Testo dell'esercizio

Si consideri la Hamiltoniana

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} - V(x)$$

con potenziale assegnato da

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{se } x < -b \\ 4/b^2 & \text{se } -b \leq x \leq b \\ 0 & \text{se } x > b \end{cases}$$

Sia $V0 = 4/b^2$. Siano:

$$\begin{cases} \text{ZonaI} & = \{x < -b\} \\ \text{ZonaII} & = \{-b \leq x \leq b\} \\ \text{ZonaIII} & = \{x > b\} \end{cases}$$

1. Diagonalizzare un'opportuna versione discreta di H con eig. Quindi cercare di estrarre il coefficiente di trasmissione dagli autovalore/vettori in funzione dell'energia o del numero d'onda, confrontando con il risultato analitico esatto.
2. Ripetere la procedura con un potenziale smooth come la barriera gaussiana e confrontare con il coefficiente di trasmissione calcolato come in classe (con il metodo dei pacchetti d'onda).

Come mai questo metodo non funziona con $V(x)$?

Primo punto

Introduzione teorica

Si vuole studiare il problema agli autovalori,dove si è posto $\hbar = 1$ e $m = 1$:

$$\mathcal{H}\psi = E\psi$$

Siano $k^2 = 2E$ e $q^2 = 2(E - V0)$. La soluzione analitica più generale è data da:

$$\psi_k(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & \text{in ZonaI} \\ \phi(x) & \text{in ZonaII} \\ Ce^{ikx} + De^{-ikx} & \text{in ZonaIII} \end{cases}$$

Non siamo per il momento interessati alla ZonaII, quindi indichiamo con $\phi(x)$

la $\psi_k(x)$ in tale zona, che a rigore sarebbe

$$\phi(x) = Ee^{iqx} + Fe^{-iqx}$$

Le costanti A, B, C, D sono determinate dalle condizioni di raccordo di continuità della funzione d'onda e della sua derivata nei punti $x = \pm b$.
Si osserverà che dalla diagonalizzazione della versione discreta della Hamiltoniana (vedi sezione apposita) risultano autofunzioni a parità definita (pari o dispari). Allora, senza perdita di generalità, si pone la ulteriore condizione di simmetria alle ψ_k, che porta:

$$\begin{cases} A = D, \quad B = C = (\tau + \rho)A & \text{per funzioni pari} \\ A = -D, \quad B = -C = -(\tau + \rho)A & \text{per funzioni dispari} \end{cases}$$

Per la conservazione del flusso di probabilità, si possono riscrivere nella seguente forma:

$$\begin{pmatrix} C \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tau & \rho \\ \rho & \tau \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A \\ D \end{pmatrix} = \quad (S) \cdot \begin{pmatrix} A \\ D \end{pmatrix}$$

Ove la matrice S è una matrice unitaria, ossia che verifica le condizioni:

$$\tau\rho^* + \tau^*\rho = 0 \quad , \quad |\tau|^2 + |\rho|^2 = 1$$

(Si è indicato con z^* il numero complesso coniugato di z). Segue immediatamente che:

$$|\tau \pm \rho|^2 = |\tau|^2 + |\rho|^2 + \tau\rho^* + \tau^*\rho = |\tau|^2 + |\rho|^2 + 0 = 1$$

Cioè $\tau \pm \rho$ differiscono per una fase:

$$|\tau \pm \rho|^2 = 1 \Rightarrow (\tau \pm \rho) = e^{2i\theta^\pm}$$

Si osservi che poichè A, B, C, D dipendono dagli autostati ψ_k, anche le fasi $\theta^\pm$ dipenderanno dall'autovalore k.
Si vuole quindi cercare una stima numerica di $\theta\pm$ per determinare τ da:

$$(\tau \pm \rho) = e^{2i\theta^\pm} \Rightarrow \tau = 1/2(e^{2i\theta^+} + e^{-2i\theta^-})$$
$$\Rightarrow \tau^2 = \sin^2(\theta^+ - \theta^-)$$

(due conti per dimostrarlo plis)
Il coefficiente di trasmissione sarà qundi dato da:

$$T = \tau^2$$

Stima delle Fasi

Si vuole stimare numericamente le fasi $\theta^\pm$, a partire dagli autovettori calcolati dalla $\mathcal{H}$ discretizzata. Gli autovettori sono combinazioni pari e dispari di onde piane con la stessa frequenza, quindi corrispondono rispettivamente a coseni e seni.

$$\psi_k^{odd} = \begin{cases} A\sin(kx + \theta_k^-) & \text{in ZonaI} \\ A\sin(kx + \theta_k^+) & \text{in ZonaIII} \end{cases} \qquad \psi_k^{even} = \begin{cases} A\cos(kx + \theta_k^-) & \text{in ZonaI} \\ A\cos(kx + \theta_k^+) & \text{in ZonaIII} \end{cases}$$

Primo Metodo Si vuole fittare i dati con seni e coseni di opportuna frequenza k e fase da determinare (parametro di fit). Si definiscono allora:
In ZonaI $= \{x < -b\}$, sia

$$f_k^{even}(y) = \int_{-\infty}^{-b} |A\cos(kx+y) - \psi_k^{even}(x)| \mathrm{d}x$$

$$f_k^{odd}(y) = \int_{-\infty}^{-b} |A\sin(kx+y) - \psi_k^{odd}(x)| \mathrm{d}x$$

In ZonaIII $= \{x < -b\}$, sia

$$g_k^{even}(y) = \int_{b}^{+\infty} |A\cos(kx+y) - \psi_k^{even}(x)| \mathrm{d}x$$

$$g_k^{odd}(y) = \int_{b}^{+\infty} |A\sin(kx+y) - \psi_k^{odd}(x)| \mathrm{d}x$$

Si ha immediatamente che:

$$\theta_k^- = y \text{ t.c. } f_k(\theta_k^-) = 0$$

$$\theta_k^+ = y \text{ t.c. } g_k(\theta_k^+) = 0$$

Si troverà che:

$$\theta_k^+ = -\theta_k^- = \theta_k$$

Quindi:

$$\psi_k^{odd} = \begin{cases} A\sin(kx-\theta_k) & \text{in ZonaI} \\ A\sin(kx+\theta_k) & \text{in ZonaIII} \end{cases} \quad \psi_k^{even} = \begin{cases} A\cos(kx-\theta_k) & \text{in ZonaI} \\ A\cos(kx+\theta_k) & \text{in ZonaIII} \end{cases}$$

Appendice: Discretizzazione numerica

Si vuole anzitutto discretizzare lo spazio si lavoro. Dall'intera retta reale $\mathbb{R}$ si passa a un segmento chiuso $[-L, L]$ per un opportuno parametro $L > 0$, dopodichè scelto opportunamente un numero di punti N in cui suddividere l'intervallo in un reticolo di passo $1/N$, si definisce la griglia:

$$\mathcal{G} = \{x_j \in [-L, L] : x_j = -L + 2j/N, \quad j = 0, ..., N\}$$

Fissato $b > 0$ parametro del potenziale, siano nb e mb gli indici per cui

$$x_{mb} = -b \quad , \quad x_{nb} = b$$

Si è scelto di lavorare in condizioni di periodicità, quindi un'approssimazione numerica del laplaciano $-\frac{d^2}{dx^2}$ sarà data da (come visto a lezione):

$$T = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & \cdots & 0 & -1 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ -1 & 0 & \cdots & 0 & 2 & -1 \end{pmatrix}$$

Un'approssimazione del potenziale sarà invece data da una matrice diagonale con i valori che la funzione $V(x)$ assume sui punti della griglia:

$$V = \text{diag}(V(x_1), \cdots, V(x_N))$$

Allora l'approssimazione discreta della Hamiltoniana $\mathcal{H}$ sarà data dalla matrice:

$$H = T + V \approx \mathcal{H}$$

Sia ora $M0$ la matrice degli autovettori di H e $E0$ il vettore degli autovalori di H
Degenerazione spezzata dalla discretizzazione
Gli sbatti dei teta fuori dalla griglia Gg -> fittare perchè i teta sono fuori dalla griglia Phil dice: autovalori leggermente diversi fanno due griglie leggermente diverse (scattering phase-shift)

Secondo punto

1. descrivere metodo pacchetti
2. IMPLEMENTAZIONE: minimalwms con integrazione funzione d'onda destra e sinistra dopo tempo T0 -> Occhio che non progava il pacchetto ma si scioglie (risolvere)
3. plot frame interazione pacchetto
4. plot coeff trasmissione metodo punto 1 vs pacchetti (qualche punto)

CONCLUSIONI

1. plot pacchetto onda con barriera quadrata
2. per dire che c'è il residuo dovuto a discontinuità