# Evolución temporal de paquete gaussiano

**Carlos Manuel Rodríguez Martínez**

## 1. Método numérico

A continuación se muestra un método numérico para calcular la evolución temporal de un paquete gaussiano. El código en Mathematica es una reimplementación del que se muestra en `http://jakevdp.github.io/blog/2012/09/05/quantum-python/`.

Para obtener la evolución temporal del paquete gaussiano se utilizará un método numérico. Partiendo de la ecuación de Schrödinger,

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

con la transformada de Fourier

$$\tilde{\psi}(k,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\psi(x,t)e^{ikx}\,dx,$$

se llega a la representación de la ecuación de Scrödinger en el espacio de Fourier

$$i\hbar\frac{\partial\tilde{\psi}}{\partial t} = \frac{\hbar^2k^2}{2m}\tilde{\psi} + V\left(i\frac{\partial}{\partial k}\right)\tilde{\psi}.$$

La aproximación consiste en resolver ambas ecuaciones para intervalos temporales pequeños sin considerar los términos que depende de la derivada de $x$ y $k$. Entonces queda

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = V(x)\psi$$

cuya solución es

$$\psi(x,t+\Delta t) = \psi(x,t)e^{-\frac{iV(x)\Delta t}{\hbar}},$$

y de la ecuación de Scrödinger en el espacio de Fourier

$$i\hbar\frac{\partial\tilde{\psi}}{\partial t} = \frac{\hbar^2k^2}{2m}\tilde{\psi},$$

cuya solución es

$$\tilde{\psi}(k,t+\Delta t) = \tilde{\psi}(k,t)e^{-\frac{i\hbar k^2\Delta t}{2m}}.$$

Para resolver el problema numéricamente conviene discretizarlo, de manera que se usará una transformada de Fourier discreta,

$$\widetilde{F_m} = \sum_{n=0}^{N-1}F_n e^{-2\pi inm/N},$$

y su inversa

$$F_n = \frac{1}{N}\sum_{m=0}^{N-1}\widetilde{F_m}e^{2\pi inm/N}.$$

Para llegar a esta forma discreta primero se hará la consideración de que el potencial tiende a infinito para los valores $x \leq a$ y $x \geq b$. Entonces

$$\widetilde{\psi}(k,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_a^b\psi(x,t)e^{-ikx}dx.$$

Al aproximar la integral por una suma de Riemman de $N$ términos, con $\Delta x = (b-a)/N$ y $x_n = a + n\Delta x$ queda

$$\widetilde{\psi}(k,t) \simeq \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n=0}^{N-1} \psi(x_n,t) e^{-ikx_n} \Delta x.$$

Por último se hace $k_m = k_0 + m\Delta k$, con $\Delta k = 2\pi/(N\Delta x)$, y queda

$$\widetilde{\psi}(k_m,t) \simeq \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n=0}^{N-1} \psi(x_n,t) e^{-ik_m x_n} \Delta x.$$

Sustituyendo esto en la expresión para la transformada de Fourier discreta se llega a

$$\left[\widetilde{\psi}(k_m,t) e^{imx_0\Delta k}\right] \simeq \sum_{n=0}^{N-1} \left[\frac{\Delta x}{\sqrt{2\pi}} \psi(x_n,t) e^{-ik_0 x_n}\right] e^{-2\pi imn/N}$$

y para la transformada de Fourier inversa

$$\left[\frac{\Delta x}{\sqrt{2\pi}} \psi(x_n,t) e^{-ik_0 x_n}\right] \simeq \frac{1}{N} \sum_{m=0}^{N-1} \left[\widetilde{\psi}(k_m,t) e^{-imx_0\Delta k}\right] e^{2\pi imn/N}.$$

Este resultado nos indica que el par

$$\psi(x,t) \Longleftrightarrow \widetilde{\psi}(k,t)$$

en el caso continuo corresponde al par

$$\frac{\Delta x}{\sqrt{2\pi}} \psi(x_n,t) e^{-ik_0 x_n} \Longleftrightarrow \widetilde{\psi}(k_m,t) e^{-imx_0\Delta k}$$

en el caso discreto con las aproximaciones. Con esto se puede construir un algoritmo para evaluar la evolución temporal de la función de onda.

1. Se escogen $a$, $b$, $N$ y $k_0$ suficientes para representar el estado inicial de la función de onda $\psi(x)$. Con esto se puede calcular $\Delta x = (b-a)/N$ y $\Delta k = 2\pi/(b-a)$. Se definen también los arrays $x_n = a + n\Delta x$ y $k_m = k_0 + m\Delta k$.

2. Se discretiza la función de onda en el array. Sea $\psi_n(t) = \psi(x_n,t)$, $V_n = V(x_n)$, y $\widetilde{\psi}_m = \widetilde{\psi}(k_m,t)$.

3. Para avanzar el sistema en intervalo temporal $\Delta t$ se hace lo siguiente. Se computa un medio paso en $x$,
$$\psi_n \longleftarrow \psi_n \exp[-i(\Delta t/2)(V_n/\hbar)]$$

4. Se calcula $\widetilde{\psi}_m$ de $\psi_n$ usando la transformada de Fourier discreta.

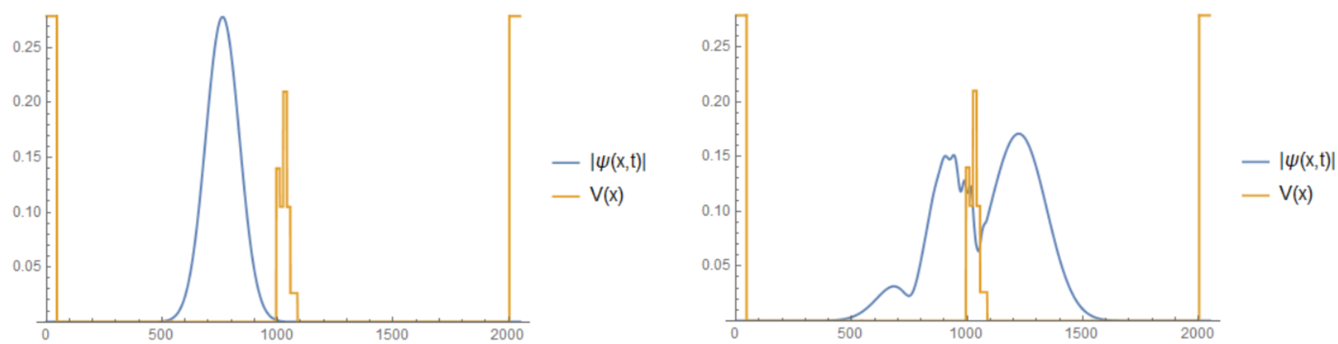
5. Se computa un paso completo en $k$,
$$\widetilde{\psi}_m \longleftarrow \widetilde{\psi}_m \exp[-i\hbar(k\cdot k)\Delta t/(2m)].$$

6. Se calcula $\psi_n$ de $\widetilde{\psi}_m$ usando la transformada de Fourier discreta inversa.

7. Se computa un segundo medio paso en $x$,
$$\psi_n \longleftarrow \psi_n \exp[-i(\Delta t/2)(V_n/\hbar)]$$

8. Se repite desde el paso 3 hasta que se avance al tiempo deseado.

Las gráficas que se generan son




(a) $t = 10$.

(b) $t = 100$.

Figura 1: Gráficas de la evolución temporal.