Universidad Nacional Autónoma de México

Facultad de Ciencias

Introducción a la Física Cuántica

Solución númerica a la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo

Cerritos Lira, Carlos
Facultad de Ciencias UNAM, México
carloscerlira@ciencias.unam.mx

4 de noviembre de 2019

Resumen

Se resolvió numéricamente la ecuación dependiente del tiempo de Schrödinger usando el método de euler y $RK4$, se analizo la relación entre parámetros para obtener estabilidad numérica en cada método, se obtuvo la solución para el potencial de una y dos rendijas, donde se conocen los resultados cualitativos experimentales(patrón de interferencia), pero no tienen solución analítica. La implementación del algoritmo se hizo en C++, se puede encontrar en: $https://github.com/carloscerlira/Schrodinger-equation-numerical-solution$ y en el apéndice A de este proyecto.

Palabras clave: solución numérica, ecuación de Schrödinger, experimento de la doble rendija

1. Introducción

1.1. Ecuación de Schrödinger

Nuestro problema inicial es asignar la probabilidad de encontrar un electrón en una región A, cuando un potencial $V(\hat{x})$ actúa sobre esté. En mecánica cuántica la función de onda $\Psi(\hat{x}, t)$ satisface:

$$P(A) = \int_A |\Psi(\vec{x}, t)|^2 d\vec{x}$$

La función de onda debe satisfacer la ecuación de Schrödinger:

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

donde $\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + V(\hat{x})$, $\hat{p} = -i\hbar\nabla$.

1.2. Runge-Kutta 4

Supongamos que queremos resolver el problema con valor inicial:

$$\frac{\partial y}{\partial t}(t) = f(t, y(t))$$

$$y(t_0) = y_0$$

queremos encontrar el valor de y en:

$$t_n = t_0 + nh_t$$

definimos:

$$y^n = y(t_n)$$

los coeficientes de Range-Kutta se definen como:

$$\begin{aligned}
a(t) &= F(t, f(t)) \\
b(t) &= F(t + \frac{h_t}{2}, y(t) + \frac{h_t}{2} a(t)) \\
c(t) &= F(t + \frac{h_t}{2}, y(t) + \frac{h_t}{2} b(t)) \\
d(t) &= F(t + \frac{h_t}{2}, y(t) + h_t c(t))
\end{aligned}$$

se tiene:

$$y^{n+1} \approx y^n + \frac{h_t}{6}(a^n + 2b^n + 2c^n + d^n)$$

2. Desarrollo

2.1. Runge-Kutta 4 aplicado a Schrödinger

Ajustamos nuestras unidades de medición para tener $\hbar = 1$, $m = 1$, la ecuación de Schrödinger se ve como:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t}(x, t) = i\left(\frac{1}{2}\nabla^2 - V(x)\right)\Psi(x, t)$$

sean:

$$x_k = x_0 + kh_x$$
$$y_j = y_0 + jh_y$$

Definimos:

$$\Psi_{k,j}(t) = \Psi(x_k, y_j, t)$$

sea:

$$t_n = t_0 + nh_t$$

Nuestro objetivo es conocer:

$$\Psi^n_{k,j} = \Psi_{k,j}(t_n)$$

Dada la condición inicial:

$$\Psi^0_{k,j}$$

Comenzamos discretizando ∇^2 como:

$$\begin{aligned}
\nabla^2 \Psi_{k,j}(t_n) = &\frac{\Psi^n_{k+1,j} - 2\Psi^n_{k,j} + \Psi^n_{k-1,j}}{h_x^2} \\
&+ \frac{\Psi^n_{k,j+1} - 2\Psi^n_{k,j} + \Psi^n_{k,j-1}}{h_y^2}
\end{aligned}$$

Se tiene entonces $\Psi_{k,j}$ satisface la ecuación:

$$\frac{\partial \Psi_{k,j}}{\partial t}(t) = F_{k,j}(t, \Psi_{k,j}(t))$$

donde:

$$F_{k,j}(t_n, \Psi_{k,j}(t)) = i\left(\frac{1}{2}\nabla^2 - V(x_k, y_j)\right)\Psi_{k,j}(t)$$

Aplicando RK4 a la función $\Psi_{k,j}(t)$, obteniendo los coeficientes:

$$\begin{aligned}
a_{k,j}(t) &= i\left(\frac{1}{2}\nabla^2 - V(x_k, y_j)\right)\Psi_{k,j}(t) \\
b_{k,j}(t) &= i\left(\frac{1}{2}\nabla^2 - V(x_k, y_j)\right)\left(\Psi_{k,j}(t) + \frac{h_t}{2}a_{k,j}(t)\right) \\
c_{k,j}(t) &= i\left(\frac{1}{2}\nabla^2 - V(x_k, y_j)\right)\left(\Psi_{k,j}(t) + \frac{h_t}{2}b_{k,j}(t)\right) \\
d_{k,j}(t) &= i\left(\frac{1}{2}\nabla^2 - V(x_k, y_j)\right)\left(\Psi_{k,j}(t) + h_t c_{k,j}(t)\right)
\end{aligned}$$

Finalmente:

$$\Psi_{k,j}^{n+1} \approx \Psi_{k,j}^{n} + \frac{h_t}{6}(a_{k,j}^{n} + 2b_{k,j}^{n} + 2c_{k,j}^{n} + d_{k,j}^{n})$$

2.1.1. Condiciones iniciales

Las condiciones iniciales son:

$$\Psi(\hat{x}, 0) = e^{-\left(\frac{|\hat{x}-\hat{r_0}|}{2\sigma}\right)^2} (sin(xk) + icos(xk))$$

Esto es, una onda gaussiana con un momento k en la dirección x.
Las condiciones de fronteras son:

$$\Psi_{0,j}^{n} = 0 \quad \Psi_{n_x,j}^{n} = 0$$
$$\Psi_{k,0}^{n} = 0 \quad \Psi_{k,n_y}^{n} = 0$$

Para cada punto (x_k, y_j), se normalizo el valor $|\Psi(x_k, y_k)|^2$, esto es a cada punto se le asigno de forma lineal un valor entre $[0, 1]$, siendo 1 el valor máximo, en este caso $\hat{r_0}$, en base a este número se asigno un color a cada píxel, siendo el 1 verde brillante y 0 negro, a continuación se muestra la función de onda para $n_t = 0$:

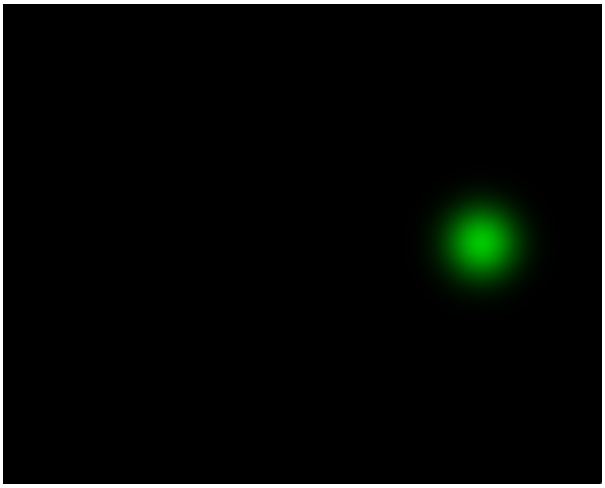

Figura 1: Función de onda al tiempo $\mathrm{n}_t = 0$

3. Resultados

3.1. Potencial para una rendija

Se tiene un potencial de la forma:

$$V(x, y) = \begin{cases} \infty & \text{si } -\delta_x < x < \delta_x \text{ y } y_0 < y < -\delta_y \text{ o } \delta_y < y < y_{n_y} \\ 0 & \text{de otra forma} \end{cases}$$

Los parámetros utilizados son:

$$\begin{array}{lll} n_x = 400 & n_y = 400 & n_t = 3000 \\ h_x = 0.01 & h_y = 0.01 & h_t = 5 \times 10^{-5} \\ \delta_x = 0.1 & \delta_y = 0.1 & (x_0, y_0) = (-2, -2) \\ r_0 = (1, 0) & & \end{array}$$

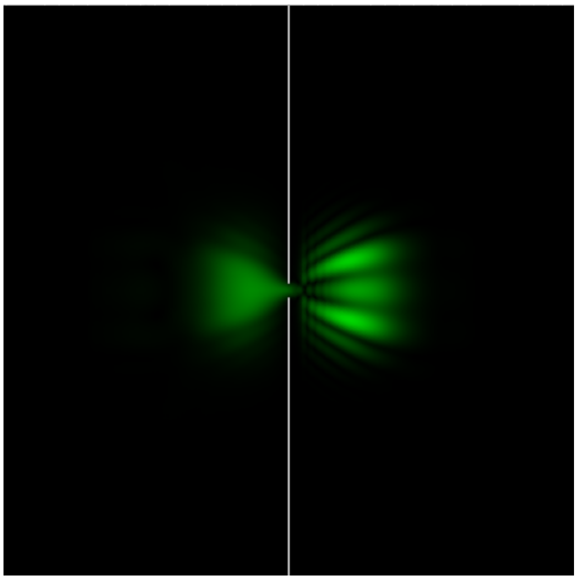

Figura 2: Función de onda al tiempo $\mathrm{n}_t = 3500$

3.2. Potencial para dos rendijas

Se utilizaron los mismos parámetros de una sola rendija, el único cambio es el potencial:

$$V(x, y) = \begin{cases} \infty & \text{si } -\delta_x < x < \delta_x \text{ y } y_0 < y < -\delta_y \\ \infty & \text{si } -\delta_x < x < \delta_x \text{ y } -\frac{\delta_y}{2} < y < \frac{\delta_y}{2} \\ \infty & \text{si } -\delta_x < x < \delta_x \text{ y } \delta_y < y < y_{n_y} \\ 0 & \text{de otra forma} \end{cases}$$

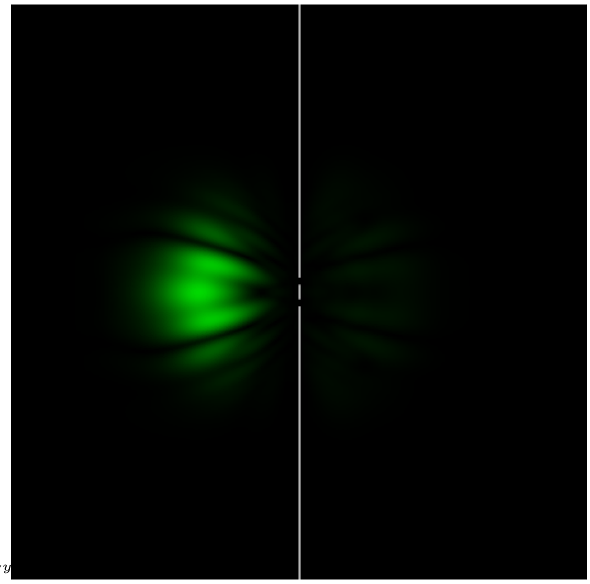

Figura 3: Función de onda al tiempo $n_t = 3000$

4. Discusión

Como trabajo futuro se recomienda realizar en paralelo el algoritmo, este era la meta final al del proyecto, sin embargo no se pudo realizar debido al tiempo.

Se recomienda implementar un potencial gaussiano y comparar los resultados.

5. Conclusiones

1. Al usar $RK4$ para resolver la ecuación de Schrodinger se debe de tener $h_t < h_x^2$ para obtener estabilidad numérica.
2. Al usar euler para resolver la ecuación de Schrodinger se debe de tener $h_t < h_x^6$ para obtener estabilidad númerica.
3. Usar $RK4$ para resolver la ecuación de Schrodinger en dos dimensiones tiene una complejidad $O(n_t \cdot n_x \cdot n_y)$.

Referencias

[1] Wikipedia (October 30), Schrodinger equation, Retrived from https://en.wikipedia.org/wiki/Schrodinger_equation

[2] Wikipedia (October 30), Runge-Kutta methods, Retrived from https://en.wikipedia.org/wiki/Runge–Kutta_methods