INSTITUTO TECNOLÓGICO Y DE ESTUDIOS SUPERIORES DE OCCIDENTE

Transporte Electrónico en Nanoestructuras

Primavera 2019

Partícula Libre

Gráficas de la Función de Onda

chiñas fuentes karina

NT704804

Profesor: Gustavo Montes Cabrera

Tlaquepaque, Jalisco

viernes, 22/febrero/2019

Partícula Libre: Gráficas de la Función de Onda

Sabiendo que la función de onda está dada por,

$$\Psi(x,t) = \left(2\pi\sigma_o^2\right)^{-1/4} \frac{\sigma_o}{\tilde{\sigma_o}(t)} \exp\left[-\frac{1}{4\tilde{\sigma_o}(t)} \left(x - x_o - 2\mathrm{i}\sigma_o^2 k_o\right)^2 - \sigma_o^2 k_o^2 + \mathrm{i}k_o x\right], \tag{1}$$

donde,

$$\tilde{\sigma_o}(t) = \left(\sigma_o^2 + \frac{\mathrm{i}\hbar t}{2m}\right)^{1/2}, \tag{2}$$

y,

$$\Psi_o(x) = \Psi(x, t=0) = \left(2\pi\sigma_o^2\right)^{-1/4} \exp\left[-\frac{1}{4\sigma_o^2} \left(x - x_o\right)^2 + \mathrm{i}k_o x\right], \tag{3}$$

es posible graficar la parte real e imaginariade de la función de onda. A continuación se muestra el proceso.

Primero, abordo la importancia de expresar a $\tilde{\sigma_o}(t)$ como la suma de un número real con la suma de otro número real multiplicado por i. Para ello, utilizo la expresión de

$$z^{1/n} = |z|^{1/n} \left[\cos\left(\frac{1}{n}\left(\theta + 2k\pi\right)\right) + \mathrm{i}\sin\left(\frac{1}{n}\left(\theta + 2k\pi\right)\right)\right],$$

en ese caso: $z = \sigma_o^2 + \mathrm{i}\frac{\hbar t}{2m}$, $\theta = \arctan\left(\frac{\hbar t}{2\sigma_o^2 m}\right)$, $n = 2$ y $k = 0, 1$. Entonces, se tendrá,

$$\tilde{\sigma_o}^{(k)}(t) = \left(\sigma_o^4 + \left(\frac{\hbar t}{2m}\right)^2\right)^{1/4} \left[\cos\left(\frac{1}{n}\left(\theta + 2k\pi\right)\right) + \mathrm{i}\sin\left(\frac{1}{n}\left(\theta + 2k\pi\right)\right)\right]. \tag{4}$$

Al mismo tiempo, es posible expresarlo como,

$$\tilde{\sigma_o}^{(k)}(t) = \tilde{\sigma_o}_{Re}^{(k)} + \mathrm{i}\tilde{\sigma_o}_{Im}^{(k)}, \tag{5}$$

donde

$$\tilde{\sigma_o}_{Re}^{(k)} = \left(\sigma_o^4 + \left(\frac{\hbar t}{2m}\right)^2\right)^{1/4} \left[\cos\left(\frac{1}{n}\left(\theta + 2k\pi\right)\right)\right] \tag{6}$$

y

$$\tilde{\sigma_o}_{Im}^{(k)} = \left(\sigma_o^4 + \left(\frac{\hbar t}{2m}\right)^2\right)^{1/4} \left[\sin\left(\frac{1}{n}\left(\theta + 2k\pi\right)\right)\right]. \tag{7}$$

De la misma forma, igual es posible poner la ec. (4) como

$$\left(\tilde{\sigma_o}^{(k)}(t)\right)^{-1} = |\tilde{\sigma_o}^{(k)}(t)|^{-1} \exp\left(-\mathrm{i}\Omega_k\right), \tag{8}$$

donde,

$$\Omega_k = \arctan\left(\frac{\tilde{\sigma_o}^{(k)}_{Re}}{\tilde{\sigma_o}^{(k)}_{Im}}\right). \tag{9}$$

No obstante, para $\Psi(x,t)$ va a ser necesario tener su inverso, es por ello que la ec. (8) se escribió de esa forma. Ahora, retomando la ec. (1), se podría ver como

$$\Psi(x,t) = \left(2\pi\sigma_o^2\right)^{-1/4}\sigma_o|\tilde{\sigma_o}^{(k)}(t)|^{-1}\exp\left[-\frac{a_k}{4}\left(\tilde{\sigma_o}^{(k)}_{Re} + \mathrm{i}\tilde{\sigma_o}^{(k)}_{Im}\right)\left(x - x_o - 2\mathrm{i}\sigma_o^2 k_o\right)^2 - \sigma_o^2 k_o^2 + \mathrm{i}k_o x - \mathrm{i}\Omega_k\right],$$

si llamamos parte del argumento de la exponente como

$$f(x,t) = -\frac{a_k}{4}\left(\tilde{\sigma_o}^{(k)}_{Re} + \mathrm{i}\tilde{\sigma_o}^{(k)}_{Im}\right)\left(x - x_o - 2\mathrm{i}\sigma_o^2 k_o\right)^2 + \mathrm{i}k_o x, \tag{10}$$

donde

$$a_k = \left[\tilde{\sigma_o}^{2(k)}_{Re} - \mathrm{i}\tilde{\sigma_o}^{2(k)}_{Im}\right]^{-1}, \tag{11}$$

al enfocarnos únicamente en el producto que involucra a los complejos,

$$\left(\tilde{\sigma_o}^{(k)}_{Re} + \mathrm{i}\tilde{\sigma_o}^{(k)}_{Im}\right)\left(x - x_o - 2\mathrm{i}\sigma_o^2 k_o\right)^2 = \left(\tilde{\sigma_o}^{(k)}_{Re} + \mathrm{i}\tilde{\sigma_o}^{(k)}_{Im}\right)\left((x - x_o)^2 - \mathrm{i}4\sigma_o^2 k_o\left(x - x_o\right) - 4\sigma_o^4 k_o^2\right).$$

Se sabe que

$$AB = \left(A_1 + \mathrm{i}A_2\right)\left(B_1 + \mathrm{i}B_2\right) = \left(A_1 B_1 - A_2 B_2\right) + \mathrm{i}\left(A_2 B_1 + A_1 B_2\right),$$

si decimos que

$$A = \tilde{\sigma_o}^{(k)}_{Re} + \mathrm{i}\tilde{\sigma_o}^{(k)}_{Im},$$

y que

$$B = \left((x - x_o)^2 - 4\sigma_o^4 k_o^2\right) - \mathrm{i}4\sigma_o^2 k_o\left(x - x_o\right),$$

se va a tener que

$$\mathrm{Re}\left(AB\right) = \left(x - x_o\right)^2\tilde{\sigma_o}^{(k)}_{Re} - 4\sigma_o^4 k_o^2\tilde{\sigma_o}^{(k)}_{Re} - 4\sigma_o^2 k_o\left(x - x_o\right)\tilde{\sigma_o}^{(k)}_{Im}, \tag{12}$$

y

$$\mathrm{Im}\left(AB\right) = \left(x - x_o\right)^2\tilde{\sigma_o}^{(k)}_{Im} - 4\sigma_o^4 k_o^2\tilde{\sigma_o}^{(k)}_{Im} - 4\sigma_o^2 k_o\left(x - x_o\right)\tilde{\sigma_o}^{(k)}_{Re}, \tag{13}$$

Por lo tanto

$$f(x,t) = f_{Re} + \mathrm{i}f_{\mathrm{Im}} = -\frac{a_k}{4}\mathrm{Re}(AB) + \mathrm{i}\left[k_o x - \frac{a_k}{4}\mathrm{Im}(AB)\right], \tag{14}$$

haciendo que $\Psi(x,t)$ pueda ser expresada como

$$\Psi(x,t) = \mathrm{Re}\left(\Psi(x,t)\right) + \mathrm{i}\mathrm{Im}\left(\Psi(x,t)\right),$$

donde

$$\mathrm{Re}\left(\Psi(x,t)\right) = \frac{\alpha}{|\tilde{\sigma}_o|}\cos\left(\Omega_k + f^k_{\mathrm{Im}}\right)\exp\left[f^k_{\mathrm{Re}} - \sigma_o^2 k_o^2\right],$$

$$\mathrm{Im}\left(\Psi(x,t)\right) = \frac{\alpha}{|\tilde{\sigma}_o|}\sin\left(\Omega_k + f^k_{\mathrm{Im}}\right)\exp\left[f^k_{\mathrm{Re}} - \sigma_o^2 k_o^2\right],$$

donde,

$$\alpha = \left(2\pi\sigma_o^2\right)^{-1/4}\sigma_o$$

Haciendo que $\Psi(x,t)$ ya se pueda graficar, a continuación presento un código que grafica los resultados.

```
import math
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from numpy import pi, sin, cos, sqrt
from math import factorial, exp, atan
from matplotlib.pyplot import savefig
import matplotlib.patheffects as path_effects

i = complex(0,1)

x_i = -10
x_f = 10
x_o = -1
k_o = 1

sigma = 0.4
h_bar = 1
m = 1

tsigma = lambda t:  (sigma**2 + i*((h_bar*t)/(2*m)) )**(1/2)
alpha = lambda t:  ((2*pi*(sigma**2))**(-1/4))*sigma*(1/tsigma(t))

psi_o = lambda x:  ((2*pi*(sigma**2))**(-1/4))*\
exp( (-(1/(2*sigma))**2)*((x-x_o)**2) + i*k_o*x )

Re_psi_o = lambda x:  psi_o(x).real
Im_psi_o = lambda x:  psi_o(x).imag
Mg_psi_o = lambda x:  ((2*pi*(sigma**2))**(-1/2))*\
exp( (-(1/(sqrt(2)*sigma))**2)*((x-x_o)**2))

Psi = lambda x,t:  alpha(t)*(exp((-1/(4*tsigma(t)))*\
((x-x_o-i*(2*k_o*(sigma**2)))**2)-(sigma*k_o)**2+i*k_o*x))

Re_Psi = lambda x, t:  Psi(x,t).real
Im_Psi = lambda x, t:  Psi(x,t).imag
Mg_Psi = lambda x, t:  Re_Psi(x,t)*Re_Psi(x,t) + Im_Psi(x,t)*Im_Psi(x,t)

X = np.linspace(x_i,x_f,500)

RePSI_o = np.zeros(len(X))
ImPSI_o = np.zeros(len(X))
MgPSI_o = np.zeros(len(X))

RePSI1 = np.zeros(len(X))
RePSI2 = np.zeros(len(X))
RePSI3 = np.zeros(len(X))
RePSI4 = np.zeros(len(X))
RePSI5 = np.zeros(len(X))
RePSI6 = np.zeros(len(X))
```

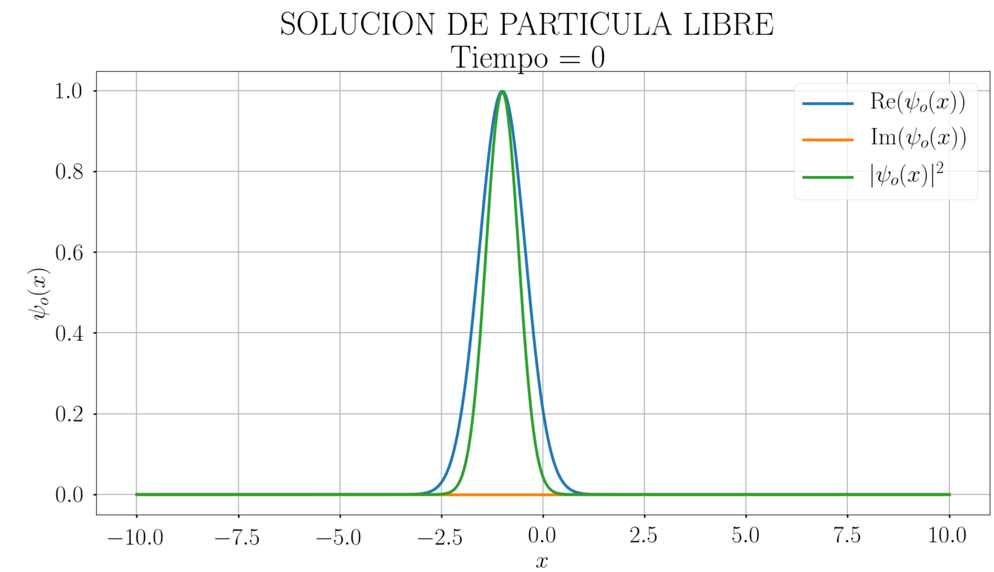
```
RePSI7 = np.zeros(len(X))

ImPSI1 = np.zeros(len(X))
ImPSI2 = np.zeros(len(X))
ImPSI3 = np.zeros(len(X))
ImPSI4 = np.zeros(len(X))
ImPSI5 = np.zeros(len(X))
ImPSI6 = np.zeros(len(X))
ImPSI7 = np.zeros(len(X))

MgPSI1 = np.zeros(len(X))
MgPSI2 = np.zeros(len(X))
MgPSI3 = np.zeros(len(X))
MgPSI4 = np.zeros(len(X))
MgPSI5 = np.zeros(len(X))
MgPSI6 = np.zeros(len(X))
MgPSI7 = np.zeros(len(X))

T = 1

for l in range(len(X)):

RePSI_o[l] = Re_psi_o(X[l])
ImPSI_o[l] = Im_psi_o(X[l])
MgPSI_o[l] = Mg_psi_o(X[l])

RePSI1[l] = Re_Psi(X[l],T)
RePSI2[l] = Re_Psi(X[l],T+1)
RePSI3[l] = Re_Psi(X[l],T+3)
RePSI4[l] = Re_Psi(X[l],T+5)
RePSI5[l] = Re_Psi(X[l],T+7)
RePSI6[l] = Re_Psi(X[l],T+9)
RePSI7[l] = Re_Psi(X[l],T+49)

ImPSI1[l] = Im_Psi(X[l],T)
ImPSI2[l] = Im_Psi(X[l],T+1)
ImPSI3[l] = Im_Psi(X[l],T+3)
ImPSI4[l] = Im_Psi(X[l],T+5)
ImPSI5[l] = Im_Psi(X[l],T+7)
ImPSI6[l] = Im_Psi(X[l],T+9)
ImPSI7[l] = Im_Psi(X[l],T+49)

MgPSI1[l] = Mg_Psi(X[l],T)
MgPSI2[l] = Mg_Psi(X[l],T+1)
MgPSI3[l] = Mg_Psi(X[l],T+3)
MgPSI4[l] = Mg_Psi(X[l],T+5)
MgPSI5[l] = Mg_Psi(X[l],T+7)
MgPSI6[l] = Mg_Psi(X[l],T+9)
MgPSI6[l] = Mg_Psi(X[l],T+49)
```

```
titulo = "SOLUCION DE PARTICULA LIBRE"

sstyle = "seaborn-poster"
plt.style.use(sstyle)
plt.rc(’text’, usetex = True)
plt.rc(’font’, family = ’serif’)

plt.figure(figsize = (20,10))
plt.plot(X, RePSI_o, label = "Re$(\\psi_o(x))$", linewidth = 3.5 )
plt.plot(X, ImPSI_o, label = "Im$(\\psi_o(x))$", linewidth = 3.5 )
plt.plot(X, MgPSI_o, label = "$|\\psi_o(x)|^2$", linewidth = 3.5 )

plt.suptitle(titulo + "\n Tiempo = 0", fontsize=40)
plt.xlabel("$x$") plt.ylabel("$\\psi_o(x)$")
plt.legend()
plt.grid()
##plt.savefig( "Psi_0" + ".png", format = "png")
plt.show()

plt.figure(figsize = (20,10))
plt.plot(X, RePSI1, label = "$t$= " + str(T) + "s", linewidth = 3.5 )
plt.plot(X, RePSI2, label = "$t$= " + str(T+1) + "s", linewidth = 3.5 )
plt.plot(X, RePSI3, label = "$t$= " + str(T+3) + "s", linewidth = 3.5 )
plt.plot(X, RePSI4, label = "$t$= " + str(T+5) + "s", linewidth = 3.5 )
plt.plot(X, RePSI5, label = "$t$= " + str(T+7) + "s", linewidth = 3.5 )
plt.plot(X, RePSI6, label = "$t$= " + str(T+9) + "s", linewidth = 3.5 )
plt.plot(X, RePSI7, label = "$t$= " + str(T+49)+ "s", linewidth = 3.5 )

plt.suptitle(titulo + "\n Parte Real", fontsize=40)
plt.xlabel("$x$")
plt.ylabel("Re$(\\Psi(x,t))$")
plt.legend()
plt.grid()
##plt.savefig( "psi_o" + ".png", format = "png")
plt.show()

plt.figure(figsize = (20,10))
plt.plot(X, ImPSI1, label = "$t$= " + str(T) + "s", linewidth = 3.5 )
plt.plot(X, ImPSI2, label = "$t$= " + str(T+1) + "s", linewidth = 3.5 )
plt.plot(X, ImPSI3, label = "$t$= " + str(T+3) + "s", linewidth = 3.5 )
plt.plot(X, ImPSI4, label = "$t$= " + str(T+5) + "s", linewidth = 3.5 )
plt.plot(X, ImPSI5, label = "$t$= " + str(T+7) + "s", linewidth = 3.5 )
plt.plot(X, ImPSI6, label = "$t$= " + str(T+9) + "s", linewidth = 3.5 )
plt.plot(X, ImPSI7, label = "$t$= " + str(T+49)+ "s", linewidth = 3.5 )

plt.suptitle(titulo + "\n Parte Imaginaria", fontsize=40)
plt.xlabel("$x$")
plt.ylabel("Im$(\\Psi(x,t))$")
plt.legend()
plt.grid()
##plt.savefig( "Im_psi" + ".png", format = "png")
```

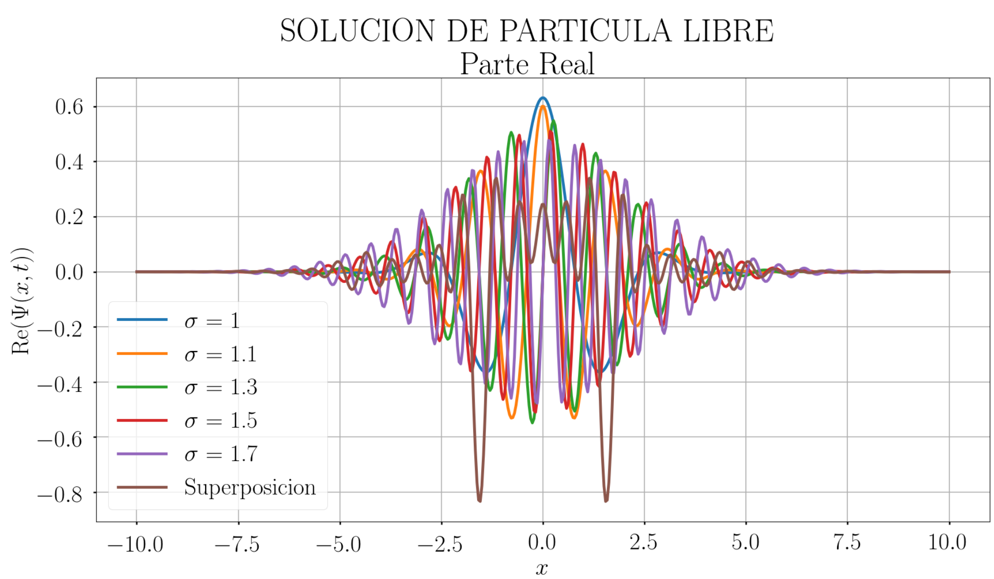
```
plt.show()

plt.figure(figsize = (20,10))
plt.plot(X, MgPSI1, label = "$t$= " + str(T) + "s", linewidth = 3.5 )
plt.plot(X, MgPSI2, label = "$t$= " + str(T+1) + "s", linewidth = 3.5 )
plt.plot(X, MgPSI3, label = "$t$= " + str(T+3) + "s", linewidth = 3.5 )
plt.plot(X, MgPSI4, label = "$t$= " + str(T+5) + "s", linewidth = 3.5 )
plt.plot(X, MgPSI5, label = "$t$= " + str(T+7) + "s", linewidth = 3.5 )
plt.plot(X, MgPSI6, label = "$t$= " + str(T+9) + "s", linewidth = 3.5 )
plt.plot(X, MgPSI7, label = "$t$= " + str(T+49)+ "s", linewidth = 3.5 )

plt.suptitle(titulo + "\n Magnitud al Cuadrado", fontsize=40)
plt.xlabel("$x$")
plt.ylabel("$|\\Psi(x,t)|^2$")
plt.legend()
plt.grid()
##plt.savefig( "mg_psi" + ".png", format = "png")
plt.show()
```

Los resultados de las gráficas fueron los siguientes.

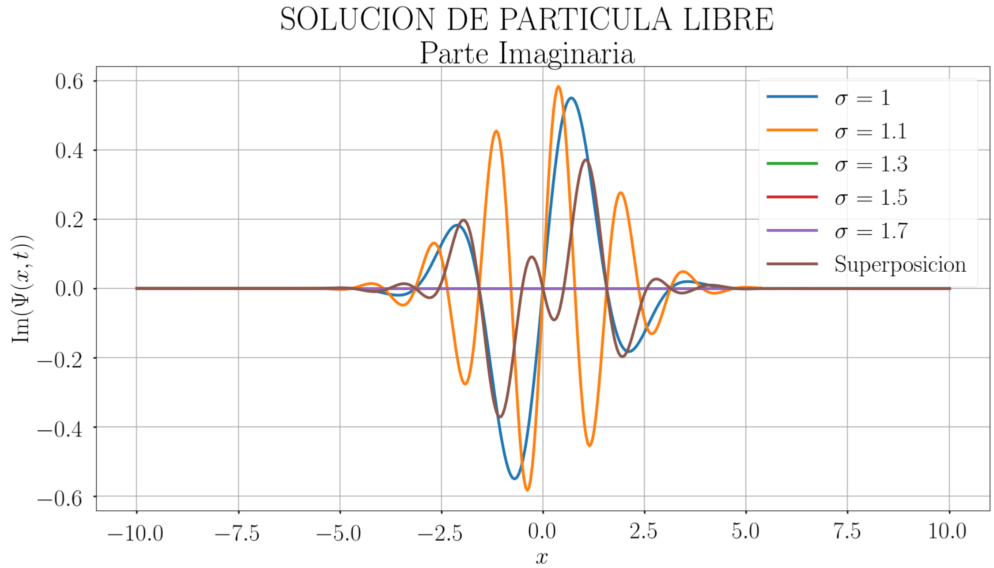
- Para $\Psi_o(x)$ se tiene



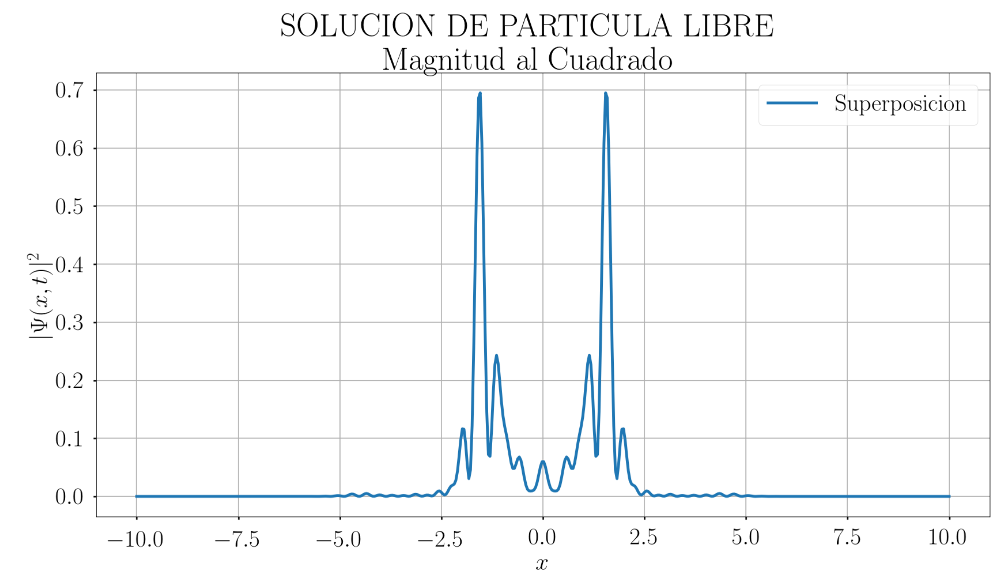
- Para la parte real de $\Psi(x,t)$, se tiene



- Para la parte imaginaria de $\Psi(x,t)$, se tiene



- Para la magnitud al cuadrado de $\Psi(x,t)$, se tiene



Es posible notar que la función de onda decae rápidamente en el tiempo, haciendo que cada vez haya la misma probabilidad de encontrar a la partícula en cualquier x.