Ecuación de Schrödinger: Función de onda en un pozo de potencial

Ecuación de Schrödinger

- La evolución temporal de una partícula caracterizada por la función de onda $\Phi(x,t)$ en un sistema 1D viene dada por la ecuación de Schrödinger:

$$i\hbar\frac{\partial\Phi(x,t)}{\partial t} = H(x)\Phi(x,t)$$

- Donde $H(x)$ es el operador Hamiltoniano:

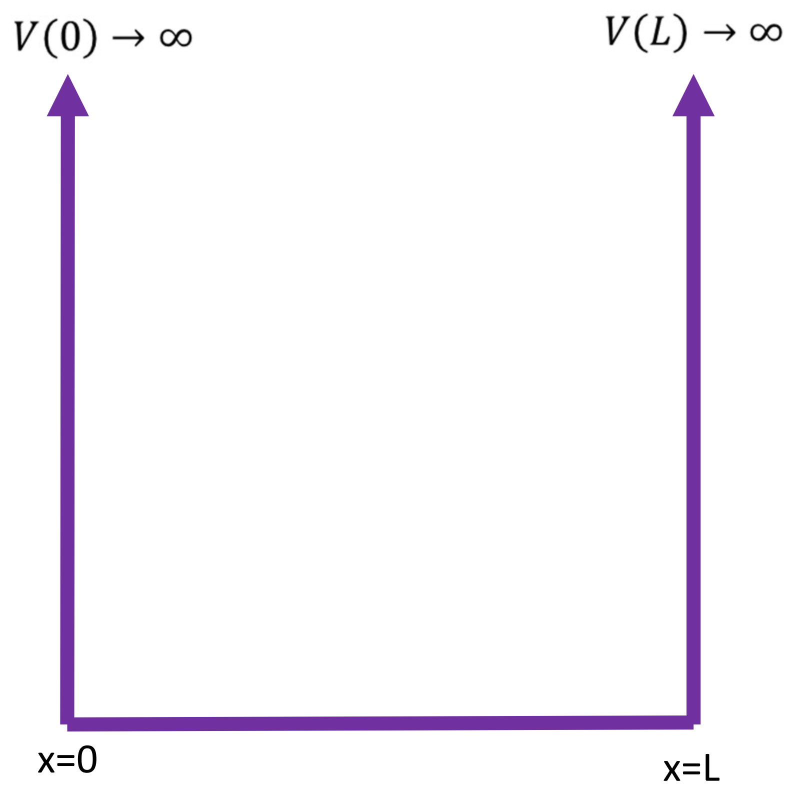
$$H(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$$

- La ecuación de Schrödinger es una ecuación lineal en derivadas parciales, de primer order en el tiempo y de segundo en el espacio.

- H es un operador hermítico (es igual a su adjunto): $\langle\phi|H\phi\rangle = \langle H\phi|\phi\rangle$:
  - Los autovalores del Hamiltoniano son reales.
  - Los autovectores del Hamiltoniano son ortogonales.

- La densidad de probabilidad de encontrar a la partícula en un volumen dV alrededor del punto x en el instante t es $dP = |\Phi(x,t)|^2 dV$, con normalización $\int_V |\Phi(x,t)|^2 dV = 1$
  - Al integrar numéricamente la Ecuación de Schrödinger deberemos garantizar que se mantenga la normalización de la densidad de probabilidad.

Ecuación de Schrödinger en un pozo de potencial



Condiciones de contorno:

$\Phi(x = 0, t) = \Phi(x = L, t) = 0 \; \forall t$

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < L \\ \infty, & else \end{cases} \quad \Rightarrow \quad -\frac{h^2}{2m}\frac{d^2\Phi(x,t)}{dx^2} = E\Phi(x,t)$$

Solución estacionaria: $\Phi(x) = A\,sin(kx), \qquad k = \hbar^{-1}\sqrt{2mE}$

Número de onda, k=1,2,3…

Las energías permitidas están cuantizadas en términos del número de onda.

Ecuación de Schrödinger: Integración numérica

- La solución formal de la ecuación de Schödinger es

$$\Phi(x,t) = e^{-i(t-t_0)H}\Phi(x,t_0)$$

Dado que H es hermítico, el operador e^{-itH}es unitario (su inverso coincide con su adjunto). Esta propiedad nos será útil para diseñar la discretización numérica que permita resolver el problema.

- Para simplificar la notación, haremos los cambios de variable
  - $t \to t\hbar$
  - $x \to x\hbar/\sqrt{2m}$

$$i\frac{\partial\Phi(x,t)}{\partial t} = H(x)\Phi(x,t) = -\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$$

Método numérico: discretización

- Discretizamos el tiempo y el espacio:
  - $x_j = jh \rightarrow h$ es el paso espacial, $j = 0,1,\ldots,N$. Por lo tanto, $L = hN$.
  - $t_n = ns \rightarrow s$ es el paso temporal, $s = 0,1,2,\ldots;\ s = 0$ corresponde a la condición inicial.
- La función de onda ahora es: $\Phi\left(x_j, t_n\right) = \Phi(jh, ns) = \Phi_{jn}$, y la condición de normalización viene dada por $\sum_{j=0}^{N} \left|\Phi_{jn}\right|^2 = 1\ \forall n$.
- Para discretizar espacialmente H utilizamos el desarrollo de Euler de la derivada segunda, $\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} = \frac{1}{h^2}\left(\Phi_{j+1} - 2\Phi_j + \Phi_{j-1}\right) + O(h^2)$, de modo que la acción del Hamiltoniano discretizado H_D viene dada por $\mathrm{H_D}\Phi_j = -\frac{1}{h^2}\left(\Phi_{j+1} - 2\Phi_j + \Phi_{j-1}\right) + V_j\Phi_j$, donde $V_j = V\left(x_j\right)$.
- Podemos discretizar la dinámica como $\Phi_{j,n+1} = e^{-isH}\Phi_{jn}$, donde hemos de calcular $e^{-isH}\Phi_{jn}$. En primer orden (utilizando el desarrollo en serie de Taylor), el operador e^{-isH} se puede aproximar por $1 - isH$. Sin embargo, el operador $1 - isH$ no es unitario, por lo que no conserva la norma.

Método numérico: discretización

-
- Una alternativa que sí garantiza que el operador sea unitario es la aproximación de Cayley: $e^{-isH} \approx \frac{1-isH_D/2}{1+isH_D/2}$
- Por tanto: $\boxed{\Phi_{j,n+1} = \frac{1-isH_D/2}{1+isH_D/2}\Phi_{jn} = \left[\frac{2}{1+isH_D/2} - 1\right]\Phi_{jn} = \chi_{jn} - \Phi_{jn} \quad (1)}$

$$\chi_{jn} = \frac{2}{1+isH_D/2}\Phi_{jn}$$

$$j = 0, \dots, N$$

$$\left[1 + \frac{isH_D}{2}\right]\chi_{jn} = 2\Phi_{jn}$$

donde:

  - s es el paso temporal
  - H_D es el Hamiltoniano discreto. $\mathrm{H_D}\Phi_j = V_j\Phi_j - \frac{1}{h^2}(\Phi_{j+1} - 2\Phi_j + \Phi_{j-1})$

- Además de ser unitario, el nuevo operador es exacto hasta orden $(sH_D)^2$.
- → Cálculo de χ_{jn}

$$\chi_{j+1,n} + \left[-2 + \frac{2i}{\tilde{s}} - \tilde{V}_j\right]\chi_{j,n} + \chi_{j-1,n} = \frac{4i}{\tilde{s}}\Phi_{jn}$$

$$\boxed{\begin{aligned}\tilde{s} &= s/h^2 \\ \tilde{V} &= h^2 V\end{aligned}}$$

$$\chi_{j+1,n} + \left[-2 + \frac{2i}{\tilde{s}} - \tilde{V}_j\right]\chi_{j,n} + \chi_{j-1,n} = \frac{4i}{\tilde{s}}\Phi_{jn}$$

$$A_j^+\chi_{j+1,n} + A_j^0\chi_{j,n} + A_j^-\chi_{j-1,n} = b_{jn}, \qquad j = 1, \dots, N-1$$

$$\begin{cases} A_j^+ = 1, \\ A_j^0 = -2 + \dfrac{2i}{\tilde{s}} - \tilde{V}_j, \\ A_j^- = 1, \\ b_{jn} = \dfrac{4i}{\tilde{s}}\Phi_{jn} \end{cases}$$

Unidad imaginaria

Condiciones de contorno: $\chi_{0,n} = \chi_{N,n} = 0$ (lo que garantiza que $\Phi_{0,n} = \Phi_{N,n} = 0\ \forall n$).

- Ansatz de la solución: $\chi_{j+1,n} = \alpha_j\chi_{j,n} + \beta_{j,n}$, $j = 0, \dots, N-1$, donde $\alpha_{N-1} = \beta_{N-1,n} = 0$ para garantizar $\chi_{N,n} = 0$

$$\chi_{j,n} = -\frac{A_j^-}{A_j^0 + A_j^+\alpha_j}\chi_{j-1} + \frac{b_{j,n} - A_j^+\beta_{j,n}}{A_j^0 + A_j^+\alpha_j} \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \alpha_{j-1} &= -\gamma_j A_j^- \\ \beta_{j-1,n} &= \gamma_j\left(b_{jn} - A_j^+\beta_{jn}\right) \\ \gamma_j &= \left(A_j^0 + A_j^+\alpha_j\right)^{-1} \end{aligned} \quad (3)$$

- Partiendo de α_{N-1} y β_{N-1} obtenemos α_j y $\beta_{j,n}$ recursivamente para $j = N-2, N-3, \dots, 1, 0$.
  - α_j no depende del tiempo: sólo es necesario calcularlas una vez.
- Una vez obtenidas α_j y $\beta_{j,n}$ calculamos $\chi_{j,n}$ en orden de j crecientes.
- Finalmente calculamos $\Phi_{j,n+1}$ a partir de $\chi_{j,n}$.

Condición Inicial

- La condición inicial es una onda plana con amplitud gaussiana:

$$\Phi(x,0) = e^{ik_0 x} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}}$$

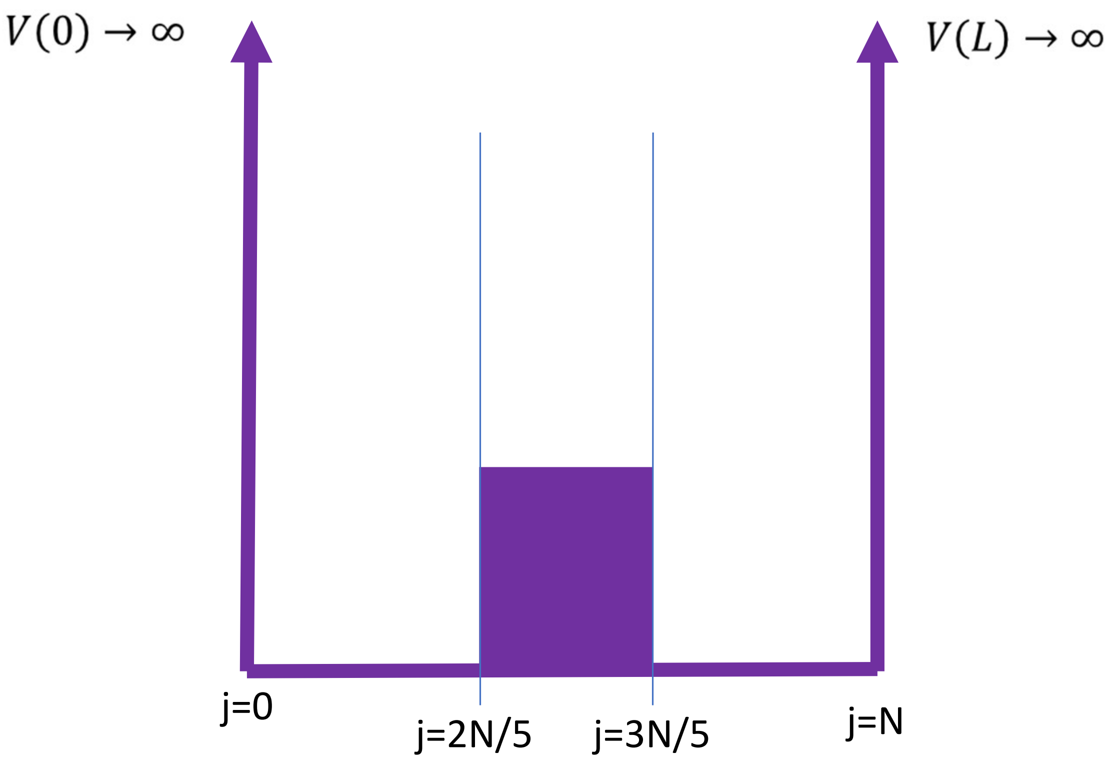
- La densidad de probabilidad de encontrar a la partícula en el instante inicial en un punto x es una gaussiana centrada en x_0 y de anchura σ. Fijamos por ejemplo $x_0 = Nh/4$ y $\sigma = Nh/16$ en cuyo caso

$$\Phi_{j,0} = e^{i\tilde{k}_0 j} e^{-\frac{8(4j-N)^2}{N^2}}$$

donde $\tilde{k}_0 = k_0 h$. Aunque de modo general es recomendable escribir la condición inicial en términos de x_0 y σ.

- k_0 fija el número de oscilaciones completas que la función de onda tiene sobre la red: $k_0 N h = 2\pi n_{ciclos}$, con $n_{ciclos} = 0,1,2,\ldots,N$. Por comodidad, fijaremos n_{ciclos} en lugar de k_0. Restringiremos $n_{ciclos} \leq N/4$ para asegurar una aceptable resolución espacial: de este modo cada ciclo tendrá al menos 4 puntos.

Pozo de potencial con un obstáculo



- La anchura del escalón es de N/5.
- El escalón está centrado en N/2.
- Su altura es porporcional a la energía de la función de onda incidente: $\tilde{V}_0 = \lambda \tilde{k}_0^2$.
  - Probaremos varios valores de $\lambda = 0.3, 0.5, 0.7$ por ejemplo.
- En resumen, el potencial es:

$$\tilde{V}(x) = \begin{cases} 0, si\ j \notin [\frac{2N}{5}, \frac{3N}{5}] \\ \lambda \tilde{k}_0^2, \quad si\ j \in [\frac{2N}{5}, \frac{3N}{5}] \end{cases}$$

Discretización temporal

- La resolución de la discretización temporal viene dada por $\tilde{s} = s/h^2$.
- El operador dinámico discreto tiende a ser exacto en potencias de Hs: es óptimo elegir $||H||s < 1$.
- Dado que la energía es proporcional a $\tilde{k}_0^2$, la condición anterior implica $k_0^2\ s < 1$, esto es, $\tilde{s} < \tilde{k}_0^{-2}$.
- En concreto tomaremos $\tilde{s} = \frac{1}{4}\tilde{k}_0^{-2}$.

RESUMEN

- Inicialmente, fijar los parámetros N, n_{ciclos} y λ.
- A partir de ellos, calcular $\tilde{s}$, $\tilde{k}_0$, $\tilde{V}_j$, $\Phi_{j,0}$ (incluyendo las condiciones de contorno $\Phi_{0,0} = \Phi_{N,0} = 0$) y α.
- Implementar el bucle temporal en *n*:
  - Calcular β (3).
  - Calcular χ (2).
  - Calcular $\Phi_{j,n+1}$ (1).

- **Objetivo:** Resolver la ecuación de Schrödinger unidimensional para un potencial cuadrado con un escalón.
  1. Comprobar que se conserva la norma.
  2. Representar la distribución de probabilidad de encontrar a la partícula en cada posición x para varios tiempos, $p(x,t)$.
     1. [Opcional] Realizar un gif mostrando la evolución temporal de $p(x,t)$.
  3. Estudiar el sistema (a través de $p(x,t)$) para distintos valores de λ. ¿Qué efecto tiene cambiar la altura del escalón?

Ejercicio individual: Estudiar el coeficiente de transmisión.

- El coeficiente de transmisión K es la probabilidad de encontrar a la partícula al otro lado del obstáculo para tiempos largos. En sistemas clásicos este coeficiente es igual a uno si la energía de la partícula es mayor que la energía del escalón y 0 si es menor. En sistemas cuánticos esto cambia debido al efecto túnel.

- Para determinar si una partícula se refleja o se transmite en el obstáculo colocamos dos detectores, uno a la derecha y otro a la izquierda de la barrera. La probabilidad de que un detector finito situado entre x_1 y x_2 detecte a la partícula es $P(x,t) = \int_{x_1}^{x_2} |\Phi(x)|^2 dx$. Por tanto, si nuestros detectores tienen un ancho de $N/5$, la probabilidad a tiempo *n* de detectar la partícula a la derecha vendrá dada $P_R(n) = \sum_{i=\frac{N}{5}+1}^{N} \left|\Phi_{i,n}\right|^2$, y la probabilidad de detectarla a la izquierda será $P_L(n) = \sum_{i=0}^{N/5} \left|\Phi_{i,n}\right|^2$. Después de realizar el experimento *m* veces, el **coeficiente de transmisión** se calcula como $K = N_T/m$, donde N_T es el número de veces que se ha detectado la partícula a la derecha del potencial.

- Si la partícula se detecta no hace falta continuar con la simulación, pero si no se detecta hay que proyectarla. Esto significa que a cada paso que no haya detección hay que hacer los coeficientes $\Phi_i = 0$ para $i \in [N/5, N]$ si hemos aplicado el detector derecho, y para $i \in [0, N/5]$ si ha sido el izquierdo. Para garantizar la normalización tendremos que calcular tras cada paso el valor $k = \sum_{j=0}^{N} \left|\Phi_j\right|^2$ y reescalar Φ_j como $\Phi_j = k^{-1/2}\Phi_j$.

- Se pide (para obtener una buena estadística habrá que simular el sistema al menos 10^3 veces):
  - Estudiar la dependencia en *N* de *K* realizando simulaciones para *N* = 500, 1000, 2000.
  - Estudiar la dependencia en *V*(*x*) de *K*, usando valores $\lambda = 0.1, 0.3, 0.5, 1, 5, 10$.
  - Comparar con resultados teóricos.