

Cálculo numérico de funciones de onda para pozos de potencial y oscilador armónico

Esteban Marulanda Ardila, Carlos Andrés Granada Palacio
*Instituto de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad
de Antioquia UdeA, Calle 70 No. 52-21, Medellín, Colombia.*

3 de diciembre de 2020

Resumen

Utilizando el método de diferencias finitas se ha transformado la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo en un problema de valores y vectores propios matricial y de esta forma, con un programa de Python basado en objetos, el cual implementa lo anterior, se han encontrado los gráficos de las auto funciones, de sus densidades de probabilidad y se ha animado su evolución temporal de estas para tres sistemas cuánticos (esta última aparece en el repositorio anexo [2]), a saber, el pozo finito de potencial, el pozo infinito y el oscilador armónico, todo lo anterior se ha realizado con métodos pertenecientes a una misma clase.

Planteamiento del Problema

Las autofunciones del Hamiltoniano de un sistema cuántico son denotadas como $\phi_n(x)$ con una energía E_n . Estas autofunciones y sus respectivas energías quedan determinadas por el siguiente problema de valores y vectores propios cuando el operador H tiene un espectro discreto:

$$H|\phi_n\rangle = E_n|\phi_n\rangle$$

En donde el operador H en la representación de posiciones tiene la forma de [1]:

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)$$

Que se denomina como operador Hamiltoniano y es la suma del operador energía cinética con el operador energía potencia. Cuando H , E_n , $|\phi_n\rangle$ no dependen explícitamente del tiempo, la evolución del ket de estado del sistema, el cual está determinada por [1]:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n C_n e^{\frac{-iE_n t}{\hbar}} |\phi_n\rangle$$

Este ket de estado tiene como interpretación de manera implícita la probabilidad de medir diferentes cantidades físicas. En particular, cuando consideramos la base del espacio de estados determinada por las autofunciones del operador Hamiltoniano y estas forman un conjunto numerable de autovectores no degenerados, la probabilidad de realizar una medida de la energía en el sistema y obtener E_n es:

$$P(a_n) = |\langle u_n | \psi \rangle|^2$$

De manera más general se puede determinar la probabilidad de obtener un cierto valor posible de cualquier otro observable físico de una manera análoga [1].

¡Vale la pena observar como la posibilidad de tener un espectro discreto de autovalores del Hamiltoniano nos dice que algunos sistemas físicos no pueden tener cualquier energía entre un valor máximo y mínimo, sino que entre dos posibles valores de energía realmente hay un salto!.

En nuestro caso particular, el problema que nos interesa, que es denominado pozo finito de potencial está determinado por la función energía potencial:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & |x| < a/2 \\ V_0 & |x| > a/2 \end{cases}$$

Luego, para un tratamiento analítico se debe optar por separar la ecuación en las dos regiones definidas por el potencial y resolver la ecuación diferencial teniendo en cuenta como condiciones de frontera que la función de onda debe ser continua y con derivada continua en estos casos donde el potencial es finito.

Para el caso del oscilador armónico cuántico, se considera un potencial de tipo $V(x) = \frac{m\omega^2}{2}x^2$. En la solución analítica están involucrados los polinomios de Hermite. Aquí optaremos por una solución numérica.

Solución Computacional y Algoritmo

La idea en la cual nos basamos para encontrar las autofunciones de los diferentes sistemas cuánticos que se han analizado consiste en utilizar el método de diferencias finitas para convertir la ecuación de Schrödinger en una ecuación de valores y vectores propios matricial, con el fin de realizar calculos computacionales.

La pregunta por el cambio a una ecuación de autovalores matricial no es conceptualmente trivial y realmente requiere del uso de aproximaciones. Uno podría pensar que como d/dx es un operador lineal debe tener una matriz asociada y de esta manera podemos pasar la ecuación a una forma matricial, sin embargo, para encontrar esta matriz necesitaríamos primero una base, y el problema es que el espacio de estados en el cual estamos interesados resulta ser de dimensión infinita, lo cual imposibilita pensarlo de esta manera.

Sin embargo resulta muy útil considerar el siguiente razonamiento. Primero, suponiendo que la función de onda es una función que tiene tercera derivada en un intervalo cerrado E teniendo a x como un extremo, entonces podemos usar la formula de Taylor local [3], o tambien llamada fórmula de Taylor infinitesimal, para escribir (acá usaremos el

simbolo g nerico f , para denotar la funci n de onda, porque es un procedimiento que en general aplica para cualquier funci n que satisfaga las hip tesis anteriores):

$$f(x+h) = f(x) + \frac{f'(x)}{1!}h + \frac{f''(x)}{2!}h^2 + \frac{f'''(x)}{3!}h^3 + o(h^3); \quad h \rightarrow 0, \quad x+h \in E$$

Donde $o(h)$, $h \rightarrow 0$ es una funci n infinitesimal en el l mite de h tendiendo a cero, para cada x . Podemos escribir entonces:

$$f(x-h) = f(x) - \frac{f'(x)}{1!}h + \frac{f''(x)}{2!}h^2 - \frac{f'''(x)}{3!}h^3 + o(h^3); \quad h \rightarrow 0, \quad x-h \in E$$

$$\Rightarrow f''(x) = \frac{1}{h^2}[f(x+h) + f(x-h) - 2f(x)] + o(h); \quad h \rightarrow 0, \quad x+h \in E$$

Lo anterior constituye as , para $h \ll 1$, la siguiente aproximaci n:

$$f''(x) \approx \frac{1}{h^2}[f(x+h) + f(x-h) - 2f(x)] \quad (1)$$

Luego, la idea ser  escribir la ecuaci n de Schr dinger en forma matricial discretizando el espacio, esto quiere decir, si vamos a resolver la ecuaci n en el intervalo $[-a, a]$, los elementos de este intervalo los escribiremos como $\{-a, -a+h, -a+2h, -a+3h, \dots, 0, \dots, a-2h, a-h, a\}$ tomando h como paso, podemos considerar vectores con entradas:

$$\begin{aligned} f(-a+ih) &= f_i, \quad f(-a+(i+1)h) = f_{i+1}, \quad \dots, \quad f(a) = f_N \\ f''(-a+ih) &= f''_i, \quad f''(-a+(i+1)h) = f''_{i+1}, \quad \dots, \quad f''(a) = f''_N \end{aligned}$$

En efecto, N queda determinado por la longitud del paso y la ecuaci n (1) adquiere un aspecto matricial:

$$\left[\frac{d^2 f(x)}{dx^2} \right] = \begin{pmatrix} f''_0 \\ f''_1 \\ f''_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ f''_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & \cdot & \cdot & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & \cdot & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & \cdot & 0 \\ \cdot & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 1 \\ 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 1 & -2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_0 \\ f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ f_N \end{pmatrix} = \left[\frac{d^2}{dx^2} \right] [f(x)]$$

Por otro lado, el potencial adquiere la siguiente forma, pensando en el resultado despu s de multiplicar por el vector asociado a la funci n de onda:

$$[V(x)] = \begin{pmatrix} V_0 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ 0 & V_1 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ 0 & 0 & V_2 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ \cdot & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & V_N \end{pmatrix}$$

De esta manera la ecuaci n de Schr dinger queda transformada en un problema de valores y vectores propios matricial:

$$[H(x)][f(x)] = \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \left[\frac{d^2}{dx^2} \right] + [V(x)] \right) [f(x)] = E[f(x)]$$

Ahora, solo hace falta dar una forma para el potencial y podemos resolver el problema de valores propios usando alguna librería de Python como linalg.

En cuanto al código en si que utilizamos, nuestro enfoque fue de programación basada en objetos, entonces creamos una clase en python con el nombre de 'WaveFunction'. La clase tiene 6 módulos los cuales ayudan a solucionar el problema. Los objetos se inicializan con 4 parámetros los cuales son el potencial del problema, el dominio de la función de onda y la masa de la partícula. Con estos se crean 9 atributos que serán utilizados en los módulos, entre estos estan: self.domin, self.m, self.potential, self.h, self.Mdd, self.H, self.E, self.psiS, self.psi. Respectivamente cada atributo se encarga de: definir el dominio, crear la masa, definir el potencial en el dominio dado, el paso de integración, la matriz de segunda derivada, el Hamiltoniano, los autovalores (energías), autovectores y la matriz con autovectores transpuesta.

De la libreria 'numpy', se ha utilizado la función np.diag(), para la construcción de la matriz de segundas derivadas (self.Mdd) y potencial (self.potential). El hamiltoniano se construye como se explico anteriormente con estos dos ultimos atributos. Además, se ha utilizado la librería 'scipy.linalg', esta tiene una función llamada 'linalg.eigh' la cuál recibe como argumento una matriz y retorna autovalores y autovectores para solucionar la ecuación de valores y vectores propios. En nuestro caso a esta función se da como argumento el Hamiltoniano (self.H) y esta retornara las energías (self.E) y las funciones de onda (self.psiS), donde como se menciono self.psi es la transpuesta de self.psiS.

Para los gráficos se han creado diferentes métodos, el método 'solution' recibe por argumentos el entero n que indica el número de auto funciones a graficar y el parámetro b que limita el gráfico al intervalo en el eje x $(-b, b)$. Esta función esta basada en los atributos ya definidos, self.domin y self.psi. y retornara entonces, el gráfico de las primeras n auto funciones. Por otro lado esta el método 'Density' recibe por argumentos los mismos que 'solution', solo que en este caso retornara las primeras n densidades de probabilidad asociadas a las primeras n autofunciones. El metodo '*Density_CT*' recibe como argumentos un valor para el tiempo t_0 y el parámetro b que limita el gráfico al intervalo en el eje x $(-b, b)$, este método devuelve el gráfico de la siguiente ecuación.

$$\psi(x, t) = \sum_{n=0}^3 c_n \psi_n e^{-\frac{i E_n t}{\hbar}} \quad (2)$$

El cual usa los atributos definidos en el constructor para hallar las energías y auto funciones correspondientes a cada estado. Con el fin de visualizar como es la evolución temporal de (2) se ha creado otro método que realiza una animación utilizando la librería 'matplotlib.animation', el metodo retorna un archivo '.gif'. Finalmente, se ha creado un método que permitira de igual manera visualizar la evolución temporal del modulo cuadrado de (2), este método funciona igual al método anterior.

Resultados

Para el pozo finito se ha creado una función que contiene toda la información del pozo, esto es, tiene una altura de 6 fuera del intervalo $(-3,3)$, y en este intervalo tiene un valor de 0. Se han elegido como parámetros la masa igual a 1 y por simplicidad la constante de Planck igual a 1. Por otro lado se ha elegido como dominio el intervalo $(-100,100)$.

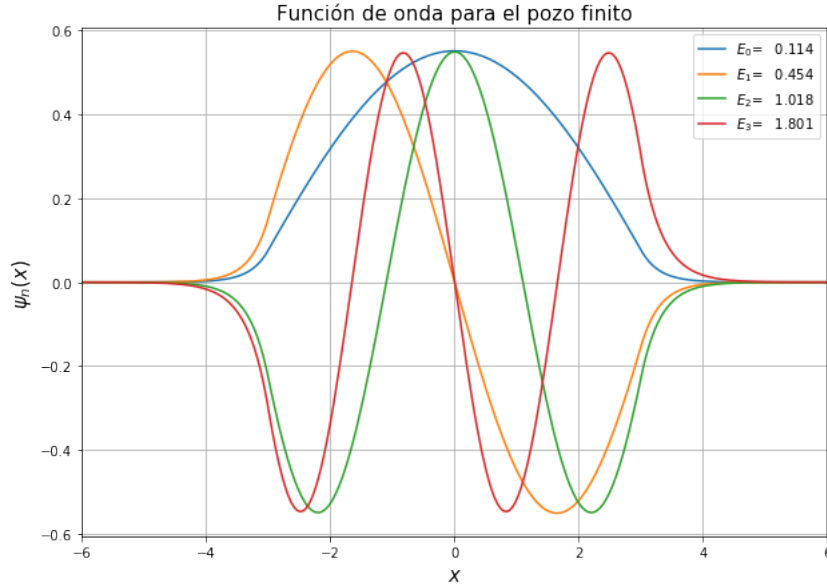


Figura 1: Primeras 4 auto funciones con sus respectivas energías para el pozo finito

En las primeras 4 figuras anexas se encuentra gráficos correspondientes a los diferentes métodos ya descritos de la clase.

Para el pozo infinito se ha construido una función que contiene un array de ceros en el intervalo $(-10,10)$, luego se crea un objeto con esta función y se utilizan los métodos. Los resultados obtenidos para este sistema cuántico son los gráficos anexados del 5 al 8.

Finalmente para el oscilador armónico se ha elegido el potencial $V(z) = (1/2)z^2$, se ha construido una función que contiene este potencial, se crea una array con valores en el intervalo $(-10,10)$, luego se crea un objeto con esta función y se utilizan los métodos. Los resultados obtenidos para este sistema cuántico son los gráficos anexados del 9 al 12. Para los 3 casos debido a la ligadura en la función de onda se deben elegir coeficientes c_n correspondientes a (2) que satisfagan la ecuación:

$$1 = \sum_{n=0}^3 |c_n|^2$$

De esta manera se han elegido los coeficientes $c_n = 0,5$ en los tres sistemas cuánticos. A continuación se presentan los resultados anteriormente descritos, teniendo en cuenta que las unidades utilizadas son arbitrarias. Es de señalarse en los resultados, que para el oscilador armonico los autovalores de energía corresponden con los de la conocida

ecuación para oscilador armonico cuántico:

$$E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$$

Donde hemos tomado como $\hbar = 1$ y $\omega = 1$. Similarmente las energias del pozo infinito coinciden con los de la literatura [1]



Figura 2: Primeras 4 densidades de probabilidad para el pozo finito

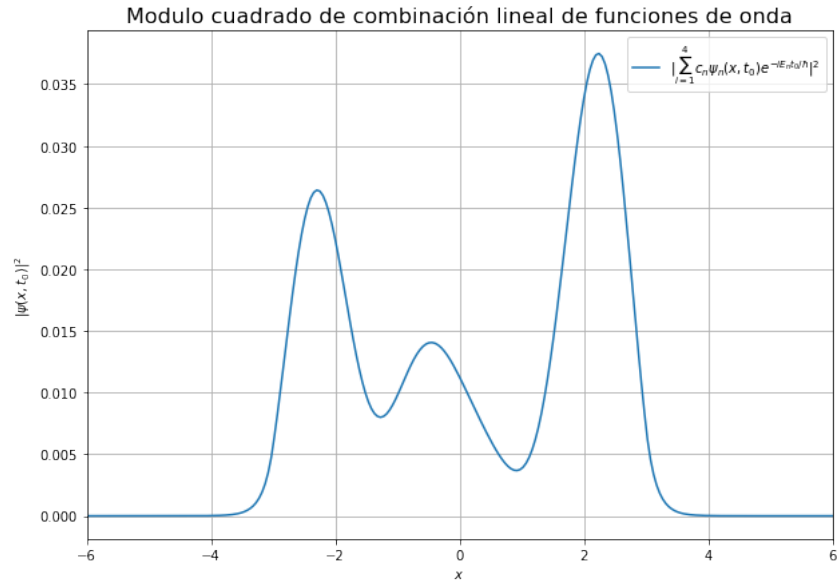


Figura 3: Densidad de probabilidad de la combinación lineal para $c_n = 0,5$ en $t=2s$ para pozo finito

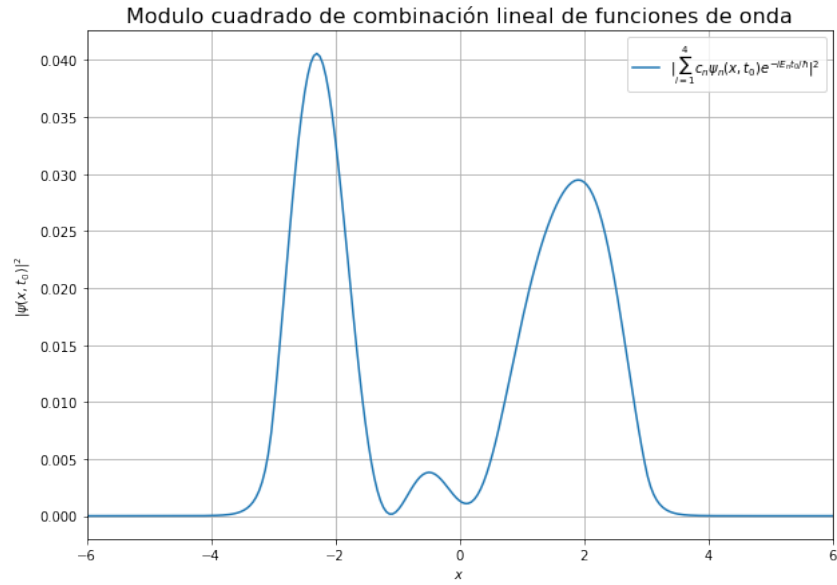


Figura 4: Densidad de probabilidad de la combinación lineal para $c_n = 0,5$ en $t=3s$ para el pozo finito

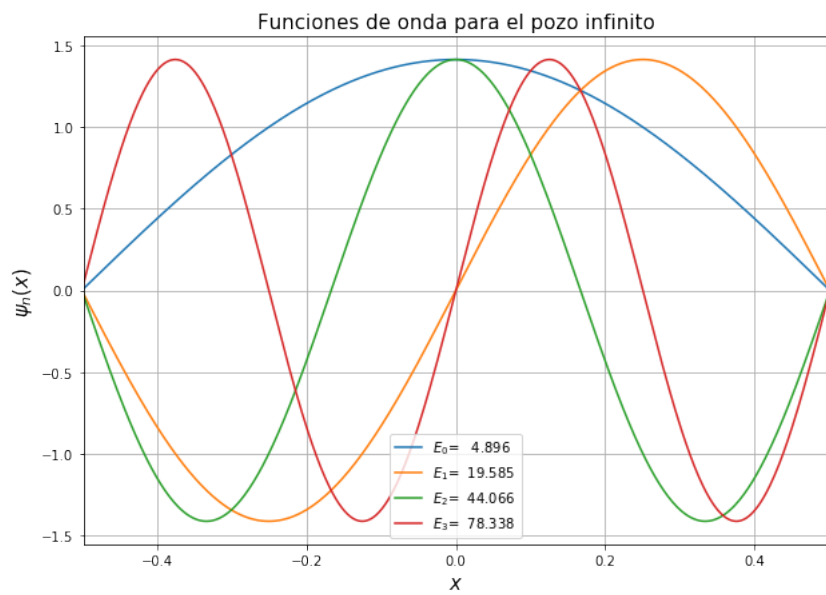


Figura 5: Primeras 4 autofunciones con sus respectivas energías para el pozo infinito



Figura 6: Primeras 4 densidades de probabilidad para el pozo infinito

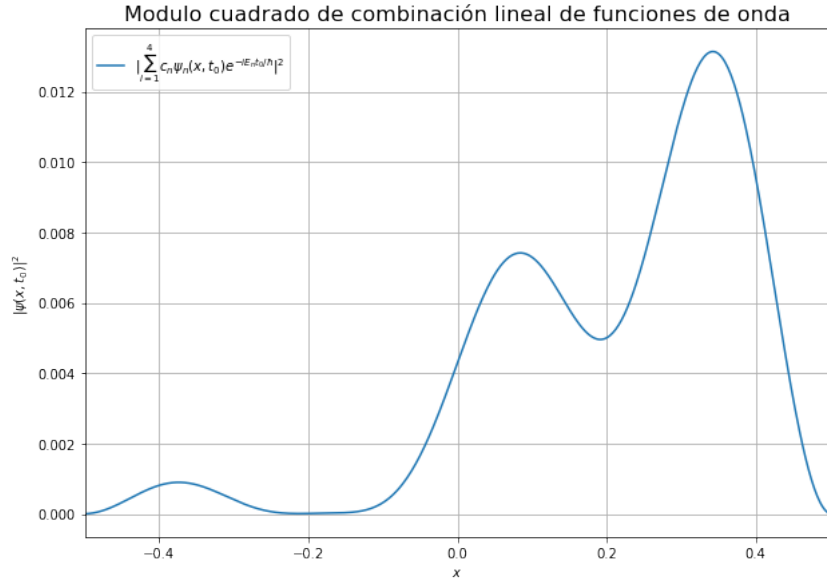


Figura 7: Densidad de probabilidad de la combinación lineal para $c_n = 0,5$ en $t=2s$ para el pozo infinito

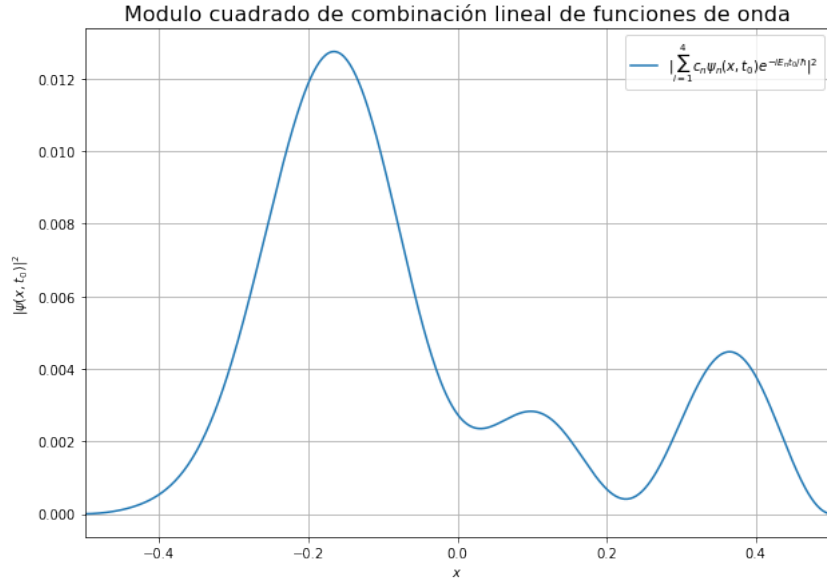


Figura 8: Densidad de probabilidad de la combinación lineal para $c_n = 0,5$ en $t=3s$ para el pozo infinito

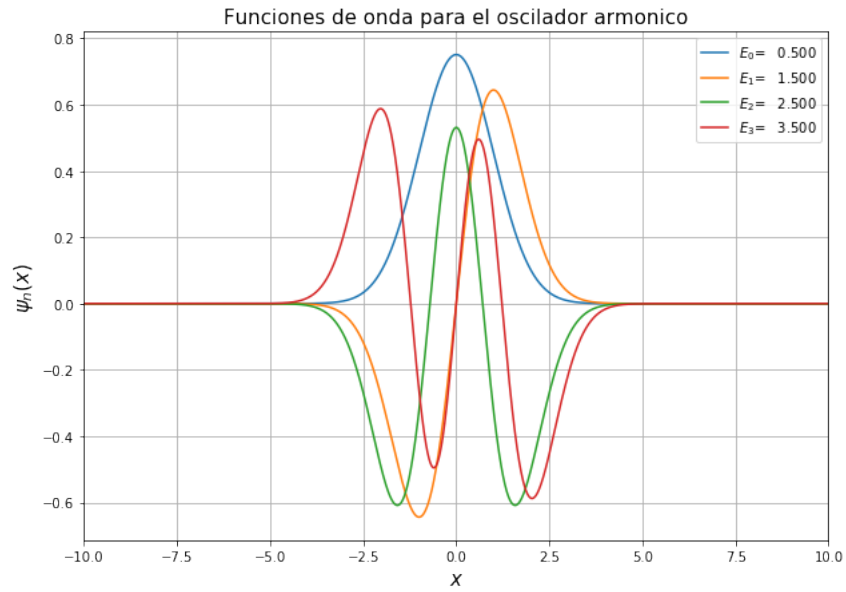


Figura 9: Primeras 4 autofunciones con sus respectivas energías para el oscilador armónico

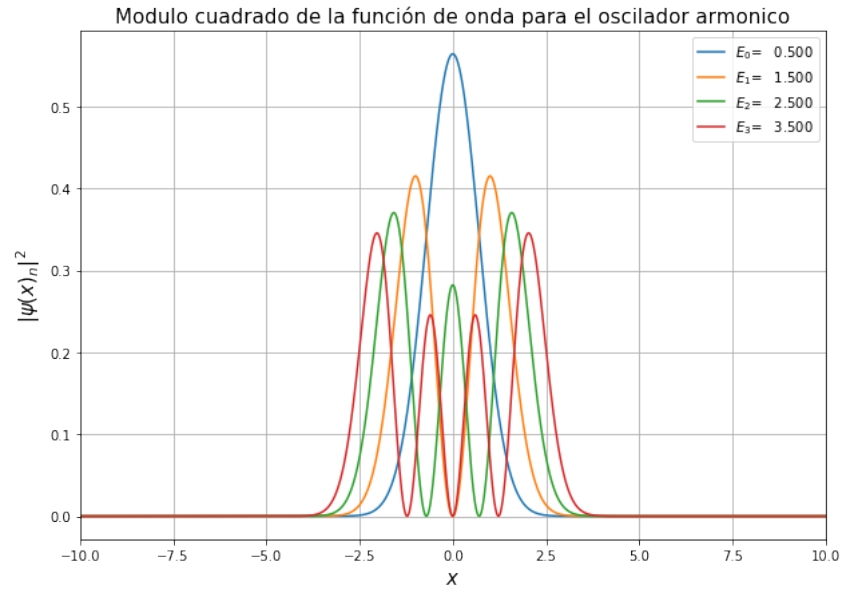


Figura 10: Primeras 4 densidades de probabilidad para el oscilador armónico

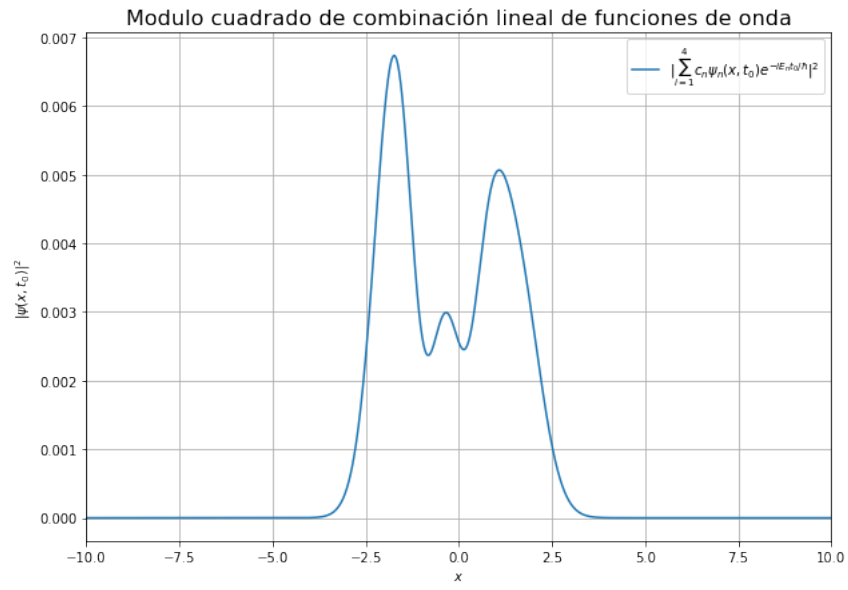


Figura 11: Densidad de probabilidad de la combinación lineal para $c_n = 0,5$ en $t=2s$ para el oscilador armónico

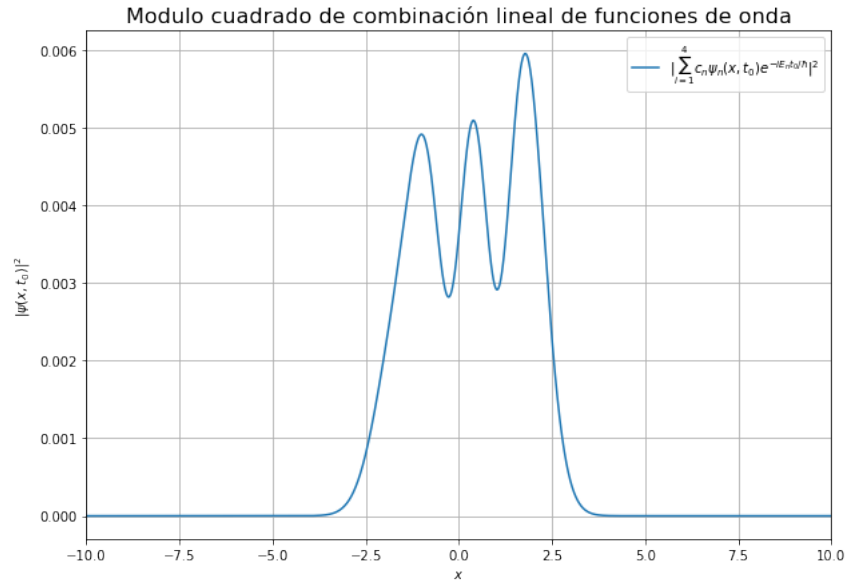


Figura 12: Densidad de probabilidad de la combinación lineal para $c_n = 0,5$ en $t=2s$ para el oscilador armónico

Referencias

- [1] Cohen-Tannoudji. *Quantum Mechanics, Vol. 1*. Textbook Physics. Wiley, 1977. ISBN: 2-7056-5833-5.
- [2] Carlos Granada - Esteban Marulanda. URL: <https://github.com/EstebanM%E2%88%929298/TareasEstebanMarulandaArdila/blob/master/Proyecto/QM.ipynb>.
- [3] V.A. Zorich. *Mathematical Analysis I*. Universitext. Springer, 2015. ISBN: 978-3-662-48790-7.