

Indice

1	Propagazione del pacchetto d'onde	3
1.1	Introduzione	3
1.2	Risoluzione per rappresentazione su stati stazionari	4
1.3	Operatore evoluzione	5
1.4	Funzione d'onda nella rappresentazione degli impulsi	6
1.5	Pacchetto d'onde gaussiano ed evoluzione in potenziale nullo	8
1.6	Matrice di trasmissione, coefficienti di trasmissione e riflessione	11
1.7	Coefficiente di trasmissione per una barriera quadrata	13
2	Metodi numerici	17
2.1	Risoluzione numerica dell'equazione di Schrödinger	17
2.2	Risoluzione di un sistema $Ax = y$ con A matrice tridiagonale	20
2.3	Criteri per la scelta dei parametri di calcolo	22
2.4	Simulazione per un pacchetto d'onde gaussiano in potenziale nullo	26
2.5	Funzione d'onda nella rappresentazione dei momenti	31
3	Risultati	35
3.1	Barriera quadrata di potenziale	35
3.2	Doppia barriera quadrata	43
4	Conclusioni	51
A	Codici in MatLab	53
B	Dettagli di calcolo per il pacchetto gaussiano	59
C	Coefficiente di trasmissione per più barriere	61

Prefazione

In questa tesi discuteremo un metodo per la risoluzione numerica dell'evoluzione temporale di un pacchetto d'onde in Meccanica Quantistica per un sistema unidimensionale con potenziale indipendente dal tempo.

Nel primo capitolo esporremo alcuni concetti di Meccanica Quantistica che verranno utilizzati nei capitoli successivi. Troveremo la soluzione analitica dell'evoluzione in potenziale nullo di un pacchetto d'onde gaussiano, che sarà utilizzata nel secondo capitolo per effettuare delle verifiche sul metodo numerico che presenteremo.

Nel secondo capitolo esporremo un metodo per la risoluzione numerica dell'evoluzione di un pacchetto d'onde. Tale metodo sarà poi sottoposto a un test che consta in simulazioni-prova della propagazione di un pacchetto d'onde gaussiano; la soluzione ottenuta numericamente sarà così confrontata con la soluzione analitica, ricavata nel primo capitolo. Si presenterà in questo capitolo un ulteriore metodo numerico per calcolare l'evoluzione della funzione d'onda nella rappresentazione dei momenti da quella nella rappresentazione delle coordinate, ottenuta col primo metodo.

Nel terzo capitolo infine applicheremo i metodi numerici presentati nel secondo capitolo a due problemi di urto di un pacchetto gaussiano contro alcune barriere. Se ne discuteranno i risultati analizzando l'evoluzione delle distribuzioni di probabilità per le coordinate e per i momenti.

Capitolo 1

Propagazione del pacchetto d'onde

1.1 Introduzione

In Meccanica Quantistica l'evoluzione di un sistema fisico è descritta dalla **equazione di Schrödinger**:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r}, t) \psi(\mathbf{r}, t) \quad (1.1)$$

ove $\psi(\mathbf{r}, t)$ è la funzione d'onda, che specifica lo stato del sistema, e $V(\mathbf{r}, t)$ è il potenziale del sistema fisico. Dalle proprietà matematiche di questa equazione discende l'importante proprietà che data la funzione d'onda $\psi(\mathbf{r}, t_0)$ in un istante fissato t_0 , la funzione d'onda $\psi(\mathbf{r}, t)$ a qualsivoglia istante t è univocamente determinata. Per comodità di esposizione nel seguito porremo l'istante t_0 in cui è noto lo stato del sistema a $t_0 = 0$ e lo chiameremo *istante iniziale*. L'equazione (1.1) viene anche scritta spesso come

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = \mathcal{H}(t) \psi(\mathbf{r}, t) , \quad (1.2)$$

ove $\mathcal{H}(t)$ è l'operatore hamiltoniano dato

$$\mathcal{H}(t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}, t) . \quad (1.3)$$

In questa tesi esporremo un metodo numerico per un caso particolare della (1.1), quello per sistemi unidimensionali con potenziale indipendente dal tempo:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t) + V(x) \psi(x, t) . \quad (1.4)$$

In questo caso l'operatore hamiltoniano è

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) . \quad (1.5)$$

Si noti che a differenza del caso generale, l'operatore hamiltoniano non dipende dal tempo.

La difficoltà di calcolo della soluzione analitica della (1.4) dipendono essenzialmente dalla forma della funzione d'onda all'istante iniziale $\psi(x, 0)$ e dalla forma del potenziale $V(x)$.

1.2 Risoluzione per rappresentazione su stati stazionari

In questa sezione esporremo il metodo tradizionale con cui viene risolto il problema dell'evoluzione della funzione d'onda in un sistema unidimensionale con potenziale indipendente dal tempo. Esso consta nell'esprimere la soluzione $\psi(x, t)$ come una sovrapposizione di autostati dell'energia, che hanno la peculiarità di avere una evoluzione temporale matematicamente nota.

L'equazione (1.4) è lineare, per cui se $\psi_1(x, t)$ e $\psi_2(x, t)$ sono due soluzioni, lo è anche la loro combinazione lineare $\alpha\psi_1(x, t) + \beta\psi_2(x, t)$, con α e β numeri complessi. Si può sfruttare quindi questa proprietà per esprimere la soluzione $\psi(x, t)$ del problema, che a $t = 0$ è data dalla funzione d'onda iniziale del sistema, come combinazione lineare eventualmente infinita di funzioni $\varphi_k(x, t)$, ove k è un indice, la cui evoluzione temporale è nota.

Consideriamo un set particolare di funzioni, quelle che risolvono l'equazione differenziale

$$\mathcal{H}\varphi_k(x) = E_k\varphi_k(x) . \quad (1.6)$$

Le funzioni $\varphi_k(x)$ sono chiamate *stati stazionari*. Se all'istante t_0 lo stato del sistema è dato da $A\varphi_k(x)$ (ove A è una costante moltiplicativa), dalla (1.4) si ricava che l'evoluzione temporale è data da

$$Ae^{-\frac{iE_k}{\hbar}(t-t_0)}\varphi_k(x) . \quad (1.7)$$

Il modulo quadro di questa soluzione non varia nel tempo ed è costantemente eguale a $|\varphi_k(x)|^2$; per tale motivo queste funzioni sono dette stati stazionari.

Quindi un metodo per risolvere il problema dell'evoluzione della funzione d'onda consta essenzialmente in

1. Cercare l'insieme degli stati stazionari risolvendo **l'equazione agli autovalori**

$$\mathcal{H}\varphi_k(x) = E_k\varphi_k(x) . \quad (1.8)$$

2. Esprimere lo stato iniziale $\psi(x, 0)$ come la seguente sovrapposizione di autostati $\varphi_k(x)$ di energia:

$$\psi(x, 0) = \int g(k)\varphi_k(x)dk \quad (1.9)$$

ove l'integrale è esteso sull'insieme su cui varia l'indice k . La funzione $g(k)$ si ottiene proiettando lo stato iniziale $\psi(x, 0)$ sugli autostati $\varphi_k(x)$ con il seguente prodotto scalare:

$$g(k) = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_k^*(x)\psi(x, 0)dx . \quad (1.10)$$

3. L'evoluzione temporale $\psi(x, t)$ della funzione d'onda sarà data da:

$$\psi(x, t) = \int g(k)e^{-\frac{iE_k}{\hbar}t}\varphi_k(x)dk . \quad (1.11)$$

Questo modo di procedere per trovare la soluzione analitica dell'evoluzione temporale di una funzione d'onda non è sempre fattibile, in quanto coinvolge la risoluzione di una equazione differenziale e due operazioni di integrazione che possono presentare difficoltà notevoli. Nella sezione 1.5 è presentato un esempio pratico di risoluzione attraverso questi tre passaggi.

1.3 Operatore evoluzione

Discutiamo in questa sezione l'operatore evoluzione. Nella sezione 2.1 del prossimo capitolo si farà riferimento a questo operatore per ricavare il metodo di risoluzione numerica dell'equazione (1.4).

Consideriamo in generalità un sistema fisico tridimensionale con operatore hamiltoniano $\mathcal{H}(t)$ dipendente dal tempo ove l'evoluzione è regolata dalla (1.1). Definiamo **operatore evoluzione dall'istante t_0 all'istante t** un operatore $\mathcal{U}_{(t,t_0)}$ tale che applicato alla funzione d'onda all'istante t_0 restituisce la funzione d'onda evoluta all'istante t :

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \mathcal{U}_{(t,t_0)}\psi(\mathbf{r}, t_0) . \quad (1.12)$$

Dalla definizione se ne ricavano subito le seguenti proprietà:

1. L'operatore evoluzione è lineare Questa proprietà deriva direttamente dalla linearità dell'equazione di Schrödinger (1.1).
2. $\mathcal{U}_{(t_0,t_0)} = \mathcal{I}$, ove \mathcal{I} è l'operatore identità.
3. Sostituendo nell'equazione di Schrödinger (1.1) la funzione $\psi(\mathbf{r}, t)$ secondo la definizione (1.12) si giunge all'equazione

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{U}_{(t,t_0)} = \mathcal{H}(t)\mathcal{U}_{(t,t_0)} . \quad (1.13)$$

4. Dati tre istanti di tempo t_1, t_2 e t_3 si ha

$$\mathcal{U}_{(t_3,t_1)} = \mathcal{U}_{(t_3,t_2)}\mathcal{U}_{(t_2,t_1)} . \quad (1.14)$$

5. Da $\mathcal{U}_{(t_0,t_0)} = \mathcal{I}$ e la proprietà precedente si ha

$$\mathcal{U}_{(t_0,t)} = \mathcal{U}_{(t,t_0)}^{-1} . \quad (1.15)$$

6. Differenziando rispetto al tempo l'equazione di Schrödinger si ha che l'operatore evoluzione tra un istante t e l'istante $t + dt$ è

$$\mathcal{U}_{(t+dt,t)} = \mathcal{I} - \frac{i}{\hbar} \mathcal{H}(t)dt . \quad (1.16)$$

Per un sistema conservativo, ove quindi l'operatore hamiltoniano \mathcal{H} non dipende dal tempo, l'operatore evoluzione si può ricavare facilmente dalla (1.13); la soluzione è

$$\mathcal{U}_{(t,t_0)} = e^{-i\frac{(t-t_0)}{\hbar}\mathcal{H}} = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-i)^m}{m!} \left(\frac{t-t_0}{\hbar}\right)^m \mathcal{H}^m . \quad (1.17)$$

L'ultima eguaglianza discende dalla definizione di funzione di un operatore. Si sottolinea la questione importante che la (1.13) non si può risolvere come se fosse una equazione differenziale per funzioni; in altri termini l'operatore

$$e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \mathcal{H}(\tau) d\tau} \quad (1.18)$$

non è in generale la soluzione della (1.13). Questo perché in generale

$$\frac{d}{du} e^{A(u)} \neq \frac{dA(u)}{du} e^{A(u)} . \quad (1.19)$$

Dalla (1.17) si ricava che nel caso particolare di un sistema fisico conservativo l'operatore evoluzione $\mathcal{U}_{(t_0+\Delta t, t_0)}$ che fa evolvere il sistema da un generico istante t_0 per un lasso di tempo Δt non dipende da t_0 ma solo da Δt . Per semplicità di notazione definiremo

$$\mathcal{U}_{\Delta t} \stackrel{def}{=} \mathcal{U}_{(t_0+\Delta t, t_0)} = e^{-i \frac{\Delta t}{\hbar} \mathcal{H}} . \quad (1.20)$$

Dall'equazione (1.14) si ricava la seguente interessante proprietà:

$$\mathcal{U}_{\Delta t}^n = \mathcal{U}_{n\Delta t} . \quad (1.21)$$

Questa proprietà mostra che data la funzione d'onda iniziale $\psi(\mathbf{r}, 0)$, si può ottenere la funzione d'onda all'istante $t_n = n\Delta t$ attraverso la applicazione reiterata dell'operatore evoluzione.

Dalla equazione (1.17) si possono avere approssimazioni dell'operatore evoluzione. In particolare l'approssimazione al primo ordine per l'evoluzione nell'intervallo temporale $[t, t + dt]$ restituisce la (1.16).

1.4 Funzione d'onda nella rappresentazione degli impulsi

Nella prima sezione abbiamo mostrato che lo stato del sistema può essere descritto in un istante t da una funzione d'onda $\psi(x, t)$ delle coordinate. Lo stato del sistema può comunque essere descritto equivalentemente da una funzione d'onda $\tilde{\psi}(p_x, t)$ nella rappresentazione dei momenti. Tale rappresentazione si ottiene attraverso la trasformata di Fourier Quantistica:

$$\tilde{\psi}(p_x) = \mathcal{F}[\psi(x)](p_x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) e^{-ip_x x/\hbar} dx . \quad (1.22)$$

Si dimostra che per una data la funzione $\tilde{\psi}(p_x)$, la funzione d'onda $\psi(x)$ che la genera secondo la trasformazione (1.22) si ottiene attraverso un operatore, la **trasformata inversa di Fourier Quantistica**:

$$\psi(x) = \mathcal{F}^{-1}[\tilde{\psi}(p_x)](x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}(p_x) e^{ip_x x/\hbar} dp_x . \quad (1.23)$$

Poiché stiamo trattando il caso unidimensionale, "alleggeriremo" la notazione sostituendo il simbolo p_x con il simbolo p .

La definizione della (1.22) ha la seguente importante interpretazione fisica. Si consideri l'osservabile \mathcal{P}_x del momento lungo x . L'equazione agli autovalori per questa osservabile è, nella rappresentazione delle coordinate,

$$\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \rho_p(x) = p \rho_p(x), \quad (1.24)$$

ove $\rho_p(x)$ è l'autostato con momento ben definito p . La soluzione di questa equazione è

$$\rho_p(x) = A e^{ipx/\hbar} \quad p \in \mathbb{R}, \quad (1.25)$$

ove A è una costante moltiplicativa arbitraria; poniamo

$$A = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}. \quad (1.26)$$

Questa scelta fa sì che la norma della funzione trasformata $\tilde{\psi}(p)$ sia eguale alla norma della funzione trasformanda $\psi(x)$. Il generico autostato (1.25) per qualsivoglia p è detto *onda piana*.

Si dimostra che l'insieme degli $\rho_p(x)$ è una base ortonormale per lo spazio $L^2(\mathbb{R})$, per cui lo stato del sistema può essere rappresentato da una sovrapposizione lineare infinita di onde piane. Per ottenere tale rappresentazione si ricorre alla proiezione di $\psi(x)$ sugli autostati di \mathcal{P}_x , ovvero

$$(\rho_p(x), \psi(x)) = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho_p^*(x) \psi(x) dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) e^{-ipx/\hbar} dx, \quad (1.27)$$

che è proprio la trasformata di Fourier Quantistica definita all'inizio della sezione. Quindi *la trasformata di Fourier della funzione d'onda è la rappresentazione dello stato del sistema sulla base degli autostati dell'operatore \mathcal{P}_x* . Dai postulati della Meccanica Quantistica si ricava inoltre che $|\tilde{\psi}(p)|^2$ è la distribuzione di probabilità che un atto di misura sul sistema fisico restituisca l'autovalore p .

La trasformata di Fourier Quantistica definita nella (1.22) ha molte proprietà dal significato fisico notevole. Ne citiamo due:

- Chiamati σ_x lo scarto quadratico medio di $|\psi(x)|^2$ e σ_p lo scarto quadratico medio di $|\tilde{\psi}(p)|^2$, vale la disequazione

$$\sigma_x \sigma_p \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (1.28)$$

Tale importante disequazione è chiamata *principio di indeterminazione di Heisenberg*.

- La trasformata $\tilde{\psi}(p)$ di $\psi(x)$ ha la stessa norma di $\psi(x)$:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |\tilde{\psi}(p)|^2 dp. \quad (1.29)$$

Tale equazione è detta *formula di Parseval-Plancherel*.

Da notare che questa ultima relazione vale se è presente la costante moltiplicativa $1/\sqrt{2\pi\hbar}$ nella definizione, ovvero se si compie la sostituzione dell'equazione (1.26). Si

dimostra che tale costante viene ricavata dall'estensione della serie di Fourier di una funzione in un intervallo limitato alla trasformata di Fourier su tutto \mathbb{R} .

Lo stato del sistema fisico può essere descritto sia nella rappresentazione delle coordinate che in quella dei momenti. L'evoluzione temporale della funzione d'onda $\tilde{\psi}(p, t)$ è regolata dall'equazione di Schrödinger nella rappresentazione dei momenti. Ricavaremo adesso questa equazione, di cui faremo nel secondo capitolo nella sezione 2.5 e di cui si calcolerà la soluzione numerica nel terzo capitolo.

Per ottenere tale equazione, applichiamo la trasformata di Fourier su entrambi i membri della equazione di Schrödinger (1.4). Si ha al primo membro

$$\mathcal{F} \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) \right] (p) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\psi}(p, t). \quad (1.30)$$

Al secondo membro della (1.4) figurano due addendi; per il primo si ha

$$\mathcal{F} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t) \right] (p) = \frac{p^2}{2m} \tilde{\psi}(p, t). \quad (1.31)$$

Per il secondo addendo si ha

$$\begin{aligned} \mathcal{F} [V(x)\psi(x, t)] (p) &= \mathcal{F} [V(x)\mathcal{F}^{-1}[\tilde{\psi}(p', t)](x)] (p) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}(p', t) \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-ix(p-p')/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} V(x) dx \right) dp' = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{V}(p-p') \tilde{\psi}(p', t) dp'. \end{aligned} \quad (1.32)$$

Assemblando questi risultati si ottiene l'equazione di Schrödinger per la funzione d'onda nella rappresentazione dei momenti:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\psi}(p, t) = \frac{p^2}{2m} \tilde{\psi}(p, t) + \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{V}(p-p') \tilde{\psi}(p', t) dp'. \quad (1.33)$$

Si nota che è una equazione integro-differenziale. Otterremo la soluzione numerica di questa equazione con un metodo che esporremo nella sezione 2.5.

1.5 Pacchetto d'onde gaussiano ed evoluzione in potenziale nullo

In questa sezione si riportano alcuni risultati riguardanti la propagazione del pacchetto d'onda gaussiano in potenziale nullo, compresa la soluzione analitica della sua evoluzione. Tale risultato ha un duplice fine: da un lato è un esempio pratico di risoluzione secondo il metodo presentato nella sezione 1.2; dall'altro la soluzione analitica dell'evoluzione $\psi(x, t)$ sarà utilizzata nella sezione 2.4 per effettuare dei test sulla bontà del metodo numerico.

Consideriamo la seguente sovrapposizione di onde piane a un istante posto eguale a 0:

$$\psi(x, 0) = C \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) e^{ikx} dk \quad (1.34)$$

ove

$$g(k) = e^{-\frac{a^2}{4}(k-k_0)^2} \quad (1.35)$$

con a parametro reale e C una costante che si dovrà calcolare per normalizzare a 1 il modulo quadro di $\psi(x, 0)$. $g(k)$ è la distribuzione dei pesi di ogni onda piana; è una funzione gaussiana e per questo "l'inviluppo" dato dall'integrale (1.34) è detto *pacchetto d'onde gaussiano*. Il parametro a è connesso, come si vedrà, con lo scarto quadratico medio della distribuzione di probabilità della posizione e quello degli impulsi.

Per calcolare l'integrale (1.34) si fa uso del seguente risultato:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha^2(x+\beta)^2} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{\alpha} \quad \alpha \in \mathbb{C}, \beta \in \mathbb{C}, \Re\{\alpha^2\} > 0 \quad (1.36)$$

ove la condizione $\Re\{\alpha^2\} > 0$ assicura la convergenza dell'integrale; il parametro a della funzione $g(k)$ soddisfa questa condizione per ogni valore in \mathbb{R} . Per sfruttare questo risultato occorre riscrivere l'esponente dell'equazione (1.34) in modo che il termine dipendente da k (la variabile di integrazione) sia un quadrato perfetto; lo si può fare attraverso le seguenti eguaglianze:

$$\begin{aligned} & \frac{a^2}{4}(k-k_0)^2 - ikx + (ik_0x - ik_0x) = \\ & = \frac{a^2}{4}(k-k_0)^2 - i(k-k_0)x - ik_0x + \left(\frac{x^2}{a^2} - \frac{x^2}{a^2}\right) = \\ & = \frac{a^2}{4}\left(k-k_0 - \frac{2ix}{a^2}\right)^2 - ik_0x + \frac{x^2}{a^2} \end{aligned} \quad (1.37)$$

per cui si calcola che la funzione d'onda all'istante iniziale $t = 0$ è

$$\psi(x, 0) = C \frac{2\sqrt{\pi}}{a} e^{ik_0x} e^{-x^2/a^2} . \quad (1.38)$$

Imponendo la condizione di normalizzazione a 1 del modulo quadro otteniamo il valore della costante C :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x, 0)|^2 dx = 1 \rightarrow |C|^2 \frac{2\sqrt{2}\pi\sqrt{\pi}}{a} = 1 \rightarrow C = \frac{\sqrt{a}}{(2\pi)^{3/4}} . \quad (1.39)$$

Nell'ultimo passaggio si è posto arbitrariamente $\Im\{C\} = 0$, essendo il vettore di stato determinato a meno di un fattore di fase arbitrario. Trovata la costante di normalizzazione C , si ha la funzione d'onda

$$\psi(x, 0) = \left(\frac{2}{\pi a^2}\right)^{1/4} e^{ik_0x} e^{-x^2/a^2} \quad (1.40)$$

e la distribuzione di probabilità sulla misura di posizione

$$|\psi(x, 0)|^2 = \sqrt{\frac{2}{\pi a^2}} e^{-2x^2/a^2} . \quad (1.41)$$

Si nota che è una funzione gaussiana normalizzata con valore medio sullo zero; per ottenerne una con valore medio x_0 diverso da 0 basta effettuare nella (1.34) la sostituzione $x \rightarrow x - x_0$. Si ottiene così che la funzione d'onda è la trasformata di Fourier di una funzione $g(k)$ non puramente reale ma complessa. Nel seguito si tratterà, senza perdere di generalità, $|\psi(x, 0)|^2$ centrata nello zero.

La funzione d'onda (1.40) può essere scritta come

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}(p, 0) e^{ipx/\hbar} dp \quad (1.42)$$

con

$$\tilde{\psi}(p, 0) = \frac{\sqrt{a}}{(2\pi\hbar^2)^{1/4}} e^{-\frac{a^2}{4\hbar^2}(p-p_0)^2} \quad (1.43)$$

e

$$p_0 = \hbar k_0 . \quad (1.44)$$

L'equazione (1.42) ha la forma della trasformata inversa di Fourier dell'equazione (1.23).

Quindi la distribuzione di probabilità di misurare un impulso p per la particella è data da

$$|\tilde{\psi}(p, 0)|^2 = \frac{a}{\sqrt{(2\pi\hbar^2)}} e^{-\frac{a^2}{2\hbar^2}(p-p_0)^2} . \quad (1.45)$$

Da notare che sia $|\psi(x, 0)|^2$ che $|\tilde{\psi}(p, 0)|^2$ sono normalizzati a 1, come ci si poteva aspettare dalla formula di Parseval-Plancherel (equazione (1.29)).

Si evince dalle proprietà di una funzione gaussiana che nella (1.41) si ha uno scarto quadratico medio sulla posizione di

$$\sigma_x = \frac{a}{2} \quad (1.46)$$

e nella (1.45) si ha uno scarto quadratico medio sull'impulso di

$$\sigma_p = \frac{\hbar}{a} . \quad (1.47)$$

Si ha così l'interessante relazione

$$\sigma_x \sigma_p = \frac{\hbar}{2} \quad (1.48)$$

che ha la peculiarità di minimizzare l'indeterminazione prevista dal principio di Heisenberg.

Si calcola adesso l'evoluzione del pacchetto d'onda nel tempo in potenziale nullo. Applicando l'operatore evoluzione sul pacchetto di onde definito in (1.34), si ha

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= e^{-\frac{i\hbar}{\hbar}\mathcal{H}}\psi(x, 0) = \\ &= C \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) e^{-\frac{i\hbar}{\hbar}\mathcal{H}} e^{ikx} dk = \\ &= \frac{\sqrt{a}}{(2\pi)^{3/4}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{a^2}{4}(k-k_0)^2} e^{i\left(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t\right)} dk . \end{aligned} \quad (1.49)$$

Trasformando, come prima, l'esponente della funzione integranda in un quadrato perfetto rispetto alla variabile di integrazione k e applicando l'integrale di Gauss si trova che

$$\psi(x, t) = \left(\frac{2a^2}{\pi}\right)^{1/4} e^{i\varphi(t)} \exp\left[\frac{-a^2}{a^4 + \frac{4\hbar^2}{m^2}t^2} \left(x - \frac{\hbar k_0}{m}t\right)^2\right] \quad (1.50)$$

ove

$$\varphi(t) = \frac{1}{a^4 + \frac{4\hbar^2}{m^2}t^2} \left(a^4 k_0 x + \frac{2\hbar t x^2}{m} - \frac{a^4 \hbar k_0^2 t}{2m} \right) - \frac{1}{2} \arctan \left(\frac{2\hbar t}{ma^2} \right). \quad (1.51)$$

Da questo si ricava che

$$|\psi(x, t)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \sqrt{\frac{a^2}{4} + \frac{\hbar^2}{a^2 m^2} t^2}} \exp \left[-\frac{\left(x - \frac{\hbar k_0}{m} t \right)^2}{2 \left(\frac{a^2}{4} + \frac{\hbar^2}{a^2 m^2} t^2 \right)} \right]. \quad (1.52)$$

Da questa equazione si nota che il punto medio della distribuzione si muove con velocità costante pari a

$$V = \frac{\hbar k_0}{m} \quad (1.53)$$

e lo scarto quadratico medio della posizione si evolve secondo

$$\sigma_x(t) = \frac{a}{2} \sqrt{1 + \frac{4\hbar^2 t^2}{m^2 a^4}}. \quad (1.54)$$

Per quanto concerne la distribuzione dei numeri d'onda, dalla (1.49) si nota che la funzione d'onda $\psi(x, t)$ è la trasformata di Fourier (a meno della costante C della funzione

$$g'(k, t) = e^{-i \frac{\hbar k^2}{2m} t} g(k) \quad (1.55)$$

per cui $|g'(k, t)| = |g(k)|$ in ogni istante t . Quindi *la distribuzione dei numeri d'onda (e quella degli impulsi) non variano nel tempo*. Questo risultato ha un significato fisico: in un potenziale nullo, in accordo con la fisica classica, l'impulso rimane costante.

1.6 Matrice di trasmissione, coefficienti di trasmissione e riflessione

Nei problemi di particelle che devono superare una barriera di potenziale si possono definire delle quantità che risultano molto utili e di significato fisico immediato: *i coefficienti di riflessione e trasmissione e la matrice di trasmissione*. Come avviene soventemente, queste quantità sono state coniate in Fisica Classica in seno all'Ottica, ma sono state poi mutuate nella Meccanica Quantistica con una prospettiva di interpretazione molto diversa.

In questa sezione definiremo i suddetti coefficienti in un sistema fisico unidimensionale con potenziale di qualsivoglia forma all'interno di un intervallo $[0, l]$ e nullo all'esterno. Un caso particolare che tratteremo in questo ambito è la barriera quadrata di potenziale, nella prossima sezione.

Consideriamo un potenziale del tipo

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \text{ (regione I)} \\ \bar{V}(x) & 0 \leq x < l \text{ (regione II)} \\ 0 & x \geq l \text{ (regione III)} \end{cases} \quad (1.56)$$

ove $\bar{V}(x)$ è una funzione arbitraria. Si tratta quindi di una barriera di potenziale di qualsivoglia forma localizzata nell'intervallo $[0, l]$. L'equazione agli autovalori che consente di trovare gli stati stazionari è

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi_k(x) + V(x)\varphi_k(x) = E_k \varphi_k(x). \quad (1.57)$$

Nella *regione I* due soluzioni (non le più generali) della (1.57) sono e^{ikx} e e^{-ikx} . Sia $\chi_k(x)$ la soluzione che è identica a e^{ikx} nella *regione I*:

$$\chi_k(x) = \begin{cases} e^{ikx} & x \leq 0 \\ F(k)e^{ikx} + G(k)e^{-ikx} & x \geq l \end{cases}. \quad (1.58)$$

È importante ricordare che un teorema di Analisi Matematica sulle equazioni differenziali assicura per l'equazione (1.57) che per una data una soluzione nella *regione I* ne risultano $F(k)$ e $G(k)$ nella *regione III* univocamente determinati. Si definisca analogamente $\xi_k(x)$ la soluzione che nella *regione I* sia eguale a e^{-ikx}

$$\xi_k(x) = \begin{cases} e^{-ikx} & x \leq 0 \\ \bar{F}(k)e^{ikx} + \bar{G}(k)e^{-ikx} & x \geq l \end{cases}. \quad (1.59)$$

La soluzione più generale è data da una combinazione lineare di $\chi_k(x)$ con $\xi_k(x)$; più precisamente, combinando con pesi A_I e B_I , si ha

$$\varphi_k(x) = A_I \chi_k(x) + B_I \xi_k(x) = \begin{cases} A_I e^{ikx} + B_I e^{-ikx} & x \leq 0 \\ A_{III}(k) e^{ikx} + B_{III}(k) e^{-ikx} & x \geq l \end{cases} \quad (1.60)$$

ove

$$\begin{aligned} A_{III}(k) &= A_I F(k) + B_I \bar{F}(k) \\ B_{III}(k) &= A_I G(k) + B_I \bar{G}(k) \end{aligned} \quad (1.61)$$

Si possono scrivere queste due relazioni in notazione matriciale:

$$\begin{pmatrix} A_{III} \\ B_{III} \end{pmatrix} = M(k) \begin{pmatrix} A_I \\ B_I \end{pmatrix} \quad (1.62)$$

ove la matrice $M(k)$, detta **matrice di trasmissione del potenziale**, è

$$M(k) = \begin{pmatrix} F(k) & \bar{F}(k) \\ G(k) & \bar{G}(k) \end{pmatrix}. \quad (1.63)$$

Si possono dimostrare le seguenti due proprietà per la matrice di trasmissione (si consulti [Coh05]):

- Per le componenti di $M(k)$ si ha

$$\begin{aligned} F^*(k) &= \bar{G}(k) \\ G^*(k) &= \bar{F}(k) \end{aligned} \quad (1.64)$$

per cui si può riscrivere

$$M(k) = \begin{pmatrix} F(k) & G^*(k) \\ G(k) & F^*(k) \end{pmatrix}. \quad (1.65)$$

- Il determinante della matrice di trasmissione è eguale a 1:

$$\det M(k) = |F(k)|^2 - |G(k)|^2 = 1 . \quad (1.66)$$

Nel secondo membro si è fatto uso della prima proprietà.

Dalle componenti della matrice di trasmissione si possono ricavare due importanti quantità, il coefficiente di trasmissione e il coefficiente di riflessione. Consideriamo un problema fisico di una particella con energia ben definita (quindi un'onda piana) che viene da $-\infty$ e incontra la barriera di potenziale nell'intervallo spaziale $[0, l]$. In questo caso il coefficiente B_{III} della (1.60) è nullo, non essendovi alcuna particella che viene da $+\infty$. In un stato dato da $\varphi_k(x)$ dell'equazione (1.60) non si può calcolare la probabilità di trovare la particella in un intervallo spaziale finito, in quanto $|e^{ikx}| = 1$ e quindi $\varphi_k(x)$ non è una funzione a quadrato sommabile. Tuttavia in $\varphi_k(x)$ si possono distinguere le intensità di tre onde piane, associate a una particella che giunge da $-\infty$, una che viene riflessa e una che viene trasmessa attraverso la barriera di potenziale. Da queste si può calcolare la probabilità che la particella venga riflessa dalla barriera, il **coefficiente di riflessione**:

$$R(k) = \left| \frac{B_I}{A_I} \right|^2 = \left| \frac{G(k)}{F(k)} \right|^2 \quad (1.67)$$

e la probabilità che la particella venga trasmessa, il **coefficiente di trasmissione**:

$$T(k) = \left| \frac{A_{III}}{A_I} \right|^2 = \left| \frac{1}{F(k)} \right|^2 . \quad (1.68)$$

Dalla proprietà sul determinante di $M(k)$ se ne ricava l'importante equazione

$$T(k) + R(k) = 1 \quad (1.69)$$

il cui significato fisico è che il flusso di particelle è conservato. È importante notare che se si considera il problema fisico di una particella che viene invece da $+\infty$ i *coefficienti di trasmissione e riflessione non cambiano*. Infatti ponendo nella (1.60) il coefficiente $A_I = 0$ si ha

$$\begin{aligned} A_{III} &= \frac{G^*(k)}{F^*(k)} B_{III} \\ B_I &= \frac{1}{F^*(k)} B_{III} \end{aligned} \quad (1.70)$$

e dalla prima proprietà su $M(k)$ si evince che i due coefficienti in questione non cambiano.

La matrice $M(k)$ è dipendente dal numero d'onda k ; la sua dipendenza dal momento p si ottiene effettuando la sostituzione secondo la relazione di De Broglie $k = p/\hbar$.

1.7 Coefficiente di trasmissione per una barriera quadrata

In questa sezione calcoleremo il coefficiente di trasmissione per una barriera quadrata di potenziale. Tale coefficiente ritornerà utile quando nel terzo capitolo si effettueranno delle simulazioni di urto di pacchetto d'onde gaussiano contro una barriera quadrata.

Si consideri un sistema fisico con una particella che viene da $x = -\infty$ con una barriera di potenziale (si veda figura 1.1):

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \text{ (regione I)} \\ V_0 & 0 \leq x < l \text{ (regione II)} \\ 0 & x \geq l \text{ (regione III)} \end{cases} . \quad (1.71)$$

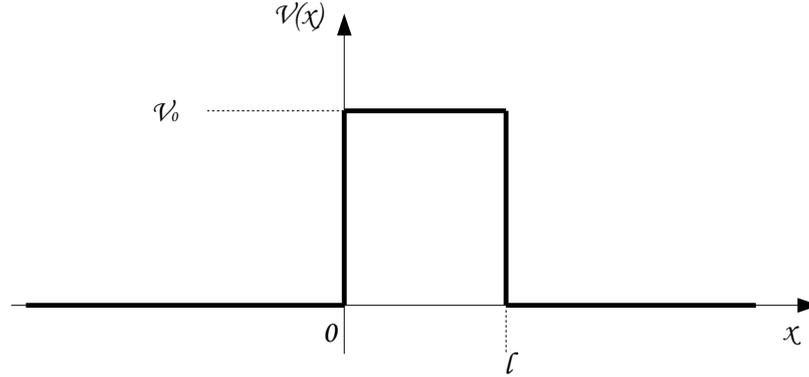


Figura 1.1: Barriera quadrata

L'equazione agli autovalori è

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi_k(x) + V(x) \varphi_k(x) = E_k \varphi_k(x) . \quad (1.72)$$

Si considererà dapprima il caso $E \geq V_0$; il caso $E \leq V_0$ verrà facilmente calcolato attraverso delle sostituzioni.

Gli stati stazionari che risolvono la (1.72) si ottengono trovando le soluzioni dell'equazione differenziale nelle tre regioni e raccordandole per continuità di $\varphi_k(x)$ e della derivata prima $\varphi'_k(x)$. Le soluzioni nelle tre regioni sono:

$$\varphi_I(x) = A_I e^{ik_1 x} + B_I e^{-ik_1 x} \quad (1.73)$$

$$\varphi_{II}(x) = A_{II} e^{ik_2 x} + B_{II} e^{-ik_2 x} \quad (1.74)$$

$$\varphi_{III}(x) = A_{III} e^{ik_1 x} + B_{III} e^{-ik_1 x} \quad (1.75)$$

ove

$$k_1 = \sqrt{\frac{2mE_k}{\hbar^2}} \quad k_2 = \sqrt{\frac{2m(E_k - V_0)}{\hbar^2}} . \quad (1.76)$$

Per il problema fisico considerato, ovvero di una particella che viene da $-\infty$, il coefficiente B_{III} è nullo. Dalle condizioni di raccordo si ottiene il sistema:

$$\begin{cases} A_I + B_I = A_{II} + B_{II} \\ e^{ik_2 l} A_{II} + e^{-ik_2 l} B_{II} = e^{ik_1 l} A_{III} \\ A_I - B_I = \frac{k_2}{k_1} (A_{II} - B_{II}) \\ e^{ik_2 l} A_{II} - e^{-ik_2 l} B_{II} = \frac{k_1}{k_2} e^{ik_1 l} A_{III} \end{cases} . \quad (1.77)$$

Si tratta di un sistema lineare di 4 equazioni in 5 incognite; è un caso previsto dalla teoria, ove una delle incognite viene fissata come coefficiente di normalizzazione (ricordiamo che l'equazione agli autovalori è omogenea). Per semplicità di calcolo fissiamo il coefficiente A_{III} , da cui dipenderanno gli altri 4 coefficienti A_I, B_I, A_{II}, B_{II} . Si ricava che la soluzione del sistema è

$$A_I = \left[\cos(k_2 a) - i \frac{k_1^2 + k_2^2}{2k_1 k_2} \sin(k_2 a) \right] e^{ik_1 a} A_{III} \quad (1.78)$$

$$B_I = i \frac{k_2^2 - k_1^2}{2k_1 k_2} \sin(k_2 a) e^{ik_1 a} A_{III} . \quad (1.79)$$

Da questi risultati si può ottenere il coefficiente di riflessione

$$R(k) = \left| \frac{B_I}{A_I} \right|^2 = \frac{(k_1^2 - k_2^2) \sin^2(k_2 l)}{4k_1^2 k_2^2 + (k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2(k_2 l)} \quad (1.80)$$

e il coefficiente di trasmissione

$$T(k) = \left| \frac{A_{III}}{A_I} \right|^2 = \frac{4k_1^2 k_2^2}{4k_1^2 k_2^2 + (k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2(k_2 l)} . \quad (1.81)$$

La dipendenza di R e T da k è data dalle sostituzioni (1.76). Si fa notare che le soluzioni trovate soddisfano la condizione $R + T = 1$. Esplicitando le quantità k_1 e k_2 si ottiene il coefficiente di trasmissione in funzione dell'energia della particella e dell'energia potenziale:

$$T(E) = \frac{4E(E - V_0)}{4E(E - V_0) + V_0^2 \sin^2 \left(\sqrt{\frac{2m l^2 (E - V_0)}{\hbar^2}} \right)} \quad E \geq V_0 . \quad (1.82)$$

Il caso $E \leq V_0$ può essere trattato facendo la seguente sostituzione nei calcoli precedenti:

$$k_2 \rightarrow -i\rho_2, \rho_2 = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}} . \quad (1.83)$$

L'espressione del coefficiente di trasmissione in funzione dell'energia e dell'altezza della barriera di potenziale è in questo caso

$$T(E) = \frac{4E(V_0 - E)}{4E(V_0 - E) + V_0^2 \sinh^2 \left(\sqrt{\frac{2m l^2 (V_0 - E)}{\hbar^2}} \right)} \quad E \leq V_0 . \quad (1.84)$$

Conviene riscrivere il coefficiente di trasmissione dividendo numeratore e denominatore per V_0^2 , ottenendo

$$T(\eta) = \begin{cases} \frac{4\eta(1-\eta)}{4\eta(1-\eta) + \sinh^2 \left(\sqrt{\frac{2m l^2 V_0}{\hbar^2}} \sqrt{(1-\eta)} \right)} & 0 \leq \eta \leq 1 \\ \frac{4\eta(\eta-1)}{4\eta(\eta-1) + \sinh^2 \left(\sqrt{\frac{2m l^2 V_0}{\hbar^2}} \sqrt{(\eta-1)} \right)} & 1 \leq \eta \end{cases} \quad (1.85)$$

ove $\eta = E/V_0$ è una quantità adimensionale. In $\eta = 1$ la funzione non è definita ma prolungabile per continuità; il calcolo del limite restituisce

$$\lim_{\eta \rightarrow 1} T(\eta) = \frac{1}{1 + \frac{ml^2V_0}{2\hbar}}. \quad (1.86)$$

La figura 1.2 è un grafico della funzione (1.85) con il fattore $\sqrt{2ml^2V_0/\hbar^2}$ posto a $\sqrt{40}$, circa eguale a 2π . Nella sezione 3.1 si simulerà l'urto di un pacchetto d'onde gaussiano contro una barriera per cui $\sqrt{2ml^2V_0/\hbar^2} = \sqrt{40} \approx 2\pi$

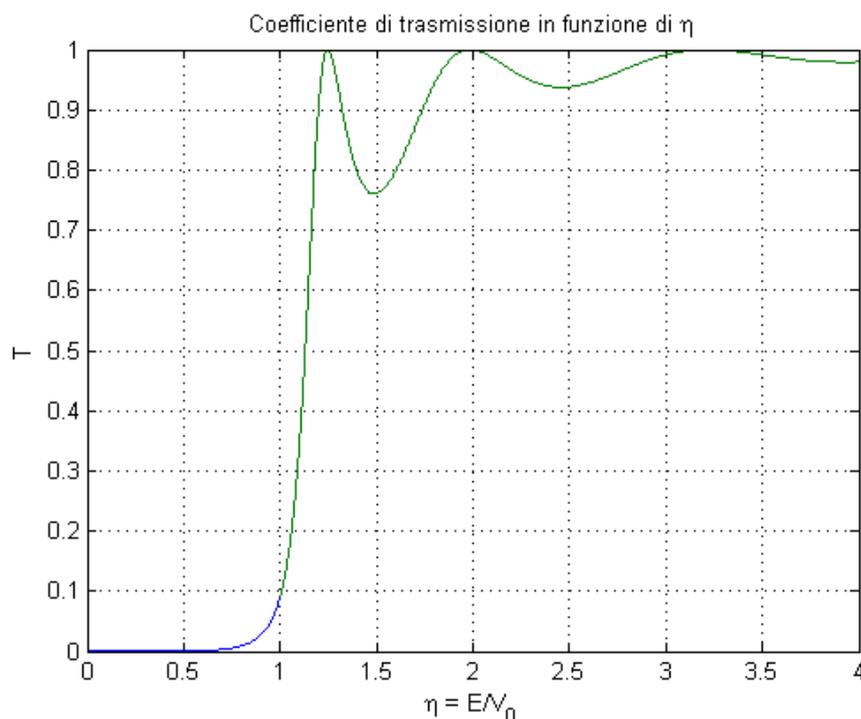


Figura 1.2: Coefficiente di trasmissione per barriera quadrata di potenziale
In questo grafico è disegnata la funzione (1.85), con impostato $\sqrt{2ml^2V_0/\hbar^2} = \sqrt{40} \approx 2\pi$. La parte in blu mostra il coefficiente di trasmissione per $E < V_0$ (effetto tunnel).

In contrasto con la meccanica classica, i coefficienti di trasmissione e riflessione mostrano che vi è sempre una probabilità che la particella venga riflessa o trasmessa, a prescindere che l'energia della particella sia maggiore o minore della barriera di potenziale. In particolare vi è anche la possibilità che una particella con energia minore di quella della barriera riesca a oltrepassarla; questo fenomeno è chiamato **effetto tunnel**.

Capitolo 2

Metodi numerici

2.1 Risoluzione numerica dell'equazione di Schrödinger

In questa sezione discuteremo sul metodo numerico (implementato in un algoritmo scritto in linguaggio MatLab) usato per la risoluzione dell'equazione di Schrödinger a una dimensione spaziale con potenziale indipendente dal tempo:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t) + V(x) \psi(x, t) . \quad (2.1)$$

Per trattare il problema numericamente si deve procedere con alcune approssimazioni:

- L'insieme $\mathbb{R} \times \mathbb{R}$ di coordinate spazio-temporali su cui è definita la soluzione analitica $\psi(x, t)$ è sostituito da un insieme finito di punti che prende il nome di **griglia**. I punti della griglia saranno indicizzati con una coppia di indici discreti

$$(j, n) \quad j \in \{1, \dots, N_x\}, n \in \{1, \dots, N_t\} \quad (2.2)$$

e avranno coordinate

$$x_j = x_1 + (j - 1)\Delta x \quad t_n = t_1 + (n - 1)\Delta t , \quad (2.3)$$

ove Δx è il passo di discretizzazione spaziale, Δt è il passo di discretizzazione temporale. Nel seguito il punto t_1 verrà posto eguale a zero, ponendo nel problema fisico il sistema di riferimento temporale in modo che lo stato iniziale da cui si evolve il sistema sia all'istante $t_1 = 0$. Il numero di punti totale della griglia è $N_x N_t$.

- La funzione $\psi(x, t)$ è sostituita da una matrice Ψ di numeri complessi; gli elementi ψ_j^n di Ψ rappresentano la soluzione numerica calcolata in corrispondenza dei punti della griglia (x_j, t_n) . Nel seguito si indicherà con il simbolo ψ^n il vettore-colonna numerico $\psi^n = (\psi_1^n, \dots, \psi_{N_x}^n)^T$ che rappresenta la funzione d'onda nell'istante t_n . Il vettore numerico $\psi^{\mathbf{I}}$ rappresenta la funzione d'onda all'istante iniziale, dal quale verranno calcolati gli istanti successivi col metodo numerico che esporremo. Precisiamo che con il termine “vettore numerico” intenderemo nel seguito un insieme finito ordinato di numeri reali.

- La funzione del potenziale $V(x)$ è sostituita da un vettore numerico V_j che contiene il valore del potenziale nei punti x_j .
- Gli operatori lineari su funzioni saranno sostituiti da matrici che operano sui vettori numerici attraverso il noto prodotto matriciale. Useremo i simboli in calligrafia (ad esempio \mathcal{H} e \mathcal{U}) per indicare gli operatori che agiscono su funzioni; in maiuscolo corsivo (ad esempio H e U) indicheremo le matrici che agiscono sui vettori numerici.

Cerchiamo una approssimazione dell'operatore hamiltoniano. Per il calcolo numerico della derivata seconda spaziale si userà una espressione a 3 punti che si ricava come segue. Si considerino i seguenti sviluppi in serie di Taylor della funzione d'onda a un istante fissato t_0 intorno al punto x :

$$\begin{aligned} \psi(x + \Delta x, t_0) &= \psi(x, t_0) + \frac{\partial}{\partial x} \psi(x, t_0) \Delta x + \\ &+ \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t_0) \Delta x^2 + \frac{1}{6} \frac{\partial^3}{\partial x^3} \psi(x, t_0) \Delta x^3 + O(\Delta x^4) \end{aligned} \quad (2.4)$$

$$\begin{aligned} \psi(x - \Delta x, t_0) &= \psi(x, t_0) - \frac{\partial}{\partial x} \psi(x, t_0) \Delta x + \\ &+ \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t_0) \Delta x^2 - \frac{1}{6} \frac{\partial^3}{\partial x^3} \psi(x, t_0) \Delta x^3 + O(\Delta x^4) \end{aligned} \quad (2.5)$$

. Sommando membro a membro la (2.4) con la (2.5) e tenendo conto delle coordinate dei punti della griglia (equazione (2.3)) si ottiene, con semplici passaggi algebrici,

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x_j, t_n) = \frac{\psi_{j+1}^n - 2\psi_j^n + \psi_{j-1}^n}{\Delta x^2} + O(\Delta x^2) . \quad (2.6)$$

Approssimeremo per il calcolo numerico l'operatore di derivazione seconda con la matrice D_2 che agisce su $\boldsymbol{\psi}^n$ tale che la j -esima componente di $D_2 \boldsymbol{\psi}^n$ sarà

$$(D_2 \boldsymbol{\psi}^n)_j = \frac{\psi_{j+1}^n - 2\psi_j^n + \psi_{j-1}^n}{\Delta x^2} . \quad (2.7)$$

Dalla (2.6) si nota che con questa approssimazione si commette un errore di troncamento $O(\Delta x^2)$.

Trovata l'approssimazione dell'operazione di derivata seconda, l'operatore hamiltoniano che agisce su $\psi(x, t)$ viene sostituito quindi dalla matrice H_c che agisce sul vettore numerico $\boldsymbol{\psi}^n$ tale che la j -esima componente di $H_c \boldsymbol{\psi}^n$ è data da

$$(H_c \boldsymbol{\psi}^n)_j = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\psi_{j+1}^n - 2\psi_j^n + \psi_{j-1}^n}{\Delta x^2} \right) + V_j \psi_j^n . \quad (2.8)$$

Il pedice di H_c sta per *computazionale*. Per i punti spaziali indicizzati da $j = 1$ e $j = N_x$ la formula (2.8) ha bisogno di condizioni al contorno che specificino i valori di ψ_0^n e $\psi_{N_x+1}^n$, che non appartengono alla matrice Ψ . Porremo come condizioni al contorno:

$$\psi_0^n = \psi_{N_x+1}^n = 0 \quad \forall n \in \{1, \dots, N_t\} . \quad (2.9)$$

Le condizioni (2.9) hanno un significato fisico. Esse stabiliscono che il metodo numerico calcola l'evoluzione in modo che in qualunque istante t_n la soluzione si annulli ai lati

dell'intervallo spaziale. Il metodo numerico tratta quindi il sistema come se fosse in una scatola di potenziale a pareti infinite che contiene l'intervallo spaziale $[x_0, x_{N_x+1}]$ ed entro la quale è presente un potenziale dato da $V(x)$. Questa si tratta di una ulteriore approssimazione di cui si dovrà tener conto nella risoluzione numerica. Si noti che si possono costruire altre approssimazioni H_c dell'operatore \mathcal{H} usando approssimazioni della derivata a più di 3 punti.

Trovata l'approssimazione dell'operatore hamiltoniano, cerchiamo l'approssimazione dell'operatore evoluzione studiato nella sezione 1.3. Dall'equazione (1.20) si ha che l'approssimazione più semplice di $\mathcal{U}_{\Delta t}$ è quella al primo ordine:

$$\mathcal{U}_{\Delta t} = \mathcal{I} - \frac{i\Delta t}{\hbar} \mathcal{H} . \quad (2.10)$$

Sostituendo \mathcal{H} con H_c si ottiene la formula

$$\psi^{n+1} = \left(I - \frac{i\Delta t}{\hbar} H_c \right) \psi^n . \quad (2.11)$$

Attraverso l'applicazione reiterata n volte di questo operatore si può trovare il vettore ψ^{n+1} dalla condizione iniziale ψ^1 . Tuttavia l'uso dell'espressione (2.11) presenta due problemi: il primo è che l'espressione al secondo membro nella (2.10) non è un operatore unitario, come invece lo è $\mathcal{U}_{\Delta t}$, quindi non conserva la norma del vettore di stato. Il secondo problema è che il metodo numerico dato dall'equazione (2.11) presenta problemi di instabilità numerica dovuti alla crescita degli errori di troncamento. Conviene procedere invece con l'approssimazione nella cosiddetta *forma di Cayley* [Gol67]:

$$\mathcal{U}_{\Delta t} = \mathcal{U}_{\frac{\Delta t}{2}} \left(\mathcal{U}_{-\frac{\Delta t}{2}} \right)^{-1} \approx \frac{\left(I - \frac{i\Delta t}{2\hbar} \mathcal{H} \right)}{\left(I + \frac{i\Delta t}{2\hbar} \mathcal{H} \right)} . \quad (2.12)$$

Usando questa espressione e l'operatore H_c si ottiene

$$\left(1 + \frac{1}{2} \frac{i\Delta t}{\hbar} H_c \right) \psi^{n+1} = \left(1 - \frac{1}{2} \frac{i\Delta t}{\hbar} H_c \right) \psi^n \quad (2.13)$$

e tenendo conto della (2.8) si giunge, per n fissato, al sistema di equazioni seguente:

$$P\psi_{j-1}^{n+1} + Q_j\psi_j^{n+1} + P\psi_{j+1}^{n+1} = P^*\psi_{j-1}^n + Q_j^*\psi_j^n + P^*\psi_{j+1}^n \quad j \in \{1, \dots, N_x\} \quad (2.14)$$

ove si è definito

$$P = -\frac{i\hbar\Delta t}{4m(\Delta x)^2} \quad (2.15)$$

e

$$Q_j = 1 - 2P + \frac{i\Delta t}{2\hbar} V_j . \quad (2.16)$$

e dove $\psi_0^n, \psi_{N_x+1}^n, \psi_0^{n+1}, \psi_{N_x+1}^{n+1}$ sono stabiliti dalle condizioni al contorno (2.9).

Si può scrivere il sistema (2.14) in notazione matriciale:

$$\begin{pmatrix} Q_1 & P & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ P & Q_2 & P & 0 & & \vdots \\ 0 & P & Q_3 & P & & \vdots \\ 0 & 0 & P & Q_4 & \ddots & \vdots \\ \vdots & & & \ddots & \ddots & P \\ 0 & \cdots & \cdots & \cdots & P & Q_{N_x} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1^{n+1} \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ \psi_{N_x}^{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Q_1 & P & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ P & Q_2 & P & 0 & & \vdots \\ 0 & P & Q_3 & P & & \vdots \\ 0 & 0 & P & Q_4 & \ddots & \vdots \\ \vdots & & & \ddots & \ddots & P \\ 0 & \cdots & \cdots & \cdots & P & Q_{N_x} \end{pmatrix}^* \begin{pmatrix} \psi_1^n \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ \psi_{N_x}^n \end{pmatrix} \quad (2.17)$$

ove le incognite sono $\psi_1^{n+1}, \dots, \psi_{N_x}^{n+1}$. Per risolvere numericamente tale sistema si è fatto uso di un metodo di addizione e sottrazione delle equazioni che diagonalizza A ; tale metodo è spiegato nella prossima sezione.

2.2 Risoluzione di un sistema $Ax = y$ con A matrice tridiagonale

Nel metodo numerico per la risoluzione dell'equazione di Schrödinger dipendente dal tempo (esposto nella sezione 2.1) occorre risolvere un sistema di equazioni del tipo seguente:

$$\begin{cases} P\psi_1^{n+1} & + Q_1\psi_1^{n+1} & + P\psi_2^{n+1} & = & P^*\psi_1^n & + Q_1^*\psi_1^n & + P^*\psi_2^n \\ P\psi_1^{n+1} & + Q_2\psi_2^{n+1} & + P\psi_3^{n+1} & = & P^*\psi_1^n & + Q_2^*\psi_2^n & + P^*\psi_3^n \\ & & \dots & = & \dots & & \\ P\psi_{N_x-2}^{n+1} & + Q_{N_x-1}\psi_{N_x-1}^{n+1} & + P\psi_{N_x}^{n+1} & = & P^*\psi_{N_x-2}^n & + Q_{N_x-1}^*\psi_{N_x-1}^n & + P^*\psi_{N_x}^n \\ P\psi_{N_x-1}^{n+1} & + Q_{N_x}\psi_{N_x}^{n+1} & & = & P^*\psi_{N_x-1}^n & + Q_{N_x}^*\psi_{N_x}^n \end{cases} \quad (2.18)$$

ove ψ_j^{n+1} con $j \in \{1, \dots, N_x\}$ sono le incognite. Si mostra in questa sezione un metodo per risolverla. Conviene riscrivere i termini noti del sistema semplificando la notazione

$$\begin{cases} Q_1\psi_1^{n+1} & + & P\psi_2^{n+1} & & = & W_1^n \\ P\psi_1^{n+1} & + & Q_2\psi_2^{n+1} & + & P\psi_3^{n+1} & = & W_2^n \\ & & & & \dots & = & \dots \\ P\psi_{N_x-2}^{n+1} & + & Q_{N_x-1}\psi_{N_x-1}^{n+1} & + & P\psi_{N_x}^{n+1} & = & W_{N_x-1}^n \\ & & P\psi_{N_x-1}^{n+1} & + & Q_{N_x}\psi_{N_x}^{n+1} & = & W_{N_x}^n \end{cases} \quad (2.19)$$

Si effettua ora una combinazione lineare delle equazioni con l'obiettivo di eliminare da ogni equazione una incognita. Più precisamente

- La prima equazione non viene manipolata.
- Dalla seconda equazione si sottrae la prima moltiplicata per P/Q_1 ; si ottiene così

$$Q'_2 \psi_2^{n+1} + P \psi_3^{n+1} = W'^n_2 \quad (2.20)$$

ove

$$Q'_2 = Q_1 - \frac{P^2}{Q_1} \quad (2.21)$$

$$W'^n_2 = W_2^n - \frac{P}{Q_1} W_1^n . \quad (2.22)$$

Si è così eliminata una incognita dalla seconda equazione.

- L'equazione (2.20) testé ottenuta ha una forma analoga alla prima. Si può ripetere quindi lo stesso procedimento combinando linearmente la terza equazione con la (2.20).
- Si ripete la procedura finché si ottiene il sistema di equazioni

$$Q'_j \psi_j^{n+1} + P \psi_{j+1}^{n+1} = W'^n_j \quad , j \in \{1, \dots, N_x\} \quad (2.23)$$

ove

$$Q'_j = Q_j - \frac{P^2}{Q'_{j-1}} \quad (2.24)$$

$$W'^n_j = W_j^n - \frac{P}{Q'_{j-1}} W'^n_{j-1} \quad (2.25)$$

con

$$Q'_1 = Q_1 \quad (2.26)$$

$$W'^n_1 = W_1^n \quad (2.27)$$

L'ultima equazione è quindi

$$Q'_{N_x} \psi_{N_x}^{n+1} = W'^n_{N_x} . \quad (2.28)$$

da cui si ricava l'incognita

$$\psi_{N_x}^{n+1} = \frac{W'^n_{N_x}}{Q'_{N_x}} . \quad (2.29)$$

Sostituendo questo valore nell'equazione $N_x - 1$ si ottiene il valore di $\psi_{N_x-1}^{n+1}$; si procede allora con questa serie di "sostituzioni a cascata" e risolvendo, in ordine da $j = N_x - 1$ a $j = 1$, l'equazione

$$\psi_j^{n+1} = \frac{W'^n_j - P \psi_{j+1}^{n+1}}{Q'_j} . \quad (2.30)$$

2.3 Criteri per la scelta dei parametri di calcolo

In questa sezione si discuterà degli errori numerici che l'algoritmo presentato nella sezione 2.1 genera nel calcolo dell'evoluzione del pacchetto d'onde. Gli errori di calcolo numerico hanno due origini:

1. **Errori di discretizzazione**, che nascono dall'approssimazione dell'equazione differenziale in una equazione alle differenze finite.
2. **Errori di arrotondamento**, che nascono dall'arrotondamento che effettua il calcolatore in ogni operazione a causa del numero di cifre significative che esso può trattare o, in altri termini, dalla limitata *precisione macchina*.

La *precisione macchina* si definisce come il più piccolo numero razionale q tale che il risultato della somma $1.0+q$ eseguita dal calcolatore sia maggiore di 1.0. Nel programma usato per il calcolo, MatLab, la precisione macchina viene restituita dall'invocazione del comando `eps`. La precisione macchina per i calcoli numerici effettuati consta in $q = 2.220446049250313 \times 10^{-16}$, che indicano $|\log_2(q)| + 1 = 53$ cifre significative.

L'errore di arrotondamento su un risultato dipende in maniera preponderante dal numero di operazioni di macchina effettuate per giungere al risultato stesso. Se ci si pone in una visione pessimistica che ad ogni operazione elementare si compie un errore sul bit meno significativo, dopo M operazioni si ha un errore di arrotondamento che corrompe i $\lfloor \log_2(M) \rfloor$ bit meno significativi. Questa considerazione pone quindi, per una data precisione macchina, a un limite superiore al numero di calcoli elementari che si possono effettuare che consta in 2^S , ove S è il numero di cifre binarie con cui viene memorizzato un numero; nel caso particolare della precisione macchina dell'ambiente MatLab si ha un numero massimo di operazioni di macchina che consta in $2^{53} \approx 9.00 \times 10^{15}$. Attraverso stime di ordini di grandezza si può asserire a larghe linee che un computer con un processore di $1GHz$ impiega *almeno* 100 ore per effettuare questo numero di calcoli.

Nel seguito della trattazione si considereranno gli errori di arrotondamento ininfluenti rispetto a quelli di discretizzazione e non saranno discussi. A sostenere questa asserzione vi è da un lato il fatto che il numero di operazioni effettuate in ogni processo di calcolo con l'algoritmo indicato nella sezione 2.1 è di gran lunga minore del limite indicato nel paragrafo precedente 2^{53} .

Prima di iniziare il processo di calcolo numerico della matrice-soluzione Ψ sulla griglia occorre stabilire i seguenti parametri:

- L'intervallo spaziale $[x_0, x_{N_x}]$ su cui effettuare la computazione. Per il significato della notazione si veda l'equazione (2.3).
- L'intervallo temporale $[0, t_{N_t}]$ su cui effettuare la computazione.
- Il passo di discretizzazione spaziale Δx .
- Il passo di discretizzazione temporale Δt .

La scelta dei primi due parametri è dettata anche pragmaticamente da quale regione del piano $\mathbb{R} \times \mathbb{R}$, su cui è definita la funzione d'onda $\psi(x, t)$, è di interesse per l'analisi del problema fisico. Tuttavia bisogna tenere conto di alcune limitazioni. Tra queste la principale è che l'algoritmo accumula errori di discretizzazione ad ogni passo temporale che avanza, quindi per intervalli di tempo "lunghi" si ha un accumulo di errore tale che la soluzione ottenuta numericamente si discosta sempre più da quella analitica

verso la fine dell'intervallo temporale di evoluzione $[t_1, t_{N_t}]$. Si precisa che il significato quantitativo del termine “discostamento” nella precedente frase sarà specificato nella sezione (2.4). Per ovviare all'accumulo di troncamento si potrebbe diminuire il passo spaziale e temporale (ovvero aumentare i punti della griglia), ammesso che l'algoritmo sia *convergente* [Qua97]. Tuttavia questa scelta comporta per l'esecuzione dell'algoritmo un aumento dei tempi di computazione e dello spazio di memoria necessaria; inoltre per passi di discretizzazione troppo piccoli si ha un aumento dell'influenza degli errori di approssimazione data dalla precisione macchina. Come sovente nell'ambito della Fisica e della Matematica Computazionale occorre cercare *un giusto compromesso*.

Nell'ambito di questa discussione sulla scelta degli intervalli spaziale e temporale per il calcolo occorre fare la seguente considerazione per il metodo numerico presentato nella sezione 2.1. In questa sezione si è mostrato che la condizione (2.9) fa sì che l'algoritmo calcoli l'evoluzione della funzione d'onda come se fosse in un pozzo infinito di potenziale di intervallo $[x_1, x_{N_x}]$ con ivi definito il potenziale del problema $V(x)$. Questo fa sì che quando il pacchetto d'onde urta gli estremi dell'intervallo, questo viene totalmente riflesso. Ma nella vera soluzione dell'equazione di Schrödinger il pacchetto d'onde non viene riflesso ma continua il suo moto verso distanze infinite. Detto questo, è quindi necessario che si scelga l'intervallo spaziale “largo abbastanza” affinché la soluzione numerica non urti gli estremi x_1 e x_{N_x} dell'intervallo.

Cerchiamo ora di studiare gli effetti degli errori di troncamento che si compaiono nelle approssimazioni dell'operatore derivata seconda con la (2.7), dell'operatore hamiltoniano con la (2.8) e dell'operatore evoluzione con la (2.13). La strada che si seguirà a tal proposito consta nel considerare gli effetti delle approssimazioni (che incorrono nella (2.8)) sui singoli autostati dell'energia. Il calcolo verrà qui effettuato dapprima per un sistema fisico con potenziale nullo e in seguito per uno con barriera di potenziale costante a V_0 .

Si consideri a tal proposito un problema con un potenziale nullo; gli stati stazionari $\varphi_k(x)$ di energia E_k per una particella di massa m sono:

$$\varphi_k(x) = e^{\pm ikx} \quad , \quad k \in \mathbb{R} \quad (2.31)$$

con

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad . \quad (2.32)$$

Come già sottolineato nella sezione 1.4, il generico stato stazionario di un potenziale nullo è detto onda piana. La derivata seconda di un'onda piana è

$$\frac{d^2 \varphi_k(x)}{dx^2} = -k^2 \varphi_k(x) \quad (2.33)$$

mentre nel calcolo numerico si è invece usata una approssimazione a tre punti della derivata seconda (si vedano le equazioni (2.6) e (2.8)) che agisce sullo stato stazionario come

$$\begin{aligned} \frac{\varphi_k(x + \Delta x) - 2\varphi_k(x) + \varphi_k(x - \Delta x)}{\Delta x^2} &= -\frac{2(1 - \cos(k\Delta x))}{\Delta x^2} \varphi_k(x) \approx \\ &\approx -k^2 \left(1 - \frac{k^2 \Delta x^2}{12}\right) \varphi_k(x) \quad . \quad (2.34) \end{aligned}$$

L'effetto dell'operatore di derivazione seconda sull'autostato $\varphi_k(x)$ (equazione (2.33)) è diverso da quello dell'approssimazione a 3 punti (equazione (2.34)); si può stimare

l'errore di troncamento commesso, sottraendo la (2.34) dalla (2.33) e facendo il modulo:

$$\begin{aligned} \left| \frac{d^2 \varphi_k(x)}{dx^2} - \frac{\varphi_k(x + \Delta x) - 2\varphi_k(x) + \varphi_k(x - \Delta x)}{(\Delta x)^2} \right| &= \\ &= \frac{k^2(\Delta x)^2}{12} = \frac{2m E^2(\Delta x)^2}{\hbar^2 12}. \end{aligned} \quad (2.35)$$

Questa quantità da una stima dell'errore che si commette nell'approssimazione dell'operatore di derivazione *quando questo agisce su un autostato* del potenziale nullo. Si noti che, in accordo con la (2.6), l'errore tende a 0 come un infinitesimo di secondo ordine.

Si consideri ora un sistema fisico in cui figura un pozzo di potenziale o una barriera, come quello mostrato in sezione 1.7. Nelle regioni esterne in cui il potenziale è nullo continua a valere quanto detto nel precedente paragrafo. Nella *regione II*, ovvero nell'intervallo $[0, l]$ in cui il potenziale è costante di valore V_0 ($V_0 < 0$ per un pozzo, $V_0 > 0$ per una barriera), le soluzioni dell'equazione agli autovalori sono

$$\varphi_{II}(x) = e^{\pm i k_2 x} \quad (2.36)$$

ove stavolta k_2 è

$$k_2 = \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}}. \quad (2.37)$$

Si sottolinea che con questa trattazione si tiene anche conto della possibilità che $E < V_0$ (situazione di *effetto tunnel*), ovvero quando l'espressione sotto radice è negativa; in tal caso basterà considerare k come valore immaginario.

Alla fine di conti analoghi a quelli effettuati su un potenziale nullo, si ottiene una condizione simile alla (2.35):

$$\begin{aligned} \left| \frac{d^2 \varphi_{II}(x)}{dx^2} - \frac{\varphi_{II}(x + \Delta x) - 2\varphi_{II}(x) + \varphi_{II}(x - \Delta x)}{(\Delta x)^2} \right| &= \\ &= \frac{(|k_2| \Delta x)^2}{12} = \frac{2m |E - V_0| (\Delta x)^2}{\hbar^2 12}. \end{aligned} \quad (2.38)$$

Questa equazione valuta l'errore di troncamento in una situazione più generale della (2.35); si noti come ponendo $V_0 = 0$ si ottenga la (2.35).

Si può dare una spiegazione intuitiva di questo risultato. La derivazione seconda a 3 punti (equazione (2.6)) ha come parametro il passo di discretizzazione spaziale Δx . Se l'autostato d'energia è una funzione che oscilla o varia "troppo velocemente" all'interno di un intervallo Δx si ha una cattiva stima numerica. Negli autostati d'energia in cui $E > V_0$ si ha infatti che il numero di oscillazioni per unità di spazio è proporzionale a $\sqrt{E - V_0}$ (si veda la figura 2.1). La (2.35) e la (2.38) quantificano proprio questa interpretazione. Inoltre tale interpretazione ci permette di estendere il discorso a una barriera di potenziale $V(x)$ di qualsivoglia forma (quella presentata nella sezione 1.6). Se si considera un autostato di energia E , la (2.38) si può estendere come

$$\begin{aligned} \left| \frac{d^2 \varphi_{II}(x)}{dx^2} - \frac{\varphi_{II}(x + \Delta x) - 2\varphi_{II}(x) + \varphi_{II}(x - \Delta x)}{(\Delta x)^2} \right| &< \\ &< \frac{2m \max_{x \in \mathbb{R}} |E - V(x)| (\Delta x)^2}{\hbar^2 12}. \end{aligned} \quad (2.39)$$

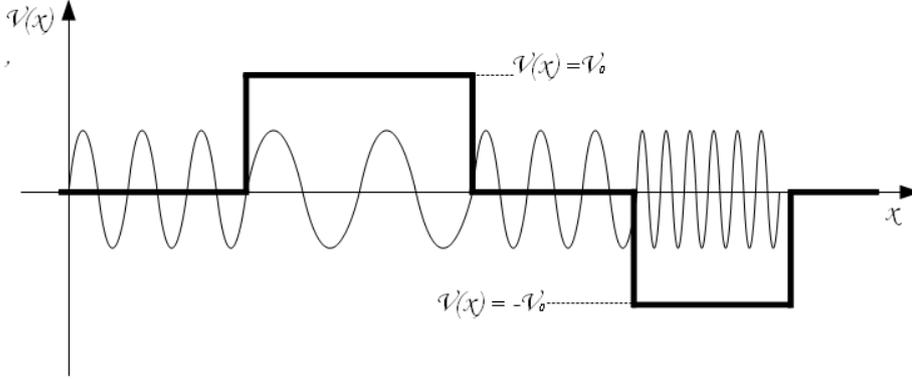


Figura 2.1: Autostato in potenziale a gradini

Nei paragrafi precedenti si è valutato l'errore di troncamento sugli stati stazionari; per valutare l'errore di troncamento quando si agisce invece su un *pacchetto d'onde* ci si può rifare alle quantità (2.35) e (2.38) considerando lo sviluppo in stati stazionari del pacchetto d'onde. Sia infatti la seguente sovrapposizione di stati stazionari:

$$\psi(x, 0) = \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) \varphi_k(x) dk . \quad (2.40)$$

Si definisca ora E_m come l'energia dello stato stazionario $\varphi_m(x)$ per cui nell'intervallo dato da $m < k$ si ha $g(k)$ trascurabile; intuitivamente, il valore di energia più basso tale che

$$E_m \text{ tale che } \frac{\int_m^{+\infty} |g(k)|^2 dk}{\int_{-\infty}^{+\infty} |g(k)|^2 dk} \ll \varepsilon \quad (2.41)$$

ove ε è una quantità "piccola", confrontabile con l'accuratezza numerica del computer o comunque con il grado di accuratezza che si vuole ottenere. Allora, secondo la quantità nella (2.38), l'errore numerico dovuta alla discretizzazione spaziale si può limitare rispettando la condizione

$$\frac{(\max_{x \in \mathbb{R}} |E_m - V(x)| \Delta x)^2}{12} \ll 1 . \quad (2.42)$$

Con questa disequazione si è trovata una "ricetta" per diminuire l'influenza sugli errori di troncamento che nascono dalla discretizzazione dell'intervallo spaziale; tale ricetta tuttavia non fornisce precise indicazioni quantitative per un pacchetto d'onda. Per avere delle indicazioni quantitative si farà ricorso nel seguito a test che confrontano il risultato computazionale con la soluzione analitica di un problema risolto.

Si cercano ora analoghe considerazioni che coinvolgano il passo di discretizzazione temporale Δt . Si consideri il pacchetto d'onde al tempo $t = t_0$ come sovrapposizione di stati stazionari $\varphi_k(x)$ di energia E_k . Ogni autostato si evolve in un lasso di tempo Δt come (si veda equazione (1.17))

$$\mathcal{U}_{\Delta t} \varphi_k(x) = e^{-iE_k \Delta t / \hbar} \varphi_k(x) . \quad (2.43)$$

Si consideri ora l'applicazione dell'operatore evoluzione approssimato dalla (2.12) della sezione 2.1 su ogni autostato, in modo da farlo evolvere dall'istante t a $t + \Delta t$; si ha allora

$$\frac{1 - iE_k\Delta t/2\hbar}{1 + iE_k\Delta t/2\hbar} \varphi_k(x) = e^{-2i \arctan\left(\frac{E_k\Delta t}{2\hbar}\right)} \varphi_k(x). \quad (2.44)$$

La discrepanza tra l'evoluzione esatta (2.43) e quella approssimata della (2.44) si può interpretare fisicamente come una differenza di fase che si accumula col tempo tra l'evoluzione analitica e quella numerica su ogni autostato; questa differenza di fase α viene incrementata ad ogni passo temporale della quantità

$$\alpha = \frac{E_k\Delta t}{\hbar} \left(1 - \frac{2\hbar}{E_k\Delta t} \arctan\left(\frac{E_k\Delta t}{2\hbar}\right) \right) \approx \frac{E_k^3\Delta t^3}{12\hbar^3}, \quad (2.45)$$

quindi se ne ricava una ulteriore condizione, simile alla (2.42):

$$\frac{E_k^3\Delta t^3}{12\hbar^3} \ll 1. \quad (2.46)$$

Anche in questo caso occorre effettuare dei test che confrontino i risultati analitici con i risultati numerici per ottenere una indicazione quantitativa sul passo Δt da usare.

2.4 Simulazione per un pacchetto d'onde gaussiano in potenziale nullo

In questa sezione si simula con l'algoritmo presentato nella sezione 2.1 la propagazione di un pacchetto d'onde gaussiano in potenziale nullo. Di questo problema è nota la soluzione analitica, e questo ci permette di quindi di effettuare dei confronti con la soluzione numerica al fine di testare la bontà dell'algoritmo usato. Per la definizione del pacchetto d'onde gaussiano e la risoluzione del problema della propagazione si consulti la sezione 1.5. Per poter fare un confronto tra soluzione analitica e computazionale occorre prima definire una quantità che permetta di valutare la differenza tra i risultati. A questo scopo definiamo la quantità

$$\bar{\epsilon}(N_x, N_t) = \frac{1}{N_x N_t} \sum_{n=1}^{N_t} \sum_{j=1}^{N_x} |\psi_j^n - \psi(x_j, t_n)|, \quad (2.47)$$

ove ψ_j^n è la soluzione numerica sul punto (x_j, t_n) della griglia e $\psi(x_j, t_n)$ è la soluzione analitica sullo stesso punto. Per come è definita, la quantità $\bar{\epsilon}(N_x, N_t)$ rappresenta la stima del valor medio dell'errore di discretizzazione che si commette in ogni punto della griglia

Il problema risolto analiticamente con cui si è effettuato il confronto è la propagazione del pacchetto gaussiano (si veda l'equazione dell'evoluzione (1.50)). La funzione d'onda iniziale è

$$\psi(x, 0) = \left(\frac{2}{\pi a^2} \right)^{1/4} e^{ik_0 x} e^{-x^2/a^2} \quad (2.48)$$

con

- Posizione media iniziale $x_0 = 0$.

- Impulso medio iniziale $p_0 = k_0 \hbar = 0$
- Parametro $a = 1$, ovvero scarto quadratico medio iniziale della posizione $\sigma_x = a/2$ e scarto quadratico medio dell'impulso pari a $\sigma_p = \hbar/a$.

Si sottolinea che nel test saranno usate quantità adimensionali, prescindendo quindi dal significato strettamente fisico del problema per focalizzare l'attenzione sulla questione dell'errore numerico.

Per effettuare i test si è scritto un algoritmo che

1. Costruisce una griglia in un dominio dato da $[-L, L] \times [0, t_{max}]$, ove $[-L, L]$ è l'intervallo spaziale, $[0, t_{max}]$ è l'intervallo temporale. Il parametro t_{max} viene stabilito in funzione di L secondo un criterio che sarà specificato fra poco.
2. Calcola numericamente la soluzione analitica della propagazione sui punti della griglia.
3. Calcola la soluzione numerica della propagazione con l'algoritmo presentato.
4. Effettua il confronto calcolando la quantità $\bar{e}(N_x, N_t)$.
5. Ripete queste operazioni dal punto 1 per varie combinazioni di N_x e N_t .
6. Presenta con un grafico i risultati delle varie combinazioni di N_x e N_t .

Gli intervalli spaziale e temporale vengono stabiliti in base in modo da evitare "l'urto ai bordi" menzionato nella sezione 2.1. In questa sezione è stato infatti esposto che per via delle condizioni nell'equazione (2.9) l'algoritmo calcola l'evoluzione temporale del pacchetto gaussiano come se fosse in un box di potenziale di intervallo $[-L, L]$. Bisogna quindi imporre una limite all'intervallo di temporale in modo che la funzione d'onda non urti le pareti riflettendosi e "auto-interferendo" (si veda la figura 2.2). Per trovare un criterio si consideri l'evoluzione temporale dello scarto quadratico medio della posizione:

$$\sigma_x(t) = \frac{a}{2} \sqrt{1 + \frac{4\hbar^2 t^2}{m^2 a^2}}. \quad (2.49)$$

Si è allora imposto un estremo superiore t_{max} per l'intervallo di tempo in modo che gli estremi dell'intervallo spaziale fossero distanziati dal centro x_0 della gaussiana almeno di $5\sigma_x(t)$, ovvero che sui lati la funzione d'onda valesse al massimo $|\psi(5\sigma(t), t)| \approx 0.012$. t_{max} si trova esplicitando la (2.49):

$$\sigma_x(t) \leq \frac{L}{5} \rightarrow t_{max} = \frac{a^2 m}{2\hbar} \sqrt{\frac{4L^2}{(5)^2 a^2} - 1}. \quad (2.50)$$

Si specifica che il (5) nella parentesi è proprio il numero scelto di scarti quadratici medi che deve distare il centro x_0 dai bordi. Si potrebbe incrementare ulteriormente questa distanza per diminuire ulteriormente l'effetto dell'urto ai bordi; prove computazionali hanno comunque mostrato che non si hanno miglioramenti apprezzabili nei test. Il parametro L conviene dunque sceglierlo piuttosto grande in modo che t_{max} pure sia grande; in questo modo il test si effettua su un intervallo più ampio e acquista un maggiore significanza in seno alla questione della propagazione degli errori di troncamento.

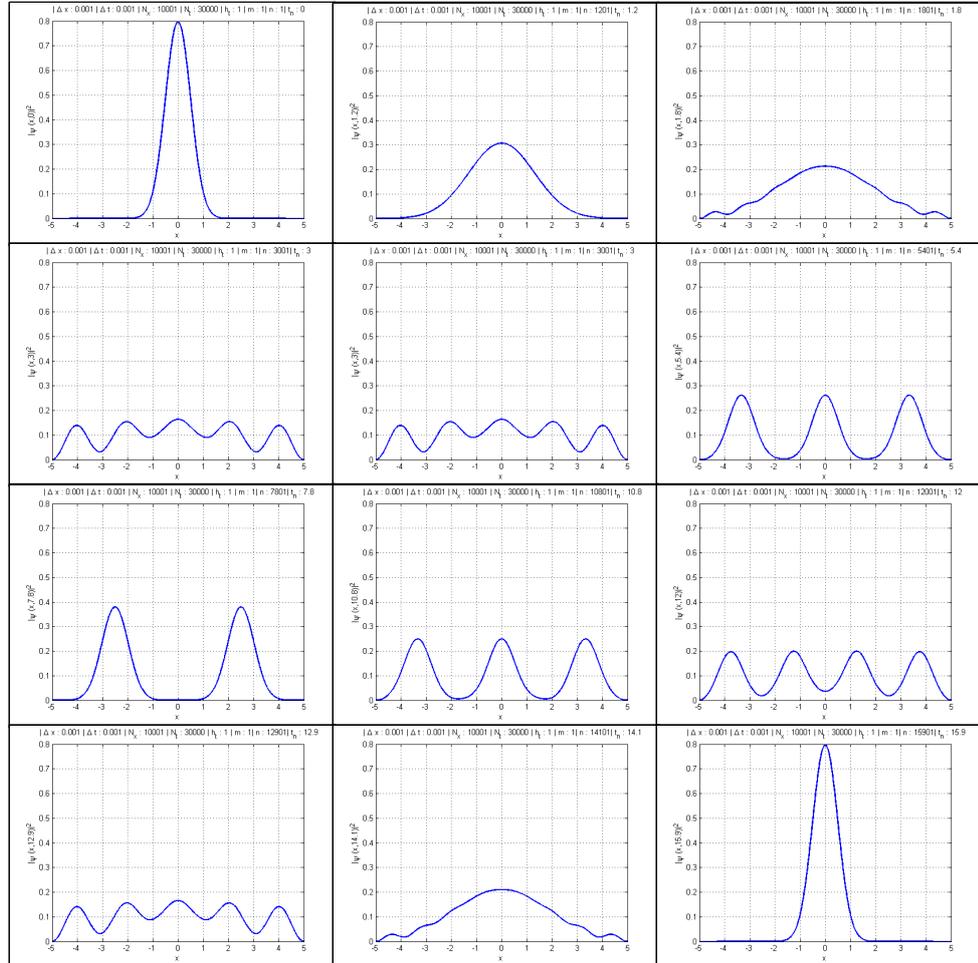


Figura 2.2: Evoluzione di pacchetto d'onde gaussiano in un box di potenziale.

Si noti che tra un fotogramma e un altro non passa sempre lo stesso intervallo di tempo. Questo al fine di evidenziare gli stati stazionari della buca di potenziale per cui passa l'evoluzione della funzione d'onda. Su ogni figura sono indicati l'indice dell'istante e l'istante corrispondente a tale indice.

Si sono quindi scelti come ultimi parametri $\hbar = 1$, massa $m = 1$, $L = 100$ da cui $t_{max} \approx 20$.

I grafici di livello in figura 2.3 mostrano $\bar{e}(N_x, N_t)$ e l'equivalente $\bar{e}(\Delta x, \Delta t)$. A fianco di questi grafici vi è una legenda di colori che indica che le regioni segnate da colori caldi sono costituite da punti per cui la quantità \bar{e} ha valore più elevato; le regioni con colori freddi sono quelle che per contro hanno un valore di \bar{e} più basso. Come ci si aspetta, all'aumentare del prodotto $N_x N_t$ si ha una diminuzione di $\bar{e}(N_x, N_t)$ e viceversa. Si nota anche come la stabilità dell'algoritmo usato permette qualsiasi combinazione di Δx e Δt . Si nota inoltre come \bar{e} dipenda "più fortemente" dal passo di discretizzazione spaziale.

Dai grafici in figura 2.3 si possono ricavare condizioni quantitative più precise di quelle delle disequazioni (2.42) e (2.46). Occorre però stabilire la quantità E_m definita nella 2.41. A tal proposito, la distribuzione degli impulsi del pacchetto gaussiano usato per la simulazione è (si veda la (1.45))

$$|\tilde{\psi}(p, t)|^2 = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\sigma_p^2)}} e^{-\frac{p^2}{2\sigma_p^2}} \quad (2.51)$$

con

$$\sigma_p = \frac{\hbar}{a}. \quad (2.52)$$

È importante sottolineare che la distribuzione dei momenti e dell'energia è costante nel tempo, quindi la quantità E_m che si cerca può essere cercata nella condizione iniziale e rimane valida per tutta l'evoluzione. Considerando che nel caso di una particella libera si ha $E = p^2/2m$ si trova una distribuzione di probabilità di energia data da

$$P(E) = \frac{1}{\sqrt{2\pi E_0}} \frac{e^{-\frac{E}{E_0}}}{E} \quad (2.53)$$

ove

$$E_0 = \frac{\sigma_p^2}{m} = \frac{\hbar^2}{a^2 m}. \quad (2.54)$$

Da questa funzione appare ragionevole porre $E_m = 5E_0$, con $P(E) \approx 5.3 \times 10^{-4}$. Dati i parametri del problema, si ha $E_m = 5$

Trovati E_m e i grafici di \bar{e} si può finalmente dare una stima quantitativa più precisa per le relazioni (2.42) e (2.46). Nel problema dato con i parametri dati, per avere un errore globale di discretizzazione medio ci circa

$$\bar{e} \approx 0.05 \quad (2.55)$$

occorre un passo spaziale di almeno $\Delta x \approx 0.1$ e un passo temporale di almeno $\Delta t \approx 0.1$, quindi

$$\frac{2m E_m (\Delta x)^2}{\hbar^2} \frac{E_m (\Delta x)^2}{12} \approx 4.2 \times 10^{-5} \quad (2.56)$$

e

$$\frac{E_m^3 (\Delta t)^3}{12\hbar^3} \approx 0.01. \quad (2.57)$$

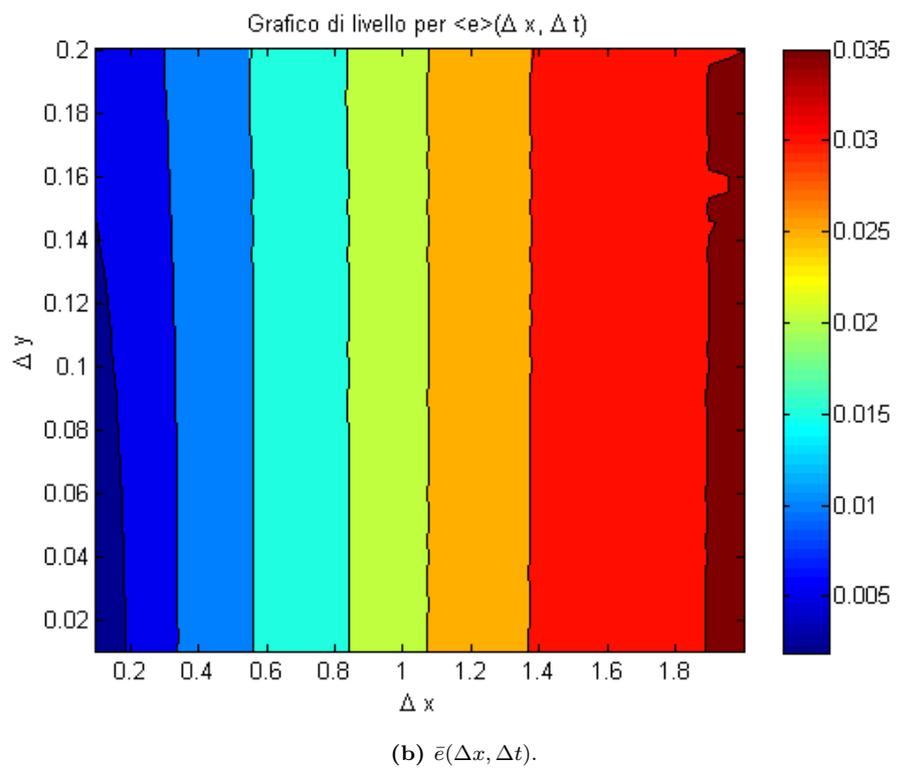
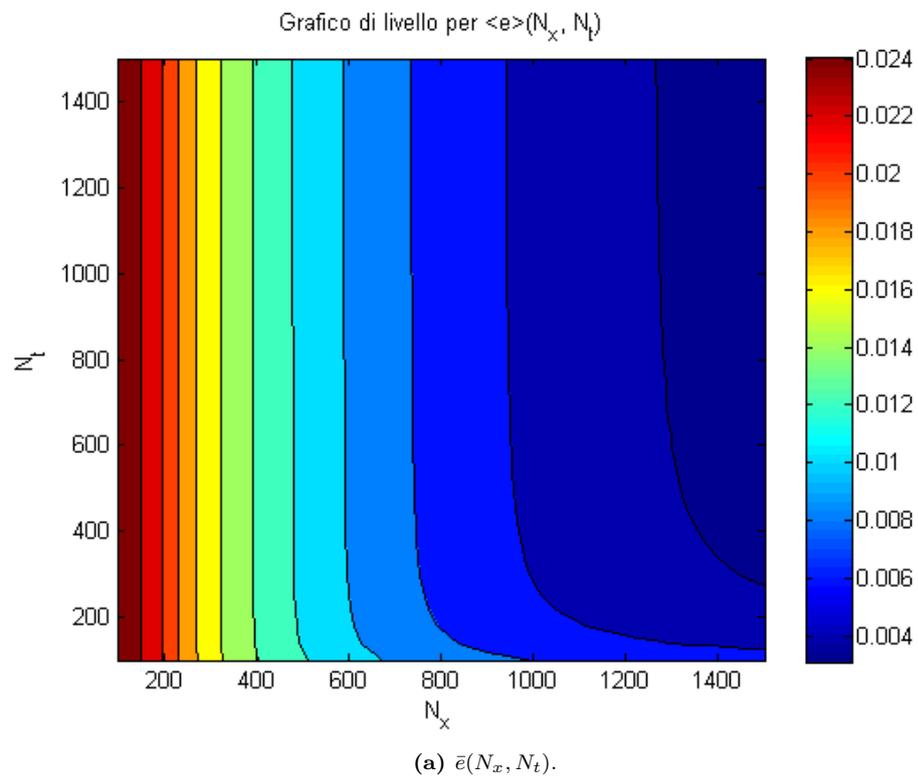


Figura 2.3: Andamento dell'errore di discretizzazione medio

Questo risultato della simulazione è indubbiamente legato ai parametri iniziali del problema. Tuttavia questo non vuol dire che tali test siano fini a se stessi; questi possono invece essere usati per valutare l'errore che si commette nel calcolo numerico dell'evoluzione di un pacchetto d'onde *di qualsiasi forma e in qualsiasi potenziale*, a prescindere dalla conoscenza della soluzione analitica. Infatti si può

- Formulare il problema A di cui si cerca la soluzione numerica.
- Impostare i parametri per il calcolo numerico (valori delle costanti, intervalli spaziale e temporale, passi di discretizzazione)
- Valutare la quantità E_m e $\max_{x \in \mathbb{R}} |E_m - V(x)|$
- Effettuare dei test con un problema B di cui si ha la soluzione analitica con stessi parametri per il calcolo numerico e stessa maggiorazione dell'energia cinetica $\max_{x \in \mathbb{R}} |E_m - V(x)|$.

I risultati del test daranno un errore di discretizzazione globale medio $\bar{\epsilon}$ sul problema B che sarà circa eguale a quello del risultato del calcolo numerico effettuato sul problema A . Ad esempio i risultati ottenuti in questa sezione possono essere usati per calcolare l'evoluzione in potenziale nullo di un pacchetto d'onde di qualsiasi forma con stessi parametri per il calcolo numerico e stesso E_m .

2.5 Funzione d'onda nella rappresentazione dei momenti

In questa sezione esporremo un metodo per calcolare numericamente la funzione d'onda $\tilde{\psi}(p, t)$ nella rappresentazione dei momenti dalla funzione d'onda $\psi(x, t)$ nella rappresentazione delle coordinate ricavata con il metodo numerico di sezione 2.1. In questo modo si potrà studiare l'evoluzione temporale del sistema nelle due rappresentazioni.

Presentiamo prima una operazione su vettori numerici, la Discrete Fourier Transform, che è una "versione al discreto" della trasformata di Fourier. Consideriamo il vettore numerico $a = (a_1, \dots, a_j, \dots, a_N)$ di valori complessi. Si definisce *Discrete Fourier Transform* l'operazione che trasforma il vettore a in un vettore $b = (b_1, \dots, b_l, \dots, b_N)$ secondo l'equazione

$$b_l = DFT(a) = \sum_{j=1}^N a_j e^{-\frac{2\pi i}{N}(j-1)(l-1)} \quad l \in \{1, 2, \dots, N\} . \quad (2.58)$$

Questa definizione è il prodotto scalare di ordine 2

$$(u_l, a) = \sum_{j=1}^N (u_l)_j^* a_j \quad (2.59)$$

ove il vettore u_l , per l fissato, ha componenti

$$(u_l)_j = e^{\frac{2\pi i}{N}(j-1)(l-1)} \quad j \in \{1, 2, \dots, N\} . \quad (2.60)$$

Si può notare che il vettore u_l è una versione “al discreto” di un’onda piana con variabile j e avente numero d’onda

$$k_l = \frac{2\pi}{N}(l-1) . \quad (2.61)$$

Per una maggiore chiarezza nei calcoli che seguiranno definiamo $j' = j-1$ e $l' = l-1$. È importante notare la seguente relazione:

$$(u_l, u_m) = \sum_{j'=0}^{N-1} e^{\frac{2\pi i}{N}(m-l)j'} = \begin{cases} N & l = m \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases} . \quad (2.62)$$

La trasformazione (2.58) può essere eseguita tramite calcolo matriciale; tuttavia esiste un algoritmo più veloce che esegue tale trasformazione che prende il nome di *Fast Fourier Transform* (FFT). Il funzionamento di questo algoritmo esula dall’intento di questa sede.

Consideriamo ora la trasformata di Fourier Quantistica della funzione d’onda a un dato istante t_n appartenente alla griglia:

$$\tilde{\psi}(p, t_n) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x, t_n) e^{-ipx/\hbar} . \quad (2.63)$$

Approssimiamo tale integrale in modo da esprimerlo rispetto alla soluzione numerica data dal vettore ψ^n ; utilizzando il metodo dei trapezi si ottiene

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}_p^n &= \sum_{j=1}^{N_x-1} \frac{\Delta x}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{e^{-ipx_{j+1}/\hbar} \psi_{j+1}^n + e^{-ipx_j/\hbar} \psi_j^n}{2} = \\ &= \frac{\Delta x}{\sqrt{2\pi\hbar}} \sum_{j=1}^{N_x} e^{-ipx_j/\hbar} \psi_j^n - \frac{1}{2} \frac{\Delta x}{\sqrt{2\pi\hbar}} (e^{-ipx_1/\hbar} \psi_1^n + e^{-ipx_{N_x}/\hbar} \psi_{N_x}^n) \approx \\ &\approx \frac{\Delta x}{\sqrt{2\pi\hbar}} \sum_{j=1}^{N_x} e^{-ipx_j/\hbar} \psi_j^n . \end{aligned} \quad (2.64)$$

L’approssimazione della sommatoria nell’ultimo passaggio è ragionevole per N_x grande e una funzione d’onda numerica ψ_j^n localizzata al centro dell’intervallo spaziale, per cui gli elementi ψ_1^n e $\psi_{N_x}^n$ sono trascurabili. Le simulazioni di evoluzione del pacchetto verificheranno questa condizione, dacché si eviterà l’urto ai bordi spaziali della soluzione numerica (si veda la sezione 2.1).

Per calcolare la sommatoria all’ultimo membro della (2.64) si può far uso della DFT. In questo modo si ha il vantaggio di calcolare la sommatoria (2.64) attraverso l’algoritmo FFT, ricavando una maggiore velocità di calcolo. Attraverso alcune sostituzioni si dimostra che si può calcolare il vettore numerico $\tilde{\psi}^n$ che rappresenta la funzione d’onda dei momenti con

$$\tilde{\psi}_l^n = e^{\frac{2\pi i x_1 l}{N \Delta x}} (DFT(\bar{\psi}^n))_j \frac{\Delta x}{\sqrt{2\pi\hbar}} \quad (2.65)$$

ove il vettore $\bar{\psi}^n$ è definito da

$$\bar{\psi}_j^n = \psi_j^n e^{-i\pi(j-1)} \quad j \in \{1, \dots, N_x\} . \quad (2.66)$$

La componente l -esima del vettore $\tilde{\psi}^n$ è il valore numerico della funzione d'onda nella rappresentazione dei momenti sul momento p_l dato da:

$$p_l = -\frac{\pi\hbar}{\Delta x} + \frac{2\pi\hbar}{N_x\Delta x}(l-1). \quad (2.67)$$

La soluzione numerica è quindi definita su un vettore \mathbf{p} limitato e discretizzato di momenti p_l . Più precisamente si hanno le seguenti proprietà:

- L'insieme dei momenti p_l ha N_x elementi.
- Il momento minimo è

$$p_1 = -\frac{\pi\hbar}{\Delta}. \quad (2.68)$$

- Tra un momento p_l e il successivo p_{l+1} si ha un passo di discretizzazione del momento pari a

$$\Delta p = \frac{2\pi\hbar}{N_x\Delta x}. \quad (2.69)$$

- Il momento l -esimo è

$$p_l = \frac{-\pi\hbar}{\Delta p} + (l-1)\Delta p \quad (2.70)$$

- Il momento massimo è

$$p_{N_x} = p_1 + (N_x - 1)\Delta p = \frac{\pi\hbar}{\Delta x} - \Delta p. \quad (2.71)$$

L'insieme dei momenti non è quindi perfettamente simmetrico.

È interessante sottolineare che queste proprietà del vettore \mathbf{p} dipendono solo dalla lunghezza dell'intervallo spaziale, che vale $(x_{N_x} - x_1) \approx N_x\Delta x$, e dal passo di discretizzazione spaziale Δx .

Capitolo 3

Risultati

3.1 Barriera quadrata di potenziale

La prima applicazione del metodo numerico che esporremo sarà la propagazione di un pacchetto d'onde gaussiano che urta contro una barriera quadrata di potenziale. Per una disquisizione sugli autostati e sul coefficiente di trasmissione si può consultare la sezione 1.7.

Per poter fare una simulazione numerica occorre prima determinare i parametri del problema fisico e quelli del calcolo numerico (si veda (2.3)). Alcuni di questi parametri sono stati impostati arbitrariamente; altri invece devono essere impostati in modo da ottimizzare alcune condizioni per calcolo numerico. I parametri scelti arbitrariamente sono:

- La costante di Planck ridotta: $\hbar = 1$.
- La massa della particella: $m = 1$.
- L'intervallo spaziale. Si è posto $[x_1, x_{N_x}] = [-30, 30]$. Tale scelta influenza il passo di discretizzazione Δp del momento per la funzione d'onda nella rappresentazione dei momenti (equazione (2.69) nella sezione 2.5).
- La posizione e la larghezza della barriera. Si è scelto di porre la barriera quadrata sull'intervallo $[x_a, x_b] = [0, 1]$. Come in sezione 1.7 chiameremo *regione I* l'intervallo $[x_1, x_a]$, *regione II* l'intervallo $[x_a, x_b]$, *regione III* l'intervallo $[x_b, x_{N_x}]$. Si veda la figura 3.1.
- L'energia potenziale della barriera V_0 è stata scelta in modo tale che il coefficiente di trasmissione dell'equazione (1.85) presentasse alcune oscillazioni. A tal proposito si è quindi impostato $V_0 = 20$, in modo che il coefficiente $\sqrt{2ml^2V_0/\hbar^2}$ dell'equazione (1.85) fosse circa eguale a 2π . Il grafico del coefficiente di trasmissione con $\sqrt{2ml^2V_0/\hbar^2} = \sqrt{40}$ è mostrato nella figura 1.2 nella sezione 1.7.
- Lo scarto quadratico medio sulla posizione è stato posto a $\sigma_x = 1$.
- Il passo di discretizzazione spaziale e temporali sono stati impostati a $\Delta x = 0.0005$ e $\Delta t = 0.0005$, in modo da sfruttare al meglio le capacità di calcolo della macchina. Da Δx e dall'intervallo spaziale $[x_1, x_{N_x}]$ si ricava che $N_x = 120001$.

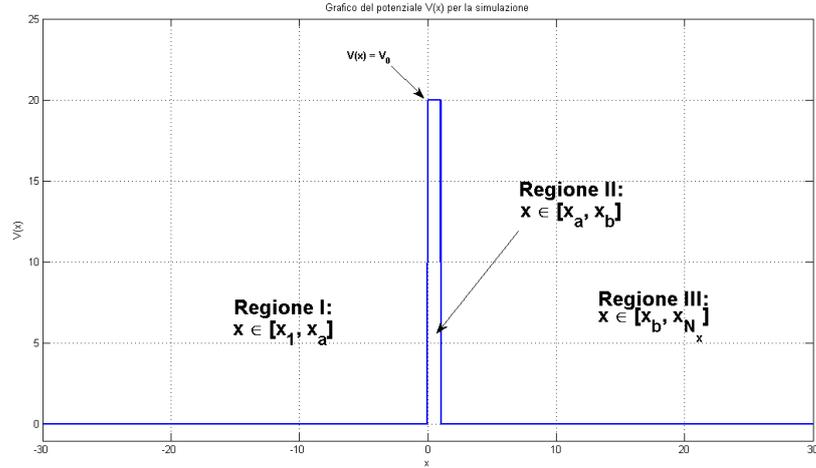


Figura 3.1: Grafico della barriera di potenziale $V(x)$ per la simulazione.

- Si è posto il valore medio del momento p_0 a 8. Per tale valore si ha $\eta = 1.6$ e $T(\eta) \approx 0.8$. Nei pressi di questo valore, come si nota dal grafico in figura 1.2, vi è un punto di minimo relativo di $T(\eta)$.

Dati questi parametri, gli altri sono stati scelti di conseguenza:

- La media spaziale x_0 del pacchetto gaussiano a $x_0 = -6$. In questo modo x_0 dista almeno $6\sigma_x$ dalla barriera.
- Si è fatto evolvere il sistema in modo da evitare l'urto ai bordi. Si è ottenuto così nel processo di calcolo numerico un numero di punti temporali N_t pari a 6001. Dato $\Delta t = 0.0005$, si ha così che l'estremo superiore t_{max} dell'intervallo temporale $[0, t_{max}]$ è $t_{max} = 3$.

Prima di eseguire la simulazione dell'urto contro una barriera quadrata si è eseguita una simulazione di propagazione di pacchetto d'onde gaussiano in potenziale nullo, come quello della sezione 1.5, in modo da valutare l'errore di calcolo. Il risultato è stato un errore di troncamento globale medio di $\bar{\epsilon} = 0.00005$. Tale errore è maggiore o comparabile con quello della simulazione dell'urto contro la barriera quadrata che si effettua in questa sezione; infatti dall'equazione (2.38) nella sezione 2.3 si ha che l'errore di troncamento su ogni autostato dipende da

$$\frac{2m}{\hbar^2} \frac{|E - V_0|(\Delta x)^2}{12}. \quad (3.1)$$

Quindi l'errore di troncamento su ogni autostato è maggiore nel caso della particella libera che nel caso della particella che urta contro una barriera di potenziale.

La figura 3.2 mostra una successione di vari fotogrammi dell'evoluzione di $|\psi(x, t)|^2$ ottenuta numericamente. Si sottolinea che per comodità di visualizzazione l'intervallo spaziale graficato non è sempre lo stesso.

Il primo fotogramma (all'istante $t_1 = 0$) mostra $|\psi(x)|^2$ all'istante iniziale, impostato con i parametri sopra esposti. Nel secondo fotogramma (istante $t_{721} = 0.36$) il pacchetto d'onde si è avvicinato alla barriera. Dal terzo fotogramma ($t_{1081} = 0.54$)

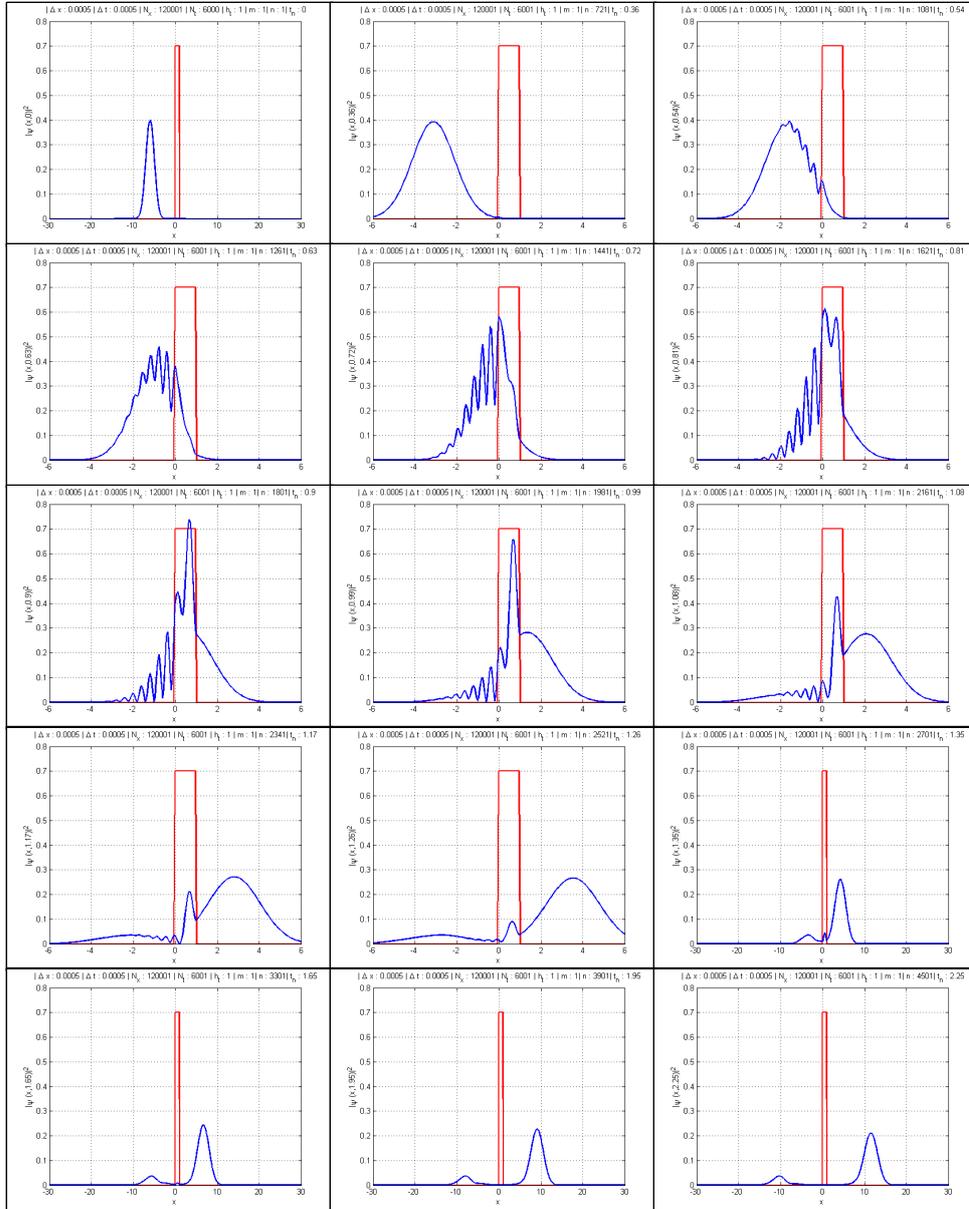


Figura 3.2: Fotogrammi dell'urto di pacchetto contro barriera quadrata di potenziale. Si noti che l'intervallo spaziale non è uguale per tutte le figure, per migliorare la visualizzazione del fenomeno. Inoltre il lasso di tempo tra un fotogramma e quello successivo non è costante. In alto a ogni fotogramma si possono leggere le varie informazioni a riguardo.

all'undicesimo ($t_{2521} = 1.26$) avviene la collisione del pacchetto d'onde con la barriera. Il comportamento oscillatorio di $|\psi(x)|^2$ a sinistra della barriera è provocato dalla interferenza della parte del pacchetto d'onde riflessa con quella che ancora deve raggiungere la barriera. Tale comportamento non è invece presente nel pacchetto che sta oltrepassando la barriera. Durante tutto il processo dell'urto, una parte del pacchetto rimane imprigionata nella barriera formando ivi un massimo relativo; questa parte si disperde col passare del tempo, formando le code del pacchetto riflesso e di quello trasmesso. Dal dodicesimo fotogramma ($t_{2701} = 1.35$) all'ultimo ($t_{4501} = 2.25$) il pacchetto riflesso e trasmesso lasciano la barriera; nel contempo la parte rimasta dentro si "esaurisce". Sottolineiamo che i due pacchetti non hanno più la forma gaussiana di quello iniziale.

Calcoliamo adesso numericamente la probabilità di trovare la particella in qualsivoglia delle tre regioni in ogni istante di tempo. A tal proposito definiamo:

1. La probabilità $\mathcal{P}_I(t)$ di trovare la particella nell'istante t nella *regione I*. Questa quantità è data da

$$\mathcal{P}_I(t) = \int_{x_1}^{x_a} |\psi(x, t)|^2 dx . \quad (3.2)$$

2. La probabilità $\mathcal{P}_{II}(t)$ di trovare la particella nell'istante t nella *regione II*, data da

$$\mathcal{P}_{II}(t) = \int_{x_a}^{x_b} |\psi(x, t)|^2 dx . \quad (3.3)$$

3. La probabilità $\mathcal{P}_{III}(t)$ di trovare la particella nell'istante t nella *regione III*, data da

$$\mathcal{P}_{III}(t) = \int_{x_b}^{x_{N_x}} |\psi(x, t)|^2 dx . \quad (3.4)$$

Queste tre quantità possono venir calcolate numericamente utilizzando il metodo dei trapezi sui moduli quadri delle componenti del vettore ψ^n che rappresenta la funzione d'onda all'istante t_n .

Il grafico in figura 3.3 mostra il risultato della suddetta integrazione numerica. Si ha

- In blu il grafico di $\mathcal{P}_I(t)$
- In verde il grafico di $\mathcal{P}_{II}(t)$
- In rosso il grafico di $\mathcal{P}_{III}(t)$.
- In celeste il grafico dell'integrale numerico su tutto l'intervallo spaziale $[x_1, x_{N_x}] = [-30, 30]$ in ogni istante t . Questo grafico è la somma su ogni istante di dei tre grafici precedenti.

Si noti come il grafico in celeste, che è l'integrale numerico su tutto l'intervallo spaziale, rimane eguale a 1; questo mostra che l'approssimazione dell'operatore evoluzione in forma di Cayley nell'equazione (2.12) conserva la norma della soluzione numerica. Dall'altro lato si è sperimentato che effettivamente l'approssimazione dell'equazione (2.10) non conserva la norma e presenta maggiore instabilità numerica. Verso la fine

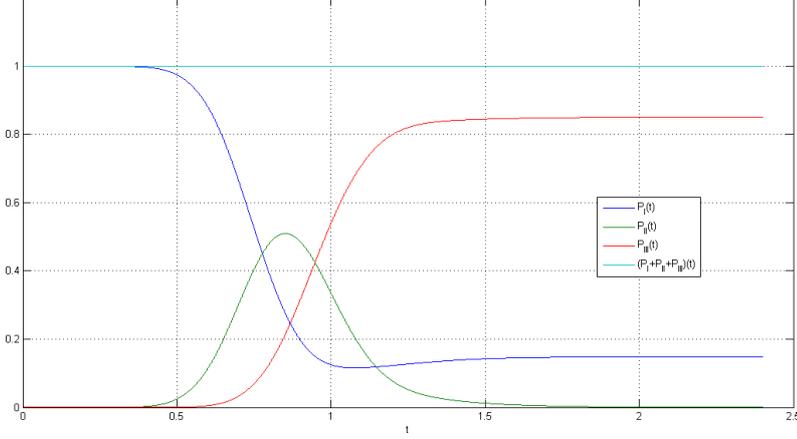


Figura 3.3: Integrazione numerica di $|\psi(x,t)|^2$ sulle tre regioni spaziali in funzione del tempo.

della simulazione, quando t si avvicina a t_{max} , i grafici di $\mathcal{P}_I(t), \mathcal{P}_{II}(t), \mathcal{P}_{III}(t)$ si appiattiscono. Questa parte del grafico corrisponde in effetti all'intervallo di tempo dopo il completamento dell'interazione tra la funzione d'onda e la barriera. In questo intervallo temporale il pacchetto d'onde è scisso in una parte riflessa che viaggia verso $-\infty$ e l'altra trasmessa che viaggia verso $+\infty$, lasciando la barriera di potenziale. Da questo si ricava che $\mathcal{P}_I(t)$ e $\mathcal{P}_{III}(t)$ per $t \rightarrow t_{max}$ sono rispettivamente la probabilità di misurare la riflessione della particella e la probabilità di misurare la trasmissione della particella. Il calcolo numerico restituisce che

- La probabilità di trasmissione è $\mathcal{P}_{III}(t_{max}) = 0.851$.
- La probabilità di riflessione è $\mathcal{P}_I(t_{max}) = 0.149$.

Sottolineiamo che il coefficiente di trasmissione per uno stato stazionario con momento ben definito $p_0 = 8$, ovvero eguale al momento medio del pacchetto, è $T = 0.8$.

Passiamo ora all'analisi dell'evoluzione della funzione d'onda nella rappresentazione dei momenti $\tilde{\psi}(p, t)$, ottenuta tramite l'uso della DFT sui vettori ψ^n (si veda la sezione 2.5). Dai parametri di calcolo scelti, si ha che

- I vettori $\tilde{\psi}^n$ che rappresentano la funzione d'onda dei momenti all'istante t_n hanno N_x elementi.
- Il passo di discretizzazione del momento è

$$\Delta p = \frac{2\pi\hbar}{N_x \Delta x} \approx 0.1047 . \quad (3.5)$$

- Il momento minimo p_1 e quello massimo p_{N_x} sono approssimativamente eguali in modulo e valgono

$$p_1 = -\frac{\pi\hbar}{\Delta x} \approx -6.28 \times 10^3 \quad (3.6)$$

$$p_2 \approx -p_1 . \quad (3.7)$$

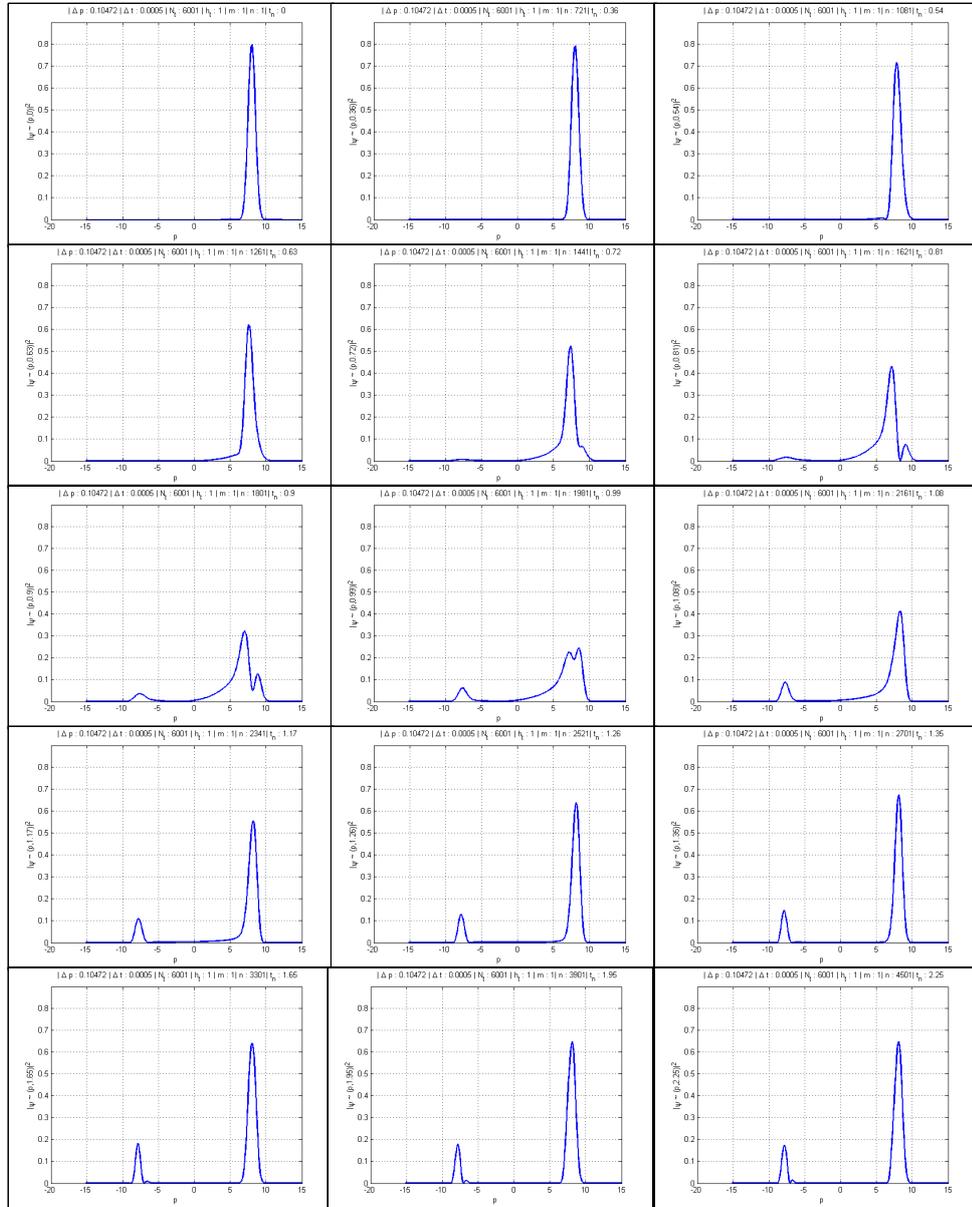


Figura 3.4: Evoluzione temporale di $|\tilde{\psi}(p, t)|^2$

Il grafico mostra una successione di istanti della funzione d'onda nella rappresentazione dei momenti. La successione degli istanti è eguale a quella dei grafici in figura 3.2; in questo modo si può confrontare l'evoluzione di $|\psi(x, t)|^2$ e $|\tilde{\psi}(p, t)|^2$.

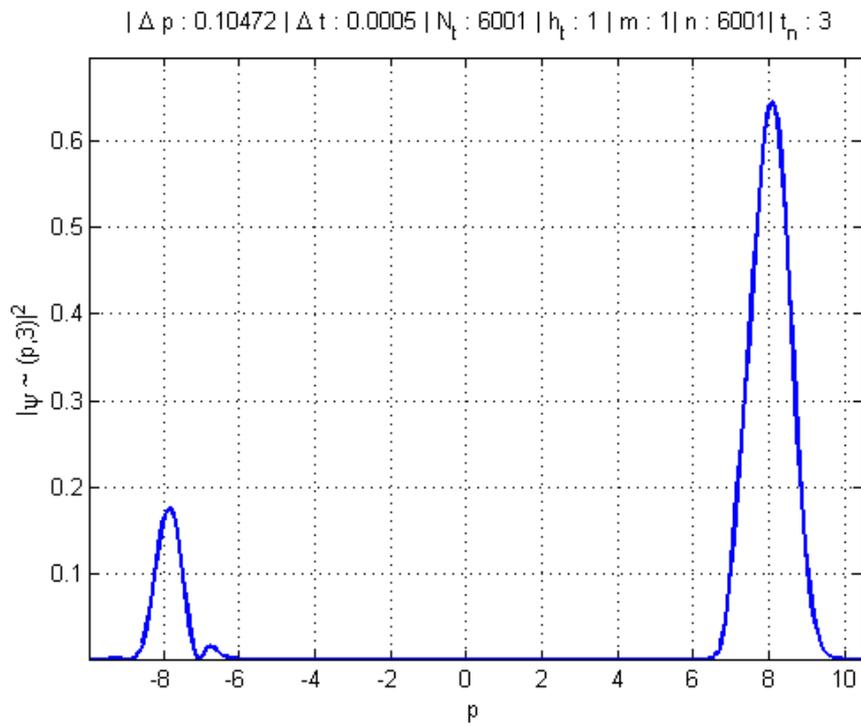
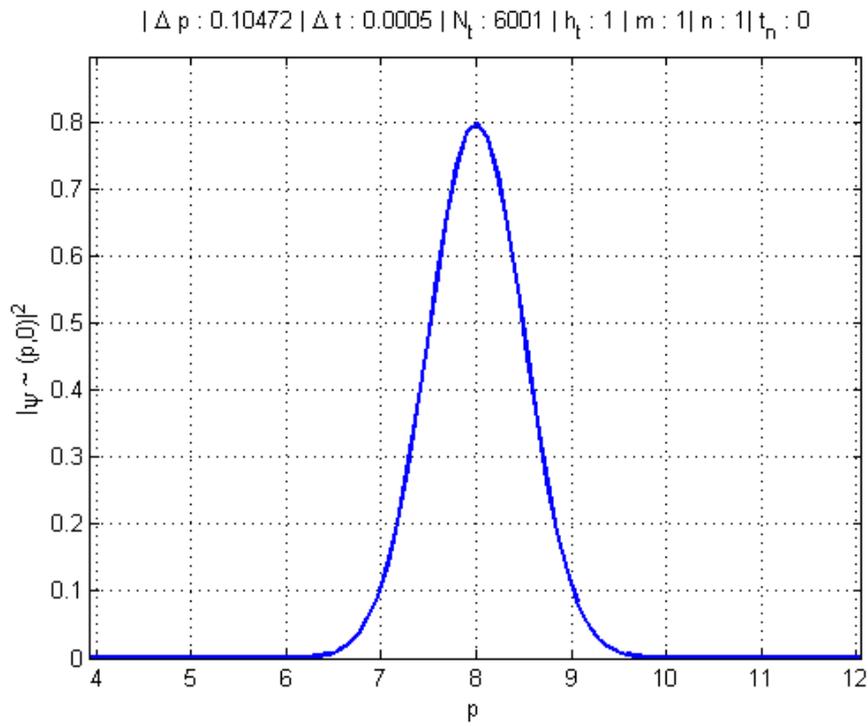


Figura 3.5: Istante iniziale e finale della distribuzione di probabilità del momento

La figura 3.4 mostra l'evoluzione temporale della distribuzione di probabilità del momento p data da $|\tilde{\psi}(p, t)|^2$. La successione di istanti mostrata è eguale a quella della figura 3.2. In questa maniera possiamo confrontare l'evoluzione del sistema nella rappresentazione delle coordinate e in quella dei momenti. Sottolineiamo che l'intervallo dei momenti visualizzato è una piccola parte dell'intervallo totale che rappresenta il vettore $\tilde{\psi}^n$ (si vedano le equazioni (3.6) e (3.7)). Al di fuori dell'intervallo mostrato la funzione d'onda nello spazio dei momenti è quasi nulla.

Si noti come prima che la funzione d'onda delle coordinate $|\psi(x, t)|^2$ raggiunga la barriera (figura 3.2) la funzione d'onda dei momenti $|\tilde{\psi}(p, t)|^2$ non subisca variazioni, egualmente a quanto avviene in fisica classica. Nell'intervallo temporale in cui si ha l'interazione con la barriera si ha una evoluzione che termina con la "scissione in due" della $|\tilde{\psi}(p, t)|^2$ (si vedano gli ultimi tre fotogrammi in figura 3.4). Una parte piccata si trova nella regione delle p negative, l'altro nella regione delle p positive. Queste parti corrispondono rispettivamente al pacchetto riflesso e a quello trasmesso.

È interessante studiare nel dettaglio il primo e l'ultimo istante della simulazione. Il grafico (a) della figura 3.5 mostra la distribuzione di probabilità del momento all'istante iniziale, il grafico (b) la mostra all'istante finale. Si noti che, in accordo con quanto studiato nella sezione (1.5) e i parametri inseriti all'inizio di questa sezione, all'istante iniziale la distribuzione di probabilità del momento è una gaussiana con media su $p_0 = 8$ e scarto quadratico medio sul momento $\sigma_p = 1/2$.

Dalle distribuzioni di probabilità del momento all'istante finale e a quello iniziale si può ottenere il coefficiente di trasmissione $T(\eta)$ del grafico 1.2 in un intervallo intorno al valore $\eta_0 = p_0^2/2mV_0$. Infatti il pacchetto d'onde che all'istante iniziale viaggia da $-\infty$ verso la barriera è una sovrapposizione infinita di onde piane con pesi dati dalla $\tilde{\psi}(p, 0)$. Dalla figura (a) della 3.5 si nota che la parte significativa di $\tilde{\psi}(p, 0)$ è per $p > 0$. Ognuna di queste onde viene in parte riflessa e in parte trasmessa. Più precisamente, l'intensità di ogni onda trasmessa è data dall'intensità dell'onda incidente (nella regione a sinistra della barriera) per un coefficiente C complesso il cui modulo quadro è il coefficiente di trasmissione. Succede quindi che alla fine del processo di urto la distribuzione di probabilità del momento dell'onda trasmessa (quindi per $p > 0$) è data da

$$|\tilde{\psi}(p, t_{max})|^2 = T(p)|\tilde{\psi}(p, 0)|^2 \quad p > 0, \quad (3.8)$$

riscrivibile come

$$T(p) = \frac{|\tilde{\psi}(p, t_{max})|^2}{|\tilde{\psi}(p, 0)|^2}. \quad (3.9)$$

Dall'equazione (3.9) si deduce che dal modulo quadro del rapporto momento per momento dei valori della funzione nel grafico (b) con quelli del grafico (a) si ottiene il coefficiente di trasmissione in funzione del momento. Facendo questo calcolo numerico ed esprimendo il risultato in funzione di $\eta = p^2/2mV_0$ abbiamo ottenuto il grafico in figura 3.6. Gli asterischi in verde rappresentano invece il risultato analitico, ovvero un ramo del grafico 1.2. Il grafico blu è stato ottenuto numericamente facendo il rapporto delle due distribuzioni nell'intervallo dei momenti $p_0 \pm 5\sigma_p = 8 \pm 5 \times 1/2$. Si nota che al di fuori di questo intervallo il coefficiente di trasmissione ottenuto numericamente non segue il risultato analitico. Questo avviene perché il valore delle due distribuzioni fuori dall'intervallo è dell'ordine di grandezza dell'errore di troncamento globale medio $\bar{\epsilon}$. L'errore relativo sui valori delle distribuzioni per un dato momento diviene così ingente, e il rapporto per ottenere il coefficiente di trasmissione ne viene affetto. Sottolineiamo che il grafico 3.6 è un ramo del grafico 1.2.

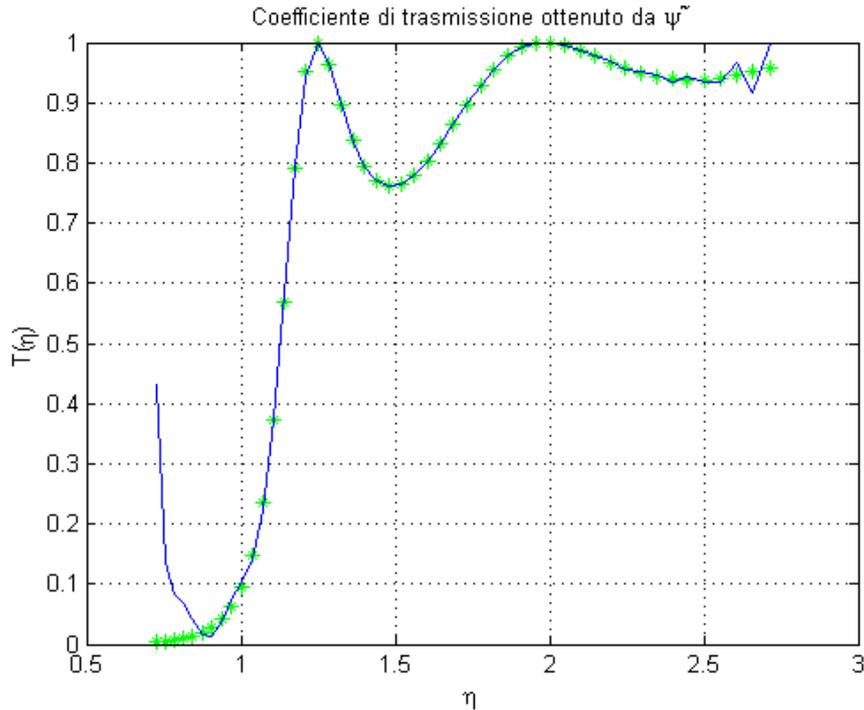


Figura 3.6: Coefficiente di trasmissione per stati stazionari.

In blu è rappresentata la soluzione ottenuta numericamente dai risultati di figura 3.5. Gli asterischi in verde rappresentano la soluzione analitica, calcolata nella sezione 1.7.

All'interno di queste considerazioni si può spiegare anche la forma della distribuzione all'istante finale (grafico (b) della figura 3.5) per $p < 0$. Si nota un nodo al valore di circa $p \approx 7.07$. A tale valore del momento corrisponde un valore di $\eta \approx 1.25$, per il quale il coefficiente di trasmissione è quasi pari a 1 (si veda la figura 3.6). Quindi le onde piane che hanno momento circa eguale a $p \approx 7.07$ non vengono trasmesse senza subire la riflessione, ragion per cui la distribuzione ha tale nodo.

3.2 Doppia barriera quadrata

Si possono estendere i risultati della sezione precedente al caso di due barriere quadrate. Consideriamo il potenziale definito da

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ V_0 = 20 & 0 \leq x < 1 \\ 0 & 1 \leq x < 2 \\ V_0 = 20 & 2 \leq x < 3 \\ 0 & x \geq 3 \end{cases} . \quad (3.10)$$

Il coefficiente di trasmissione per gli stati stazionari della barriera doppia è, in funzione del momento p , graficato nella figura 3.8. Tale risultato è stato ottenuto

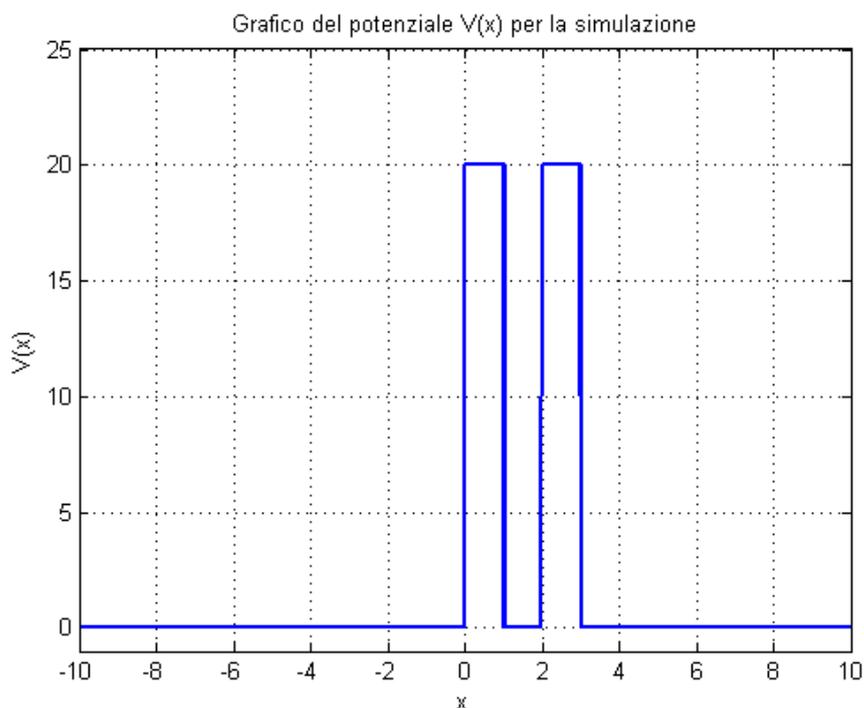


Figura 3.7: Potenziale a doppia barriera quadrata.

esattamente da una soluzione analitica. Il metodo per trovarlo è esposto nell'appendice C.

Si nota una accentuazione della intensità delle oscillazioni che erano già presenti nel grafico del coefficiente di trasmissione della barriera singola(1.2). Tale fenomeno viene ulteriormente accentuato con l'aumento del numero di barriere; per un numero di barriere molto grandi, il coefficiente di trasmissione tende a una funzione discontinua in cui si alternano intervalli di p ove $T(p) = 1$ (trasmissione totale) a intervalli ove $T(p) = 0$ (riflessione totale). A questi intervalli del momento corrispondono rispettivamente le cosiddette *bande permesse e proibite di energia*.

Nel grafico in figura 3.8 si notano in particolare tre punti ove $T(p)$ è piccata. Caratterizziamo la larghezza e la posizione di questi picchi attraverso l'intervallo in cui $T(p) \geq 0.5$. Il primo picco è situato nell'intervallo $p = [4.6369, 4.6375]$, il secondo nell'intervallo $p = [6.405, 6.465]$ e il terzo nell'intervallo $p = [6.9, 7.6]$. Il primo picco presenta notevoli peculiarità. Una di queste è che si trova in una regione proibita classicamente, quindi si tratta di trasmissione per effetto tunnel. La seconda è che è estremamente stretto, e non si può risolvere con i metodi numerici esposti.

Studieremo l'urto contro questa barriera di un particolare pacchetto d'onde, diverso da quello gaussiano usato nella sezione precedente. Il vantaggio del pacchetto d'onde che useremo è che permette un confronto migliore con il coefficiente di trasmissione. Inoltre potremo così usare il metodo numerico su un pacchetto d'onde diverso.

Allo stato iniziale imporreemo la seguente funzione d'onda nella rappresentazione

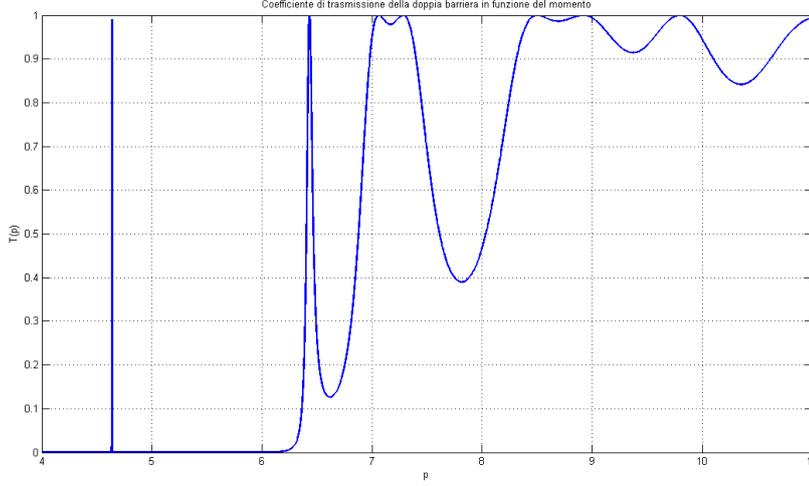


Figura 3.8: Coefficiente di trasmissione per doppia barriera data dall'equazione (3.10).

dei momenti:

$$\tilde{\psi}(p, 0) = \frac{1}{2\sqrt{\hbar}} \left[\operatorname{erf} \left(\frac{p - p_0 + b}{2s} \right) + \operatorname{erf} \left(\frac{p - p_0 - b}{2s} \right) \right] \quad (3.11)$$

ove $\operatorname{erf}(u)$ è la *funzione errore*, definita come

$$\operatorname{erf}(u) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^u e^{-u^2} du . \quad (3.12)$$

Lo stato nella rappresentazione delle coordinate è dato da:

$$\psi(x, t) = b \sqrt{\frac{2}{\pi \hbar^2}} \operatorname{sinc} \left(\frac{bx}{\hbar} \right) e^{-s^2 x^2 / \hbar^2} e^{ip_0 x} . \quad (3.13)$$

Sottolineiamo che la (3.11) non è normalizzata a 1 e lo stesso vale per la funzione d'onda delle coordinate (3.13), come si deduce dalla relazione di Parseval-Plancherel di equazione (1.29).

Il grafico in figura 3.9 mostra il modulo quadro della (3.11) con i parametri $\hbar = 1$, $p_0 = 8$, $b = 3$, $s = 0.5$, usati per impostare la condizione iniziale della simulazione esposta in questa sezione. La funzione ha un valore circa costante a 1 nell'intervallo $p = [-6, 10]$. Lo studio della funzione (3.11) mostra che il parametro b stabilisce la larghezza della funzione, p_0 il valore medio e s la ripidità delle code.

Il fatto che la distribuzione di probabilità del momento in figura 3.9 sia circa uno nell'intervallo $p = [-6, 10]$ permette uno studio agevolato del coefficiente di trasmissione. Si consideri infatti il problema della sezione precedente di trovare il coefficiente di trasmissione in funzione di un intervallo del momento $[p_a, p_b]$ dal rapporto

$$T(p) = \left| \frac{\tilde{\psi}(p, t_{max})}{\tilde{\psi}(p, 0)} \right|^2 \quad p \in [p_a, p_b] . \quad (3.14)$$

Impostando come funzione d'onda iniziale la (3.11) si può scegliere un intervallo dei momenti $[p_a, p_b]$ in cui $|\tilde{\psi}(p, 0)|^2$ sia circa eguale a una costante C (ad esempio a 1

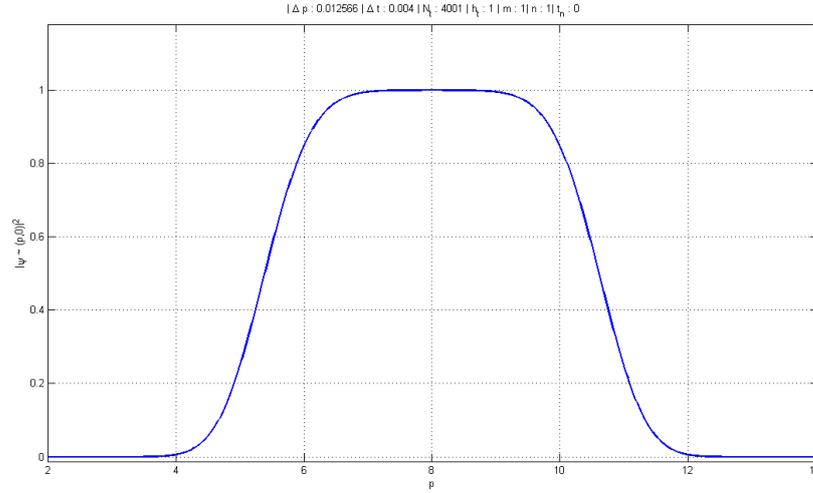


Figura 3.9: Grafico di $|\tilde{\psi}(p, 0)|^2$, con $\tilde{\psi}(p, 0)$ data dalla (3.11).

I parametri del grafico sono $\hbar = 1, p_0 = 8, b = 3$, utilizzati per la simulazione esposta in questa sezione.

nella figura 3.9), sicchè dalla (3.14) si ha che $T(p) \approx C|\tilde{\psi}(p), t_{max}|^2$ in $[p_a, p_b]$. Inoltre la forma particolare della distribuzione permette di distinguere facilmente l'intervallo dei momenti in cui l'errore relativo di troncamento globale è minore, che provoca gli errori numerici evidenziati dagli estremi del grafico 3.6. Un compito analogo poteva anche essere assolto dalla funzione

$$\tilde{\psi}(p, 0) = \begin{cases} 0 & p < p_0 - b \\ 1 & p_0 - b < p < p_0 + b \\ 0 & p_0 + b < p \end{cases} \quad (3.15)$$

tuttavia la funzione d'onda nella rappresentazione dei momenti sarebbe stata:

$$\psi(x, 0) = b\sqrt{\frac{2}{\pi}} \text{sinc}(bx) \quad (3.16)$$

che tende a 0 troppo lentamente (come $1/x$), accentuando il problema dell'urto agli estremi dell'intervallo spaziale. Il problema è stato così risolto "arrotondando" le discontinuità della (3.15) in $p = p_0 - b$ e in $p = p_0 + b$ con l'utilizzo della funzione (3.11). Gli svantaggi principali di questa scelta sono però essenzialmente 2. Uno è che non vale la minimizzazione del principio di indeterminazione: in questo caso $\sigma_x \sigma_p > \hbar/2$. L'altro è che il fenomeno della dispersione viene accentuato, ovvero la $\sigma_x(t)$ soprattutto se la distribuzione di probabilità dei momenti risulta larga.

La simulazione è stata effettuata con i seguenti parametri:

- $\hbar = 1, m = 1, b = 3, p_0 = 8, s = 0.5$, come anticipato sopra. Con queste impostazioni si può studiare bene la distribuzione dei momenti nell'intervallo $p = [6, 10]$.
- Potenziale descritto dalla (3.10). Con tali parametri si calcola numericamente uno scarto quadratico medio nella distribuzione del momento $\sigma_p = 2.59$ e uno sulla coordinata x di $\sigma_x = 0.79$.

- Intervallo spaziale $[x_1, x_{N_x}] = [-400, 400]$. La scelta di un intervallo spaziale così grande rispetto alla lunghezza della barriera permette alla funzione d'onda di evolvere per più tempo e lasciare la barriera. Inoltre permette una maggiore risoluzione della distribuzione dei momenti (equazione (2.69)).
- Passo di discretizzazione spaziale $\Delta x = 0.004$. Dato l'intervallo spaziale del punto precedente, si ha $N_x = 200001$. Ne consegue inoltre, dalla equazione (2.69), che $\Delta p \approx 0.008$.
- Passo di discretizzazione temporale $\Delta t = 0.004$ e $N_t = 7001$, sicché si ha la soluzione numerica nell'intervallo temporale $[0, t_{max}]$ con $t_{max} = 28$. Il numero di punti temporali è stato scelto in modo da avere l'intervallo di tempo più largo possibile ed evitando che la funzione d'onda ottenuta numericamente raggiungesse gli estremi dell'intervallo spaziale.

Per valutare l'errore computazionale abbiamo eseguito una simulazione-prova di propagazione di un'onda gaussiana in potenziale nullo. In tale simulazione-prova abbiamo impostato gli stessi parametri per la griglia sopra presentati per la simulazione di questa sezione. La funzione d'onda iniziale della simulazione-prova è un'onda gaussiana (descritta nella sezione 1.5) con impostati gli stessi parametri $m = 1, \hbar = 1, p_0 = 8, \sigma_x = 2.59$ della simulazione di questa sezione. Il risultato della simulazione-prova è un errore di troncamento globale medio di $\bar{\epsilon} = 0.011$.

La figura 3.10 mostra una successione di fotogrammi dell'evoluzione della distribuzione di probabilità della coordinata x . I primi sei fotogrammi (da $t_1 = 0$ a $t_{401} = 1.6$) mostrano l'evoluzione del pacchetto prima dell'urto con la doppia barriera. I successivi sei fotogrammi mostrano l'urto del pacchetto contro la barriera (da $t_{441} = 1.76$ a $t_{1401} = 5.6$). Da notare che il primo di questi sei fotogrammi ha un intervallo spaziale mostrato diverso. Gli ultimi tre fotogrammi mostrano l'evoluzione del pacchetto d'onde rimasto imprigionato tra le due barriere che si disperde.

Nella figura 3.11 vi sono 4 fotogrammi dell'evoluzione delle distribuzione dei momenti $|\tilde{\psi}(p, t)|^2$ nell'intervallo $p = [6, 10]$. Sottolineiamo che a differenza della sezione precedente, agli istanti temporali dei fotogrammi del grafico 3.11 non corrispondono quelli del grafico 3.10. Di preciso, i primi quindici fotogrammi del grafico 3.10 sono circa situati nell'intervallo temporale delimitato dai primi due fotogrammi della figura 3.11.

Più precisamente, i primi due fotogrammi della figura 3.11 sono nell'intervallo di tempo dei quindici fotogrammi della figura 3.10. Il primo è un ramo della distribuzione all'istante iniziale, quindi un ingrandimento del grafico in figura 3.9. Gli altri tre mostrano il graduale avvicinamento di $|\tilde{\psi}(p, t)|^2$ alla funzione $T(p)|\tilde{\psi}(p, 0)|^2$ (si veda l'equazione (3.14)). Si noti come la barriera abbia effettuato un "filtraggio" sulla distribuzione dei momenti, analogamente a quanto succede in certi circuiti elettronici, lasciando passare le onde con frequenze intorno ai picchi e riflettendo quelle nelle valli.

L'evoluzione della distribuzione dei momenti risulta piuttosto lenta. Infatti i primi due fotogrammi della 3.11 corrispondono ai quindici fotogrammi della 3.10. Questo vuol dire che nonostante la maggior parte del pacchetto $\psi(x, t)$ si sia evoluto scindendosi in parte riflessa e trasmessa, la funzione d'onda nella rappresentazione dei momenti $\tilde{\psi}(p, t)$ non si è ancora evoluta completamente. Occorre un ulteriore lasso di tempo affinché l'andamento "vibrotorio" del secondo e terzo fotogramma della figura 3.11 diminuisca fino a divenire trascurabile (quarto fotogramma).

La concordanza dell'evoluzione di $|\psi(p, t)|^2$ con il risultato previsto dal coefficiente di trasmissione dimostra che il calcolo numerico si rivela affidabile.

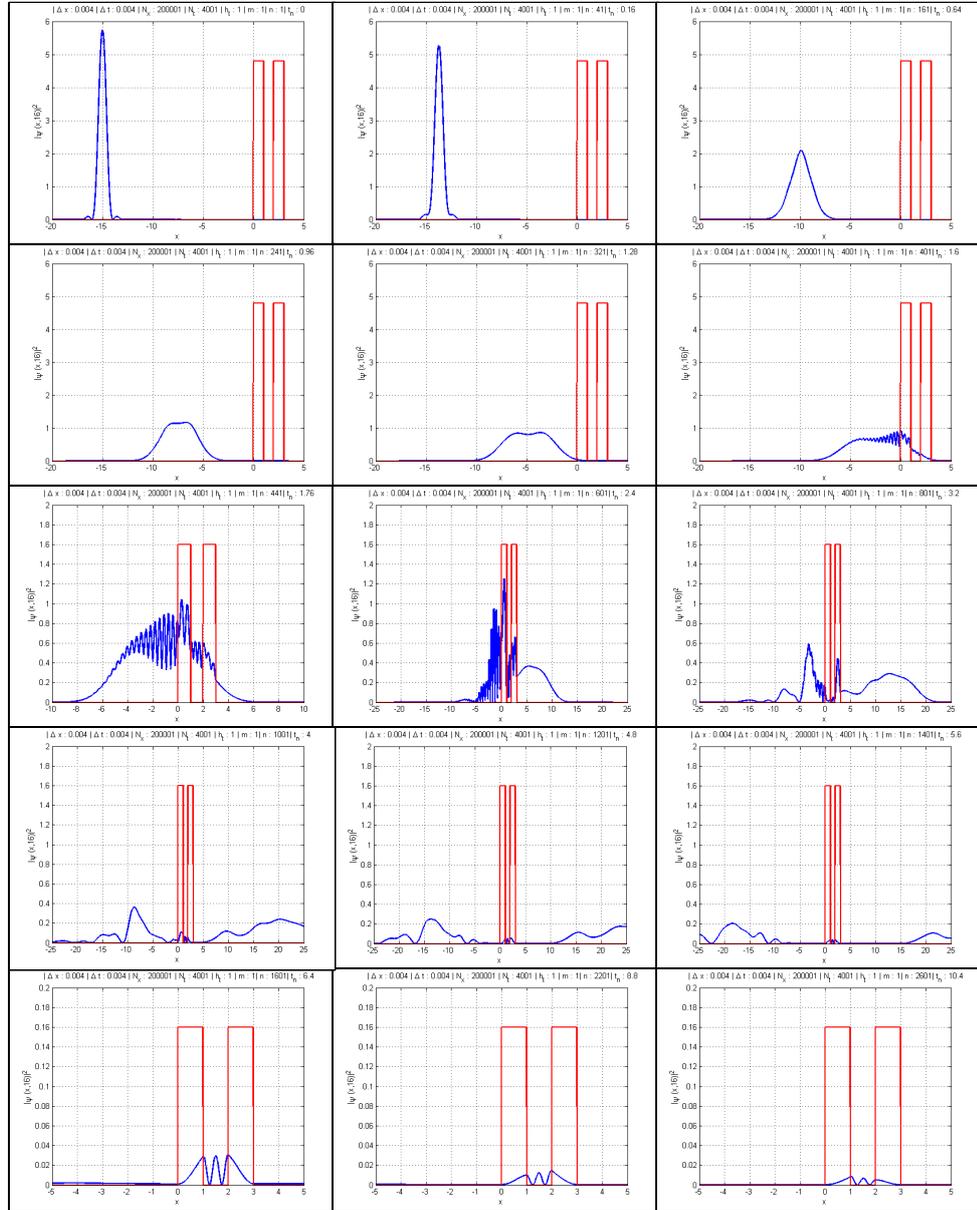


Figura 3.10: Evoluzione di $|\tilde{\psi}(x, t)|^2$.

Si noti che per comodità di visualizzazione l'intervallo spaziale mostrato e il lasso temporale tra un fotogramma e un altro non sono costanti.

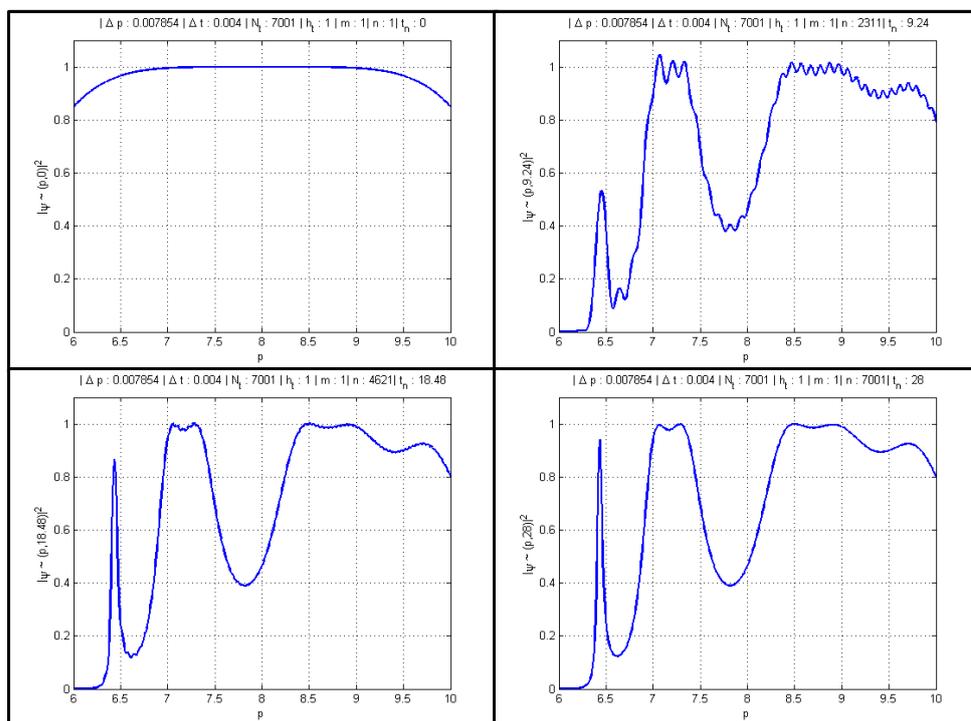


Figura 3.11: Evoluzione di $|\tilde{\psi}(p, t)|^2$.

Capitolo 4

Conclusioni

Nel corso di questa tesi abbiamo sviluppato un metodo numerico per calcolare l'evoluzione della funzione d'onda in un sistema monodimensionale con potenziale indipendente dal tempo (sezione 2.1). Ne abbiamo poi testato la convergenza con simulazioni-prova in cui risultati numerici sono stati confrontati con quelli analitici. Dopodiché abbiamo sviluppato nella sezione 2.5 un altro metodo numerico che riutilizza i risultati del primo per poter ottenere l'evoluzione della funzione d'onda nella rappresentazione dei momenti.

Nel terzo capitolo i metodi numerici di cui sopra sono stati applicati a due problemi di urto di pacchetto d'onde contro una barriera di potenziale. Prima di eseguire queste simulazioni abbiamo effettuato delle simulazioni-prova con stessi parametri di calcolo per ottenere una stima dell'errore numerico in cui si incorre. Lo studio della funzione d'onda nella rappresentazione dei momenti all'istante finale delle simulazioni (una volta concluso il processo di urto) ha mostrato che il calcolo numerico porta a risultati compatibili con le previsioni teoriche, date dal coefficiente di trasmissione. Con il metodo dei trapezi si è riuscito inoltre a ottenere la probabilità, dipendente dal tempo, di misurare la particella trasmessa o riflessa.

Le verifiche fatte con il confronto con i risultati analiticamente noti, indicano che l'implementazione dell'algoritmo è solida dal punto di vista del controllo degli errori numerici. Per questo motivo riteniamo che l'algoritmo possa essere applicato con successo per qualsiasi tipo di barriera di potenziale.

Rimangono le seguenti questioni aperte, che l'Autore di questa tesi desidera studiare in futuro. Una di queste è l'estensione dei metodi numerici mostrati a sistemi a più dimensioni, a più particelle e con potenziale dipendente dal tempo.

Appendice A

Codici in MatLab

In questa appendice presentiamo alcuni codici in linguaggio MatLab usati per l'implementazione del metodo numerico della sezione 2.1. Non tutti i codici usati per la creazione di questa tesi sono stati riportati, dacché alcuni di questi presentano accorgimenti per diminuire la quantità di calcoli e di memoria da usare che però rendono il codice stesso meno leggibile. Invece il fine di questa appendice è di presentare alcuni codici facilmente leggibili per mostrare come implementare il metodo numerico esposto, prescindendo dai problemi strettamente informatici.

Il linguaggio MatLab presenta i seguenti vantaggi:

- Possibilità di scrivere ed eseguire script senza necessità di compilazione di un codice.
- Gestione *built-in* di variabili complesse.
- Gestione semplificata dei file attraverso *function* già implementate nell'ambiente MatLab
- Gestione potente delle matrici e del calcolo matriciale.

Queste agevolazioni però si pagano con una richiesta maggiore di memoria e una lentezza maggiore di calcolo rispetto ai linguaggi compilativi (come ad esempio il linguaggio C e Fortran).

I codici che presenteremo salvano i risultati del calcolo numerico su file. Il vantaggio è da un lato quello di liberare la memoria volatile dai risultati dei calcoli. L'altro vantaggio è quello di poter riutilizzare facilmente i risultati per svariate operazioni. Infatti in Meccanica Quantistica lo stato del sistema è dato dalla funzione d'onda $\psi(x, t)$; per avere informazioni che riguardano le grandezze fisiche bisogna manipolare $\psi(x, t)$ attraverso svariati operatori, ad esempio l'integrazione o la trasformata di Fourier.

Nei codici che presenteremo si terrà conto che un file che contiene i risultati sull'evoluzione della funzione d'onda ha la seguente struttura

1. Informazioni sui parametri fisici e del calcolo. In ordine, il file contiene i valori numerici di $N_t, N_x, \Delta t, \Delta x, x_1, m, \hbar$.
2. Il vettore del potenziale \mathbf{V} .

3. La funzione d'onda istante per istante. Per ogni istante n viene scritta prima la parte reale di ψ^n e poi la parte immaginaria. Le prime due righe sono quindi rispettivamente la parte reale e immaginaria della funzione d'onda all'istante iniziale.

Lo script `gen_file.m` nel listato A.1 esemplifica pragmaticamente come generare un file con questa struttura. Questo script come funzione d'onda allo stato iniziale un pacchetto gaussiano. I commenti nel codice spiegano la funzione delle variabili.

Listing A.1: `gen_file.m`

```

%% Creazione del file funzione d'onda pacchetto gaussiano
2
%% Impostazione dei parametri
4 h_t = 1;      %Costante h tagliato
  m = 1;      %Massa della particella
6 x_0 = 0;     %Valore aspettato della posizione
  p_0 = 0;    %Valore aspettato del momento
8 k_0 = p_0/h_t;
  a = 1;     %Doppio SQM della posizione (DELTA_X(t=0) = a/2)
10 N_t = 1;   %Numero di righe(sola condizione iniziale)
  Dt = 0.01; %Passo di integrazione temporale
12 Dx = 0.01; %Passo di integrazione spaziale
  x_min = -5; %Estremo inferiore dell'intervallo spaziale
14 N_x = 1001; %Numero di punti spaziali
  x = x_min : Dx : (x_min + (N_x-1)*Dx);
16 %x e' il vettore di coordinate spaziali
  V = zeros(1,N_x); %Vettore che definisce il potenziale
18 nome_file = 'gaussiana_in_box.bin';
  phi_0 = (2/(pi*a^2))^(1/4)* ...
20     exp(i*k_0*(x-x_0)).*exp(-(x-x_0).^2/a^2);
  %phi_0 e' la funzione d'onda all'istante iniziale
22
%% Scrittura del file
24 file_punt = fopen(nome_file, 'w');
  %fopen apre un file e assegna un puntatore
26 %Inizio di scrittura dei parametri fisici e di calcolo
  fwrite(file_punt, N_t, 'uint32');
28 fwrite(file_punt, N_x, 'uint16');
  fwrite(file_punt, Dt, 'double');
30 fwrite(file_punt, Dx, 'double');
  fwrite(file_punt, x_min, 'double');
32 fwrite(file_punt, m, 'double');
  fwrite(file_punt, h_t, 'double');
34 %Fine di scrittura dei parametri fisici e di calcolo
  fwrite(file_punt, V, 'double'); %Scrittura del potenziale
36 %Inizio di scrittura della funzione d'onda a t=0
  real_phi = real(phi_0);
38 imaginary_phi = imag(phi_0);
  fwrite(file_punt, real_phi, 'double');
40 fwrite(file_punt, imaginary_phi, 'double');
  %Fine di scrittura della funzione d'onda a t=0
42 fclose(file_punt); %Chiusura del file
  clear %Liberazione della memoria

```

Una volta scritto un file con la funzione d'onda all'istante iniziale, si può calcolare numericamente l'evoluzione attraverso l'utilizzo della *function* `evoluzione.m`, nel listato A.2. Per usarla basta invocare in MatLab il comando

```
evoluzione(nome_file,N_ist)
```

ove il primo parametro è il nome del file che contiene la funzione d'onda, il secondo parametro è il numero di istanti da calcolare. Una volta calcolati il numero di istanti richiesti, la function salva i risultati sul file stesso.

Listing A.2: `evoluzione.m`

```

%% Funzione evoluzione
2  % Questa function legge un file di funzione d'onda, ne calcola
  % l'evoluzione e scrive il risultato sul file stesso.
4
function evoluzione(nome_file, N_ist)
6  %Le variabili di entrata sono il nome del file e
  %il numero di istanti di evoluzione da calcolare
8
%% Parte 1: caricamento delle variabili dal file
10  tic
   file_punt = fopen(nome_file, 'r+');
12  N_t = fread(file_punt, 1, 'uint32');
   N_x = fread(file_punt, 1, 'uint16');
14  Dt = fread(file_punt, 1, 'double');
   Dx = fread(file_punt, 1, 'double');
16  x_min = fread(file_punt, 1, 'double');
   m = fread(file_punt, 1, 'double');
18  h_t = fread(file_punt, 1, 'double');
   V = fread(file_punt, N_x, 'double');
20  %Lettura all'ultima riga ove e' scritta la funzione d'onda
  %all'ultimo istante calcolato
22  fseek(file_punt, -8*N_x*2, 'eof');
   real_phi = fread(file_punt, N_x, 'double');
24  imaginary_phi = fread(file_punt, N_x, 'double');
  %Fine lettura dell'ultima riga
26
  % La seguente istruzione riabilita gli fwrite che seguono.
28  % Leggere nota specifica su fopen in MatLab
   fseek(file_punt, 0, 'cof');
30
%% Parte 2: definizione delle variabili per la computazione
32  %Funzione d'onda iniziale da cui iniziare il calcolo
   phi_iniz = real_phi + i*imaginary_phi;
34  clear real_phi imaginary_phi
  %Funzione d'onda nell'istante successivo a quello sotto analisi
36  phi_succ = zeros(N_x,1);
  %La matrice U e' l'analogo dell'operatore evoluzione
38  U = zeros(N_x,N_x);
  %Fine inizializzazione delle variabili
40
%% Parte 3: evoluzione
42
  %Preparazione della matrice evoluzione
44  A = zeros(N_x,N_x); %Matrice provvisoria per il calcolo
   P = -i*Dt*h_t/(4*m*Dx^2);

```

```

46     Q = 1 - 2*E + i*Dt*V/(h_t*2);
      A = diag(P*ones(N_x-1,1),1) + diag(Q,0) + diag(P*ones(N_x-1,1),-1);
48     U = A^-1 * conj(A);
      clear A P Q
50     for i_t = 1 : N_ist
          phi_succ = U*phi_iniz;
52         fwrite(file_punt, real(phi_succ) , 'double');
          fwrite(file_punt, imag(phi_succ) , 'double');
54         phi_iniz = phi_succ;
      end
56
58 %% Parte 4: chiusura del file
      frewind(file_punt);
60 %%Aggiornamento del numero di istanti nel file
      fwrite(file_punt, N_t+N_ist , 'uint32');
62 %%Chiusura del file
      fclose(file_punt);
64 disp('Operazione terminata. Tempo impiegato: ')
      toc

```

Con i due script `gen_file.m` e `evoluzione.m` si può scrivere su file la funzione d'onda allo stato iniziale e calcolarne l'evoluzione per il numero di istanti voluto. Questi dati salvati poi possono essere manipolati per estrapolare altre informazioni.

Ad esempio, la function `prob_spaz(nome_file,x_a, x_b)` grafica in funzione del tempo il valore numerico dell'integrale

$$P_{[x_a,x_b]}(t) = \int_{x_a}^{x_b} |\psi(x,t)|^2 dx , \quad (\text{A.1})$$

ovvero la probabilità di trovare in una misura a un istante t la particella nell'intervallo spaziale $[x_a, x_b]$. L'integrale è calcolato tramite il metodo dei trapezi, analogamente a quello di equazione (2.64). Il listato A.3 mostra il codice di `prob_spaz(nome_file,x_a, x_b)`.

Listing A.3: `prob_spaz.m`

```

%% Calcolo di integrale
2
      function prob_spaz(nome_file, x_a, x_b)
4  %% Parte 1: caricamento del file
      file_punt = fopen(nome_file, 'r+');
6  N_t = fread(file_punt, 1, 'uint32');
      N_x = fread(file_punt, 1, 'uint16');
8  Dt = fread(file_punt, 1, 'double');
      Dx = fread(file_punt, 1, 'double');
10 x_min = fread(file_punt, 1, 'double');
      m = fread(file_punt, 1, 'double');
12 h_t = fread(file_punt, 1, 'double');
      V = fread(file_punt, N_x, 'double');
14 t = 0:Dt:Dt*(N_t-1);
      %Calcolo dell'indice per x_a e x_b
16 j_a = floor((x_a-x_min)/Dx);
      j_b = ceil((x_b-x_min)/Dx);
18
      %% Parte 2: caricamento della funzione d'onda

```

```

20 %Dichiarazione di 'distr',matrice che contiene
    %la distribuzione di probabilita' sulla posizione
22 distr = zeros(N_t,N_x);
    phi_real = zeros(1,N_x);
24 phi_imag = zeros(1,N_x);
    for i_t = 1: N_t
26         phi_real = fread(file_punt, N_x, 'double');
            phi_imag = fread(file_punt, N_x, 'double');
28         distr(i_t,:)=phi_real.^2 + phi_imag.^2;
    end
30
    %% Parte 3:calcolo integrale
32 integ = zeros(1,N_t);
    integ_ist = 0;
34 for i_t = 1:N_t
        for i_x = j_a:j_b
36             integ_ist = integ_ist+distr(i_t,i_x)*Dx;
            end
38             integ_ist=integ_ist-Dx*(distr(i_t,j_a)+distr(i_t,j_b))/2;
                integ(i_t)=integ_ist;
40 end

42 %% Graficazione
    plot(t,i_t)
44 clear phi_real phi_imag integ_ist j_a j_b
    fclose(nome_file)

```

L'evoluzione del modulo quadro della funzione d'onda può essere caricato in memoria e visualizzato attraverso una animazione. Il listato A.4 mostra la function `filmato(nome_file)` che compie questo lavoro, caricando i risultati dal file specificato dalla stringa `nome_file`.

Listing A.4: `filmato.m`

```

%% Filmato
2 function filmato(nome_file)

4 %% Parte 1: caricamento del file
    file_punt = fopen(nome_file, 'r+');
6     N_t = fread(file_punt, 1, 'uint32');
        N_x = fread(file_punt, 1, 'uint16');
8     Dt = fread(file_punt, 1, 'double');
        Dx = fread(file_punt, 1, 'double');
10    x_min = fread(file_punt, 1, 'double');
        m = fread(file_punt, 1, 'double');
12    h_t = fread(file_punt, 1, 'double');
        V = fread(file_punt, N_x, 'double');
14    phi_real = zeros(1,N_x);
        phi_imag = zeros(1,N_x);
16    distr = zeros(N_t, N_x);
        for i_t=1:N_t
18            phi_real = fread(file_punt, N_x, 'double');
                phi_imag = fread(file_punt, N_x, 'double');
20            distr(i_t,:)=phi_real.^2 + phi_imag.^2;
        end

```

```
22 fclose(nome_file);
   x = x_min:Dx:Dx*(N_x-1)+x_min;
24
   %% Parte 2: filmato
26 ymax = max(max(distr));
   %[0,ymax] e' il range delle ordinate da visualizzare
28 figure
   for i_t = 1:N_t
30     plot(x, distr(i_t,:));
       grid on
32     xlabel('x')
       ylabel('\psi(x,t)');
34     ylim([0 ymax]);
   end
```

Appendice B

Dettagli di calcolo per il pacchetto gaussiano

In questa appendice specificheremo i dettagli di calcolo per risolvere l'integrale (1.49). Cerchiamo come trasformare un trinomio di secondo grado rispetto a una variabile k in un quadrato perfetto più una costante.

Consideriamo

$$Ak^2 + Bk + C . \quad (\text{B.1})$$

In primis riduciamo il problema raccogliendo A :

$$A \left(k^2 + \frac{B}{A}k \right) + C = A \left(k^2 + \frac{B}{A}k \right) + C . \quad (\text{B.2})$$

Aggiungendo e sottraendo $B'^2/4$ al polinomio in parentesi tonde si ha

$$A \left(k^2 + \frac{B}{A}k + \frac{B^2}{4A^2} \right) + C - \frac{B^2}{4A} = A \left(k + \frac{B}{2A} \right)^2 + C - \frac{B^2}{4A} . \quad (\text{B.3})$$

Applichiamo ora questa formula per calcolare l'integrale (1.49). Sviluppando l'argomento della funzione esponenziale integranda

$$-\frac{a^2}{4}(k-k_0)^2 + ikx - \frac{i\hbar k^2}{2m}t = \left(-\frac{a^2}{4} - \frac{i\hbar t}{2m} \right) k^2 + \left(\frac{a^2 k_0}{2} + ix \right) k + \left(-\frac{a^2 k_0^2}{4} \right) \quad (\text{B.4})$$

ove le quantità tra parentesi svolgono la funzione di A, B, C dell'equazione (B.1). Allora dall'equazione (B.3) si ha

$$-\left(\frac{a^2}{4} + \frac{i\hbar}{2m}t \right) \left(k^2 + \frac{B^2}{2A} \right)^2 - \frac{a^2 k_0^2}{4} + \frac{\left(\frac{a^2 k_0}{2} + ix \right)^2}{\left(a^2 + \frac{2i\hbar}{m}t \right)} . \quad (\text{B.5})$$

La costante B non è stata esplicitata, in quanto scompare nell'operazione di integrazione ed è quindi ininfluenza; più utile sviluppare gli ultimi due termini:

$$\begin{aligned}
& -\frac{a^2 k_0^2}{4} + \frac{\left(\frac{a^2 k_0}{2} + ix\right)^2}{\left(\frac{a^2}{4} + \frac{i\hbar}{2m}t\right)} = \\
& = \frac{1}{a^4 + \frac{4\hbar^2}{m^2}t^2} \left[-\frac{a^6 k_0^2}{4} - \frac{a^2 \hbar^2 k_0^2 t^2}{m^2} + \frac{a^6 k_0^2}{4} - a^2 x^2 + \frac{2a^2 \hbar k_0 t x}{m} + \right. \\
& \left. + i \left(a^4 k_0 x + \frac{2\hbar t x^2}{m} - \frac{a^4 \hbar k_0^2 t}{2m} \right) \right] = \\
& = \frac{-a^2}{a^4 + \frac{4\hbar^2}{m^2}t^2} \left(x - \frac{\hbar k_0}{m}t \right)^2 + \frac{i}{a^4 + \frac{4\hbar^2}{m^2}t^2} \left(a^4 k_0 x + \frac{2\hbar t x^2}{m} - \frac{a^4 \hbar k_0^2 t}{2m} \right). \quad (\text{B.6})
\end{aligned}$$

Allora l'integrale (1.49) ha per risultato

$$\begin{aligned}
\psi(x, t) = \frac{\sqrt{a}}{(2\pi)^{3/4}} \frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{\frac{a^2}{4} + \frac{i\hbar}{2m}t}} \exp \left[\frac{i}{a^4 + \frac{4\hbar^2}{m^2}t^2} \left(a^4 k_0 x + \frac{2\hbar t x^2}{m} - \frac{a^4 \hbar k_0^2 t}{2m} \right) \right] \times \\
\times \exp \left[\frac{-a^2}{a^4 + \frac{4\hbar^2}{m^2}t^2} \left(x - \frac{\hbar k_0}{m}t \right)^2 \right]. \quad (\text{B.7})
\end{aligned}$$

Rappresentando in forma esponenziale il numero complesso al denominatore e semplificando le costanti, si giunge alla soluzione data in equazione (1.50).

Appendice C

Coefficiente di trasmissione per più barriere

In questa appendice mostriamo come calcolare il coefficiente di trasmissione per un potenziale dato da una successione di barriere quadrate.

Più precisamente consideriamo il potenziale dato dalla successione di Q barriere quadrate di lunghezza l e distanza a :

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & 0 + na \leq x < l + na \\ 0 & l + na \leq x < a + na \\ 0 & x < 0 \wedge (Q + 1)a \leq x \end{cases} \quad n \in \{1, 2, \dots, Q\} . \quad (\text{C.1})$$

L'equazione agli autovalori d'energia per una barriera quadrata è stata discussa nella sezione (1.7). L'equazione agli autovalori per un sistema con potenziale dato dalla (C.1) si risolve raccordando gli stati stazionari $\varphi_k(x)$ delle varie barriere per continuità di $\varphi_k(x)$ e della derivata prima $\varphi_k'(x)$. Si dimostra, esprimendo queste condizioni di raccordo in notazione matriciale, che la matrice di trasmissione $M_Q(k)$ delle Q barriere è dato da

$$M_Q(k) = M(k)(D(k)M(k))^{Q-1} \quad (\text{C.2})$$

ove $M(k)$ è la matrice di trasmissione di una singola barriera e $D(k)$ è data da

$$D = \begin{pmatrix} e^{ika} & 0 \\ 0 & e^{-ika} \end{pmatrix} . \quad (\text{C.3})$$

La matrice di trasmissione $M(k)$ di una singola barriera di potenziale è data da

$$M(k) = \begin{pmatrix} (\cosh(\rho l) + i \frac{k^2 - \rho^2}{2k\rho} \sinh(\rho l)) e^{-ikl} & -i \frac{k_0^2}{2k\rho} \sinh(\rho l) \\ i \frac{k_0^2}{2k\rho} \sinh(\rho l) & (\cosh(\rho l) - i \frac{k^2 - \rho^2}{2k\rho} \sinh(\rho l)) e^{ikl} \end{pmatrix} , \quad (\text{C.4})$$

ove

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad (\text{C.5})$$

$$\rho = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}} \quad (\text{C.6})$$

$$k_0 = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}}. \quad (\text{C.7})$$

Una volta trovata la matrice di trasmissione $M_Q(k)$, si può ricavare il coefficiente di trasmissione secondo quanto esposto nella sezione 1.6.

Un *notebook* in Mathematica permette di effettuare il calcolo simbolico di $M_Q(k)$. Il vantaggio dell'uso di Mathematica rispetto a MatLab per questa operazione è una maggiore stabilità numerica(dovuta proprio al fatto che il calcolo è simbolico e non numerico).

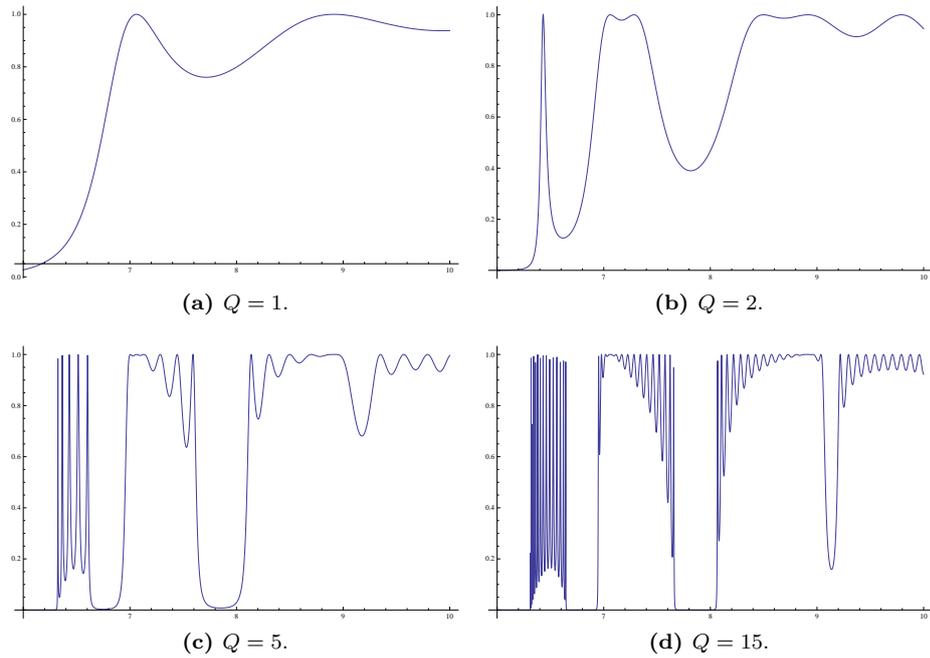


Figura C.1: Coefficiente di trasmissione al variare del numero di barriere Q . In ascissa vi è l'intervallo dei numeri d'onda $k = [6, 10]$, in ordinata il coefficiente di trasmissione $T(k)$. I parametri impostati sono $V_0 = 20$, $l = 1$, $a = 2$.

Bibliografia

- [Coh05] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloë, *Quantum Mechanics*, J. Wiley & Sons(New York), 2005
- [Lan04] L. D. Landau, E. M. Lifšits, *Meccanica Quantistica, teoria non relativistica*, Editori Riuniti(Roma), 2004
- [Gol67] A. Goldberg, H. M. Schey, J. L. Schwartz, *Am. J. Phys.* **35**,177 (1967)
- [Qua97] A. Quarteroni, *Elementi di Calcolo Numerico*, Progetto Leonardo(Bologna), 1997
- [Com95] V. Comincioli, *Analisi Numerica*, McGraw-Hill Libri Italia(Milano), 1995