

Universidad de Alicante

FACULTAD DE CIENCIAS

# PRÁCTICA 1: POZO INFINITO CON PARED MÓVIL

*Física Cuántica Avanzada*

Gabriel Simón López

2022/2023

# Índice

|  |           |
|--|-----------|
| <b>1. Resumen</b>                              | <b>2</b>  |
| <b>2. Problema a resolver</b>                  | <b>2</b>  |
| 2.1. Aproximación Adiabática . . . . .         | 2         |
| 2.2. Solución numérica . . . . .               | 3         |
| <b>3. Código</b>                               | <b>3</b>  |
| <b>4. Resultados</b>                           | <b>5</b>  |
| 4.1. Pared con movimiento lineal . . . . .     | 5         |
| 4.1.1. Primer caso . . . . .                   | 5         |
| 4.1.2. Segundo caso . . . . .                  | 7         |
| 4.2. Pared con movimiento sinusoidal . . . . . | 8         |
| 4.2.1. Tercer caso . . . . .                   | 8         |
| 4.2.2. Cuarto caso . . . . .                   | 9         |
| <b>5. Conclusiones</b>                         | <b>11</b> |
| <b>6. Referencias</b>                          | <b>11</b> |

## 1. Resumen

El principal 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 5. Para profundizar el estudio se emplearán dos funciones diferentes para el movimiento de la pared, una lineal 4.1 y otra sinusoidal 4.2, se variarán los parámetros de las mismas y se estudiará además la validez de la aproximación adiabática en el tiempo.

## 2. Problema a resolver

Consideramos la ecuación de Schrödinger en 1D tomando  $m = 1/2$  y  $\hbar = 1$ , por simplicidad:

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

Donde  $H = -\partial_{xx} + V(x, t)$ . En el pozo infinito de potencial con pared móvil el potencial viene dado por:

$$V(x, t) = \begin{cases} 0, & \text{si } 0 < x < l(t) \\ \infty, & \text{en otro caso} \end{cases} \quad (2)$$

De modo que la función de onda  $\psi(x, t) = 0$  está sujeta a las siguientes condiciones de contorno:

$$\psi(0, t) = 0, \quad \psi(l(t), t) = 0 \quad (3)$$

Para todo el tiempo  $t$ .

La condición inicial vendrá dada por:

$$\psi(x, t) = f(x), \quad 0 < x < l(t) \quad (4)$$

Siendo  $f(x)$  una solución del pozo infinito para  $l(0)$ .

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

$$x \rightarrow z = \frac{x}{l(t)} \quad (5)$$

Quedando así la ecuación 1 como:

$$i\partial_t\psi(z, t) = -\frac{1}{l(t)^2}\partial_z^2\psi(z, t) + iz\frac{l'}{l}\partial_z\psi(z, t) \quad (6)$$

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

### 2.1. 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:

$$\frac{l'(t)}{l(t)} \ll 1 \quad (7)$$

Podemos despreciar el último término de la ecuación 6 y tenemos entonces:

$$i\partial_t\psi(z, t) = -\frac{1}{l(t)^2}\partial_z^2\psi(z, t) \quad (8)$$

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

$$|\psi_n(x, t)|^2 = \frac{2}{l(t)} \cdot \sin^2 n\pi \frac{x}{l(t)} \quad (9)$$

Que será la solución válida para todo tipo de movimiento  $l(t)$ , que emplearemos más adelante en el programa.

## 2.2. Solución numérica

Uno de los objetivos de la práctica es resolver numéricamente 6. Para ello la discretizamos usando:

$$z_k = kh_n \quad (10)$$

Donde  $k$  es un número natural y  $h_n = 1/n$ . Por lo tanto, los valores de la función de onda también estarán discretizados. Si tenemos esto en cuenta y, además, aplicamos un desarrollo en serie de Taylor, podremos obtener la ecuación que resolveremos más adelante mediante un método iterativo.

$$\partial_t \phi_k(t) = \frac{1}{h_n^2} \frac{i}{l^2(t)} [\phi_{k+1}(t) - 2\phi_k(t) + \phi_{k-1}(t)] + \frac{1}{2h_n} z_k \frac{l'(t)}{l(t)} [\phi_{k+1}(t) - \phi_{k-1}(t)] \quad (11)$$

## 3. Código

Hemos realizado un código en python, el cual resuelve numéricamente usando el método de Runge-Kutta, la ecuación de Schrödinger para el caso del pozo cuadrado con una pared móvil. La cual puede tener un movimiento tanto lineal como sinusoidal.

En este código utilizamos la función `jit` de la librería Numba, con el fin de reducir el tiempo que tarda en compilar el programa, sobre todo en los casos en que el tiempo de simulación es mayor. Además, usamos como función inicial  $f(z) = \sqrt{2} \sin m\pi z$  con  $m = 2$ .

Crearemos una función la cual determina el movimiento de la pared  $l(t)$ , y otra, la cual será su derivada. Las cuales necesitaremos para definir una función  $f(t, phi)$  la cual la necesitaremos para el `scipy.integrate.solve_ivp` del método de Runge-Kutta y para la resolución de la aproximación adiabática definimos una lista de longitud  $z$  y  $t$ , la cual llenaremos con un `for` siguiendo la ecuación 9.

```
##### PRÁCTICA 1. POZO INFINITO CON PARED MÓVIL #####
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from scipy.integrate import solve_ivp
from numba import jit
from mpl_toolkits.mplot3d import Axes3D

#Definimos las constantes

n=50
dz=1/n
dt=0.05
tmax=50
m = 2

#Definimos las variables, que están relacionadas con la pared

a = 1    #Longitud pared instante inicial (t=0)
b = 2    # Velocidad pared
w = 2    # Frecuencia angular pared

#Definimos vector espacial y temporal
```

```

z = np.arange(0, 1+dz, dz)      #espacial
t = np.arange(0, tmax+dt, dt)   #temporal

#Creamos una funcion que describe el movimiento de la pared.

@jit
def l(t):
    return a+b*t # Lineal
    #return a+b*np.sin(w*t) # Periódico

#Y su derivada.

@jit
def lprima(t):
    return b # Lineal
    #return w*b*np.cos(w*t) # Periódico

#Creamos el entorno para representar los casos

Z,T=np.meshgrid(z,t)

# Deshacemos el cambio de variable con  $X = Z \cdot l$ 
X = np.zeros((len(t), len(z)))
for i in range(len(t)):
    for j in range(len(z)):
        X[i,j] = Z[i,j]*l(t[i])

##### 1.1 APROXIMACIÓN ADIABÁTICA #####

#suponemos que lprima << l
aproxad = np.zeros((len(t),len(z))) #array de ceros que llenaremos con valores de espacio y tiempo

for i in range(len(t)):
    for j in range(len(z)):
        aproxad[i, j] = 2/l(t[i])*(np.sin(m*np.pi*z[j])**2)

#REPRESENTACIÓN GRÁFICA

fig, adb = plt.subplots(1,1)
adb = plt.axes(projection='3d')
adb.set_xlabel('Espacio')
adb.set_ylabel('Tiempo')
adb.set_zlabel('Densidad de probabilidad')
adb.set_title('Densidad de probabilidad (Aproximación adiabática)')
adb.plot_surface(X, T,aproxad, rstride=1, cstride=1, edgecolor='none')
adb.set_ylim((t[-1],t[0]))
adb.set_zlim((0,6))

##### 1.2 RESOLUCIÓN NUMÉRICA #####

@jit
def phi0(z):
    return np.sqrt(2/l(0))*np.sin(m*np.pi*z)

```

```

phi = np.zeros((len(z)), dtype = np.complex64) #añadimos el tipo para tener complejos
phi[:] = phi0(z) #llenamos el array con la función inicial

@jit
def funcion(t,phi):
    phi[0] = 0.+0j
    phi[-1] = 0.+0j
    retf = [np.complex64(x) for x in range(0)]
    for k in range(len(z)):
        if k == 0 or k == len(z)-1:
            retf += [0.+0j]
        else:
            retf += [(1j/(dz**2 * l(t)**2)) * (phi[k+1] - 2*phi[k] + phi[k-1]) + (1/(2*dz))*z[k]*(lpr
    return np.array(retf, dtype = np.complex64)

# Resolucion por Runge-Kutta

solu = solve_ivp(fun = funcion, t_span = (t[0], t[-1]), t_eval = t, y0 = phi,method = 'RK45', rtol =

#REPRESENTACIÓN GRÁFICA
fig, num = plt.subplots(1,1)
num = plt.axes(projection='3d')
num.set_xlabel('Espacio')
num.set_ylabel('Tiempo')
num.set_zlabel('Densidad de probabilidad')
num.set_title('Densidad de probabilidad (Runge-Kutta)')
num.plot_surface(X, T, np.abs(np.transpose(solu.y))*2, rstride=1,cstride=1,edgecolor='none')
num.set_ylim((t[-1],t[0]))
num.set_zlim((0,6))

```

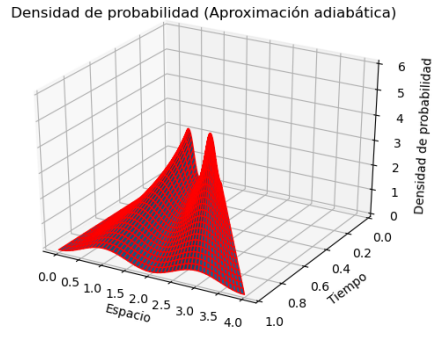
## 4. Resultados

En este apartado realizaremos un análisis de los resultados obtenido por el programa en los distintos casos planteados, tanto para el caso de la pared con movimiento lineal, como para el caso de la pared con un movimiento sinusoidal.

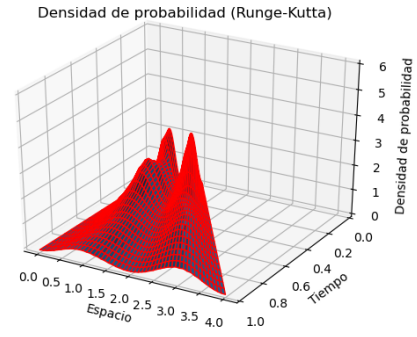
### 4.1. Pared con movimiento lineal

#### 4.1.1. Primer caso

En este caso la posición inicial de la pared,  $a = 1$  y tendremos un tiempo de simulación de  $t = 1$  segundos, y daremos tres valores a la velocidad de esta pared  $b = (3, 1, 0, 2)$ .

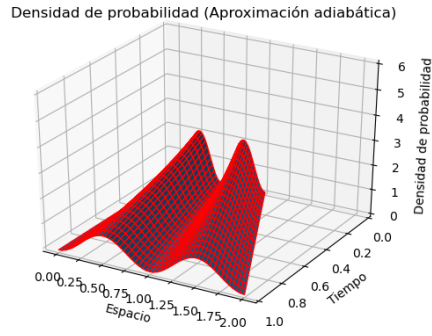


(a) Aproximación Adiabática  $b = 3$

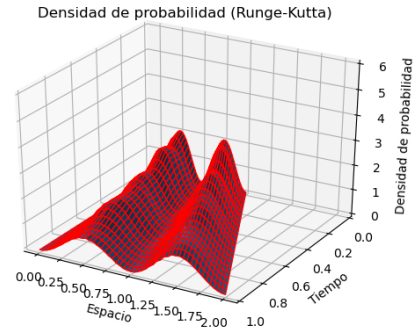


(b) Aproximación numérica  $b = 3$

**Figura 1:** Evolución de la densidad de probabilidad mediante Runge-Kutta para  $a = 1$  y  $b = 3$  de  $l(t) = a + bt$ .

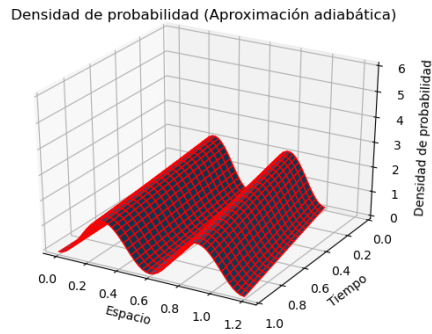


(a) Aproximación Adiabática  $b = 1$

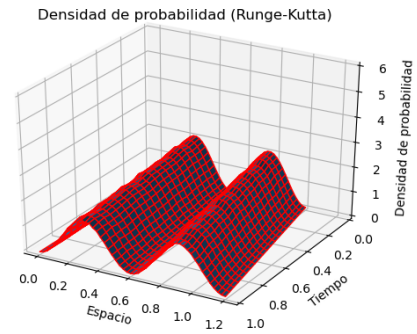


(b) Aproximación numérica  $b = 1$

**Figura 2:** Evolución de la densidad de probabilidad mediante Runge-Kutta para  $a = 1$  y  $b = 1$  de  $l(t) = a + bt$ .



(a) Aproximación Adiabática  $b = 0,2$



(b) Aproximación numérica  $b = 0,2$

**Figura 3:** Evolución de la densidad de probabilidad mediante Runge-Kutta para  $a = 1$  y  $b = 0,2$  de  $l(t) = a + bt$ .

En las figura 3 podemos apreciar claramente como la solución numérica 3b y adiabática 3a son prácti-

camente iguales . En cambio conforme vamos aumentando la velocidad de la pared, vemos como la solución adiabática va presentado más diferencias con respecto a la numérica. Siendo estas notáblemente más acusadas en 1a y en 1b.

Esto es debido a que la solución adiabática solo es válida cuando  $\frac{l'(t)}{l(t)} \ll 1$ , por lo que siendo  $l(t) = a + bt$  y por tanto  $l'(t) = b$  esto nos deja que  $\frac{b}{a+bt} \ll 1$  como condición para que la aproximación adiabática sea válida. De esta manera, siendo  $a = 1$ , para  $b = 0,2$  nos encontraremos dentro de la condición, para  $b = 1$  estaremos acercándonos al límite, en lo que ya se pueden apreciar unas pequeñas diferencias en las densidades  $2a$  y  $2b$  aunque no muy pronunciadas, y en  $b = 3$  ya estaremos acercándonos más al límite de la condición, provocando que esta no sea una buena aproximación, ya que la resolución numérica si que estrá teniendo en cuenta el segundo término de la ecuación 6 mientras que la adiabática lo estaremos despreciando.

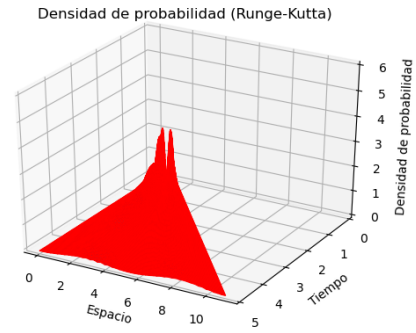
También es importante comentar que a cuanto mayor es la velocidad mayor será la pendiente de la figura representada, ya que en la misma cantidad de tiempo se recorrerá más espacio y que, dado que la densidad de probabilidad depende inversamente de  $l(t)$  9, por lo que a mayor  $b$  menor será la densidad de probabilidad.

#### 4.1.2. Segundo caso

En este caso la posición inicial de la pared,  $a = 1$  , la velocidad de esta pared  $b = 2$  tendremos un segundos, y daremos dos valores al tiempo de simulación de  $t = (5, 50)$



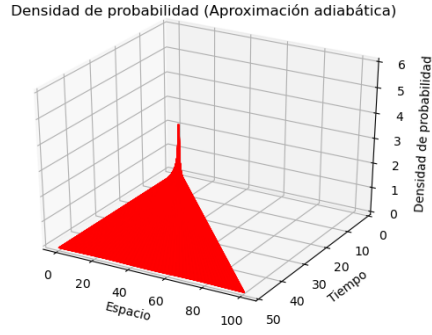
(a) Aproximación Adiabática  $t = 5$



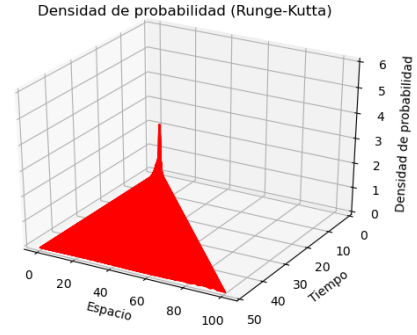
(b) Aproximación numérica  $t = 5$

**Figura 4:** Evolución de la densidad de probabilidad mediante Runge-Kutta para  $a = 1$  y  $b = 2$  de  $l(t) = a + bt$  con  $t = 5$ .





(a) Aproximación Adiabática  $t = 50$



(b) Aproximación numérica  $t = 50$

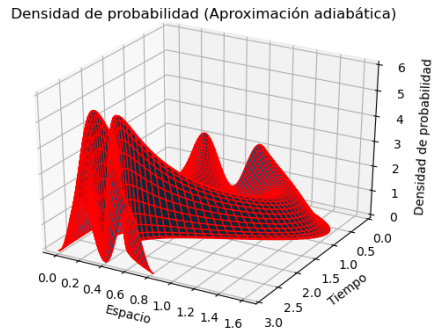
**Figura 5:** Evolución de la densidad de probabilidad mediante Runge-Kutta para  $a = 1$  y  $b = 2$  de  $l(t) = a + bt$  con  $t = 50$ .

En estas figuras se ve muy claramente que si mantenemos fija la velocidad de la pared pero aumentamos el tiempo de simulación dado que la solución exacta de la densidad de probabilidad, en el caso de la aproximación adiabática, es inversamente proporcional a la ecuación de movimiento, la cual depende directamente del tiempo, provoca que a valores muy altos de  $t$  las curvas descritas parezcan planas 5a, aunque si rotamos la figura y nos acercamos, si que se verán las curvas descritas en los casos anteriores.

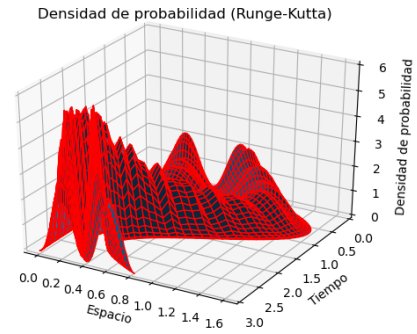
## 4.2. Pared con movimiento sinusoidal

### 4.2.1. Tercer caso

En este caso la posición inicial de la pared,  $a = 1$  y tendremos un tiempo de simulación de  $t = 3$  segundos, y daremos tres valores a la velocidad de esta pared  $b = (0,6, 0,4, 0,2)$ , siendo el movimiento de la pared sinusoidal  $l(t) = a + \sin(wt)$  y en donde  $w = 2$ .

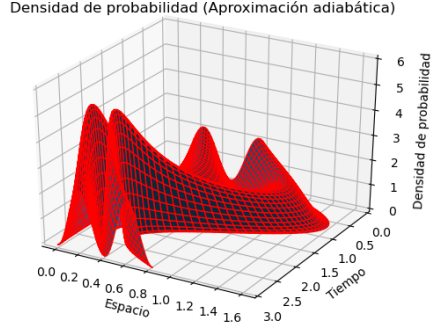


(a) Aproximación Adiabática  $b = 0,6$

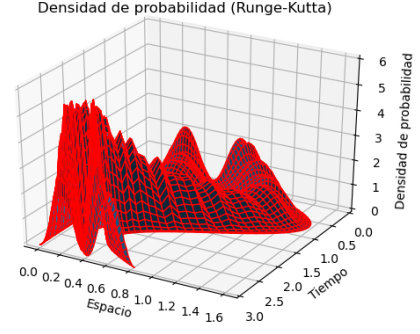


(b) Aproximación numérica  $b = 0,6$

**Figura 6:** Evolución de la densidad de probabilidad mediante Runge-Kutta para  $a = 1$ ,  $b = 0,6$  y  $w = 2$  de  $l(t) = a + \sin(wt)$ .

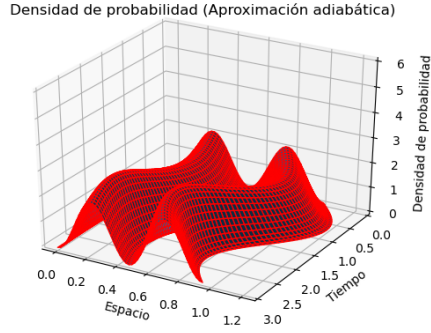


(a) Aproximación Adiabática  $b = 0,4$

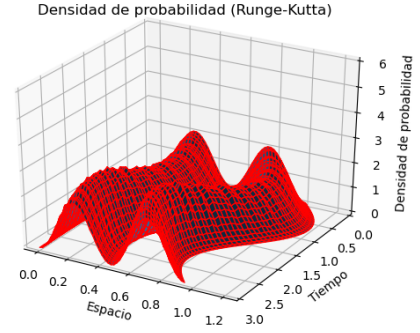


(b) Aproximación numérica  $b = 0,4$

**Figura 7:** Evolución de la densidad de probabilidad mediante Runge-Kutta para  $a = 1$ ,  $b = 0,4$  y  $w = 2$  de  $l(t) = a + \sin(wt)$ .



(a) Aproximación Adiabática  $b = 0,2$



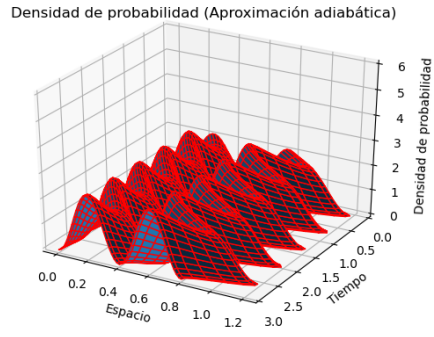
(b) Aproximación numérica  $b = 0,2$

**Figura 8:** Evolución de la densidad de probabilidad mediante Runge-Kutta para  $a = 1$ ,  $b = 0,2$  y  $w = 2$  de  $l(t) = a + \sin(wt)$ .

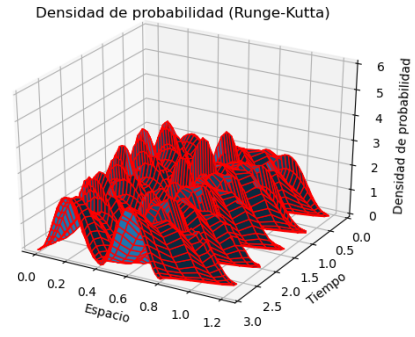
En este caso resulta importante comentar que la dependencia espacio-tiempo es sinusoidal y que la amplitud del movimiento aumenta a medida que aumentamos la velocidad angular. También, dado que el máximo de la densidad de probabilidad aumenta cuanto mayor sea la velocidad.

#### 4.2.2. Cuarto caso

En este caso la posición inicial de la pared,  $a = 1$  y tendremos un tiempo de simulación de  $t = 3$  segundos, y daremos tres valores a la velocidad angular de esta pared  $w = (10, 5, 2)$ , con  $b = 0,2$  y siendo el movimiento de la pared sinusoidal  $l(t) = a + \sin(wt)$ .

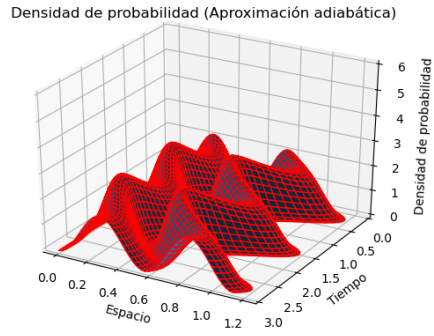


(a) Aproximación Adiabática  $w = 10$

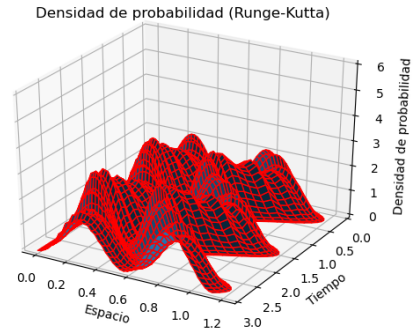


(b) Aproximación numérica  $w = 10$

**Figura 9:** Evolución de la densidad de probabilidad mediante Runge-Kutta para  $a = 1$  ,  $b = 0,2$  y  $w = 10$  de  $l(t) = a + \sin(wt)$ .

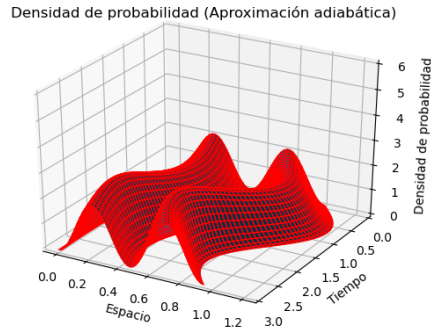


(a) Aproximación Adiabática  $w = 5$

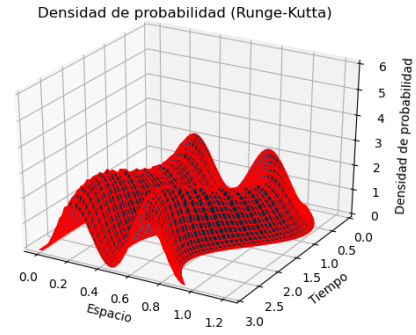


(b) Aproximación numérica  $w = 5$

**Figura 10:** Evolución de la densidad de probabilidad mediante Runge-Kutta para  $a = 1$  ,  $b = 0,2$  y  $w = 5$  de  $l(t) = a + \sin(wt)$ .



(a) Aproximación Adiabática  $w = 2$



(b) Aproximación numérica  $w = 2$

**Figura 11:** Evolución de la densidad de probabilidad mediante Runge-Kutta para  $a = 1$ ,  $b = 0,2$  y  $w = 2$  de  $l(t) = a + \sin(wt)$ .

Vemos que para el caso  $w = 10$  la solución con Runge-Kutta presenta una forma nada trivial con varios surcos y máximos no presentes en la forma esperado en la aproximación adiabática, mucho más suave. Esto no ocurre cuando la variación temporal es menor  $w = 2$ , donde el límite adiabático y la solución real coinciden. En el caso  $w = 5$  observamos una situación intermedia entre las dos analizadas. Esto puede ser debido a que la velocidad angular lo que provoca es este aumento de los máximos en la figura.

## 5. Conclusiones

- Hemos resuelto satisfactoriamente la ecuación de Schrödinger para un pozo infinito con una pared móvil con dos métodos de aproximación distintos.
- Hemos estudiado la dependencia de la densidad de probabilidad con el tiempo y la importancia del tipo de movimiento de la pared. Además, hemos visto satisfactoriamente como se comportan las aproximaciones realizadas en las distintas posibilidades de las variables de las que depende el sistema.
- Se ha añadido un caso en el que el tiempo de simulación es mucho mayor y el movimiento de la pared es sinusoidal, en el que si se cumple la aproximación adiabática frente al caso del movimiento lineal.

## 6. Referencias

- [1] O. Fojón et al./ Computers and Mathematics with Applications 59 (2010) 964-976.
- [2] Sakurai, J. J.; (1994) (Revised Edition) Modern Quantum Mechanics. Addison-Wesley Publishing Company.
- [3] GARCÉS VERNIER, INTI y CHIAPPE ACOSTA, GUILLERMO. Guión de prácticas de ordenador para la asignatura de Física Cuántica Avanzada, Cuarto Curso de Física de la Universidad de Alicante, 2022/2023.