

Corso di Metodi Computazionali della Fisica

Alessandro Vicini (Università di Milano)

Esercizi di Mathematica

- Si calcoli $\arccos(0.707107)$
Si calcolino $\cos(2i)$, $\cosh(2)$, $1/2(\exp(-2) + \exp(2))$.
Che differenza si ottiene inserendo i numeri secondo le seguenti notazioni: 2 oppure 2. ?
- Si definiscano $a = -5 + i$ e $b = 1 + 2i$.
Si discuta la validità dell'uguaglianza $\log(ab) = \log(a) + \log(b)$. Per illustrare il risultato si disegni la parte immaginaria di $\log(z)$ con z complesso.
- Si disegni, utilizzando il comando `ParametricPlot3D` la superficie di Riemann della funzione $f(z) = z^{1/2}$.
- Si calcolino i seguenti integrali

$$\int dx \frac{1}{\sqrt{1 - 2 \sin^2(x)}}$$
$$\int_0^\infty dx x \exp(-x^2)$$
$$\int_0^\infty dx \frac{1}{\pi} \cos\left(\frac{x^3}{3} + xt\right)$$

- Si definisca, attraverso una relazione ricorsiva, una funzione che si comporta come il fattoriale.
- Si scriva un algoritmo per calcolare il determinante di una matrice 3x3, nota l'espressione del determinante di una matrice 2x2.
- **Soluzione di (sistemi di) equazioni**

Si risolvano i seguenti sistema di equazioni lineari, sia con il formalismo matriciale che con la scrittura esplicita delle equazioni:

$$\begin{array}{rcl} x + 3y + 5z & = & 7 \\ x + 2y + 4z & = & 6 \\ x + y + z & = & 5 \end{array} \qquad \begin{array}{rcl} x + 3y + 5z & = & 0 \\ x + 2y + 4z & = & 0 \\ x + y + z & = & 0 \end{array}$$

$$\begin{array}{rcl} x + 2y + 3z & = & 7 \\ 4x + 5y + 6z & = & 6 \\ 7x + 8y + 9z & = & 5 \end{array} \qquad \begin{array}{rcl} x + 2y + 3z & = & 0 \\ 4x + 5y + 6z & = & 0 \\ 7x + 8y + 9z & = & 0 \end{array}$$

- Si risolva il seguente sistema di equazioni:

$$\begin{aligned}x + y - z &= -1 \\x^2 + y^2 - z &= 3\end{aligned}\tag{1}$$

Si disegnino le due superfici descritte dalle due equazioni, considerando x e y nell'intervallo $[-5, 5]$.

Si spieghi il significato dell'intersezione delle due superfici.

Si uguagliano le due equazioni, risolte rispetto a z e si ricavi y in funzione di x .

Si determini l'intervallo di x permesso per avere una soluzione reale del problema.

Si disegnino in questo intervallo di x le due soluzioni.

- Si scriva una funzione $f(r, s)$ che descriva il risultato del seguente integrale in termini dei due parametri r ed s :

$$f(r, s) = \int_0^1 dt t^{r-1}(1-t)^{s-1}$$

Si consideri la possibilità di usare l'opzione `GenerateConditions->False` del comando `Integrate`.

- Si verifichi che i polinomi di Hermite possono essere ottenuti derivando ripetutamente una funzione generatrice, secondo la formula

$$H_n(x) = \exp(x^2) \left[\left(\frac{\partial}{\partial t} \right)^n \exp(-(x-t)^2) \right]_{t=0}$$

- Nota le relazioni di ricorrenza soddisfatta dai polinomi di Hermite,

$$\begin{aligned}H_{n+1}(x) &= 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x) \\H_0(x) &= 1 \\H_1(x) &= 2x\end{aligned}$$

si costruiscano i primi 20 polinomi $H_n(x)$ $1 \leq n \leq 20$ e si verifichi che soddisfano una relazione di ortogonalità rispetto alla misura $\exp(-x^2)$ sull'intervallo $(-\infty, \infty)$.

- **Oscillatore armonico**

Si risolva la seguente equazione differenziale:

$$y''(x) + (2n + 1 - x^2)y(x) = 0$$

che descrive un sistema quantistico unidimensionale soggetto a un potenziale armonico.

Si scartino le soluzioni che divergono per $x \rightarrow \pm\infty$.

Si calcoli la normalizzazione delle autofunzioni $y_n(x)$, per dato n .

Si disegnino le prime 5 autofunzioni dell'oscillatore armonico, $\psi_n(x) = \exp(-1/2 x^2)y_n(x)$ con x compreso nell'intervallo $[-5, 5]$.

- **Potenziale lineare**

Si consideri un sistema sottoposto a un potenziale lineare

$$y''(x) - xy(x) = 0, \quad \text{con } y(0) = 0 \text{ e con } y'(0) = 1$$

- **Potenziale centrale, armoniche sferiche, polinomi di Legendre**

Si risolvano le equazioni per la parte angolare dell'equazione di Schrödinger, nel caso di un problema con un potenziale centrale.

$$\begin{aligned} - \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \psi_{lm}(\theta, \phi) &= l(l+1)\psi_{lm}(\theta, \phi) \\ - \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \psi_{lm}(\theta, \phi) &= m^2 \psi_{lm}(\theta, \phi) \end{aligned}$$

Essendo le due equazioni disaccoppiate, si riscriva la funzione incognita come prodotto di una funzione che dipende solo da $\cos \theta$ per una che dipende solo da ϕ : $\psi_{lm}(\theta, \phi) = \Theta(\theta)\Phi(\phi)$.

Si ponga $\xi = \cos \theta$ e si riscriva la prima equazione, sfruttando la seconda per eliminare le derivate rispetto a ϕ dalla prima.

Si risolva la seconda equazione e si determini $\Phi(\phi)$. Si risolva quindi la prima equazione.

Si osservi che compaiono polinomi di Legendre di 2 tipi. Imponendo la regolarità della soluzione in $\xi = \pm 1$ si fissi una delle due costanti di integrazione.

Si confrontino le soluzioni ottenute con le armoniche sferiche Y_{lm} implementate in Mathematica.

Si disegnino le prime armoniche sferiche, con $l = 0, 1, 2$ e $-l \leq m \leq l$, utilizzando il comando `ParametricPlot3D` e notando che la funzione da disegnare fornisce il raggio (in coordinate sferiche) ovvero la distanza della superficie dall'origine.

- Si generino i primi 50 polinomi di Legendre, basandosi sulla relazione di ricorrenza da essi soddisfatta,

$$(l+1)P_{l+1}(x) - (2l+1)xP_l(x) + lP_{l-1}(x) = 0$$

essendo noto che $P_0(x) = 1$, $P_1(x) = x$.

- Si verifichi, per $0 \leq i, j \leq 5$ la relazione di ortogonalità dei polinomi di Legendre.
- Si implementi una regola di sostituzione che sfrutta la relazione di ortogonalità dei polinomi di Legendre.

- **Algebra di Dirac**

Si consideri un insieme di 4 matrici γ^μ $\mu = 0, 1, 2, 3$ che soddisfano la seguente regola di anticommutazione

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2g^{\mu\nu}\mathbf{1}$$

e inoltre si consideri la matrice $\gamma_5 = i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3$ che anticommuta con tutte le altre matrici, cioè tale per cui $\{\gamma^\mu, \gamma_5\} = 0$, e che è tale per cui $\gamma_5^2 = \mathbf{1}$.

Si usi Mathematica per implementare delle regole che permettano:

- a) di calcolare la traccia del prodotto di un numero arbitrario di matrici γ ;
- b) di semplificare un prodotto di matrici γ quando un indice compaia ripetuto (due volte).

Per raggiungere questo scopo si considerino i seguenti passaggi:

- 1) si rappresentino i vettori, con un indice di Lorentz, il tensore metrico, con due indici di Lorentz, il prodotto scalare di due vettori e infine la contrazione di un tensore metrico con un vettore, utilizzando un unico simbolo;
- 2) si introduca un simbolo per rappresentare una matrice γ con indice μ ;
- 3) si introduca un simbolo con cui scrivere il prodotto (ovviamente non commutativo) di una sequenza arbitrariamente lunga di matrici γ ;
- 4) si introduca un simbolo che implementi (ricorsivamente) l'operazione di traccia di matrici γ .

Si ricordino le dimostrazioni per cui $\text{Tr}(\gamma^\mu) = 0$ e per cui $\text{Tr}(\gamma^\mu\gamma^\nu) = 4g^{\mu\nu}$.

Si ha infatti $\text{Tr}(\gamma^\mu) = \text{Tr}(\gamma_5\gamma_5\gamma^\mu) = -\text{Tr}(\gamma_5\gamma^\mu\gamma_5) = -\text{Tr}(\gamma_5\gamma_5\gamma^\mu) = -\text{Tr}(\gamma^\mu) = 0$ e inoltre $\text{Tr}(\gamma^\mu\gamma^\nu) = \text{Tr}(2g^{\mu\nu}\mathbf{1} - \gamma^\nu\gamma^\mu) = 8g^{\mu\nu} - \text{Tr}(\gamma^\nu\gamma^\mu)$ da cui il risultato.

Si ricordi inoltre che

$$\gamma^\mu\gamma^{\alpha_1} \dots \gamma^{\alpha_n}\gamma_\mu = \begin{cases} -2\gamma^{\alpha_n}\gamma^{\alpha_{n-1}} \dots \gamma^{\alpha_1} & n \text{ dispari} \\ 4g^{\alpha_1\alpha_2} & n = 2 \\ 4 & n = 0 \end{cases}$$

- **Calcolo dei livelli della buca di potenziale unidimensionale**

Dato un potenziale

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x \leq |a| \\ V_0 & x > |a| \end{cases},$$

con $V_0 > 0$, si studi l'equazione di Schrödinger

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi(x) = q \psi(x).$$

Si distinguano le soluzioni pari e quelle dispari.

Si impongano le condizioni di continuità della funzione d'onda e della sua derivata prima nei punti $x = \pm a$.

Prendendo il rapporto delle due condizioni di continuità si scriva la condizione, indipendente dalle costanti di integrazione del problema, che definisce i livelli energetici ammessi all'interno della buca.

Si determinino numericamente i livelli energetici, per dati a e V_0 .

Dalle equazioni di continuità si ricavi una delle due costanti di integrazione in funzione dell'altra.

Si calcoli numericamente, per ogni valore ammesso dell'energia, la normalizzazione della funzione d'onda.

Si disegni, per i diversi livelli dell'energia, la funzione d'onda nell'intervallo di x $[-a, a]$.

- **Formule di prostaferesi**

Si realizzi almeno una soluzione per implementare le seguenti formule di prostaferesi:

$$\begin{aligned}\cos(\alpha + \beta) &= \cos \alpha \cos \beta - \sin \alpha \sin \beta \\ \sin(\alpha + \beta) &= \sin \alpha \cos \beta + \cos \alpha \sin \beta \\ \frac{1 - \cos \theta}{2} &= \sin^2 \frac{\theta}{2} \\ \frac{1 + \cos \theta}{2} &= \cos^2 \frac{\theta}{2}\end{aligned}\tag{2}$$

cioè un modo per ottenere che, data un'espressione che contiene dei termini che troviamo a primo membro nelle identità qui riportate, questi vengano trasformati nei corrispondenti secondi membri.

- **Particella libera in coordinate sferiche** Si risolva la seguente equazione differenziale, soddisfatta, in coordinate sferiche, dalla parte radiale della funzione d'onda di una particella libera.

$$y''(r) + \frac{2}{r}y'(r) + \left(1 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right)y(r) = 0$$

Si determini una delle costanti di integrazione, studiando l'andamento delle soluzioni nell'origine e all'infinito.