



**UNIVERSIDAD
DE GRANADA**

Facultad de Ciencias

GRADO EN FÍSICA

Método de Crank-Nicolson aplicado a la resolución temporal de la ecuación de Schrödinger.

Yone del Castillo Bermúdez

Resumen

En este trabajo se estudian las soluciones de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo. Se toma un sistema unidimensional con un potencial a trozos. El método numérico empleado es el llamado método de Crank-Nicolson, que se aplicará para resolver la ecuación de Schrödinger. Los objetivos de este proyecto son: comprobar la conservación de la norma con el método Crank-Nicolson y a partir de los resultados obtenidos estudiar la dependencia del coeficiente de transmisión con los parámetros de la simulación.

Índice

1	Introducción.	3
1.1	Condiciones de contorno.	3
2	Metodología.	4
3	Resultados.	4
3.1	Evolución temporal.	4
3.2	Conservación de la norma.	6
3.3	Coeficiente de transmisión.	7
4	Conclusiones	8
	Referencias	8

1 Introducción.

Para la descripción de los sistemas atómicos o subatómicos es necesario emplear el tratamiento de la mecánica cuántica. A diferencia de la mecánica clásica, en cuántica un sistema físico no queda determinado por el conjunto de posiciones y momentos en cada instante de tiempo. En el formalismo de la mecánica cuántica toda la información del sistema está contenida en una función compleja llamada función de onda $\Psi(x, t)$, que es un vector dentro de un espacio de Hilbert definido por el sistema.

Lo conocible del sistema son por tanto las probabilidades con las que es posible medir los observables del sistema. La probabilidad de medir a la partícula entre x y $x + dx$ en un instante dado viene dada por el cuadrado de la función de onda $|\Psi(x, t)|^2 dx$.

En representación de posiciones la ecuación de Schrödinger tiene la siguiente forma:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x)\Psi(x, t) \quad (1.1)$$

Esta es la forma particular de la ecuación para una dimensión [1].

En el problema a tratar el potencial $V(x)$ será una barrera de anchura y energía dadas. Un parámetro empleado para estudiar el comportamiento de la función de onda es el coeficiente de transmisión K . Se define como la probabilidad de que la partícula haya traspasado la barrera de potencial al cabo de un tiempo t . Esta probabilidad puede hallarse teóricamente integrando $|\Psi(x, t)|^2$ en la región posterior a la barrera. Se comprobará que el resultado del programa replique los esperados teóricamente.

Se parte de una condición inicial de paquete gaussiano para la función de onda. El centro y la anchura del paquete son parámetros que se pueden modificar.

El método de Crank-Nicolson es el que mejor permite conservar la norma al hacer evolucionar la función de onda [2]. Se estudiará por tanto la conservación la norma y su dependencia con el número de puntos N .

1.1 Condiciones de contorno.

A parte de las condiciones iniciales, también es necesario establecer unas condiciones de contorno. En este caso se impondrá que la función de onda debe valer cero en los extremos del intervalo. A nivel físico esto es equivalente a situar la partícula en un potencial de pozo infinito.

$$\Psi(0, t) = 0 \quad (1.2)$$

$$\Psi(L, t) = 0 \quad (1.3)$$

2 Metodología.

En esta sección se explicará la implementación de los métodos numéricos para la resolución del problema. El programa se ha escrito usando el lenguaje de programación python. Concretamente se ha empleado la plataforma 'Colab' de Google, que funciona de forma similar a un jupyter notebook. A parte se han usado las siguientes librerías:

1. Numpy: Nos permite trabajar y operar con 'arrays' de forma sencilla.
2. Matplotlib: Esta librería se ha empleado para obtener las gráficas y las animaciones.
3. Random: Para simular los resultados de las medidas de la posición.

Podemos dividir el programa en tres grandes bloques:

El primer bloque: Incluye la declaración de variables como el momento inicial, la energía de la barrera, tiempo transcurrido en la simulación, número de puntos espaciales, anchura y posición iniciales del paquete, etc. además de las funciones que se usarán en el programa. La función de onda pasa de ser una función continua a ser un conjunto discreto de puntos que evolucionan según la ecuación de Schrödinger. Lo más importante es la definición de la función 'evolución temporal' que es la que implementa el método de Crank-Nicolson.

El segundo bloque: En esta parte se declara el array de la función de onda. Este array contiene los valores de la función de onda para cada punto e instante temporal, es por tanto un array bidimensional. Una vez establecida la condición inicial se ejecuta la parte del código que aplica el método de Crank-Nicolson [2] que añade los valores de Ψ al array temporal.

Tercer bloque: En este bloque se extrae la información de interés de la simulación. Se generan las gráficas de la evolución temporal de la norma y también la animación, para la que se han empleado las funciones 'FuncAnimation' y 'PillowWriter' de matplotlib [3]. En este bloque se incorpora también un módulo que calcula el coeficiente de transmisión con el algoritmo que se describe en las notas [2].

3 Resultados.

3.1 Evolución temporal.

En la siguiente figura (1) se puede ver la evolución temporal de la ecuación de onda. Se destacarán algunos fenómenos:

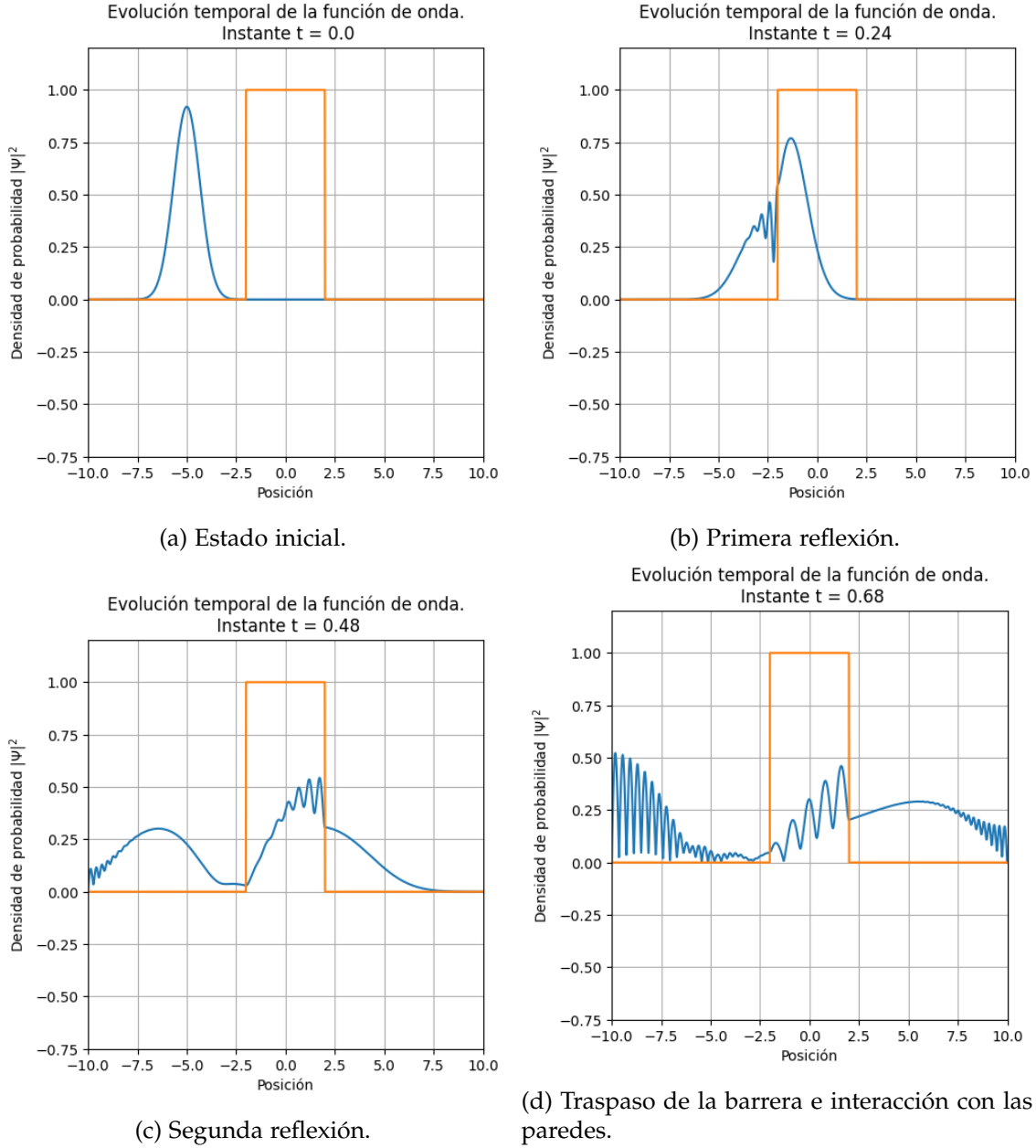


Figura 1: Distintos instantes temporales de una misma simulación.

En esta figura la energía de la barrera es un 80% la de la partícula. En la figura (1b) se observa el fenómeno de reflexión, mas adelante en (1c) se sucede una segunda reflexión antes de terminar de atravesar la barrera. Este es un fenómeno que recuerda a la difracción de la luz, es por ello que se habla de la dualidad onda-corpúsculo.

En la última figura se puede ver como el paquete comienza a interactuar con los bordes de la caja antes de terminar de traspasar la barrera. Puede verse que parte del paquete de ondas está a la izquierda y parte a la derecha de la barrera. A este fenómeno es al que a veces se refieren diciendo que una partícula puede "estar en dos sitios al mismo tiempo" [4]. Realmente no es que la partícula esté en dos sitios a la vez, lo que nos dice la función de onda es que la partícula tiene una cierta probabilidad de haber pasado la barrera y otra de no haberlo hecho.

3.2 Conservación de la norma.

Estudiando varias simulaciones se puede reconocer (2) que la norma se conserva de forma satisfactoria. Se observa que la norma empieza a decrecer levemente a partir de la mitad de la simulación. Dicho instante coincide con el momento de la primera colisión de la onda con las paredes. Si se alejan los bordes del pozo infinito se consigue evitar esta pérdida. Parece por tanto importante tener en cuenta el factor de los bordes. Para simulaciones de mucha duración podrían introducir un error considerable.

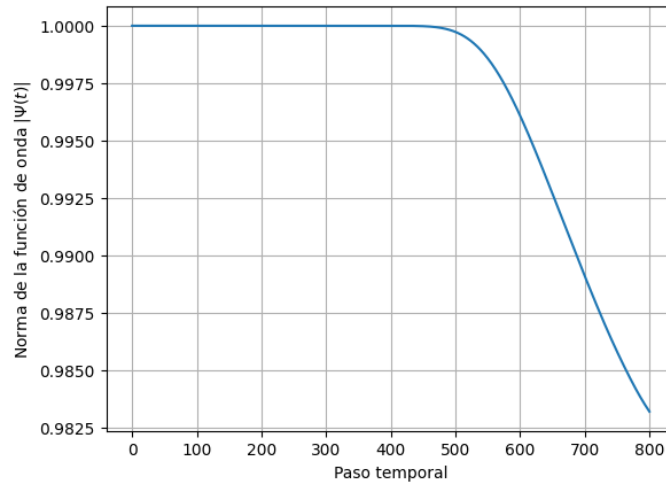


Figura 2: Evolución temporal de la norma. El momento en el que empieza a decrecer coincide con el primer choque contra la pared.

En la siguiente figura (3) se han alejado las paredes del pozo manteniendo el resto de parámetros con el mismo valor. Puede verse que en este caso no se tiene pérdida de norma apreciable (la escala está en el orden de 10^{-13}). Esta es por tanto una mejora significativa y un factor a tener en cuenta.

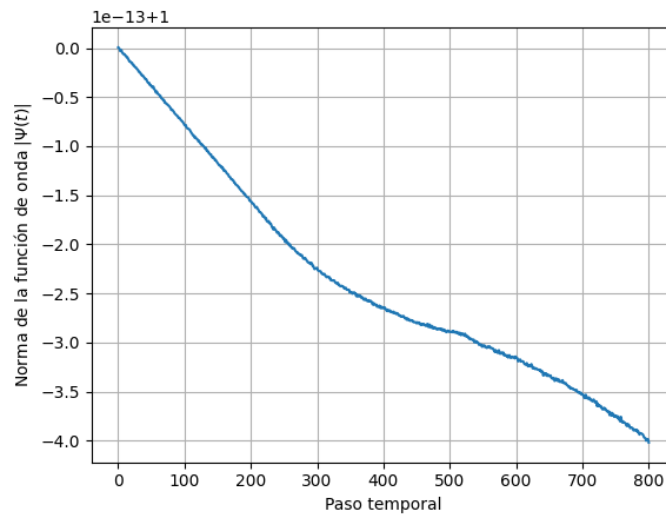


Figura 3: Evolución temporal de la norma. Se han alejado del centro los bordes de la caja.

3.3 Coeficiente de transmisión.

Para estudiar el coeficiente de transmisión se probó a cambiar la altura de la barrera en relación a la energía de la partícula. También se probó a cambiar el número de puntos de la simulación, para ver si afecta a los resultados. Para cada valor del potencial se realizaron 1000 simulaciones. Los resultados pueden verse en (4):

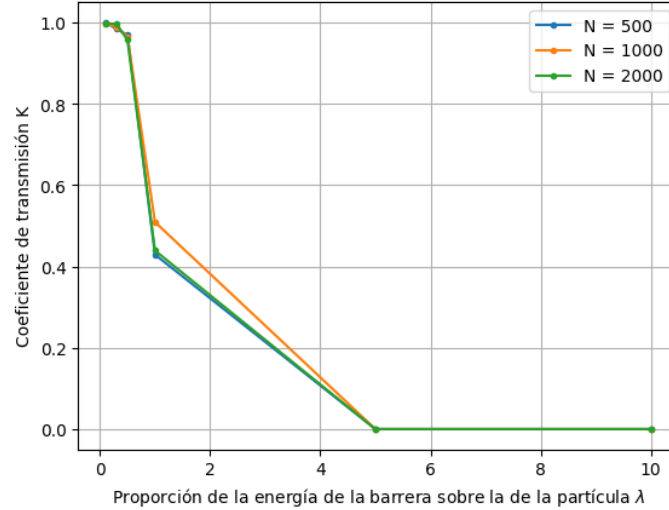


Figura 4: Dependencia del coeficiente de transmisión con la altura de la barrera.

Lo que se encuentra es que la probabilidad de atravesar la barrera es prácticamente del 100 % cuando la energía de la barrera es menor a la de la partícula ($\lambda < 1$). Cuando la energía es igual o superior el coeficiente de transmisión decrece rápidamente hasta volverse nulo. Se observa en (4) que el número de puntos no parece afectar significativamente el resultado.

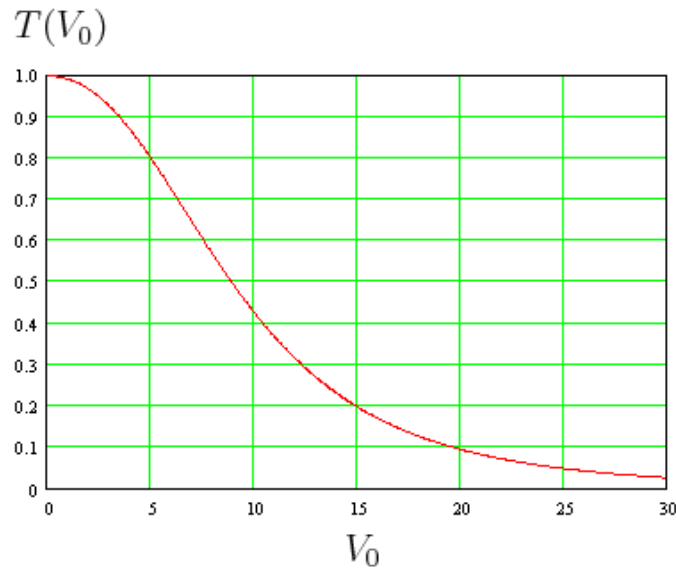


Figura 5: Dependencia teórica del coeficiente de transmisión con la altura de la barrera [5].

En la figura (5) se muestra el resultado teórico esperado. La diferencia entre ambas gráficas es que en (5) se muestra la dependencia de K (que aparece como T) con V_0 , mientras que en (4) se muestra su dependencia con $\lambda \propto V_0/E$, siendo E la energía de la partícula. Ambas gráficas son por tanto iguales excepto por un factor de escala. Se ve claramente que los resultados de las simulaciones siguen la misma tendencia que la curva teórica.

Un problema que se encontró fue en costo computacional de realizar 1000 simulaciones. Para cada punto de la gráfica se requerían aproximadamente 17 min de cálculo. Si se quisieran obtener más puntos de la gráfica sería necesario buscar una mejora en el método de cálculo o el uso de otros lenguajes de programación más eficientes como C++ o Fortran.

4 Conclusiones

En conclusión, el método de Crank-Nicolson arroja resultados satisfactorios para poder experimentar con la dinámica de la función de onda. El empleo de este tipo de simulaciones puede permitir estudiar sistemas más complejos en los que no sea posible hallar una solución analítica. Un factor determinante que se ha encontrado para el buen funcionamiento del método son las colisiones con los bordes de la caja de potencial. Para evitar pérdidas en la norma es relevante alejar los extremos de la región de interés para que no interfieran en los resultados.

Respecto al coeficiente de transmisión, a pesar del poco tamaño de la muestra (1000 simulaciones por cada valor de λ) sí parece haber un acuerdo entre las medidas de la simulación y las predicciones teóricas.

Por tanto, los resultados de este informe se pueden considerarse satisfactorios desde el punto de vista tanto computacional como físico, debido a la concordancia de los resultados con la teoría.

Referencias

- [1] COHEN-TANNOUDJI C. (1977).
Quantum Mechanics. Volume 1.
Wiley-Interscience.
- [2] NOTAS DE LA ASIGNATURA FÍSICA COMPUTACIONAL.
Resolución de ecuaciones en derivadas parciales: la ecuación de Schrödinger.
Universidad de Granada
Curso 22-23.
- [3] SPATIAL THOUGHTS LLP (14 de enero, 2022)
<https://spatialthoughts.com/2022/01/14/animated-plots-with-matplotlib/>
- [4] DR STEFAN FORSTNER (15 octubre, 2020).
Need to be in two places at once? It may be possible.
University of Queensland.
<https://shorturl.at/biTWX>
- [5] ARMANDO MARTÍNEZ TÉLLEZ (11 de agosto, 2009).
Transmisión y reflexión de partículas III. La Mecánica Cuántica.
http://la-mecanica-cuantica.blogspot.com/2010/07/transmision-y-reflexion-de-particulas_06.html