DRAFT VERSION SEPTEMBER 14, 2022
Typeset using LATEX default style in AASTeX631

Demonstração Schrodinger-Crank-Nicolson

GABRIEL SIQUEIRA[1]

[1] *Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais*

1. INTRODUÇÃO

Utilizado para simplificar equações diferenciais parciais, nesse caso a equação de Schrodinger:

$$i \cdot \hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x,t)\psi(x,t) \tag{1}$$

Na análise numérica, o método de Crank-Nicolson mostra que a derivada parcial pode ser aproximada por uma secante, portanto é possível estabelecer uma diferença conforme visto na definição de derivada sem a utilidade do limite (dessa forma a variação do denominador não será nula o suficiente para termos uma tangente).

$$\frac{\psi_i^{n+1} - \psi_i^n}{\Delta t} \tag{2}$$

Mas como alcançar a equação (2)?

2. O MÉTODO DAS DIFERENÇAS FINITAS

Utilizado para resolver problemas com valor inicial ou problemas de contorno para EDO e EDP, usaremos para lidar com a EDP da equação 1. Como são EDP's podemos dizer que a nossa variável independente da equação é x e a tarefa é discretizá-la (Dividir em subdomínios). Para um domínio semi-infinito os subdomínios podem ser representados como, 0, 1, 2, ..., i - 1, i, i + 1.

O próximo passo é gerar as aproximações para obter $\dot{\psi}_i$ e $\ddot{\psi}_i$ nos pontos discretos x_i utilizando ψ. Após a aproximação, aplica-se a EDP gerando sistemas de equações álgebra na forma: f(ψ_i)=0, tal f é o vetor das equações álgebricas que depende de valores de ψ_i. De fato, a aplicação do método da discretizaçção se resolve localmente, em cada x_i e o seu resultado é um conjunto enumerável.

3. APROXIMAÇÃO DE DERIVADAS

Como as diferenças finitas são usadas para resolver equações diferenciais, podemos expandir em série de Taylor em torno de um dado ponto. Então seja $\psi(x_{i+1}) = \psi_{i+1}$, então o valor de ψ_{i+1} pode ser definido como:

$$\psi_{i+1} = \psi_i + \dot{\psi}_i(x_{i+1} - x_i) + \ddot{\psi}_i\frac{(x_{i+1} - x_i)^2}{2} + ... \tag{3}$$

Enquanto que, para $\psi(x_{i-1}) = \psi_{i-1}$

$$\psi_{i-1} = \psi_i - \dot{\psi}_i(x_i - x_{i-1}) + \ddot{\psi}_i\frac{(x_{i-1} - x_i)^2}{2} + ... \tag{4}$$

4. COMPRIMENTO DO DOMÍNIO

$$h_i = x_i - x_{i-1} \tag{5}$$

A equação se torna mais comapcta e melhor para demonstrar. Com o objetivo de isolar a primeira derivada e limitar as superiores podemos:

$$h_i^2\psi_{i+1} - h_{i+1}^2\psi_{i-1} = (h_i^2 - h_{i+1}^2)\psi_i + (h_i^2 h_{i+1} + h_i h_{i+1}^2)\dot{\psi}_i + \ddot{\psi}_i(h_i^2 h_{i+1}^2 - h_{i+1}^2 h_i^2) + ... \tag{6}$$

Com essa subtração, o termo de segundo grau sumirá, e isso é importante, visto que há um solução para ele. Isolando a primeira derivada obtemos:

$$\dot{\psi}_i = \frac{h_i^2\psi_{i+1} + (h_{i+1}^2 - h_i^2)\psi_i - h_{i+1}^2\psi_{i-1}}{h_i^2 h_{i+1} + h_i h_{i+1}^2} + O\left(\frac{}{h_i^2 h_{i+1} + h_i h_{i+1}^2}\right) \tag{7}$$

E O indica as outras séries que quando seu valor tende a 0 significa que teremos uma derivada exata. Chamamos isso de erro de truncamento. Para a nossa aproximação ignoraremos o erro de truncamento.

5. MALHA UNIFORME

Em uma malha uniforme a diferença no domínio em i, dada por h é a mesma, ou seja:

$$h_i = h, \forall i \tag{8}$$

Portanto:

$$\dot{\psi}_i = \frac{h^2\psi_{i+1} + (h^2 - h^2)\psi_i - h^2\psi_{i-1}}{h^2 h + h h^2} = \frac{\psi_{i+1} - \psi_{i-1}}{2h}$$

E essa é a diferença central da primeira derivada. Como é uma malha uniforme, a diferença é a mesma:

$$\frac{\psi_{i+1} - \psi_i}{h} = \frac{\psi_i - \psi_{i-1}}{h} \tag{9}$$

O próximo passo é obter para a segunda derivada sumindo com a primeira derivada. Assim h_i multiplica ψ_{i+1}, h_{i+1}, ψ_{i-1}.

$$h_i\psi_{i+1} - h_{i+1}\psi_{i-1} = (h_i - h_{i+1})\psi_i + (h_i h_{i+1} + h_i h_{i+1})\dot{\psi}_i + \ddot{\psi}_i(h_i h_{i+1}^2 + h_{i+1} h_i^2) + ... \tag{10}$$

Isolando o $\ddot{\psi}_i$:

$$\ddot{\psi}_i = \frac{h_i\psi_{i+1} - (h_{i+1} + h_i)\psi_i + h_{i+1}\psi_{i-1}}{\frac{h_{i+1}^2 h_i + h_{i+1} h_i^2}{2}} + O\left(\frac{}{\frac{h_{i+1}^2 h_i + h_{i+1} h_i^2}{2}}\right) \tag{11}$$

Portanto, tendendo $z \to 0$ e $h_i = h$, obtemos:

$$\ddot{\psi}_i = \frac{\psi_{i+1} - 2\psi_i + \psi_{i-1}}{h^2} \tag{12}$$

6. ALÉM DO IMPLÍCITO E EXPLÍCITO

Crank-Nicolson é justamente um método para segundo grau no tempo e espaço. Provadamente estável então é uma ótima aproximação para a tarefa.

$$f_{i+1/2} = \frac{1}{2}(f_i + f_{i+1})$$

$$f_{i+1/2} = 1/2(f(t_i, y_i) + f(t_{i+1}, y_{i+1}))$$

Em (11) obtemos o caso para a segunda derivada então basta substituir, supondo que f seja a segunda derivada de uma função. Então para Crank-Nicolson a segunda derivada equivale à:

$$\frac{1}{2} \cdot \frac{y_{i+1}^t - 2y_i^t + y_{i-1}^t + y_{i+1}^{t+1} - 2y_i^{t+1} + y_{i-1}^{t+1}}{h^2} \tag{13}$$

Então a variação no tempo existe para um espaço homogêneo.

7. REPRESENTAÇÃO ALGÉBRICA

Dada a equação 1 deste trabalho, podemos reintrepretá-la como:

$$\frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = \frac{\psi_i^{n+1} - \psi_i^n}{\Delta t} \tag{14}$$

$$\frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} = \frac{1}{2\Delta x^2}[(\psi_{i+1}^{n+1} - 2\psi_i^{n+1} + \psi_{i-1}^{n+1}) + (\psi_{i+1}^n - 2\psi_i^n + \psi_{i-1}^n)] \tag{15}$$

$$V(x,t)\psi(x,t) = 1/2[V_i^{n+1}\psi_i^{n+1} + V_i^n \psi_i^n] \tag{16}$$

$$\frac{i\hbar}{\Delta t}[\psi_i^{n+1} - \psi_i^n] = \frac{-\hbar^2}{4m\Delta x^2}[(\psi_{i+1}^{n+1} - 2\psi_i^{n+1} + \psi_{i-1}^{n+1}) + (\psi_{i+1}^n - 2\psi_i^n + \psi_{i-1}^n)] + \frac{1}{2}[V_i^{n+1}\psi_i^{n+1} + V_i^n \psi_i^n] \tag{17}$$

Para fins de simplificação utilizaremos $a = \frac{-\hbar^2}{4m\Delta x^2}$, dessa forma:

$$\frac{i\hbar}{\Delta t}\psi_i^{n+1} - 2a\psi_i^{n+1} - \frac{1}{2}V_i^{n+1}\psi_i^{n+1} = \frac{i\hbar}{\Delta t}\psi_i^n - 2a\psi_i^n - \frac{1}{2}V_i^n\psi_i^n - a\psi_{i+1}^{n+1} - a\psi_{i-1}^{n+1} - a\psi_{i+1}^n - a\psi_{i-1}^n$$

E para melhorar a solução podemos observar a evidência de ψ_i^n e ψ_i^{n+1} e destacar que:

$$b_i = \frac{i\hbar}{\Delta t} - 2a - 1/2V_i^{n+1} \tag{18}$$

$$c_i = \frac{i\hbar}{\Delta t} + 2a + 1/2V_i^n \tag{19}$$

$$a\psi_{i+1}^{n+1} + b_i\psi_i^{n+1} + a\psi_{i-1}^{n+1} = -a\psi_{i+1}^n + c_i\psi_i^{n+1} - a\psi_{i-1}^n \tag{20}$$

Assim obtemos quatro matrizes capazes de estabelecer uma relação, mesmo que incompleta, $A\psi_i^{k+1} = B\psi_i^k$, onde:

$$A\psi^{k+1} = \begin{bmatrix} b_1 & a & 0 & & 0 & 0 \\ a & b_2 & a & 0 & & \\ 0 & a & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & & & \ddots & \ddots & a \\ 0 & 0 & & -0 & a & b_M \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \psi_0^{k+1} \\ \psi_1^{k+1} \\ \vdots \\ \psi_M^{k+1} \end{pmatrix} \tag{21}$$

$$B\psi^k = \begin{bmatrix} c_1 & -a & 0 & & 0 & 0 \\ -a & c_2 & -a & 0 & & \\ 0 & -a & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & & & \ddots & \ddots & -a \\ 0 & 0 & & -0 & -a & c_M \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \psi_0^k \\ \psi_1^k \\ \vdots \\ \psi_M^k \end{pmatrix} \tag{22}$$

7.1. *Uma solução incompleta*

Como a solução é válida para qualquer potencial, analisaremos para o caso do poço infinito com certas condições de contorno. Pense no poço quadrado infinito com as seguintes condições de contorno:

$$\psi(0,t) = 0, \psi(1,t) = u(t)$$

Para a = 1 e u(t) = 0, obtemos uma densidade de onda com valor 1, no entanto, se u(t) não for igual a 0 essa possibilidade não é certa de ocorrer e para verificar que tipos de soluções são ideais para $u(t) \neq 0$ devemos recorrer a equação de Schrodinger com o sistema estacionário dessa forma estabelecendo:

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x) = E(x)\psi(x) \tag{23}$$

Suponha: Considere que o estado fundamental da energia seja $\frac{\hbar\omega}{2}$, dessa forma teriamos E(x)=0, assim:

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} = V(x)\psi(x) \tag{24}$$

7.2. *Resolvendo a EDP pelo método da equação característica*