Resolución de un problema de datos iniciales para la ecuación de Schroedinger

Cálculo Numérico (A-F-O)/Elementos de Cálculo Numérico (M)

Segundo Cuatrimestre 2012

La ecuación de Schroedinger que da la evolución de la probabilidad de encontrar una partícula en determinado estado de un sistema cuántico, es:

$$i\hbar\Psi_t = \hat{H}\Psi \tag{1}$$

Aquí $\hbar$ es una constante real positiva, $\Psi(x,t)$ es la función de onda del sistema, cuyo módulo cuadrado da la densidad de probabilidad de encontrar el sistema en una configuración determinada. Además $\hat{H}$ es el operador hamiltoniano del sistema.

En el caso de una partícula libre de masa m, moviéndose en una sola dimensión espacial, el operador $\hat{H}$ se reduce a

$$\hat{H} = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

Por lo tanto se debe resolver la ecuación en derivadas parciales:

$$i\Psi_t = \frac{\hbar}{2m}\Psi_x x$$

i) Considere el método explícito en t:

$$\Psi(x,t+k) = \Psi(x,t) - i\frac{\hbar}{2m}\frac{k}{h^2}[\Psi(x+h,t) - 2\Psi(x,t) + \Psi(x-h,t)]$$

donde h, k son los incrementos en la malla en x y en t respectivamente. Ensáyelo para dato inicial

$$\Psi(x,0) = \exp(-x^2) \qquad\qquad x \in [-5,5]$$

y con datos de contorno $\Psi(-5,t) = \Psi(5,t) = \Psi(\pm 5, 0)$. ¿Qué observa? Ensaye varios valores de h y de k.

ii) Utilice ahora el correspondiente método implícito:

$$\Psi(x,t+k) = \Psi(x,t) - i\frac{\hbar}{2m}\frac{k}{h^2}[\Psi(x+h,t+k) - 2\Psi(x,t+k) + \Psi(x-h,t+k)]$$

para repetir el cálculo anterior. ¿Qué observa?

iii) Realice un análisis de la estabilidad de ambos métodos.