

Complementos Matemáticos y Numéricos

Máster en Física - 2023/2024

Ejercicio 2

Resolver la **ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo** para cada uno de los potenciales $V(x)$ que se presentan a continuación. Representar la densidad de probabilidad para varios tiempos junto con el potencial (en escalas diferentes apropiadamente elegidas, dentro de la misma figura). Si se conoce la solución exacta, compararlas. En este ejercicio, considerar una caja de paredes rígidas con bordes en $x = 0$ y $x = L = 2\pi$ (es decir, las condiciones de contorno son: $\psi(0, t) = 0$, y $\psi(L, t) = 0$).

Pasos a tener en cuenta:

1. Programar algoritmo de Crank-Nicolson en unidades naturales $\hbar = 1$ y masa $m = 1$.
2. Usar la subrutina generada en el apartado anterior para resolver los siguientes casos, analizando los resultados obtenidos desde el punto de vista numérico y de interpretación física:

(a) Partícula libre: $V(x) = 0$

Condiciones iniciales: $\psi(x, 0) = C \exp[-(x - x_0)^2/\sigma^2]$

$x_0 = 0.4$, $\sigma^2 = 10^{-3}$, $\Delta x = 10^{-2}$, $\Delta t = 5 \cdot 10^{-7}$.

(b) Partícula libre con función de onda inicial

$\psi(x, 0) = C \exp[-(x - x_0)^2/\sigma^2] \exp(ik_0x)$, con $k_0 = 500$.

Calcular la velocidad del paquete de ondas (velocidad de $\langle x \rangle$ o velocidad del máximo de la densidad de probabilidad).

(c) Estudiar la reflexión/transmisión en pared:

$V(0 < x < 0.6) = 0$, $V(0.6 < x < L) = 10^6$ con $\psi(x, 0)$ del caso (b).

(d) Estudiar la reflexión/transmisión en barranco:

$V(0 < x < 0.6) = 0$, $V(0.6 < x < L) = -10^6$ con $\psi(x, 0)$ del caso (b).

(e) Estudiar la reflexión/transmisión por barrera:

$V(0.6 < x < 0.7) = 1.25 \cdot 10^5$, $V(\text{resto}) = 0$ con $\psi(x, 0)$ del caso (b), con k_0 variable alrededor de 500, para ver los efectos del número de onda o velocidad en el problema.

(f) Estudiar la reflexión/transmisión por pozo:

$V(0.6 < x < 0.7) = -1.25 \cdot 10^5$, $V(\text{resto}) = 0$ con $\psi(x, 0)$ del caso (b), con k_0 variable alrededor de 500, para ver los efectos del número de onda o velocidad en el problema.