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

Elementos de Cálculo Numérico - Segundo Cuatrimestre de 2006

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:

$$i\Psi_t = \frac{\hbar}{2m}\Psi_{xx}$$

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.