Equação de Schrodinger independente do tempo via Numerov-Cooley

PPGFIS

Franklin Ferreira da Silva Filho - franklin.ferreira@ufpe.br

Universidade Federal de Pernambuco

14 de dezembro de 2022

Curvas

- Curva parametrizada

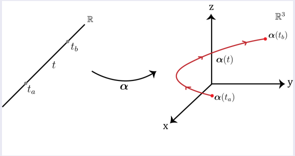
$$\alpha(t) = (x(t), y(t), z(t)). \qquad (1)$$

- Função comprimento:

$$s(t) = \int |\alpha'(t)| dt \qquad (2)$$

- Parametrização por comprimento de arco (p.c.a.):

$$\boldsymbol{\alpha}(t(s)), \text{ com } \boldsymbol{\alpha}'(s) = 1 \, \forall \, s. \qquad (3)$$



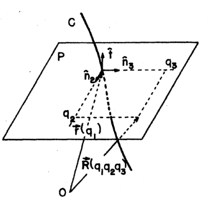
Formalismo de confinamento quântico

R. C. T. da Costa, *Phys. Rev. A* **23**, 1982 (1981)

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V_{geo} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{ds^2} - \frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\kappa(s)^2}{4} \tag{4}$$

$$\varepsilon = \frac{2\mu E}{\hbar^2},\ \mathcal{V} = -\frac{\kappa(s)^2}{4} \tag{5}$$

$$\psi'' + (\varepsilon - \mathcal{V})\psi = 0 \tag{6}$$



Problema de Valor de Contorno

Temos um problema de valor de contorno,

$$\psi''(x) + P(x)\psi(x) = 0, \qquad \psi(x_0) = 0,\ \psi(x_N) = b \tag{7}$$

Considere agora o seguinte problema de valor inicial,

$$v''(x) + P(x)v(x) = 0, \qquad v(x_0) = 0,\ v'(x_0) = s \tag{8}$$

Seja $w(x) = \theta v(x)$ que atenda $w(x_N) = b$. Para isso $\theta = b/v(x_N)$. Então,

$$\psi(x) = w(x) = \frac{b}{v(x_N)} v(x) \tag{9}$$

ainda,

$$\psi_1 = \psi'(x_0)\Delta x + \psi_0 \tag{10}$$

Numerov

Expandindo usando série de Taylor,

$$\psi(x+\Delta x) = \psi(x)+\psi'(x)\Delta x+\frac{1}{2}\psi''(x)\Delta x^2+\frac{1}{6}\psi^{(3)}(x)\Delta x^3+\frac{1}{24}\psi^{(4)}(x)\Delta x^4+\ldots$$

$$\psi(x-\Delta x) = \psi(x)-\psi'(x)\Delta x+\frac{1}{2}\psi''(x)\Delta x^2-\frac{1}{6}\psi^{(3)}(x)\Delta x^3+\frac{1}{24}\psi^{(4)}(x)\Delta x^4+\ldots$$

$$\psi(x+\Delta x)+\psi(x-\Delta x) = 2\psi(x)+\psi''(x)\Delta x^2+\frac{1}{12}\psi^{(4)}(x)\Delta x^4. \tag{11}$$

mas,

$$\psi''(x) = -(V-E) = -P(x)\psi(x), \tag{12}$$

$$\psi^{(4)}(x) = \frac{d^2\psi''(x)}{dx^2} = \frac{\psi''(x+\Delta x)+\psi''(x-\Delta x)-2\psi''(x)}{\Delta x^2}. \tag{13}$$

Numerov

Fazendo as substituições,

$$\psi(x+\Delta x)\left(1+P(x+\Delta x)\frac{\Delta x^2}{12})\right)+\psi(x-\Delta x)\left(1+P(x-\Delta x)\frac{\Delta x^2}{12}\right)$$
$$=2\psi(x)\left(1-5P(x)\frac{\Delta x^2}{12}\right). \quad (14)$$

Discretize e defina $k=\Delta x^2/12$,

$$\psi_{j+1}=\frac{2\psi_j(1-5kP_j)-\psi_{j-1}(1+kP_{j-1})}{(1+kP_{j+1})}. \quad (15)$$

Matching Method

- Poderíamos chutar E e resolver a equação de Schrödinger via Numerov até que ela atendesse o contorno em x_N, porém esse método não é o mais adequado.
- Multiple shooting: resolver indo para direita até m, resolver indo para esquerda até m e exigir continuidade da função de onda e de sua derivada nesse ponto.

1. $\psi^r_m = \psi^l_m \implies \psi = \psi^r = C\psi^l \implies C = \psi^r_m/\psi^l_m$
2. $\psi'^r_m = \psi'^l_m \implies g(E) = \psi^E_{m+1} + \psi^E_{m-1} - 2\psi^E_m = 0$

Correção de Cooley

A cada passo faremos correções do tipo

$$E^{k+1} = E^{k} + \Delta E, \tag{16}$$

Usando teoria de pertubação,

$$\Delta E = E - E_0 = \frac{\langle \psi^{E_0} | H - E_0 | \psi^{E_0} \rangle}{\langle \psi^{E_0} | \psi^{E_0} \rangle}, \tag{17}$$

$$\Delta E = \frac{\psi_m^{E_0 *}}{\sum_j |\psi_j^{E_0}|^2} \left[-\frac{1}{2} \frac{Y_{m+1}^{E_0} + Y_{m-1}^{E_0} - 2Y_m^{E_0}}{\Delta x^2} \right] + (V_m - E_0)\psi_m^{E_0}, \tag{18}$$

onde,

$$Y_m = (1 + kP_m)\psi_m. \tag{19}$$

Código

```
def numerov(E, V):
    k = (dx**2)/12          # Numerov Parameter
    s = s_prime = 1e-6      # Free shooting parameters (inward and backward)

    psi = np.zeros(N)
    psi[0] = 0.0
    psi[1] = s
    psi[-2] = s_prime

    for iteration in range(1000):
        P = E-V

        # Forward integration to matching point m
        for i in range(1, N-1):
            psi[i+1] = (2*psi[i]*(1 - 5*k*P[i]) - psi[i-1]*(1 + k*P[i-1]))/(1 + k*P[i+1])
            if psi[i] < psi[i-1]:
                m = i+1
                psi_out_m = psi[m]
                break

        # Backward integration to matching point
        for i in range(N-2, m, -1):
            psi[i-1] = (2*psi[i]*(1 - 5*k*P[i]) - psi[i+1]*(1 + k*P[i+1]))/(1 + k*P[i-1])

        # Matching for continuity of psi
        psi[:m] = psi[:m]/psi_out_m
        psi[m:] = psi[m:]/psi[m]

        # Cooley correction
        Y = (1+k*P)*psi
        dE = (psi[m].conj()/np.sum(np.abs(psi)**2))*(-0.5*(Y[m+1]-2*Y[m]+Y[m-1])/(dx**2)+(V[m]-E)*psi[m])
        E = E + dE

        if np.abs(dE) < 1e-6:
            print(f'Converged after {iteration+1} steps.')
            break

        # Normalization
        A = simps(psi**2, x)
        psi = psi/A

    return psi, E
```

Catenária

Parametrização,

$$\boldsymbol{\alpha}(s) = \left(a\,\mathrm{arcsinh}\,(s/a)\,,\sqrt{s^2 + a^2}\right)\,,\ s \in \mathbb{R} \tag{20}$$

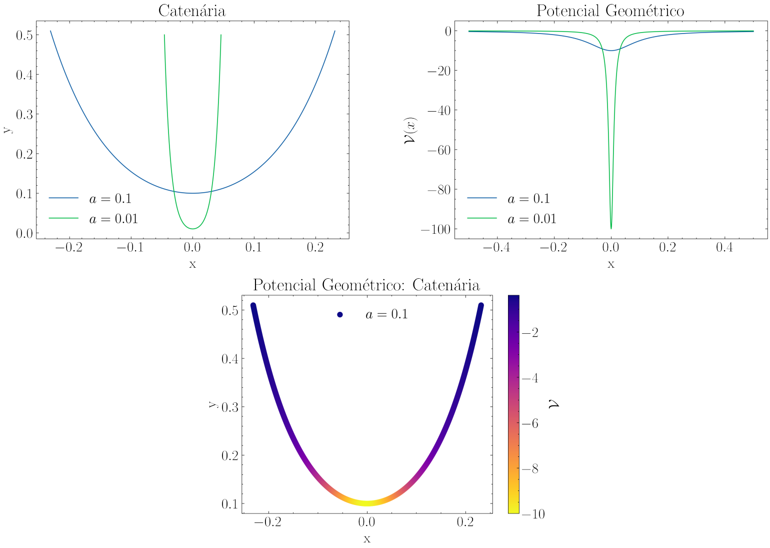
Curvatura,

$$\kappa(s) = \frac{a}{a^2 + s^2} \tag{21}$$

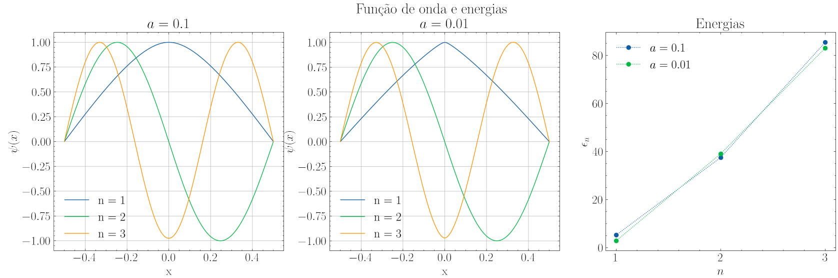
Equação de Schrödinger,

$$\psi'' + \left[\frac{a^2}{4(a^2 + s^2)^2} + \varepsilon\right]\psi = 0 \tag{22}$$

Catenária - Curva



Catenária - Função de onda e energias



Catenária - Densidade de probabilidade