

# Trabajo

## Física de la materia condensada

*Javier Uzquiza López*



# Universidad de Oviedo

Facultad de Ciencias

PCEO Física y Matemáticas

Métodos numéricos y sus aplicaciones a la física

2019-2020

# Índice

<b>1. Práctica 1: Gas bidimensional</b>	<b>2</b>
1.1. 1º apartado . . . . .	2
1.2. 2º apartado . . . . .	3
<b>2. Ecuaciones de Maxwell</b>	<b>5</b>
2.1. 1º apartado . . . . .	5
2.2. 2º apartado . . . . .	6
<b>3. Ecuación de Schrödinger</b>	<b>7</b>
3.1. 1º apartado . . . . .	7
3.2. 2º apartado . . . . .	10

# 1. Práctica 1: Gas bidimensional

## 1.1. 1º apartado

Se simula un gas bidimensional de 150 discos (partículas), con una temperatura  $T=25$ . Variando el área de la caja entre 100 y 1500, se busca obtener los valores de presión para los distintos tamaños, así como representar la presión en función del inverso del área.

En primer lugar, utilizaremos un soporte de tamaños de área equiespaciados, que irán desde 100 hasta 1500 en pasos de 100. Para aumentar la calidad de la aproximación del modelo, en el cálculo de la presión se tendrá en cuenta el área de los discos utilizados como partículas, incrementando ligeramente la presión y mejorando la simulación.

Se llevan a cabo simulaciones del programa confeccionado, en el que la presión es consecuencia del choque de las partículas con las paredes de la caja, de manera que parece lógico pensar que cuanto mayor sea el área que contiene la caja, menor será el número de choques durante un mismo intervalo temporal.

Los resultados obtenidos son mostrados a continuación:

Área	Presión
100	0.40874
200	0.18800
300	0.12416
400	0.09003
500	0.07248
600	0.06095
700	0.05079
800	0.04427
900	0.03796
1000	0.03604
1100	0.03027
1200	0.02978
1300	0.02760
1400	0.02648
1500	0.02445

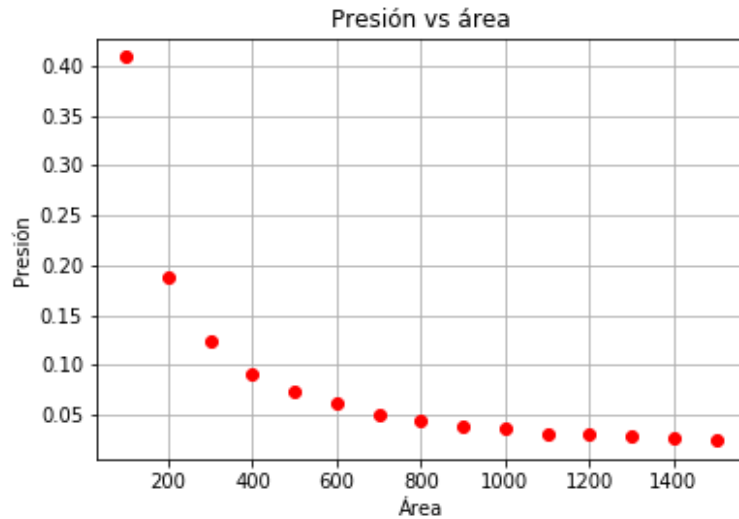


Figura 1: Resultados obtenidos de la presión en función del área.

Los resultados obtenidos concuerdan con lo esperado, ajustándose a una curva de decaimiento exponencial a medida que aumenta el área, de forma que el valor de la presión convergerá a 0 hacia el infinito y divergerá a infinito cuando el área se aproxime a 0.

Otra manera de comprobar este comportamiento es a partir de la representación de la presión frente al inverso del área, que se ajustará a una línea recta de cierta pendiente, con origen en 0 (área  $\sim \infty$ ). En esta ocasión, resulta más apropiado utilizar un soporte de puntos equidistantes para el inverso del área, teniendo de nuevo en cuenta la superficie ocupada por los propios discos.

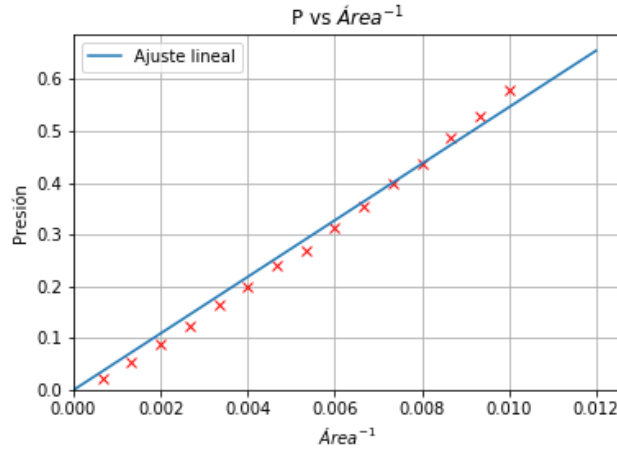


Figura 2: Representación gráfica de la presión en función del inverso del área.

El ajuste lineal ofrece una pendiente de 54.03, con ordenada en el origen en 0. Resultado que se ajusta a lo que cabe esperar de forma teórica.

## 1.2. 2º apartado

Se simula un gas bidimensional con 100 partículas, de las cuales, 50 son de masa  $m_1=1$  y presentan al inicio una temperatura  $T=100$  y otras 50 de masa  $m_2=40$  y con temperatura inicial  $T=0$ . Se busca observar cómo varía la temperatura de cada tipo de partículas a lo largo del tiempo, así como la influencia que tiene el número de partículas de cada tipo existentes.

Puesto que  $E = K_B \cdot T$ , siendo  $K_B$  la constante de Boltzmann, vamos a entender  $E \sim T$ , de forma, que la energía es proporcional a la temperatura de las partículas.

En la simulación incluida en el código, se muestran de color rojo las partículas de tipo 1, con masa  $m_1$  e inicialmente en movimiento, pues al presentar  $T \neq 0$ ,  $E = \frac{1}{2}mv^2 \neq 0$  y por tanto, las partículas tienen cierta velocidad. Las partículas del tipo 2, de color azul y con masa  $m_2$ , presentan inicialmente velocidad nula, con lo que se encuentran paradas. A medida que las partículas rojas van chocando de forma elástica con las azules las van confiriendo, poco a poco, velocidad y por tanto, presentan energía y temperatura.

Al producirse choques elásticos, la energía (temperatura) del sistema ha de conservarse, no así el de las distintas partículas, las cuales mediante este tipo de contactos lo van transfiriendo de unas a otras. El resultado obtenido es el siguiente:

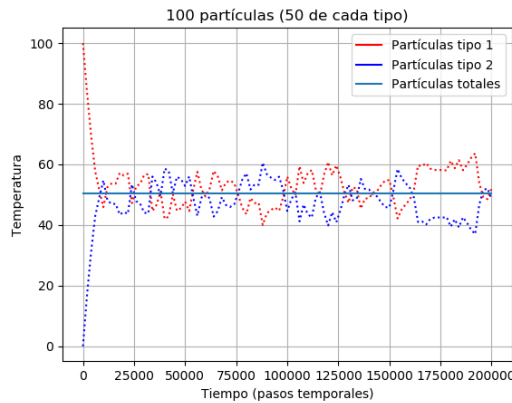


Figura 3: Temperatura de los distintos tipos de partículas a lo largo del tiempo.

Se puede observar, a medida que avanza el tiempo, una reducción de la temperatura de las partículas del primer tipo, así como un aumento para las del tipo 2, mientras que la temperatura del conjunto se mantiene constante. Alrededor de dicha temperatura, sucederán a lo largo del tiempo distintas fluctuaciones, que harán que en según qué instante temporal la temperatura de uno de los grupos de partículas sea superior o inferior, pero siempre próximo.

Analizando en detalle la parte inicial (compensación térmica), podemos determinar cómo los aumentos o disminuciones de temperatura siguen un desarrollo exponencial, que se va suavizando a medida que las temperaturas son más cercanas, tal y como se muestra a continuación.

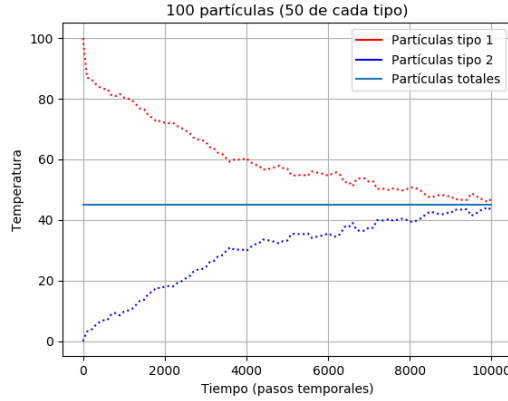


Figura 4: Temperatura de los distintos tipos de partículas en los instantes iniciales.

A continuación, veremos cómo influye el número de partículas que haya de cada tipo:

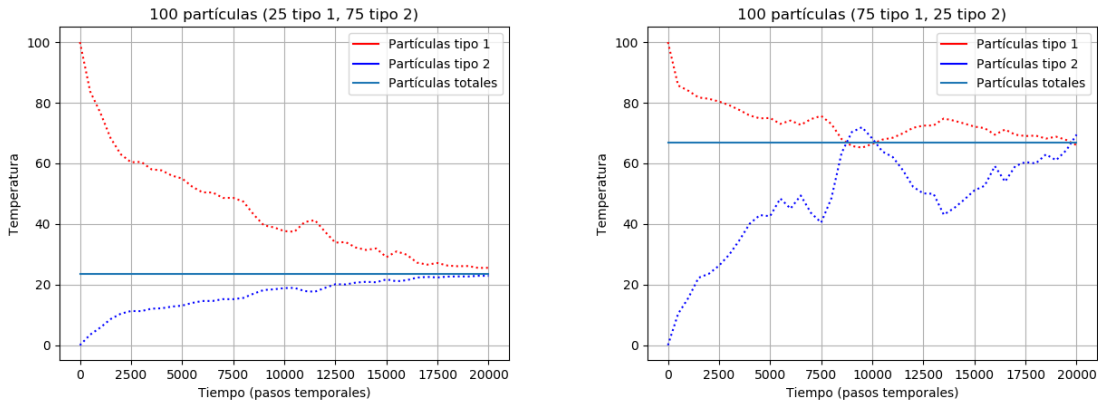


Figura 5: Temperatura de las partículas en función del tiempo para distinto número de partículas de cada tipo

Las gráficas muestran un comportamiento similar al del caso en el que se tienen el mismo número de partículas de ambos tipos, de manera que tras un cierto periodo de tiempo la temperatura de ambos grupos de partículas se estabiliza entorno a un valor. Sin embargo, en el caso en el que las partículas del primer tipo son mayoría, la estabilidad se alcanza en mucho menos tiempo que en el caso en el que son minoría, donde tarda aún más que en el caso estudiado en primer lugar (mismo número). Además, tal y como cabe de esperar, la temperatura del sistema general, es superior en el caso donde las partículas rojas, las que presentan movimiento al inicio, son más que las azules.

## 2. Ecuaciones de Maxwell

### 2.1. 1º apartado

Se busca implementar la ley de Snell utilizando una fuente a lo largo de una línea, situada en la parte inferior de la primera mitad del mallado, formando un ángulo de  $45^\circ$  con el eje horizontal. Se estudiará la transmisión y reflexión del pulso para cuando el primer medio es el vacío y el segundo presenta  $\varepsilon = 4$ . Además, se buscará el índice de refracción del primer medio que de lugar al ángulo límite para el caso en el que el el segundo medio es el vacío.

Modificando y acomodando al enunciado el código escrito en clase podemos observar los dos fenómenos ópticos comentados: reflexión y refracción. La onda sinusoidal generada en el extremo inferior izquierdo del primer medio ( $\varepsilon_1 = 1$ ) es reflejada en el extremo superior de este mismo medio con el mismo ángulo, consecuencia de la reflexión, de manera que  $\theta_i = \theta_r = 45^\circ$ .

Por otro lado, atendiendo a la ley de la refracción o *ley de Snell*:

$$n_i \sin \theta_i = n_t \sin \theta_t \quad (1)$$

podemos calcular el ángulo con el que será transmitido el pulso sinusoidal. Para ello, necesitamos establecer la relación entre los índices de refracción de ambos medios:

$$\frac{n_t}{n_i} = \frac{\sqrt{\mu_t \varepsilon_t}}{\sqrt{\mu_i \varepsilon_i}} = \frac{\sqrt{\varepsilon_t}}{\sqrt{\varepsilon_i}} = \frac{\sqrt{\varepsilon_2}}{\sqrt{\varepsilon_1}} = 2 \quad (2)$$

Por tanto:

$$\theta_t = \arcsin \frac{n_i \sin \theta_i}{n_t} = \arcsin \frac{\sin 45^\circ}{2} = \arcsin \frac{1}{2\sqrt{2}} = 20.7^\circ \quad (3)$$

Al llevar a cabo la simulación, el resultado es el siguiente:

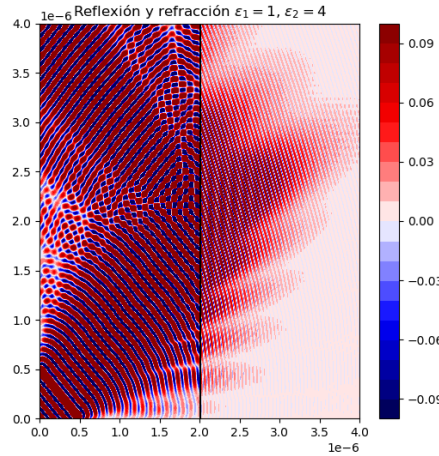


Figura 6: Representación de los fenómenos de reflexión y refracción entre dos medios.

Debido al elevado valor de  $\varepsilon_2$  ( $\varepsilon_2 = 4$ ), en el segundo medio se produce una elevada absorción de la onda, reduciéndose notablemente la intensidad del pulso.

Para el caso en el que el medio incidente presenta un mayor índice de refracción, resulta posible el cálculo del ángulo límite, a partir del que no se produce transmisión al segundo, sino que la reflexión es total. Utilizando la ley de Snell (1) y las relaciones de la expresión (2) se obtiene que la permitividad del primer medio ha de ser  $\varepsilon_1 = 2\varepsilon_2$ . Utilizando dichos valores, se procede a la simulación: Como se

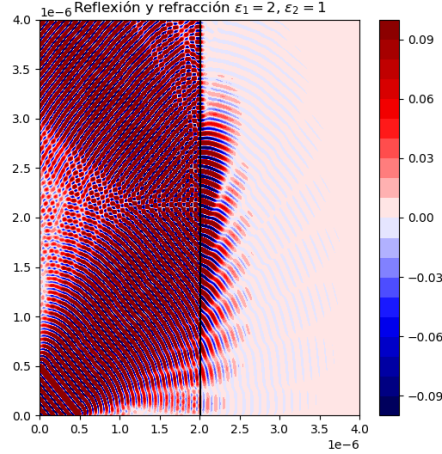


Figura 7: Representación del fenómeno de reflexión total.

puede observar, debido a que el pulso sinusoidal posee cierta longitud, la dirección del frente de ondas en los extremos no es exactamente la misma que se pretende simular ( $\theta_i = 45^\circ$ ), incidencia para la que se ha configurado la reflexión total. Esto provoca cierta transmisión de la onda y no el fenómeno buscado. No obstante, la cantidad de pulso transmitido resulta muy reducido.

## 2.2. 2º apartado

**Se busca la observación del fenómeno de interferencia, analizando la dependencia de la frecuencia de la fuente emisora.**

Se divide el espacio en dos partes mediante una pared, que los comunica salvo por dos pequeños orificios, de localización próxima, que propiciarán el fenómeno de interferencia. Además, debido a que el tamaño de la abertura es del orden de la longitud de onda del pulso, aparece el fenómeno de difracción, causante del patrón formado por colinas y valles redondeados que se observa en la pantalla proyectora.

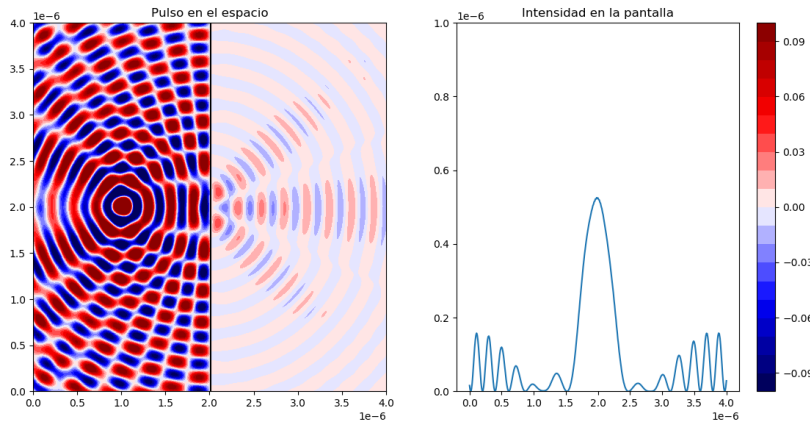


Figura 8: Parte izquierda: propagación del pulso en el espacio.

Parte derecha: patrón de interferencia y difracción proyectado en la pantalla para cada instante.

Por otro lado, para establecer cualitativamente la dependencia de la frecuencia del pulso en el patrón de interferencia se utilizan 3 longitudes de pulso diferentes:  $4 \cdot 10^{-8}m$  (frecuencia alta),  $6.5 \cdot 10^{-8}m$  (frecuencia media),  $9 \cdot 10^{-8}m$  (frecuencia baja) y se proyecta el resultado acumulado tras un cierto periodo de tiempo. El resultado es el siguiente:

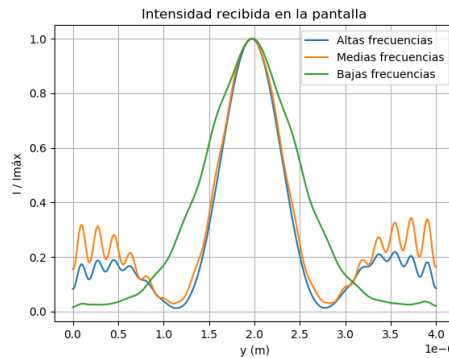


Figura 9: Análisis cualitativo de los patrones de interferencia y difracción para distintas frecuencias.

Puede observarse como la anchura de los picos de intensidad se reduce a medida que aumenta la frecuencia. Además, aunque al estar normalizados no pueda apreciarse, la intensidad es superior para frecuencias mayores, tal y como cabría de esperar.

### 3. Ecuación de Schrödinger

#### 3.1. 1º apartado

##### Resumen del código implementado

En esta tercera práctica se busca ir avanzando paso a paso en el estudio del comportamiento cuántico de los átomos, para llevar a cabo la resolución de la ecuación de Schrödinger en una dimensión.

**Cálculo del potencial** Confeccionado el mallado sobre el que se trabajará, se calcula el potencial causado por los distintos átomos situados de forma equiespaciada, tal que:

$$V(x) = \sum_{i=1}^N \frac{-Z}{\sqrt{(x - x_i)^2 + \delta}} \quad (4)$$

siendo  $Z$  el número atómico,  $N$  el número de átomos y  $\delta$  un factor corrector de valor 0.1.

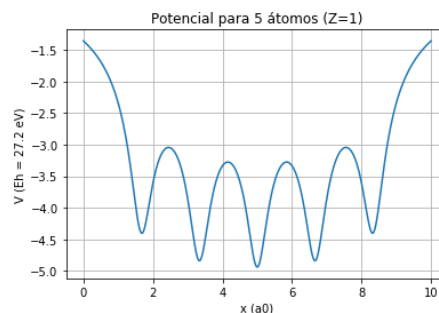


Figura 10: Potencial obtenido para 5 átomos de H equiespaciados.

**Base de funciones** Para el cálculo de las funciones de onda se utilizan distintas bases de funciones, que corresponden a los orbitales de Slater (3.1), gaussianos (3.1) y series de Fourier (3.1). De esta



forma, se tiene:

$$\psi_i(x) \simeq \sum_{j=1}^{Nbase} C_{ij} \Phi_j(x) \quad (5)$$

tal que  $C_{ij}$  son los coeficientes a determinar y  $\Phi_j(x)$  es la base de funciones.

Dichas bases de funciones son:

- Slater:

$$\Phi_j(x) = e^{-\beta|x-x_j|} \quad (6)$$

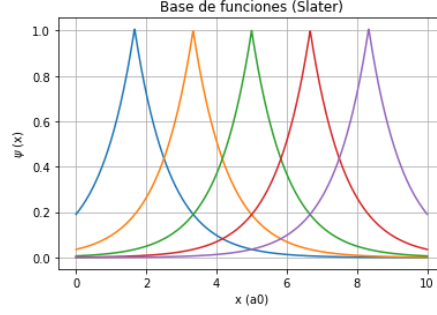


Figura 11: Base de 5 funciones de Slater para 5 átomos normalizadas.

- Gauss:

$$\Phi_j(x) = e^{-\beta(x-x_j)^2} \quad (7)$$

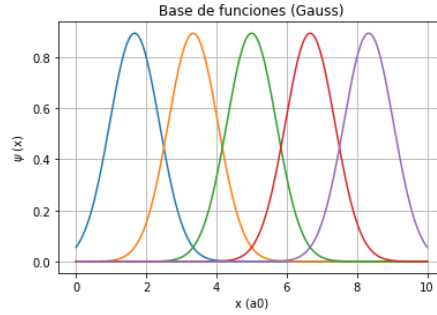


Figura 12: Base de 5 funciones de Gauss para 5 átomos normalizadas.

- Fourier:

$$\Phi_j(x) = e^{i \frac{2n\pi Nbase}{L} x} \quad (8)$$

**Cálculo del hamiltoniano y de la matriz de solape** Buscamos obtener el hamiltoniano del sistema que nos permitirá conocer los autovalores (energías) y autoestados del sistema. Para ello, aplicamos la siguiente expresión:

$$H = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \quad (9)$$

a las funciones obtenidas y calculando la derivada segunda en un punto a partir de utilizar la información de los valores consecutivos:

$$f''(x) = \frac{f(x + \Delta x) + f(x - \Delta x) - 2f(x)}{\Delta x^2} \quad (10)$$

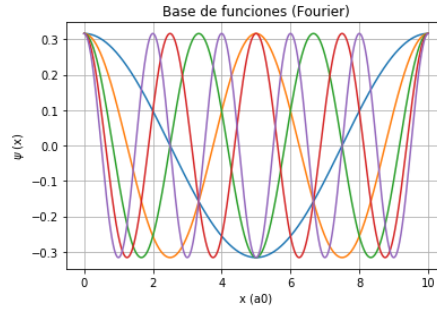


Figura 13: Base de 5 funciones de Fourier para 5 átomos normalizadas.

Para llevar a cabo la resolución el problema de autovalores se introduce la función de solapamiento  $S_{ij} = \int \Phi_i^*(x)\Phi_j(x)dx$ . Esta matriz coincide con la identidad en caso de que las funciones de la base sean ortogonales, como es el caso de la de Fourier. Por su parte la matriz del hamiltoniano corresponde a  $H_{ij} = \int \Phi_i^*(x)H\Phi_j(x)dx$ , tal que  $H = T + V$ .

Calculados los valores propios de la energía y sus correspondientes autoestados, se obtienen las autofunciones de onda a partir de cada una de las bases de funciones, cuyo resultado es el siguiente:

- Slater:

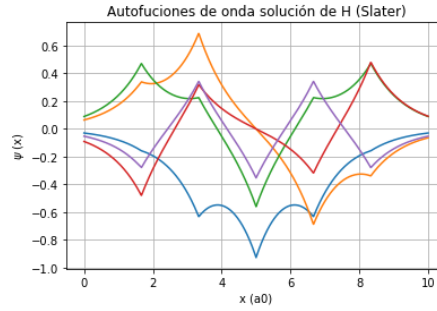


Figura 14: Autofunciones de onda normalizadas para una base de 5 funciones de Slater para 5 átomos.

- Gauss:

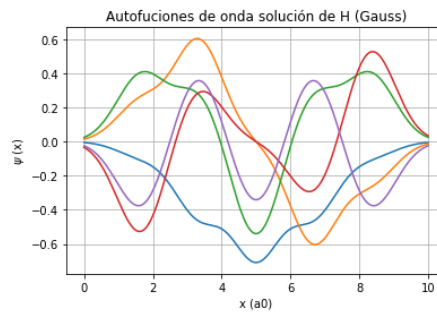


Figura 15: Autofunciones de onda normalizadas para una base de 5 funciones de Gauss para 5 átomos.

- Fourier:

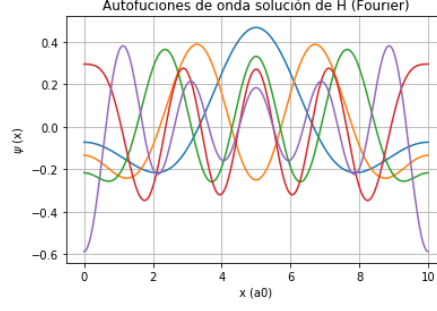


Figura 16: Autofunciones de onda normalizadas para una base de 5 funciones de Fourier para 5 átomos.

### 3.2. 2º apartado

Se busca expresar el número de partículas  $N$  y la energía total del sistema  $E$  en función de los elementos de la matriz del solape y el hamiltoniano.

$$\begin{aligned}
 Sea \quad N &= \int \sum_{n=1}^N |\Psi_n|^2 dx = \int \sum_n \sum_{\mu} C_{n\mu}^* \Phi_{\mu}^* \sum_{\sigma} C_{n\sigma} \Phi_{\sigma} dx = \sum_n \sum_{\mu} \sum_{\sigma} C_{n\mu}^* C_{n\sigma} \int \Phi_{\mu}^* \Phi_{\sigma} dx = \\
 &= \sum_{\mu, \sigma} \rho_{\mu\sigma} S_{\mu\sigma}; \text{ tal que } \rho_{\mu\sigma} = \sum_n C_{n\mu}^* C_{n\sigma} \text{ son los elementos de la matriz de densidad y} \\
 S_{\mu\sigma} &= \int \Phi_{\mu}^* \Phi_{\sigma} dx \text{ los elementos de la matriz de solape.}
 \end{aligned} \tag{11}$$

$$\begin{aligned}
 Sea \quad E &= \int \sum_{n=1}^N \Psi_n^* H \Psi_n dx = \int \sum_n \sum_{\mu} C_{n\mu}^* \Phi_{\mu}^* \sum_{\sigma} C_{n\sigma} H \Phi_{\sigma} dx = \sum_n \sum_{\mu} \sum_{\sigma} C_{n\mu}^* C_{n\sigma} \int \Phi_{\mu}^* H \Phi_{\sigma} dx = \\
 &= \sum_{\mu, \sigma} \rho_{\mu\sigma} H_{\mu\sigma}; \text{ tal que } H_{\mu\sigma} = \int \Phi_{\mu}^* H \Phi_{\sigma} dx \text{ los elementos de la matriz del hamiltoniano}
 \end{aligned} \tag{12}$$