

# Evolução temporal de soluções da Equação de Schrödinger 2D

Instituto Superior Técnico, LEFT, Técnicas de Física Computacional  
Iara Pereira, nº46734, Luis Figueira, nº46740, Gonçalo Pereira nº48156

Junho 2001

## Resumo

Este trabalho tem como objectivo a obtenção da evolução temporal da solução da equação de Schrödinger dependente do tempo, no caso bidimensional, partindo de uma onda inicial e de um potencial independente do tempo. Para tal, implementou-se um método numérico pseudo-espectral em C, representando graficamente as soluções em *Mathematica*.

## 1 Introdução

Dada uma função de onda  $\psi(\mathbf{r}, t_0)$ , a sua evolução temporal obedece à bem conhecida equação de Schrödinger dependente do tempo,

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}, t) + \mathbf{V} \psi(\mathbf{r}, t) \\ &= (\mathbf{T} + \mathbf{V}) \psi(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (1)$$

onde  $\mathbf{T}$  e  $\mathbf{V}$  são, respectivamente, os operadores associados à energia cinética e ao potencial. Assim,  $\psi(\mathbf{r}, t)$  fica univocamente determinada para todo o  $t$ , uma vez especificada  $\psi(\mathbf{r}, t_0)$  e imposto  $\mathbf{V}$ .

A equação (1) é linear, pelo que qualquer combinação linear de soluções é ainda uma solução. Note-se que, como os coeficientes da equação são complexos, as soluções serão necessariamente complexas.

O significado físico usualmente atribuído às soluções de (1) consiste na associação de  $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2$  a uma densidade de probabilidade. Desta forma, normaliza-se a função de onda de modo a que

$$\int |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d\mathbf{r} = 1$$

Pretende-se com este trabalho implementar um algoritmo que construa numericamente a solução de (1) para um conjunto de potenciais e condições iniciais, no caso bidimensional.

## 1.1 Solução formal da equação de Schrödinger

A integração de (1) em ordem a  $t$  é imediata e conduz a

$$\psi(\mathbf{r}, t) = e^{-i(t-t_0)/\hbar(\mathbf{T}+\mathbf{V})}\psi(\mathbf{r}, t_0) \quad (2)$$

Convencionou-se, sem perda de generalidade,  $t_0 = 0$ . A expressão (2) é apenas uma solução formal da equação, ou seja, não é uma expressão passível de ser calculada, uma vez que envolve exponenciais de operadores. O termo  $e^{-it/\hbar\mathbf{V}}$  é de cálculo directo, uma vez que  $\mathbf{V}$  é uma função,  $\mathbf{V} = V(\mathbf{r})$ . A exponencial do termo cinético envolve, contudo, derivadas em ordem às coordenadas espaciais. Para contornar esta questão, exprime-se a exponencial dos operadores em  $\mathbf{r}$  como exponencial de funções em  $\mathbf{k}$ , onde  $\mathbf{k}$  é a variável do espaço dos momentos. O uso de expressões tanto no espaço das posições como no espaço dos momentos dá a este método a designação de Pseudo-Espectral.

Como os operadores  $\mathbf{T}$  e  $\mathbf{V}$  não comutam, a exponencial em (2) não pode ser separada. Desta forma,

$$\psi(\mathbf{x}, t) \simeq e^{-it/(2\hbar)\mathbf{V}} e^{-it/\hbar\mathbf{T}} \underbrace{e^{-it/(2\hbar)\mathbf{V}}\psi(\mathbf{x}, t_0)}_{\phi(\mathbf{x}, t_0)}$$

constitui apenas uma aproximação para (2). O teorema de Baker-Campbell-Hausdorff [1] permite estabelecer  $\mathcal{O}(t^2)$  para a expressão anterior.

Define-se, aplicando a transformada de Fourier bidimensional,

$$\phi(\mathbf{k}, t_0) = \mathcal{F}^{-1}\{\Phi(\mathbf{k}, t_0)\} = \frac{1}{2\pi} \int \Phi(\mathbf{k}, t_0) e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})} d\mathbf{k}$$

o que permite escrever

$$\begin{aligned} e^{-it/\hbar\mathbf{T}}\phi(\mathbf{k}, t_0) &= e^{-it/\hbar\mathbf{T}} \frac{1}{2\pi} \int \Phi(\mathbf{k}, t_0) e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})} d\mathbf{k} \\ &= \frac{1}{2\pi} \int \Phi(\mathbf{k}, t_0) e^{-it/\hbar(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2)} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})} d\mathbf{k} \\ &\stackrel{*}{=} \frac{1}{2\pi} \int \Phi(\mathbf{k}, t_0) \sum_n \frac{(-it/\hbar)^n}{n!} \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right)^n \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)^n e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})} d\mathbf{k} \\ &= \frac{1}{2\pi} \int \Phi(\mathbf{k}, t_0) \sum_n \frac{(-it/\hbar)^n}{n!} \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^n (\mathbf{k}\cdot\mathbf{k})^n e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})} d\mathbf{k} \\ &= \frac{1}{2\pi} \int \Phi(\mathbf{k}, t_0) e^{-it/\hbar T(\mathbf{k})} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})} d\mathbf{k}, \quad T(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2m}(\mathbf{k}\cdot\mathbf{k}) \\ &= \mathcal{F}^{-1}\{e^{-it/\hbar T(\mathbf{k})}\Phi(\mathbf{k}, t_0)\} \end{aligned}$$

\* Prova-se por indução que  $\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)^n = \left(\frac{\partial^{2n}}{\partial x^{2n}} + \frac{\partial^{2n}}{\partial y^{2n}}\right)$ .

Por fim, obtém-se

$$\psi(\mathbf{r}, t) \simeq e^{-it/(2\hbar)V(\mathbf{r})} \mathcal{F}^{-1} \left\{ e^{-it/\hbar T(\mathbf{k})} \Phi(\mathbf{k}, t_0) \mathcal{F}\{e^{-it/\hbar V(\mathbf{r})}\phi(\mathbf{r}, t_0)\} \right\} \quad (3)$$

que constitui a base do algoritmo implementado.

## 2 Implementação

Para o cálculo das transformadas rápidas de Fourier, optou-se por usar a biblioteca **FFTW**, disponível em [2], dado o seu bom desempenho face a outros algoritmos usualmente empregues – ver [3]. Todos os cálculos necessários à execução do algoritmo foram efectuados em C. No fim de cada iteração, o programa escrito envia para o *Mathematica*, via *MathLink*, uma instrução para desenhar um gráfico, representando o quadrado do módulo da solução no instante decorrente. Pretendeu-se, desta forma, otimizar os recursos disponíveis.

Em primeiro lugar, discretiza-se o potencial e a função  $\psi(\mathbf{r}, t_0)$  numa malha rectangular no espaço das posições. A malha é definida especificando, para cada direcção, o número de nós,  $N_x$  e  $N_y$ , e os extremos. Em cada ponto da malha, calcula-se o termo  $e^{-it/(2\hbar)V(\mathbf{r})}\psi(\mathbf{r}, t_0)$ . Realiza-se, em seguida, a transformada discreta da matriz (complexa) assim obtida.

Para calcular  $e^{-it/\hbar T(\mathbf{k})}$ , é necessário construir, no espaço dos momentos, a malha correspondente à das posições. Definindo  $\delta_x$  e  $\delta_y$  como sendo os espaçamentos dos pontos da malha no espaço das posições, em ambas as direcções, temos [1]

$$\delta_{k_x} = \frac{2\pi}{N_x \delta_x}, \quad \delta_{k_y} = \frac{2\pi}{N_y \delta_y}$$

Dada a forma como a transformada discreta é calculada, é necessário proceder a uma reordenação dos elementos da malha no espaço dos momentos, antes de calcular uma transformada inversa. Na prática, esta reordenação resume-se à permuta dos quadrantes ímpares e dos pares. É então possível inverter o termo

$$e^{-it/\hbar T(\mathbf{k})} \Phi(\mathbf{k}, t_0) \mathcal{F} \{ e^{-it/\hbar V(\mathbf{r})} \phi(\mathbf{r}, t_0) \},$$

multiplicando em seguida pelo termo potencial. É ainda necessário normalizar o resultado dado que, no caso de uma **FFT** bidimensional,  $\phi = N_x N_y \mathcal{F}^{-1} \{ \mathcal{F} \{ \phi \} \}$ . O processo descrito constitui o corpo do ciclo iterativo a partir do qual se obtém

a evolução temporal da onda  $\psi(\mathbf{r}, t_0)$ .

## 3 Resultados

### 3.1 Onda inicial

A onda inicial escolhida,  $\psi(\mathbf{r}, 0)$ , para cada um dos exemplos apresentados, tem a forma de uma gaussiana. No caso em que não existe momento inicial, tem-se que

$$|\psi(\mathbf{r}, 0)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(\mathbf{r}\cdot\mathbf{r})}{2\sigma^2}} = \mathcal{F}^{-1} \left\{ \underbrace{\mathcal{F} \{ |\psi(\mathbf{r}, 0)|^2 \}}_{\Psi(\mathbf{k}, 0)} \right\}$$

Assumindo um momento inicial  $\mathbf{k}_0$ ,

$$\begin{aligned} |\psi(\mathbf{r}, 0)|^2 &= \mathcal{F}^{-1} \{ \Psi(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0, 0) \} \\ &= e^{i(\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r})} \mathcal{F}^{-1} \{ \Psi(\mathbf{k}, 0) \} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{i(\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r})} e^{-\frac{(\mathbf{r}\cdot\mathbf{r})}{2\sigma^2}} \end{aligned}$$

pelo que a onda inicial é dada por

$$\psi(\mathbf{r}, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{i(\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r})} e^{-\frac{(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)^2}{4\sigma^2}}$$

Esta escolha afigurou-se como natural, uma vez que corresponde à minimização do princípio de incerteza de Heisenberg [1]

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \Leftrightarrow \Delta x \Delta k \geq \frac{1}{2}$$

## 3.2 Exemplos

Testou-se a eficácia do método desenvolvido, impondo alguns potenciais de interesse.

### 3.2.1 Interferência de duas ondas

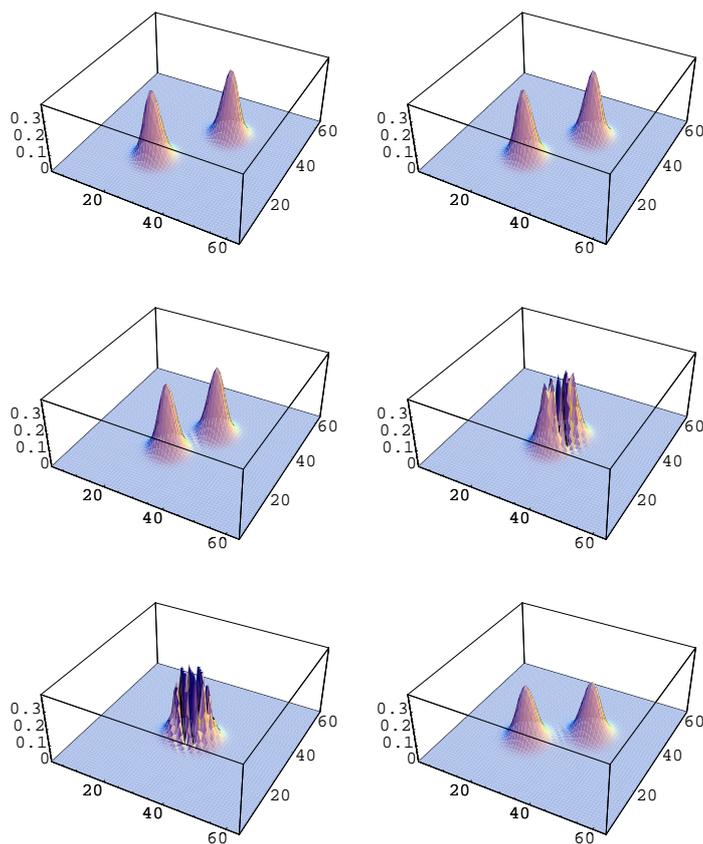


Figura 1: Interferência de duas ondas –  $\Delta t \simeq 0.093 \times 10^{-16}$ s

### 3.2.2 Difraccão por fenda dupla

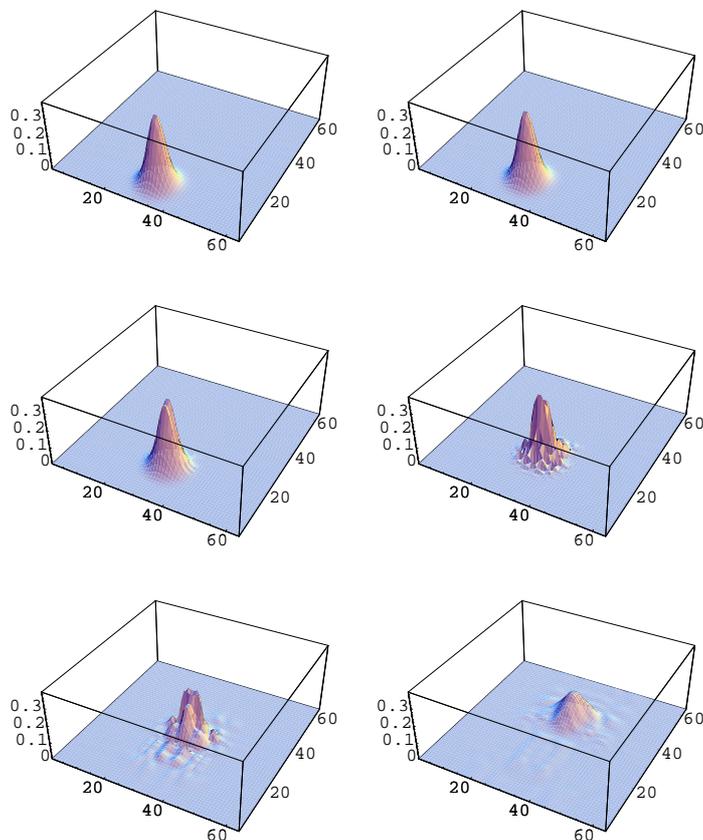


Figura 2: Duas fendas –  $\Delta t \simeq 43.3 \times 10^{-16}$ s

### 3.3 Comentários

É importante referir que, dada a forma como a transformada é construída, impondo a periodicidade da função, as soluções obtidas perdem significado ao se aproximarem da fronteira da malha estabelecida. Nessas circunstâncias, verifica-se que as ondas se reflectem são reflectidas, interferindo consigo mesmas, invalidando assim os resultados obtidos.

Este fenómeno é inevitável, evidenciando-se para as gaussianas, que se encontram definidas em  $\mathbf{R}^2$ . O método revela-se assim condicionado em termos de tempo de simulação, uma vez que as soluções acumulam erros em cada iteração, e de resolução espacial, dado que é necessário uma malha suficientemente larga e densa para estudar com detalhe zonas afastadas da fronteira.

Outro factor a ter em consideração é a natureza quântica dos fenómenos em questão, que determina relações entre a energia que se pode estudar e o

intervalo de tempo necessário para o fazer, com base no princípio de incerteza de Heisenberg.

A todo o processo estão também inerentes erros numéricos, nomeadamente na aproximação à exponencial de operadores, onde a expressão utilizada é  $\mathcal{O}(t^2)$ . Constatou-se que, em alguns casos, o método é muito sensível a variações no passo de tempo.

## Referências

- [1] DeVries, Paul L., *A first course in Computational Physics*;
- [2] <http://www.fftw.org>;
- [3] Frigo, M., Johnson, S. *The Fastest Fourier Transform in the West* MIT-LCS-TR-728 (Sep. '97);
- [4] Schiff, Leonard L., *Quantum Mechanics*, McGraw-Hill, Third Edition, 1968;
- [5] Press, William H., et al. *Numerical Recipes in C: the art of scientific computing*, Cambridge University Press.