

Inestabilidad Cuántica en el Potencial de David Bohm

Rodolfo M. Id Betan¹, Luis Lara²

Junio 6, 1997

En este trabajo resumimos una estructura explícita de cálculo numérico para resolver el formalismo de David Bohm de la Mecánica Cuántica. El programa fue desarrollado en Fortran 77 para correr en equipos PC de capacidad estándar. Mostramos numéricamente la existencia de la inestabilidad cuántica en el potencial de David. Bohm cuando los estados estacionarios son ligeramente perturbados. Para los estados perturbados el espacio de las fases asociado a la partícula virtual presenta aspecto caótico.

Introducción

Dada la ecuación de Schrödinger

$$i \cdot \hbar \cdot \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2 \cdot m} \cdot \nabla^2 \psi(\bar{r}, t) + V(\bar{r}) \cdot \psi(\bar{r}, t),$$

función de onda en forma polares:

$$\psi(\bar{r}, t) = R(\bar{r}, t) \cdot e^{i \frac{S(\bar{r}, t)}{\hbar}},$$

separando la parte real de la imaginaria, se obtienen las siguientes dos ecuaciones:

$$\frac{\partial S(\bar{r}, t)}{\partial t} + \frac{(\nabla S(\bar{r}, t))^2}{2 \cdot m} + V(\bar{r}) - \frac{\hbar^2}{2 \cdot m} \cdot \frac{\nabla^2 R(\bar{r}, t)}{R(\bar{r}, t)} = 0,$$

(0-1)

$$\frac{\partial R^2(\bar{r}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot \left(R^2(\bar{r}, t) \cdot \frac{\nabla S(\bar{r}, t)}{m} \right) = 0,$$

(0-2)

definiendo el último término de la (0-1) como *potencial cuántico*:

$$Q(\bar{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2 \cdot m} \cdot \frac{\nabla^2 R(\bar{r}, t)}{R(\bar{r}, t)},$$

se escribe (0-1) de la siguiente forma:

¹ Facultad de Ciencias Exactas, Ingeniería y Agrimensura. U.N.R.

² Facultad de Ciencias Exactas, Ingeniería y Agrimensura. U.N.R.

$$\frac{\partial \mathcal{S}(\bar{r}, t)}{\partial t} + \frac{(\nabla \mathcal{S}(\bar{r}, t))^2}{2 \cdot m} + V(\bar{r}) + Q(\bar{r}, t) = 0,$$

(0-3)

a la cual se la llama *ecuación de Hamilton Jacobi Cuántica*, por analogía con la ecuación clásica.

A partir de (0-3) puede interpretarse que (0-2) expresa la conservación de la probabilidad, donde la densidad de probabilidad está dada por $P=R^2$, de un ensamble de partículas que satisface la *ecuación de Hamilton Jacobi Cuántica*; y donde cada una de las partículas se desplaza con una trayectoria definida por:

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_j} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_j} = 0$$

Adimensionalización

Se adimensionaliza la ecuación de Schrödinger unidimensional con el fin de construir una ley de escala y simplificar las ecuaciones:

$$x = \frac{\tilde{x}}{L_0}$$

donde x es la variable espacial adimensional y L_0 una longitud característica; mientras que la coordenada temporal queda definida por la siguiente adimensionalización:

$$t = \frac{\tilde{t}}{\tau_0}; \quad \tau_0 = \frac{2 \cdot m \cdot L_0^2}{\hbar},$$

donde t es la variable temporal adimensional; de la misma manera quedan las otras variable:

$$U = \frac{V}{V_0}; \quad V_0 = \frac{\hbar^2}{2 \cdot m \cdot L_0^2},$$

donde U es la altura de la barrera adimensional.

$$\varepsilon = \frac{E}{V_0},$$

donde ε es la energía promedio de la partícula del sistema.

$$\psi = \tilde{\psi} \cdot \sqrt{L_0},$$

ψ es la función de onda adimensional.

Utilizando estas nuevas variables se escribe la ecuación de Schrödinger unidimensional de la siguiente forma:

$$i \cdot \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = -\frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t) + u(x) \cdot \psi(x, t),$$

(0-4)

mientras el potencial cuántico en variables adimensional queda expresado de la siguiente manera:

$$Q(x, t) = -\frac{1}{R(\bar{r}, t)} \cdot \frac{\partial^2 R(x, t)}{\partial x^2}.$$

Resolución Numérica

Se resolvió la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo aproximando la derivada espacial con una interpolación de Lagrange con tres puntos, generándose un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias en la variable temporal. El sistema se integra mediante el método de Runge Kutta de cuarto orden .

La estrategia seguida fue la siguiente:

- Se escribió la función de onda en forma binómica

$$\psi(x, t) = u(x, t) + i \cdot v(x, t)$$

- En la ecuación de Schrödinger se separa parte real e imaginaria obteniendo dos ecuaciones:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= Hv \\ \frac{\partial v}{\partial t} &= -Hu \end{aligned}$$

(0-1)

donde H es el Hamiltoniano del sistema:

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

(0-2)

El dominio espacio temporal se discretiza en la parte espacial con paso fijo, entonces los nodos son $x_j = x_{min} + j * dj$ donde dj es el paso, con $j=0, 1, 2, \dots, n$; y los extremos de la caja son x_{min} y x_{max} .

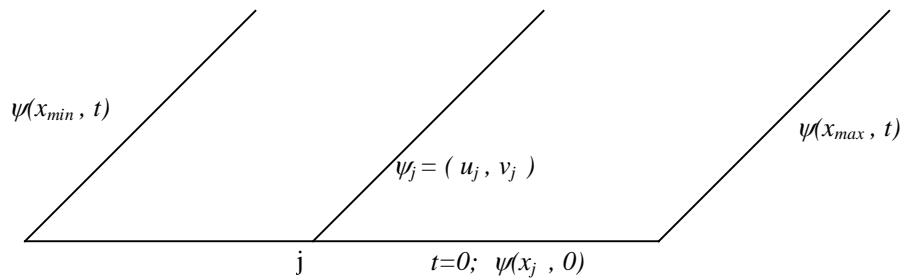
Para cada punto x_j definimos las funciones de una variable u_j y v_j de esta forma la ecuación de Schrödinger se aproxima por un sistema de $n+1$ ecuaciones diferenciales ordinarias:

$$\left. \frac{\partial u}{\partial \alpha} \right|_j = - \left(\frac{v_{j+1} - 2 \cdot v_j + v_{j-1}}{dj^2} \right)$$

$$\left. \frac{\partial v}{\partial \alpha} \right|_j = - \left(\frac{u_{j+1} - 2 \cdot u_j + u_{j-1}}{dj^2} \right)$$

Las condiciones de borde son $u_{min} = v_{min} = 0$ y $u_{max} = v_{max} = 0$, por tratarse de una barrera de potencial infinita.

Como condición inicial se debe establecer la ley de $\psi(x, t = 0)$.



A medida que se integra la ecuación de Schrödinger, se calcula el potencial cuántico según el formalismo de David Bohm

$$Q(x, t) = - \frac{\nabla^2 R(x, t)}{R(x, t)}$$

donde $Q(x, t)$ es el potencial cuántico adimensional y $R(x, t)$ es el módulo de la función de onda. $\psi(x, t)$

Al evaluar el potencial es necesario calcular la derivada segunda de la función $R(x, t)$, para esto se utiliza un polinomio de interpolación de Lagrange de grado cuatro, en base y factorizando para minimizar errores de cálculo el, potencial $Q(x, t)$ se calcula como:

$$Q_j = \left(\frac{1}{12 \cdot dj^2} \right) \cdot \left\{ \left[30 + \left(\frac{R_{j+2}}{R_j} + \frac{R_{j-2}}{R_j} \right) \right] - 16 \cdot \left(\frac{R_{j+1}}{R_j} + \frac{R_{j-1}}{R_j} \right) \right\}$$

Para determinar las trayectorias de las partículas virtuales, utilizando las ecuaciones de Lagrange se obtiene:

$$p_j^{i+1} = p_j^i - (U_{j+1} - U_j) \Big|_{t_i} \cdot \frac{\Delta t}{dj}$$

Donde p es el momento canónicamente conjugado a x , el subíndice en p corresponde a la posición espacial y el supraíndice al grado de avance en el tiempo.

$$x_j^{i+1} = x_j^i + p_j^i \cdot \Delta t$$

U_j representa el potencial total, que es la suma del potencial cuántico más el potencial físico. Los índices conservan los mismos sentidos que en p .

Nuevamente a medida que se obtiene la función de onda se determina la trayectoria para cada condición inicial; en donde el algoritmo para cada valor discreto de tiempo va determinando en que posición del plano de la fases se encuentra la partícula.

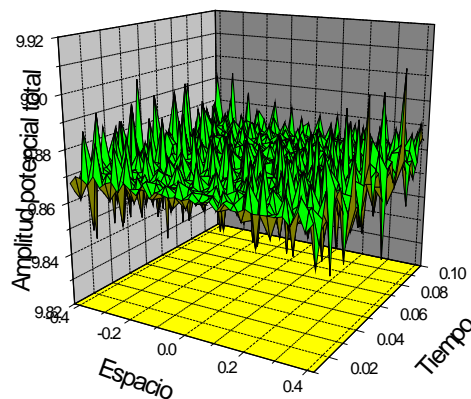
Solución estacionaria y validación

Las trayectorias en el plano de las fases correspondientes a estados estacionarios de una partícula en una caja son rectas.

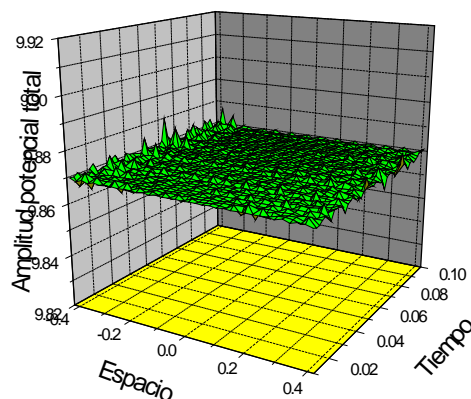
Además de la estimación analítica de los errores de truncamiento y redondeo se utiliza la solución estacionaria como elemento de control numérico.

En las figs 1 y 2 se muestran el potencial cuántico antes y después de filtrarse el ruido de cálculo mediante la técnica de promedio móvil de cinco puntos.

En esta validación se observa una robustez en la estructura de calculo.



Potencial Total sin suavizar - Fig. 1



Potencial Total suavizado - Fig. 2

Las evaluaciones de la densidad de probabilidad muestran un menor error debido a que requieren menos operaciones aritméticas que el potencial cuántico, como se observa en la figura 3 para la densidad de probabilidad de la función de onda.

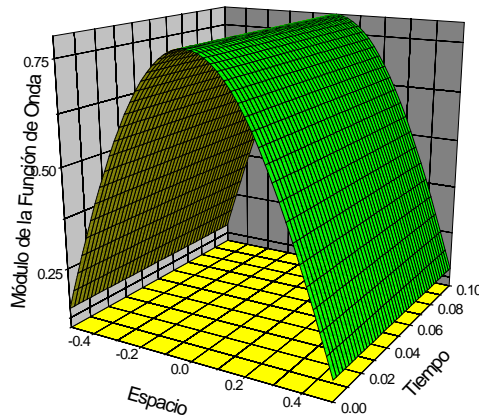


Fig. 3

por otro lado, también como elemento de control, se determinó numéricamente la trayectoria de las partículas virtuales en el espacio de la fases obteniéndose una muy buena aproximación a la solución analítica

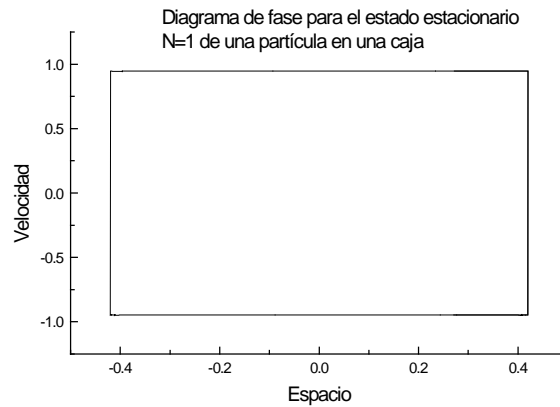


Fig. 4

La figura 5 muestra el valor medio del potencial cuántico calculado en forma numérica para el algoritmo sin aplicar el criterio de promedio móviles, mientras que la figura 5 muestra la desviación standard media para esta misma situación.

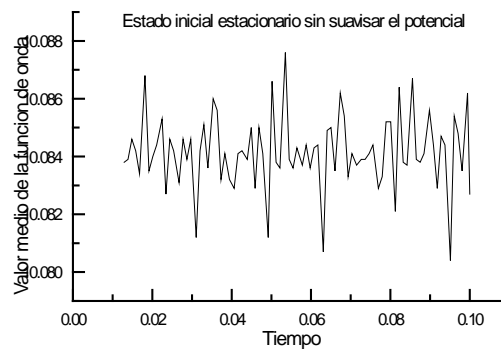


Fig. 5

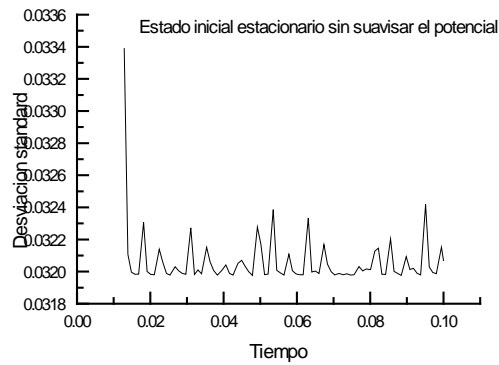


Fig. 6

Comparando las dos últimas gráficas con las correspondientes al algoritmo utilizando técnica de suavizado (figs. 7 y 8) en la misma escala de tiempo se observa la disminución de la cota de error.

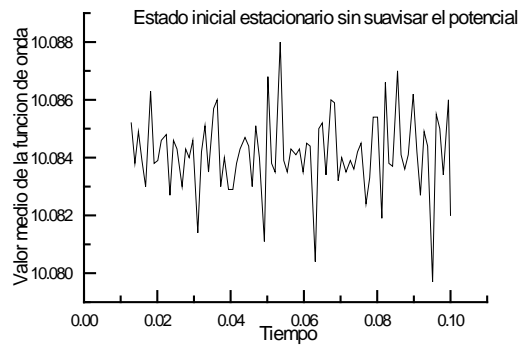


Fig. 7

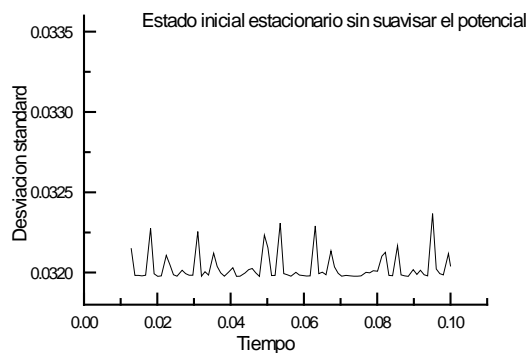


Fig. 8

Perturbación e Inestabilidad

En esta sección describimos los resultados de un conjunto de experimentos numéricos, que están orientados a mostrar que pequeñas perturbaciones sobre la

condición inicial correspondiente a soluciones estacionarias, conduce a fuertes cambios en el potencial cuántico.

Para generar la solución no estacionaria fijamos como condición inicial

$$\psi_{(x,t=0)} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \cdot \cos(\pi \cdot x) - \varepsilon \cdot (x - 0.5) \cdot (x + 0.5)$$

donde ε es el coeficiente perturbativo, mientras x es la variable espacial y t es la variable temporal; mientras que para los bordes se toma la siguiente condición

$$\psi_{(x=x_{min},t)} = \psi_{(x=x_{max},t)} = 0$$

donde x_{min} es el valor mínimo de la variable espacial y x_{max} el es máximo valor que puede tomar esta variable.

La figura 9 muestra el potencial total perturbado en función de la coordenada espacial y temporal, ésta muestra la aparición de fluctuaciones que van cambiando con el tiempo dando una apariencia de caoticidad

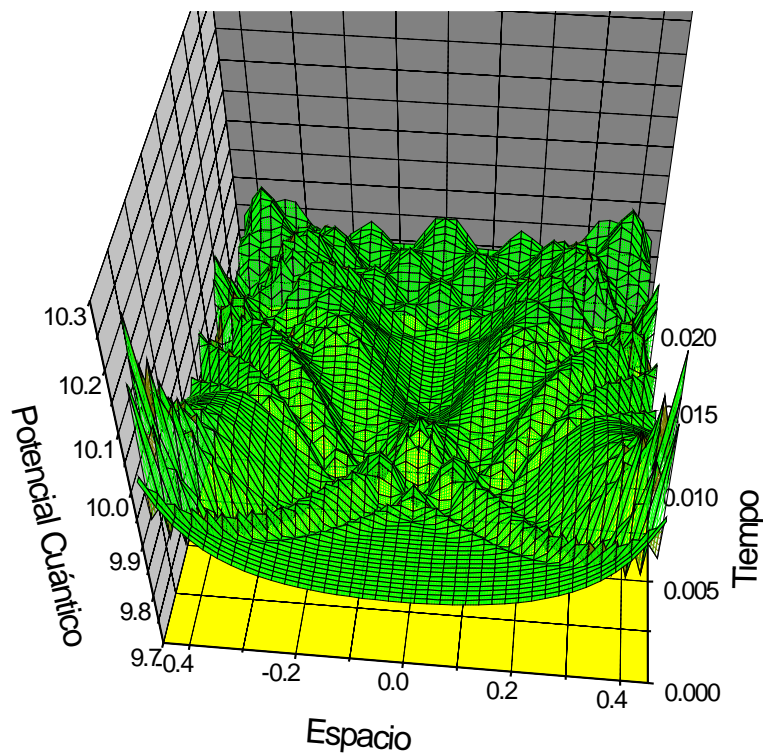


Fig. 9

Con el fin de ilustrar los resultados de esta figura se representan la densidad de probabilidad, el valor medio del potencial cuántico como función del tiempo y la desviación standard.

La densidad parece no haber sido afectada por la perturbación, pero tal observación es errónea por el hecho que el potencial cuántico está definido a partir de ésta haciendo el cociente de su Laplaciano con ella misma

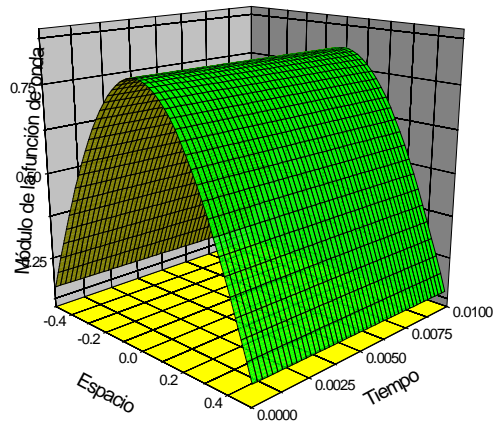


Fig. 10

Para cada valor de tiempo analizamos el valor medio y la dispersión del potencial cuántico.

La figura 11 representa el valor medio del potencial cuántico observándose que el mismo fluctúa alrededor del valor correspondiente a la solución estacionaria.

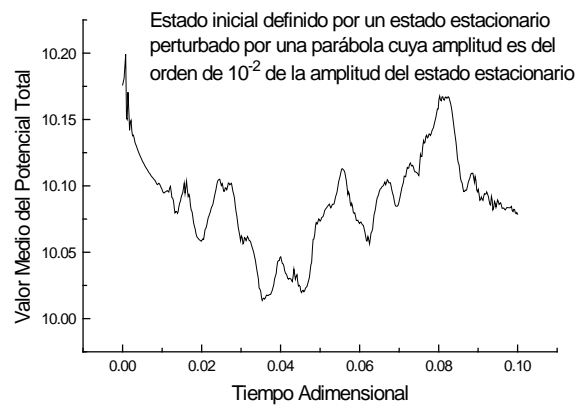


Fig. 11

La figura 12 muestra la desviación para este potencial como función del tiempo.

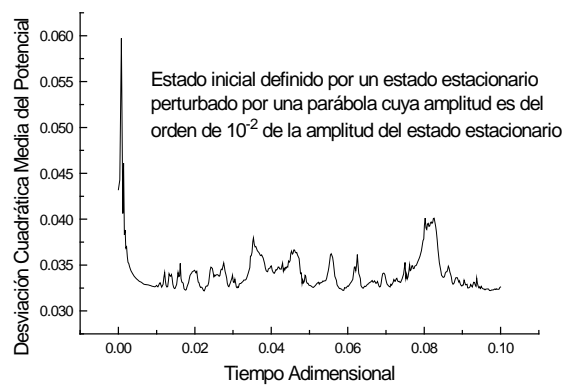


Fig. 12

La representación del potencial es realizada después de filtrar el ruido numérico propio del cálculo. La ligera perturbación da lugar a valles que oscilan en el tiempo, estos valles son tomados como trayectoria para las partículas de menor energía.

Este comportamiento casi caótico del potencial se refleja dramáticamente en el espacio de las fases, figura 13. En el estado, estacionario la trayectoria es una recta siendo ahora un movimiento altamente desordenado.

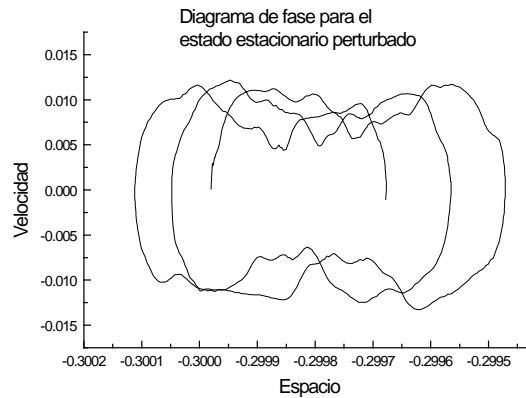


Fig. 13

Conclusiones

Hemos desarrollado una estructura y algoritmo de cálculo para ser corrido en PC, el cual da resultados altamente satisfactorios en función de las diferentes validaciones con respecto a soluciones analíticas. Para la caja encontramos que una partición de 50 elementos es suficiente para la precisión buscada. Los errores relativos en la función de onda está por debajo de 10^{-6} sobre los rangos de tiempo experimentados. Si bien la integración en el tiempo se podría resolver analíticamente por tratarse de un sistema EDO lineal y obtener soluciones cuasianalíticas, nuestra experiencia de cálculo nos indica que es más exacta el camino numérico que hemos emprendido.

A través de los experimentos numéricos hemos mostrado, que el potencial cuántico correspondiente a soluciones estacionarias es inestable frente a pequeñas perturbaciones.

Si bien somos conscientes que un conjunto de experimentos numéricos no constituyen una demostración, los resultados numéricos validan nuestra tesis y abre las puertas para un camino más teórico. Por otro lado, dada la complejidad matemática del problema creemos que analíticamente resultaría muy difícil llegar a tal conclusión y más aun visualizar la forma del potencial.

Bibliografía

- C. Dewdney, B. Hilley, Found Phys. 12,27-48, 1982
- F. Merayo . Programación en Fortran 77 (Paraninfo, Madrid, 1990)
- M. Abramowitz , I. Stegun (Dover Publications, New York, 1972)
- D. Bohm, B. Hilley, The Undivided Universe. (Routledge, London, 1993).
- A. Bohm Quantum Mechanics (Springer, New York, 1979).

E. Nelson . Dynamical Theories of Brownian Motion (Princeton University Press, Princeton, 1967).

R. Id Betan et al. , Interpretación Ontológica de la Inestabilidad Cuántica (U.N.R., Tesina, 1996).

C. Philippidis, C. Dewdnei, Nuovo Cimento, 52B, 15-28, 1979.