

ALMA MATER STUDIORUM · UNIVERSITÀ DI BOLOGNA

Scuola di Scienze
Corso di Laurea in Fisica

**Simulazione di sistemi quantistici,
approccio numerico e sperimentale nel caso
della localizzazione di Anderson**

Relatore:

**Prof. Cristian Degli Esposti
Boschi**

Presentata da:

Arturo Farolfi

Sessione II

Anno Accademico 2014/2015

Sommario

In questo lavoro viene presentato l'utilizzo di simulatori quantistici nello studio di sistemi a molte componenti. Dall'idea iniziale di Feynman della intersimulazione tra sistemi quantistici in questi anni si è sempre più sviluppata la tecnica sperimentale necessaria a creare sistemi di atomi in reticoli ottici ben controllati, nei quali riprodurre il comportamento di sistemi di natura diversa, ottenendo risultati promettenti nell'indagine di situazioni non trattabili analiticamente o numericamente. Tra questi, la conduzione di elettroni in materiali disordinati è ancora un problema aperto. In questa tesi nello specifico sono trattati i modelli di Anderson e di André-Aubry, i quali prevedono una transizione da stati estesi a localizzati in presenza di disordine nel materiale. I due modelli sono stati investigati numericamente su reticoli monodimensionali e i risultati confrontati con una realizzazione sperimentale realizzata con atomi freddi.

Capitolo 1

Introduzione

Gran parte dei modelli fisici esistenti non sono risolvibili analiticamente, se non in modo approssimato, a causa della complessità delle equazioni. In questi casi è necessario ricorrere alla soluzione numerica, fino a quando le dimensioni del sistema eccedono la capacità di calcolo a disposizione. Nonostante i progressi tecnologici dei computer la quantità di operazioni per risolvere un problema aumenta spesso molto rapidamente all'aumentare delle dimensioni, rendendo questa tecnica applicabile solo per sistemi limitati. Metodi alternativi possono essere usati in questi casi, tra questi l'utilizzo di un altro sistema di natura diversa ma facilmente controllabile, preparato appositamente per evolvere secondo le stesse equazioni del sistema iniziale. L'idea di sviluppare questo metodo anche per i sistemi quantistici si deve a Feynman e da allora ci sono stati considerevoli sforzi per realizzare una macchina di calcolo che operi secondo le leggi della meccanica quantistica. Ad oggi la tecnologia in questo campo è in evoluzione e sono stati realizzati sistemi altamente controllabili dai risultati promettenti, che possono essere usati per simulare alcuni aspetti di altri sistemi. La fisica dello stato solido è uno dei campi in cui questa tecnica troverebbe grande impiego, a causa del grande numero di costituenti mutuamente interagenti che impedisce la soluzione esplicita. Questi problemi possono essere trasportati nel campo degli atomi freddi grazie alla realizzazione di reticoli cristallini artificiali, utilizzando reticoli ottici. L'utilizzo di condensati di Bose-Einstein permette inoltre di studiare simultaneamente il comportamento di numerose particelle con stato quantistico iniziale noto. L'estrema flessibilità dei reticoli ottici permette non solo di realizzare cristalli di vario tipo e dimensionalità, ma anche di introdurre potenziali esterni per simulare varie condizioni dello stato solido. Questa caratteristica permette lo studio di cristalli non perfetti, quali sono i materiali reali, nei quali le impurità possono modificare sostanzialmente le caratteristiche del sistema. La caratterizzazione degli stati degli elettroni in questo tipo di materiali è un problema aperto, poiché tanto le caratteristiche del materiale quanto le interazioni tra le particelle precludono la soluzione analitica. Tra i modelli esistenti per questi materiali ci occuperemo del modello di Anderson, il quale prevede una transizione da stati estesi a stati localizzati all'aumentare del disordine nel mate-

riale. Questo modello ha trovato numerose applicazioni in contesti diversi, rivelandosi una caratteristica generale della propagazione delle onde in mezzi disomogenei. Simile al modello di Anderson, il modello di Andr -Aubry presenta la stessa transizione anche nel caso monodimensionale, considerando un reticolo semi-periodico. In questo lavoro sono presentate simulazioni numeriche di questi modelli nel caso monodimensionale.

Nel Cap.2   presentata l'ideazione del simulatore quantistico come   stata originariamente formulata. Nel Cap.3 sono esposte le caratteristiche principali dei reticoli ottici e le caratteristiche che rendono i condensati di Bose-Einstein utilizzabili come simulatori quantistici. Nel Cap.4 sono riassunti il modello di Anderson, di Andr -Aubry e alcune delle grandezze usate per quantificare la localizzazione degli stati. Nel Cap.5 sono riportati il procedimento e i risultati delle simulazioni numeriche. Nel Cap.6   rivisto un'esperimento di localizzazione di Anderson in un condensato di Bose-Einstein.

Capitolo 2

Feynman e il simulatore quantistico universale

Nel 1981 Richard P. Feynman espose¹ un'idea rivoluzionaria circa la simulazione di sistemi fisici usando calcolatori. L'utilizzo di sistemi elettronici per la risoluzione di equazioni non era certo una novità e resta anche oggi uno strumento potentissimo, ma riduce un sistema ad una serie di equazioni (solitamente differenziali) e utilizza algoritmi per trovarne le soluzioni numeriche. Per far ciò è necessario discretizzare le grandezze continue della fisica classica (lo spazio e il tempo principalmente), poiché i calcolatori possono maneggiare solamente grandezze discrete, operando quindi un'approssimazione. Maggiori sono i punti con cui vengono rappresentate le grandezze del sistema migliore sarà la precisione dell'approssimazione, ma questo fa aumentare rapidamente il numero di operazioni che la macchina deve compiere per trovare la soluzione. Trattando un sistema quantistico, non potendo prevedere esattamente l'evoluzione del sistema ma solo la probabilità che, a partire da un determinato stato iniziale, si trovi in un determinato stato finale, occorre anche rappresentare numericamente (con n cifre) la probabilità di ciascuno stato e poi interpretare fisicamente questi risultati. Considerando un sistema con N particelle che possono occupare R punti nello spazio, le configurazioni possibili per lo stato finale sono quindi R^N e scalano esponenzialmente con il numero di particelle. Se volessimo calcolare per ogni configurazione la probabilità che questa si verifichi e rappresentarla con un certo numero di cifre significative, dovremmo calcolare tutti gli R^N numeri e immagazzinare una quantità proporzionale di dati. Questa strada è percorribile solo con un numero molto limitato di corpi, ma diventa rapidamente proibitiva all'aumentare di N .

Feynman si chiese se fosse possibile, e in quale misura, imitare esattamente un sistema quantistico piuttosto che rappresentarlo con un calcolatore. A differenza di un calcolatore che cerca la soluzione per le equazioni provenienti da un modello, un simulatore è una macchina (un sistema) che si comporta allo stesso identico modo del sistema fisico che si vuole studiare. Questo permette di aggirare la risoluzione di problemi matematici complicati, ed è un concetto già ampiamente sfruttato, si pensi ai modelli in una galleria

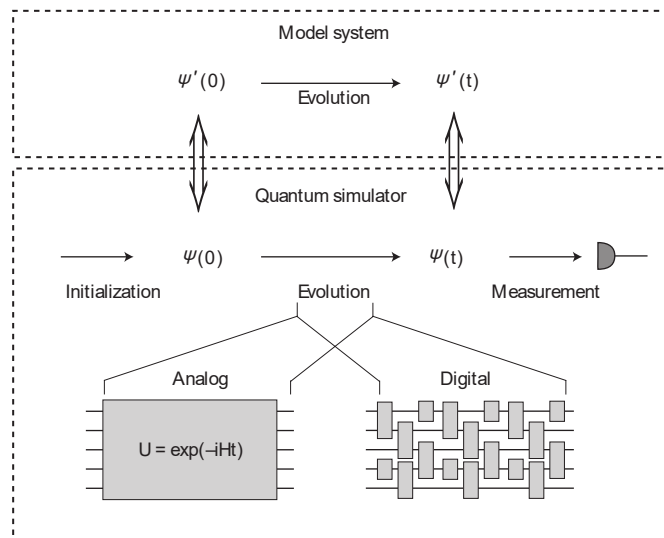


Figura 2.1: Rappresentazione grafica del funzionamento di un simulatore quantistico. Da:⁶

del vento per studiare il comportamento dei fluidi. Inoltre, occorre considerare che i calcolatori sono macchine “classiche”, le cui leggi non permettono tutti i fenomeni del mondo quantistico, perciò sarà necessario utilizzare un sistema quantistico per simularne esattamente un altro. La proposta di Feynman fu quindi di applicare alla simulazione dei sistemi quantistici gli stessi ragionamenti utilizzati per la classificazione dei problemi per i calcolatori “classici”: studiare quali sistemi quantistici fossero intersimulabili ed eventualmente concepire un “simulatore quantistico universale” (sulla falsariga di un calcolatore universale), in grado di simulare ogni tipo di sistema.

In dettaglio, il funzionamento di un tale simulatore si basa sulla costruzione di una corrispondenza tra gli stati del simulatore e del sistema. Il simulatore, posto in uno stato iniziale, evolve con una certa Hamiltoniana per un intervallo di tempo, dopo il quale si osserva lo stato finale. Nonostante il simulatore sia fisicamente diverso dal sistema da studiare, è sufficiente che le transizioni da uno stato iniziale a uno finale avvengano con la stessa identica probabilità che avrebbe il sistema tra i due stati corrispondenti. Eseguendo un gran numero di ripetizioni si stima la probabilità di transizione del sistema con la distribuzione degli stati finali del simulatore. Ovviamente, data la natura quantistica dei sistemi, il simulatore permette solamente di studiare le probabilità di transizione e non può prevedere o riprodurre lo stato finale del sistema, poiché ciò equivarrebbe ad imporre uguali le eventuali “variabili nascoste” dei due sistemi (la cui esistenza è confutata dalla violazione della disuguaglianza di Bell).

Poiché le probabilità di transizione sono date dall’Hamiltoniana del sistema, un simulatore quantistico universale deve poter essere modificato per riprodurre una Hamiltoniana matematicamente equivalente a quella in esame (Hamiltonian engineering). Un

sistema in cui l'Hamiltoniana totale è controllabile a piacimento è detto *simulatore quantistico analogico* e richiede una varietà di interazioni molto grande e un ottimo controllo su queste. È stato dimostrato⁵ che una qualsiasi Hamiltoniana può essere approssimata dalla somma di un numero finito di interazioni locali e successive, con precisione crescente con il numero di interazioni. Inoltre queste ultime crescono solo polinomialmente con il numero di particelle da simulare. Ciò rende teoricamente possibile la costruzione di un *simulatore quantistico digitale* universale, anche se non è attualmente disponibile la tecnologia necessaria per la sua realizzazione.

Ad oggi non è ancora stato costruito un sistema in grado di simulare ogni sistema quantistico, ma esistono sistemi in grado di simularne alcuni. Questi sistemi inoltre permettono spesso di poter variare i parametri ben oltre i limiti del sistema originale, permettendo lo studio dei fenomeni non solo in tutte le condizioni possibili, ma anche in regimi altrimenti irraggiungibili.

Capitolo 3

Gli atomi freddi in reticoli ottici

I modelli fisici sono spesso modelli ideali: si trascurano gli effetti minori e si limita lo studio alle interazioni principali. Simulare tali modelli richiede quindi un sistema privo di effetti secondari o non controllabili. Allo stesso tempo il simulatore deve essere facilmente riconfigurabile, deve permettere di operare con una gamma di parametri regolabili e di misurare i suoi stati con la migliore fedeltà possibile. Gli atomi ultrafreddi nei reticoli ottici soddisfano molti di questi requisiti e permettono di realizzare simulatori quantistici analogici. In questo capitolo verranno esaminate le principali caratteristiche dei reticoli ottici e come modificare l'interazione sfruttando la risonanza di Feshbach.

3.1 Reticoli ottici

Nello studio della materia condensata si affrontano spesso potenziali periodici, quali i reticoli cristallini, che possono essere riprodotti utilizzando un numero variabile di fasci laser per creare un'onda stazionaria, detta reticolo ottico. Il numero di fasci e le loro caratteristiche dipendono dalla geometria del reticolo, ma nel caso cubico è sufficiente usare, per ogni direzione spaziale, due fasci contropropaganti. Le zone luminose e buie create dall'interferenza tra i fasci diventano zone di attrazione o repulsione grazie alla forza di dipolo ottico agente sugli atomi.

La forza di dipolo⁷ è causata dall'interazione tra il campo elettromagnetico del laser e gli elettroni esterni dell'atomo e può essere trattata sia quantisticamente, con il modello dell'atomo vestito, che classicamente nel modo seguente. Gli elettroni dell'atomo, a causa del campo elettrico oscillante \vec{E} , si spostano dall'equilibrio trasformando l'atomo in un dipolo indotto \vec{p} , oscillante alla stessa frequenza.

$$\vec{E} = \vec{E}(e^{-i\omega t} + e^{i\omega t}) \rightarrow \vec{p} = \alpha \vec{E}(e^{-i\omega t} + e^{i\omega t})$$

dove α è una grandezza complessa, la *polarizzabilità*. Il potenziale di dipolo è $U_{dip} = -\frac{1}{2}\vec{p}\vec{E}$, dove il termine $-\frac{1}{2}$ è dovuto al fatto che il dipolo è indotto. Il potenziale è costi-

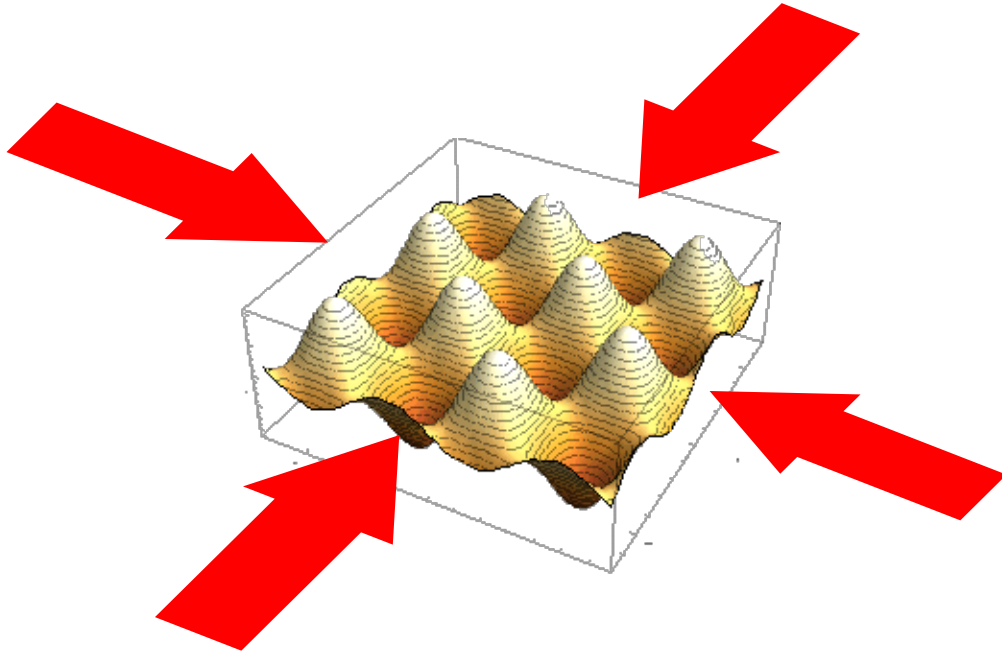


Figura 3.1: Rappresentazione qualitativa dell'onda stazionaria di un reticolo ottico bidimensionale, formato da due coppie ortogonali di fasci contropropaganti

tuito da un termine rapidamente oscillante $\approx e^{\pm 2i\omega t}$ e uno ≈ 1 . A causa dell'inerzia degli atomi il primo termine non dà alcun contributo, mediamente nel tempo, permettendo di scrivere:

$$U_{dip} = -\frac{1}{2}Re(\alpha)|E|^2$$

Gli atomi sono quindi soggetti ad un potenziale proporzionale all'intensità del campo elettromagnetico, solitamente attrattivo verso i massimi di intensità.

Sfruttando la forza di dipolo, l'onda stazionaria crea un potenziale periodico i cui parametri sono completamente controllabili: operando sulla lunghezza d'onda dei fasci è possibile modificare la distanza tra i siti reticolari, mentre l'intensità dei fasci permette di regolare la probabilità di tunneling nei siti adiacenti. È inoltre possibile studiare sistemi a bassa dimensionalità utilizzando coppie di fasci in una o due direzioni e altre forme di confinamento nelle rimanenti direzioni, realizzando reticoli quasi mono o bidimensionali. Inoltre, poiché sono disponibili laser con alta stabilità in frequenza e fase, i reticoli ottenuti sono stabili e privi di imperfezioni, permettendo di realizzare potenziali molto vicini alle condizioni ideali. Gli atomi inseriti in questi reticoli devono avere temperature

molto basse, poiché le forze di dipolo ottico sono poco intense e il reticolo non può contenere atomi con impulso notevole.

3.2 La risonanza di Feshbach

La realizzazione di un simulatore quantistico richiede la capacità di impostare a piacimento l'interazione tra le particelle del sistema. Per gli atomi ultrafreddi in reticolo ottico ciò è possibile grazie ad un fenomeno detto “risonanza di Feshbach”. Questo fenomeno fu teorizzato indipendentemente e con diversi sviluppi teorici da Feshbach (1958, 1962) nell'ambito della fisica nucleare e Fano (1935, 1961) in fisica atomica. Successivamente (Stwalley, 1976) fu studiato per i gas quantistici e considerato un effetto indesiderato perché inelastico. Solo molto più tardi (Tiesinga, 1993) ne fu trovato un utilizzo nel campo degli atomi ultrafreddi. Una risonanza di Feshbach è un effetto di interazione tra uno stato continuo (atomi liberi) e uno discreto (stato legato), che avviene quando essi hanno energia simile.

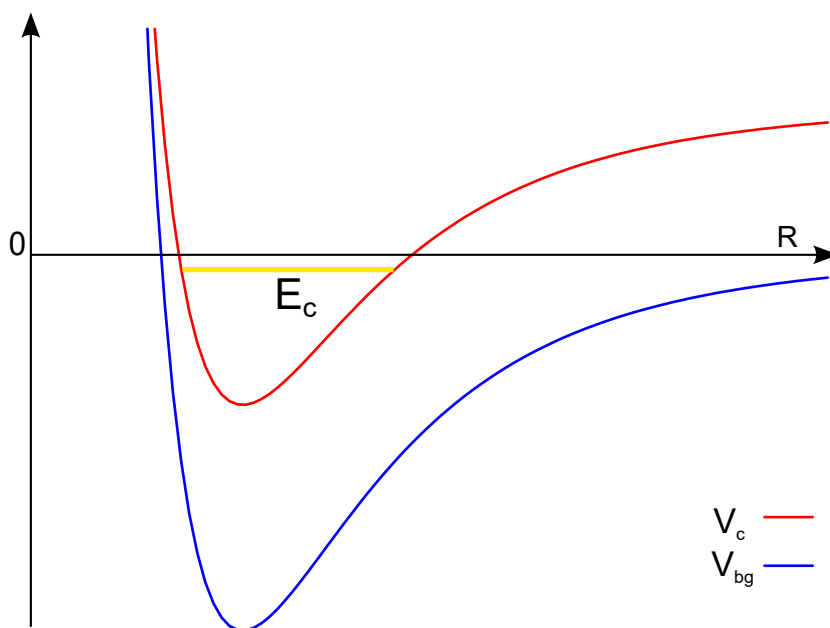


Figura 3.2: Andamento dei potenziali considerati

Per comprendere questo fenomeno, si considerano due atomi liberi che vanno incontro ad un processo di collisione. Passando nell'usuale sistema a massa ridotta e distanza relativa usato per l'urto tra due corpi senza struttura interna, risulta un potenziale V_{bg} dipendente solo dalla distanza, ad andamento “molecolare”: tende asintoticamente per $R \rightarrow +\infty$ alla condizione di atomi liberi ($V = 0$), ha un punto di minimo ad una

certa distanza ed è repulsivo (centrifugo) a piccole distanze. Questa configurazione dei due atomi costituisce un *canale*, cioè una configurazione degli stati interni, ed è detto *aperto* poiché è energeticamente permesso. Gli atomi trattati devono possedere un altro canale con un potenziale V_c con andamento simile ma valore asintotico maggiore, il quale permette la formazione di uno stato legato con energia E_c . L'urto è detto a bassa energia se l'energia del sistema è di poco superiore al valore asintotico del potenziale V_{bg} e minore di quello di V_c , per cui il secondo canale è *chiuso* (energeticamente proibito). Questo fenomeno diventa interessante quando l'energia dello stato legato è sensibile a campi esterni (spesso magnetici, a volte ottici). Agendo su questi campi è possibile calibrare E_c fino a renderla sufficientemente simile all'energia iniziale degli atomi, condizione per la quale anche una piccola interazione tra i canali causa un grande mescolamento dei due.

Negli esperimenti con atomi freddi si utilizzano principalmente risonanze controllate magneticamente, che avvengono in presenza di una differenza di momento magnetico δu tra i due canali, per cui la differenza di energia dei canali è lineare in B , andando ad annullarsi per il campo magnetico di risonanza B_0 . In questi casi è utile rappresentare l'interazione tra i canali usando la lunghezza di scattering a , per la quale si ricava (Moerdijk et al. (1995)), considerando i fenomeni di scattering con momento angolare nullo, una espressione semplice di dipendenza dal campo magnetico (B) (Figura 3.3).

$$a(B) = a_{bg} \left(1 - \frac{\Delta}{B - B_0} \right)$$

a_{bg} rappresenta la lunghezza di scattering per il solo V_{bg} , quindi in assenza di risonanza. B_0 è il valore del campo magnetico per cui l'energia dello stato legato è esattamente uguale al valore asintotico del potenziale V_{bg} , per questo valore la lunghezza di scattering diverge a $\pm\infty$ (a seconda della direzione di avvicinamento a B_0). Δ rappresenta la larghezza della risonanza.

3.3 Risonanza di Feshbach e BEC

Negli esperimenti con atomi ultrafreddi con condensati di Bose-Einstein (BEC) le risonanze di Feshbach trovano un duplice utilizzo, prima nella realizzazione del condensato e poi nella modifica delle sue caratteristiche. Le tecniche sperimentali per ottenere un BEC prevedono di confinare un campione di atomi in una trappola, cioè un qualche tipo di potenziale con un punto di minimo nello spazio. Si riduce l'energia degli atomi intrappolati (che si comportano come un gas) utilizzando il raffreddamento evaporativo fino ad ottenere le condizioni di degenerazione quantistica e quindi la condensazione. Il raffreddamento evaporativo si basa sull'allontanamento dal resto del campione degli atomi con energia cinetica superiore ad una certa soglia, lasciandoli fuoriuscire dal potenziale di trappola. Eliminando la frazione di atomi più energetici si abbassa l'energia media. Il campione viene poi lasciato termalizzare e il processo viene ripetuto con una

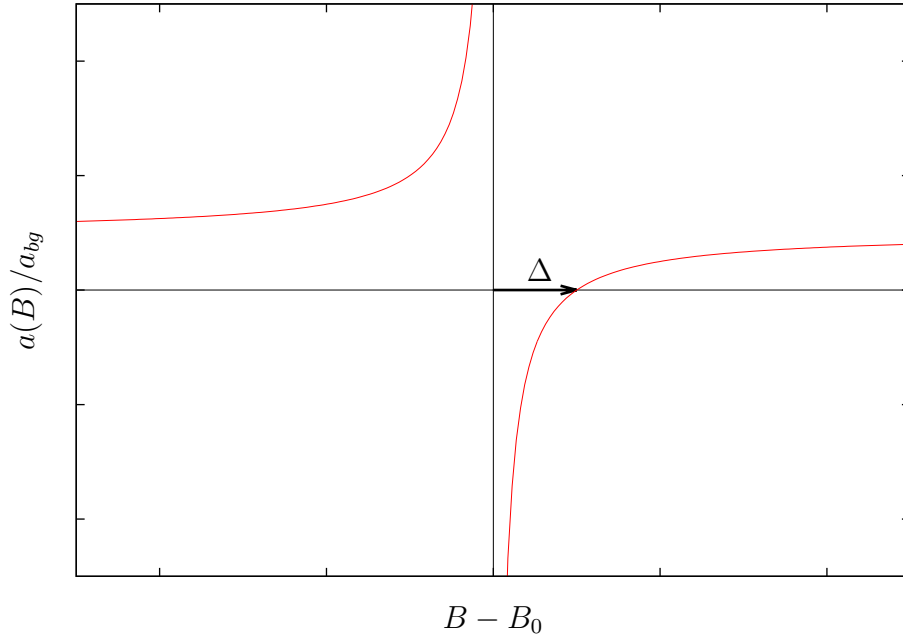


Figura 3.3: Andamento della lunghezza di scattering in prossimità di una risonanza di Feshbach. Unità arbitrarie.

soglia inferiore (realmente, questo processo viene effettuato in modo continuo). La termalizzazione del campione di atomi è dovuta alla loro interazione (urti elastici), per cui una lunghezza di scattering grande permette un'alta frequenza di interazione e quindi il rapido raggiungimento dell'equilibrio termico. Non tutte le specie atomiche hanno una lunghezza di scattering sufficientemente ampia per permettere questo tipo di raffreddamento, perciò si utilizza un campo magnetico per indurre una risonanza di Feshbach e aumentare a artificialmente verso un valore molto grande e positivo. Nella pratica non si può utilizzare un valore arbitrariamente grande di a poiché si aumenta la probabilità di fenomeni a 3 corpi, che causano la perdita di atomi dal campione. Normalmente i valori usati vanno da alcune decine a alcune centinaia di volte il raggio di Bohr.

Una volta ottenuto il condensato, è possibile rendere gli atomi non interagenti, condizione di interesse nel caso specifico. Questa condizione si ottiene quando la lunghezza di scattering diventa nulla e le interazioni tra gli atomi sono fortemente inibite. Osservando la Figura 3.3 si nota che per $(B - B_0) = \Delta$ la lunghezza di risonanza è nulla, per cui è possibile rendere il condensato non interagente utilizzando un campo magnetico pari a $\Delta + B_0$.

Capitolo 4

Il caso della localizzazione di Anderson

4.1 il modello originale di Anderson

P. W. Anderson pubblicò nel 1958 un articolo² in cui dimostrava, sotto certe condizioni, che in un materiale disordinato la diffusione di elettroni è soppressa. Il fenomeno divenne in seguito noto come localizzazione di Anderson e, ben oltre gli intenti originari, fu individuato in molti altri sistemi in cui un'onda si propaga in un mezzo disomogeneo.

Il modello costruito da Anderson considera particelle in un reticolo “tight-binding”, cioè in cui le autofunzioni sono espresse come somma di stati fortemente localizzati intorno a ciascun sito. Il reticolo non è necessariamente regolare nello spazio e le particelle si spostano da un sito all'altro attraverso salti quantistici. Il moto delle particelle è limitato ai reticoli e non si indaga la funzione d'onda negli spazi interstiziali. Le particelle considerate sono non interagenti, perciò la trattazione si sviluppa tenendo in considerazione il comportamento di una singola particella e mantiene la sua validità finché la densità è sufficientemente bassa. Occupando il sito j la particella possiede energia E_j , la quale è una variabile stocastica distribuita in una banda di valori, secondo una distribuzione di probabilità con larghezza caratteristica W . Ad esempio viene spesso utilizzata una distribuzione uniforme tra $[-W/2; +W/2]$ per cui è possibile calcolare esplicitamente alcune grandezze, ma altre distribuzioni non modificano il risultato. Questa condizione è posta per riprodurre un reticolo imperfetto, nel quale sono presenti alcune impurità che rendono disordinato il potenziale altrimenti periodico del reticolo cristallino. Poiché un potenziale perfettamente periodico presenta solo stati estesi (funzioni d'onda di Bloch), l'introduzione del disordine è fondamentale per spiegare la mancanza di diffusione. La transizione tra due siti è regolata da una energia di interazione V_{ij} che trasferisce la particella dal sito i al sito j . Questo modello è espresso dalla Hamiltoniana tight-binding,

in cui l'occupazione del sito i è espressa in notazione di Dirac come $|j\rangle$:

$$H = \sum_j E_j |j\rangle \langle j| + \sum_{j,i \neq j} V_{ij} |j\rangle \langle i|$$

o in alternativa dall'equazione di Schrödinger indipendente dal tempo sulla base delle funzioni di Wannier:

$$-\frac{i\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = E_j \Psi_j + \sum_{i \neq j} V_{ij} \Psi_j$$

Da questo modello Anderson ricava un teorema per cui, se $V(r_{ij})$ cala con la distanza più rapidamente di $\frac{1}{r^3}$ e se la larghezza del disordine W è superiore ad un certo valore critico, non si verifica alcun trasporto di particelle. Ciò è dimostrato considerando una particella localizzata con certezza nel sito n all'istante iniziale $t = 0$, per la quale la funzione d'onda si annulla esponenzialmente, allontanandosi dal sito, anche per $t \rightarrow \infty$.

Qualitativamente questo fenomeno è causato dall'impossibilità per la particella di passare ad un sito adiacente conservando l'energia, poiché è improbabile che questo abbia energia molto simile a E_n . Perciò sono possibili solo una serie di transizioni virtuali nella regione intorno al sito n . Non è impossibile che esista un qualche sito con energia tale da permettere la transizione, ma la probabilità che questa avvenga è data da $V(r)$ e, poiché questa cala più rapidamente del numero di siti che esistono ad una certa distanza (proporzionale al volume), la probabilità di una transizione di lunga distanza è bassa.

Lo spettro energetico di un reticolo ordinato è una banda energetica ben definita di stati estesi, con singolarità di van Hove agli estremi. Introducendo un disordine gli estremi della banda diventano continui e presentano due "code" decrescenti, costituite da stati localizzati. Poiché uno stato localizzato non può avere la stessa energia di uno stato esteso, altrimenti anche un piccolo accoppiamento produrrebbe un mescolamento degli stati e quindi la perdita di localizzazione, deve esistere una separazione netta tra la parte di banda estesa e la parte localizzata. Questa separazione è detta *soglia di mobilità* (mobility edge) ed è particolarmente interessante nello studio della transizione da metallo a isolante per $T \rightarrow 0$, poiché il materiale diventerà isolante solo se l'energia di Fermi ϵ_F è minore della soglia di mobilità⁴ p 1476.

Negli sviluppi successivi della teoria della localizzazione è stato dimostrato che la soglia di mobilità esiste solo in materiali con almeno tre dimensioni, negli altri casi gli stati sono sempre localizzati.

4.2 Il caso monodimensionale

In questo lavoro è trattato il caso monodimensionale, con un reticolo spaziato uniformemente con distanza d . Nel caso in cui siano permesse solo transizioni tra primi vicini con eguale

probabilità per tutti i siti, si pone $V = 1$ e il modello si semplifica nell'equazione di Schrödinger discretizzata:

$$\Psi_{n+1} + \Psi_{n-1} - 2\Psi_n + E_n\Psi_n = E\Psi_n$$

in cui il termine $-2\Psi_n$ deriva dalla discretizzazione della derivata seconda e sarà successivamente omissa incorporandolo nell'energia. Le energie E_n dei siti possono essere statisticamente indipendenti o correlate tra loro, portando a diversi comportamenti delle autofunzioni.

Nel caso statisticamente indipendente tutte le autofunzioni risultano esponenzialmente localizzate (cioè W critico è 0), ciò è dimostrato considerando l'autofunzione a partire dal sito $n = 0$, che costituisce un estremo del reticolo. Costruendo i vettori:

$$U_n = \begin{pmatrix} \Psi_{n+1} \\ \Psi_n \end{pmatrix}$$

Un metodo per definire la localizzazione dello stato è attraverso il seguente limite:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \log |\Psi_n^2 + \Psi_{n+1}^2| = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \log \|U_n\| = \frac{1}{\xi}$$

il quale è 0 se l'autofunzione è estesa poiché $\Psi_n > \epsilon$, mentre è finito se l'autofunzione è localizzata come $\approx e^{\frac{n}{\xi}}$. Esprimendo $U_1, U_2 \dots U_n$ in funzione di U_0 :

$$U_{n+1} = \begin{pmatrix} E - E_n & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} U_n \implies U_n = \prod_{p=1}^n \begin{pmatrix} E - E_p & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} U_0 = \mathbf{Q}_n U_0$$

La probabilità di trovare la particella a grande distanza è quindi riconducibile al prodotto di una serie di matrici con termini casuali, per il quale vale il teorema di Furstenberg⁸:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \log \|\mathbf{Q}_n U_0\| = -2\gamma > 0$$

che implica la localizzazione. Infatti considerando un reticolo molto lungo ma finito, lo stesso argomento vale all'altro estremo del reticolo, per cui le autofunzioni devono crescere esponenzialmente verso il centro e raccordarsi in qualche sito intermedio. Poiché $\gamma(E)$, anche la lunghezza di localizzazione $\xi(E)$ è dipendente dall'energia.

4.3 Modello André-Aubry

Poiché la autofunzioni del modello di Anderson sono sempre localizzate per reticoli con 1 o 2 dimensioni, non è possibile studiare i valori critici per la localizzazione in sistemi a bassa dimensionalità. Ciò è possibile considerando un altro modello in cui il disordine

del sistema non è casuale ma correlato. Il modello di André-Aubry³ è stato sviluppato originariamente per elettroni in un cristallo (in approssimazione tight-binding), in cui al potenziale periodico del cristallo è sovrapposto un potenziale (disordine) con periodo incommensurato rispetto al primo. Si viene a creare un potenziale quasi-periodico con autofunzioni localizzate solo se il grado di disordine è superiore ad un valore critico.

Il modello è rappresentato dall'equazione di Schrödinger tight-binding,

$$-\Psi_{n-1} - \Psi_{n+1} + \lambda V(2\pi\beta n + \theta)\Psi_n = E\Psi_n$$

in cui il disordine V è una funzione con periodo $2\pi\beta$, in cui β è il rapporto tra il periodo del cristallo e quello del disordine. λ è l'ampiezza del disordine, θ è una fase arbitraria. L'interazione tra siti adiacenti del reticolo è costante ed è rappresentata dai coefficienti di Ψ_{n-1} e Ψ_{n+1} . Quando $\lambda = 0$ le autofunzioni sono onde piane $\Psi_n(k) = e^{ikn}$ con autovalori $E(k) = 2 \cos(k)$. Sviluppando perturbativamente al primo ordine in λ , si ha il termine correttivo per le autofunzioni:

$$\Psi_n(k) - e^{ikn} = \lambda \sum_{k \neq k'} \left(\frac{\langle k' | V | k \rangle e^{ik'n}}{2(\cos k - \cos k')} \right)$$

il valore di aspettazione dell'interazione tra gli stati può essere riscritto:

$$\langle k' | V | k \rangle \rightarrow \sum_{m, m'} \langle k' | m' \rangle \langle m' | V | m \rangle \langle m | k \rangle$$

utilizzando la completezza delle funzioni di Wannier $|m\rangle$. poiché $\langle m' | V | m \rangle = V_m \delta_{m, m'}$ e $\langle k | m \rangle = e^{-ikm}$ l'interazione diventa:

$$\sum_m V_m e^{im(k-k')} = \tilde{V}(q) \quad q = k - k'$$

In cui $\tilde{V}(q)$ è la trasformata di Fourier del potenziale, la quale sarà trascurabile per tutti i $q \neq 2\pi\beta m$ a causa della periodicità di V , con m intero. Ponendo la sommatoria in funzione di m :

$$\Psi_n(k) = e^{ikn} + \lambda \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{V_m e^{in(k-2\pi\beta m)}}{2(\cos k - \cos(k - 2\pi\beta m))}$$

La serie contenuta nello sviluppo perturbativo converge solo se tutti i denominatori sono non nulli, cioè se per qualsiasi $p \in \mathbb{N}$:

$$2\pi\beta m + k \neq k + 2\pi p \implies \beta \neq \frac{p}{m}$$

$$2\pi p - k \neq k - 2\pi\beta m \implies \frac{k}{\pi} - \beta m \neq p$$

La serie non converge inoltre se β è un numero di Liouville³ p. 153 e se non esistono A, B per cui:

$$\left| \frac{k}{\pi} - \beta m - p \right| > \frac{A}{m^{1+B}}$$

cioè β non deve essere un numero Diofanteo.

La non convergenza della serie indica che non è possibile approssimare l'autofunzione della particella ad un'onda piana modulata, per cui si ha una transizione verso stati localizzati.

Nel caso particolare $V = \cos(2\pi n\beta + \theta)$ è possibile calcolare esplicitamente⁹ che, per $\beta = \frac{\sqrt{5}-1}{2}$, la transizione tra stati estesi e localizzati avviene ad un valore definito di λ :

- $\lambda > 2$ tutte le autofunzioni sono localizzate esponenzialmente con la stessa lunghezza caratteristica, in unità di distanza reticolare, $\epsilon = \frac{1}{\log \lambda/2}$.
- $\lambda < 2$ le autofunzioni sono onde piane modulate.
- $\lambda = 2$ le autofunzioni non sono ne estese ne esponenzialmente localizzate.

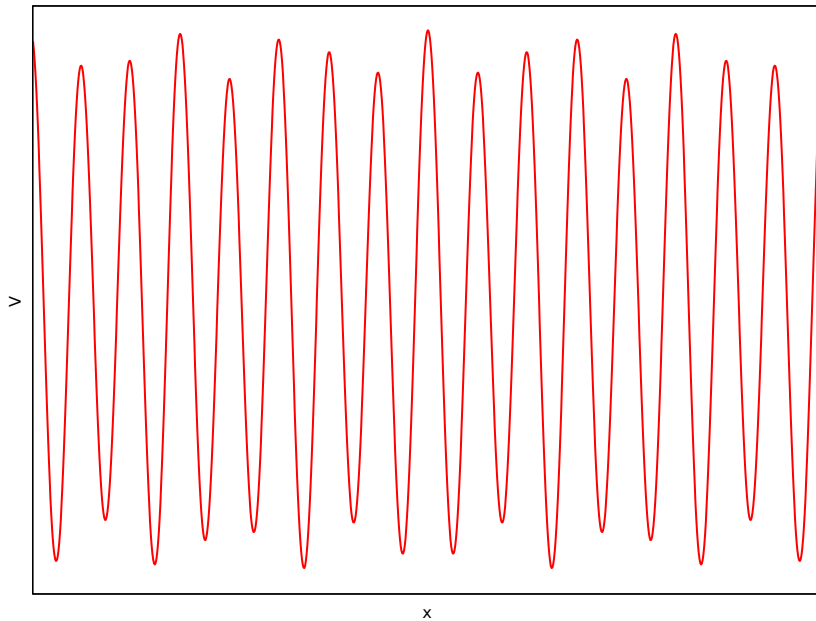


Figura 4.1: Potenziale quasi periodico del tipo $V = \cos(x) + \lambda \cos(\beta x)$. Unità arbitrarie.

4.4 Analisi della localizzazione

Macroscopicamente uno stato è localizzato se non presenta trasporto della particella. Per lo studio dei modelli di materiali disordinati e dei valori critici dei parametri è necessario definire alcune quantità microscopiche per descrivere il grado di localizzazione di uno stato. In seguito sono trattati alcuni di questi. Una discussione più approfondita è disponibile in⁴ p.1496.

Comportamento asintotico della funzione d'onda: Poiché la funzione d'onda deve annullarsi allontanandosi dalla regione accessibile alla particella, si può studiare il suo andamento fuori dalla regione per mezzo di un fit esponenziale. Si esprime quindi

$$\Psi(r) = f(r)e^{-\frac{r}{\xi}}$$

dove $f(r)$ descrive la funzione nella regione accessibile e il decadimento esponenziale rappresenta l'andamento al di fuori. Il parametro ξ è detto lunghezza di localizzazione e rappresenta il grado di confinamento della particella. Ovviamente $\xi \rightarrow \infty$ corrisponde ad uno stato esteso. Questo parametro è poco usato nelle simulazioni numeriche poiché richiede il calcolo esplicito degli autostati.

Numero di partecipazione inverso: Spesso per l'analisi della "larghezza" della autofunzione è sufficiente considerare il quadrato della probabilità di trovare la particella. Si definisce quindi il numero di partecipazione inverso come:

$$P = \frac{1}{\sum_r |\Psi(r)|^4} \quad \text{con } \|\Psi\| = 1$$

Viene espresso come somma su tutti i siti del reticolo, perciò è alquanto facile da implementare quando si svolge una simulazione numerica. Questo valore può essere considerato una misura del volume nel quale la funzione d'onda è marcatamente diversa da zero. Infatti, nel caso limite in cui la particella si può trovare su un solo sito (massima localizzazione):

$$\begin{aligned} \Psi_n &= 0, n \neq n_0 \\ \Psi_{n_0} &= 1 \end{aligned} \implies P = 1$$

Nel caso in cui la particella possa trovarsi con eguale probabilità su tutti gli N siti (massima delocalizzazione):

$$\Psi_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \implies P = N$$

Spettro energetico: La quantità di autostati disponibili alla particella in funzione dell'energia $\rho(E)$ è utile allo studio delle proprietà dei solidi. Nel caso di un reticolo monodimensionale senza disordine, di lunghezza L e con N siti, si considera l'equazione di Schrödinger discretizzata:

$$-\frac{\hbar^2}{2md^2} [\Psi_{n-1} - 2\Psi_n + \Psi_{n+1}] = E\Psi_n$$

ponendo $\frac{\hbar^2}{2md^2} = 1$ per fissare la scala delle energie in funzione della dimensione del reticolo d . Le soluzioni saranno onde piane $\Psi(k) = e^{ikn}$ (onde di Bloch, avendo omesso la componente periodica $u(r)$) con energia $E = 2(1 - \cos k)$. Imponendo condizioni al contorno periodiche, $\Psi_{n+N} = \Psi_n$, k può assumere solo i valori:

$$k = \left(\frac{2\pi}{L}\right) p \quad p = 0, 1, 2, \dots, N-1$$

per cui il numero di stati in funzione di k è: $\rho(k) = \frac{L}{2\pi} dk$. Poiché

$$dk = \frac{1}{\sqrt{E(4-E)}} dE \implies \rho(E) = \left(\frac{L}{2\pi}\right) \frac{1}{\sqrt{E(4-E)}} dE$$

le energie permesse per un reticolo ordinato sono quindi $0 < E < 4$ e la densità degli stati presenta singolarità di van Hove agli estremi.

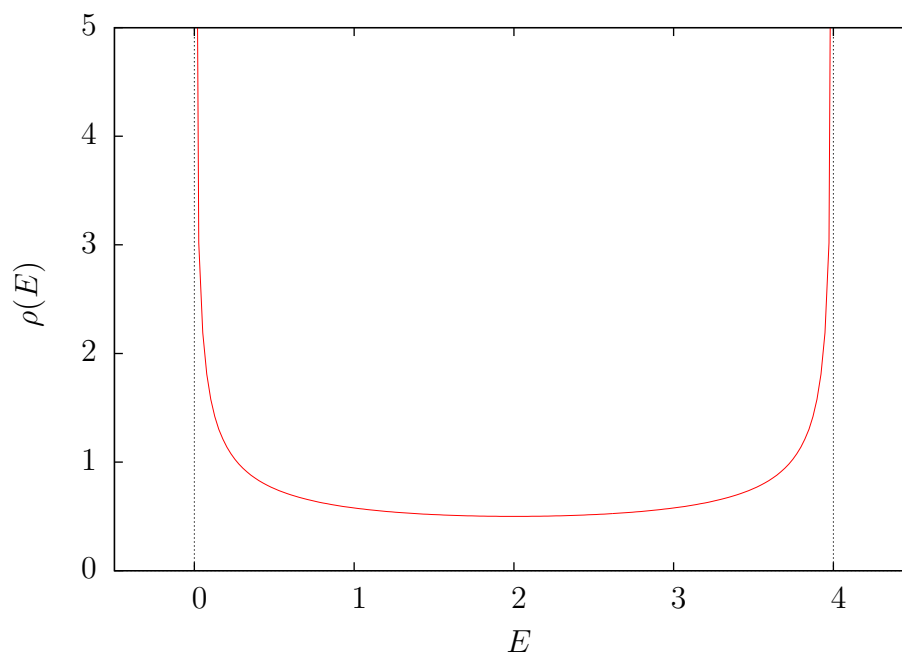


Figura 4.2: Distribuzione degli stati per il reticolo ordinato. Unità arbitrarie

Capitolo 5

Realizzazione di simulazione numerica

Poiché il modello di Anderson tratta particelle non interagenti, è possibile calcolare numericamente le autofunzioni per una particella singola, per verificare se si riproduce il fenomeno della localizzazione. Nella prima sezione di questo capitolo si ripercorre la realizzazione di un programma in C++ per il calcolo approssimato delle autofunzioni di un reticolo monodimensionale, con un potenziale qualsiasi. Nelle sezioni seguenti vengono riportati i risultati di alcune simulazioni per un potenziale casuale e per un potenziale quasi-periodico.

5.1 Realizzazione programma

Per calcolare le autofunzioni del sistema occorre trovare le soluzioni all'equazione di Schrödinger indipendente dal tempo:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}(x) = (E - V)\Psi(x)$$

Dovendo trattare il sistema con un numero finito di punti, occorre discretizzare l'equazione per tenere conto della risoluzione spaziale finita. Nell'appendice A si ripercorrono i passaggi logici che portano ad esprimere l'equazione di Schrödinger come sistema lineare con N autofunzioni del tipo:

$$-\frac{\hbar^2}{2md^2} [\Psi_{x-1} - 2\Psi_x + \Psi_{x+1}] = (E - V_x)\Psi_x$$

Dove $\Psi_{-1} = \Psi_N$ e $\Psi_{N+1} = \Psi_0$ sono le condizioni periodiche di Born-von Karman, utilizzate per riprodurre un reticolo con un numero infinito di siti (limite termodinamico). Nel realizzare il programma si è fissato $\frac{\hbar^2}{2md^2} = 1$, esprimendo l'unità di energia in funzione

della distanza tra i punti del reticolo d . La soluzione del problema consiste nel trovare il valore dell'energia che rende la funzione Ψ un'autofunzione e i valori discreti della funzione. Nel caso della localizzazione di Anderson, poiché si tratta di un modello tight-binding, esprimere le autofunzioni del sistema in modo discreto equivale ad esprimerle sulla base di Wannier, la quale consiste di stati localizzati su ciascun punto del reticolo, con un solo stato possibile su ciascun sito. Inoltre, poiché si tratta di un sistema 1D, le autofunzioni possono essere rese reali moltiplicandole per una fase, cosa che è stata assunta implicitamente nel resto del capitolo. Poiché tanto i valori delle autofunzioni quanto l'energia sono incogniti, il sistema lineare può essere pensato come un problema agli autovalori per la matrice \mathbf{T} :

$$\begin{pmatrix} (-2 - V_0) & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & (-2 - V_1) & 1 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & \cdots & 1 & (-2 - V_{N-1}) \end{pmatrix}$$

E il sistema si può esprimere come $\mathbf{T}\Psi = E\Psi$, dove Ψ è un vettore contenente gli N valori dell'autofunzione nei siti del reticolo. Chiaramente la matrice \mathbf{T} ha dimensioni pari ai punti del reticolo considerati, quindi la ricerca degli autovalori è un compito computazionalmente impegnativo.

Il programma è stato implementato usando la libreria Eigen3 (disponibile gratuitamente su <http://eigen.tuxfamily.org/>), che permette di istanziare matrici di dimensioni qualsiasi e fornisce diversi algoritmi, tra cui l'algoritmo QR per la ricerca degli autovalori. L'algoritmo QR consiste nel decomporre la matrice di partenza \mathbf{A}_k nel prodotto di una matrice ortogonale \mathbf{Q}_k e una triangolare superiore \mathbf{R}_k , per poi moltiplicarle in ordine inverso e ottenere la matrice \mathbf{A}_{k+1} :

$$\mathbf{A}_k = \mathbf{Q}_k \mathbf{R}_k \rightarrow \mathbf{A}_{k+1} = \mathbf{R}_k \mathbf{Q}_k$$

Ogni passaggio conserva gli autovalori poiché:

$$\mathbf{A}_{k+1} = \mathbf{Q}_k^T \mathbf{Q}_k \mathbf{R}_k \mathbf{Q}_k = \mathbf{Q}_k^T \mathbf{A}_k \mathbf{Q}_k = \mathbf{Q}_k^{-1} \mathbf{A}_k \mathbf{Q}_k$$

Sotto certe condizioni le matrici \mathbf{A}_k convergono ad una matrice triangolare superiore, con gli autovalori sulla diagonale. Il prodotto di tutte le \mathbf{Q}_k costituisce la matrice degli autovettori. Questo algoritmo è numericamente stabile ma richiede molte operazioni, per cui la libreria Eigen3 utilizza alcune ottimizzazioni che riducono il tempo di computazione.

5.2 Simulazione potenziale di Anderson

Il reticolo considerato ha dimensione $N = 1000$ siti. Il potenziale casuale simulato ha distribuzione uniforme tra $[-\lambda; +\lambda]$, con valori del disordine $\lambda = 0.1; 1; 2; 3; 10$. Sono

state realizzate 10 simulazioni per ciascun valore di λ ed è stata analizzata la media dei risultati corrispondenti allo stesso bin energetico. La distribuzione degli stati in 5.1 mostra una forte dipendenza dello spettro dal disordine. Se il disordine è molto debole gli stati riproducono il reticolo periodico, ciò è dovuto al numero limitato di siti considerato e alle condizioni al contorno che permettono stati estesi che sarebbero soppressi per un reticolo di lunghezza infinita. Al crescere del disordine le singolarità di van Hove si attenuano e lo spettro tende ad una distribuzione uniforme di stati localizzati su un solo sito.

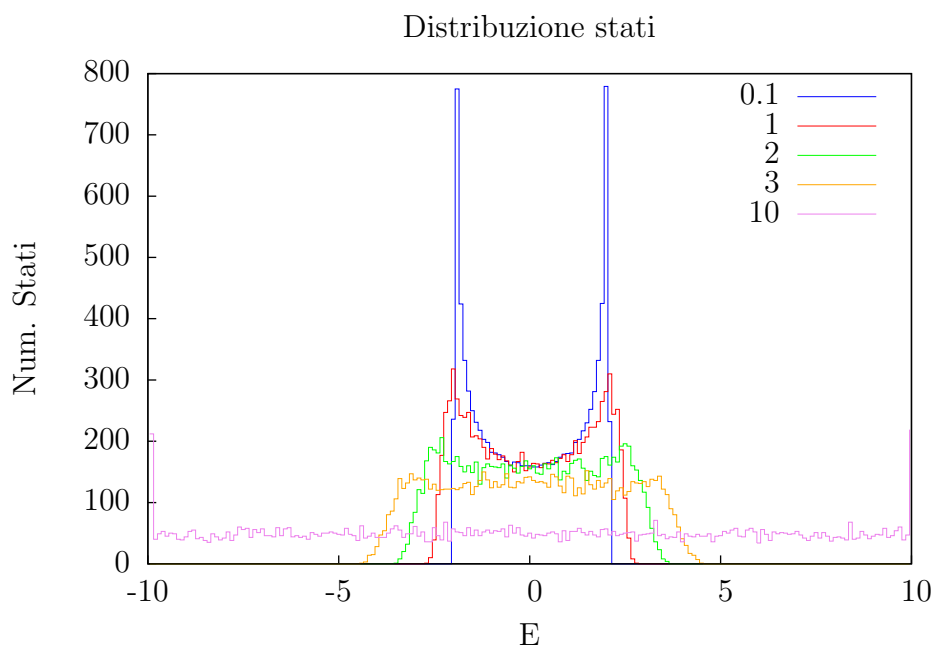


Figura 5.1: Distribuzione degli stati per il modello di Anderson, utilizzando 100 bin di larghezza fissa 0.1. Ciascun set è la somma di 10 realizzazioni per il valore di λ indicato.

La lunghezza di localizzazione utilizzata è una definizione operativa per permettere di individuare gli stati localizzati, pari al numero di siti in cui la probabilità di trovare la particella è almeno il 10% del valore massimo, espressa come frazione sul numero di siti del reticolo. Questa quantità è ≈ 1 per uno stato esteso e per uno stato massimamente localizzato $\approx 1/N$. In 5.2 è evidente che per $\lambda > 2$ tutti gli stati possono considerarsi localizzati.

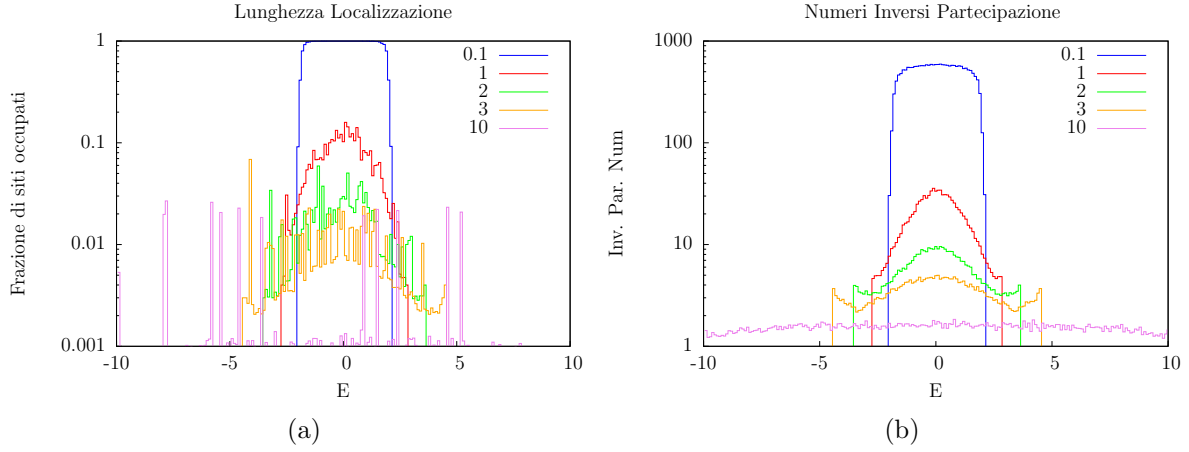


Figura 5.2: (a) Lunghezze di localizzazione e (b) numeri di partecipazione inversi per il modello di Anderson, ciascun set è la media di 10 realizzazioni per il valore di λ indicato

5.3 Simulazione potenziale Aubry

È stato simulato un potenziale con $\beta = (\sqrt{5} - 1)/2$, pari alla sezione aurea, per $\lambda = 0; 0.5; 2; 3; 10$ su un reticolo di 1000 siti. In 5.3 lo spettro energetico del potenziale in presenza di disordine si divide in numerose bande. In 5.4 si osserva come siano presenti stati estesi per $\lambda < 2$. Il caso $\lambda = 2$ è critico: le bande sono molto strette e gli stati intermedi tra estesi e localizzati. Per $\lambda > 2$ gli stati sono localizzati, i gap energetici e le bande si allargano man mano. La lunghezza di localizzazione riportata è stata calcolata come per caso precedente.

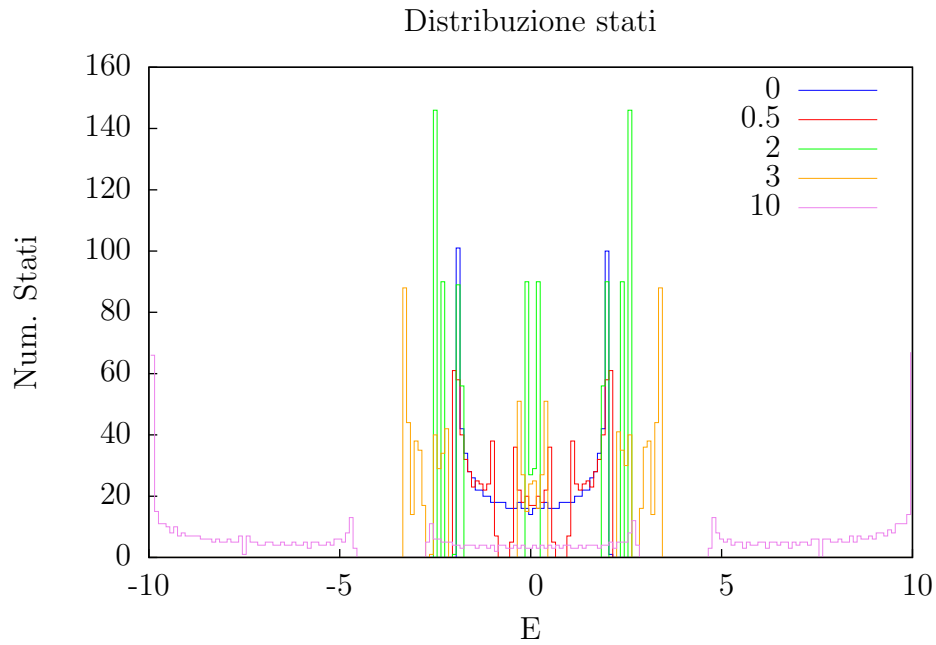


Figura 5.3: Distribuzione degli stati, utilizzando 100 bin di larghezza fissa 0.1.

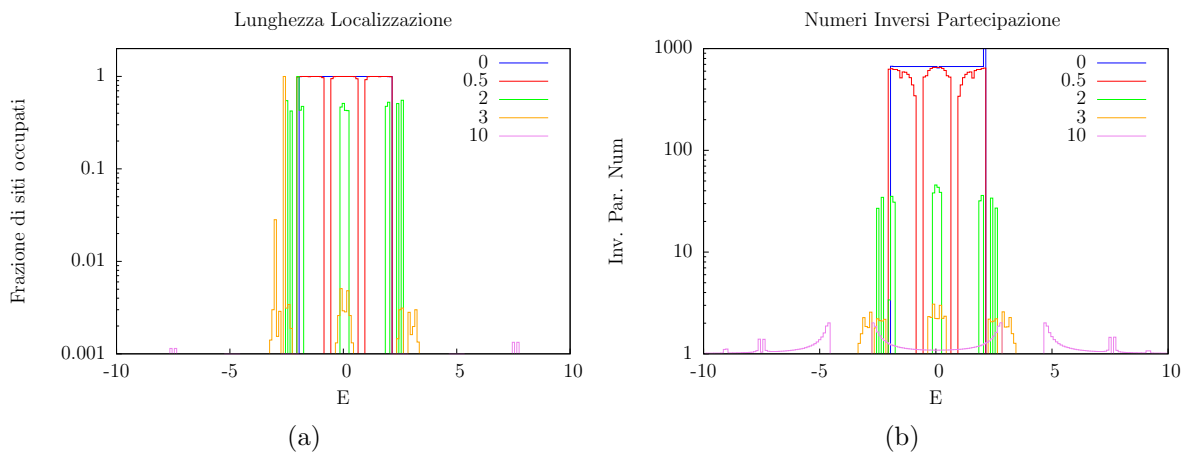


Figura 5.4: (a) Lunghezze di localizzazione e (b) numeri di partecipazione inversi per il modello di Andr e-Aubry

Capitolo 6

Osservazione sperimentale di transizione di Anderson e conclusioni

Come esempio notevole di simulazione quantistica alla Feynman si riportano alcuni risultati sperimentali¹⁰ riguardanti la localizzazione di BEC in reticoli ottici, in cui è stato osservato per la prima volta il fenomeno in onde di materia.

6.1 Caratteristiche del sistema

Il condensato è costituito da atomi ^{39}K resi non interagenti dopo la condensazione, riducendo la lunghezza di scattering grazie ad una risonanza di Feshbach. Il condensato è trattenuto in una trappola di dipolo incrociato, realizzata focalizzando due fasci laser provenienti da direzioni diverse nello stesso punto. Utilizzando due onde stazionarie create con fasci laser di diversa lunghezza d'onda è stato realizzato un reticolo ottico monodimensionale. Il fascio di intensità maggiore fornisce i siti reticolari (in modo simile agli atomi nella materia), il cui potenziale periodico è modulato dal secondo fascio, meno intenso. Il reticolo è approssimativamente quasi-periodico poiché le due lunghezze d'onda hanno un rapporto $\beta = 1.1972\dots$, realizzano quindi una condizione trattabile con il modello di André-Aubry. Controllando l'intensità dei due fasci è possibile variare il grado di disordine Δ e l'interazione di tunnelling J . Il loro rapporto $\lambda = \frac{\Delta}{J}$ fornisce il grado di disordine. Il confinamento nelle altre due direzioni è dovuto al profilo di intensità dei fasci, maggiore al centro che all'esterno, che crea un potenziale armonico grazie alla forza di dipolo ottico.

6.2 Analisi degli autostati

L'analisi degli autostati del reticolo è stata eseguita con diversi metodi. Disattivando improvvisamente la trappola armonica e lasciando espandere il condensato nel reticolo è possibile confrontare l'estensione degli autostati con quella iniziale del condensato. In un reticolo senza disordine gli stati estesi permettono l'espansione libera (balistica), mentre nel caso di forte disordine l'estensione degli autostati è minore di quella del condensato e l'espansione è inibita. Ripetendo il processo di misura con diversi gradi di disordine è stata osservata una transizione continua tra espansione libera e mantenimento delle dimensioni iniziali. Per $\lambda > 7$ il condensato mantiene le dimensioni iniziali. Ripetendo l'osservazione per diversi valori di Δ e J , la transizione tra stati estesi e localizzati si è rivelata dipendente solamente da λ , rivelando che la localizzazione è indipendente dalla scala del potenziale.

L'alto numero di atomi nel condensato permette di osservarne direttamente la densità grazie alla diffusione luminosa. Dal profilo di densità del condensato dopo un tempo fissato di espansione si può stimare la lunghezza di localizzazione con un fit esponenziale su α : $f_\alpha(x) = A \exp(-|x - x_0|^\alpha/l)$. Gli stati estesi mostrano un profilo gaussiano ($\alpha = 2$) a causa della distribuzione di velocità del condensato, mentre quelli localizzati presentano un profilo esponenziale ($\alpha = 1$). I dati raccolti mostrano una transizione continua da $\alpha = 2$ verso $\alpha = 1$ per λ compreso tra 1 e 10.

La distribuzione degli impulsi degli atomi in un reticolo senza disordine è caratterizzata da picchi per $k = 0, \pm k_{ret}$, dovuti alla periodicità del potenziale. Questi sono ben definiti poiché gli stati sono estesi su un gran numero di siti. Inserendo disordine nel reticolo, la distribuzione dei momenti si allarga mostrando che gli stati sono più localizzati.

6.3 Confronto con simulazione numerica

Il confronto con gli autostati calcolati per il potenziale di Aubry conferma che l'andamento del fenomeno è quello previsto. Nel caso sperimentale la transizione non è nettamente definita per $\lambda = 2$, a causa del diverso rapporto β tra i periodi di disordine e potenziale. Il comportamento libero al limite dell'assenza di disordine e la totale localizzazione nel caso di un forte disordine mostrano che variando i parametri della simulazione è possibile riprodurre il fenomeno sperimentale. Viceversa, è possibile utilizzare il metodo sperimentale per eseguire indagini al posto del metodo numerico, una volta definita una corrispondenza tra le grandezze in esame. Il metodo sperimentale permette inoltre di inserire interazioni nel modello senza complicare le procedure, a differenza del calcolo numerico che si complica con l'aumento del numero di particelle. L'osservazione diretta promette quindi di superare con la sua flessibilità l'inconveniente della maggior difficoltà di realizzazione nella simulazione di sistemi di molte particelle interagenti.

Bibliografia

- [1] R. P. Feynman, *Simulating Physics with Computers*, Int. Journal of Theoretical Physics, Vol. 21, Issue 6, pp 467-488, (1982)
- [2] P.W. Anderson, *Absence of Dissusion in Certain Random Lattices*, Phys. Rev. **109**, 1492
- [3] Aubry, S. & André, G. *Analitycy breaking and Anderson localization in incommensurate lattice*. Ann. Israel Phys. Soc. **3**, 133-140 (1980)
- [4] Kramer B. & MacKinnon A. *Localization: theory and experiment*. Rep.Prog. Phys. 1469-1564 (1993)
- [5] S. Lloyd, *Universal quantum simulators*, Science **273**, 1073-1078 (1996)
- [6] R. Blatt & C.F. Roos *Quantum simulation with trapped ions*, Nat. Phys vol. 8 (2012)
- [7] R. Grimm, M. Weidemuller, Y. B. Ovchinnikov, *Optical dipole traps for neutral atoms*, disponibile su [arXiv:physics/9902072](https://arxiv.org/abs/physics/9902072) 30 April 2015).
- [8] Ishii K. *Prog. Theor. Phys. Suppl* **53** 77 (1973)
- [9] Christian, A., André, W., Gert-Ludwig, I., Peter, H., Imre, V. *Phase-space visualization of a metal-insulator transition*. New Journal of Physics, **6**, 1, 70-70 (2004).
- [10] Roati G., D'Errico C. Fallani E. Fattori M., Fort C., Zaccanti M., Modugno G., Modugno M., Inguscio M. *Anderson localization of a non-interacting Bose-Einstein condensate* Nature, **453** (2008)

Appendices

Appendice A

Discretizzazione Eq. Schrödinger

Per discretizzare l'equazione occorre esprimere la derivata spaziale in termini del valore della funzione sui punti del reticolo. L'espressione per una forma approssimata di derivata seconda si può ricavare considerando uno sviluppo di Taylor di una funzione nei pressi di un punto x . Esprimiamo il valore della funzione ad una distanza h dal punto attraverso il suo valore in x ed un certo numero di sue derivate:

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) + \dots$$

La stessa cosa è applicabile al punto $(x-d)$. Ciò che faremo in questo caso sarà considerare il punto x come un sito del reticolo, e i punti $(x+d), (x-d)$ come i due siti immediatamente adiacenti. Esprimiamo le derivate di f come qualche funzione lineare dei valori della funzione di un certo numero di punti attorno ad x , nel nostro caso ci limiteremo a 3 (ma il ragionamento è facilmente modificabile per un numero maggiore)

$$f'(x) = af(x-d) + bf(x) + cf(x+d)$$

nella quale è immediato sostituire l'espressione sopra troncata al terzo termine, sia per $f(x-d)$ che per $f(x+d)$, ottenendo un semplice sistema per i coefficienti a, b, c , con soluzione $b = 0, a = -c = \frac{1}{2d}$. Con un procedimento identico esprimiamo $f''(x)$ e risolviamo il sistema dei coefficienti, ricavando:

$$f''(x) = \frac{1}{d^2}f(x-d) - \frac{2}{d^2}f(x) + \frac{1}{d^2}f(x+d)$$

Sostituendo questa espressione per la derivata seconda nell'equazione di Schrödinger, possiamo riscriverla come:

$$-\frac{\hbar^2}{2md^2} [\Psi(x-d) - 2\Psi(x) + \Psi(x+d)] = (E - V)\Psi(x)$$

Ricordando che abbiamo scelto gli incrementi spaziali coincidenti con il passo del reticolo, possiamo riesprimere $\Psi(x) \rightarrow \Psi_x$ $\Psi(x+d) \rightarrow \Psi_{x+1}$, numerando quindi tutti i punti del reticolo con un numero intero.

L'equazione differenziale si è così ridotta ad un sistema di equazioni lineari, in cui le incognite sono i valori dell'autofunzione in ciascun punto del reticolo. Nel sistema l'energia è quindi un parametro che individua le diverse soluzioni, mentre è di nostro interesse ricavare i valori di energia per cui la soluzione del sistema è un'autofunzione. Per far ciò occorre imporre le condizioni al contorno che rendono la soluzione un'autofunzione, che nel caso del dominio limitato significa imporre $\Psi = 0$ nei punti sulla frontiera del reticolo. In alternativa si può imporre che il sistema sia periodico al termine del reticolo, permettendo "virtualmente" che la soluzione sia uno stato esteso, in quanto ecessario che l'estensione del reticolo nel calcolatore sia finita. Ipotizzando che i punti del reticolo siano identificati da numeri interi $\in [0, 1, \dots, N-1]$, per imporre il dominio limitato è sufficiente eliminare il termine Ψ_{-1} nella 0-esima equazione e il termine Ψ_{N+1} nell'equazione N-esima. Per imporre le condizioni periodiche identifichiamo i termini Ψ_0 e Ψ_N nelle equazioni 0-esima e N-esima.