

Solución numérica de la Ecuación de Schroodinger en 1D

1 Teoría

1.1 Discretización de la ecuación de Schrödinger

Los dos métodos numéricos que vamos a considerar tienen como punto de partida la discretización de la ecuación de Schrödinger, es decir, la transformación de una ecuación diferencial en un problema de álgebra lineal.

Para ello, el punto de partida es describir la función de onda en un retículo de puntos equidistantes:

$$\psi(x) \rightarrow \psi(\ell a) \quad (1)$$

donde n son números enteros y a es la distancia entre puntos. Consideramos que x está constreñida dentro de una celda de simulación $-\frac{L}{2} < x < \frac{L}{2}$, con $a \ll L$.

Si consideramos un retículo de N puntos, la función de onda queda descrita por un vector de dimensión N y el espaciado de los puntos es:

$$a = \frac{L}{N-1} \quad (2)$$

Por ejemplo, si elegimos $N = 2$, un punto en cada extremo del segmento, tenemos $a = L$. Usualmente tomamos $N > 100$, de forma que $a \ll L$.

El siguiente paso es escribir la versión discreta de la ecuación de Schrödinger. Para ello escribimos en primer lugar la derivada primera de una función como:

$$\frac{d\psi(x)}{dx} \simeq \frac{\psi((\ell+1)a) - \psi(\ell a)}{a} \quad (3)$$

que no es otra cosa que la definición de derivada. Lógicamente, la calidad de esta aproximación dependerá de que tomemos a suficientemente pequeño, es decir, N suficientemente grande.

La expresión de la derivada segunda se obtiene derivando el lado derecho de (3):

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} \simeq \frac{(\psi((\ell+1)a) - \psi(\ell a)) - (\psi(\ell a) - \psi((\ell-1)a))}{a^2} \quad (4)$$

donde hemos derivado el primer término "a izquierdas" y el segundo "a derechas" con el fin de obtener una expresión simétrica:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} \simeq \frac{\psi((\ell+1)a) - 2\psi(\ell a) + \psi((\ell-1)a)}{a^2} \quad (5)$$

Vemos así que la derivada segunda conecta la función de onda en un punto n con la función de onda en los dos puntos adyacentes, $\ell \pm 1$.

En adelante adoptamos la notación:

$$\psi(\ell a) \rightarrow \psi_\ell \quad (6)$$

Igualmente, el potencial es discretizado,

$$V(x) \rightarrow V(\ell a) \rightarrow V_\ell \quad (7)$$

Escribimos la ecuación de Schrödinger en una dimensión como:

$$-\frac{\hbar^2}{2ma^2} (\psi_{\ell+1} - 2\psi_\ell + \psi_{\ell-1}) + V_\ell \psi_\ell = E_n \psi_\ell \quad (8)$$

donde E_n son las energías. Resulta conveniente definir la escala de energía:

$$\epsilon_0 = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \quad (9)$$

y las cantidades adimensionales:

$$\tilde{V}_\ell \equiv \frac{V_\ell}{\epsilon_0} \quad (10)$$

y

$$\tilde{E}_n \equiv \frac{E_n}{\epsilon_0} \quad (11)$$

Con estas definiciones, podemos escribir la ecuación de Schrödinger como:

$$\boxed{-(\psi_{\ell+1} - 2\psi_\ell + \psi_{\ell-1}) + \tilde{V}_\ell \psi_\ell = \tilde{E}_n \psi_\ell} \quad (12)$$

Esta ecuación es el principal resultado de esta sección. Es conveniente darse cuenta que (12) describe una ecuación matricial tridiagonal:

$$\begin{pmatrix} 2 + \tilde{V}_0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2 + \tilde{V}_1 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 + \tilde{V}_2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 2 + \tilde{V}_3 & -1 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_0 \\ \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \dots \end{pmatrix} = \tilde{E}_n \begin{pmatrix} \psi_0 \\ \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \dots \end{pmatrix} \quad (13)$$

2 Cálculo numérico de estados ligados

Para los estados ligados, el procedimiento numérico consiste en la diagonalización numérica de la ecuación de Schrödinger discretizada 12. Con el objetivo de evitar los problemas asociados a la implementación de la derivada segunda en los bordes, consideramos estados cuya función de onda está localizada en el centro de la celda de simulación. Esto se consigue considerando un valor de L grande, potenciales que confinan en la zona central, y estudiando estados de baja energía.

Por tanto, el método de solución numérica tiene los siguientes pasos:

1. Elección del valor de L , que define el tamaño de la celda de simulación. En los códigos de python la celda de simulación está definida entre $-x_{max}$ y $+x_{max}$. Por tanto $L = 2 \mathbf{xmax}$.
2. Elección del valor de N , que define la precisión del retículo, a . En los códigos estas son las variables \mathbf{N} y $\mathbf{dx} = \frac{2\mathbf{xmax}}{\mathbf{N}-1}$. Los errores numéricos se minimizan al aumentar N , lo que por su parte aumenta el tiempo de cálculo.
3. Escribir la versión discreta y adimensional del potencial, que viene dada por un vector de dimensión N , \tilde{V}_n y escribir la matriz tridiagonal asociada a la segunda derivada. En el código estas tareas las realiza la función *ham*. Uno de los argumentos de *ham* es una función, *potfun(x,param)*. En el código se proporcionan n varios ejemplos.
4. Diagonalizar la ecuación 13, numéricamente. Para ello empleamos la función de la librería de python *scipy.linalg.eigvalsh(mat)* donde *mat* es la matriz generada por la función *ham*. Esto nos proporciona las energías y las funciones de onda normalizadas.

3 Solución numérica de problema de scattering en 1D

En esta esta sección discutimos un método numérico de solución del problema de scattering. El punto de partida es la ecuación de Schrödinger (12) que ahora escribimos cambiando los términos de orden:

$$\psi_{\ell-1} = (\tilde{V}_\ell - \tilde{E}_n + 2) \psi_\ell - \psi_{\ell+1} \quad (14)$$

Esta ecuación nos permite averiguar la función de onda en el sitio $\ell - 1$ si conocemos la función de onda en los sitios $\ell + 1$ y ℓ . Para resolver problemas de scattering, podemos usar este resultado de la siguiente forma. Tal y como hacemos cuando resolvemos el problema analíticamente, dividimos el

espacio en 3 regiones. En las regiones *I* y *III* el potencial se anula. En la región *II*, comprendida entre $x_m = \ell_m a$ y $x_M = \ell_M a$ el potencial es no nulo.

La función de onda en las regiones *I* y *III* se suele escribir :

$$\begin{aligned}\psi(x) &= e^{ikx} + r_k e^{-ikx} & x < x_1 \\ \psi(x) &= t_k e^{ikx} & x > x_2\end{aligned}\tag{15}$$

donde k se relaciona con la energía E y la masa m de la partícula a través de la relación usual

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\tag{16}$$

Ahora dividimos la ecuación (15) por t_k y obtenemos

$$\begin{aligned}\psi(x) &= \frac{1}{t_k} e^{ikx} + \frac{r_k}{t_k} e^{-ikx} & x < x_1 \\ \psi(x) &= e^{ikx} & x > x_2\end{aligned}\tag{17}$$

Esta expresión nos proporciona la función de onda en la región *III* y nos permite usar de forma iterativa la ecuación (14) hasta obtener, de forma numérica, la función de onda en la región *I*, ψ_{ℓ_1} . Tenemos por tanto la ecuación que relaciona el valor obtenido numéricamente ψ_{ℓ_1} con la expresión analítica:

$$\psi_{\ell_1} = \frac{1}{t_k} e^{ikx_1} + \frac{r_k}{t_k} e^{-ikx_1}\tag{18}$$

Esta ecuación tiene dos incógnitas. Como podemos evaluarla en varios puntos, podemos obtener más ecuaciones. Por ejemplo, derivamos ambos lados de la ecuación:

$$\frac{\psi_{\ell_1} - \psi_{\ell_1-1}}{a} = ik \left(\frac{1}{t_k} e^{ikx_1} - \frac{r_k}{t_k} e^{-ikx_1} \right)\tag{19}$$

Escribimos esta ecuación como:

$$\frac{\psi_{\ell_1} - \psi_{\ell_1-1}}{ika} = \frac{1}{t_k} e^{ikx_1} - \frac{r_k}{t_k} e^{-ikx_1}\tag{20}$$

y la sumamos a (18) para obtener

$$\frac{\psi_{\ell_1} - \psi_{\ell_1-1}}{ika} + \psi_{\ell_1} = \frac{2}{t_k} e^{ikx_1}\tag{21}$$

que nos permite obtener:

$$t_k = \frac{2e^{ikx_1}}{\frac{\psi_{\ell_1} - \psi_{\ell_1-1}}{ika} + \psi_{\ell_1}}\tag{22}$$

donde los valores de ψ_{ℓ_1} y ψ_{ℓ_1-1} son obtenidos numéricamente.

Finalmente, el coeficiente de transmisión se obtiene calculando

$$T(E) = |t_k(E)|^2\tag{23}$$

3.1 Resumen del método

1. Elección de los parametros de la celda de simulación, x_1 , x_2 , L , N .
2. Definición de la función $V(x)$.
3. Cálculo de t_k por el método de iteración
4. Cálculo de $T(E)$.

La función de python *trans* implementa estos pasos.

A Chequeo analítico

A.1 Condiciones de contorno de paredes duras

Consideremos el problema de la ecuación de Schrödinger con condiciones de contorno de paredes duras, es decir $\psi(x=0) = \psi(x=L) = 0$. Proponemos funciones de onda

$$\psi_\ell^k = \sin(k_n \ell a) \quad (24)$$

La condición de nulidad en $\ell = 0$ se cumple automáticamente. En cambio, la anulacón de la función de onda en $\ell = N - 1$ implica:

$$k_n(N - 1)a = \pi n \quad (25)$$

donde $n = 1, 2, 3, \dots$. Como $L = (N - 1)a$ podríamos escribir $k_n = \frac{\pi n}{L}$.

Ahora comprobemos si las funciones de onda 24 cumplen la ec. 12, con $V = 0$,

$$-(\sin(k_n(\ell + 1)a) - 2\sin(k_n \ell a) + \sin(k_n(\ell - 1)a)) = \tilde{E}_k \sin(k_n \ell a) \quad (26)$$

Ahora usamos que $\sin(\alpha \pm \beta) = \sin \alpha \cos \beta \pm \cos \alpha \sin \beta$ de forma que tenemos:

$$-(2\sin(k_n \ell a) \cos(k_n a) - 2\sin(k_n \ell a)) = \tilde{E}_k \sin(k_n \ell a) \quad (27)$$

Ignorando lo que ocurre en los bordes, vemos que la ecuación (27) se satisface si:

$$\tilde{E}_k = 2(1 - \cos k_n a) \quad (28)$$

Ahora tenemos que comparar este espectro con:

$$E^{(HW)} =_n = \frac{\hbar^2}{2mL^2} (\pi n)^2 \quad (29)$$

con $n = 1, 2, 3, \dots$

$$\tilde{E}_k = 2(1 - \cos k_n a) \simeq k_n^2 a^2 \quad (30)$$

Ahora usamos que las ecuaciones (9), (11) y (25) para escribir:

$$E_k \simeq \frac{\hbar^2}{2ma^2} \left(\frac{\pi n}{(N - 1)a} \right)^2 a^2 = \frac{\hbar^2}{2mL^2} (\pi n)^2 \quad (31)$$

El siguiente término no nulo en la expansión de Taylor es $\frac{(k_n a)^4}{4!}$. Por tanto, el error viene dado por:

$$\delta = \epsilon_0 \frac{(k_n a)^4}{4!} = \frac{\hbar^2}{2ma^2} (k_n a)^2 \frac{(k_n a)^2}{4!} \quad (32)$$

Ahora usamos $k_n a = \frac{\pi n}{N - 1}$, o $k_n = \frac{\pi n}{L}$ escribimos

$$\delta = \frac{\hbar^2}{2mL^2} (\pi n)^2 \frac{(k_n a)^2}{4!} = E_n^{HW} \frac{(k_n a)^2}{4!} = E_n^{HW} \frac{(\pi n)^2}{4(N - 1)^2!} \propto N^{-2} \quad (33)$$

A.2 Chequeo de consistencia

Podemos comparar los resultados del método numérico con soluciones de problemas para los que disponemos de fórmulas analíticas. Tenemos dos casos fáciles de implementar:

- Partícula cuántica confinada en un pozo de longitud L . El espectro de energía viene dado por

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2mL^2} n^2 \pi^2 \quad (34)$$

y las correspondientes funciones de onda normalizadas por:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \quad (35)$$

donde hemos considerado que el las paredes del pozo están en $x = 0$ y $x = L$

- Oscilador armónico. Tenemos una partícula cuántica de masa m confinada en un potencial $V(x) = \frac{1}{2} kx^2$. Definimos $\omega^2 = \frac{k}{m}$. El espectro de enegía es:

$$E_n = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (36)$$

con $n = 0, 1, 2, \dots$

B Comparación con resultado analítico para problemas de scattering

La transmisión de la barrera cuadrada de anchura L , que viene dada por la fórmula, y altura V_0 :

$$\begin{aligned} T(E) &= \frac{1}{1 + \frac{V_0^2 \sinh(k_b L)}{4E(V_0 - E)}} \quad E > V_0 \\ T(E) &= \frac{1}{1 + \frac{V_0^2 \sin(k_b L)}{4E(V_0 - E)}} \quad E < V_0 \\ T(E) &= \frac{1}{1 + \frac{mL^2 V_0^2}{2\hbar^2}} \quad E = V_0 \end{aligned} \tag{37}$$

donde

$$\begin{aligned} k_b &= \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}} \quad E > V_0 \\ k_b &= \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}} \quad E < V_0 \end{aligned} \tag{38}$$

Podemos comparar las curvas $T(E)$, obtenidas con el resultado del cálculo numérico con el analítico, considerando varios valores de m , d y V_0