El propósito de este trabajo es estudiar la dinámica cuántica de una partícula en un potencial $U(x)$, integrando numéricamente la ecuación de Schrödinger adimensionalizada:

$$i\eta\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left[-\frac{\eta^2}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x)\right]\psi,$$

donde el parámetro η es el $\hbar$ "efectivo" del sistema. Como condición inicial, use un paquete de onda con momento k_0, energía cinética E_{k_0}, centrado en x_0 y de "ancho" σ_0:

$$\psi(x, t=0) = Ce^{ik_0x}e^{-(x-x_0)^2/4\sigma_0^2}, \qquad E_{k_0} = \eta^2k_0^2/2.$$

Calcule numéricamente la evolución del paquete de onda ψ en el recinto $[0, L]$ en los siguientes casos.

1. Partícula libre: $U(x) = 0$; $k_0 = 50\pi$.

2. Barrera de potencial: $U(x) = \begin{cases} U_0 \text{ si } |x - L/2| < a, \\ 0 \text{ si } |x - L/2| > a, \end{cases}$

   con $a = 0.032$ y $U_0 = (50\pi)^2$.

   i) $E_{k_0} < U_0$ (e.g. $k_0 = 50\pi$),

   ii) $E_{k_0} \lesssim U_0$ (e.g. $k_0 = 70\pi$),

   iii) $E_{k_0} > U_0$ (e.g. $k_0 = 100\pi$).

Elija como condiciones de contorno $\psi(0, t) = \psi(L, t) = 0$, con $L = 1$, $x_0 = 1/4$, $\sigma_0 = 0.05$, $\eta = 1$. Para la discretización, use por ejemplo: $\Delta x = 0.001\eta$ y $\Delta t = 2\Delta x^2/\eta$.

En cada caso obtenga primero la constante de normalización C. Luego, durante un tiempo $t \lesssim (L/2)/(\eta k_0)$, grafique en función del tiempo:

- La energía: $E(t) = \langle H\rangle$.
- La norma de la función de onda: $\int |\psi(x, t)|^2\, dx$.
- La posición media $\langle x\rangle$ y su dispersión $(\delta x)^2 = \langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2$.
- El momento medio $\langle p\rangle$ y su dispersión $(\delta p)^2 = \langle p^2\rangle - \langle p\rangle^2$.

Verifique que se conservan la energía y la norma. Luego grafique $|\psi(x,t)|^2$ vs. x para varios instantes.

Recuerde: $\langle A \rangle \equiv \langle \psi | A | \psi \rangle \equiv \int \psi^*(x,t) A \psi(x,t)\, dx$.

La parte espacial de la ecuación de Schrödinger es fácil de implementar en diferencias finitas centradas con los métodos que hemos visto. Pero la evolución temporal es más delicada porque hay que asegurarse de que sea *unitaria*, como es la acción del operador $e^{-i\Delta t H}$, que debería dar la evolución temporal de ψ en el sitio j en un paso de tiempo:

$$\psi_j^{n+1} = e^{-i\Delta t H} \psi_j^n.$$

Las discretizaciones más sencillas del operador de evolución no son ni estables numéricamente, ni unitarias. Pero hay una manera relativamente fácil de resolver este inconveniente usando una representación llamada de Cayley:

$$e^{-i\Delta t H} \psi_j^n \approx \frac{1 - \frac{1}{2} i H \Delta t}{1 + \frac{1}{2} i H \Delta t},$$

que es unitaria y $o(\Delta t^2)$. Aplicada a la función de onda podemos escribir:

$$(1 + \tfrac{1}{2} i H \Delta t) \psi_j^{n+1} = (1 - \tfrac{1}{2} i H \Delta t) \psi_j^n.$$

Aquí hay que reemplazar H por la diferencia finita (centrada en el espacio) de la derivada segunda, más el potencial (local) U, reacomodar los términos y obtener:

$$\psi_{j+1}^{n+1} + (i\lambda - \Delta x^2 U_j - 2)\psi_j^{n+1} + \psi_{j-1}^{n+1} = -\psi_{j+1}^n + (i\lambda + \Delta x^2 U_j + 2)\psi_j^n - \psi_{j-1}^n,$$

donde $\lambda = 2\Delta x^2/\Delta t$. Este es el método de Crank-Nicholson, que hemos mencionado pero sin dar detalles. Es un método implícito, que requiere resolver un sistema algebraico para iterar. Pero el sistema es tridiagonal, porque involucra sólo sitios vecinos, así que no es difícil de hacer. En el paper de Goldberg y Schey [1] está explicado con todo detalle, y se muestran resultados como los que pretendemos obtener aquí. Los libros también tienen explicado el esquema, de manera más general.

Bibliografía

[1] Goldberg and Schey, *Computer-generated motion picturesof one-dimensional quantum-mechanical transmission and reflection phenomena*, American Journal of Physics 35(3):177–186 (1967).
[2] Bestehorn, *Computational physics*, Section 7.1.2, p. 196 (De Gruyter, 2018).
[3] Press et al., *Numerical Recipes*, 3rd ed., Section 20.2.1, p. 1048 (Cambridge UP, 2007). (Está también en el capítulo 19 de la 2a edición.)