

Método de elementos finitos aplicado a la ecuación de Schrödinger en una dimensión

Diego Noguera

Universidad Nacional de Asunción

Febrero, 2010

Resumen

La finalidad de este trabajo es estudiar la dispersión de un paquete de ondas debido a un potencial unidimensional, para ello se utiliza el método de elementos finitos. Como el método de elementos finitos no es aplicable directamente a la ecuación de Schrödinger esta se escribe primero en su forma débil y luego se utiliza el método de Galerkin para hallar soluciones aproximadas.

1. Introducción

A lo largo del siglo XX la investigación científica y el desarrollo de la tecnología han estado profundamente vinculados a los fenómenos que ocurren a escala molecular, atómica y subatómica. Para estudiar el comportamiento de la materia a partir de la nano-escala se debe tener en cuenta su naturaleza cuántica.

El comportamiento de la materia a escala molecular, atómica y subatómica cuando no se tienen en cuenta efectos relativistas está determinado por la ecuación de Schrödinger. La búsqueda de soluciones analíticas para la ecuación de Schrödinger no es sencilla salvo en ciertos casos particulares, por esta razón, es preciso disponer de métodos para hallar soluciones numéricas aproximadas para la ecuación de Schrödinger.

Para estudiar la dispersión de un paquete de ondas debido a un potencial unidimensional se utiliza un paquete de ondas gaussiano, ya que dicho paquete de ondas permite observar claramente los fenómenos de dispersión y el achatamiento debido al principio de indeterminación.

Para resolver numéricamente la ecuación de Schrödinger se utiliza el método de elementos finitos, como dicho método no es aplicable directamente a la ecuación de Schrödinger esta se escribe primero en su forma débil, luego se utiliza el método de Galerkin para hallar soluciones aproximadas. Para la derivada temporal se utiliza el método de Cranck-Nicolson, que es implícito e incondicionalmente estable.

El mayor aporte de este trabajo sería en la transferencia de conocimientos, que constituye un paso importante en el desarrollo de cualquier área de investigación.

2. Ondas de De-Broglie

Investigaciones sobre la naturaleza de la luz (efecto fotoeléctrico) han mostrado que dependiendo del dominio del experimento realizado la luz puede ser descrita como ondas electromagnéticas o como partículas (fotones). Los aspectos ondulatorios aparecen en los fenómenos de difracción e interferencia, mientras que en el efecto fotoeléctrico la luz se comporta como compuesta por partículas (fotones).

De Broglie asumió que la dualidad onda-partícula que había sido comprobada experimentalmente para los fotones debía ser válida también para todas las demás partículas. Según esta hipótesis puede asignarse a cada partícula una frecuencia angular ω , una longitud de onda λ y un número de onda k .

Las relaciones de Einstein-Planck son válidas para los fotones y se asumen como válidas para las demás partículas. Para una partícula moviéndose uniformemente en el espacio libre con velocidad v , energía ε y un momentum p dichas relaciones están dadas por

$$\varepsilon = \hbar\omega \quad (1)$$

$$p = \hbar k = \frac{h}{\lambda} \quad (2)$$

donde $h = 6,62606896 \times 10^{-34} J.s$ es la constante de Planck y $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ es la constante reducida de Planck.

3. La ecuación de Schrödinger

La deducción de la ecuación de Schrödinger se realiza a través de analogías con fenómenos físicos conocidos como los de la óptica ondulatoria [3].

Al asumir el hecho de que la materia posee propiedades ondulatorias es posible asociar a una partícula libre una función ψ que sea solución de la ecuación de ondas

$$\psi_{xx} = \frac{1}{v^2}\psi_{tt} \quad (3)$$

donde v corresponde a la velocidad de propagación de la onda. Una onda plana

$$\psi(x, t) = e^{i(kx - \omega t)} \quad (4)$$

es solución de la ecuación de ondas y se puede escribir como

$$\psi(x, t) = e^{i(kx - \omega t)} = \varphi(x)e^{-i\omega t} \quad (5)$$

utilizando la relación de Einstein-Planck $\varepsilon = \omega\hbar$ la onda plana puede expresarse como

$$\psi(x, t) = \varphi(x)e^{\frac{-i\varepsilon t}{\hbar}} \quad (6)$$

A partir de ahora salvo que se indique lo contrario $\psi(x, t)$ será representada por ψ y $\varphi(x)$ será representada por φ . Introduciendo la expresión (2.6) en la ecuación de ondas

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\varphi_{xx} = -\frac{\omega^2}{v^2}\varphi \quad (7)$$

la velocidad de la onda está dada por $v = \omega/k$, la energía de una partícula libre que se mueve a velocidades mucho menores que la velocidad de la luz corresponde a $\varepsilon = \frac{p^2}{2m}$ y utilizando la relación de Einstein-Planck $p = \hbar k$ se tiene que

$$\varphi_{xx} = \frac{2m}{\hbar^2}\varepsilon\varphi \quad (8)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\varphi_{xx} = \varepsilon\varphi \quad (9)$$

Si agregamos el factor $e^{-i\omega t}$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}[\varphi e^{-i\omega t}]_{xx} = \varepsilon\varphi e^{-i\omega t} \quad (10)$$

como

$$[\varphi e^{-i\omega t}]_t = -\frac{i}{\hbar}\varepsilon\varphi e^{-i\omega t} \quad (11)$$

se obtiene

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi_{xx} = i\hbar\psi_t \quad (12)$$

esta es la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo para una partícula libre. Como una onda plana es solución de la ecuación de Schrödinger y como se trata de una ecuación lineal se tiene que una superposición de ondas planas (*paquete de ondas*) debe ser también solución de la ecuación de Schrödinger

Si la partícula esta sometida a un potencial $u(x, t)$ dependiente del tiempo la ecuación de Schrödinger será

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi_{xx} + u(x, t)\psi = i\hbar\psi_t \quad (13)$$

A partir de ahora serán considerados solamente potenciales independientes del tiempo por lo que se escribirá u en lugar de $u(x, t)$, luego

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi_{xx} + u\psi = i\hbar\psi_t \quad (14)$$

En la formulación axiomática de la mecánica cuántica la ecuación de Schrödinger no se deduce, se establece como uno de los postulados principales de la teoría [2].

3.1. Nociones sobre la Teoría de Distribuciones

3.1.1. Espacio de las Funciones de Prueba

Sea $\Omega \in \mathbb{R}^n$, sea C^∞ el espacio de las funciones infinitamente diferenciables. Dada una función u definida en Ω , se denomina soporte de u a la clausura en Ω del conjunto de los puntos de Ω donde la función es diferente de cero. Por C_0^∞ se denota al subespacio del espacio C^∞ con soporte compacto en Ω . Se dice que una secuencia $(\varphi_\nu)_{\nu \in \mathbb{N}}$ que pertenece al espacio C_0^∞ converge a cero cuando son satisfechas las siguientes condiciones:

1. Todas las funciones (φ_ν) de la secuencia poseen soportes contenidos en un compacto $K \in \Omega$.
2. La secuencia (φ_ν) y la de todas sus derivadas convergen uniformemente a cero en K , o sea $(D^j \varphi_\nu) \rightarrow 0$

El espacio vectorial C_0^∞ dotado de esta noción de convergencia se denomina espacio de las funciones de prueba y está representado por $\mathcal{D}(\Omega)$

3.1.2. Distribución

Se denomina distribución sobre Ω [4] a toda forma lineal T , continua en $\mathcal{D}(\Omega)$, es decir, una distribución es un funcional $T : \mathcal{D}(\Omega) \rightarrow \mathbb{R}$ que satisface las condiciones

1. $T(a\theta + b\varphi) = aT(\theta) + bT(\varphi)$, donde $a, b \in \mathbb{R}$ y $\theta, \varphi \in \mathcal{D}$
2. T es continua en $\mathcal{D}(\Omega)$, es decir, si (φ_ν) converge a cero en $\mathcal{D}(\Omega)$ entonces $T(\varphi_\nu)$ converge a cero en \mathbb{R}

El espacio de las distribuciones con la noción de convergencia se denota por $\mathcal{D}'(\Omega)$.

3.1.3. Derivada Débil

Para $u \in \mathcal{D}'(\Omega)$, $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_n) \in \mathbb{N}$ y $|\alpha| = \alpha_1 + \dots + \alpha_n$, para todo $\varphi \in \mathcal{D}(\Omega)$ se define la derivada débil de orden α de u como:

$$\left\langle \frac{\partial^\alpha u}{\partial x^\alpha} \middle| \varphi \right\rangle = (-1)^\alpha \left\langle u \middle| \frac{\partial^\alpha \varphi}{\partial x^\alpha} \right\rangle \quad (15)$$

3.1.4. Espacio de Sobolev $H^m(\Omega)$

Sea Ω un abierto de \mathbb{R}^n , se define el espacio $H^m(\Omega)$, donde $m \in \mathbb{N}$, por

$$H^m(\Omega) = \left\{ u : \Omega \rightarrow \mathbb{R}; u \in L^2(\Omega), \frac{\partial^\alpha u}{\partial x_1^{\alpha_1} \dots \partial x_n^{\alpha_n}} \in L^2(\Omega) \right\} \quad (16)$$

donde $\alpha = \alpha_1 + \dots + \alpha_n$, $1 \leq \alpha \leq m$, $\alpha_i \in \mathbb{N}$

Para $u, v \in H^m(\Omega)$ el producto interno esta dado por

$$(u, v) = \sum_{\alpha=0}^m \int_{\Omega} \frac{\partial^{\alpha} u}{\partial x_1^{\alpha_1} \cdots \partial x_n^{\alpha_n}} \frac{\partial^{\alpha} v}{\partial x_1^{\alpha_1} \cdots \partial x_n^{\alpha_n}} \quad (17)$$

Debe observarse que el espacio de Sobolev con un producto interno así definido es un espacio de Hilbert para $m = 0, 1, \dots, m \in \mathbb{N}$. En particular el espacio $H^0(\Omega) = L^2(\Omega)$. Para $m = 1$

$$H^1(\Omega) = \left\{ u \in L^2(\Omega); \frac{\partial u}{\partial x_i} \in L^2(\Omega) \right\} \quad (18)$$

cuyo producto interno esta dado por

$$(u|v) = \int_{\Omega} uv d\Omega + \int_{\Omega} \nabla u \nabla v d\Omega \quad (19)$$

y cuya norma está dada por

$$\|u\|^2 = \int_{\Omega} |u|^2 d\Omega + \int_{\Omega} |\nabla u|^2 \Omega \quad (20)$$

Un subespacio importante del espacio $H^1(\Omega)$ es el espacio $H_0^1(\Omega)$ que corresponde espacio de todas las funciones $u \in H^1(\Omega)$ que se anulan en la frontera de Ω

4. Formulación Variacional

4.1. Formulación del Problema

Dados los intervalos de números reales $\Omega = [a, b]$ y $[0, T]$ consideremos la ecuación de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi_{xx} + u(x)\psi = i\hbar\psi_t \quad (21)$$

sujeta a las condiciones de frontera e iniciales dadas por

$$\begin{aligned} \psi(a, t) &= \psi(b, t) \\ \psi(x, 0) &= \psi_0(x) \end{aligned} \quad (22)$$

donde $\psi(x, t) \in H_0^1(\Omega)$ y $u(x) \in L^2(\Omega)$.

La ecuación de Schrödinger

$$\psi_t - i\frac{\hbar}{2m}\psi_{xx} + i\frac{u}{\hbar}\psi = 0 \quad (23)$$

se multiplica por la función de prueba v y luego se integra por partes en el dominio Ω

$$\int_{\Omega} \left(\psi_t - i\frac{\hbar}{2m}\psi_{xx} + i\frac{u}{\hbar}\psi \right) v dx = 0 \quad (24)$$

Como

$$[\psi_x v]_x = \psi_{xx} v + \psi_x v_x \quad (25)$$

$$\int_{\Omega} [\psi_x v]_x dx = \int_{\Omega} \psi_{xx} v dx + \int_{\Omega} \psi_x v_x dx \quad (26)$$

$$[\psi_x v]_{\partial\Omega} = \int_{\Omega} \psi_{xx} v dx + \int_{\Omega} \psi_x v_x dx \quad (27)$$

$$\int_{\Omega} \psi_{xx} v dx = - \int_{\Omega} \psi_x v_x dx + [\psi_x v]_{\partial\Omega} \quad (28)$$

Luego

$$\int_{\Omega} \psi_t v dx + i \frac{\hbar}{2m} \int_{\Omega} \psi_x v_x dx - i \frac{\hbar}{2m} [\psi_x v]_{\partial\Omega} + i \int_{\Omega} \frac{u}{\hbar} \psi v dx = 0 \quad (29)$$

Recordando que $v(\partial\Omega) = 0$ se obtiene la forma débil de la ecuación de Schrödinger

$$\int_{\Omega} \psi_t v dx + i \frac{\hbar}{2m} \int_{\Omega} \psi_x v_x dx + i \int_{\Omega} \frac{u}{\hbar} \psi v dx = 0 \quad (30)$$

Se pueden definir los siguientes funcionales bilineales

$$a(\psi_t, v) = \int_{\Omega} \psi_t v dx \quad (31)$$

$$b(\psi, v) = i \int_{\Omega} \psi_x v_x dx \quad (32)$$

$$c(\psi, v) = i \int_{\Omega} \frac{u}{\hbar} \psi v dx \quad (33)$$

Con lo que queda

$$a(\psi, v) + \frac{\hbar}{2m} b(\psi, v) + c(\psi, v) = 0 \quad \forall v \in \mathcal{D}(\Omega) \quad (34)$$

y como $\mathcal{D}(\Omega)$ puede identificarse con el espacio

$$a(\psi_t, v) + \frac{\hbar}{2m} b(\psi, v) + c(\psi, v) = 0 \quad \forall \psi, v \in H_0^1(\Omega) \quad (35)$$

4.2. Discretización del Problema

4.2.1. Discretización Espacial: La aproximación de Galerkin

Este método consiste en aproximar el espacio de funciones de las soluciones por un espacio de dimensión finita V_m .

Sea $V_m \subset H_0^1(\Omega)$ un espacio de dimensión finita en el cual la solución se proyecta ortogonalmente, cuya base está dada por $\{\phi_1, \dots, \phi_m\}$.

La solución aproximada ψ^h se puede escribir como combinación lineal de los elementos de la base de V_m

$$\psi^h = \sum_{j=1}^m \psi_j \phi_j \quad \forall v \in V_m \quad (36)$$

$$\psi_t^h = \sum_{j=1}^m (\psi_j)_t \phi_j \quad \forall v \in V_m \quad (37)$$

reemplazando la solución aproximada en la ecuación de Schrödinger

$$a(\psi_t^h, v) + \frac{\hbar}{2m} b(\psi^h, v) + c(\psi^h, v) = 0 \quad (38)$$

Como $v \in V_m$ es posible tomar $v = \phi_i$

$$a\left(\sum_{j=1}^m (\psi_j)_t \phi_j, \phi_i\right) + \frac{\hbar}{2m} b\left(\sum_{j=1}^m \psi_j \phi_j, \phi_i\right) + c\left(\sum_{j=1}^m \psi_j \phi_j, \phi_i\right) = 0 \quad (39)$$

$$\sum_{j=1}^m (\psi_j)_t a(\phi_j, \phi_i) + \frac{\hbar}{2m} \sum_{j=1}^m \psi_j b(\phi_j, \phi_i) + \sum_{j=1}^m \psi_j c(\phi_j, \phi_i) = 0 \quad (40)$$

donde las matrices A, B y C se definen como

$$A_{kj} = a(\phi_k, \phi_j) = \int_{\Omega} \phi_k \phi_j dx \quad (41)$$

$$B_{kj} = b(\phi_k, \phi_j) = i \int_{\Omega} (\phi_k)_x (\phi_j)_x dx \quad (42)$$

$$C_{kj} = c(\phi_k, \phi_j) = i \int_{\Omega} \frac{u}{\hbar} \phi_k \phi_j dx \quad (43)$$

con lo que se obtiene la siguiente ecuación matricial

$$A \vec{\psi}_t = - \left(\frac{\hbar}{2m} B + C \right) \vec{\psi} \quad (44)$$

4.2.2. Discretización Temporal: Método de Crank-Nicolson

El método de Crank-Nicolson es el promedio entre el método backward Euler y forward Euler. Este método es de segundo orden en el tiempo e implícito, y además numéricamente estable.

Método backward Euler

$$A \left(\frac{\psi^{\rightarrow n+1} - \psi^{\rightarrow n}}{\tau} \right) = - \left(\frac{\hbar}{2m} B + C \right) \psi^{\rightarrow n+1} \quad (45)$$

Método forward Euler

$$A \left(\frac{\psi^{\rightarrow n+1} - \psi^{\rightarrow n}}{\tau} \right) = - \left(\frac{\hbar}{2m} B + C \right) \psi^{\rightarrow n} \quad (46)$$

Método de Crank-Nicolson

$$A \left(\frac{\psi^{\rightarrow n+1} - \psi^{\rightarrow n}}{\tau} \right) = - \frac{1}{2} \left(\frac{\hbar}{2m} B + C \right) \left(\psi^{\rightarrow n+1} + \psi^{\rightarrow n} \right) \quad (47)$$

$$\left(A + \frac{\hbar\tau}{4m} B + \frac{\tau}{2} C \right) \psi^{\rightarrow n+1} = \left(A - \frac{\hbar\tau}{4m} B - \frac{\tau}{2} C \right) \psi^{\rightarrow n} \quad (48)$$

4.3. Ensamblado de las matrices A, B y C

Para el cálculo de las matrices globales A_{kj} , B_{kj} y C_{kj} es necesario definir explícitamente las funciones ϕ_j que son las bases del espacio V_m .

Las funciones ϕ_j escogidas son funciones lineales por partes que satisfacen la siguiente condición

$$\phi_j(x_i) = \begin{cases} 1 & j = i \\ 0 & j \neq i \end{cases} \quad (49)$$

donde $x_i \in \Omega$ corresponde al i -ésimo nodo. Tomando m divisiones en Ω definimos la longitud del elemento como

$$l_j = x_{j+1} - x_j \quad j = 1, \dots, m \quad (50)$$

En cada nodo j definimos la función ϕ_j como

$$\phi_j(x) = \begin{cases} \frac{x-x_{j-1}}{l_{j-1}} & \forall x \in [x_{j-1}, x_j] \\ \frac{x_{j+1}-x}{l_j} & \forall x \in [x_j, x_{j+1}] \\ 0 & \forall x \notin [x_{j-1}, x_{j+1}] \end{cases} \quad (51)$$

Cada subdominio $[x_j, x_{j+1}]$, es decir, cada elemento e del dominio Ω puede expresarse según sus coordenadas locales $[x_1^e, x_2^e] = [x_j, x_{j+1}]$ [4]

Definimos las funciones ϕ_c^e locales

$$\phi_c^e(x) = \begin{cases} \phi_1^e = \frac{x_2^e - x}{l_e} & \forall x \in [x_1^e, x_2^e] \\ \phi_2^e = \frac{x - x_1^e}{l_e} & \forall x \in [x_1^e, x_2^e] \\ 0 & \forall x \notin [x_1^e, x_2^e] \end{cases} \quad (52)$$

La función $\phi_j(x)$ es la unión de las funciones locales ϕ_1^e y ϕ_2^e

$$\phi_c^e(x) = \begin{cases} \phi_2^{e-1} & \forall x \in [x_1^{e-1}, x_2^{e-1}] = [x_{j-1}, x_j] \\ \phi_1^e & \forall x \in [x_1^e, x_2^e] = [x_j, x_{j+1}] \\ 0 & \forall x \notin [x_{j-1}, x_{j+1}] \end{cases} \quad (53)$$

las matrices locales A, B y C para cada elemento e se definen como

$$A_{cd}^e = \int_{x_1^e}^{x_2^e} \phi_c^e \phi_d^e dx \quad (54)$$

$$B_{cd}^e = i \int_{x_1^e}^{x_2^e} (\phi_c^e)_x (\phi_d^e)_x dx \quad (55)$$

$$C_{cd}^e = i \frac{u_e}{\hbar} \int_{x_1^e}^{x_2^e} \phi_c^e \phi_d^e dx \quad (56)$$

Donde u_e es el promedio de u para cada elemento e .

Para los $(m+1)$ nodos de la discretización de Ω tenemos m elementos. Luego

$$A = \sum_{e=1}^m A^e \quad B = \sum_{e=1}^m B^e \quad C = \sum_{e=1}^m C^e \quad (57)$$

En el intervalo $[x_1^e, x_2^e]$ las únicas funciones no nulas son las funciones ϕ_1^e y ϕ_2^e . De esta forma para la matriz A_{cd}^e los únicos elementos no necesariamente nulos son $A_{11}^e, A_{12}^e, A_{21}^e$ y A_{22}^e

$$A^e = \begin{bmatrix} 0 & \downarrow & \downarrow & 0 \\ A_{11}^e & A_{12}^e & \leftarrow & \\ A_{21}^e & A_{22}^e & \leftarrow & \\ 0 & & & 0 \end{bmatrix} \begin{matrix} e \\ e+1 \end{matrix} \quad (58)$$

Se aplicara ahora la siguiente transformación isoparamétrica

$$\xi : [x_1^e, x_2^e] \rightarrow [-1, 1] \quad (59)$$

$$x \mapsto \xi(x) = \frac{2x - x_1^e - x_2^e}{l_e} \quad (60)$$

donde $l_e = x_2^e - x_1^e$ y $\frac{dx}{d\xi} = \frac{l_e}{2}$. Las funciones de base se expresarán como

$$\phi_c^e(\xi) = \begin{cases} \phi_1^e = \frac{1}{2}(1 - \xi) & \forall \xi \in [-1, 1] \\ \phi_2^e = \frac{1}{2}(1 + \xi) & \forall \xi \in [-1, 1] \\ 0 & \forall \xi \notin [-1, 1] \end{cases} \quad (61)$$

Por lo tanto

$$A_{cd}^e = \frac{l_e}{2} \int_{-1}^1 \phi_c^e(\xi) \phi_d^e(\xi) d\xi \quad (62)$$

$$B_{cd}^e = i \frac{2}{l_e} \int_{-1}^1 [\phi_c^e(\xi)]_\xi [\phi_d^e(\xi)]_\xi d\xi \quad (63)$$

$$C_{cd}^e = i \frac{u_e l_e}{\hbar 2} \int_{-1}^1 \phi_c^e(\xi) \phi_d^e(\xi) d\xi \quad (64)$$

Luego la matriz A^e será

$$A^e = \frac{l_e}{6} \begin{matrix} & \begin{matrix} e & e+1 \end{matrix} \\ \begin{bmatrix} 0 & \downarrow & \downarrow & 0 \\ & 2 & 1 & \leftarrow \\ & 1 & 2 & \leftarrow \\ 0 & & & 0 \end{bmatrix} & \begin{matrix} e \\ e+1 \end{matrix} \end{matrix} \quad (65)$$

La matriz B^e será

$$B^e = \frac{1}{l_e} \begin{matrix} & \begin{matrix} e & e+1 \end{matrix} \\ \begin{bmatrix} 0 & \downarrow & \downarrow & 0 \\ & i & -i & \leftarrow \\ & -i & i & \leftarrow \\ 0 & & & 0 \end{bmatrix} & \begin{matrix} e \\ e+1 \end{matrix} \end{matrix} \quad (66)$$

La matriz C^e será

$$C^e = \frac{u_e l_e}{\hbar 6} \begin{matrix} & \begin{matrix} e & e+1 \end{matrix} \\ \begin{bmatrix} 0 & \downarrow & \downarrow & 0 \\ & 2i & i & \leftarrow \\ & i & 2i & \leftarrow \\ 0 & & & 0 \end{bmatrix} & \begin{matrix} e \\ e+1 \end{matrix} \end{matrix} \quad (67)$$

La solución para cada elemento se puede escribir como

$$\vec{\psi}^e = \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ a_1 + ib_1 \\ a_2 + ib_2 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \quad (68)$$

que puede ser escrito como un vector de cuatro componentes reales [5]

$$\vec{\psi}^e = \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ a_1 \\ b_1 \\ a_2 \\ b_2 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \quad (69)$$

Ahora debemos reemplazar las matrices 2x2 A^e , B^e y C^e por las matrices 4x4 A_{real}^e , B_{real}^e y C_{real}^e que al actuar sobre el vector de cuatro componentes reales den los mismos resultados que se obtienen cuando las matrices A^e , B^e y C^e actúan sobre el vector de dos componentes complejas, dichas matrices son

$$A_{real}^e = \frac{l_e}{6} \begin{bmatrix} 0 & \downarrow^e & \downarrow^e & \downarrow^{e+1} & \downarrow^{e+1} & 0 \\ & 2 & 0 & 1 & 0 & \leftarrow^e \\ & 0 & 2 & 0 & 1 & \leftarrow^e \\ & 1 & 0 & 2 & 0 & \leftarrow^{e+1} \\ & 0 & 1 & 0 & 2 & \leftarrow^{e+1} \\ 0 & & & & & 0 \end{bmatrix} \quad (70)$$

$$B_{real}^e = \frac{1}{l_e} \begin{bmatrix} 0 & & & & & 0 \\ & 0 & -1 & 0 & 1 & \\ & 1 & 0 & -1 & 0 & \\ & 0 & 1 & 0 & -1 & \\ & -1 & 0 & 1 & 0 & \\ 0 & & & & & 0 \end{bmatrix} \quad (71)$$

$$C_{real}^e = \frac{u_e l_e}{\hbar \delta} \begin{bmatrix} 0 & & & & & 0 \\ & 0 & -2 & 0 & -1 & \\ & 2 & 0 & 1 & 0 & \\ & 0 & -1 & 0 & -2 & \\ & 1 & 0 & 2 & 0 & \\ 0 & & & & & 0 \end{bmatrix} \quad (72)$$

De esta forma podemos expresar las ecuaciones en su forma real

$$R_+ \vec{\psi}^{\rightarrow n+1} = R_- \vec{\psi}^{\rightarrow n} \quad (73)$$

Donde

$$R_+^e = A_{real}^e + \frac{\hbar\tau}{4m} B_{real}^e + \frac{\tau}{2} C_{real}^e \quad (74)$$

$$R_-^e = A_{real}^e - \frac{\hbar\tau}{4m} B_{real}^e - \frac{\tau}{2} C_{real}^e \quad (75)$$

por lo tanto la ecuación que debemos resolver será

$$\vec{\psi}^{\rightarrow n+1} = (R_+)^{-1} R_- \vec{\psi}^{\rightarrow n} \quad (76)$$

Debemos recordar que la solución aproximada es la suma de las soluciones aproximadas para cada elemento.

Para dos elementos será

$$\vec{\psi} = \begin{bmatrix} a_1 \\ b_1 \\ a_2 \\ b_2 \\ a_3 \\ b_3 \end{bmatrix} \quad (77)$$

La matriz A_{real} y la matriz B_{real} estarán dadas por

$$A_{real} = \frac{l_e}{6} \begin{bmatrix} 2 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 4 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 4 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 2 \end{bmatrix} \quad B_{real} = \frac{1}{l_e} \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -2 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 2 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (78)$$

y la matriz C_{real}

$$C_{real} = \frac{l_e}{\hbar 6} \begin{bmatrix} 0 & -2u_1 & 0 & -u_1 & 0 & 0 \\ 2u_1 & 0 & u_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -u_1 & 0 & -2u_1 - 2u_2 & 0 & -u_2 \\ u_1 & 0 & 2u_1 + 2u_2 & 0 & u_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -u_2 & 0 & -2u_2 \\ 0 & 0 & u_2 & 0 & 2u_2 & 0 \end{bmatrix} \quad (79)$$

5. Resultados Numéricos

5.1. Pozo de Potencial Infinito

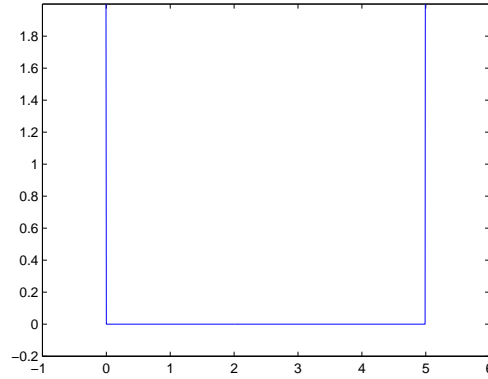


Figura 1: Pozo de potencial infinito

$$u(x) = \begin{cases} \infty & x < a \\ 0 & a \leq x \leq b \\ \infty & x > b \end{cases} \quad (80)$$

La simulación fue realizada con 200 elementos, el pozo de potencial infinito se encuentra en $-18 \leq x \leq 18$, el paquete gaussiano está centrado en $x_0 = -10$, con $k_0 = 2$ y $\sigma = 2$. La línea azul corresponde a la densidad de probabilidad, la línea roja corresponde a la parte real de la función de onda y la línea verde a la parte imaginaria.

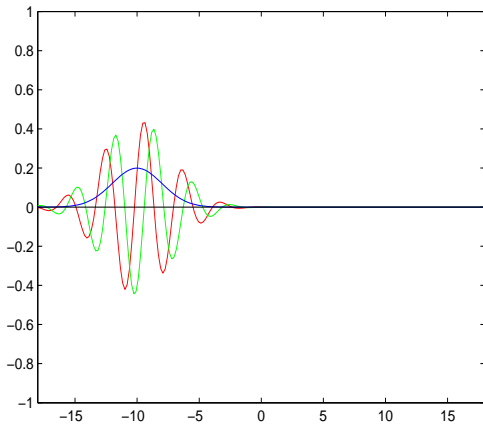


Figura 2: Paquete de ondas para $\tau = 1$

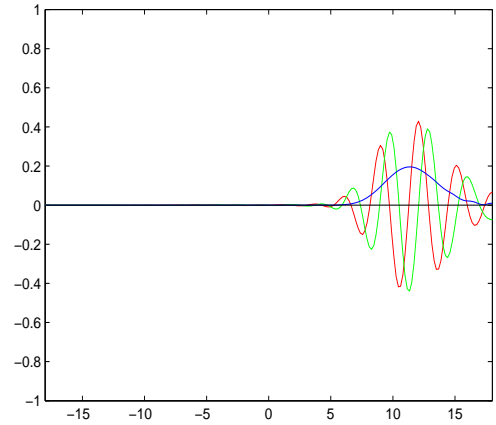


Figura 3: Paquete de ondas para $\tau = 60$. Se puede observar como la función de onda se mueve de izquierda a derecha.

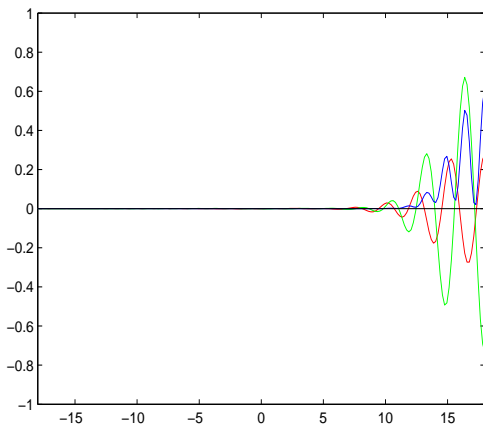


Figura 4: Paquete de ondas para $\tau = 80$. Se puede observar como la función de onda choca contra la pared del pozo de potencial infinito

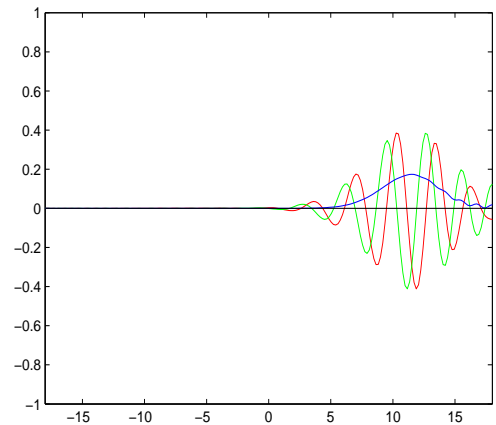


Figura 5: Paquete de ondas para $\tau = 120$. La función se refleja, en este punto resulta apreciable el ensanchamiento del paquete gaussiano que se produce a medida que la función de onda avanza.

5.2. Barrera de Potencial Rectangular

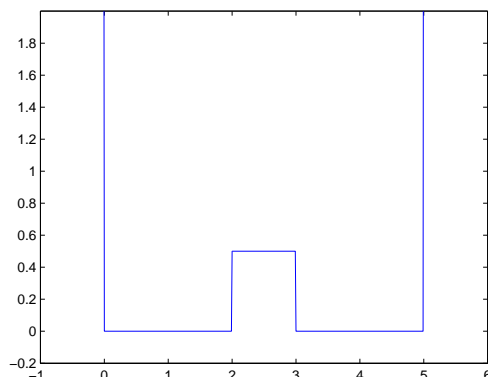


Figura 6: Pozo de potencial infinito con una barrera de potencial

Si $a < c < b$, el potencial $u(x)$ estará dado por

$$u(x) = \begin{cases} \infty & x < a \\ 0 & a \leq x < b \\ k & b \leq x < c \\ 0 & c \leq x \leq d \\ \infty & x > d \end{cases} \quad (81)$$

donde a, b, c, d y k son constantes.

La simulación fue realizada con 200 elementos, el pozo de potencial infinito se encuentra en $-18 \leq x \leq 18$, el paquete gaussiano está centrado en $x_0 = -10$, con $k_0 = 2$ y $\sigma = 2$. La línea azul corresponde a la densidad de probabilidad, la línea roja corresponde a la parte real de la función de onda y la línea verde a la parte imaginaria.

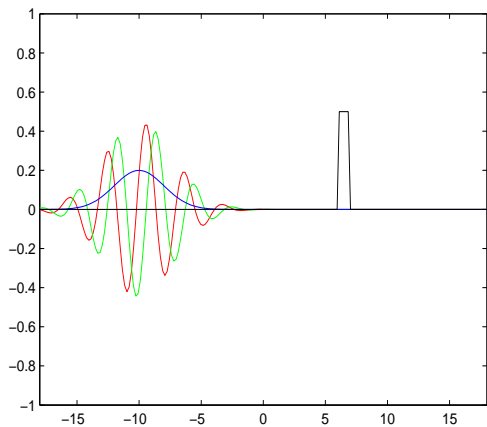


Figura 7: Paquete de ondas para $\tau = 1$

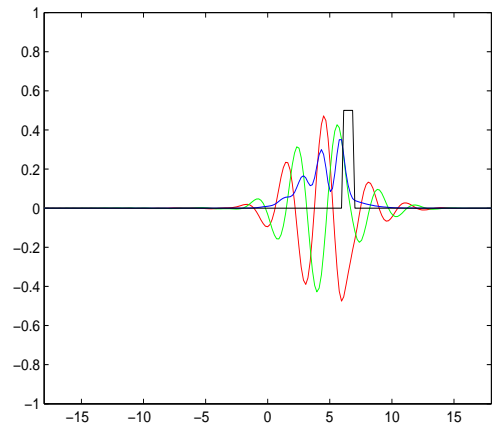


Figura 8: Paquete de ondas para $\tau = 40$. Se puede observar como la función de onda que se mueve de izquierda a derecha choca contra la barrera de potencial rectangular.

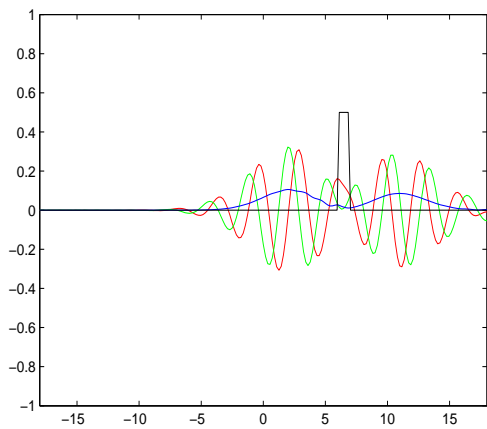


Figura 9: Paquete de ondas para $\tau = 60$. Una parte de la función de onda se refleja y otra parte se transmite.

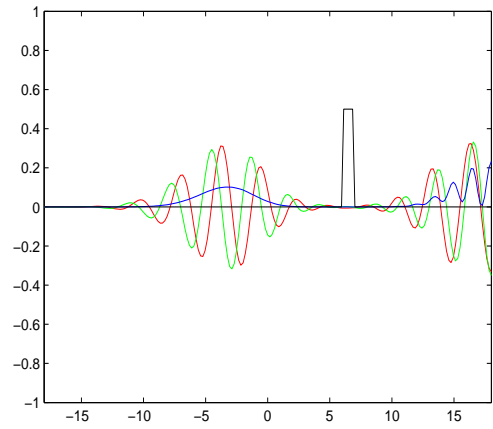


Figura 10: Paquete de ondas para $\tau = 80$. La función de onda transmitida choca contra la pared del pozo de potencial infinito

5.3. Pozo de Potencial Rectangular

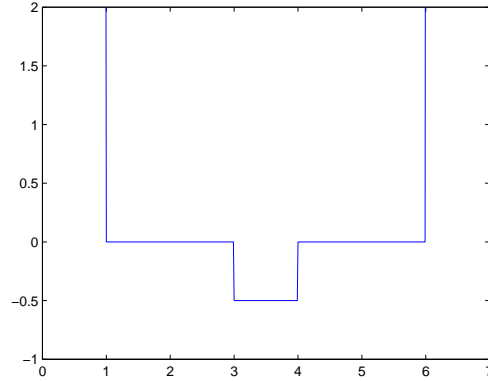


Figura 11: Pozo de potencial rectangular

El potencial $u(x)$ estrara dado por

$$u(x) = \begin{cases} \infty & x < a \\ 0 & a \leq x < b \\ -k & b \leq x < c \\ 0 & c \leq x \leq d \\ \infty & x > d \end{cases} \quad (82)$$

donde a, b, c, d y k son constantes.

La simulación fue realizada con 200 elementos, el pozo de potencial infinito se encuentra en $-18 \leq x \leq 18$, el paquete gaussiano está centrado en $x_0 = -10$, con $k_0 = 2$ y $\sigma = 2$. La línea azul corresponde a la densidad de probabilidad, la línea roja corresponde a la parte real de la función de onda y la línea verde a la parte imaginaria.

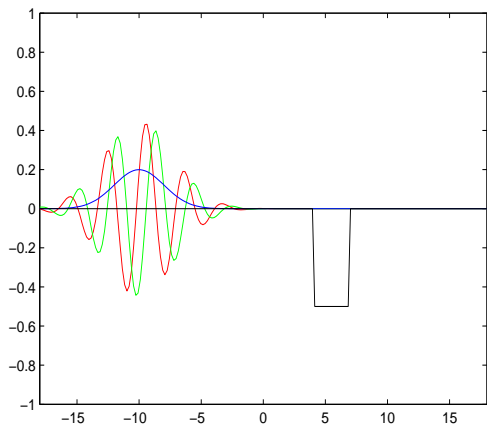


Figura 12: Paquete de ondas para $\tau = 1$.

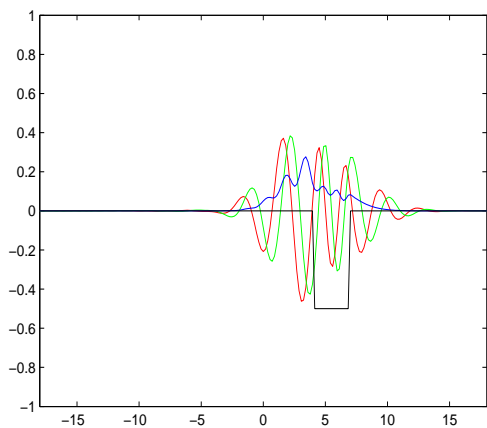


Figura 14: Paquete de ondas para $\tau = 42$.

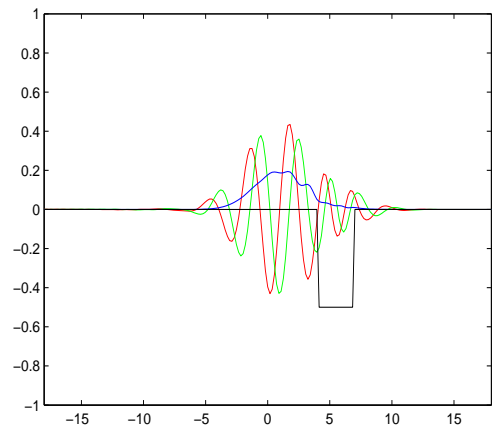


Figura 13: Paquete de ondas para $\tau = 35$. Se puede observar como la función de onda que se mueve de izquierda a derecha choca contra el pozo de potencial rectangular.

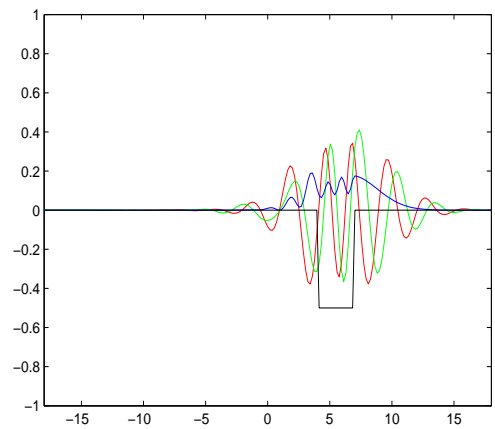


Figura 15: Paquete de ondas para $\tau = 49$. Una parte de la función de onda se refleja y otra parte se transmite.

6. Conclusiones

Para el pozo de potencial infinito se observa como el paquete gaussiano se ensancha a medida que avanza, esto se debe a que la incertidumbre de la posición crece en el tiempo por lo que el paquete no conserva su forma en el tiempo haciéndose cada vez más ancho.

Para el pozo de potencial infinito con una barrera de potencial rectangular se observa como una parte de la función de onda se refleja y otra parte se transmite, el que una parte de la función de onda se transmita implica que existe una probabilidad no nula de que la partícula cruce la barrera de potencial a pesar de que su energía es menor que dicho potencial, este resultado es el opuesto al que predicen las leyes de la física clásica donde para las regiones en las que $\varepsilon < u$ la probabilidad de encontrar a la partícula es cero.

Para el pozo de potencial rectangular se puede observar como parte de la función de onda se refleja, esto quiere decir que existe una probabilidad no nula de que la partícula rebote a pesar de tener una energía mayor que el potencial que debe superar.

El análisis sobre la convergencia y el error de las soluciones para el método de elementos finitos no es trivial [1] por lo que no ha sido considerado en este trabajo, pero la correspondencia entre las simulaciones y las soluciones analíticas de la ecuación de Schrödinger para los potenciales estudiados [2] muestra que el algoritmo desarrollado provee buenas soluciones cuando se utiliza un gran número de elementos, por esta razón podría utilizarse también para encontrar soluciones numéricas de potenciales para los cuales es difícil hallar soluciones analíticas.

Los experimentos numéricos realizados muestran que el algoritmo desarrollado no provee buenas soluciones si no se utilizan como mínimo alrededor de 200 elementos, y como no se ha hecho un análisis sobre la convergencia y el error de las soluciones no es posible determinar con exactitud como afectan los errores del método al ensanchamiento de la función de onda, por lo que un estudio sobre la convergencia y el error de las soluciones es uno de los objetivos de los siguientes trabajos.

Apendices

A. Paquete de Ondas Gaussiano

Dada una onda plana e^{ikx} con amplitud

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}g(x, 0) = \frac{\sqrt{a}}{(2\pi)^{3/4}}e^{-\frac{a^2}{4}(k-k_0)^2} \quad (83)$$

que corresponde a una función gaussiana centrada en $k = k_0$ (multiplicada por un coeficiente tal que normaliza la función de onda), puede obtenerse un paquete de ondas gaussiano mediante la superposición de dichas ondas planas [2].

$$\psi(x, 0) = \frac{\sqrt{a}}{(2\pi)^{3/4}} \int_{\mathbb{R}} e^{-\frac{a^2}{4}(k-k_0)^2} e^{ikx} dk \quad (84)$$

Se completa el cuadrado en los exponentes para escribirlos de la forma

$$-\frac{a^2}{4}(k - k_0)^2 + ikx = -\frac{a^2}{4} \left[k - k_0 - \frac{2ix}{a^2} \right]^2 + ik_0x - \frac{x^2}{a^2} \quad (85)$$

y usando la relación

$$\int_{\mathbb{R}} e^{\alpha^2(\xi+\beta)^2} d\xi = \frac{\sqrt{\pi}}{\alpha} \quad (86)$$

se obtiene

$$\psi(x, 0) = \left(\frac{2}{\pi a^2} \right)^{\frac{1}{4}} e^{ik_0x} e^{-\frac{x^2}{a^2}} \quad (87)$$

y separando la función de onda en su parte real e imaginaria

$$\psi(x, 0) = \left(\frac{1}{2\pi\sigma^2} \right)^{\frac{1}{4}} [\cos(k_0x) + i \operatorname{sen}(k_0x)] e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4\sigma^2}} \quad (88)$$

La densidad de probabilidad será

$$|\psi(x, 0)|^2 = \sqrt{\frac{2}{\pi a^2}} e^{-\frac{2x^2}{a^2}} \quad (89)$$

Para un paquete gaussiano centrado en $x = 0$ la desviación estándar en el valor de la posición está dada por

$$\Delta x = \sqrt{\int_{\mathbb{R}} \bar{\psi} x^2 \psi dx - \left(\int_{\mathbb{R}} \bar{\psi} x \psi dx \right)^2} = \frac{a}{2} \quad (90)$$

La desviación estándar en el valor del momentum está dada por

$$\Delta p = \sqrt{\int_{\mathbb{R}} \bar{\psi} p^2 \psi dx - \left(\int_{\mathbb{R}} \bar{\psi} p \psi dx \right)^2} = \frac{\hbar}{a} \quad (91)$$

donde

$$p\psi = i\hbar\partial_x\psi = i\hbar\psi_x \quad (92)$$

$$p^2\psi = -\hbar\partial_{xx}\psi = -\hbar^2\psi_{xx} \quad (93)$$

El principio de incertidumbre de Heisenberg determina que $\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$. Se dice que un paquete gaussiano es un paquete mínimo ya que para el mismo la desigualdad anterior se reduce a una igualdad.

B. Código

El siguiente programa fue desarrollado en Matlab

```
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%%dispersion de un paquete gaussiano%%
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
N=200;%numero de elementos
xi=-18;%extremo izquierdo del pozo infinito
xf=18;%extremo derecho del pozo infinito
le=(xf-xi)/N;%longitud del elemento
x=[xi:le:xf];%malla
n=200;%numero de frames
d=1/200;%constante reducida de Planck dividida por 4 veces
%la masa d=(constante reducida de Planck)/(4m) donde
%h=constante de Plank y h/(2*pi)=constante reducida de %
%Planck
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%%matriz A%%
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
AA=[2 0 1 0;
    0 2 0 1;
    1 0 2 0;
    0 1 0 2];

Q=[2 0 1 0;
   0 2 0 1;
   1 0 2 0;
   0 1 0 2];

for j=1:N-1
    AA=blkdiag(AA,zeros(2))+blkdiag(zeros(2*j),Q);
end

A=(le/6)*AA;
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
```

```

%%%%%%%%%%
%%matriz B %%
%%%%%%%%%%
BB=[0 -1 0 1;
    1 0 -1 0;
    0 1 0 -1;
    -1 0 1 0];

R=[0 -1 0 1;
   1 0 -1 0;
   0 1 0 -1;
   -1 0 1 0];

for j=1:N-1
    BB=blkdiag(BB, zeros(2)) + blkdiag(zeros(2*j), R);
end

B=(1/le)*BB;
%%%%%%%%%%

%%%%%%%%%%
%%matriz C%%
%%%%%%%%%%

%el vector g contiene los valores del potencial dividido por
%la constante reducida de Planck para cada elemento

y=0*ones(1, size(x, 2)); %potencial constante
%y=0.*(x<0)-0.05.*((0<=x)&(x<2))+0.*(2<=x); %pozo rectangular
%y=0.05*exp(-x.^2); %barrera exponencial
%y=0.05*sin(x); %potencial senoidal
for j=1:N
    g(j)=(y(j)+y(j+1))/2;
end

CC=g(1)*[0 -2 0 -1;
          2 0 1 0;
          0 -1 0 -2;
          1 0 2 0];

R1=[0 -2 0 -1;
     2 0 1 0;
     0 -1 0 -2;
     1 0 2 0];

```

```

    1 0 2 0];

for j=1:N-1
    CC=blkdiag(CC,zeros(2))+g(j+1)*blkdiag(zeros(2*j),R1);
end

C=(1e/6)*CC;
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%%paquete gaussiano%%
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
sigma=2;%desviacion estandar en el valor de la posicion
ko=2;
xo=-10;%posicion inicial del paquete gaussiano
Con=(1/(2*pi*(sigma^2)))^(1/4);
psi=[];
for j=1:size(x,2)
    C1=Con*exp(-((x(j)-xo)^2)/(4*(sigma^2)));
    psij=C1*[cos(ko*x(j)) sin(ko*x(j))];
    psi=[psi psij];
end
Psik=psi';
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%%simulacion%%
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
for k=1:n
    Psik=inv(A+d*(k-1)*B+(1/2)*(k-1)*C)*...
        (A-d*(k-1)*B-(1/2)*(k-1)*C)*Psik;
    psik=Psik';
    Psireal=[];
for i=1:size(psi,2)
    if mod(i,2)~=0
        Psireal=[Psireal psik(i)];
    end
end
Psiim=[];
for i=1:size(psi,2)
    if mod(i,2)==0

```

```

        Psiim=[Psiim psik(i)];
    end
end
for i=1:size(Psireal,2)
    Den(i)=((Psireal(i))^2)+((Psiim(i))^2);
end

plot(x,Psireal,'-r',x,Psiim,'-g',x,...
     Den,'-b',x,5*y,'-k'),axis([xi xf -0.6 0.6])

M(k)=getframe;
end
movie(M)
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

```

Referencias

- [1] BRAES, D. 2007. *Finite Elements*, CAMBRIDGE University Press, Cambridge
- [2] COHEN-TANOUDJI, C., DIU, B., LALOE, F. 1977. *Quantum Mechanics*, Hermann
- [3] GALINDO, A., PASCUAL, P. 1989. *Mecánica Cuántica*, EUEDEMA, Madrid
- [4] LIU, I., RINCON, M. 2001. *Introdução ao Método de Elementos Finitos*, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro
- [5] SEHRA, A. 2006. *Finite Element Analysis of the Schrödinger Equation*, Wales University, arxiv.org/abs/0704.3240