FÍSICA CUÁNTICA AVANZADA

Práctica 1. Pozo infinito con pared móvil

El objetivo de esta práctica es el de resolver numéricamente la ecuación de Schrödinger para el pozo infinito con pared móvil mediante la rutina de Python *scipy.integrate.solve_ivp*, aplicando el método de Runge-Kutta de orden 4-5, y comparar el resultado obtenido con la solución analítica dada por la aproximación adiabática [1]. Para profundizar el estudio se emplearán dos funciones diferentes para el movimiento de la pared, una lineal y otra sinusoidal, se variarán los parámetros de las mismas y se estudiará además las validez de la aproximación adiabática en el tiempo.

Problema a resolver

Considerando la ecuación de Schrödinger en 1D con $m = 1/2$ y tomando por simplicidad $\hbar = 1$

$$i\partial_t\psi = H\psi \quad (1)$$

donde $H = -\partial_{xx} + V(x,t)$. Para el pozo infinito de potencial con pared móvil el potencial $V(x,t)$ es:

$$V(x,t) = \begin{cases} 0, \ si \ \ 0 < x < l(t) \\ \infty, \ \ en \ otro \ caso \end{cases}$$

de modo que la función de onda $\psi(x,t)$ está sujeta a las condiciones de contorno:

$$\psi(0,t) = 0, \quad \psi(l(t),t) = 0 \ \ para \ cualquier \ valor \ de \ t.$$

La condición inicial vendrá dada por:

$$\psi(x,0) = f(x), \ \ 0 < x < l(t)$$

Una solución exacta para cualquier ley de movimiento de la pared $l(t)$ es desconocida, pero se puede intentar resolver la ecuación de Schödinger bajo ciertas condiciones que permitan realizar aproximaciones que faciliten la obtención de soluciones analíticas, o resolver el problema de forma númerica.

Si realizamos el cambio de variable propuesto en [1]:

$$x \to z = \frac{x}{l(t)} \ \ (2)$$

la equación (1) queda:

$$i\partial_t\psi(z,t) = -\frac{1}{l(t)^2}\partial_{z^2}\psi(z,t) + iz\frac{\dot{l}}{l}\partial_z\psi(z,t) \quad (3)$$

con $\psi(0,t) = 0$ y $\psi(1,t) = 0$ y la condición inicial $\psi(z,0) = f(z)$.

Aproximación adiabática

Una aproximación que proporciona soluciones analíticas es la adiabática. Si suponemos que el movimiento de la pared es lo suficientemente lento, tal que:

$$\frac{\dot{l}\,(t)}{l(t)} << 1$$

podemos despreciar el último término de la ecuación (3) y tenemos entonces:

$$i\partial\psi_t(z,t) = -\frac{1}{l(t)^2}\partial^2{}_z\psi(z,t) \quad (4)$$

La cual tiene solución analítica para las funciones $\psi_n(x,t)$ y cuya densidad de probabilidad tiene la forma:

$$|\psi_n(x,t)|^2 = \frac{2}{l(t)} sin^2\left(n\pi\frac{x}{l(t)}\right) \;\; n = \pm1, \pm2, \ldots \quad (5)$$

esta ecuación es válida para todo tipo de movimiento $l(t)$.

La comparación de los resultados derivados de esta **aproximación adiabática** (5) con la solución numérica es uno de los objetivos de esta práctica.

Solución numérica

Si discretizamos la variable z (2):

$$z_k = kh_n$$

siendo $k \in \mathbb{N}$ y $h_n = 1/n$ donde n es el número de celdas en que intervalo el tramo [0, 1] de la variable z.

Los valores de la función de onda $\psi(z_k,t)$ también estarán discretizados en el espacio y serán:

$$\phi_k(t) = \psi(z_k,t)$$

Quedando la ecuación (3) de la forma:

$$i\partial_t\phi_k(t) = -\frac{1}{l(t)^2}\partial^2{}_z\psi(z,t) + iz\frac{\dot{l}\,(t)}{l(t)}\partial_z\psi(z,t) \quad (6)$$

Aproximando las derivadas mediante desarrollo de Taylor llegamos a la ecuación a resolver numéricamente [1]:

$$\partial_t\phi_k(t) = \frac{1}{{h_n}^2}\frac{i}{l^2(t)}[\phi_{k+1}(t) - 2\phi_k(t) + \phi_{k-1}(t)] + \frac{1}{2h_n}z_k\frac{\dot{l}\,(t)}{l(t)}[\phi_{k+1}(t) - \phi_{k-1}(t)] \quad (7)$$

Objetivos y casos a analizar

1. Resolver numéricamente la ecuación (7) para el caso $l(t) = a + bt$ y comparar el resultado con la aproximación adiabática. Se propone estudiar los casos $(a = 1, b = 3, t = 1)$, $(a = 1, b = 1, t = 1)$ y $(a = 1, b = 0.2, t = 1)$
2. Resolver numéricamente la ecuación (7) para el caso $l(t) = a + b\ sin(\omega t)$ y comparar el resultado con la aproximación adiabática. Se propone estudiar los casos $(a = 1, b = 0.6, \omega = 2, t = 3)$, $(a = 1, b = 0.4, \omega = 2, t = 3)$, $(a = 1, b = 0.2, \omega = 2, t = 3)$
3. Resolver numéricamente la ecuación (7) para el caso $l(t) = a + b\ sin(\omega t)$ y comparar el resultado con la aproximación adiabática. Se propone estudiar los casos $(a = 1, b = 0.2, \omega = 10, t = 3)$, $(a = 1, b = 0.2, \omega = 5, t = 3)$, $(a = 1, b = 0.2, \omega = 2, t = 3)$
4. Resolver numéricamente la ecuación (7) para el caso $l(t) = a + bt$ y comparar el resultado con la aproximación adiabática. Se propone estudiar los casos $(a = 1, b = 2, t = 5)$, $(a = 1, b = 2, t = 50)$

Para todos los casos:

- Usar en todos los casos como función inicial la función $f(z) = \sqrt{2}\ sin(m\pi z)\ con\ m = 2$ (solución analítica para el pozo infinito con paredes fijas)
- Para la solución numérica utilizar el método *scipy.integrate.solve_ivp* aplicando el método de Runge-Kutta de orden 4-5. Este método es el que se aplica por defecto en *scipy.integrate.solve_ivp*.
- Como para algunos casos el cálculo es costoso en tiempo de cómputo, se recomienda utilizar la librería Numba.
- Graficar los resultados en 3D y de cualquier otra forma que sirva para analizarlos y realizar una breve discusión de los mismos.
- Los valores propuestos para los distintos casos son orientativos, tenéis libertad para usar otros que os sirvan para el análisis.

Referencias

[1] The quantum square well with moving boundaries: A numerical analysis. O. Fojón et al.

[2] Numba: https://numba.pydata.org/

[3] SciPy(solve_ivp): https://docs.scipy.org/doc/scipy/reference/generated/scipy.integrate.solve_ivp.html

[4] Matplotlib: https://matplotlib.org/

[5] NumPy: https://numpy.org/