

ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER DEPENDIENTE DEL TIEMPO

Integrantes: Alexis Ruales, Julián Montoya, Luisa Vargas.

La ecuación de Schrödinger describe la evolución espacial y temporal de un sistema cuántico no relativista, está dada por:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi, \quad [1]$$

siendo \hat{H} el hamiltoniano, $\hbar = h/2\pi$, la constante de Planck reducida, $i = \sqrt{-1}$, la unidad imaginaria. La función de onda, es en general una función compleja de posición y tiempo. Podemos analizar a la ecuación de onda como dos PDE parabólicas, que acoplan las partes real e imaginaria de la función de onda. Para esto, es importante conocer aspectos básicos de la mecánica cuántica, entre ellos está el concepto de *densidad de probabilidad*:

$$|\Psi(x, t)|^2 = \Psi^*(x, t)\Psi(x, t) = \rho(x, t), \quad [2]$$

La densidad de probabilidad definida en la ecuación [2], juega un papel central en el formalismo cuántico porque representa la probabilidad de que el sistema se localice en un intervalo $(x, x+dx)$ en un tiempo t . Cuando se resuelven problemas dependientes del tiempo, la función de onda generalmente se modela como un paquete de onda, que presenta tanto la localización como el comportamiento de onda. Algo muy importante, es definir la forma inicial del paquete de onda, es decir en un tiempo $t=0$, porque su localización requiere que desaparezca asintóticamente, es decir, que la función de onda tienda a cero cuando estamos en los límites del eje x , $x \rightarrow \pm \infty$.

Otro concepto importante es la *norma*, ya que representa la probabilidad total de que el sistema se localice en algún lugar del espacio, además de esto, debe permanecer constante en el tiempo. Está definida por:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = 1, \quad [3]$$

La solución de la ecuación de Schrödinger para un sistema 1D la podemos expresar como:

$$\Psi(x, t) = e^{-i(t-t_0)\hat{H}}\Psi(x, t_0), \quad [4]$$

Esa expresión $e^{-i(t-t_0)\hat{H}}$ es conocida como el *operador evolución*. Ese operador es unitario porque si lo multiplicamos por su adjunto, obtendremos el operador identidad. El hecho de que sea unitario, implica que se conserve la norma del paquete de onda a un tiempo t .

Considerando dos pasos de tiempo consecutivos t_n , y $t_{n+1}=t_n+\Delta t$, el paquete de ondas evoluciona de acuerdo a la siguiente expresión:

$$\Psi^{n+1} = e^{-i h_t \hat{H}} \Psi^n. \quad [5]$$

Si expandimos en series de potencias hasta primer orden, tenemos entonces:

$$\Psi^{n+1} = \left(1 - i h_t \hat{H}\right) \Psi^n. \quad [6]$$

Esto permite obtener la solución n+1 en términos de la solución anterior, n. Pero, el problema con la expresión [6] es que no es unitario, por tanto, no se conserva la norma del paquete de ondas; esto implica entonces que haya inestabilidad y, la función de onda diverge.

Para discretizar el operador de evolución, expresamos la función de onda n +1/2 en el paso de tiempo medio $t_{n+1/2} = t_n + h_t/2$. Esto garantiza la unitariedad y la conservación de la norma. La función de onda en estos términos sería:

$$\Psi^{n+1/2} \equiv e^{i(h_t/2)\hat{H}} \Psi^{n+1} = e^{-i(h_t/2)\hat{H}} \Psi^n. \quad [7]$$

Expandiendo en series de potencias hasta segundo orden, eliminando términos y despejando, llegamos a:

$$\Psi^{n+1} = \left(1 + i \frac{h_t}{2} \hat{H}\right)^{-1} \left(1 - i \frac{h_t}{2} \hat{H}\right) \Psi^n. \quad [8]$$

De la expresión [8] llegamos a la *forma Cayley* del operador de evolución, que viene dada por:

$$e^{-i h_t \hat{H}} \cong \left(1 + i \frac{h_t}{2} \hat{H}\right)^{-1} \left(1 - i \frac{h_t}{2} \hat{H}\right), \quad [9]$$

Problema: Consideremos el movimiento 1D de una partícula cuántica de masa m con un potencial estacionario V(x). El hamiltoniano del sistema es:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x), \quad [10]$$

Tomando por simplicidad m=1, $\hbar=1$, la ecuación de Schrödinger correspondiente toma la forma:

$$i \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left[-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \Psi. \quad [11]$$

Aplicando el método de Crank-Nicolson a la ecuación de Schrödinger, podemos llegar a una matriz con forma tridiagonal, expresada como:

$$-\lambda \Psi_{j-1}^{n+1} + (W_j - i) \Psi_j^{n+1} - \lambda \Psi_{j+1}^{n+1} = \lambda \Psi_{j-1}^n - (W_j + i) \Psi_j^n + \lambda \Psi_{j+1}^n, \quad [12]$$

$$j = 2, \dots, N_x - 1.$$

Siendo $W_j = 2\lambda + \frac{1}{2}h_t V_j$, el valor de los potenciales y, $\lambda = \frac{h_t}{4h_x^2}$. Por tanto, el método de Crank-Nicolson y el enfoque de Cayley son equivalentes. Entonces, el problema se puede resolver solucionando esa matriz por algún método, ya sea factorización LU, Gauss-Jordan, entre otros.

Nuestro grupo intentó solucionar un problema en específico con este método, pero como la función de onda tiene parte real e imaginaria, fue muy tedioso. Una estrategia alternativa para resolver el sistema, es entonces separar estas partes, la real y la imaginaria.

$$\Psi^n = \psi^n + i\chi^n. \quad [13]$$

Reemplazando [13] en [12] y despejando componentes, llegamos a la siguiente expresión:

$$\begin{aligned} \psi_j^{n+1} &= \psi_{j,0}^{n+1} - \lambda (\chi_{j-1}^{n+1} + \chi_{j+1}^{n+1}) + W_j \chi_j^{n+1}, \quad j = 2, 3, \dots, N_x - 1, \\ \chi_j^{n+1} &= \chi_{j,0}^{n+1} + \lambda (\psi_{j-1}^{n+1} + \psi_{j+1}^{n+1}) - W_j \psi_j^{n+1}. \end{aligned} \quad [14]$$

La solución de este sistema se puede hacer mediante el método de Gauss-Seidel, y es ventajoso porque evita la aritmética compleja y reduce significativamente los requisitos de almacenamiento, ya que los elementos del sistema de diferencia tridiagonal no tienen que almacenarse simultáneamente para pasar a la rutina de solución. Esas componentes de la expresión [14] se pueden determinar numéricamente mediante iteraciones de Gauss-Seidel.

Método de Gauss-Seidel

Es un método iterativo utilizado para resolver sistemas de ecuaciones lineales. Esto significa que se parte de una aproximación inicial y se repite el proceso hasta llegar a una solución con un margen de error tan pequeño como se quiera. En notación matricial, sería $Ax=b$, donde:

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}, \quad x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix} \quad [15]$$

Para las iteraciones $k+1$:

$x^{(k+1)} = Mx^{(k)} + c$, donde $A = N - P$. Definiendo $M = N^{-1}P$, y $c = N^{-1}b$; los coeficientes de la matriz N se definen como: $n_{ij} = a_{ij}$ si $i \leq j$, $n_{ij} = 0$ si $i > j$.

Aplicación: Elegimos representar el estado inicial de la partícula cuántica como un paquete de onda gaussiana normalizada, esto es:

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^{1/2}\sigma}} e^{-(x-x_0)^2/(4\sigma^2)} e^{ik_0x}. \quad [16]$$

x_0 representa la posición del centro del paquete de ondas, σ es el ancho medio del paquete y k_0 es el número de onda promedio asociado. El primer exponencial define la envoltura gaussiana, mientras que el segundo exponencial es responsable del movimiento del paquete, de acuerdo con el signo de k_0 . Los paquetes de ondas gaussianas se usan mucho debido a sus propiedades especiales, entre las cuales la principal importancia es ser los paquetes de ondas de mínima incertidumbre.

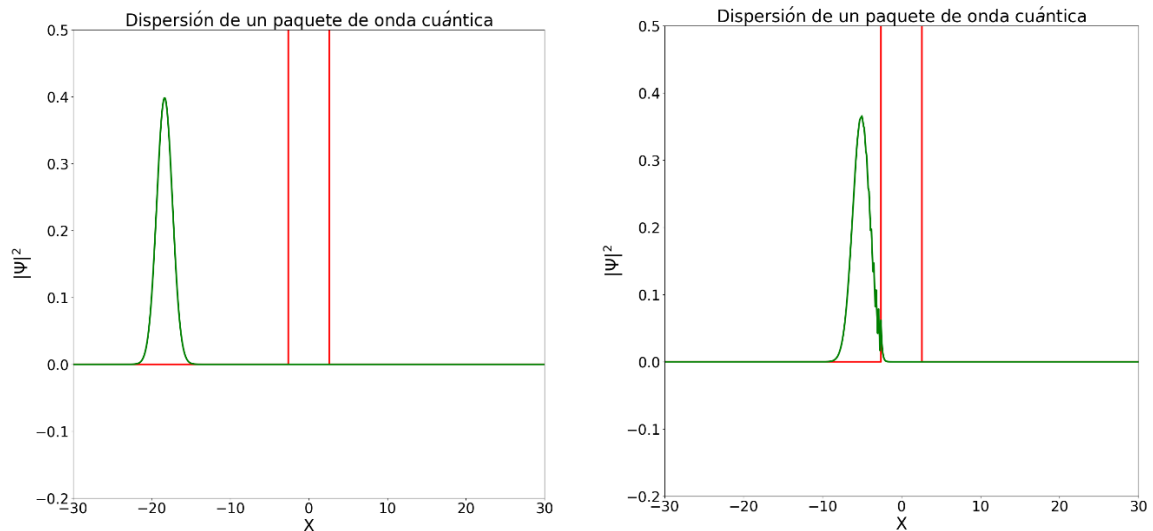
Consideramos la dispersión (reflexión y transmisión) del paquete de ondas en una barrera de potencial cuadrado, con un ancho “a” y, altura V_0 , que se extiende simétricamente sobre el origen.

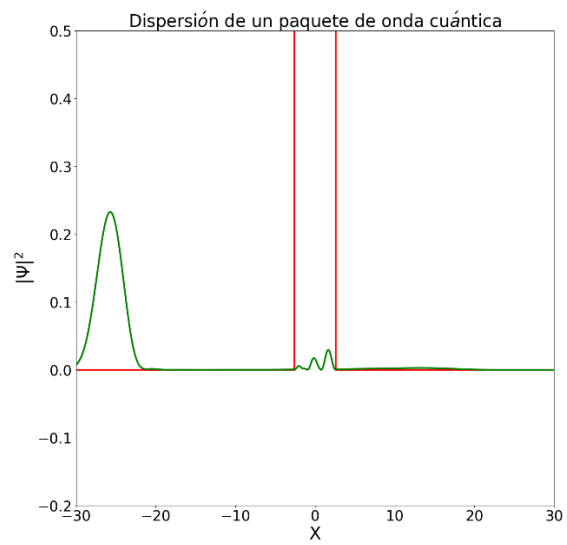
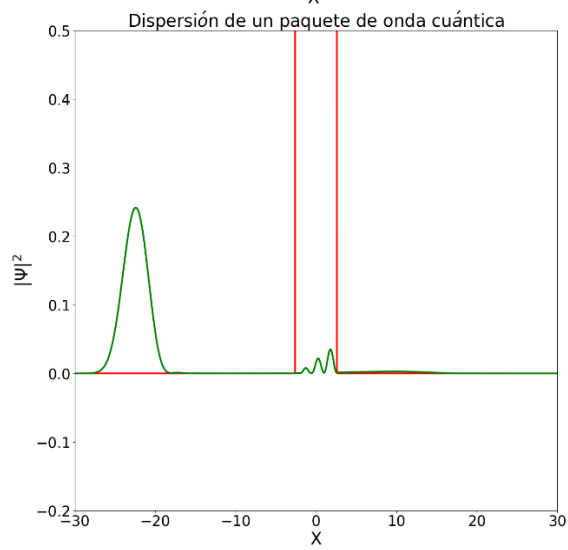
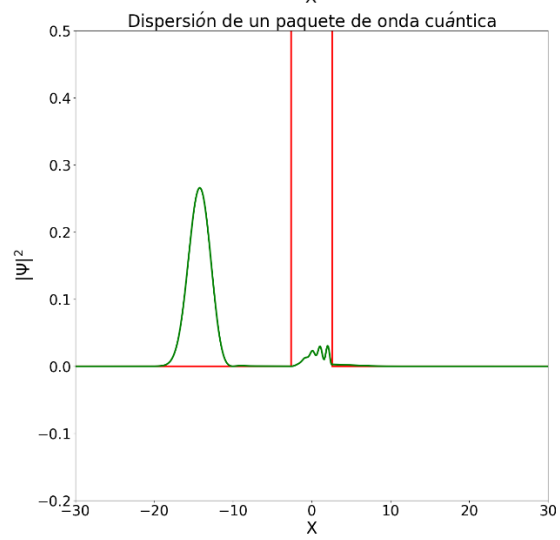
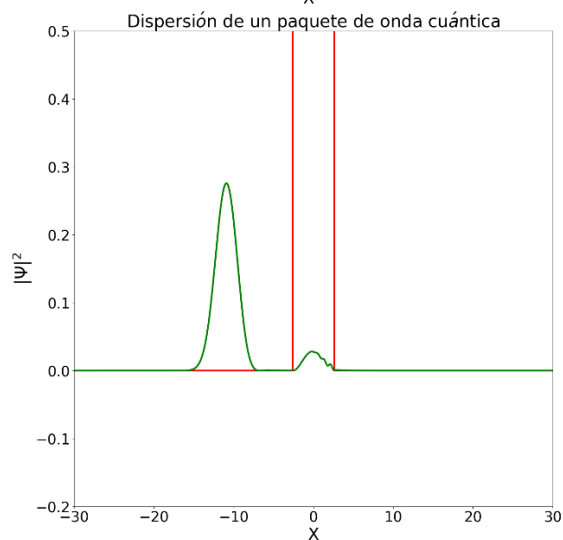
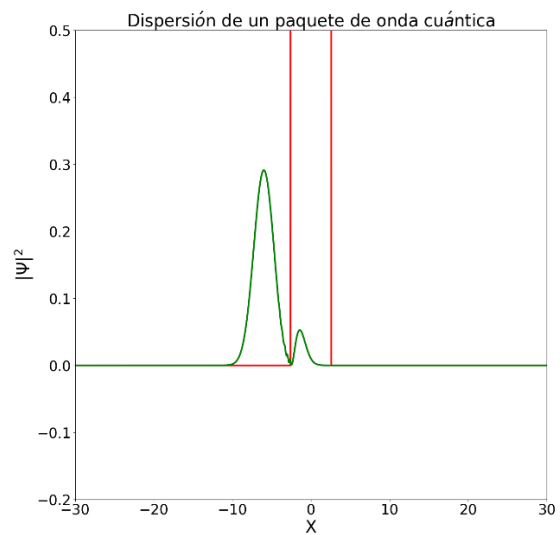
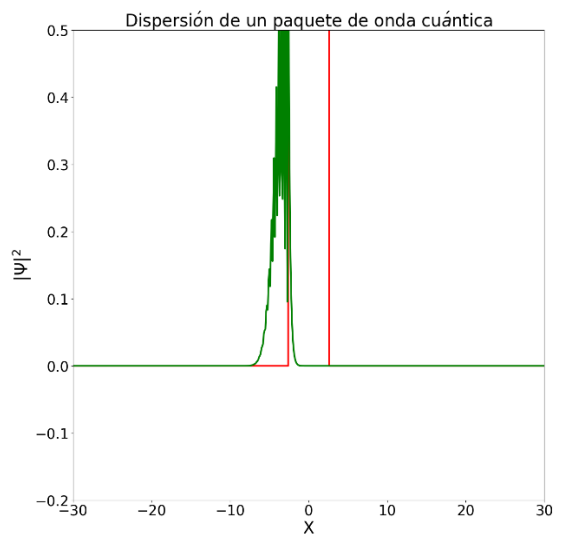
$$V(x) = \begin{cases} V_0, & |x| \leq a/2, \\ 0, & |x| > a/2. \end{cases} \quad [17]$$

Resultados: El anterior ejemplo se programó en C++ donde se resolvió el sistema de ecuaciones mediante el método de Gauss-Seidel.

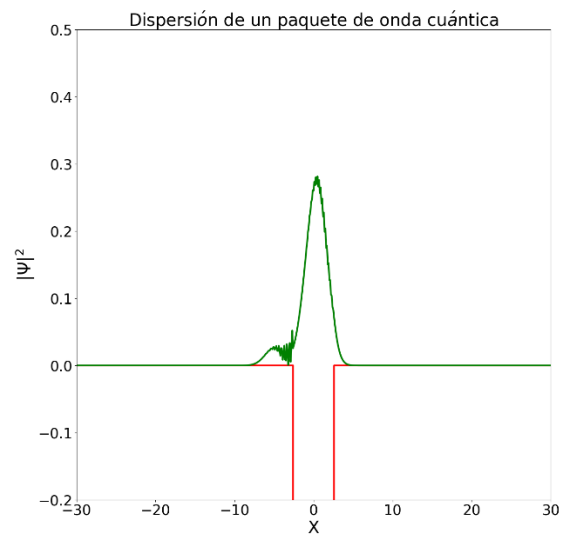
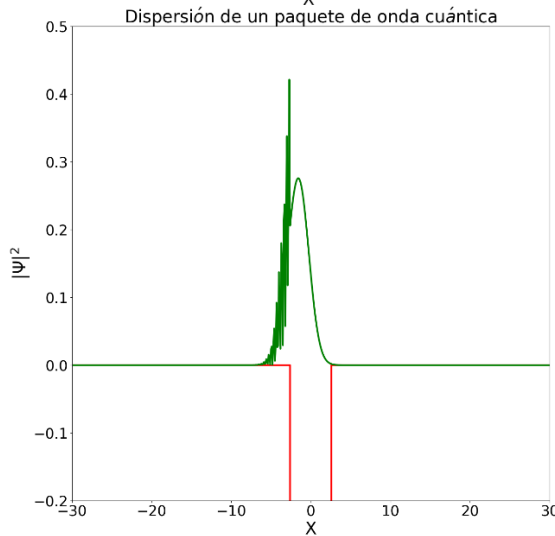
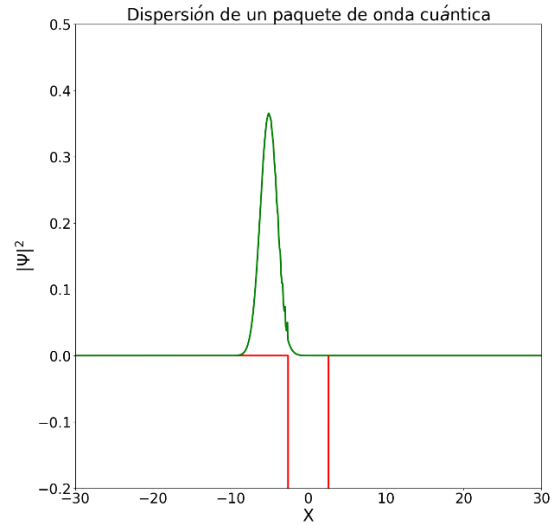
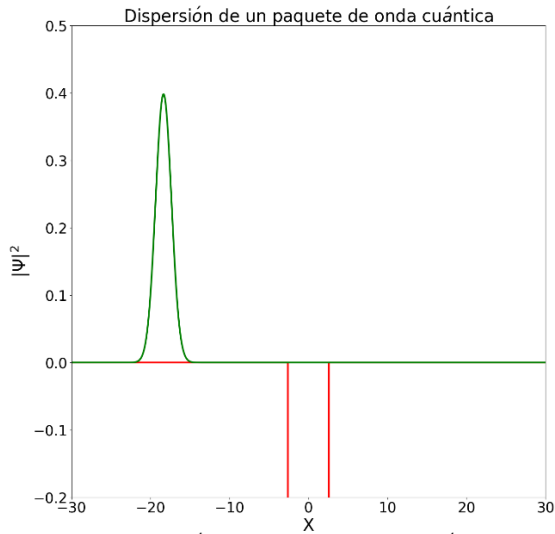
Caso 1: El vídeo llamado gauss_seidel_v50_a5 muestra una barrera de potencial con parámetros $a = 5$, $V_0 = 50$, $x_0 = -20$. Es decir, el paquete de ondas inicial se centra en -20. $\sigma = 1$ y $k_0 = 10$. La cuadrícula espacial se extiende en el rango $[-x_{\max}, x_{\max}]$, con $x_{\max} = 100$ y los nodos espaciados regularmente en $h_x = 5 \cdot 10^{-2}$. La propagación se lleva a cabo hasta $t_{\max} = 5$, con un paso de tiempo $h_t = 5 \cdot 10^{-3}$.

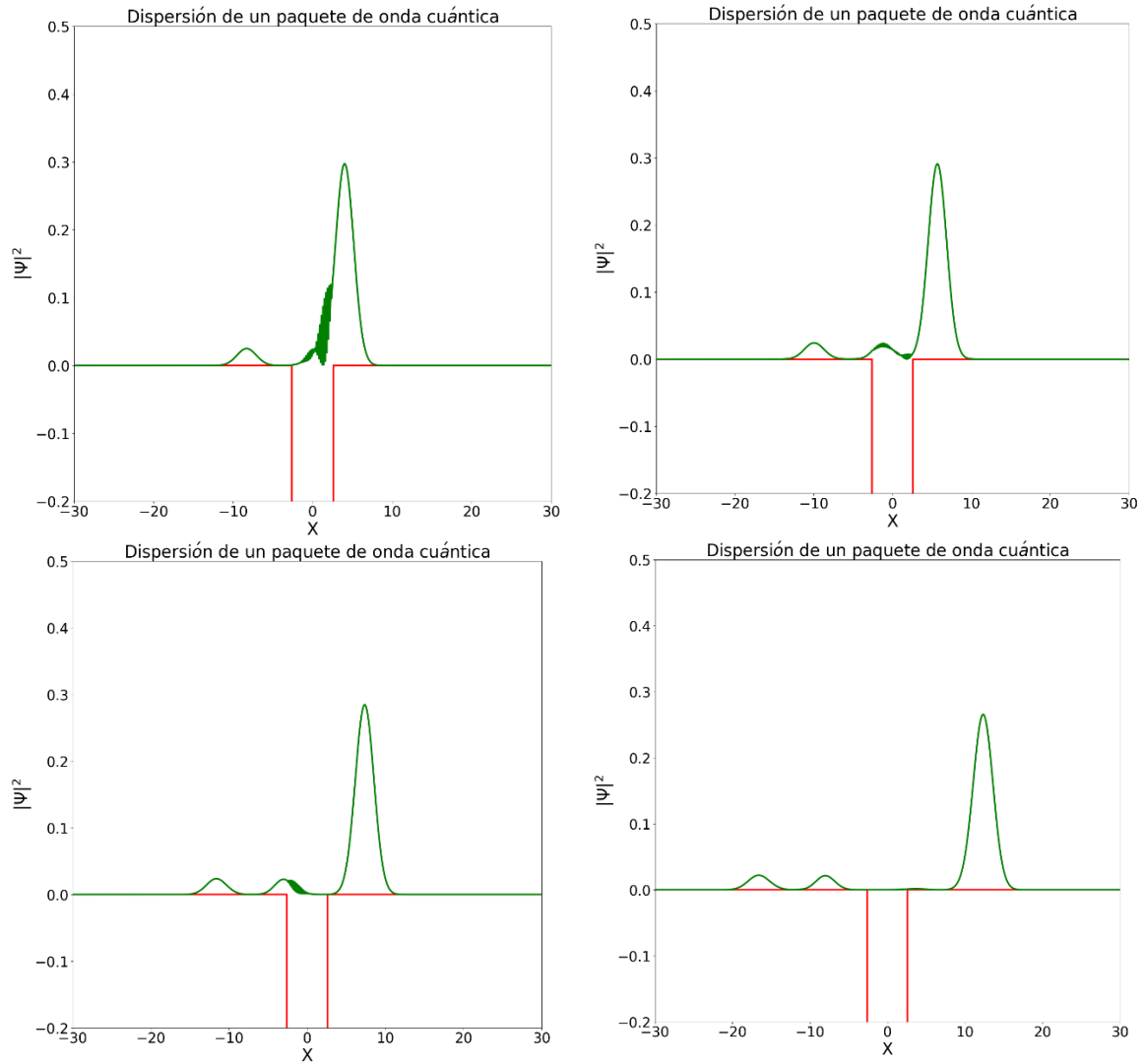
La secuencia se encuentra a continuación:



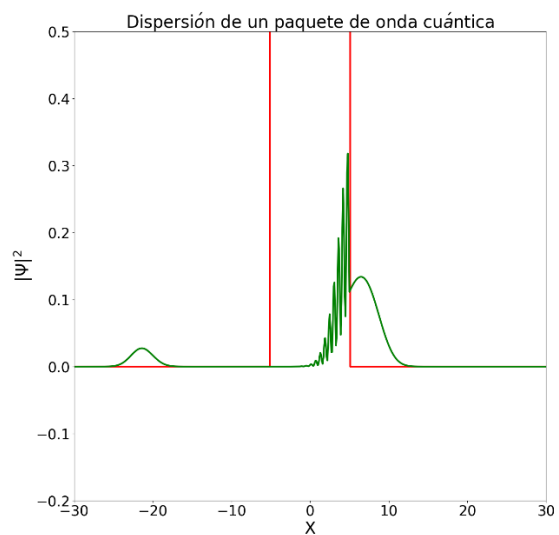
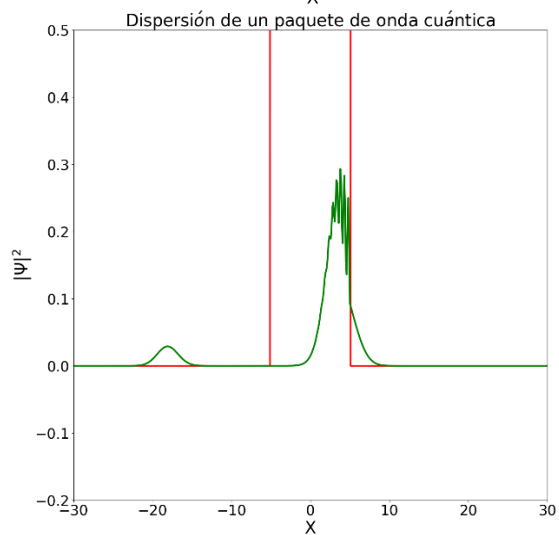
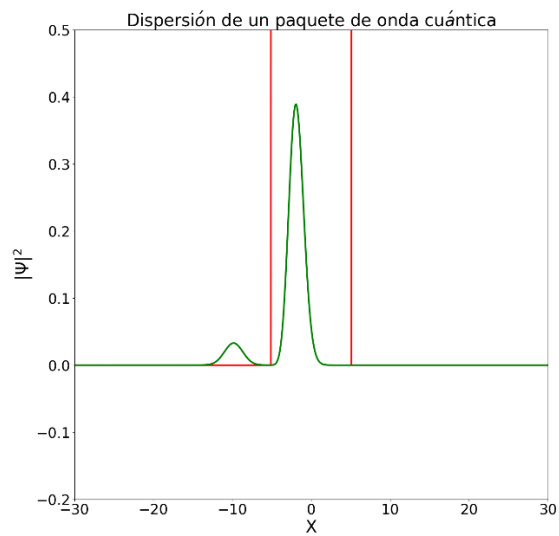
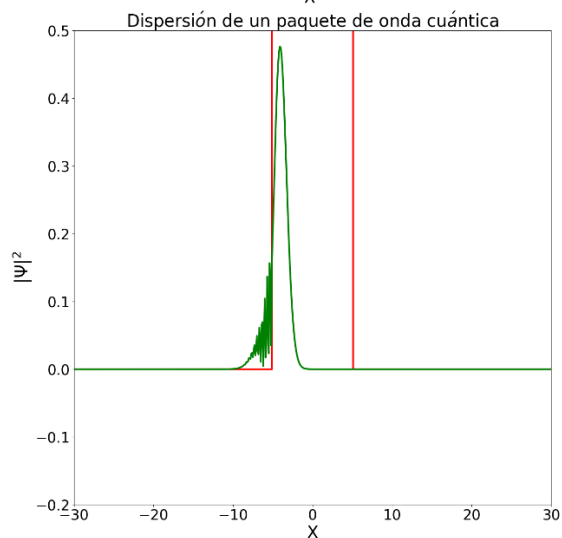
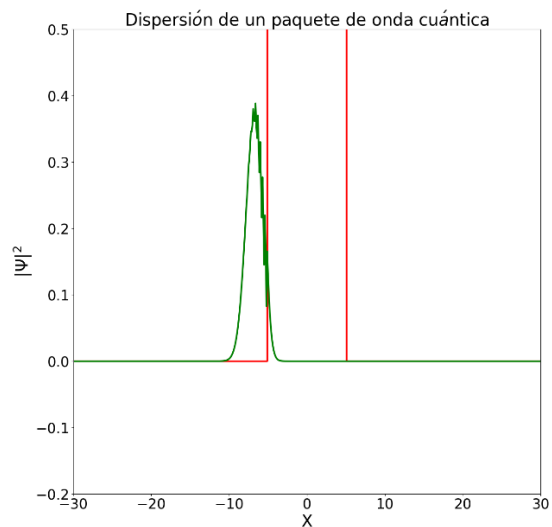
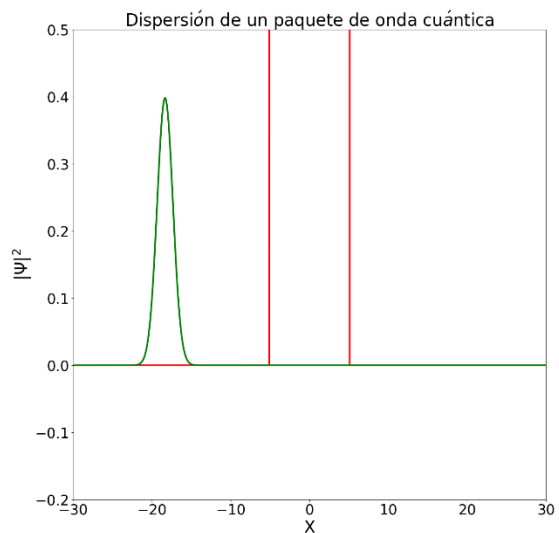


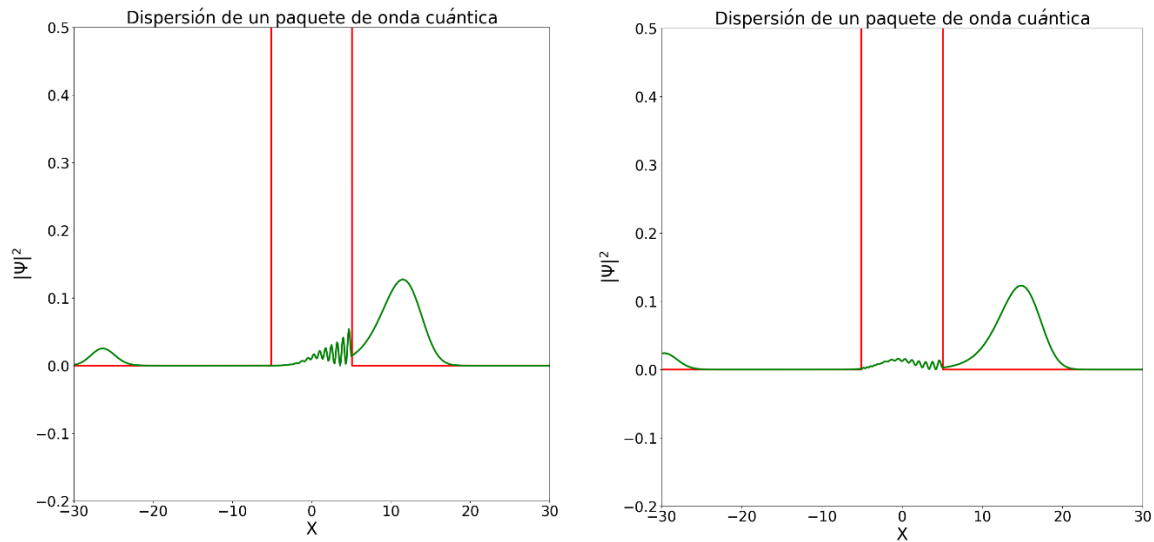
Caso 2: El vídeo llamado gauss_seidel_v-50_a5 muestra una barrera de potencial con parámetros $a = 5$, $V_0 = -50$, $x_0 = -20$. Es decir, el paquete de ondas inicial se centra en -20. $\sigma = 1$ y $k_0 = 10$. La cuadrícula espacial se extiende en el rango $[-x_{\max}, x_{\max}]$, con $x_{\max} = 100$ y los nodos espaciados regularmente en $h_x = 5 \cdot 10^{-2}$. La propagación se lleva a cabo hasta $t_{\max} = 5$, con un paso de tiempo $h_t = 5 \cdot 10^{-3}$.





Caso 3: El vídeo llamado gauss_seidel_v30_a10 muestra una barrera de potencial con parámetros $a = 10$, $V_0 = 30$, $x_0 = -20$. Es decir, el paquete de ondas inicial se centra en -20. $\sigma = 1$ y $k_0 = 10$. La cuadrícula espacial se extiende en el rango $[-x_{\max}, x_{\max}]$, con $x_{\max} = 100$ y los nodos espaciados regularmente en $h_x = 5 \cdot 10^{-2}$. La propagación se lleva a cabo hasta $t_{\max} = 5$, con un paso de tiempo $h_t = 5 \cdot 10^{-3}$.





Podemos entonces notar que cuando el potencial es negativo, la fracción del paquete de ondas transmitido es mucho mayor que el reflejado, pero esto cambia si el potencial es positivo; en el caso 1 y 2, aunque el ancho era el mismo, las fracciones transmitidas y reflejadas varían mucho. En el caso 1, se transmite muy poco y además se puede notar que la longitud de la onda transmitida es mucho mayor que la inicial, además de esto, la cresta de la onda es casi nula.

En el caso 2, la longitud de la onda transmitida es mayor que la inicial nuevamente y, a diferencia de los otros dos casos, la reflejada se divide en dos ondas. Por último, para el caso 3, el potencial es menor que en el caso 1, pero el ancho es mayor. Esto implica que haya mas fracción de onda transmitida a diferencia del caso 1; se puede notar también que la longitud de onda de la fracción transmitida es mucho que mayor que la inicial, lo cual concuerda con la teoría. También se puede notar una variación en la cresta de la onda transmitida, que a diferencia del caso 1 es mucho mayor y se puede apreciar cierta “altura”.

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.
- Método de Gauss-Seidel Wikipedia.