

Solución numérica de la ecuación de Schrödinger en una dimensión

Mecánica Cuántica I

Diego Alvarado, Abraham Morales y René Corrales

Facultad de Ciencias Físico Matemáticas
Universidad Autónoma de Nuevo León

28 de mayo de 2021

Tabla de contenido

1. Ecuación de Schrödinger
2. Discretización de la ecuación de Schrödinger: Diferencias finitas
3. Paquete de ondas
4. Simulaciones

Ecuación de Schrödinger

La ecuación de Schrödinger describe la evolución temporal de una partícula masiva de naturaleza ondulatoria no relativista y es de importancia central en la teoría de la mecánica cuántica. Matemáticamente está dada por la siguiente expresión:

$$\begin{aligned}\hat{H}\psi(\vec{r}, t) &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) \\ \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}, t) &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t)\end{aligned}\quad (1)$$

Para este proyecto usaremos la forma unidimensional de esta ecuación, y por comodidad denotaremos $\psi(x, t) \rightarrow \psi$ y $V(x) \rightarrow V$, entonces

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

Ecuación de Schrödinger

La ecuación (2) tiene solución en los complejos, por este motivo, podemos entender que la función de onda ψ sea una combinación lineal de la parte real y la parte imaginaria de la función, esto es:

$$\psi = \psi^R + \psi^I$$

donde ψ^R es la parte real y ψ^I es la parte imaginaria de la solución y además cada una cumple con lo siguiente:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi^R + V\psi^R = -\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi^I \quad (3)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi^I + V\psi^I = \hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi^R \quad (4)$$

Diferencias finitas

La característica sobresaliente del este metodo es que la operación de diferenciación se aproxima con una ecuación simple, que involucra los valores de la función en ubicaciones específicas. Estas ubicaciones son llamados puntos de cuadrícula, y el conjunto de todos los puntos de cuadrícula comprende la cuadrícula de diferencias finitas para un dominio de interés.



Entonces en cada nodo hay un valor específico asignado para ψ . Una vez teniendo discretizado el espacio sobre el que vamos a trabajar tenemos que tomar en cuenta que para cada uno de esos nodos hay un valor específico en el tiempo.

Diferencias finitas

t_k/x_j	$j = 0$	$j = 1$	$i = 2$	$j = 3$	\cdots	$j = N$
$k = 0$	$\psi(x_0, t_0)$	$\psi(x_1, t_0)$	$\psi(x_2, t_0)$	$\psi(x_3, t_0)$	\cdots	$\psi(x_N, t_0)$
$k = 1$	$\psi(x_0, t_1)$	$\psi(x_1, t_1)$	$\psi(x_2, t_1)$	$\psi(x_3, t_1)$	\cdots	$\psi(x_N, t_1)$
$k = 2$	$\psi(x_0, t_2)$	$\psi(x_1, t_2)$	$\psi(x_2, t_2)$	$\psi(x_3, t_2)$	\cdots	$\psi(x_N, t_2)$
$k = 3$	$\psi(x_0, t_3)$	$\psi(x_1, t_3)$	$\psi(x_2, t_3)$	$\psi(x_3, t_3)$	\cdots	$\psi(x_N, t_3)$
$k = 4$	$\psi(x_0, t_4)$	$\psi(x_1, t_4)$	$\psi(x_2, t_4)$	$\psi(x_3, t_4)$	\cdots	$\psi(x_N, t_4)$
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\ddots	\vdots
$k = M$	$\psi(x_0, t_M)$	$\psi(x_1, t_M)$	$\psi(x_2, t_M)$	$\psi(x_3, t_M)$	\cdots	$\psi(x_N, t_M)$

Tabla 1: Cuadrícula de diferencias finitas

Discretización de la ecuación de Schrödinger

Bajo el esquema de las diferencias finitas centrales, las derivadas parciales quedarían de la siguiente manera:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \approx \frac{1}{\Delta x^2} (\psi_{j-1,k} - 2\psi_{j,k} + \psi_{j+1,k}) \quad (5)$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} \approx \frac{1}{\Delta t} (-\psi_{j,k} + \psi_{j,k+1}) \quad (6)$$

Sustituyendo esto en la ecuación de Schrödinger tenemos que:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\Delta x^2} (\psi_{j-1,k} - 2\psi_{j,k} + \psi_{j+1,k}) + V\psi_{j,k} = i\hbar \frac{1}{\Delta t} (-\psi_{j,k} + \psi_{j,k+1}) \quad (7)$$

Discretización de la ecuación de Schrödinger

Llevando las ecuaciones (3) y (4) a la forma de la ecuación (7) tenemos lo siguiente:

$$\begin{aligned}-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\Delta x^2} (\psi_{j-1,k}^R - 2\psi_{j,k}^R + \psi_{j+1,k}^R) + V\psi_{j,k}^R &= -\hbar \frac{1}{\Delta t} (-\psi_{j,k}^I + \psi_{j,k+1}^I) \\-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\Delta x^2} (\psi_{j-1,k}^I - 2\psi_{j,k}^I + \psi_{j+1,k}^I) + V\psi_{j,k}^I &= \hbar \frac{1}{\Delta t} (-\psi_{j,k}^R + \psi_{j,k+1}^R)\end{aligned}$$

El problema de evolución consiste en resolver para $\psi_{j,k+1}^R$ y $\psi_{j,k+1}^I$, despejando estos vectores de la ecuación tenemos lo siguiente:

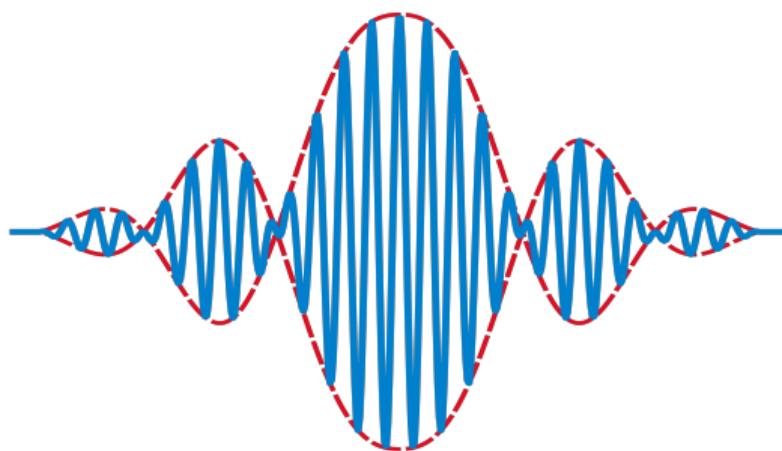
$$\psi_{j,k+1}^I = \frac{\hbar}{2m} \frac{\Delta t}{\Delta x^2} (\psi_{j-1,k}^R - 2\psi_{j,k}^R + \psi_{j+1,k}^R) - \frac{\Delta t}{\hbar} V_j \psi_{j,k}^R + \psi_{j,k}^I \quad (8)$$

$$\psi_{j,k+1}^R = -\frac{\hbar}{2m} \frac{\Delta t}{\Delta x^2} (\psi_{j-1,k}^I - 2\psi_{j,k}^I + \psi_{j+1,k}^I) + \frac{\Delta t}{\hbar} V_j \psi_{j,k}^I + \psi_{j,k}^R \quad (9)$$

Paquete de ondas

Un paquete de ondas es la superposición lineal de varias ondas que forman un pulso que se desplaza de manera compacta en el espacio.

En mecánica cuántica las soluciones reales e imaginarias de la ecuación de Schrödinger están representadas por ondas que superpuestas forman un paquete de ondas.



Paquete de ondas

Existen dos comportamientos básicos de los paquetes de ondas: dispersivo y no dispersivo.

No dispersivo

Estos paquetes se comportan como un pulso viajero normal que no cambia su amplitud. Las soluciones de la ecuación de onda en física clásica de la forma:

$$u(x, t) = A e^{i(kx - \omega t)} \quad (10)$$

La forma general de un paquete de ondas se puede expresar como:

$$u(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} A(k) e^{i(kx - \omega t)} dk \quad (11)$$

Paquete de ondas

Dispersivo

Las soluciones para la ecuación de Schrödinger se comportan como un paquete de ondas dispersivo, esto quiere decir que el ancho del paquete y su amplitud cambia a medida que el tiempo aumenta.

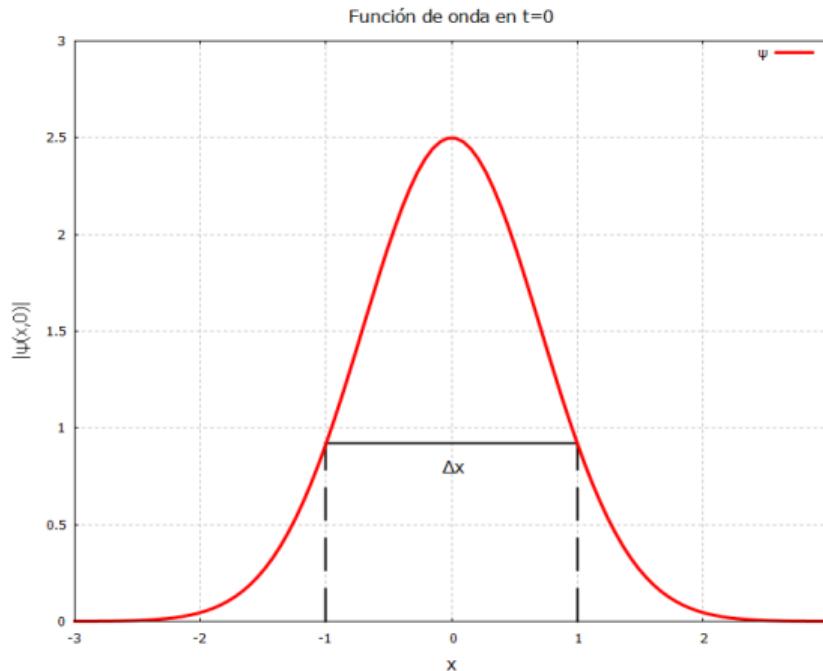
$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(k) e^{i(kx - \omega(k)t)} dk \quad (12)$$

Utilizando la transformada inversa de Fourier en $t=0$:

$$\Phi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x, 0) e^{-ikx} dx \quad (13)$$

Paquete de ondas

Tendremos que la norma de la función de onda independiente del tiempo dada que se comporta como una gaussiana.



Paquete de ondas

Se expande la variable $\omega(k)$ de la ecuación (12).

$$\omega(k) = \omega(k_0) + (k - k_0) \left[\frac{d\omega}{dk} \right]_{k_0} + \frac{1}{2}(k - k_0)^2 \left[\frac{d^2\omega}{dk^2} \right]_{k_0} + \dots \quad (14)$$

$$\frac{d\omega}{dk} = \frac{dE}{dp} = \frac{p}{m} = \frac{\hbar k}{m}; \quad \frac{d^2\omega}{dk^2} = \frac{\hbar}{m}$$

Entonces se tiene:

$$\exp[-i\omega(k)t] = \exp \left[\dots - \frac{i}{2}(k - k_0)^2 \frac{\hbar}{m} t \right] \quad (15)$$

Se determina una condición de dispersión con la siguiente forma:

$$(k - k_0)^2 \frac{\hbar}{m} t \ll 1 \quad (16)$$

Si se cumple la condición (17) no habrá dispersión apreciable.

Paquete de ondas

Recordando que $\Delta p = \Delta k \hbar$ la condición (16) también se puede escribir de las siguientes formas:

$$\frac{(\Delta p)^2 |t|}{\hbar m} \ll 1 \quad (17)$$

Utilizando la aproximación $\Delta x \Delta p \approx \hbar$ podemos escribir la condición (17) de las siguientes formas:

$$\frac{\Delta p |t|}{m} \ll \Delta x \quad (18)$$

$$|t| \ll \frac{(\Delta x)^2 m}{\hbar} \quad (19)$$

Paquete de ondas como una curva gaussiana

El paquete de ondas con el que se estará trabajando toma la forma de una curva gaussiana. La expresiones canónicas en las que se basa este proyecto son las siguientes:

$$\psi(x, 0) = A \exp \left[-\left(\frac{x - a}{2\sigma} \right)^2 \right] \cdot \exp [i\alpha(x, 0)] \quad (20)$$

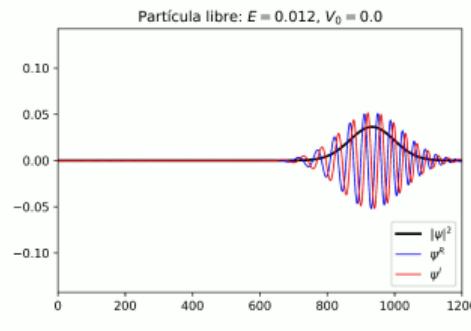
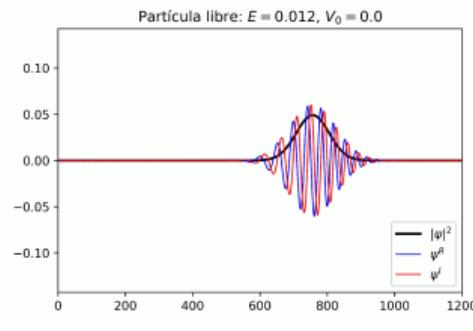
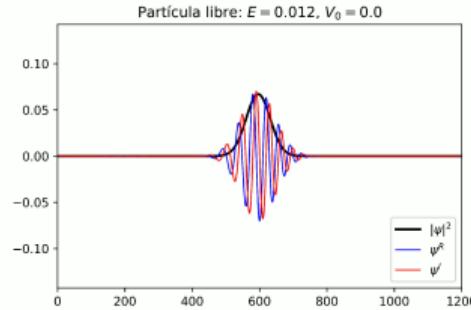
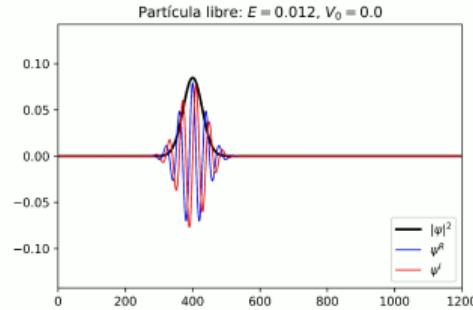
donde $\sigma = \sqrt{\langle x \rangle^2 - \langle x^2 \rangle}$. Para algún espacio con dimensiones convenientes tenemos que:

$$\psi^R(x, 0) = \exp \left[-\left(\frac{x - x_0}{2\sigma} \right)^2 \right] \cos(k_0 x) \quad (21)$$

$$\psi^I(x, 0) = \exp \left[-\left(\frac{x - x_0}{2\sigma} \right)^2 \right] \sin(k_0 x) \quad (22)$$

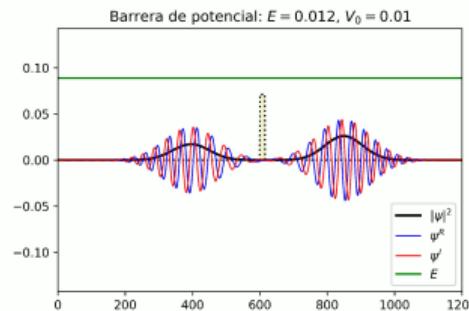
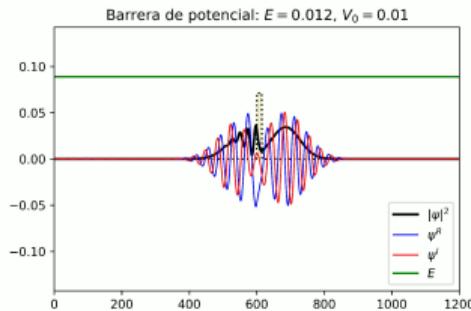
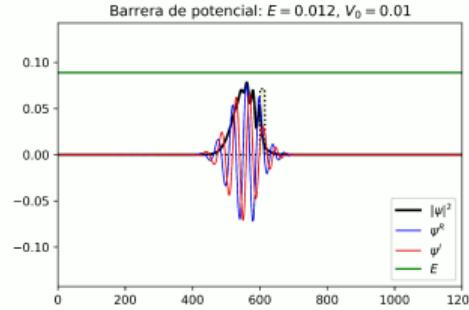
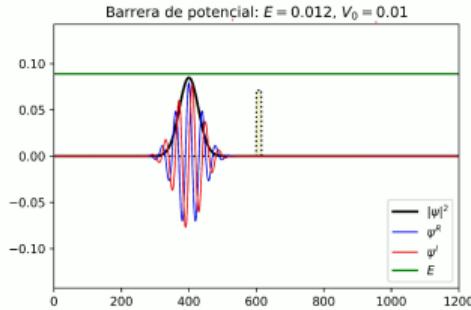
Partícula libre

Partícula moviéndose en un espacio con potencial nulo



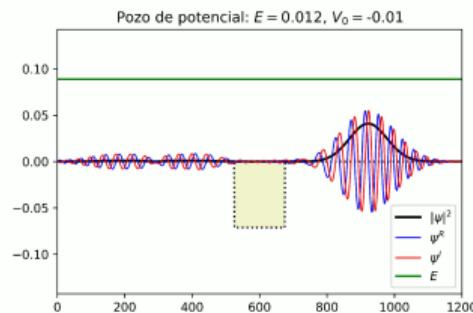
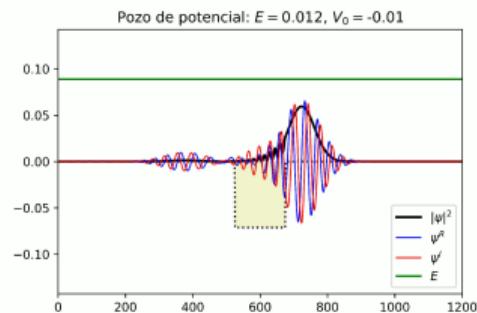
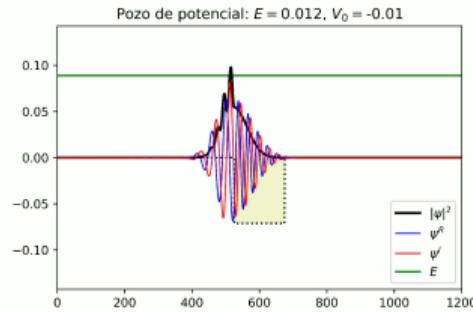
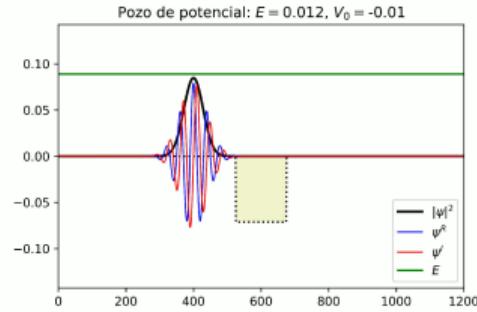
Barrera de potencial

Barrera de potencial delgada con $E > V_0$



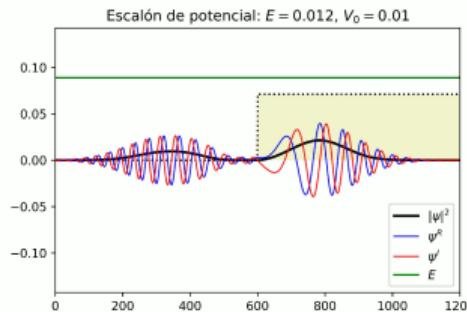
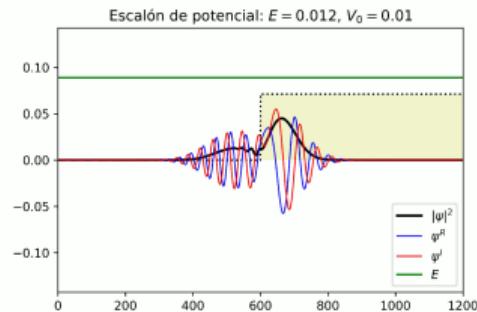
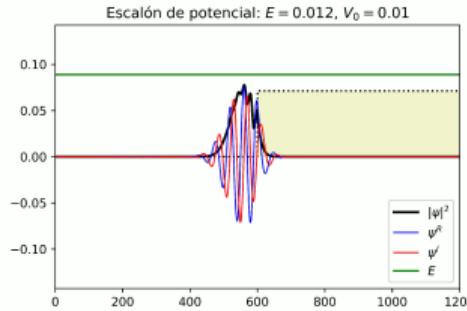
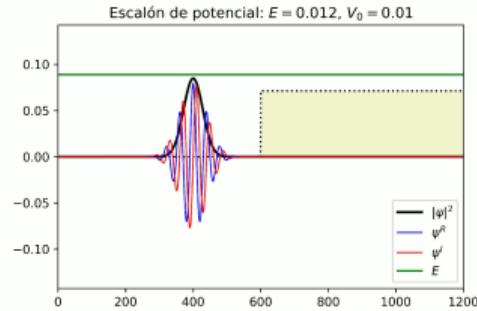
Pozo de potencial

Pozo de potencial amcho con $0 > V_0$ y $E > |V_0|$



Escalón de potencial

Escalón de potencial con $E > V_0$



Referencias

-  N. J. Giordano (1997)
Computational Physics
Prentice-Hall, ISBN:0233677230
-  P. J. Cooney, E. P. Kanter & Z. Vager (1981)
Convenient numerical technique for solving the one-dimensional Schrödinger equation for bound states
Am. J. Phys. 49(1).
-  J. R. Nagel (2008)
The One-Dimensional Finite-Difference Time-Domain (FDTD) Algorithm Applied to the Schrödinger Equation
University of Utah
-  Prof. B. Zwiebach (2016)
Quantum Physics I. Lecture 7: Wavepackets and Uncertainty, Wavepacket Shape Changes, Time Evolution of a Free Wave Packet
MIT OpenCourseWare

Fin