Ecuaciones Diferenciales Parciales

Teoría Básica

Darío Mitnik

Ecuación de Schrödinger

La ecuación de Schrödinger para una partícula de masa m en una dimensión se escribe:

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

donde $\psi(x,t)$ es la función de onda y $V(x)$ es el potencial.

Ecuación de Schrödinger

En forma operacional se escribe:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = \hat{H}\psi(x,t) \tag{2}$$

donde

$$\hat{H}\psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x). \tag{3}$$

La solución formal de esta ecuación es

$$\psi(x,t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\psi(x,0). \tag{4}$$

Ecuación de Schrödinger

La Ecuación de Schrödinger discretizada en primer orden se escribe

$$i\hbar\frac{\psi_j^{n+1}-\psi_j^n}{\tau} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\psi_{j+1}^n+\psi_{j-1}^n-2\psi_j^n}{h^2}+V_j\psi_j^n \tag{5}$$

donde $V_j \equiv V(x_j)$.

Ecuación de Schrödinger

Como el Hamiltoneano es un operador lineal, se puede escribir la ecuación anterior

$$i\hbar \frac{\psi_j^{n+1} - \psi_j^n}{\tau} = \hat{H}\psi_j^n = \sum_{k=1}^{N} \hat{H}_{jk}\psi_k^n \tag{6}$$

y la matriz $\hat{H}$ discretizada es

$$\hat{H}_{jk} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\delta_{j+1,k} + \delta_{j-1,k} - 2\delta_{j,k}}{h^2} + V_j \delta_{j,k} \tag{7}$$

Método Explícito

Volviendo a la ecuación

$$i\hbar \frac{\psi_j^{n+1} - \psi_j^n}{\tau} = \hat{H}\psi_j^n \tag{8}$$

solucionando para ψ_j^{n+1}, se puede escribir, en notación matricial

$$\mathbf{\Psi}^{n+1} = (\mathbf{I} - \frac{i\tau}{\hbar}\hat{H})\mathbf{\Psi}^n \tag{9}$$

donde $\mathbf{\Psi}^n$ es un vector columna y $\mathbf{I}$ es la matriz unidad.

Este es el esquema explícito de la resolución de la Ecuación de Schrödinger (Explicit Forward Time Centered Space - FTCS).

Método Implícito

El problema del método explícito es que es numéricamente inestable. Si en lugar de aplicar el Hamiltoneano a la función en el tiempo n

$$i\hbar \frac{\psi_j^{n+1} - \psi_j^n}{\tau} = \hat{H}\psi_j^n \tag{10}$$

lo aplicamos en el tiempo futuro $n+1$

$$i\hbar \frac{\psi_j^{n+1} - \psi_j^n}{\tau} = \hat{H}\psi_j^{n+1}, \tag{11}$$

Método Implícito

tenemos entonces

$$\mathbf{\Psi}^{n+1} = \mathbf{\Psi}^{n} - \frac{i\tau}{\hbar}\hat{H}\mathbf{\Psi}^{n+1} \tag{12}$$

y juntando los términos con $\mathbf{\Psi}^{n+1}$ queda

$$(\mathbf{I} + \frac{i\tau}{\hbar}\hat{H})\mathbf{\Psi}^{n+1} = \mathbf{\Psi}^{n} \tag{13}$$

que resolviendo nos da:

$$\mathbf{\Psi}^{n+1} = (\mathbf{I} + \frac{i\tau}{\hbar}\hat{H})^{-1}\mathbf{\Psi}^{n} \tag{14}$$

que es el esquema implícito.

Interpretación de los métodos

Dado que $e^{-z} \approx 1 - z$, podemos interpretar al método explícito como el primer término en la expansión de Taylor de la solución.

Siendo que $(1+z)^{-1} \approx (1-z)$ para $z \to 0$, o alternativamente $e^{-z} = 1/e^{z} \approx (1+z)^{-1}$, podemos ver las equivalencias entre ambos métodos.

La ventaja del método explícito, es que es correcto, la del implícito, es que es estable.

Método de Crank-Nicolson

como es usual, se puede usar un promedio entre ambos métodos

$$i\hbar\frac{\psi_j^{n+1}-\psi_j^n}{\tau}=\hat{H}\frac{1}{2}(\psi_j^n+\psi_j^{n+1}) \tag{15}$$

en notación matricial se puede escribir

$$\mathbf{\Psi}^{n+1}=\mathbf{\Psi}^n-\frac{i\tau}{2\hbar}\hat{H}(\mathbf{\Psi}^n+\mathbf{\Psi}^{n+1}) \tag{16}$$

o

$$(\mathbf{I}+\frac{i\tau}{2\hbar}\hat{H})\mathbf{\Psi}^{n+1}=(\mathbf{I}-\frac{i\tau}{2\hbar}\hat{H})\mathbf{\Psi}^n \tag{17}$$

Método de Crank-Nicolson

y, agrupando $n+1$ en un solo lado queda

$$\mathbf{\Psi}^{n+1} = (\mathbf{I} + \frac{i\tau}{2\hbar}\hat{H})^{-1}(\mathbf{I} - \frac{i\tau}{2\hbar}\hat{H})\mathbf{\Psi}^{n} \tag{18}$$

que es el Método de Crank-Nicolson.

Método de Crank-Nicolson

La aproximación de Páde del exponencial $e^{-z} \approx \frac{1-z}{1+z}$, nos muestra que el método provee una forma alternativa de obtener la solución.

Notar que si z es imaginaria, entonces $(e^{-z})^* = (e^{-z})^{-1}$, lo que significa que e^{-z} es unitario, igual que el operador $\exp{(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t)}$.

La ventaja de éste método entonces, es que es unitario.