Soluzioni numeriche dell'equazione di Schrödinger non dipendente dal tempo

Tesi di laurea in Fisica

Stefano Romboni

Relatore: Dott. Claudio Bonati

Dipartimento di Fisica *Enrico Fermi* - Università di Pisa

Soluzione numerica

$$\boxed{-\frac{d^2u}{dx^2} + q(x)u = \lambda u, \quad u(a) = u(b) = 0}$$

$$\Downarrow$$

Per farlo si utilizza l'approssimazione a 3 punti e l'estrapolazione Richardson e si implementano tramite python.

$$\Downarrow$$

Suddividiamo l'intervallo $[a, b]$ in n sottointervalli e approssimiamo la derivata seconda con:

$$\boxed{u''_i = \frac{u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}}{h^2} + O(h^2), \quad h = \frac{b-a}{n}}$$

$$\Downarrow$$

$$KU = \lambda U, \quad \text{dove} \quad K = \frac{1}{h^2}T + Q$$

L'errore deve essere lineare in h^2, e un teorema ci dice che il suo andamento è:
$|\lambda_k - \Lambda_k^{(n)}| \leq Ck^4h^2, \quad \text{dove} \quad k = 1, \ldots, n-1.$

Soluzione numerica

$$U = \begin{pmatrix} U_1 \\ U_2 \\ \vdots \\ U_{n-1} \end{pmatrix}, \quad T = \begin{pmatrix} 2 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & & \ddots & & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ & & & -1 & 2 \end{pmatrix}, \quad Q = \begin{pmatrix} q_1 & & & \\ & q_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & q_{n-1} \end{pmatrix}.$$

$$\Downarrow$$

Si utilizza l'estrapolazione Richardson per aumentare ulteriormente la precisione numerica del nostro calcolo $G = g(h) + E(h)$, con g valore approssimato e $E(h)$ errore numerico

Se l'errore ha una dipendenza dal nostro parametro h del tipo $E(h) = ch^p$, con c e p costanti, allora l'approssimazione di Richardson può ridurre ulteriormente questo errore

$$\boxed{G = \frac{(h_1/h_2)^p g(h_2) - g(h_1)}{(h_1/h_2)^p - 1}}$$

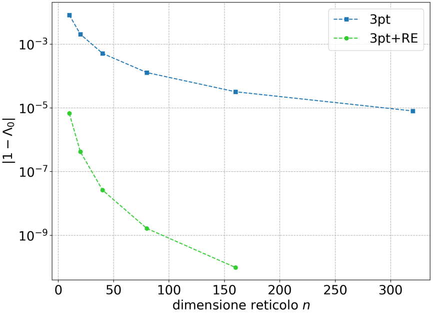
$$\Downarrow$$

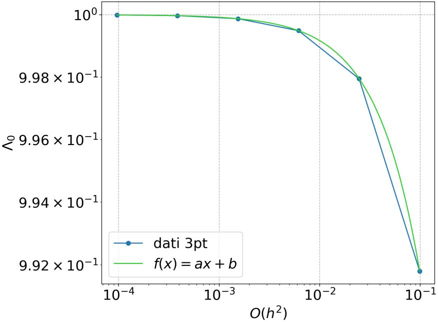
Nell'approssimazione di differenze centrali l'errore di troncamento è $E(h) = c_1 h^2 + c_2 h^4 + \dots$. Si elimina il termine dominante, ponendo p=2, e si ottiene un'accuratezza di $O(h^4)$.

Buca infinita

$$\boxed{H = \frac{p^2}{2m} + V(x), \quad \text{con} \quad V(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < \pi \\ \infty, & x < 0, x > \pi \end{cases}}$$

Poniamo $\hbar = m = 1$, e otteniamo $-u'' = 2\lambda u$, con condizioni al bordo di annullamento, $u(0) = u(\pi) = 0$. Il problema è risolvibile analiticamente e ha come soluzione: $2\lambda_n = (n+1)^2$.

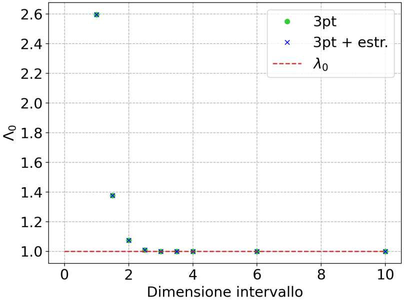


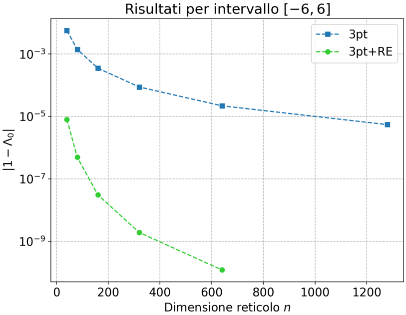


Oscillatore armonico

$$\boxed{H = \frac{p^2}{2m} + V(x), \quad \text{con} \quad V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2}$$

Poniamo $\hbar = m = \omega = 1$, e otteniamo $-u'' + x^2 u = 2\lambda u$, su un intervallo che teoricamente dovrebbe essere $(-\infty, +\infty)$, ma che noi prenderemo pari a $[-6, 6]$. Il problema è risolvibile analiticamente e ha come soluzione: $2\lambda_n = (1 + 2n)$.





Oscillatore anarmonico

$$\boxed{H = \frac{p^2}{2m} + V(x), \quad \text{con} \quad V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 + \frac{1}{2}gx^4}$$

Poniamo $\hbar = m = \omega = 1$, e otteniamo $-u'' + (x^2 + gx^4)u = 2\lambda u$, su un intervallo che teoricamente dovrebbe essere $(-\infty, +\infty)$, ma che noi prenderemo pari a $[-6, 6]$

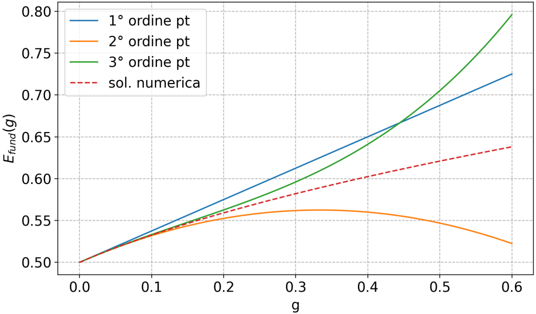
$$\Downarrow$$

La presenza di un g non nullo rafforza l'ipotesi di annullamento ai bordi

- No soluzione analitica
- No teoria perturbativa poichè g non è necessariamente "piccolo"

$$\Downarrow$$

$$\boxed{\text{Necessaria una soluzione numerica}}$$



Riferimenti

- Jhon D. Pryce, Numerical Solution of Sturm-Liouville Problems, Oxford Univ Pr (16 dicembre 1993).
- Jaan Kiusalaas, Numerical Methods in Engineering with Python 3, Cambridge Univ Pr, 3° edizione (21 gennaio 2013)
- Perturbation theory (quantum mechanics), en.wikipedia.org/wiki/Perturbation_theory_(quantum_mechanics)