

Esercizio 1

Danilo Bondi, Filippo Quarenghi

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 $V_0 = 4/b^2$. Siano:

$$\begin{cases} \text{Zona I} & = \{x < -b\} \\ \text{Zona II} & = \{-b \leq x \leq b\} \\ \text{Zona III} & = \{x > b\} \end{cases}$$

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:

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

Siano $k^2 = 2E$ e $q^2 = 2(E - V_0)$. La soluzione analitica più generale è data da:

$$\psi_k(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & \text{in Zona I} \\ \phi(x) & \text{in Zona II} \\ Ce^{ikx} + De^{-ikx} & \text{in Zona III} \end{cases}$$

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). Il problema consiste in due onde una progressiva e una regressiva, che perturbate dalla barriera vengono entrambe riflesse e trasmesse e interferiscono l'una con l'altra e con se stesse. Per la simmetria del problema, il coefficiente di riflessione e di trasmissione relativi all'onda progressiva e quella regressiva sono gli stessi. Si può allora parametrizzare ciascuna onda come:

$$Ae^{ikx} + Be^{-ikx} = Ae^{ikx} + A(\rho + \tau)e^{-ikx}$$

Dove ρ e τ sono i coefficienti il cui modulo quadro dà, rispettivamente il coefficiente di riflessione e trasmissione. In forma matriciale:

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

Ove la matrice S è una matrice unitaria, che di conseguenza 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:

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

Allora, senza perdita di generalità, si pone la ulteriore condizione di simmetria alle ψ_k , che porta:

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

Si osservi che poichè A, B, C, D dipendono dagli autostati ψ_k , anche le fasi θ^\pm dipenderanno dall'autovalore k .

Si vuole quindi cercare una stima numerica di θ^\pm per determinare τ da:

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

Il coefficiente di trasmissione sarà quindi dato da:

$$T = \tau^2$$

Stima delle Fasi

Si vuole stimare numericamente le fasi θ^\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.

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

Metodo: Si considerino gli autostati della Hamiltoniana

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

Si pongano ora le condizioni di periodicità ai bordi della scatola $x = \pm L$

$$\psi_k^{odd}(L) = \psi_k^{odd}(-L) \quad , \quad \psi_k^{even}(L) = \psi_k^{even}(-L)$$

che portano a:

$$A \sin(-kL + \theta_k^-) = A \sin(kL + \theta_k^+) \Rightarrow -kL + \theta_k^- = kL + \theta_k^+ + 2n\pi$$

$$A \cos(-kL + \theta_k^-) = A \cos(kL + \theta_k^+) \Rightarrow -kL + \theta_k^- = kL + \theta_k^+ + 2n\pi$$

ossia,

$$\theta_k^- - \theta_k^+ = 2kL + 2n\pi$$

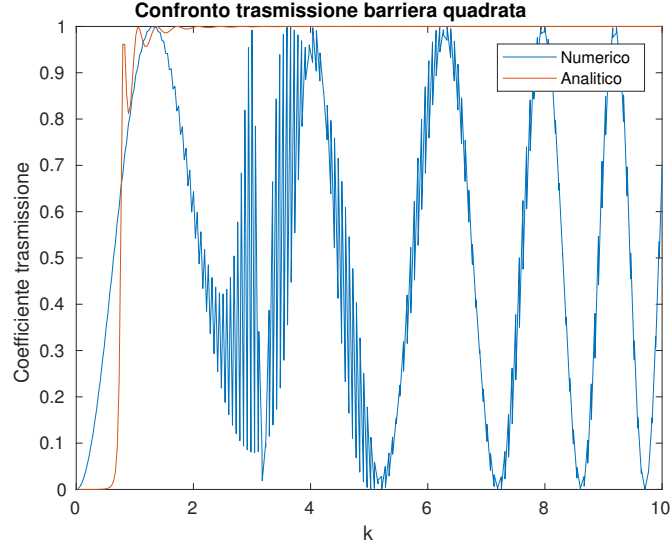
quindi il coefficiente di trasmissione risulta essere:

$$T(k) = \tau^2(k) = \sin^2(\theta_k^+ - \theta_k^-) = \sin^2(\theta_k^- - \theta_k^+) = \sin^2(2kL + 2n\pi)$$

$$T = \sin^2(2kL)$$

Risultati

Di seguito il plot del coefficiente di trasmissione calcolato numericamente contro il risultato analitico



Appendice: Discretizzazione numerica

Si vuole anzitutto discretizzare lo spazio di 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:

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

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

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

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:

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

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

Di seguito un plot di alcuni autostati di H . Si noti l'alternanza di funzioni pari e dispari

Secondo punto

Metodo dei pacchetti d'onda

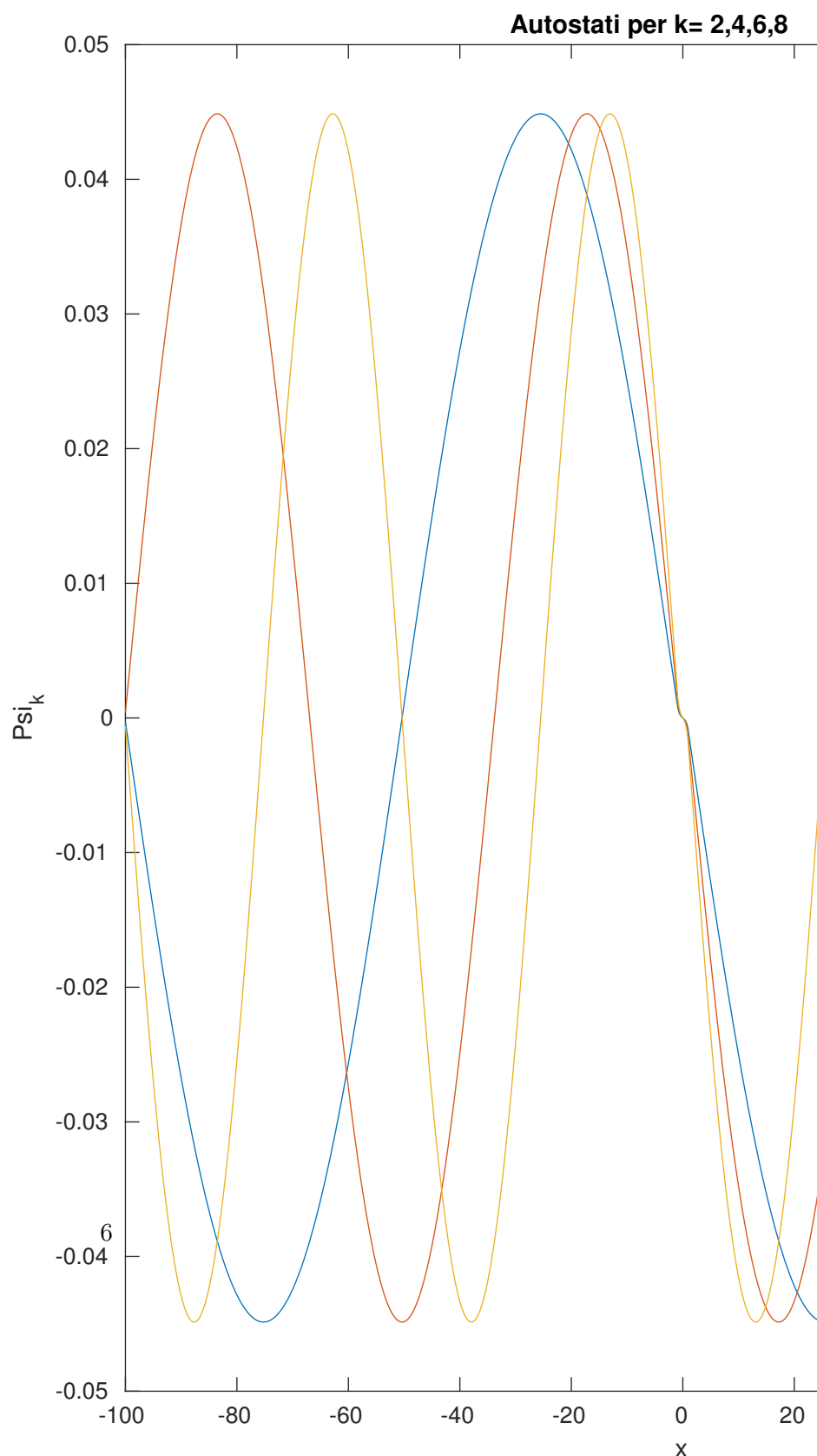
Il metodo consiste nel far evolvere temporalmente un dato iniziale a pacchetto d'onda nel potenziale stabilito e nel calcolare, dopo un opportuno tempo t_0 , la porzione di funzione d'onda che è oltre la barriera. Il tempo t_0 deve essere tale da permettere il passaggio del pacchetto oltre la barriera, ma evitare riflessioni ai bordi della scatola $[-L, L]$. In tal caso, supponendo un pacchetto incidente da sinistra a destra, il coefficiente di trasmissione sarà semplicemente

$$T = \frac{\int_b^L |\psi(x, t_0)|^2 dx}{\int_{-L}^L |\psi(x, t_0)|^2 dx}$$

Si vuole confrontare questo metodo con il metodo trovato al punto precedente, per una barriera di potenziale di tipo gaussiano.

Essendo un pacchetto d'onda una sovrapposizione lineare di più onde stazionarie, non possiede un momento ben definito. Il confronto verrà allora fatto tra il valor medio del momento di un dato pacchetto, contro il corrispettivo autovalore del metodo precedente (o quello che più gli si avvicina). Si possono riscontrare le seguenti difficoltà:

- pacchetti poco localizzati presentano problemi nella riflessione contro la barriera e nell'autointerferenza con i bordi della scatola
- pacchetti troppo localizzati presentano valori del momento molto dispersi a causa del principio di indeterminazione: questo introduce errori di approssimazione maggiori nel valutarne il valor medio



Di seguito i risultati.

Confronto dei due metodi

Conclusioni

Il metodo dei pacchetti d'onda non funziona con il potenziale a barriera quadrata del punto 1, a causa della discontinuità del potenziale. La discontinuità impedisce una buona riflessione del pacchetto d'onda incidente, risultando nella permanenza di parte dell'onda nella zona della barriera per un lungo tempo. Questo altera il calcolo dell'integrale della definizione di T perchè viene omessa una parte importante dell'onda. Il tempo che l'onda residua nella barriera impiega a spegnersi è molto maggiore del tempo che il resto del pacchetto impiega ad arrivare ai bordi della scatola e riflettersi, interagendo con sè stesso. Il metodo risulta quindi inefficiente. Di seguito alcuni plot che mostrano quanto detto.

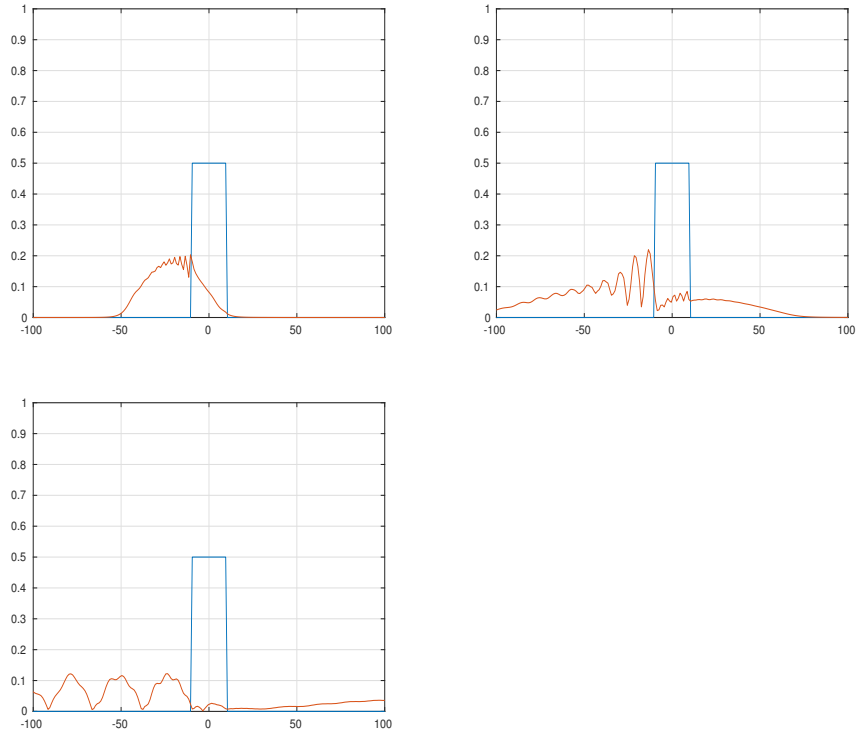


Figure 1: Plot a diversi istanti dell'evoluzione temporale