza l'indeterminazione nella posizione dello stato, rimanga costante per uno stato coerente; utilizziamo quindi il programma *sigmacfr* per studiare l'evoluzione temporale dell'indeterminazione Δx^2 per diversi valori iniziali della σ , e verifichiamo che per $\sigma = 1$, lo stato è coerente. Per sua definizione, $\Delta x^2(0) = \sigma^2/2$. Riportiamo di seguito il grafico:



Verifica del teorema di Ehrenfest per l'oscillatore armonico

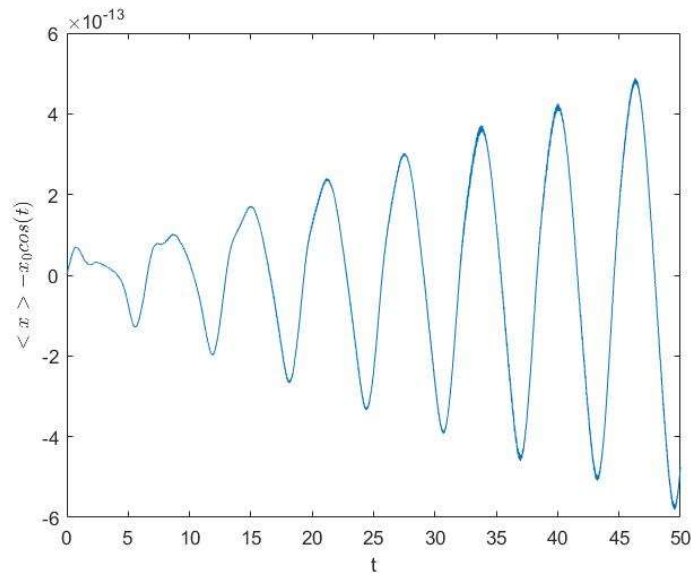
Il teorema di Ehrenfest costituisce un importante legame tra meccanica quantistica e classica, in quanto afferma che i valori medi delle osservabili seguono le leggi del moto classiche. Ricorrendo alla rappresentazione di Heisenberg (per cui gli operatori dipendono dal tempo mentre gli stati non variano), per l'operatore posizione si ha:

$$\frac{dx}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [x, H] + \frac{\partial x}{\partial t}$$

Procediamo alla sua dimostrazione per l'oscillatore armonico; in tal caso, risolvendo l'equazione per uno stato con impulso nullo, si ha:

$$\langle \psi | x(t) | \psi \rangle = \langle \psi | x(0) | \psi \rangle \cos(\omega t)$$

La relazione può essere verificata numericamente, plottando la differenza tra il valore teorico e quello trovato. Utilizzando il programma *Ehrenfest* per lo stato fondamentale, con $\langle \psi | x(0) | \psi \rangle = -3$, si nota che l'errore è dell'ordine di $e-13$ e tende ad aumentare periodicamente col tempo, a causa dell'accumulazione di errori di roundoff sulla funzione d'onda; per tempi ragionevoli resta comunque trascurabile.

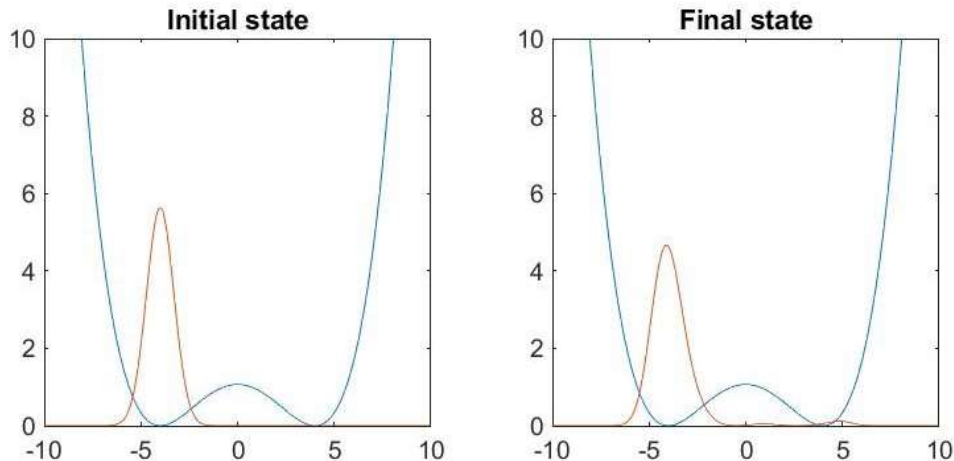


3.5 Doppia buca

Un altro esempio di effetto tunnel è visibile nella doppia buca di potenziale, ovvero un potenziale della forma $V(x) = (x^2 - 16)^2/240$.

Classicamente, una particella posta in uno dei due minimi ($x = \pm 4$) con energia nulla e dispersione inferiore all'altezza del gradino, non sarebbe in grado di superarlo e sarebbe quindi confinata in una metà della buca. Nel caso quantistico invece, la probabilità di transizione da un minimo all'altro della buca non è nulla a causa della dispersione della funzione d'onda associata e dell'effetto tunnel. Inoltre, tale probabilità aumenta al diminuire della distanza tra i minimi, proprietà non spiegabile classicamente. È possibile osservare qualitativamente il risultato trovando l'evoluto temporale dello stato iniziale con *tempEvol*.

Utilizzando la funzione d'onda iniziale $\psi_0 = e^{-\frac{(x-4)^2}{2}}$, si ottengono i seguenti grafici.



Si può osservare, ad esempio dopo $t=50$, una probabilità non nulla di trovare la particella oltre il massimo relativo di potenziale centrato in zero, quantitativamente
 $p(x < 0) = 0.9735$ $p(x > 0) = 0.0265$

4 Evoluzione temporale di un sistema in 2D

Per affrontare lo studio di un sistema quantistico in più dimensioni, è necessario introdurre il concetto di prodotto diretto: dati due spazi vettoriali H e K , lo spazio prodotto diretto $H \otimes K$ è l'insieme degli stati $\psi = \sum_{i,j} c_{ij} |e_i\rangle \otimes |f_j\rangle$ tali che $|e_i\rangle$ sono una base di H e $|f_j\rangle$ sono una base di K . Per una particella lo spazio degli stati fisici che la descrive è uno spazio di Hilbert; lo spazio che invece caratterizza gli stati fisici di una particella in due dimensioni, è il prodotto diretto degli spazi che descrivono le singole dimensioni. La funzione d'onda il cui modulo al quadrato rappresenta la densità di probabilità di trovare la particella nella posizione \vec{x} è $\langle \vec{x} | \psi \rangle = \psi(x_1, x_2) = \psi(\vec{x})$.

L'evoluzione temporale di un sistema 2-dimensionale è generata da una hamiltoniana $H = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{x})$ con P e V operatori 2-dimensionali.

Per discretizzare, è necessario considerare due insiemi finiti di punti (di dimensione N_x e N_y) con i quali si costruisce un reticolo bidimensionale in corrispondenza del quale si calcola la funzione d'onda del sistema. La funzione d'onda è quindi rappresentata da una matrice

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_{x_1 y_1} & \psi_{x_1 y_2} & \cdots & \psi_{x_1 y_{N_y}} \\ \psi_{x_2 y_1} & \ddots & \cdots & \psi_{x_2 y_{N_y}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_{x_{N_x} y_1} & \psi_{x_{N_x} y_2} & \cdots & \psi_{x_{N_x} y_{N_y}} \end{pmatrix}$$

Come nel caso monodimensionale, si può far evolvere un sistema applicando l'operatore di evoluzione temporale, con la differenza che nel caso bidimensionale è caratterizzato da una hamiltoniana che risulta una matrice di dimensione $N_x * N_y \times N_x * N_y$. Questo semplice approccio consiste quindi nel calcolare l'esponenziale di questa matrice, e comporta dunque un costo computazionale molto elevato, poiché per evitare un'eccessiva approssimazione dovuta alla discretizzazione, è necessario prendere un numero di punti di campionamento sufficientemente grande.

Per aumentare l'efficienza nonostante N_x e N_y grandi, si può estendere il metodo di 'operator splitting' visto nel caso 1D al caso bidimensionale: discretizzando il tempo ($\tau = t/n$), si approssima U come $\tilde{U}(t) \approx [\tilde{U}(\tau)]^n$, con

$$\tilde{U}(\tau) = e^{-iV\tau/2} (F_x^{-1} e^{-i\frac{k_x^2}{2}\tau} F_x) (F_y^{-1} e^{-i\frac{k_y^2}{2}\tau} F_y) e^{-iV\tau/2}$$

dove F_x agisce sulle diverse x a y costante, cioè sulle colonne di ψ , e F_y agisce invece sulle y , a x costante.

L'ordine di applicazione di F_x e F_y non è rilevante poiché gli operatori momento presi lungo le dimensioni x e y commutano tra di loro.

L'evoluzione temporale di un sistema quantistico bidimensionale è implementata nel programma *tempEvol2D*.

4.1 Oscillatore armonico 2D

Come primo esempio, consideriamo una particella soggetta ad un potenziale di oscillatore armonico bidimensionale isotropo: con la convenzione $m = \omega = 1$, la hamiltoniana risulta

$$H = \frac{\hat{p}_x^2}{2} + \frac{\hat{p}_y^2}{2} + \frac{\hat{x}^2}{2} + \frac{\hat{y}^2}{2}$$

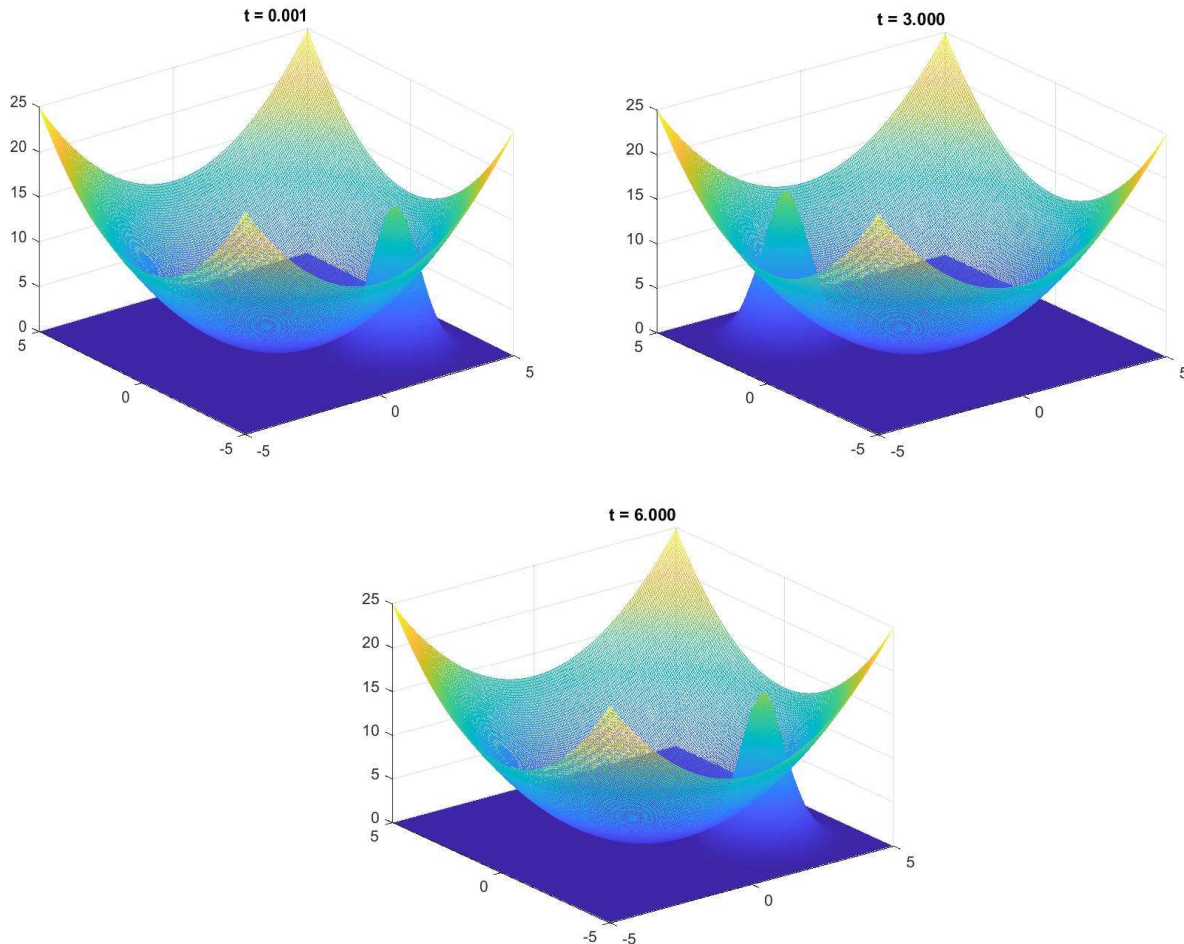
Essendo separabile, la funzione d'onda che soddisfa l'equazione agli autovalori $H\psi = E\psi$ può essere fattorizzata nel prodotto delle funzioni d'onda delle singole dimensioni, $\psi(\vec{x})_{TOT} = \psi_x\psi_y$.

È possibile verificare la possibilità di costruire dei pacchetti d'onda che oscillino con la stessa frequenza dell'oscillatore armonico classico, e che non si allarghino nel tempo.

Esaminiamo l'evoluzione temporale di uno stato con funzione d'onda iniziale

$$\psi(\vec{x}) = e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma_x^2}} e^{-\frac{(y-y_0)^2}{2\sigma_y^2}}$$

con $(x_0, y_0) = (2.5, -2.5)$ e $\sigma_x = \sigma_y = 1$, con il programma tempEvol2D, di cui riportiamo una serie di screenshots in diversi tempi.



Dai grafici si osserva qualitativamente che dalla posizione iniziale ($t = 0.001$), lo stato raggiunge l'estremità opposta del potenziale ($t = 3$), per poi ritornare nella posizione di partenza ($t = 6$), senza l'allargamento della gaussiana.

4.2 Esperimento della doppia fenditura

L'esperimento della doppia fenditura svolse un ruolo fondamentale per la formulazione della meccanica quantistica, perché permise di dimostrare il dualismo onda-particella della materia e poiché fornì le basi per la comprensione della natura probabilistica dei fenomeni quantomeccanici. L'esperimento consiste nell'indirizzare una sorgente di luce (o una sorgente di particelle come elettroni) verso una barriera con due fenditure nel mezzo, così che per la natura ondulatoria della materia, si generano delle figure di interferenza sullo schermo ricevitore, non compatibili con un'interpretazione puramente particellare.

Utilizziamo dunque il programma *tempEvol2D* per compiere una simulazione qualitativa dell'esperimento; in particolare si osserva la formazione di queste figure di interferenza nella distribuzione di probabilità della posizione di una particella, a seguito del suo passaggio attraverso la doppia fenditura.

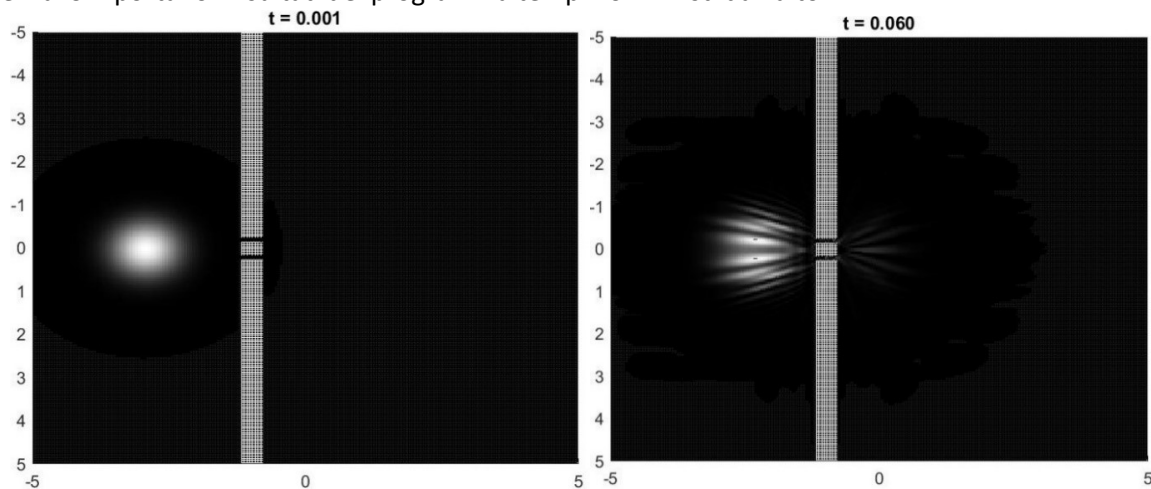
La funzione d'onda che rappresenta la particella è

$$\psi(\vec{x}) = e^{kix} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma_x^2}} e^{kiy} e^{-\frac{(y-y_0)^2}{2\sigma_y^2}}$$

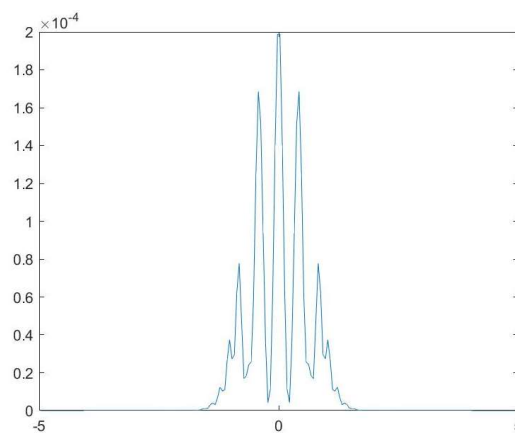
con $(x_0, y_0) = (-3, 0)$, $\sigma_x = \sigma_y = 0.6$, e $(k_{0x}, k_{0y}) = (30, 0)$; il potenziale utilizzato per ricreare la barriera con la doppia fenditura è il seguente

$$V(x, y) = \begin{cases} 5000 & \text{se } (x+1)^2 < 0.04 \text{ e } |y^2 - 0.04| > 0.02 \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases}$$

La larghezza delle fenditure è dell'ordine di $2\pi/k$, cioè la condizione necessaria per produrre una figura di interferenza. Si riportano i risultati del programma *tempEvol2D* visti dall'alto.



La particella inizialmente centrata in $x = -3$ e $y = 0$, si sposta lungo l'asse x fino a raggiungere la barriera di potenziale; si osserva che la distribuzione di probabilità della posizione della particella oltre la barriera di potenziale presenta delle figure di interferenza. In particolare, graficando i valori della distribuzione lungo la retta $x = 0.7$, si ottiene



che ricorda qualitativamente l'andamento oscillatorio esponenzialmente soppresso che si riscontra nell'esperimento della doppia fenditura.