
SOLUCIÓN DE LA ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER MEDIANTE LABVIEW

SOLUTION OF THE SCHRÖDINGER EQUATION BY LABVIEW

Oscar Duran-Avendaño¹, Carlos Ramírez-Martín^{2*}

(1) Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Facultad de Ciencias, Escuela de Física,
Carretera Central del Norte, Tunja - Colombia

(2) Universidad de Boyacá, Facultad de Ciencias e Ingeniería, Departamento de Física,
Carrera 2ª Este N°64-169, Tunja - Colombia

*autor de contacto (e-mail: cramirez@uniboyaca.edu.co)

Recibido: 24/05/2011 - Evaluado: 12/07/2011 - Aceptado: 06/10/2011

RESUMEN

En este trabajo se emplea el método numérico de Crank-Nicolson, con aplicación en computación, para resolver la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo para diferentes potenciales. Fue desarrollado en lenguaje LabVIEW, donde es aprovechada la simplicidad de la programación visual que este ofrece junto a la facilidad de manejo matemático como herramienta, que ayuda a simplificar la solución de problemas en el área de la física. Se desarrolla un programa, que permite visualizar el comportamiento que tiene una función de onda asociada a una partícula en tres situaciones diferentes: movimiento libre, penetración de una barrera de potencial y penetración de un potencial escalón. Con esta experiencia se evidencia el desarrollo potencial de simulación a través del software LabVIEW, mostrando una alternativa de uso diferente al de ser un laboratorio virtual, y contribuyendo a la solución de situaciones problemáticas en ciencias básicas.

ABSTRACT

The following work is based on the numerical method of Crank-Nicolson computer applied to solve the time-dependent Schrödinger equation for different potential. It was developed in LabVIEW language where it is exploited the simplicity of visual programming which it offers with ease math use as a tool that helps to simplify the solution of problems in the area of physics. In this work it was developed a program that displays a wave function's behavior associated to a particle in three different situations: free movement, penetration by a potential barrier and penetration of a potential step. This experience demonstrates the potential development of simulation through the LabVIEW software, showing an alternative of use other than being in a virtual laboratory and contributing to the solution of problem situations in basic science.

Palabras clave: método Crank-Nicolson; ecuación de Schrödinger; función de onda; métodos numéricos

Keywords: Crank-Nicolson method; Schrödinger equation; wave function; numerical methods

INTRODUCCIÓN

La vida moderna va ligada a la computación, así, la ciencia, ingeniería, economía, sociología, medicina entre otras ramas del saber, están siendo soportadas por las herramientas que entrega el software. La resolución de problemas físicos por medio de la computación, es a menudo la oportunidad más importante para los estudiantes de observar y explorar en el mundo real las aplicaciones fundamentales de las teorías aprendidas en el aula (Tierman, 2010); cada día, gracias al desarrollo de nuevas herramientas de software y programas especializados es posible resolver problemas cada vez más complejos y extensos.

En la actualidad existe una herramienta denominada LabVIEW (Laboratory Virtual Instruments Engineering Workbench), que es un lenguaje de programación gráfico desarrollado en 1986 por National Instruments. Se ha convertido en un poderoso y flexible instrumento para ingenieros y científicos en la investigación a través de la academia y la industria (Faraco & Gabriele, 2007). LabVIEW se utiliza ampliamente como un software de medición, desarrollando herramientas de investigación a nivel académico, industrial y de desarrollo. En contraste con C++ o Visual Basic por ejemplo, LabVIEW es un lenguaje de programación gráfico que permite la creación de programas de alta calidad en períodos de tiempo cortos (Lin *et al.*, 2011)

El software LabVIEW, representa un entorno de programación que incluyen herramientas específicas necesarias para control de instrumentos, adquisición de datos, almacenamiento, análisis, y la presentación e integración de esas características en un solo sistema. Se utiliza la programación gráfica y un lenguaje gráfico especial denominado G. El objetivo principal de LabVIEW representa la creación de instrumentos virtuales. La instrumentación virtual puede utilizarse no sólo para la construcción del mundo real de los instrumentos, sino que también puede ser utilizada para crear aplicaciones que simulan dispositivos en el mundo real y operación de instrumentos, para la animación y modelización de procesos físico reales (Dumitrescu *et al.*, 2009).

Existen una gran variedad de software de uso libre y comercial, que están basados en la programación visual, LabVIEW es un ejemplo de ellos que se utiliza a nivel comercial, y al estar basado en esta clase de programación, facilita el trabajo del programador obteniendo eficiencia en el desarrollo de programas. LabView es un lenguaje gráfico de flujo de datos, que se adapta bien al abordar problemas de espacio emergente en aplicaciones de tiempo real que demandan un alto rendimiento del equipo. El alto nivel del modelo de programación permite a los usuarios expresar con facilidad el paralelismo en los sistemas complejos sin dejar de lograr los altos rendimiento necesarios (Giannone *et al.*, 2011). La principal ventaja que presenta LabVIEW frente a otro software es la calidad y cantidad de herramientas matemáticas que posee, LabVIEW emplea una mezcla de elementos de representación visual y textual. Los elementos visuales básicos consisten en pequeñas cajas (que representan los valores, los operadores y el llamado de funciones) y líneas de conexión (Whitley *et al.*, 2006).

Basado en estas características de programación, en este trabajo fue modelado y simulado un fenómeno físico cuántico, como el comportamiento de la evolución en el tiempo de una onda asociada a una partícula interactuando con diferentes potenciales (Orquín *et al.*, 2007). De esta forma la simulación se presenta como una alternativa en potencia para el desarrollo de soluciones de ecuaciones diferenciales y es una prometedora herramienta, ya que permite la interacción y comunicación con otros programas que poseen notorias utilidades en simulación como es el caso de MatLab.

El método numérico Crank-Nicolson (Carjana *et al.*, 2003; Orquín *et al.*, 2007; Wytse & Toyama, 2007) se utilizó para la solución de la ecuación de onda de Schrödinger, ya que ofrece gran estabilidad en la solución de ecuaciones diferenciales de segundo orden. En el esquema de Crank-Nicolson, el problema original se transforma en un sistema equivalente definido en una región rectangular por una transformación lineal (Cao & Sun, 2010). Este desarrollo brinda la posibilidad de variar parámetros en los cuales se hace visible la evolución temporal de la función de onda.

PROCEDIMIENTO TEORICO

Considerando la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo (TDSE), con un potencial V independiente del tiempo.

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = H\psi(x,t), \quad x \in R, \quad t > 0 \quad (1)$$

Donde;

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \quad (2)$$

y suponiendo que:

$$\psi(x,0) = \psi^I(x), \quad \psi^I \in L^2(R) \quad (3)$$

Se busca una solución tal que $\psi(x,t) \in L^2(R)$ para cualquier $t > 0$ (Sakurai, 1994). La solución formal puede ser escrita como:

$$\psi(t + \Delta t) = \exp\left(\frac{-iH\Delta t}{\hbar}\right) \psi(t) \quad (4)$$

Método Crank-Nicolson

El método de Crank-Nicolson, es un método de diferencias finitas utilizado para resolver numéricamente los problemas difusivos de valor inicial. La parte principal de este método es la operación de evolución en el tiempo (Kang & Won, 2008).

En este método, la exponencial es aproximada por el método de la transformada Cayley (Wytse & Toyama, 2007)

$$\psi(t + \Delta t) = \left(1 - \frac{iH\Delta t}{2\hbar}\right) \left(1 + \frac{iH\Delta t}{2\hbar}\right)^{-1} \psi(t) \quad (5)$$

El espacio está dividido en segmentos del mismo tamaño Δx , se denota a ψ_j^n como la función en los puntos n y j en el punto x_j . Para el cálculo de $H\psi_j^n$ se necesita de una aproximación de segundo orden tal como la siguiente (Heermann, 1990; Schweizer, 2002).

$$\frac{\partial^2 \psi_j^n}{\partial x^2} \approx \frac{\psi_{j+1}^n - 2\psi_j^n + \psi_{j-1}^n}{\Delta x^2} \quad (6)$$

De acuerdo a la ecuación 6, se puede escribir que:

$$1 + \frac{iH\Delta t}{2\hbar} \psi_j^{n+1} = 1 - \frac{iH\Delta t}{2\hbar} \psi_j^n \quad (7)$$

Procediendo a la adimensionalización, se tiene:

$$\lambda = \frac{4im\Delta x^2}{\hbar\Delta t}, \quad \mu = \frac{2m\Delta x^2}{\hbar^2} \quad (8)$$

Usando la aproximación para encontrar los valores de ψ_j^{n+1} , y definiendo el potencial discreto como $V_j = V(x_j)$, se obtiene:

$$\psi_{j+1}^{n+1} + (\lambda - \mu V_j - 2)\psi_j^{n+1} + \psi_{j-1}^{n+1} = -\psi_{j+1}^n + (\lambda + \mu V_j + 2)\psi_j^n - \psi_{j-1}^n \quad j = 1, 2, \dots, M \quad (9)$$

De lo anterior se concluye que para encontrar la solución en forma discreta de la TDSE, basta con solucionar el sistema de ecuaciones lineales mostradas en la siguiente forma matricial (Orquín *et al.*, 2007).

$$|\psi_j^{n+1}\rangle = \left(1 - \frac{iH\Delta t}{2\hbar}\right) \left(1 + \frac{iH\Delta t}{2\hbar}\right)^{-1} |\psi_j^n\rangle \quad (10)$$

La función a solucionar descrita como condición inicial es:

$$\psi(x, t = 0) = \frac{1}{\sqrt{\sigma\sqrt{2\pi}}} \exp(i\kappa x) \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{4\sigma^2}\right) \quad (11)$$

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

A continuación se presentan los resultados obtenidos con la realización del presente trabajo. El esquema del código en LabVIEW donde se genera la función de onda inicial se muestra en la Figura 1.

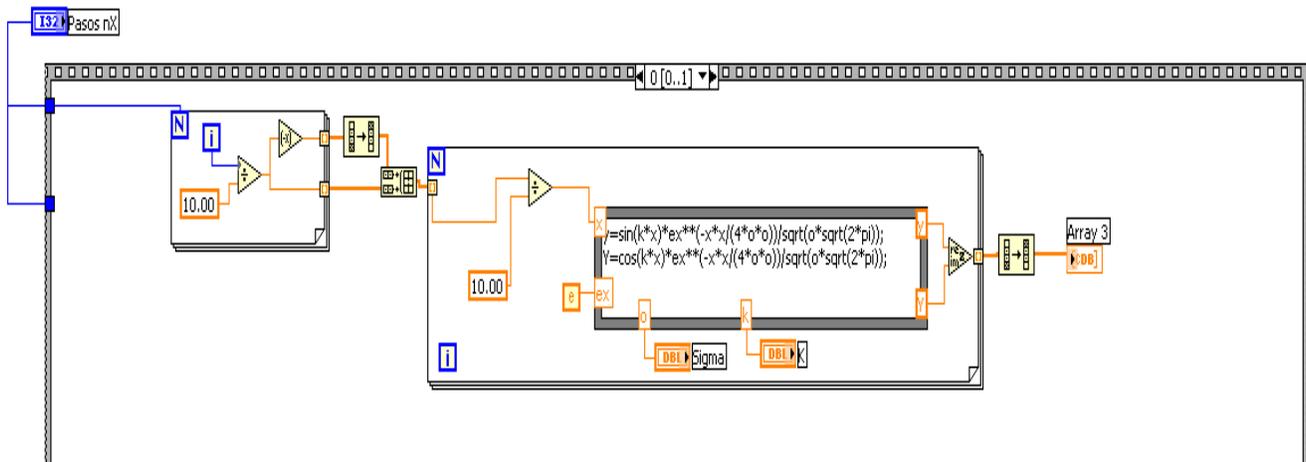


Fig. 1: Sección configuración de la ecuación de onda en LabVIEW

En él se observa la conformación de la componente compleja y real para formar el paquete de ondas de la partícula formando así un vector inicial que será tratado en las secuencias posteriores (Figuras 3, 4 y 5).

En el siguiente esquema (Figura 2), se presenta el código para el tratamiento del vector de la función de onda. En ese diagrama (Figura 2) se generan las matrices de Hamilton $\left(1 - \frac{iH\Delta t}{2\hbar}\right)\left(1 + \frac{iH\Delta t}{2\hbar}\right)^{-1}$ con ayuda de MatLab, luego son operadas para su multiplicación con el vector de estado anterior ψ_j^n , de esta forma se obtiene el valor del nuevo estado del vector que describe la función de onda ψ_j^{n+1} . El resultado de estas operaciones es visualizado mediante graficadores de vectores incorporados en LabVIEW, reduciendo así tiempo y espacio en el diseño del programa. De esta forma el programa junto con su interfaz gráfica, soluciona la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo, mediante un código comprensible y accesible

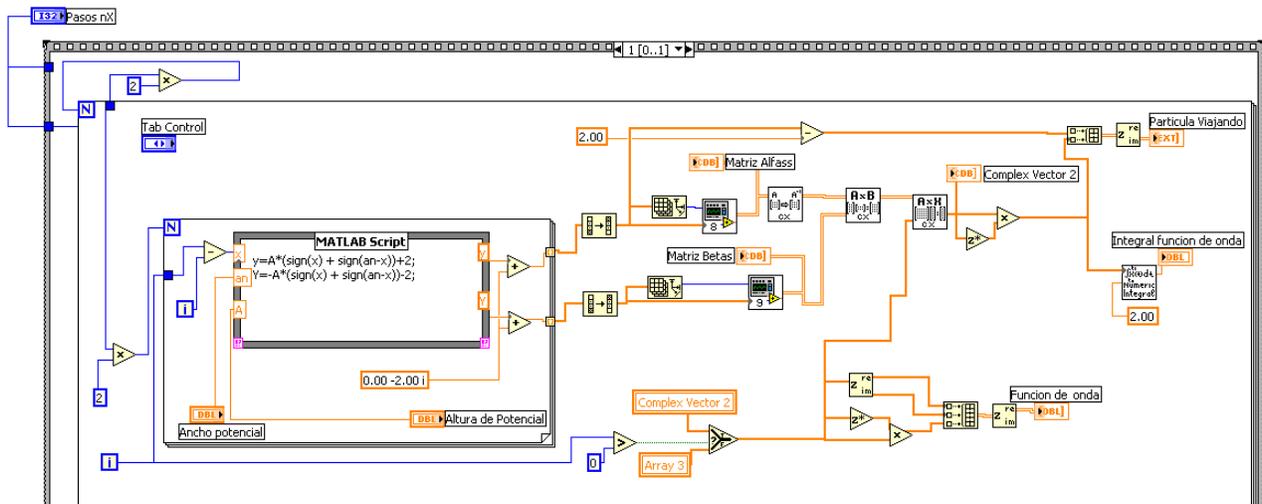


Fig. 2: Sección de linealización y cálculo mediante MatLab y LabVIEW de las matrices trabajadas.

En la secuencia (Figura 3) se observa la simulación de la partícula libre viajando hacia la derecha del potencial en tres tiempos consecutivos.

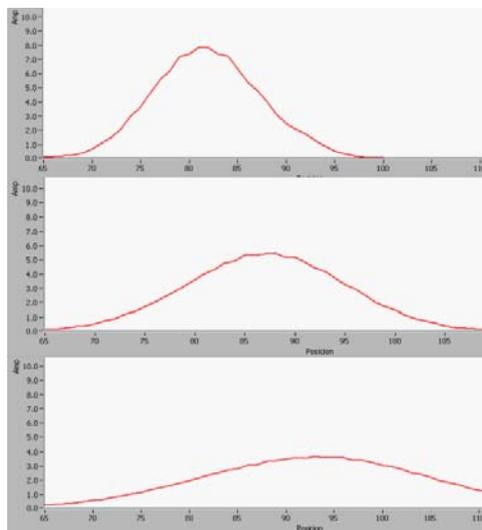


Fig. 3: Secuencia de tres tiempos de la función de onda de una partícula libre viajando a la derecha.

En esta simulación se puede apreciar, como el programa grafica la función de onda de acuerdo a los parámetros σ y κ los cuales se asignan libremente. En la evolución temporal de la función de onda sometida al potencial cero de una partícula libre, se observa cómo debido a la evolución del tiempo, la incertidumbre en la posición aumenta, esto conlleva a que al ser la función de onda acotada (o sea que su integral está normalizada) debe mantener el área constante bajo la curva a lo largo del tiempo; por ello la función de onda se va ensanchando y a la vez su amplitud va disminuyendo.

La simulación de la partícula chocando con un potencial escalón que viaja hacia la izquierda es mostrada en la secuencia de la figura 4.

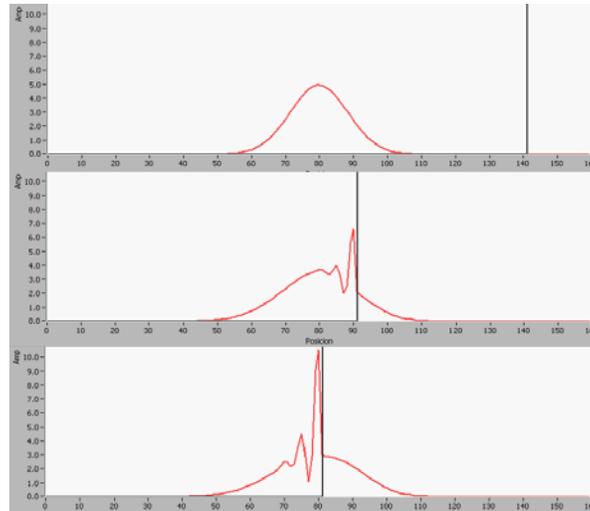


Fig. 4: Secuencia de tres tiempos de la función de onda de una partícula chocando con un potencial escalón.

Para esta parte de la simulación, se observa como el programa grafica la función de onda inicial con los parámetros σ y κ asignados por el usuario, en ella también se aprecia la graficación del potencial definido por el usuario; en este caso corresponde a un potencial escalón. El resultado de simular la evolución de la función de onda en el tiempo sometida a este potencial, permite ver como la onda se va reflejando paso a paso en sentido contrario del choque y la otra parte de la onda se va transmitiendo dentro del escalón.

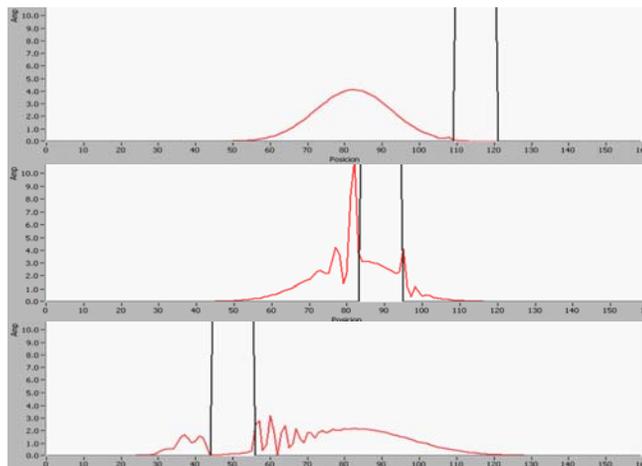


Fig. 5: Secuencia de tres tiempos de la función de onda de una partícula chocando con una barrera de potencial.

En la simulación mostrada en la figura 5, se observa una partícula chocando con una barrera de potencial que viaja hacia la izquierda.

En esta simulación, se observa como el programa grafica la función de onda inicial con los parámetros σ y κ asignados por el usuario, en ella también se puede apreciar la graficación del potencial que para este caso corresponde a un barrera de potencial con los parámetros ancho y alto definidos por el usuario. El resultado de simular la evolución de la función de onda en el tiempo sometida a este potencial, permite ver como la onda se refleja y puede traspasar esta barrera produciendo una onda reflejada y una onda transmitida.

Para el procesamiento de cada una de las situaciones tratadas anteriormente, se puede apreciar que al establecer un tamaño de la matriz hamiltoniana (que es la que define el potencial) cada vez más grande, se observa una característica y es que el tiempo de procesamiento para el recalcado de la función de onda, se incrementa

CONCLUSIONES

Fue desarrollada una herramienta didáctica soportada en la simulación presentada en este artículo, que se fundamenta en programación visual para interpretar fenómenos cuánticos básicos; tiene la versatilidad de que el usuario puede cambiar los parámetros σ y κ de la función de onda inicial, así como la altura y ancho del potencial.

Mediante la utilización del software LabVIEW se propone otra forma computacional para la solución, modelamiento y simulación de fenómenos físicos como el estudiado en el presente trabajo, generando motivación para el desarrollo de posteriores trabajos en el área.

A pesar de que el método de Crank-Nicolson ofrece gran estabilidad en el cómputo, genera gran consumo de procesamiento; en esta simulación esto se ve reflejado en la velocidad de los cálculos, convirtiéndose en un proceso lento si los datos son extensos (aproximadamente con vectores de dimensión superior a 100 datos), ya que las matrices crecen y el procesamiento de esos tamaños de matrices es más complejo.

Ya que LabVIEW es una herramienta poderosa en métodos experimentales, con esta simulación se reitera una vez más la gran versatilidad de este lenguaje aplicado en física y otras áreas de desarrollo tecnológico e investigación.

REFERENCIAS

1. Cao, W.R. & Sun, Z.Z. (2010). Maximum norm error estimates of the Crank–Nicolson scheme for solving a linear moving boundary problem. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 234 (8), 2578-2586.
2. Carjana, N., Rizeab, M. & Strottman, D. (2003). Efficient numerical solution of the time-dependent Schrödinger equation for deep tunneling. *Romanian Reports in Physics*, 55 (4), 555-579.
3. Dumitrescu, C., Olteanu, R.L., Gorghiu, L.M., Gorghiu, G. & State, G. (2009). Using virtual experiments in the teaching process. *Procedia-Social and Behavioral Sciences*, 1 (1), 776-779.
4. Faraco, G. & Gabriele, L. (2007). Using LabVIEW for applying mathematical models in representing phenomena. *Computers & Education*, 49 (3), 856-872.
5. Giannone, L., Eich, T., Fuchs, J.C., Ravindran, M., Ruan, Q., Wenzel, L., *et al.* (2011). Data acquisition and real-time bolometer tomography using LabVIEW RT. *Fusion Engineering and Design*, 86 (6-8), 1129-1132. doi:10.1016/j.fusengdes.2011.03.119.

6. Heermann, D.W. (1990). *Computer Simulation Methods in Theoretical Physics*, Berlin, Springer-Verlag, 148p.
7. Kang, D. & Won, E. (2008). Precise numerical solutions of potential problems using the Crank–Nicolson method. *Journal of Computational Physics*, 227 (5), 2970-2976.
8. Lin, B., Xiaofeng, L. & Xingxi, H. (2011). Measurement system for wind turbines noises assessment based on LabVIEW. *Measurement*, 44, 445-453.
9. Orquín, I., García, M.A., Fernández, P., Urcheguía, J.F. & Monsoriu, J.A. (2007). Introductory quantum physics courses using a LabVIEW multimedia module. *Computer Applications in Engineering Education*, 15 (2), 124-133.
10. Sakurai, J.J. (1994). *Modern Quantum Mechanics*. New York, Addison-Wesley, 500p.
11. Schweizer, W. (2002). *Numerical Quantum Dynamics*, Dordrecht, Kluwer Academic Publishers, 281p.
12. Tiernan, P. (2010). Enhancing the learning experience of undergraduate technology students with LabVIEW software. *Computers & Education*, 55 (4), 1579-1588.
13. Whitley, K.N., Novick, L.R. & Fisher, D. (2006). Evidence in favor of visual representation for the dataflow paradigm: An experiment testing LabVIEW's comprehensibility. *International Journal of Human-Computer Studies*, 64 (4), 281-303.
14. Wytse, V.D. & Toyama, F.M. (2007). Accurate numerical solutions of the time-dependent Schrödinger equation. *Physics. Review E*, 75 (3), 036707.