

Demonstração Schrodinger-Crank-Nicolson

GABRIEL SIQUEIRA¹

¹Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais

1. INTRODUÇÃO

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

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

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).

$$\frac{\psi_i^{n+1} - \psi_i^n}{\Delta t} \quad (2)$$

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: $f(\psi_i)=0$, tal f é o vetor das equações algébricas que depende de valores de ψ_i . De fato, a aplicação do método da discretização 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:

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

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

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

4. COMPRIMENTO DO DOMÍNIO

$$h_i = x_i - x_{i-1} \quad (5)$$

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

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

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

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

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:

$$h_i = h, \forall i \quad (8)$$

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:

$$\frac{\psi_{i+1} - \psi_i}{h} = \frac{\psi_i - \psi_{i-1}}{h} \quad (9)$$

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} .

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

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

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

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

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

6. ALÉM DO IMPLÍCITO E EXPLÍCITO

Crank-Nicolson é justamente um método para segundo grau no tempo e espaço. Provavelmente 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:

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

Então a variação no tempo existe para um espaço homogêneo.

7. REPRESENTAÇÃO ALGÉBRICA

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

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

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

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

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

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:

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

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

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

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

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

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