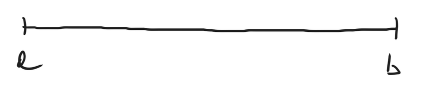
CONDIZIONI AL CONTORNO DI NEUMANN

es 1-D $\qquad f(x)$



$$\begin{cases} \frac{df}{dx}(a) = g_a \\ \frac{df}{dx}(b) = g_b \end{cases}$$

N punti:
$x_1 = a$
$x_N = b$
$$h = \frac{b-a}{N-1}$$

Implementazione: consideriamo
$$x_0 = a - h \quad e \quad x_{N+1} = b + h$$

Scegliamo f_0 e f_{N+1} in maniera da soddisfare i vincoli

NB derivata prima →
$$f_1^{(1)} = \frac{f_2 - f_0}{2h}$$

$$\frac{f_2 - f_0}{2h} = g_a \implies f_2 - f_0 = 2h\, g_a$$
$$f_0 = f_2 - 2h\, g_a$$

Analogamente
$$\frac{f_{N+1} - f_{N-1}}{2h} = g_b$$
$$f_{N+1} = 2h g_b + f_{N-1}$$

Equazione di Schrödinger TD in una dimensione
$$\hat{H}\Psi(x,t) = i\hbar\partial_t \Psi(x,t)$$
con $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + V(x)$

l'estensione a $V(x,t)$ sarà facile

$x \in [a,b]$ con la condizione al contorno
$$\Psi(a) = 0 \quad e \quad \Psi(b) = 0$$

Sia $\Psi(x,t_0) = \Psi_0(x)$ f.ne data

Formalmente scriviamo la soluzione come
$$\Psi(x,t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}\Psi(x,t)$$

Potrei (ma non lo farò)
$$\hat{H}\tilde{\Psi}_i(x) = \varepsilon_i \tilde{\Psi}_i(x)$$
trovare auto stati, auto energie
$$\Psi_0(x) = \sum_i c_i \tilde{\Psi}_i(x)$$
$$\Psi(x,t) = \sum_i c_i\, e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_i(t-t_0)}\tilde{\Psi}_i(x)$$

Vogliamo propagare con intervallo temporale Δt.
$$\Psi_i^{(n)} = \Psi(x_i, t_n)$$
$$\Psi(x, \underbrace{t_n + \Delta t}_{t_{n+1}}) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\Delta t}\Psi(x,t_n)$$

$$\Psi(x,t_{n+1}) = \left(1 - \frac{i\hat{H}}{\hbar}\Delta t\right)\Psi(x,t_n)$$

$$\Psi(x,t_{n+1}) = (1) - \frac{i}{\hbar}\Delta t\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + V(x)\right)\Psi(x,t_n)$$

$$\Psi_i^{(n+1)} = \Psi_i^{(n)} - \frac{i\Delta t}{\hbar}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right)\frac{\Psi_{i+1}^{(n)} - 2\Psi_i^{(n)} + \Psi_{i-1}^{(n)}}{h^2} - \frac{i\Delta t}{\hbar}V_i\Psi_i^{(n)}$$

Nota: è il propagatore di Eulero esplicito

Mentre l'operatore di propagazione temporale
$$\hat{U}(t,t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)} \quad \text{è unitario}$$
$$1 - \frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0) \quad \text{non è unitario}$$

infatti:
$$\left(1 + \frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)\right)\left(1 - \frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)\right) = 1 - \frac{\hat{H}^2}{\hbar^2}(t-t_0)^2$$

Metodo di: CRANK NICOLSON
$$\Psi\left(x, t_n + \frac{\Delta t}{2}\right) = \hat{U}\left(t_n + \frac{\Delta t}{2}, t_n\right)\Psi(x,t_n)$$
$$= \hat{U}\left(t_n + \frac{\Delta t}{2}, t_{n+1}\right)\Psi(x,t_{n+1})$$

$$\hat{U}\left(t_n + \frac{\Delta t}{2}, t_n\right) = 1 - \frac{i}{\hbar}\hat{H}\frac{\Delta t}{2}$$
$$\hat{U}\left(t_n + \frac{\Delta t}{2}, t_{n+1}\right) = 1 + \frac{i}{\hbar}\hat{H}\frac{\Delta t}{2}$$

$$\Psi_i^{(n)} - \frac{i\Delta t}{2\hbar}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\Psi_{i+1}^{(n)} - 2\Psi_i^{(n)} + \Psi_{i-1}^{(n)}}{h^2}\right) + V_i\Psi_i^{(n)}\right) = \Psi_i^{(n+1)} + \frac{i\Delta t}{2\hbar}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\left(\Psi_{i+1}^{(n+1)} - 2\Psi_i^{(n+1)} + \Psi_{i-1}^{(n+1)}\right)}{h^2} + V_i\Psi_i^{(n+1)}\right)$$

$$\hat{M}\vec{\Psi}^{(n+1)} = \vec{F}$$

il problema diventa
$$\sum_{j=2,N-1} M_{ij}\Psi_j^{(n+1)} = F_j$$

$$M_{ij} = \begin{cases} \frac{i4mh^2}{\hbar\Delta t} - 2 - \frac{2mh^2}{\hbar^2}V_i & i=j \\ 1 & \text{per } j = i+1 \text{ o } j = i-1 \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases}$$

$$F_i = -\Psi_{i+1}^{(n)} + 2\Psi_i^{(n)} - \Psi_{i-1}^{(n)} + \frac{i4mh^2}{\hbar\Delta t}\Psi_i^{(n)} + \frac{2mh^2}{\hbar^2}V_i\Psi_i^{(n)}$$