# ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER DEPENDIENTE DEL TIEMPO

Alexis Ruales, Julián Montoya, Luisa Vargas
Física computacional II – Instituto de Física
Universidad de Antioquia
2020 - 01

# ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER

Hamiltoniano

$$\boxed{\imath\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi,}$$

Función de onda

Constante de Planck reducida

## Solución en 1D

$$\Psi(x,t) = e^{-\imath(t-t_0)\hat{H}}\Psi(x,t_0),$$

Operador evolución

Densidad de Probabilidad

$$\boxed{|\Psi(x,t)|^2 = \Psi^*(x,t)\Psi(x,t) = \rho(x,t),}$$

Condición de Normalización

$$\boxed{\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x,t)|^2 dx = 1\,,}$$

Considerando dos pasos consecutivos de tiempo, $t_n$ y $t_{n+1} = t_n + h_t$

$$\Psi^{n+1} = e^{-\imath h_t \hat{H}}\Psi^n.$$

$$\Psi^{n+1} = \left(1 - \imath h_t \hat{H}\right)\Psi^n.$$

$$\left(1 + \imath h_t \hat{H}\right)\Psi^{n+1} = \Psi^n.$$

# Para discretizar el operador evolución, expresamos la función de onda con pasos de tiempo medio $t_{n+1/2} = t_n + h_t/2$

$$\Psi^{n+1/2} \equiv e^{\imath (h_t/2)\hat{H}} \Psi^{n+1} = e^{-\imath (h_t/2)\hat{H}} \Psi^{n}.$$

$$\downarrow$$

$$\left[1 + \imath \frac{h_t}{2}\hat{H} - \frac{1}{2}\left(\frac{h_t}{2}\hat{H}\right)^2\right] \Psi^{n+1} = \left[1 - \imath \frac{h_t}{2}\hat{H} - \frac{1}{2}\left(\frac{h_t}{2}\hat{H}\right)^2\right] \Psi^{n} + O(h_t^3).$$

$$\downarrow$$

$$\left(1 + \imath \frac{h_t}{2}\hat{H}\right) \Psi^{n+1} = \left(1 - \imath \frac{h_t}{2}\hat{H}\right) \Psi^{n},$$

$$\downarrow$$

$$\Psi^{n+1} = \left(1 + \imath \frac{h_t}{2}\hat{H}\right)^{-1} \left(1 - \imath \frac{h_t}{2}\hat{H}\right) \Psi^{n}.$$

$$\downarrow$$

**Forma de Cayley** →

$$e^{-\imath h_t \hat{H}} \cong \left(1 + \imath \frac{h_t}{2}\hat{H}\right)^{-1} \left(1 - \imath \frac{h_t}{2}\hat{H}\right),$$

**La norma se conserva** →

$$\int \left|\Psi^{n+1}\right|^2 dx = \int \left|\Psi^{n}\right|^2 dx,$$

Movimiento 1D de una partícula cuántica de masa m con potencial estacionario V (x).

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x), \quad \longrightarrow \quad \imath\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left[-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right]\Psi.$$

Aproximamos todas las funciones en una malla espacial regular definida por los nodos:

$$x_j = (j-1)h_x, \quad j = 1, 2, \ldots, N_x.$$

Fórmula de propagación:

$$\Psi_j^{n+1} + \imath\frac{h_t}{2}\left[-\frac{\Psi_{j+1}^{n+1} - 2\Psi_j^{n+1} + \Psi_{j-1}^{n+1}}{4h_x^2} + V_j\Psi_j^{n+1}\right]$$
$$= \Psi^n - \imath\frac{h_t}{2}\left[-\frac{\Psi_{j+1}^{n} - 2\Psi_j^{n} + \Psi_{j-1}^{n}}{4h_x^2} + V_j\Psi_j^{n}\right].$$

# MÉTODO DE CRANK-NICOLSON

## *Comparación diferencias progresivas y regresivas*

$$\frac{w_{i,j+1} - w_{ij}}{k} - \alpha^2 \frac{w_{i+1,j} - 2w_{ij} + w_{i-1,j}}{h^2} = 0,$$

Promediamos este método en el *j*-ésimo paso en *t:*

$$\frac{w_{i,j+1} - w_{ij}}{k} - \alpha^2 \frac{w_{i+1,j} - 2w_{ij} + w_{i-1,j}}{h^2} = 0,$$

Error de truncamiento local $\rightarrow$ $\tau_F = \frac{k}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x_i, \mu_j) + O(h^2),$

$$\frac{w_{ij} - w_{i,j-1}}{k} - \alpha^2 \frac{w_{i+1,j} - 2w_{ij} + w_{i-1,j}}{h^2} = 0,$$

Promediamos este método en el *(j+1)*-ésimo paso en *t:*

$$\frac{w_{i,j+1} - w_{i,j}}{k} - \alpha^2 \frac{w_{i+1,j+1} - 2w_{i,j+1} + w_{i-1,j+1}}{h^2} = 0,$$

Error de truncamiento local $\rightarrow$ $\tau_B = -\frac{k}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x_i, \hat{u}_j) + O(h^2).$

Aplicando el método de Crank-Nicolson a la ecuación de Schrödinger:

$$\imath \frac{\Psi_j^{n+1} - \Psi_j^n}{h_t} = -\frac{\Psi_{j+1}^{n+1} - 2\Psi_j^{n+1} + \Psi_{j-1}^{n+1}}{4h_x^2} + \frac{1}{2} V_j \Psi_j^{n+1}$$
$$- \frac{\Psi_{j+1}^{n} - 2\Psi_j^{n} + \Psi_{j-1}^{n}}{4h_x^2} + \frac{1}{2} V_j \Psi_j^{n}.$$

**El método de Crank-Nicolson y el enfoque de Cayley son equivalentes.**

**Potencial:**

$$W_j = 2\lambda + \frac{1}{2} h_t V_j,$$

**Introduciendo:** $\lambda = \dfrac{h_t}{4h_x^2},$

$$-\lambda \Psi_{j+1}^{n+1} + \left(2\lambda + \frac{1}{2} h_t V_j - \imath\right) \Psi_j^{n+1} - \lambda \Psi_{j-1}^{n+1}$$
$$= \lambda \Psi_{j+1}^{n} - \left(2\lambda + \frac{1}{2} h_t V_j + \imath\right) \Psi_j^{n} + \lambda \Psi_{j-1}^{n}.$$

$$b_1 = 1, \quad c_1 = 0, \quad d_1 = 0,$$
$$\begin{cases} a_j = -\lambda, \quad j = 2, 3, \ldots, N_x - 1, \\ b_j = W_j - \imath, \\ c_j = -\lambda, \\ d_j = \lambda \Psi_{j-1}^n - (W_j + \imath)\, \Psi_j^n + \lambda \Psi_{j+1}^n, \end{cases}$$
$$a_{N_x} = 0, \quad b_{N_x} = 1, \quad d_{N_x} = 0.$$

$$-\lambda \Psi_{j-1}^{n+1} + (W_j - \imath)\, \Psi_j^{n+1} - \lambda \Psi_{j+1}^{n+1} = \lambda \Psi_{j-1}^{n} - (W_j + \imath)\, \Psi_j^{n} + \lambda \Psi_{j+1}^{n},$$
$$j = 2, \ldots, N_x - 1.$$

Forma tridiagonal

Otra forma de resolver el problema es separando las partes real e imaginaria

$$\boxed{\Psi^n = \psi^n + \imath \chi^n.}$$

Reemplazando en la forma tridiagonal:

$$\chi_j^{n+1} - \lambda \psi_{j-1}^{n+1} + W_j \psi_j^{n+1} - \lambda \psi_{j+1}^{n+1} = \chi_j^n + \lambda \psi_{j-1}^n - W_j \psi_j^n + \lambda \psi_{j+1}^n,$$

$$\psi_j^{n+1} + \lambda \chi_{j-1}^{n+1} - W_j \chi_j^{n+1} + \lambda \chi_{j+1}^{n+1} = \psi_j^n - \lambda \chi_{j-1}^n + W_j \chi_j^n - \lambda \chi_{j+1}^n.$$

$$\psi_{j,0}^{n+1} = \psi_j^n - \lambda \left( \chi_{j-1}^n + \chi_{j-1}^n \right) + W_j \chi_j^n, \quad j = 2, 3, \ldots, N_x - 1,$$

$$\chi_{j,0}^{n+1} = \chi_j^n + \lambda \left( \psi_{j-1}^n + \psi_{j-1}^n \right) - W_j \psi_j^n,$$

$$\psi_j^{n+1} = \psi_{j,0}^{n+1} - \lambda \left( \chi_{j-1}^{n+1} + \chi_{j+1}^{n+1} \right) + W_j \chi_j^{n+1}, \quad j = 2, 3, \ldots, N_x - 1,$$

$$\chi_j^{n+1} = \chi_{j,0}^{n+1} + \lambda \left( \psi_{j-1}^{n+1} + \psi_{j+1}^{n+1} \right) - W_j \psi_j^{n+1}.$$

# APLICACIÓN

Elegimos representar el estado inicial de la partícula cuántica como un paquete de onda Gaussiana normalizada:

$$\Psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^{1/2}\sigma}} e^{-(x-x_0)^2/(4\sigma^2)} e^{ik_0 x}.$$

Número de onda promedio asociado

Ancho medio del paquete de ondas

Centro del paquete de ondas

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & |x| \leq a/2, \\ 0, & |x| > a/2. \end{cases}$$

Consideramos la dispersión (reflexión y transmisión) del paquete de ondas en una barrera de potencial cuadrado de ancho “a” y altura $V_0$, que se extiende simétricamente sobre el origen.

# APLICACIÓN

## Pseudocódigo

Se define las variables del problema

Se inicializa las variables como arreglos

Se define la forma del potencial (cuadrado)

Se inicia con la forma del paquete de onda.

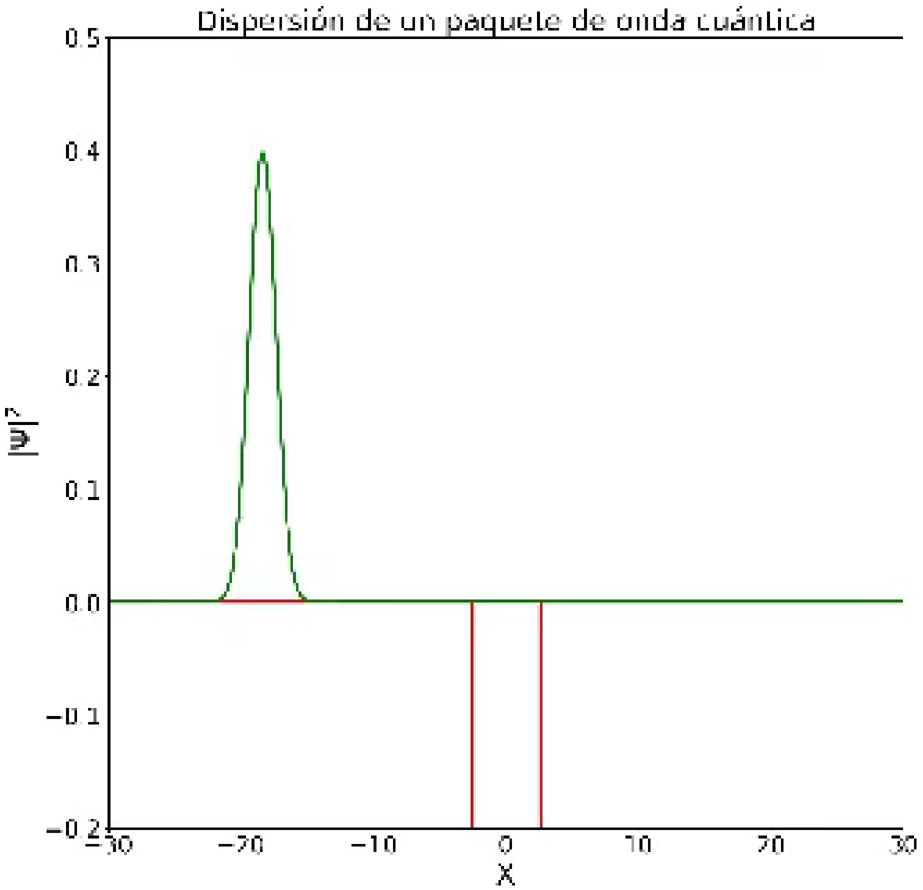
Se normaliza la función

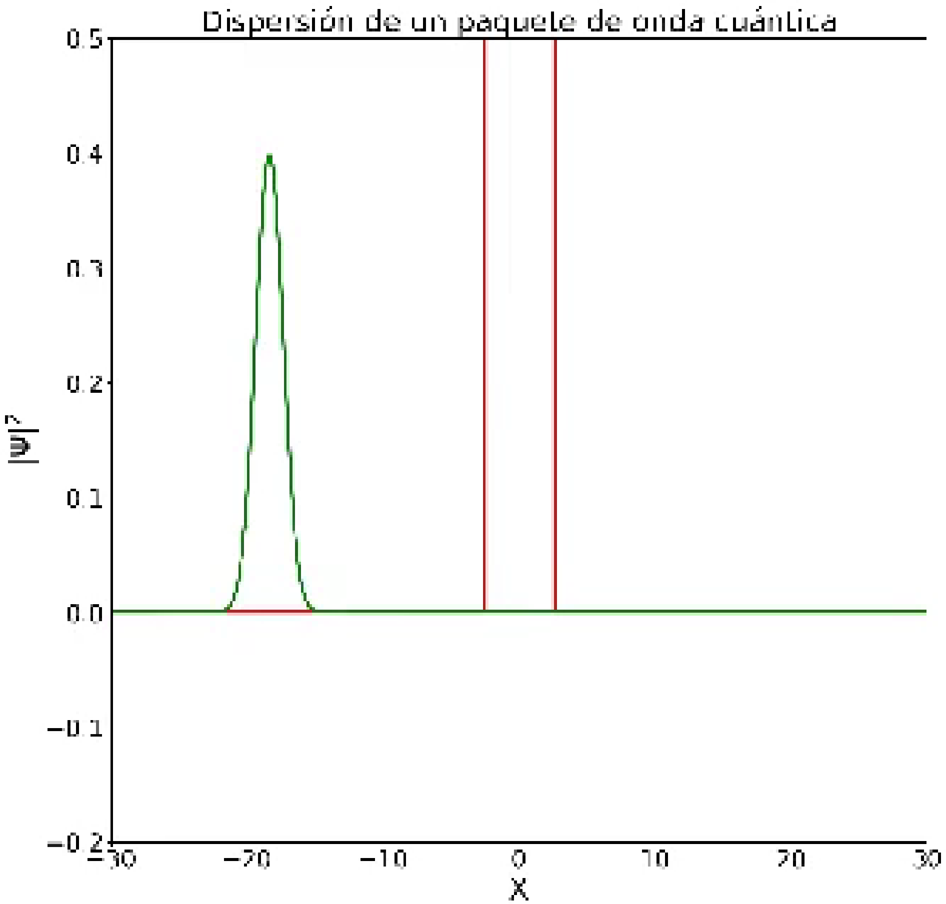
Se encuentra la densidad de probabilidad

se soluciona el sistema por Gauss-Siedel.

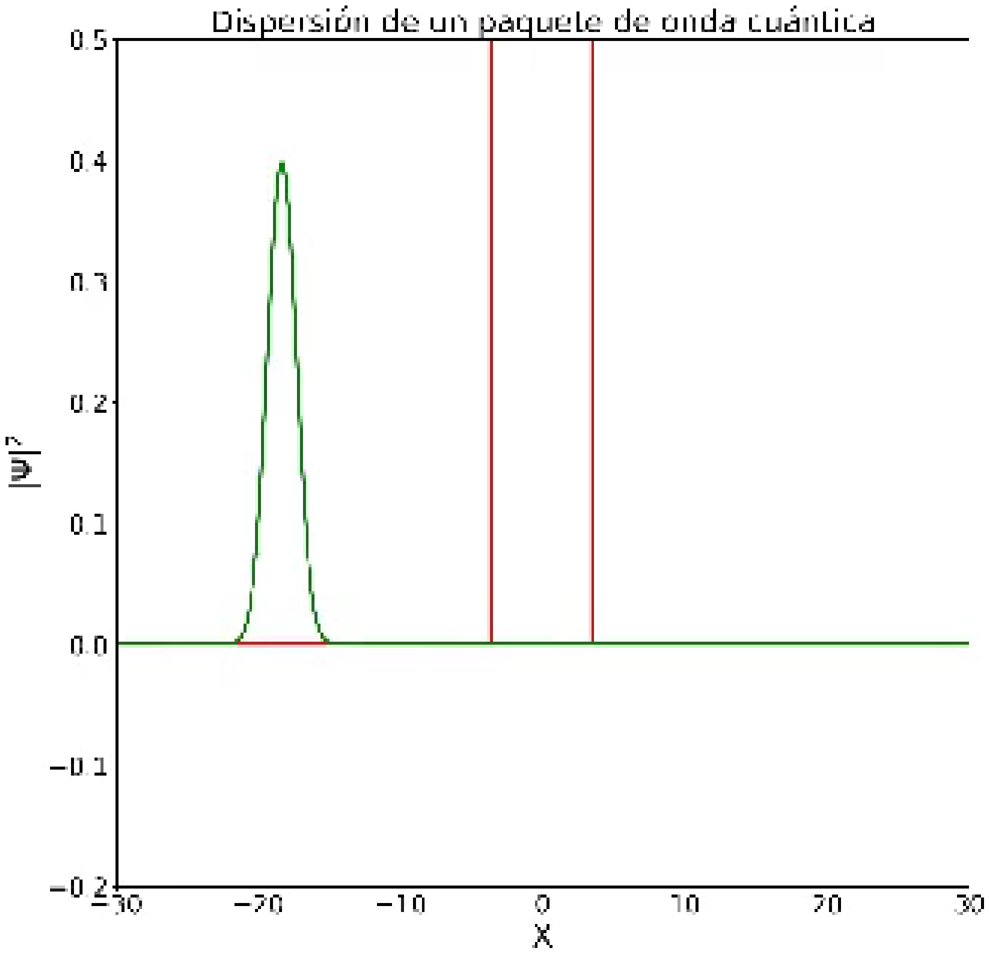
Se hace la gráfica

# CONCLUSIONES



# CONCLUSIONES



# BIBLIOGRAFÍA


- Richard Burden, Douglas Faires, Annette Burden. *Análisis numérico*. Cengage Learning, 10ª edición.
- William F. Ames, *Numerical Method for Partial Differential Equations*, Section 1.6. Academic Press, New York, 1977.
- Titus Adrian Beu. *Introduction to numerical programming.*
- J. J. Sakurai, J. Napolitano. *Modern Quantum Mechanics*. Cambridge University Press.