

Computación de la Ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo en una dimensión: Método de Crank-Nicholson

V. Mira Ramírez¹

* ¹ Departamento de Física Aplicada – Facultad de Ciencias, Universidad de Alicante (UA), Alicante, España.

27 Octubre de 2024

RESUMEN

En este informe, vamos a resolver la Ecuación de Schrödinger en una dimensión mediante el método numérico de Crank-Nicholson en python. Generalizaremos el problema para cualquier potencial y lo probaremos con distintos potenciales comunes, como el pozo de potencial y el oscilador armónico. Se discutirá la magnitud de los pasos temporales y espaciales así como las condiciones de frontera que garantizan la estabilidad del método. Los resultados obtenidos demuestran la eficacia de este enfoque en la simulación de la mecánica cuántica.

Key words: Ecuación de Schrödinger – Crank-Nicholson – estabilidad numérica – condiciones de frontera – modelización cuántica

1 MARCO TEÓRICO

1.1 Ecuación de Schrödinger

Vamos a recordar la expresión de la Ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo en una dimensión (1a). Y tomando $\hbar = m = 1$ obtenemos (1b)

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}(x, t) + V(x)\psi(x, t) \quad (1a)$$

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t}(x, t) = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}(x, t) + V(x)\psi(x, t) \quad (1b)$$

Observamos como multiplicando por i a ambos lados y usando la propiedad de que $1/i = -i$ podemos llegar a una ecuación análoga a la de la Ecuación de Difusión (2a) solo que con una función y constante de difusión D compleja y un término que multiplica al potencial (2b).

$$\frac{\partial T}{\partial t}(x, t) = D \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}(x, t) \quad (2a)$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial t}(x, t) = \frac{i}{2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}(x, t) - iV(x)\psi(x, t) \quad (2b)$$

Ambas ecuaciones son ecuaciones en derivadas parciales (EDP) y cumplen la condición para ser clasificadas como EDPs parabólicas (3). Este tipo de EDPs suelen ser tratados desde el enfoque de problemas de valor inicial (PVI).

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x \partial t}(x, t) = \frac{\partial^2 T}{\partial t^2}(x, t) = 0 \quad (3a)$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x \partial t}(x, t) = \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2}(x, t) = 0 \quad (3b)$$

Como es predecible, lo que vamos a hacer en este informe es dar un valor a la función de onda ψ en $t = 0$ y calcular y estudiar su comportamiento en tiempos futuros.

1.2 Método de Crank-Nicholson

El método de Crank-Nicholson para la calcular la solución de los PVI de EDP parabólicas se basa utilizar las diferencias temporales hacia atrás (*backwards*) haciendo la media con las diferencias temporales hacia delante (*forwards*).

Denotando f a una función problema de una EDP parabólica, entonces llamamos a su solución F como vemos en 4a

$$\frac{\partial f}{\partial t} = F\left(x, t, f, \frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\right) \quad (4a)$$

$$\frac{f_i^{n+1} - f_i^n}{\Delta t} = \frac{1}{2} (F_i^n(\dots) + F_i^{n+1}(\dots)) \quad (4b)$$

De forma que el método de Crank-Nicholson se basaría en hacer lo que observamos en (4b), donde i se refiere al paso espacial y n al paso temporal.

Aplicándolo ya a la función de onda ψ obtenemos (5b), donde nótese que tenemos un término más que en la ecuación de difusión, asociado al potencial.

$$\frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{\Delta t} = \frac{D}{2(\Delta x)^2} ((T_{i+1}^{n+1} - 2T_i^{n+1} + T_{i-1}^{n+1}) + (T_{i+1}^n - 2T_i^n + T_{i-1}^n)) \quad (5a)$$

$$\begin{aligned} \frac{\psi_i^{n+1} - \psi_i^n}{\Delta t} = & \frac{i}{2(\Delta x)^2} ((\psi_{i+1}^{n+1} - 2\psi_i^{n+1} + \psi_{i-1}^{n+1}) \\ & + (\psi_{i+1}^n - 2\psi_i^n + \psi_{i-1}^n)) \\ & + \frac{1}{2} (V_i^{n+1} \psi_i^{n+1} - V_i^n \psi_i^n) \end{aligned} \quad (5b)$$

Podemos expresar el problema como sistema matricial $\mathbf{A}x = \mathbf{b}$, donde x es un vector columna que representa la función de onda en el siguiente punto temporal, y \mathbf{b} es otro vector columna con los términos independientes, que a su vez puede ser descompuesto en $\mathbf{b} = \mathbf{B}y$, donde y es otro vector columna representando la función de onda en el punto temporal actual.

* Jose Antonio Pons Botella, Clara Dehman, Petros Stefanou, Universidad de Alicante (UA), Departamento de Física Aplicada, Spain

2 DESCRIPCIÓN DEL SCRIPT

2.1 Mallas, condición de estabilidad y contorno

Se define una malla espacial de longitud $L = 1$ con N_x puntos, generando un array de posiciones x con paso $dx = L/N_x$. Para la malla temporal, tomamos un tiempo de simulación $t_{\max} = 1s$ con N_t pasos temporales y paso de tiempo $dt = t_{\max}/N_t$ análogo al espacial.

La condición de estabilidad para la ecuación de Schrödinger se establece mediante el criterio $dt < dx^2/2$, que asegura la estabilidad del método de Crank-Nicolson (no hace falta tener en cuenta la unidad imaginaria). Si esta condición no se cumple el script entra en una excepción y no continúa la ejecución del mismo.

Se toma $N_x = 120$ ya que a partir de 100 puntos la malla espacial tiene una resolución aceptable y al haber fijado $L = 1$ ya tenemos nuestro valor de dx . Como $t_{\max} = 1s$ también ha sido fijado, tenemos también el valor de dt , y podemos imponer un $N_t = 3 \cdot 10^4$ que cumplirá con la condición de estabilidad (a la vez que realiza los cálculos en un tiempo de computación razonable).

Se emplearon condiciones de contorno de Dirichlet, que imponen que la función de onda en los bordes del espacio sea cero, es decir, $\psi(0, t) = \psi(L, t) = 0$ y alternativamente se emplearon unas condiciones de contorno ‘atenuantes’ que multiplican el valor de la función de onda en los extremos por una constante α de forma que se reduce su valor en un $100/\alpha \%$

2.2 Función inicial

La función inicial $\psi_0(x)$ se define como una gaussiana centrada en el punto medio de la malla espacial ($L/2$). Se emplea una gaussiana para simular un paquete de onda inicial estático (6a) o con un término de momento (6b),

$$\psi_0(x) = \exp\left(-\frac{(x - L/2)^2}{2\sigma}\right) \quad (6a)$$

$$\psi_{0p}(x) = \exp\left(-\frac{(x - L/2)^2}{2\sigma^2}\right) + \exp\left(\frac{i(x - L/2)}{2\sigma}\right) \quad (6b)$$

donde σ es la desviación estándar de la gaussiana, que determina la extensión de la función gaussiana. La normalización de $\psi_0(x)$ se asegura mediante el cálculo de la malla, utilizando la integral numérica de la densidad de probabilidad $|\psi_0|^2$ en el espacio $[0, L]$. Esto garantiza que $\int |\psi_0(x)|^2 dx = 1$ en todo el intervalo de tiempo, manteniendo la interpretación probabilística de la función de onda si todo va bien.

2.3 Schrödinger

Vamos a describir la función `schrodinger(V)`, que tomando un potencial nos devuelve la función ψ en la malla temporal y espacial que hayamos definido así como el valor esperado de la posición y la integral de la densidad de probabilidad, que debe ser constante.

La función calcula las matrices **A** y **B** partiendo de la expresión matricial del operador laplaciano, aplica una función gaussiana inicial y pone los bordes a cero (contorno Dirichlet).

Seguidamente se computa la inversa de **A**¹, y resolvemos $x = \mathbf{A}^{-1} \cdot (\mathbf{B} \cdot y)$ con $x = \psi^{n+1}$ e $y = \psi^n$ para cada paso temporal, aplicando en cada iteración las condiciones de contorno correspondientes.

Una vez hemos calculado ψ para todo el rango temporal, podemos pasar a calcular el valor esperado de la posición así como la integral de la densidad de probabilidad, a la que también llamaremos norma.

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi x \psi^* dx = \int_0^L x |\psi|^2 dx \quad (7a)$$

$$\|\psi\| = \int_{-\infty}^{\infty} \psi x \psi^* dx = \int_0^L |\psi|^2 dx \quad (7b)$$

2.4 Plots y animaciones

Las gráficas y animaciones generadas permiten visualizar la evolución de la densidad de probabilidad $|\psi(x, t)|^2$, las partes real e imaginaria de la función de onda, así como el valor esperado de la posición en el potencial que le pasemos a `schrodinger(V)`. Las gráficas que *ploteamos* son:

- **Evolución de $\psi(x, t)$:** Se representa la densidad de probabilidad $|\psi(x, t)|^2$ en función de la posición x para distintos tiempos t , junto a las partes real $\text{Re}(\psi)$ e imaginaria $\text{Im}(\psi)$.

- **Potencial $V(x)$:** Se muestra cuál es la forma y magnitud del potencial aplicado en función de la posición x . (Armónico, Pozo, Escalón, Delta Dirac, Pozo Dirac, Barrera, etc.)

- **Espacio-Tiempo de $|\psi(x, t)|^2$:** Se utiliza un gráfico *imshow* para representar la evolución de la densidad de probabilidad $|\psi(x, t)|^2$ en el tiempo. El eje horizontal corresponde a la posición x y el eje vertical corresponde al tiempo t . Este *plot* nos permite ver cómo y con qué frecuencia se repiten los patrones de la densidad de probabilidad.

- **Norma y valor esperado de la posición:** Se *plotean* la norma $\|\psi(x, t)\|$ (integral de la densidad de probabilidad) y el valor esperado de la posición en función del tiempo. Que la norma se mantenga constante en el tiempo nos asegura la estabilidad del método.

Estas gráficas se generan automáticamente para cada potencial que queramos, si ponemos dos, sólo se generarán las gráficas de dos potenciales gracias a la construcción de una función `generar_animaciones(resultados)` a la cual le pasamos un *array* con los resultados de aplicar la función `schrodinger(V)` a los potenciales que queramos.

¹ Perdemos algo de precisión en comparación a usar métodos de descomposición como `numpy.linalg.solve()` pero ganamos mucha velocidad en los cálculos pues la inversa sólo ha de calcularse una vez para todo el espacio temporal

3 GRÁFICAS

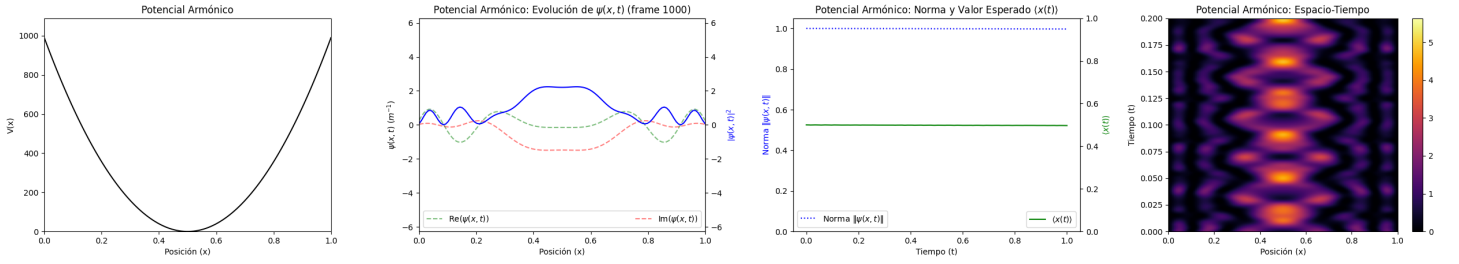


Figura 1: Potencial Armónico

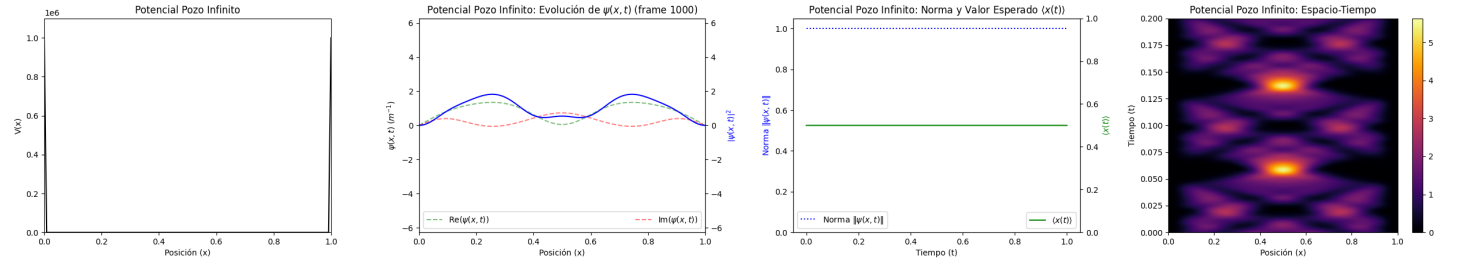


Figura 2: Pozo Infinito de Potencial

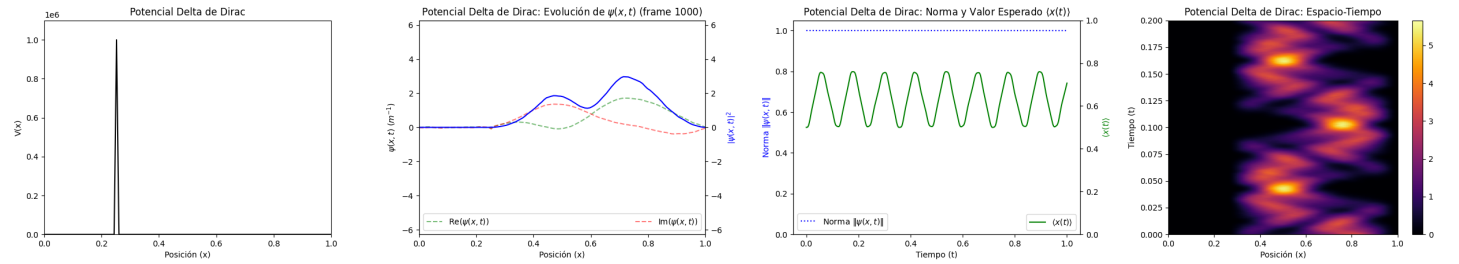


Figura 3: Potencial Delta Dirac

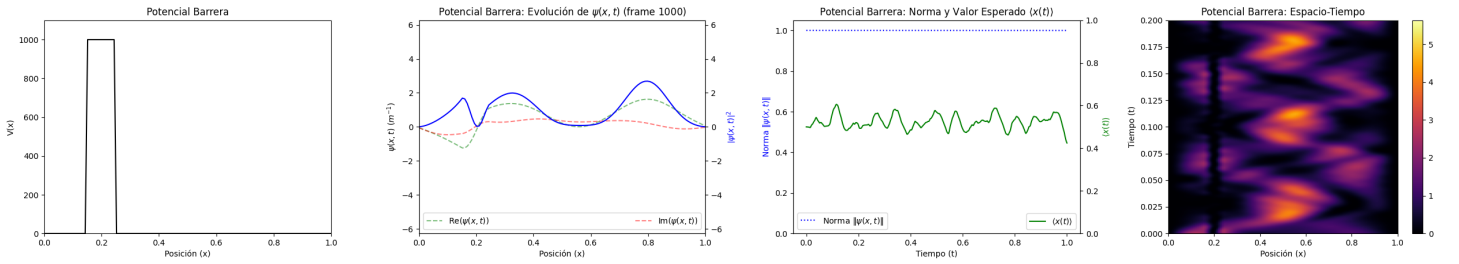


Figura 4: Barrera de potencial

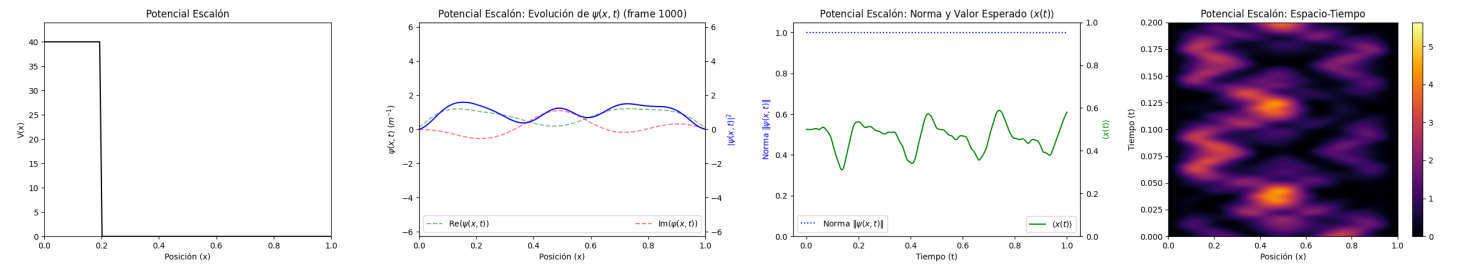


Figura 5: Escalón de potencial

4 RESULTADOS Y ANÁLISIS

En la sección anterior podemos ver la gráfica de varios potenciales junto con un *frame* de la animación, la norma y el valor esperado y por último el *imshow* del espacio tiempo. Todas las gráficas anteriores fueron realizadas para la gaussiana estática (6a).

4.1 Potencial Armónico

El potencial armónico tiene la siguiente forma:

$$\frac{1}{2}m \cdot \omega^2 \cdot (x - L/2)^2 \quad (8)$$

En el script se usó un valor de $\omega = 100$ para asegurarnos de que la pared del potencial era suficientemente alta en el dominio L . Como esperábamos, la norma es constante (y uno) lo que nos indica que la probabilidad se conserva en nuestro intervalo de tiempo.

Observamos una serie de picos secundarios de resonancia característicos del potencial armónico que no aparecen en el pozo infinito de potencial. El valor esperado de la posición está en el centro.

4.2 Pozo Infinito de Potencial

Como cabría esperar de este potencial, el valor esperado de la posición y la norma se mantienen constantes, indicando también la conservación de la probabilidad estabilidad del método con los parámetros que hemos impuesto.

La frecuencia de oscilación es bastante menor comparada con la del potencial armónico y me ha parecido interesante comentarlo. En el potencial armónico, la partícula tiende a regresar rápidamente a la posición de equilibrio cuando se desplaza de su posición central ya que este está curvado hacia el centro. Esta curvatura no aparece en el potencial pozo infinito y es lo que produce oscilaciones más lentas.

4.3 Potencial Delta Dirac

Para este potencial resulta curioso observar como los resultados obtenidos son los mismos independientemente de si la delta es positiva o negativa, es decir, si es una delta o un pozo de anchura infinitesimal.

Como nuestra gaussiana inicial está centrada en $L/2$, al dejar pasar el tiempo se puede apreciar cómo la densidad de probabilidad ‘rebota’ entre el extremo L del espacio y la delta. Esto también se puede apreciar en el comportamiento sinusoidal del valor esperado de la posición de la partícula.

Si hacemos menos acusada la delta, la función de onda empieza a atravesar la delta por efecto túnel y si encontramos la altura adecuada, podemos ver incluso como parte de la onda se queda ‘atrapada’ entre el extremo 0 y la delta.

Imponiendo las condiciones de contorno de Dirichlet, la probabilidad se conserva como podemos observar en que la norma es constante.

4.4 Barrera de Potencial

Como en todos los potenciales anteriores, la probabilidad se conserva ya que la norma es constante. El valor esperado de la posición es más caótico porque la onda tiene que interactuar con la barrera.

Además vuelve a suceder este fenómeno que comentábamos en la delta de Dirac en el cual la onda se queda atrapada entre el potencial y el borde del dominio. De hecho, en la gráfica de la densidad de probabilidad con la función de onda podemos ver como hay parte de la onda que ha atravesado la barrera por efecto túnel (la barrera es mucho menos acusada que la delta de Dirac).

En la gráfica del espacio tiempo podemos ver un hueco negro donde siempre hay menos probabilidad de encontrar a la partícula: dentro de la barrera.

4.5 Escalón de Potencial

Este potencial es análogo al anterior, pero como no hay un hueco donde la onda pueda quedarse atrapada, el comportamiento es algo menos caótico y podemos llegar a apreciar una periodicidad en el valor esperado de la posición. La banda negra que antes estaba en la barrera ha desaparecido, esto se debe claro a que hay efecto túnel y a que la onda no tiene otro lado al que traspasar.

Otra vez vemos que la probabilidad se conserva ya que la norma es constante y igual a uno.

5 CONCLUSIÓN

Hemos conseguido resolver numéricamente la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo en una dimensión para un potencial cualquiera. Es interesante probar con diferentes ondas iniciales como por ejemplo (6b), ya que se observan comportamientos oscilatorios como el que veíamos en la delta, pero en otros potenciales.

Sería interesante también hacer la generalización a dos o tres dimensiones como hicimos con la ecuación de difusión, y llegar a simular efectos cuánticos como el experimento de la doble rendija.

Recalcar también que en el código que se adjunta está resuelta también la parte B) sobre ondas amortiguadas, pero no se incluye en este informe ninguna memoria acerca del programa.

5.1 Links

Código que genera este documento: `schrodinger.tex`
Script de python: `ejercicio6.py`

BIBLIOGRAFÍA

- Tyler, M. *One-dimensional Quantum Mechanics*. Disponible en: <https://maxtyler.net/blog/one-dim-quantum-mechanics>, 2023.
Caturla Terol, M. J. *Apuntes de Mecánica Cuántica I*, Universidad de Alicante, Departamento de Física Aplicada, 2023.
Griffiths, D. J., & Schroeter, D. F. (2005). *Introduction to Quantum Mechanics* (2nd ed.). Pearson Education.