

SOLUCION DE LA ECUACION DE SCHRÖDINGER DEPENDIENTE  
DEL TIEMPO Y ALGUNAS APLICACIONES

por

Antonio Rendón Romero

Thesis PRESENTADA EN LA  
FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICO-MATEMÁTICAS  
PARA OBTENER EL GRADO DE  
LICENCIADO EN CIENCIAS FÍSICO-MATEMÁTICAS  
UNIVERSIDAD MICHOACANA DE SAN NICOLAS DE HIDALGO

Octubre 2006

## **Agradecimientos**

Agradecimientos

Agradezco a mis padres y a mis hermanos. A mis maestros. A mis amigos.

**Dedicatoria***Dedicatoria*

Dedico este trabajo a mi familia. A mis amigos y maestros. También a Kraker y KYK.

## Contenido

<b>Capítulo 1</b>	<b>INTRODUCCION . . . . .</b>	<b>5</b>
<b>Capítulo 2</b>	<b>METODOS NUMERICOS . . . . .</b>	<b>8</b>
2.1	Diferencias Finitas . . . . .	8
2.2	Convergencia . . . . .	10
2.3	Método de Integración Runge-Kutta . . . . .	12
<b>Capítulo 3</b>	<b>SOLUCION DE LA ECUACION DE SCHRÖDINGER EN UNA DIMENSION . . . . .</b>	<b>13</b>
3.1	Solución para una partícula en una caja . . . . .	14
3.1.1	Solución Analítica . . . . .	14
3.1.2	Método Implícito . . . . .	16
3.1.3	Método Explícito . . . . .	19
3.1.4	Pruebas del código . . . . .	21
3.2	Solución para una partícula con un potencial de Oscilador Armónico Simple . . . . .	23
<b>Capítulo 4</b>	<b>SOLUCION DE LA ECUACION DE SCHRÖDINGER EN DOS DIMENSIONES . . . . .</b>	<b>29</b>
4.1	Solución para una partícula en una caja bidimensional . . . . .	30
4.1.1	Solución Analítica . . . . .	30
4.1.2	Método Explícito . . . . .	32
4.2	Solución para una partícula con un potencial de Oscilador Armónico Simple Bidimensional . . . . .	33
<b>Capítulo 5</b>	<b>SOLUCION DE LA ECUACION DE SCHRÖDINGER PARA UN POTENCIAL DE CONDENSADO DE BOSE . . . . .</b>	<b>39</b>
<b>Capítulo 6</b>	<b>DISCUSION Y CONCLUSIONES . . . . .</b>	<b>42</b>
<b>Apéndice A</b>	<b>Fórmula de Diferenciación Finita Centrada . . . . .</b>	<b>43</b>
<b>Apéndice B</b>	<b>Cálculo de una derivada usando solo puntos de la derecha . . . . .</b>	<b>44</b>

## Capítulo 1

### INTRODUCCION

El objetivo principal de éste trabajo es mostrar que bajo la influencia de un laser es posible estabilizar un Condensado de Bose (CB). Este objetivo desata algunas preguntas. ¿Qué es un Condensado de Bose? Un Condensado de Bose es un estado de agregación de la materia, que se da en ciertas sustancias a temperaturas muy bajas (cercanas al cero absoluto). Lo que caracteriza a este nuevo estado es que todas las partículas que forman la sustancia se encuentran en el estado de mínima energía. Este fenómeno solo tiene lugar en la mecánica cuántica, por lo que no tiene un análogo clásico. A pesar de que el Condensado de Bose constituye la esencia de los resultados presentados aquí, no profundizo en la descripción de la transición de fase de un gas de bosones en un CB.

La ecuación que describe la dinámica de un CB en la aproximación de campo medio, que además considera la interacción a pares entre las partículas del condensado, es la ecuación de Gross-Pitaevskii [1, 2].

$$i\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{1}{2}\nabla^2\Psi + (V + \Lambda|\Psi|^2)\Psi \quad (1.1)$$

donde  $\Lambda$  es un coeficiente relacionado con la autointeracción a pares entre las partículas del gas de bosones. El potencial  $V$  es un potencial externo, que usualmente es el utilizado para confinar a los CB y regularmente es una trampa armónica. Esta ecuación es la de Schrödinger no lineal, pues contiene un potencial con un término proporcional a la densidad de probabilidad. El hecho relevante es que no es elemental construir soluciones analíticas a dicha ecuación y por tanto es necesario recurrir a la solución usando métodos numéricos.

El método numérico usado para obtener los resultados presentados en esta tesis es

la aproximación con diferencias finitas de las ecuaciones en el continuo. Las aproximaciones son de segundo orden en el espacio.

Se procede gradualmente con ejercicios de mayor dificultad. Primero se resuelve la ecuación de Schrödinger para una una partícula en una caja en una dimensión. Se hace esto para ver que somos capaces de resolver ésta ecuación de manera numérica. Este caso ha sido resuelto usando un integrador en el tiempo tanto explícito (Runge-Kutta de tercer orden) como implícito (Crank-Nicholson). Comparando los resultados obtenidos se concluyó que el método explícito es mas preciso y permite el uso de menor resolución temporal y espacial, de modo que fue el usado para los cálculos posteriores en todos problemas presentados en el resto de la tesis.

En seguida resolvimos el caso de una partícula en un caja de dos dimensiones. En ambos problemas mostramos que nuestros resultados convergen a la solución analítica con segundo orden. El siguiente paso ha sido resolver la ecuación de Schrödinger con un potencial de oscilador armónico. Para el caso de una dimensión hay solución analítica con la cuál pudimos comparar los resultados obtenidos con nuestro programa. Para la solución de la ecuación de Schrödinger con un potencial de oscilador armónico en dos dimensiones, desafortunadamente no encontramos en la literatura la solución analítica con la cual pudiéramos comparar la solución obtenida con el código numérico. Afortunadamente esto nos obligó a obtener la solución para dicho sistema y es otro de los resultados originales de esta tesis.

Una vez que pudimos resolver estos casos, el paso siguiente fue agragarle a la ecuación el término extra de autointeracción para completar la ecuación de Gross-Pitaevskii.

El caso de tres dimensiones no lo atacamos puesto que es necesario contar con mucha memoria RAM para lograr resultados para evoluciones de largo tiempo y dominios espaciales suficientemente grandes.

Nuestros resultados son los sigueintes:

1. Logramos estabilizar en una trampa armónica una solución solitónica en una di-

mención.

2. Logramos estabilizar un CB en dos dimensiones. El potencial externo corresponde a un modelo de interacción entre los átomos condensados y un laser.

Con el fin de explicar nuestras estrategias y resultados, en el capítulo 2 describo los métodos numéricos usados, en el capítulo 3 muestro la solución de la ecuación de Schrödinger en una dimensión, tanto para la partícula en una caja como en un oscilador armónico. En el capítulo 4 describo las pruebas en dos dimensiones. Finalmente, en el capítulo 5 presento los casos relacionados con la estabilización de los condensados.

## Capítulo 2

### METODOS NUMERICOS

#### 2.1 Diferencias Finitas

Para empezar debemos tener en mente, que al usar diferencias finitas el dominio de las Ecuaciones Diferenciales Parciales (EDP) esta discretizado. Esto es, la función de una EDP esta valuada en un número finito de puntos, por lo tanto las derivadas de la función también estan valuadas en un número finito de puntos. Esto implica la versión de las ecuaciones diferenciales a resolver involucra un error de discretización descrito a continuación. Aunque si se piensa en la gran variedad de problemas que se pueden resolver numéricamente y que aún no han podido ser resueltos de manera analítica, podemos concluir que vale la pena pagar el precio del error por la discretización. Por otra parte, las soluciones numéricas son algo mas que algoritmos que calculan; es necesario estimar cuándo una solución encontrada converge a la solución en el límite continuo. Para esto se requiere introducir una prueba de convergencia de Cauchy.

Para ilustrar como funciona la discretización, consideremos el caso en el que un dominio finito tiene como coordenada espacial  $x$  y coordenada temporal  $t$

- Las coordenadas espaciales estan definidas como un conjunto discreto de puntos dados por  $x_i = i\Delta x$ , con  $i$  un natural, donde la frontera izquierda corresponde al punto  $x_0$  y la frontera derecha al punto  $x_N$ .
- El tiempo  $t^n = n\Delta t$ , con  $n$  un natural, está definido solamente para ciertos valores del tiempo continuo.
- Los puntos  $x_i$  y  $t^n$  definen una malla que es una versión discreta del dominio espacio-temporal.



- Una función estará definida solamente para los valores de  $x$  y  $t$  que corresponden a puntos de la malla. Denotaremos a la función que esté definida en el punto  $(t^n, x_i)$  como  $f_i^n$ . Una suposición fundamental en el método de diferencias finitas, es que las funciones son analíticas, y que por tanto es posible hacer una expansión en serie de Taylor en torno a cualquiera de los puntos de la malla donde están definidas.

-  $\Delta x$  y  $\Delta t$  indican la resolución en las coordenadas espacial y temporal respectivamente.

- La primera derivada de una función suave  $f$  en el punto  $x_j$  está aproximada por

$$\frac{\partial f}{\partial x} \rightarrow \frac{f_{i+1}^n - f_{i-1}^n}{2\Delta x}$$

para todos los tiempos. Esta aproximación es precisa a segundo orden y usa información de los puntos  $x_{i+1}$  y del  $x_{i-1}$  lo cual es la razón por la que se le llama a esta fórmula una diferenciación finita centrada (ver apéndice A donde aparece la deducción de esta fórmula).

- Si se requiere usar solamente puntos de la derecha o de la izquierda, por ejemplo, en el caso de las fronteras, la derivada de primer orden en  $x_0$  es:

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{-3f_0^n + 4f_1^n - f_2^n}{2\Delta x}$$

y en  $x_N$  es:

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{-3f_N^n + 4f_{N-1}^n - f_{N+2}^n}{2\Delta x}$$

Estos operadores son muy importantes cuando aplicamos condiciones de frontera que contienen derivadas espaciales (ver apéndice B).

- La derivada espacial de segundo orden en  $x_i$  está aproximada a segundo orden por:

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \rightarrow \frac{f_{i+1}^n - 2f_i^n + f_{i-1}^n}{(\Delta x)^2}$$

para el tiempo  $t = n\Delta t$ .

- La derivada temporal de primer orden en el punto  $(t^{n+\frac{1}{2}}, x_i)$  esta dada por:

$$\frac{\partial f}{\partial t} \rightarrow \frac{f_i^{n+1} - f_i^n}{\Delta t}$$

esta derivada puede ser calculada en otro nivel de tiempo

- La extrapolación para calcular  $f_0^n$  con segundo orden de precisión en la frontera izquierda en terminos de los valores de los puntos del interior es:

$$f_0^n = 3f_1^n - 3f_2^n + f_3^n$$

y para la frontera derecha:

$$f_N^n = 3f_{N-1}^n - 3f_{N-2}^n + f_{N-3}^n$$

.

## 2.2 Convergencia

Cuando se resuelven ecuaciones usando diferencias finitas, las soluciones no son exactamente las mismas que para el caso continuo. Por el simple hecho de discretizar se introduce un error de truncación. En el mejor de los casos, las aproximaciones usadas para discretizar tienen propiedades que indican que tienen un comportamiento razonable para el límite continuo.

Consideremos que calculamos una función  $f_j$  con precisión de segundo orden, de modo que es posible expresarla como

$$f(x) = f_0(x) + E(x)(\Delta x^2) + O(\Delta x^3)$$

donde  $f_0(x)$  es la solución exacta en el continuo y  $E$  denota el término desconocido del error de truncación.

Si  $f_0(x)$  es conocido, es suficiente con comparar los resultados obtenidos usando diferencias finitas con dos diferentes resoluciones,  $f_1$  obtenida usando  $\Delta x$  y  $f_2$  obtenida usando  $\Delta x/2$ . Luego la teoría predice que

$$\frac{f_1 - f_0}{f_2 - f_0} = \frac{\Delta x^2 + O(\Delta x^3)}{\frac{1}{4}\Delta x^2 + O(\Delta x^3)} = 4 + O(\Delta x^3) \quad (2.1)$$

o sea, que la diferencia entre la solución exacta y  $f_1$  es cuatro veces mayor que la diferencia entre la solución exacta y  $f_2$ . Cuando la solución exacta es desconocida, podemos hacer una prueba de convergencia de Cauchy, usando los resultados de tres diferentes resoluciones. Sean  $f_1$  y  $f_2$  como antes y ahora también  $f_4$  que es calculada usando resolución  $\Delta x/4$ . Así

$$\frac{f_1 - f_2}{f_2 - f_4} = \frac{\Delta x^2 - \frac{1}{4}\Delta x^2 + O(\Delta x^3)}{\frac{1}{4}\Delta x^2 - \frac{1}{16}\Delta x^2 + O(\Delta x^3)} = \frac{\Delta x^2 + O(\Delta x^3)}{\frac{1}{4}\Delta x^2 + O(\Delta x^3)} = 4 + O(\Delta x^3) \quad (2.2)$$

donde una vez más aparece el factor cuatro. Dicho factor se llama factor de convergencia de las soluciones calculadas con la aproximación de diferencias finitas. Sin embargo en este caso con solución exacta desconocida, lo que se compara es la diferencia entre los resultados obtenidos con las diferentes resoluciones. Es preciso tener en cuenta que el factor de convergencia ha de ser cuatro cuando las aproximaciones usadas son de segundo orden y mayor cuando las aproximaciones son más precisas.

Según sea el valor del factor de convergencia, es posible establecer si los cálculos prometen un comportamiento correcto o no en el límite continuo. Por ejemplo, en nuestro

caso de aproximaciones de segundo orden, si el factor de convergencia es menor que cuatro, tenemos que aceptar que la convergencia de la solución no es tan buena como debiera. Las posibles razones son: hay un error en el algoritmo o en la implementación del programa ó el algoritmo no converge en el rango de la  $\Delta x$  seleccionada. Entiéndase que no es de esperar que el factor de convergencia sea cuatro cuando se eligen valores ridículamente grandes de  $\Delta x$ .

### 2.3 Método de Integración Runge-Kutta

El método de integración Runge-Kutta es un método para resolver ecuaciones diferenciales numéricamente. Usaremos el de tercer orden. Este algoritmo es estable y es muy usado porque solo requiere de tres iteraciones, lo que ahorra tiempo al CPU. Para ilustrar como funciona este algoritmo, supongamos que cierta función  $f$  satisface la ecuación  $\frac{\partial f}{\partial t} = S(x_i, t^n)$ . Para calcular valores de nuestra función  $f^{n+1}$  al tiempo  $t^{n+1}$  en términos de los datos a tiempo  $t^n$  basta con seguir la regla:

$$f^* = f^n + \Delta t S^n$$

$$f^{**} = \frac{3}{4}f^n + \frac{1}{4}f^* + \frac{\Delta t}{4}S^* \quad (2.3)$$

$$f^{n+1} = \frac{1}{3}f^n + \frac{2}{3}f^{**} + \frac{2}{3}\Delta t S^{**}$$

donde los valores  $S^*$  se calculan usando los valores de  $f^*$  y los de  $S^{**}$  usando los de  $f^{**}$ .

### Capítulo 3

#### SOLUCION DE LA ECUACION DE SCHRÖDINGER EN UNA DIMENSION

Para este caso es posible escribir la ecuación de Schrödinger de la siguiente forma:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x, t)\Psi(x, t) \quad (3.1)$$

Esta ecuación es de segundo orden en derivadas parciales para  $\Psi$  como función de  $x$  y  $t$ . Es semejante a muchas ecuaciones que aparecen en la Física, sin embargo, una de las características que distingue a la ecuación de Schrödinger es que contiene el número imaginario  $i$ ; por lo tanto, sus soluciones son funciones complejas.

Como primer caso a resolver consideramos una partícula en una caja, de modo que  $V = 0$  y unidades tales que  $\hbar = 1$  y  $m = 1$ , entonces nos queda:

$$i \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} \quad (3.2)$$

Dado que es una ecuación lineal proponemos a  $\Psi(x, t)$  como producto de dos funciones, es decir:

$$\Psi(x, t) = \psi(x)e^{-iEt} \quad (3.3)$$

lo que implica en la ecuación anterior que

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -iE\psi(x)e^{-iEt} \quad y \quad \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = e^{-iEt} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \quad (3.4)$$

Sustituimos estas ecuaciones en (3.2) y obtenemos:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + 2E\psi = 0 \quad (3.5)$$

### 3.1 Solución para una partícula en una caja

#### 3.1.1 Solución Analítica

Escribimos la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (3.6)$$

donde  $V(x)$  es un potencial y  $E$  es la energía del sistema. Sea  $V(x) = 0$  para  $x \in [0, 1]$  y unidades tales que  $\hbar = 1$  y  $m = 1$ , por lo que la ecuación (3.6) se transforma en

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -2E\psi(x) \quad (3.7)$$

$$\text{Sea } k^2 = 2E \quad \Rightarrow \quad k = \sqrt{2E}$$

$$\Rightarrow \quad \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -k^2\psi(x) \quad (3.8)$$

cuya solución es

$$\psi(x) = A\text{sen}(kx) + B\text{cos}(kx) \quad (3.9)$$

donde  $A$  y  $B$  son constantes. Aplicamos las condiciones de frontera correspondientes a una caja, es decir  $\psi(0) = \psi(1) = 0$

$$\psi(0) = 0 \quad \Rightarrow \quad B = 0 \quad \Rightarrow \quad \psi(x) = A\text{sen}(kx) \quad (3.10)$$

$$\psi(1) = 0 \quad \Rightarrow \quad A\text{sen}k = 0 \quad \Rightarrow \quad kx = n\pi, \quad n \in \mathbf{Z} \quad (3.11)$$

Solamente tomaremos  $n \in \mathbf{N}$  porque si  $n = 0$ , implica que  $\Psi = 0$  lo que significa que la partícula no se encuentra en la caja. Tampoco tomaremos los valores negativos de  $n$ , pues solamente cambian el signo del seno. La solución trivial  $A = 0$  no la tomaremos en cuenta, pues significa que la partícula no se encuentra en la caja. Los valores propios son

$$E_n = \frac{(n\pi)^2}{2} = \frac{k_n^2}{2} \quad (3.12)$$

Y las funciones propias

$$\psi_n(x) = A_n \text{sen}(n\pi x) \quad (3.13)$$

Sabemos de antemano que la partícula se encuentra en la caja.  $|\psi(x)|^2 = \psi^* \psi$  es la probabilidad de encontrar a la partícula en alguna región de l espacio, por lo que

$$\int_0^1 \psi^* \psi dx = \int_0^1 A_n^2 \text{sen}^2(n\pi x) dx = 1 \quad (3.14)$$

$$\Rightarrow \frac{A_n^2}{2} = 1 \quad \Rightarrow A_n = \sqrt{2}$$

$$\therefore \psi_n(x) = \sqrt{2} \text{sen}(n\pi x) \quad (3.15)$$

No olvidemos que la solución completa de la ecuación de Schrödinger debe depender de  $x$  y de  $t$ , por lo que ésta es:

$$\Psi_n(x) = \sqrt{2} e^{-iE_n t} \text{sen}(n\pi x) \quad (3.16)$$

de la cual solo tomaremos la parte real para probar nuestros códigos, es decir:

$$\Psi_n(x) = \sqrt{2} \cos(E_n t) \text{sen}(n\pi x) \quad (3.17)$$

El conocer la solución analítica de la ecuación de Schrödinger nos servirá para ver que tan bien funciona el código que estamos implementando. A continuación se presenta una gráfica de la solución analítica para  $n \in [1, 5]$  y su densidad de probabilidad

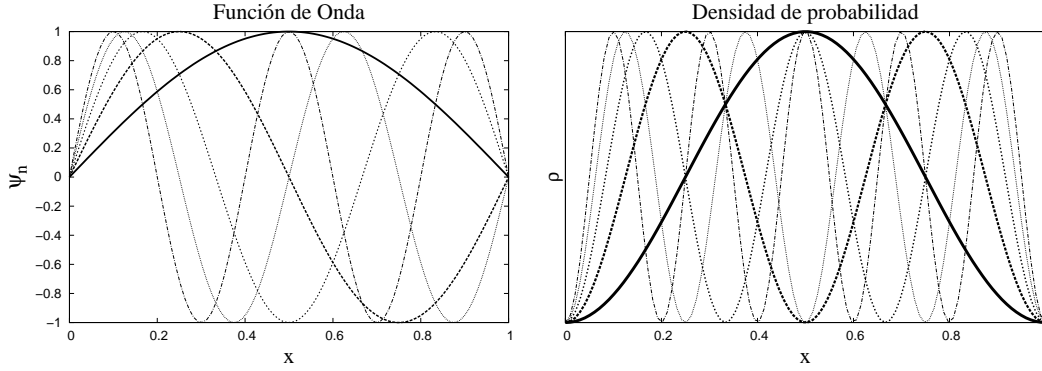


Figure 3.1: Función de Onda para  $n = 1, 2, 3, 4, 5$  y su densidad de probabilidad

### 3.1.2 Método Implícito

La ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo es:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x)\Psi(x, t) \quad (3.18)$$

Sea  $V(x) = 0$  para  $x \in [0, 1]$ , y unidades tales que  $\hbar = 1$  y  $m = 1$ , por lo que la ecuación anterior queda como:

$$i \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} \quad \text{donde } \Psi \in \mathbf{C} \quad (3.19)$$

Sea  $H = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2}$  en el dominio indicado,

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -iH\Psi \quad (3.20)$$

$$\Rightarrow \Psi(x, \Delta t) = e^{-iH\Delta t} \psi_0(x, 0) =$$

donde  $e^{-iH\Delta t}$  es el propagador de la onda, el cual podemos escribir como

$$= \frac{e^{-\frac{1}{2}iH\Delta t}}{e^{\frac{1}{2}iH\Delta t}} \psi_0(x, 0) = \frac{1 - \frac{1}{2}iH\Delta t}{1 + \frac{1}{2}iH\Delta t} \psi_0(x, 0) \quad (3.21)$$

De la anterior nos queda



$$\Psi^{n+1} = \frac{1 - \frac{1}{2}iH\Delta t}{1 + \frac{1}{2}iH\Delta t}\psi^n \quad (3.22)$$

despejamos el denominador del lado derecho de la ecuación anterior

$$\Rightarrow (1 + \frac{1}{2}iH\Delta t)\Psi^{n+1} = (1 - \frac{1}{2}iH\Delta t)\psi^n \quad (3.23)$$

y sustituimos H

$$(1 - \frac{1}{4}i\Delta t \frac{d^2}{dx^2})\Psi^{n+1} = (1 + \frac{1}{4}i\Delta t \frac{d^2}{dx^2})\psi^n \quad (3.24)$$

Escribo la segunda derivada de  $\Psi$  en su forma discreta

$$\Psi_i^{n+1} - \frac{i}{4}\Delta t \left( \frac{\Psi_{i+1}^{n+1} - 2\Psi_i^{n+1} + \Psi_{i-1}^{n+1}}{(\Delta x)^2} \right) = \Psi_i^n + \frac{i}{4}\Delta t \left( \frac{\Psi_{i+1}^n - 2\Psi_i^n + \Psi_{i-1}^n}{(\Delta x)^2} \right) \quad (3.25)$$

Sea  $\rho = i\frac{\Delta t}{4\Delta x^2}$ . Entonces la ecuación (3.25) queda como:

$$\begin{aligned} \Psi_{i-1}^{n+1}[-\rho] + \Psi_i^{n+1}[1 + 2\rho] + \Psi_{i+1}^{n+1}[-\rho] &= \\ &= \Psi_{i-1}^n[\rho] + \Psi_i^n[1 - 2\rho] + \Psi_{i+1}^n[\rho] \end{aligned} \quad (3.26)$$

Lo anterior lo podemos escribir como el producto de dos matrices, una de tamaño  $n \times n$  cuyas entradas son los coeficientes de las  $\psi'$ s del lado derecho de la ecuación anterior. Obsérvese que esa matriz es una matriz tridiagonal. La otra matriz, de tamaño  $n \times 1$  esta formada por las  $\psi'$ s. Del lado derecho tenemos una matriz de tamaño  $n \times 1$  cuyas entradas son la parte derecha de la ecuación anterior

$$\begin{pmatrix}
 (1+2\rho) & -\rho & 0 & 0 & \dots & \dots & 0 \\
 -\rho & (1+2\rho) & -\rho & 0 & \dots & \dots & 0 \\
 0 & -\rho & (1+2\rho) & -\rho & 0 & \dots & 0 \\
 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\
 \vdots & \dots & 0 & -\rho & (1+2\rho) & -\rho & 0 \\
 0 & \dots & \dots & 0 & -\rho & (1+2\rho) & -\rho \\
 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & -\rho & (1+2\rho)
 \end{pmatrix}
 \begin{pmatrix}
 \Psi_0^{n+1} \\
 \Psi_1^{n+1} \\
 \Psi_2^{n+1} \\
 \vdots \\
 \vdots \\
 \vdots \\
 \Psi_n^{n+1}
 \end{pmatrix}
 =
 \begin{pmatrix}
 (1-2\rho)\Psi_0^n + \rho\Psi_1^n \\
 \rho\Psi_0^n + (1-2\rho)\Psi_1^n + \rho\Psi_2^n \\
 \rho\Psi_1^n + (1-2\rho)\Psi_2^n + \rho\Psi_3^n \\
 \vdots^{\text{a)}} \\
 \vdots \\
 \vdots \\
 \rho\Psi_{n-1}^n + (1-2\rho)\Psi_n^n
 \end{pmatrix}$$

a)

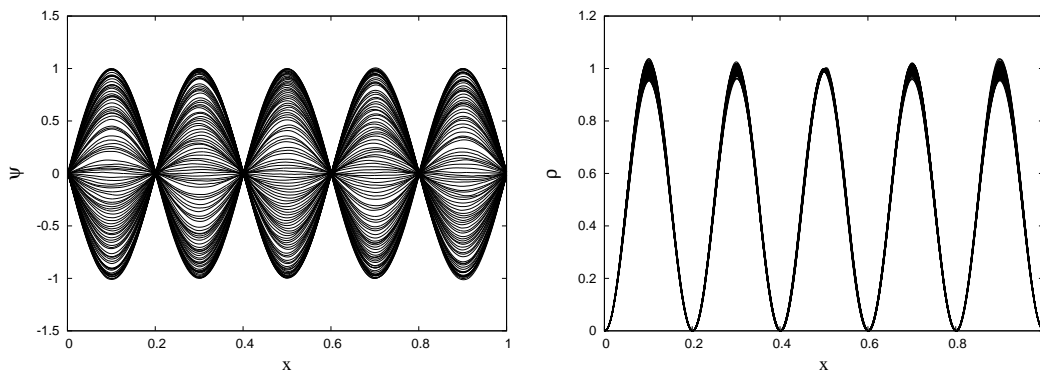


Figure 3.2: Se muestra la función de onda con cinco nodos para todos los tiempos y su densidad de probabilidad.  $x \in [0, 1]$ , dividido en 1000 partes y  $t = 1$

### 3.1.3 Método Explícito

Los métodos explícitos funcionan de manera diferente, pues en lugar de aplicar una discretización tal que sea necesario diagonalizar una matriz, dado que es necesario conocer los valores de la función al tiempo  $n + 1$  para tres puntos del espacio diferentes, se escoge una discretización tal que sea posible resolver la ecuación discretizada para un solo valor de la función en un punto dado al tiempo  $n + 1$ . Para tal efecto, escribimos nuevamente la ecuación de Schrödinger en una caja, o sea

$$\frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = \frac{i}{2} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2}. \quad (3.27)$$

Una discretización explícita es la siguiente:

$$\frac{\Psi_i^{n+1} - \Psi_i^n}{\Delta t} = \frac{i}{2} \frac{\Psi_{i+1}^n - 2\Psi_i^n + \Psi_{i-1}^n}{\Delta x^2}. \quad (3.28)$$

Tal discretización es la más elemental, y se conoce como el método de Euler. Desafortunadamente dicho algoritmo es inestable, pero ejemplifica el concepto de método explícito. Con el fin de tener algoritmos estables, se supone que para cada punto espacial  $x_i$ , la ecuación parcial se convierte en una ecuación ordinaria en el tiempo a lo largo de ese punto. Una vez teniendo esto en mente, la ecuación de evolución se resuelve usando el método preferido de ecuaciones diferenciales ordinarias, por ejemplo los métodos Runge-Kutta o de Crank-Nicholson iterativos (vale distinguir este método del Crank-Nicholson implícito). A tal visión de las ecuaciones de evolución se le conoce como *Método de líneas*. En el presente trabajo, utilizamos el método de Runge-Kutta de tercer orden (2.3), dado que posee un rango de estabilidad conveniente y utiliza solamente tres iteraciones. Para nuestra ecuación de Schrödinger, la ecuación (2.3) involucra a

$$S = \frac{i}{2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}.$$

en la región de la caja. Ejecutamos nuestros programas con diversos valores para el número de nodos, con distintas resoluciones, y en el dominio espacial  $x \in [0, 1]$ . Para

ilustrar nuestros resultados, en la figura 3.3 mostramos la solución encontrada para el mismo caso que en la sección anterior, y con los mismos parámetros de resolución en el espacio y en el tiempo.

Comparando los resultados en las figuras 3.2 y 3.3 es posible notar que la densidad de probabilidad en el caso del método implícito oscila notablemente, en comparación con lo que lo hace cuando se usa el método explícito. Sabemos que el método implícito es incondicionalmente estable para cualquier valor de  $\Delta t$ , sin embargo en el presente caso es notable que el método no aporta resultados correctos, pues la densidad de probabilidad debiera ser independiente del tiempo. Ahora, es posible corregir las oscilaciones en la densidad de probabilidad, pero para tal efecto<sup>a)</sup> es necesario usar valores de  $\Delta t$  mucho menores que el presentado en estas dos gráficas. O sea, que para obtener buenos resultados usando el método implícito el precio a pagar es una resolución temporal ridículamente pequeña, y el número de iteraciones (pasos en la evolución) se incrementaría en ordenes de magnitud.

Es por esta razón que de entre los métodos elegimos el explícito con el integrador Runge-Kutta de tercer orden en lo que resta del presente trabajo.

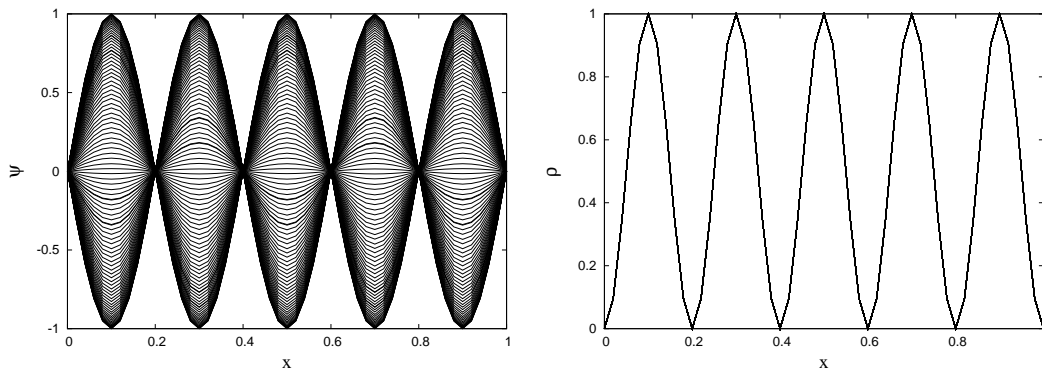


Figure 3.3: Función de Onda con cinco nodos ( $n=5$ ) para todos los tiempos ( $t=1$ ) y su densidad de probabilidad.  $x \in [0, 1]$

### 3.1.4 Pruebas del código

Una vez convencidos de que el método explícito es potencialmente mas confiable, es necesario mostrar que en efecto lo es, es decir, que converge en el régimen de parámetros numéricos que estamos usando. Aquí verificamos que en efecto el método explícito arroja resultados que convergen a la solución analítica en un amplio rango de resoluciones.

El primer paso a dar para probar que los resultados que arroja el código son correctos es comparar los cálculos con la solución analítica (con la que afortunadamente contamos para este caso de prueba). De modo que definimos la función error por:

$$e = \Psi_n - \Psi_a \quad (3.29)$$

donde  $\Psi_n$  y  $\Psi_a$  son la solución numérica y analítica respectivamente. En este estudio compararemos la parte real de la solución, cuya solución analítica para el presente caso esta dada por la expresión (3.17). Sabremos que los resultados calculados convergen a la solución si cumple con los criterios de convergencia descritos en la sección 2.2. Para tal efecto se ejecutó el programa con distintas resoluciones espaciales, simplemente conservando el valor de  $\Delta t / \Delta x^2 = 0.1$ ; el dominio espacial es tal que  $x \in [0, 1]$  con un número de puntos  $N = 50, 100, 500, 1000$  y el tiempo de ejecución fue hasta  $t = 2$ . Como se discutió en la sección 2.2, cuando se conoce la solución analítica basta con usar dos resoluciones, sin embargo, aquí, además de hacer esa prueba, mostramos que el método explícito es convergente en un amplio rango de resoluciones.

Por ejemplo, en la figura 3.4 mostramos que el resultado converge a la solución analítica en distintos momentos, pues el error en el caso en que se usan 500 puntos es cuatro veces mayor que el error cuando se usan 1000 puntos.

Sin embargo, un resultado impresionante es el que aparece en la figura 3.5, donde se compara el error obtenido cuando se usan 1000 puntos contra el error cuando se usan 50 puntos, es decir, una resolución veinte veces mas pobre. El resultado es que el error es 400 veces mayor cuando se usa la resolución mas pobre que el obtenido con 1000 puntos,

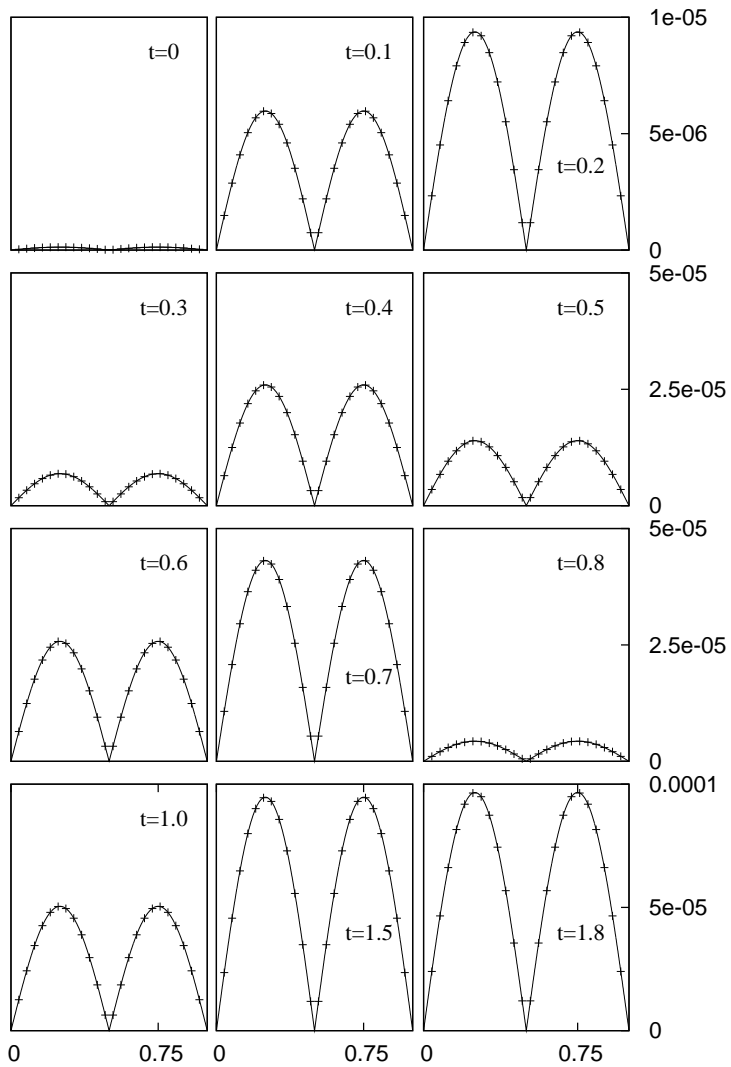


Figure 3.4: Comparación del error cuando se usan resoluciones  $\Delta x = 0.001$  y  $\Delta x = 0.002$ . El error calculado con la alta resolución aparece multiplicado por 4, y dado que la gráficas aparecen una encima de la otra para todos los tiempos mostrados, es una prueba de que el algoritmo posee convergencia de segundo orden. Las líneas continuas representan el error calculado con  $\Delta x = 0.001$ , y los puntos indican el error calculado con  $\Delta x = 0.002$  dividido por 4.

que es justamente el resultado esperado si generalizamos los resultados en la expresión (2.1). Esto habla de que los resultados obtenidos con este algoritmo convergen incluso cuando se utilizan resoluciones que van de  $\Delta x = 0.001$  hasta  $\Delta x = 0.02$ .

### 3.2 Solución para una partícula con un potencial de Oscilador Armónico Simple

El potencial de oscilador armónico simple es de gran importancia, ya que puede usarse para describir una gran cantidad de problemas donde la partícula ejecuta pequeñas vibraciones alrededor de la posición de equilibrio estable. En esta posición  $V(x)$  debe tener un mínimo. Para toda  $V(x)$  continua, la forma de la curva en la vecindad del mínimo se puede aproximar a una parábola.

El potencial para un oscilador armónico simple es

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2 \quad (3.30)$$

Una partícula cuya energía potencial tenga esta forma experimentará una fuerza restauradora

$$F = -\frac{\partial V}{\partial x} = -Cx$$

Si se suelta la partícula a una cierta distancia de la posición de equilibrio, esta oscilará alrededor de la posición de equilibrio con frecuencia

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{2m}} \quad (3.31)$$

podemos escribir a  $k$  en términos de la frecuencia, es decir

$$k = m(2\pi\nu)^2 \quad (3.32)$$

$$\Rightarrow V(x) = 2m\nu^2\pi^2 x^2$$

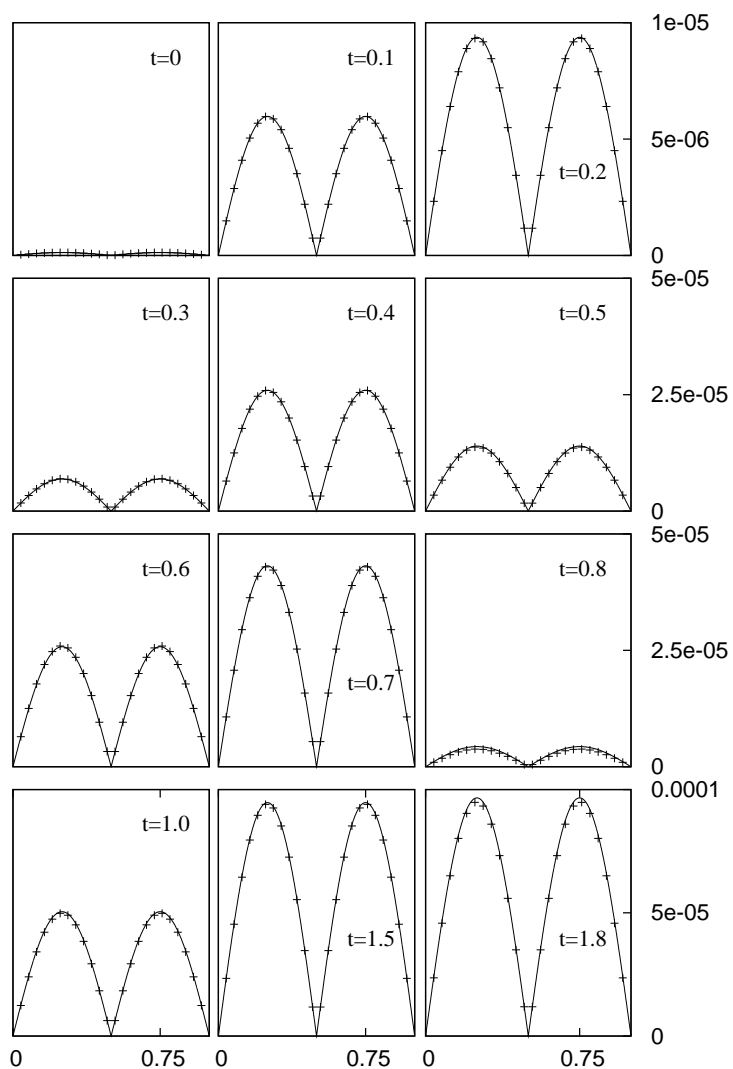


Figure 3.5: Comparación del error cuando se usan resoluciones  $\Delta x = 0.001$  y  $\Delta x = 0.02$ . El error calculado con la alta resolución aparece multiplicado por 400, y dado que la gráficas aparecen una encima de la otra para todos los tiempos mostrados, es una prueba de que el algoritmo posee un increíblemente amplio rango de convergencia de segundo orden.



La ecuación de Schrödinger correspondiente es:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + 2m\nu^2\pi^2x^2\psi = E\psi \quad (3.33)$$

Para este caso de oscilador armónico simple tomaremos también unidades tales que  $\hbar = 1$ ,  $m = 1$  y  $k = 1$ , por lo que la ecuación anterior nos queda como

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + [2E - 4\pi^2\nu^2x^2]\psi = 0 \quad (3.34)$$

Sea  $\alpha = 2\pi\nu$  y  $\beta = 2E$ , entonces (3.34) se transforma en :

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + [\beta^2 - \alpha^2x^2]\psi = 0 \quad (3.35)$$

Será conveniente escribir la nueva ecuación en términos de una nueva variable  $\xi = \sqrt{\alpha}x$

Entonces

$$\frac{d\psi}{dx} = \frac{d\psi}{d\xi} \frac{d\xi}{dx} = \sqrt{\alpha} \frac{d\psi}{d\xi} \quad (3.36)$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{d}{d\xi} \left( \frac{d\psi}{dx} \right) \frac{d\xi}{dx} = \alpha \frac{d^2\psi}{d\xi^2} \quad (3.37)$$

Sustituimos la ecuación (3.37) en (3.35) y obtenemos

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} + \left( \frac{\beta}{\alpha} - \xi^2 \right) \psi = 0 \quad (3.38)$$

Tenemos que encontrar soluciones  $\psi(\xi)$  que sean continuas y que estén acotadas para toda  $\xi$ , desde  $-\infty$  a  $+\infty$ . Las que encontremos serán continuas. Se debe tener cuidado en que  $\psi(\xi)$  esté acotada cuando  $|\xi| \rightarrow \infty$ . Si  $E$  es finita y  $|\xi|$  es muy grande,  $\beta/\alpha$  es despreciable en comparación con  $\xi^2$ , entonces

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} - \xi^2\psi = 0 \quad (3.39)$$

La solución general de esta ecuación es:

$$\psi = Ae^{\xi^2/2} + Be^{-\xi^2/2} \quad (3.40)$$

Como la función debe estar acotada cuando  $|\xi| \rightarrow \infty$ , entonces  $A = 0$ , así que tenemos que buscar soluciones de la forma

$$\psi(\xi) = e^{-\xi^2/2} H(\xi)$$

Así que calculamos

$$\frac{d\psi}{d\xi} = -\xi e^{-\xi^2/2} H + e^{-\xi^2/2} \frac{dH}{d\xi} \quad (3.41)$$

y

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} = -e^{-\xi^2/2} H + \xi^2 e^{-\xi^2/2} H - \xi e^{-\xi^2/2} \frac{dH}{d\xi} - \xi e^{-\xi^2/2} \frac{dH}{d\xi} + e^{-\xi^2/2} \frac{d^2 H}{d\xi^2} \quad (3.42)$$

Sustituyendo en (3.35) las ecuaciones (3.41), (3.42) y reduciendo términos obtenemos

$$\frac{d^2 H}{d\xi^2} - 2 \frac{dH}{d\xi} + \left( \frac{\beta}{\alpha} - 1 \right) H = 0 \quad (3.43)$$

esta ecuación nos da la función  $H(\xi)$  que estamos buscando. La ecuación (3.43) se llama *Ecuación de Hermite*, cuya solución es bien conocida, pues son los polinomios de Hermite.

Escribiremos solamente los primeros cinco polinomios:

$$\begin{aligned} H_0(\xi) &= 1 \\ H_1(\xi) &= 2\xi \\ H_2(\xi) &= 2 - 4\xi^2 \\ H_3(\xi) &= 12\xi - 8\xi^3 \\ H_4(\xi) &= 12 - 48\xi^2 + 16\xi^4 \end{aligned} \quad (3.44)$$

La relación de recurrencia para encontrar el polinomio de Hermite  $n + 1$  es la siguiente:

$$H_{n+1}(\xi) = 2\xi H_n(\xi) - 2nH_{n-1}(\xi) \quad (3.45)$$

La solución a la ecuación (3.38) es:

$$\psi_n(\xi) = \sqrt{\frac{1}{\sqrt{\pi}2^n n!}} e^{-\xi^2/2} H_n(\xi) \quad (3.46)$$

donde

$$\sqrt{\frac{1}{\sqrt{\pi}2^n n!}} \quad (3.47)$$

es un factor de normalización. Si la serie  $H(\xi)$  tuviera un número infinito de términos, el comportamiento de estas soluciones para  $|\xi| \rightarrow \infty$  sería

$$e^{-\xi^2/2} H(\xi) = a_0 C e^{\xi^2/2} + a_1 C' \xi e^{\xi^2/2}$$

cuya solución diverge cuando  $|\xi| \rightarrow \infty$ , comportamiento inaceptable para una función propia. Sin embargo, podemos tener funciones propias aceptables para ciertos valores de  $\beta/\alpha$ . Hagamos cero alguna de las constantes  $a_0$  o  $a_1$ . Para forzar a que la serie  $H(\xi)$  termine pongamos

$$\frac{\beta}{\alpha} = 2n + 1$$

donde

$$n = 1, 3, 5, \dots \quad \text{si } a_0 = 0$$

$$n = 0, 2, 4, \dots \quad \text{si } a_1 = 0$$

Las soluciones aceptables a la ecuación de Schrödinger son para las que se cumple  $\beta/\alpha = 2n + 1$ , es decir

$$\frac{\beta}{\alpha} = E$$

De modo que los estados permitidos de la energía total son:

$$E_n = \left( n + \frac{1}{2} \right) \quad (3.48)$$

La solución de la ecuación de Schrödinger para un potencial de oscilador armónico por lo tanto es:

$$\Psi_n(x, t) = \sqrt{\frac{1}{\sqrt{\pi}2^n n!}} e^{-iE_n t} e^{-x^2/2} H_n(x) \quad (3.49)$$

de la cual solo tomaremos la parte real para verificar los códigos usados, es decir:

$$\Psi_n(x, t) = \sqrt{\frac{1}{\sqrt{\pi}2^n n!}} \cos \left( \left( n + \frac{1}{2} \right) t \right) e^{-x^2/2} H_n(x) \quad (3.50)$$

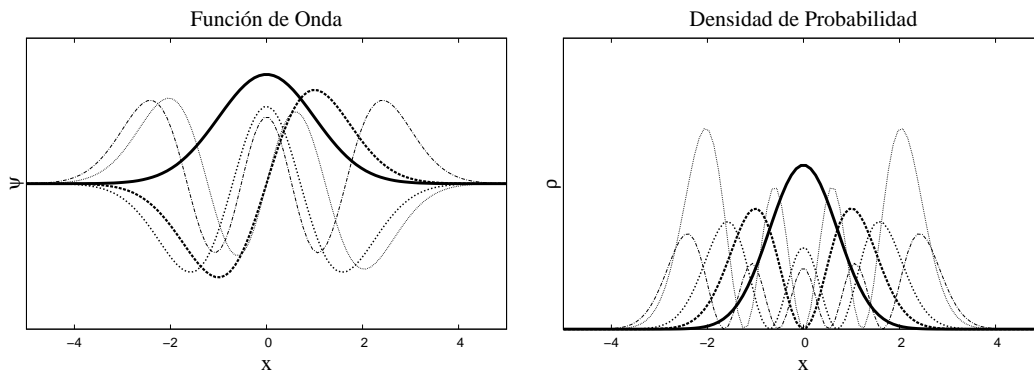


Figure 3.6: Se muestra la solución analítica de la ecuación de Schrödinger para un potencial de oscilador armónico y su densidad de probabilidad para los primeros cinco polinomios de Hermite.

## Capítulo 4

### SOLUCION DE LA ECUACION DE SCHRÖDINGER EN DOS DIMENSIONES

Volvemos a escribir la ecuación de Schrödinger:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, y, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2 \Psi(x, y, t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi(x, y, t)}{\partial y^2} \right) + V(x, y, t) \Psi(x, y, t) \quad (4.1)$$

Esta ecuación es de segundo orden en derivadas parciales para  $\Psi$  como función de  $x$ ,  $y$  y  $t$ . De ésta ecuación tomamos  $V = 0$  y unidades tales que  $\hbar = 1$  y  $m = 1$ , entonces nos queda:

$$i \frac{\partial \Psi(x, y, t)}{\partial t} = -\frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2 \Psi(x, y, t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi(x, y, t)}{\partial y^2} \right) \quad (4.2)$$

Como es una ecuación de segundo grado en derivadas parciales podemos escribir a  $\Psi(x, y, t)$  como producto de dos funciones, es decir:

$$\Psi(x, y, t) = \psi(x, y) e^{-iEt} \quad (4.3)$$

Derivamos la ecuación (4.3) respecto a  $t$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -iE \psi(x, y) e^{-iEt} \quad (4.4)$$

y obtenemos la segunda derivada de  $\Psi$  respecto a  $x$  de la ecuación (4.3)

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = e^{-iEt} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \quad (4.5)$$

y la segunda derivada de  $\Psi$  respecto a  $y$  de la ecuación (4.3)

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} = e^{-iEt} \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} \quad (4.6)$$

Sustituimos las ecuaciones (4.4), (4.5) y (4.6) en la ecuación (4.3) y obtenemos:

$$\left( \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} \right) + 2E\psi(x, y) = 0 \quad (4.7)$$

#### 4.1 Solución para una partícula en una caja bidimensional

##### 4.1.1 Solución Analítica

La ecuación de Schrödinger en dos dimensiones para una caja es:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi = E\psi \quad (4.8)$$

donde

$$\nabla^2 \psi = \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} \quad (4.9)$$

es el Laplaciano de  $\psi$ . Ahora la partícula estará confinada a una superficie de lado  $L_x = 1$  en la dirección  $x$  y lado  $L_y = 1$  en la dirección  $y$ . Así como para el caso en una dimensión, el potencial será cero en el interior de la caja. Ahora  $\psi$  es función de dos variables  $x$  y  $y$ , es decir  $\psi = \psi(x, y)$ . Para resolver la ecuación (4.8) usamos el método de separación de variables. Suponemos que  $\psi$  puede ser expresada como el producto de dos funciones independientes, la primera depende solamente de  $x$  y la segunda solo de  $y$ , es decir:

$$\psi(x, y) = X(x)Y(y) \quad (4.10)$$

Sustituyendo la ecuación anterior (4.10) en la (4.8) obtenemos

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( Y \frac{\partial^2 X}{\partial x^2} + X \frac{\partial^2 Y}{\partial y^2} \right) = EXY \quad (4.11)$$

dividimos por  $XY$  y escribimos

$$\frac{d^2 X}{dx^2} = X'' \quad \mathbf{y} \quad \frac{d^2 Y}{dy^2} = Y''$$

por lo que la ecuación (4.11) se transforma en

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{X''}{X} + \frac{Y''}{Y} \right) = E \quad (4.12)$$

Notemos que  $X''/X$  es independiente de  $y$ , cualquier cambio de  $y$  solo puede afectar al término  $Y''/Y$ , pero se ve que cualquier cambio de ese término hace cambiar la energía, que es una constante, por lo tanto podemos decir que  $Y''/Y$  es una constante independiente de  $y$ . El mismo argumento se aplica para decir que  $X''/X$  es independiente de  $x$ . Entonces podemos escribir

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{X''}{X} = E_x \quad y \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{Y''}{Y} = E_y \quad (4.13)$$

donde  $E = E_x + E_y$ . Reescribiendo las dos ecuaciones anteriores

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 X}{\partial x^2} = E_x X \quad (4.14)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 Y}{\partial y^2} = E_y Y \quad (4.15)$$

Vemos ahora que cada una de las ecuaciones tiene la misma forma que para el caso de una dimensión. Usamos el resultado del capítulo anterior y nos queda que

$$X_{n_x} = \sqrt{2} \overline{\text{sen}(n_x \pi x)} \quad (4.16)$$

$$Y_{n_y} = \sqrt{2} \overline{\text{sen}(n_y \pi y)} \quad (4.17)$$

Recordemos que  $\psi = XY$  y  $E = E_x + E_y$ , por lo que finalmente obtenemos:

$$\psi_{n_x, n_y} = 2 \overline{\text{sen}(n_x \pi x) \text{sen}(n_y \pi y)} \quad (4.18)$$

$$E_{n_x, n_y} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} [(n_x^2) + (n_y^2)] \quad (4.19)$$

Recordemos nuevamente que la solución de la ecuación de Schrödinger depende de  $x$  y  $t$ . La solución completa es:

$$\Psi = 2e^{-iE_n t} \text{sen}(n_x \pi x) \text{sen}(n_y \pi y) \quad (4.20)$$

de la cual solo tomaremos la parte real en nuestros códigos para verificar que estos sí funcionan correctamente, es decir:

$$\Psi = 2\cos(E_n t) \text{sen}(n_x \pi x) \text{sen}(n_y \pi y) \quad (4.21)$$

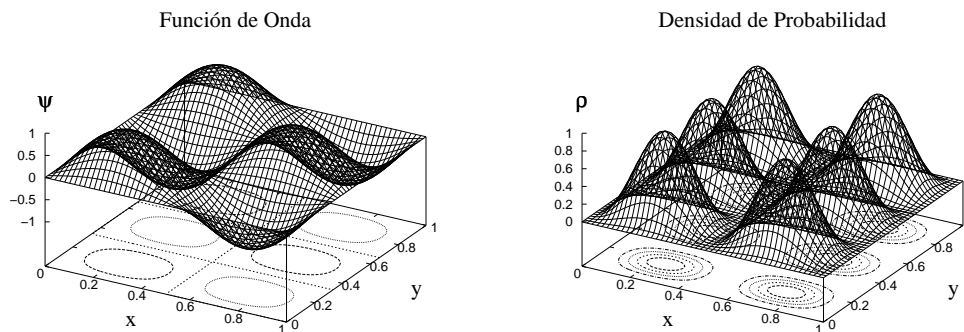


Figure 4.1: Se muestra en la figura la Función de Onda con dos nodos a lo largo del eje  $x$  y tres nodos a lo largo del eje  $y$ . Se muestra también la Densidad de Probabilidad.

#### 4.1.2 Método Explícito

Escribimos la ecuación de Schrödinger en dos dimensiones:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi \quad (4.22)$$

donde

$$\nabla^2 \Psi = \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} \quad (4.23)$$



es el Laplaciano de  $\Psi$ . Tomamos de nuevo  $\hbar = 1$  y  $m = 1$ . Entonces la ecuación de Schrödinger en su forma discreta se escribe como

$$\frac{\Psi_{i,j}^{n+1} - \Psi_{i,j}^n}{\Delta t} = \frac{i}{2} \left( \frac{\Psi_{i+1,j}^n - 2\Psi_{i,j}^n + \Psi_{i-1,j}^n}{(\Delta x)^2} + \frac{\Psi_{i,j+1}^n - 2\Psi_{i,j}^n + \Psi_{i,j-1}^n}{(\Delta y)^2} \right) \quad (4.24)$$

Escribiremos la ecuación anterior como

$$\frac{\Psi_{i,j}^{n+1} - \Psi_{i,j}^n}{\Delta t} = S \quad (4.25)$$

que se resuelve usando el método de Runge-Kutta (2.3)

a)

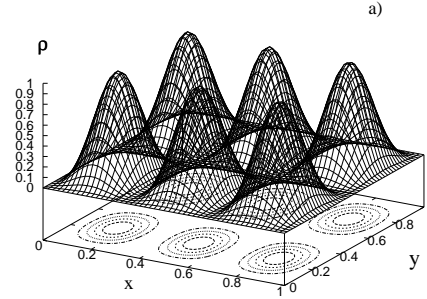
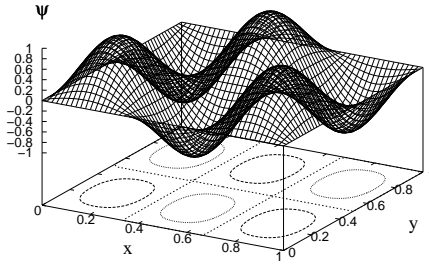


Figure 4.2: Se muestra en la figura la Función de Onda con dos nodos a lo largo del eje  $x$  y tres nodos a lo largo del eje  $y$  al tiempo  $t=1$ . Se muestra también la Densidad de Probabilidad. Estas gráficas se obtuvieron utilizando el código programado.  $x \in [0, 1]$ ,  $y \in [0, 1]$ , cada eje dividido en 100 partes

#### 4.2 Solución para una partícula con un potencial de Oscilador Armónico Simple Bidimensional

El potencial de un oscilador armónico en dos dimensiones es:

$$V(x, y) = \frac{1}{2}K(x^2 + y^2) \quad (4.26)$$

el cual podemos escribir en términos de su frecuencia de oscilación (la cual es la misma que para el caso de una dimensión), tomaremos también unidades tales que  $\hbar = 1$ ,  $K = 1$  y  $m = 1$

$$V(x, y) = 2\pi^2\nu^2(x^2 + y^2) \quad (4.27)$$

La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo es por lo tanto

$$-\frac{1}{2}\nabla^2\psi + 2\pi^2\nu^2(x^2 + y^2)\psi = E\psi$$

o bien,

$$\nabla^2\psi + (2E - 4\pi^2\nu^2(x^2 + y^2))\psi = 0 \quad (4.28)$$

donde recordemos que

$$\nabla^2\psi = \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}$$

Sea  $\alpha = 2\pi\nu$  y  $\beta = 2E$ , entonces la ecuación (4.28) se transforma en

$$\nabla^2\psi + (\beta - \alpha^2(x^2 + y^2))\psi = 0 \quad (4.29)$$

Será conveniente escribir esta ecuación en términos de dos nuevas variables. Sean

$$\xi = \sqrt{\alpha}x \quad (4.30)$$

$$\eta = \sqrt{\alpha}y \quad (4.31)$$

Entonces

$$\frac{d\psi}{dx} = \frac{d\psi}{d\xi} \frac{d\xi}{dx} = \sqrt{\alpha} \frac{d\psi}{d\xi} \quad (4.32)$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{d}{d\xi} \left( \frac{d\psi}{dx} \right) \frac{d\xi}{dx} = \alpha \frac{d^2\psi}{d\xi^2} \quad (4.33)$$

$$\frac{d\psi}{dy} = \frac{d\psi}{d\eta} \frac{d\eta}{dy} = \sqrt{\alpha} \frac{d\psi}{d\eta} \quad (4.34)$$

$$\frac{d^2\psi}{dy^2} = \frac{d}{d\eta} \left( \frac{d\psi}{dy} \right) \frac{d\eta}{dy} = \alpha \frac{d^2\psi}{d\eta^2} \quad (4.35)$$

Sustituyendo las ecuaciones (4.33) y (4.35) en (4.29) y reduciendo términos nos queda

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} + \frac{d^2\psi}{d\eta^2} + \left( \frac{\beta}{\alpha} - \xi^2 - \eta^2 \right) \psi = 0 \quad (4.36)$$

Para resolver esta ecuación usamos el método de separación de variables. Suponemos que  $\psi$  puede ser expresada como producto de dos funciones independientes.

Sea  $\psi = X(\xi)Y(\eta)$ , sustituyendo esta expresión en la ecuación (4.36) nos queda

$$Y \frac{d^2X}{d\xi^2} + X \frac{d^2Y}{d\eta^2} + \left( \frac{\beta}{\alpha} - \xi^2 - \eta^2 \right) XY = 0 \quad (4.37)$$

dividimos entre  $XY$

$$\frac{1}{X} \frac{d^2X}{d\xi^2} + \frac{1}{Y} \frac{d^2Y}{d\eta^2} + \left( \frac{\beta}{\alpha} - \xi^2 - \eta^2 \right) = 0 \quad (4.38)$$

y separamos la ecuación en dos sumandos, de manera que cada uno dependa solamente de una variable, es decir

$$\left( \frac{1}{X} \frac{d^2X}{d\xi^2} + \frac{\beta'}{\alpha'} - \xi^2 \right) + \left( \frac{1}{Y} \frac{d^2Y}{d\eta^2} + \frac{\beta''}{\alpha''} - \eta^2 \right) = 0 \quad (4.39)$$

donde

$$\frac{\beta}{\alpha} = \frac{\beta'}{\alpha'} + \frac{\beta''}{\alpha''}$$

Sea

$$\frac{1}{X} \frac{d^2 X}{d\xi^2} + \frac{\beta'}{\alpha'} - \xi^2 = R$$

y

$$\frac{1}{Y} \frac{d^2 Y}{d\eta^2} + \frac{\beta''}{\alpha''} - \eta^2 = -R$$

Por lo tanto

$$\frac{d^2 X}{d\xi^2} - \xi^2 X + \left(\frac{\beta'}{\alpha'} - R\right)X = 0 \quad (4.40)$$

$$\frac{d^2 Y}{d\eta^2} - \eta^2 Y + \left(\frac{\beta''}{\alpha''} - R\right)Y = 0 \quad (4.41)$$

Tenemos que encontrar soluciones  $X(\xi)$  y  $Y(\eta)$  que sean continuas y que esten acotadas para toda  $\xi$  y para toda  $\eta$  desde  $-\infty$  a  $+\infty$ . Las que encontremos serán continuas. Al igual que en el caso de una dimensión debemos tener cuidado en que  $X(\xi)$  este acotada cuando  $|\xi| \rightarrow \infty$  y que  $Y(\eta)$  también lo esté cuando  $|\eta| \rightarrow \infty$ . Para cuando  $|\xi| \rightarrow \infty$ , la ecuación (4.40) queda

$$\frac{d^2 X}{d\xi^2} - \xi^2 X = 0 \quad (4.42)$$

y para cuando  $|\eta| \rightarrow \infty$ , la ecuación (4.41) queda

$$\frac{d^2 Y}{d\eta^2} - \eta^2 Y = 0 \quad (4.43)$$

Vemos que las ecuaciones (4.42) y (4.43) son exactamente iguales que para el caso en una dimensión, por lo tanto, escribiremos solamente su solución, es decir:

$$X_n(\xi) = \sqrt{\frac{1}{\sqrt{\pi} 2^n n!}} e^{-\xi^2/2} H_n(\xi) \quad (4.44)$$

y

$$Y_n(\eta) = \sqrt{\frac{1}{\sqrt{\pi}2^n n!}} e^{-\eta^2/2} H_n(\eta) \quad (4.45)$$

donde recordemos que

$$\sqrt{\frac{1}{\sqrt{\pi}2^n n!}} \quad (4.46)$$

es un factor de normalización.

Los valores permitidos de la energía son:

$$E = n_x + n_y + 1 \quad (4.47)$$

Recordemos que  $\psi = X(\xi)Y(\eta)$ , así que la solución a la ecuación de Schrödinger para un potencial de oscilador armónico en dos dimensiones es:

$$\Psi(x, y, t) = \sqrt{\frac{1}{\pi 2^{n_x} n_x! 2^{n_y} n_y!}} e^{-iE_n t} e^{-\frac{x^2}{2}} e^{-\frac{y^2}{2}} H_{n_x}(x) H_{n_y}(y) \quad (4.48)$$

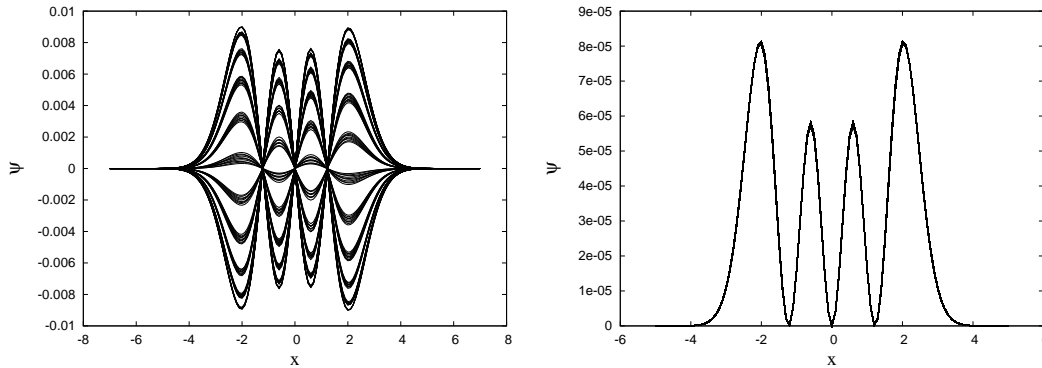


Figure 4.3: Se muestra en la figura la Función de Onda para un potencial de oscilador armónico con tres nodos a lo largo del eje  $x$  y dos nodos a lo largo del eje  $y$  y su densidad de probabilidad.  $x \in [-7, 7]$  y  $y \in [-7, 7]$ .  $t=10$ . Esta gráfica esta vista desde  $y = 0$ .

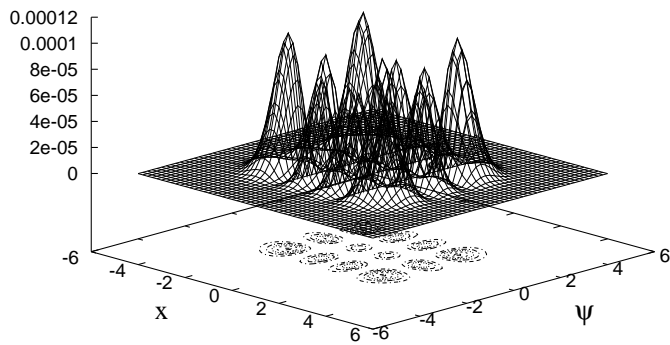
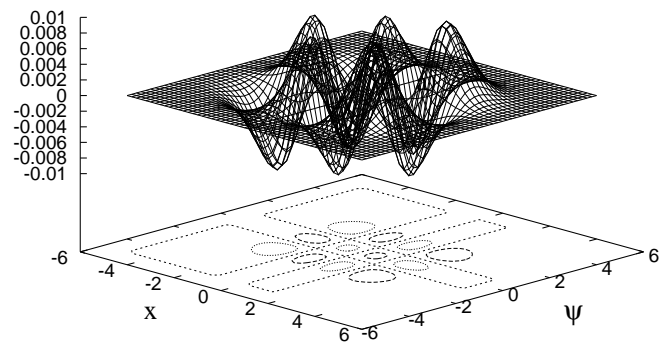


Figure 4.4: Se muestra en la figura la misma Función de Onda para un potencial de oscilador armónico y su densidad de probabilidad que en la fig (4.3), pero ahora ya no vista en un plano, sino en tres dimensiones.

## Capítulo 5

### SOLUCION DE LA ECUACION DE SCHRÖDINGER PARA UN POTENCIAL DE CONDENSADO DE BOSE

En éste capítulo vamos a generar un solitón oscuro estacionario o un solitón oscuro de interacción repulsiva o atractiva en una trampa de condensado de Bose. Los solitones son soluciones de onda estacionaria de una ecuación no lineal. La forma de un solitón no cambia con el tiempo, además mantiene su misma forma incluso cuando interactúa con otros solitones. Han sido observados en óptica, ondas de agua y en condensados de Bose. Los solitones brillantes de un condensado de Bose representan máximos locales mientras que los solitones oscuros y grises representan mínimos locales. Un solitón oscuro estacionario en el cuál el valor de su mínimo local se va a cero es llamado solitón negro. Los solitones oscuros han sido observados en trampas de condensado de Bose y son gobernados por la ecuación de Schrödinger no lineal.

La ecuación de Schrödinger no lineal en una dimensión para el caso de interacción repulsiva se escribe como:

$$i\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{1}{2}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2} + \Lambda|\psi(x,t)|^2\psi(x,t) = 0 \quad (5.1)$$

Esta ecuación tiene soluciones de tipo solitónico como el siguiente solitón oscuro:

$$\psi(x,t) = r(x-ct)e^{-i[\phi(x-ct)-\mu t]} \quad (5.2)$$

con

$$r^2(x - ct) = \kappa - 2\sigma^2 \operatorname{sech}^2[\sigma(x - ct)] \quad (5.3)$$

$$\phi(x - ct) = \frac{1}{\tan\left[\frac{-2\sigma}{c} \tanh[\sigma(x - ct)]\right]} \quad (5.4)$$

$$\sigma = \frac{\sqrt{2\kappa - c^2}}{2} \quad (5.5)$$

donde  $c$  es la velocidad,  $\mu$  es un parámetro y  $\kappa$  esta relacionada con la intensidad. El solitón (ec.5.2) con un "corte" en la densidad de fondo es gris en general. Es oscuro si la densidad  $|\psi|^2 = 0$  en el mínimo. A velocidad cero, el solitón se convierte en solitón negro:  $|\psi(x, t)| = \sqrt{\kappa} \tanh[x\sqrt{\kappa/2}]$ .

La ecuación de Schrödinger no lineal que describe un Condensado de Bose en la aproximación de campo medio para interacción a pares de las componentes de un gas diluído es

$$i \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} + (V(x, t) \Lambda |\psi(x, t)|^2) \psi(x, t) \quad (5.6)$$

llamada Ecuación de Gross-Pitaevskii (en este caso escrita para una dimensión espacial). La similitud entre estas dos ecuaciones implica la posibilidad de localizar un solitón oscuro estacionario o de un solitón negro en una trampa de condensado de Bose de temperatura cero.

La dinámica principal de una trampa de condensado de Bose es usualmente descrita por la ecuación de Gross-Pitaevskii dependiente del tiempo (ec 5.6), donde una no-linealidad positiva ( $\Lambda > 0$ ) representa interacción repulsiva y  $\Lambda < 0$  representa autointeracción atractiva. En esta ecuación,  $V(x, t)$  es un potencial externo.

La ecuación de Gross-Pitaevski (5.6) no tiene solución analítica (conocida) para  $V(x, t) \neq 0$  y  $\Lambda \neq 0$ . Claro que para  $\Lambda = 0$  tenemos la misma solución que para el oscilador armónico. Sin embargo, para  $V(x) = 0$  y  $\Lambda$  positiva, la ecuación (5.6) tiene como solución el siguiente solitón no normalizable:



$$\psi(x, t) = \sqrt{2/n} \tanh(x) e^{-2it} \quad (5.7)$$

## Capítulo 6

### DISCUSION Y CONCLUSIONES

Nuestros resultados son los siguientes:

1. Logramos estabilizar en una trampa armónica una solución solitónica en una dimensión.
2. Logramos estabilizar un CB en dos dimensiones. El potencial externo corresponde a un modelo de interacción entre los átomos condensados y un laser.

Además logramos obtener la solución analítica para el oscilador armónico en dos dimensiones.

## Apéndice A

### Fórmula de Diferenciación Finita Centrada

Hagamos la expansion en serie de Taylor para la funcion  $f$  alrededor del punto  $x$ :

$$f(x + \Delta x) = f|_x + f'|_x \Delta x + \frac{1}{2} f''|_x (\Delta x)^2 + \frac{1}{6} f'''|_x (\Delta x)^3 + \dots \quad (\text{A.1})$$

$$f(x - \Delta x) = f|_x + f'|_x (-\Delta x) + \frac{1}{2} f''|_x (-\Delta x)^2 + \frac{1}{6} f'''|_x (-\Delta x)^3 + \dots \quad (\text{A.2})$$

Lo que quiero obtener es  $f'$ , para lo cual resto (A.2) a (A.1)

$$f(x + \Delta x) - f(x - \Delta x) = 2f'|_x (\Delta x) + \frac{1}{3} f'''|_x (\Delta x)^3 + O(\Delta x)^5$$

divido ambos lados por  $2\Delta x$

$$\frac{f(x + \Delta x) - f(x - \Delta x)}{2\Delta x} = f'|_x + \frac{1}{6} f'''|_x (\Delta x)^2 + O(\Delta x)^4$$

$$f'|_x = \frac{f(x + \Delta x) - f(x - \Delta x)}{2\Delta x} \quad (\text{A.3})$$

## Apéndice B

### Cálculo de una derivada usando solo puntos de la derecha

Ahora vamos a calcular  $f'$  usando puntos solo de la derecha,

$$f(x) = f|_x \tag{B.1}$$

$$f(x + \Delta x) = f|_x + f'|_x \Delta x + f''|_x (\Delta x)^2 + \dots \tag{B.2}$$

$$f(x + 2\Delta x) = f|_x + f'|_x (2\Delta x) + f''|_x (2\Delta x)^2 + \dots \tag{B.3}$$

Quiero obtener  $f'$ , por lo que ahí corto la serie. Multiplico (A.5) por 4 y (A.6) por -1 y las sumo

$$4f(x + \Delta x) - f(x + 2\Delta x) = (4f - f) + (4f' \Delta x - 2f' \Delta x) + \dots$$

$$4f(x + \Delta x) - f(x + 2\Delta x) - 3f = 2f' \Delta x$$

$$f' = \frac{4f(x + \Delta x) - f(x + 2\Delta x) - 3f}{2\Delta x} \tag{B.4}$$

Para obtener  $f'$  solo con puntos de la izquierda se hace de manera similar.

### Referencias

- [1] L. P. Pitaevskii, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 34, 1240 (1958).
- [2] E. P. Gross, J. Math. Phys. **4**, 195 (1963).