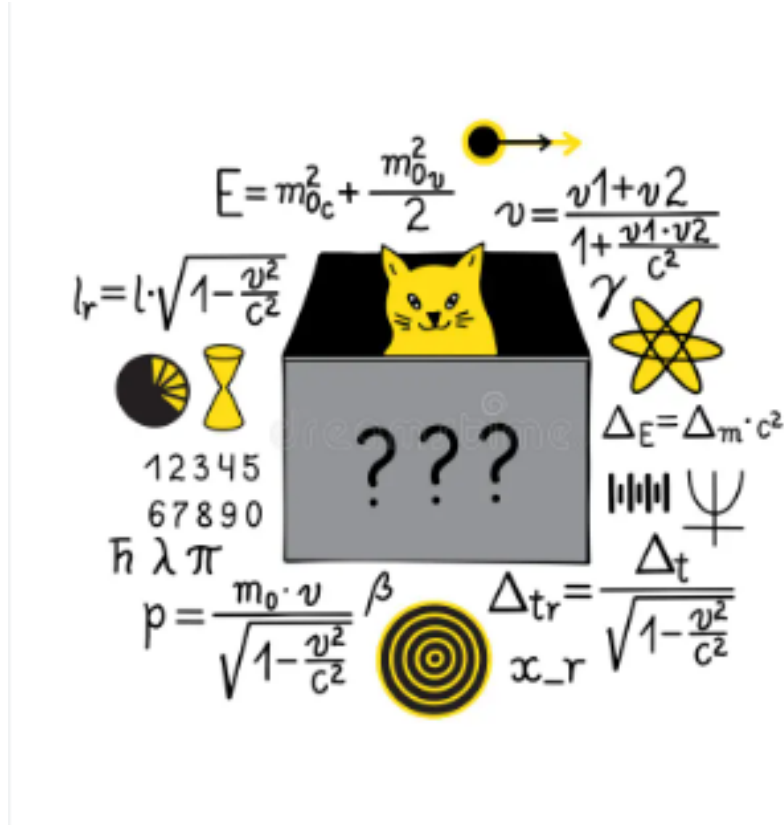


# RESOLUCIÓN DE ECUACIONES EN DERIVADAS PARCIALES: LA ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER UNIDIMENSIONAL

Pablo Caballero Mesa



## Física Computacional

### Resumen

En este trabajo se estudia el fenómeno del efecto túnel a través de simulaciones numéricas de la ecuación de Schrödinger unidimensional, con un potencial compuesto por un pozo de paredes infinitas y una barrera interna de altura finita. Se analiza el comportamiento de la función de onda al interactuar con esta barrera, observando cómo varía el coeficiente de transmisión  $K$  en función de distintos parámetros: la altura del potencial  $V(x)$  y los puntos espaciales  $N$ . Para ello, se utilizan métodos probabilísticos con detectores situados a ambos lados de la barrera, y se comparan los resultados numéricos con la predicción teórica del coeficiente  $K(\lambda, n_{\text{ciclos}})$ . Se discuten las discrepancias encontradas y su posible origen físico o numérico, concluyendo con una validación general del modelo implementado.

# Índice

<b>1. Introducción</b>	<b>3</b>
1.1. Base teórica: La ecuación de onda dependiente del tiempo en 1D . . . . .	3
1.2. El efecto túnel . . . . .	3
<b>2. Resultados y análisis</b>	<b>4</b>
2.1. Comparación de la probabilidad en el punto máximo con K. . . . .	5
2.2. Variación de K en función de N. . . . .	6
2.3. Variación de K en función de la altura de la barrera $\lambda$ . . . . .	7
<b>3. Valores Esperados</b>	<b>9</b>
<b>4. Coste Computacional</b>	<b>10</b>
<b>5. Conclusiones</b>	<b>12</b>

# 1. Introducción

## 1.1. Base teórica: La ecuación de onda dependiente del tiempo en 1D

La ecuación de Schrödinger es uno de los pilares fundamentales de la mecánica cuántica, introducida por Erwin Schrödinger en 1926. Esta ecuación permite describir la evolución temporal del estado cuántico de un sistema a través de su función de onda  $\Psi(x, t)$ .

En una dimensión espacial y en su forma dependiente del tiempo, la ecuación se expresa como:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \Psi(x, t), \quad (1)$$

donde  $V(x)$  es el potencial en el que se encuentra la partícula,  $m$  su masa, y  $\hbar$  la constante de Planck reducida.

En nuestro caso, se considera un potencial estático  $V(x)$ , definido como un pozo de potencial con paredes infinitas que contiene una barrera rectangular en su interior. Este potencial se modela como:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x \in [0, \frac{2N}{5}] \\ V, & x \in [\frac{2N}{5}, \frac{3N}{5}] \\ 0, & x \in [\frac{3N}{5}, N] \end{cases} \quad (2)$$

La solución a la ecuación (1) se obtiene utilizando separación de variables, escribiendo:

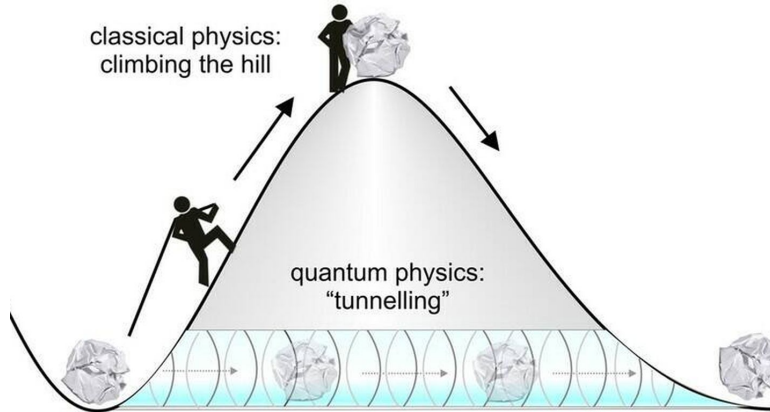
$$\Psi(x, t) = \phi(x)f(t), \quad (3)$$

lo que lleva a una ecuación temporal del tipo  $f(t) = f(0) \exp(-iEt/\hbar)$  y una ecuación espacial que resulta en la forma estacionaria de la ecuación de Schrödinger. La solución espacial dependerá del potencial y de las condiciones de contorno.

## 1.2. El efecto túnel

Uno de los fenómenos más interesantes que surgen de esta formulación es el llamado efecto túnel. Este ocurre cuando una partícula con energía menor que la altura de una barrera de potencial tiene una probabilidad finita de atravesarla, lo cual contradice la intuición clásica.

Históricamente, este efecto fue descrito por primera vez en contextos como la desintegración  $\alpha$ , y más tarde observado experimentalmente en sistemas como los semiconductores y dispositivos electrónicos. En este trabajo, se estudia el efecto túnel mediante simulaciones que permiten calcular el coeficiente de transmisión  $K$ , definido como la probabilidad de que la partícula se detecte al otro lado de la barrera.



## 2. Resultados y análisis

En mecánica clásica, el coeficiente de transmisión  $K$  representa la probabilidad de que una partícula atraviese una barrera. Este coeficiente es 1 si la energía de la partícula excede la de la barrera, y 0 si no lo hace. Sin embargo, en mecánica cuántica, debido al efecto túnel, existe una probabilidad distinta de cero de que la partícula atraviese una barrera incluso si su energía es menor que la del potencial.

La probabilidad de detectar una partícula entre las posiciones  $x_1$  y  $x_2$  viene dada por:

$$P(x_1, x_2) = \int_{x_1}^{x_2} |\Phi(x)|^2 dx, \quad (4)$$

donde  $\Phi(x)$  es la función de onda.

En un sistema numérico discreto, colocamos detectores a ambos lados de la barrera. Suponiendo que los detectores ocupan una fracción  $N/5$  del sistema, las probabilidades de detección a la izquierda ( $P_I$ ) y derecha ( $P_D$ ) en un tiempo  $n$  son:

$$P_D(n) = \sum_{j=4N/5}^N |\Phi_{j,n}|^2, \quad P_I(n) = \sum_{j=0}^{N/5} |\Phi_{j,n}|^2. \quad (5)$$

Para estimar el coeficiente de transmisión, repetimos el experimento  $m$  veces y contamos el número de veces  $m_T$  que la partícula es detectada a la derecha. Así, el coeficiente de transmisión se calcula como:

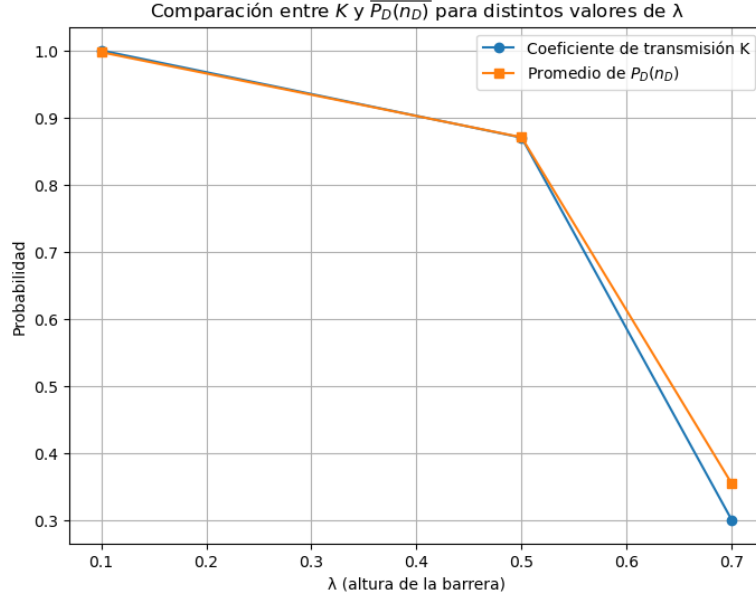
$$K = \frac{m_T}{m}. \quad (6)$$

Un aspecto clave es determinar el instante adecuado de medición. Si se mide demasiado pronto, la partícula puede no haber alcanzado la barrera; si se espera demasiado, puede haber rebotado o dispersado. Para evitarlo, se propone buscar el primer máximo local de  $P_D(t)$  y usar ese tiempo como referencia.

### Algoritmo para el cálculo de $K$

1. Inicializar  $m_T = 0$ .
2. Generar la función de onda inicial.
3. Determinar  $n_D$ , el tiempo correspondiente al primer máximo local de  $P_D(t)$ .
4. Evolucionar la función de onda hasta  $n_D$ .
5. Calcular  $P_D(n_D)$ .
6. Generar un número aleatorio  $p \in [0, 1]$ . Si  $p < P_D(n_D)$ , actualizar  $m_T = m_T + 1$ .
7. Repetir el proceso desde el paso 2 hasta completar  $m$  repeticiones.

## 2.1. Comparación de la probabilidad en el punto máximo con K.



**Figura 1:** Comparación entre  $K$  y  $P_D(n_D)$  para distintos valores de  $\lambda$  con  $N = 500$ ,  $nciclos = 60$ ,  $m = 100$  y un tiempo de simulación empleado de 2 min y 41.4 s.

Ambas cantidades están estrechamente relacionadas:  $P_D(n_D)$  puede interpretarse como la probabilidad de éxito en un experimento de Bernoulli, mientras que  $K$  es su estimador frecuentista. Por ello, en el límite de muchas simulaciones, se cumple que

$$K \approx \langle P_D(n_D) \rangle,$$

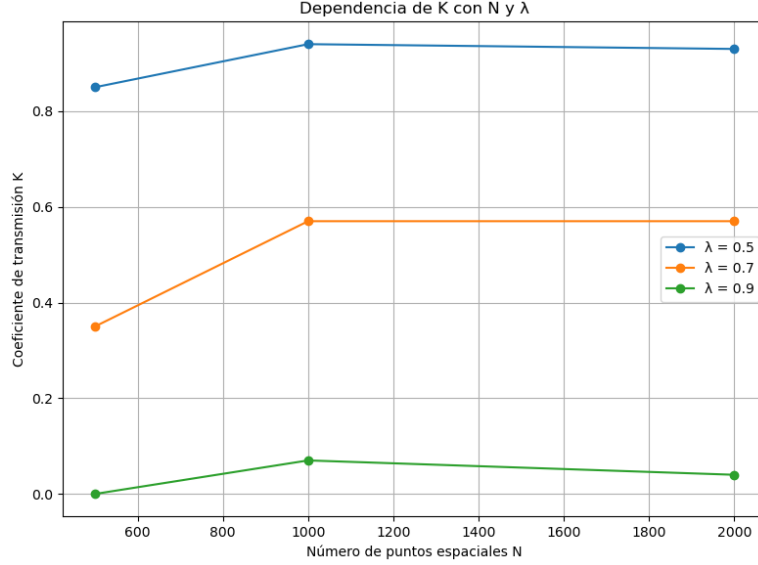
donde el símbolo  $\langle \cdot \rangle$  denota el promedio sobre realizaciones independientes. Las pequeñas diferencias entre ambos valores se deben exclusivamente a las fluctuaciones estadísticas.

Este procedimiento permite estimar el coeficiente de transmisión de forma robusta y físicamente justificada. Elegir el tiempo de medición como el primer máximo de  $P_D(t)$  garantiza que la probabilidad de detección refleje con fidelidad el comportamiento cuántico del sistema, incluyendo el efecto túnel a través de la barrera de potencial.

Además, la buena concordancia entre  $K$  y  $P_D(n_D)$  valida estadísticamente el método utilizado, ya que equivale a una estimación frecuentista de una variable de Bernoulli. En este contexto, el valor de  $P_D(n_D)$  actúa como una probabilidad de éxito, cuya estimación converge a  $K$  al aumentar el número de simulaciones, de acuerdo con la Ley de los Grandes Números. Esta consistencia estadística respalda la interpretación física de  $K$  como medida de la probabilidad de transmisión efectiva.

## 2.2. Variación de $K$ en función de $N$ .

En esta sección se mide el valor del coeficiente de transmisión  $K$  en función del número de puntos espaciales  $N$  para su posterior estudio. Cabe destacar que no se pedía realizar esta experiencia para varios valores de la altura de la barrera  $\lambda$  pero se ha realizado con la finalidad de ampliar conocimientos y obtener valores más precisos.



**Figura 2:**  $K$  en función de  $N$  para distintas alturas de barrera  $\lambda$ ,  $nciclos = 60$ ,  $m = 100$  y un tiempo de simulación empleado de 16 min y 19.4 s.

En resumen, los resultados obtenidos en el gráfico son consistentes con las predicciones teóricas de la mecánica cuántica y demuestran cómo el efecto túnel depende tanto de las características de la barrera de potencial como de la resolución espacial utilizada en la simulación.

En el gráfico superior se observa cómo varía el coeficiente de transmisión  $K$  en función del número de puntos espaciales  $N$  para distintos valores de la altura de la barrera  $\lambda$ . Para cada valor de  $\lambda$ , el comportamiento de  $K$  presenta una tendencia específica que refleja la interacción entre la resolución espacial y la forma del potencial.

A medida que  $N$  aumenta, la discretización espacial se vuelve más precisa, lo que permite una representación más fiel tanto de la barrera de potencial como de la evolución de la función de onda. Esta mejora en la resolución puede afectar significativamente el cálculo de  $K$ , especialmente en el caso de barreras altas, donde pequeños errores en la forma del potencial pueden influir notablemente en la probabilidad de transmisión.

Se observa además que, para valores más altos de  $\lambda$ , el coeficiente de transmisión  $K$  disminuye, lo cual concuerda con la teoría del efecto túnel cuántico.

La dependencia observada de  $K$  con el número de puntos  $N$  refleja también cómo la resolución numérica afecta a la simulación. Un mayor número de puntos espaciales permite una mejor aproximación al continuo, mejorando la precisión de los resultados y haciendo que el modelo discreto reproduzca con mayor fidelidad el comportamiento cuántico esperado.

También podemos observar como llegado a un determinado valor de puntos espaciales  $N$  el valor del coeficiente de transmisión se estabiliza, puesto que la resolución empleada ya es lo suficientemente precisa para determinar el correcto valor de  $K$ .

El hecho de que  $K$  se estabilice al aumentar  $N$  indica que el método numérico converge hacia una solución física bien definida. Esta estabilidad es una característica deseable en cualquier simulación basada en diferencias finitas, ya que confirma que los resultados no dependen arbitrariamente de la resolución. Para valores bajos de  $N$ , pueden observarse desviaciones asociadas a una pobre representación de la forma del potencial, que afecta directamente al acoplamiento con la función de onda.

### 2.3. Variación de K en función de la altura de la barrera $\lambda$ .

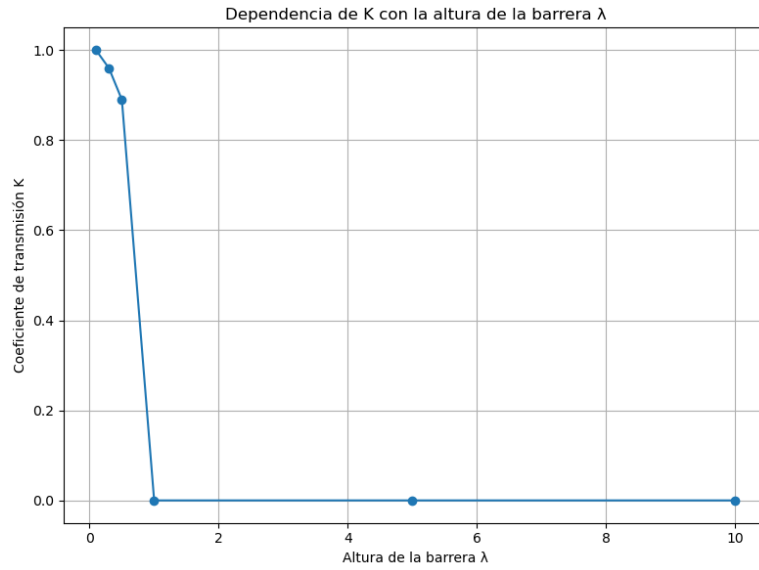
En esta sección se mide el valor del coeficiente de transmisión  $K$  en función de la altura de la barrera  $\lambda$  para su posterior estudio.

Se debe tener en cuenta los valores teóricos esperados para  $K$  para su posterior comparación con los valores obtenidos mediante la simulación.

La expresión utilizada para obtener dichos valores teóricos ha sido la siguiente

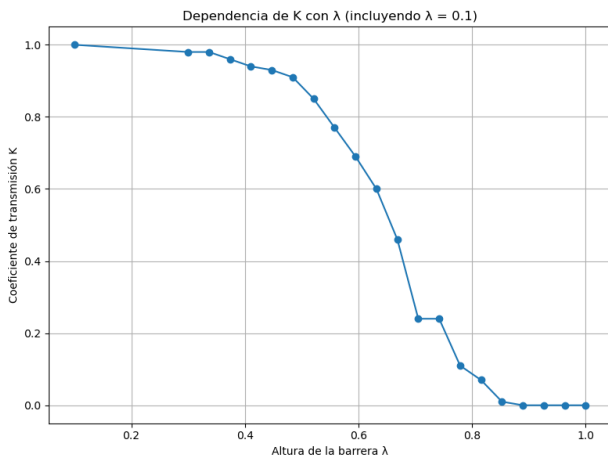
$$K(\lambda, n_{\text{ciclos}}) = \begin{cases} \frac{4(1-\lambda)}{4(1-\lambda) + \lambda^2 \sin^2\left(\frac{2\pi}{5} n_{\text{ciclos}} \sqrt{1-\lambda}\right)} & \text{si } \lambda < 1 \\ \frac{4(\lambda-1)}{4(\lambda-1) + \lambda^2 \sinh^2\left(\frac{2\pi}{5} n_{\text{ciclos}} \sqrt{\lambda-1}\right)} & \text{si } \lambda > 1 \end{cases} \quad (7)$$

Los resultados obtenidos fueron los siguientes

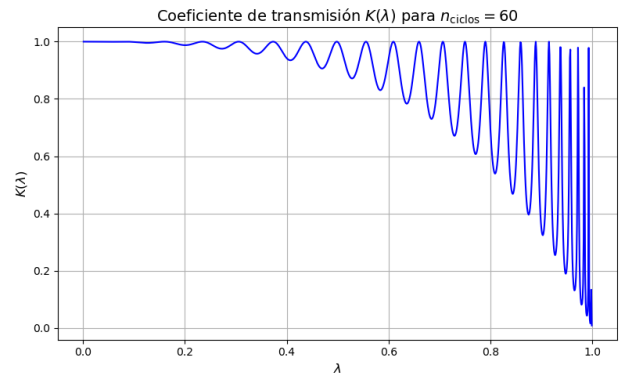


**Figura 3:** K en función de  $\lambda$  con  $N = 500$  *nciclos* = 60,  $m = 100$  y un tiempo de simulación empleado de 4 min y 38.6 s.

Como se puede observar a partir de  $\lambda = 1$  el valor de  $K$  es cero, por tanto haremos una nueva simulación centrándonos en el intervalo de 0 a 1 para la altura de la barrera, añadiendo mucho más puntos.



**(a)** K en función de  $\lambda$  con  $N = 500$  *nciclos* = 60,  $m = 100$  y un tiempo de simulación empleado de 16 min y 9.5 s.



**(b)** Valores teóricos de K en función de  $\lambda$ .

**Figura 4:** Título general del conjunto de imágenes

Como se puede observar los valores calculados mediante la simulación siguen una tendencia realmente similar a los valores teóricos por eso deducimos que el algoritmo y las hipótesis abordadas para su cálculo han sido más

que satisfactorias.

Es interesante analizar el comportamiento del coeficiente de transmisión  $K$  desde una perspectiva física. En la región donde  $K$  se mantiene cercano a 1, la energía del paquete de onda es superior a la altura de la barrera de potencial, lo que implica que, en todas las simulaciones, la partícula logra atravesarla sin dificultad y es detectada en la región derecha.

Sin embargo, a medida que el valor de  $\lambda$  se incrementa y se aproxima a  $\lambda = 0,5$ , la energía potencial de la barrera comienza a ser comparable con la energía media  $\langle E \rangle$  del paquete de onda. En este régimen intermedio, el proceso de transmisión deja de ser determinista: no todas las simulaciones terminan con detección a la derecha, y la probabilidad de transmisión disminuye gradualmente.

Cuando  $\lambda$  se aproxima a 1, la energía de la partícula resulta significativamente menor que la altura de la barrera, lo que reduce drásticamente la probabilidad de que ocurra el efecto túnel. En consecuencia,  $K$  desciende rápidamente hacia valores cercanos a cero, indicando que, en la mayoría de los casos, la partícula no logra superar el obstáculo.

En la Figura 4 se muestra una simulación centrada en valores de  $\lambda$  próximos a 1,0, lo que permite observar con mayor detalle el comportamiento asintótico de  $K$  en esa región. Comparando los resultados obtenidos con la expresión teórica dada en la Ecuación 7, se observa que, para  $\lambda < 1$ , el coeficiente de transmisión se comporta de forma inversamente proporcional a

$$\sin^2 \left( \sqrt{1 - \lambda} \right),$$

reflejando con precisión las oscilaciones características del régimen cuántico por debajo del umbral de energía.

Al modificar el número de puntos espaciales  $N$ , lo que estamos variando es el entorno espacial en el que se encuentra definida la función de onda. Sin embargo, estos cambios no alteran directamente las propiedades físicas del potencial con el que la partícula interactúa.

Cuando la onda se propaga hacia la derecha dentro del dominio, su evolución sólo se ve afectada por las paredes del potencial que encuentra en su camino. En particular, como las paredes exteriores del pozo son infinitamente altas, aumentar el valor de  $N$  simplemente hace que la onda tarde más en alcanzarlas, pero no modifica la forma en que rebota contra ellas.

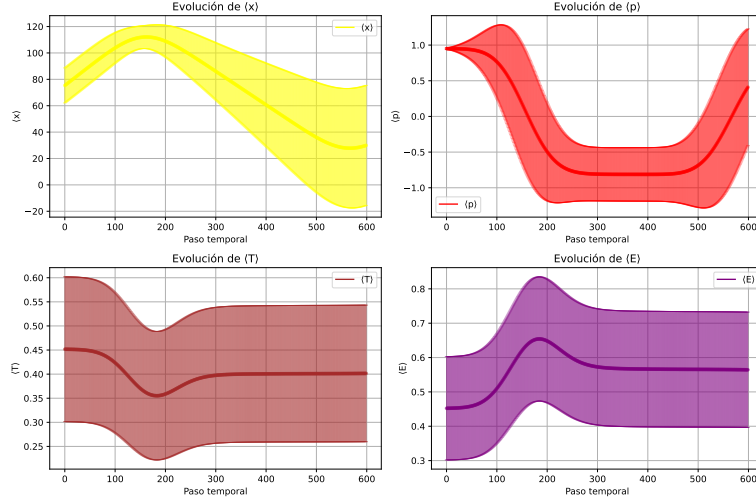
En cambio, un cambio en el parámetro  $\lambda$  sí modifica una característica esencial del potencial: la altura del escalón. Este cambio afecta directamente a la dinámica de la función de onda incidente. Para una energía fija del paquete de onda (que se conserva durante la evolución temporal), un aumento en el valor de  $\lambda$  implica una barrera más alta que la partícula debe intentar atravesar, alterando significativamente el resultado de la transmisión o reflexión.

Cabe destacar que el comportamiento de  $K$  presenta una transición clara entre dos regímenes: para  $\lambda < 1$ , se observa una transmisión parcial con oscilaciones cuánticas características, mientras que para  $\lambda > 1$ , la transmisión se reduce prácticamente a cero. Estas oscilaciones para  $\lambda < 1$  no son errores numéricos, sino manifestaciones físicas del fenómeno de interferencia dentro de la barrera, y están predichas por la dependencia inversa con  $\sin^2(\sqrt{1 - \lambda})$  en la expresión teórica.



### 3. Valores Esperados

En esta sección se calculan los valores esperados de varios observables con sus respectivos errores, cabe destacar que solo se pide el cálculo para la energía cinética y la posición, pero con el fin de ampliar conocimientos y profundizar en el tema a estudiar se han añadido los valores esperados para el momento y la energía total.



**Figura 5:** Valores esperados de la posición, momento, energía cinética y energía total en una simulación con  $N = 300$ ,  $\lambda = 0,9$  y  $nciclos = 60$ .

En la figura 5 se pueden observar los valores esperados para los observables previamente mencionados junto a sus errores (zona sombreada del mismo color).

- **Posición media  $\langle x \rangle$ :** La evolución temporal de la posición media muestra un desplazamiento neto hacia la derecha a medida que el paquete de onda se propaga. Este comportamiento es coherente con la naturaleza del paquete de onda incidente, que está centrado inicialmente a la izquierda de la barrera de potencial y tiene una componente de momento dirigida hacia la derecha. La trayectoria no es perfectamente lineal debido a las interacciones con el potencial, que causan una parcial reflexión y distorsión del paquete.
- **Momento medio  $\langle p \rangle$ :** El gráfico de  $\langle p \rangle$  oscila en torno a un valor positivo durante la evolución, indicando que la mayor parte del paquete de onda sigue moviéndose hacia la derecha. Las pequeñas fluctuaciones observadas reflejan la interferencia entre la parte reflejada y la parte transmitida de la onda, lo cual es característico en presencia de una barrera de potencial. La simetría inicial se rompe al interactuar con el potencial.
- **Energía cinética media  $\langle T \rangle$ :** El valor esperado de la energía cinética muestra una ligera disminución tras la interacción con la barrera. Esto se debe a que una fracción de la onda es reflejada, y parte de la componente transmitida sufre una dispersión. Esta pérdida aparente no contradice la conservación de la energía, ya que se debe a la redistribución de la función de onda entre regiones con distinta energía potencial.
- **Energía total media  $\langle E \rangle$ :** La energía total permanece prácticamente constante a lo largo de toda la simulación, lo cual confirma que el método numérico conserva la energía del sistema (dentro del error numérico). Esto es coherente con el hecho de que el hamiltoniano no depende del tiempo y que el algoritmo utilizado (Cayley o Crank-Nicolson) es unitario. Las pequeñas oscilaciones pueden atribuirse a discretización y errores acumulados en la interpolación de la función de onda.

La conservación de la energía total a lo largo del tiempo proporciona una verificación numérica sólida de que el algoritmo de Cayley es unitario y conserva la norma de la función de onda. Aunque se observan pequeñas fluctuaciones en la energía cinética y en el momento, éstas se mantienen dentro de márgenes aceptables y pueden atribuirse a errores de discretización y redondeo acumulados. Su presencia es esperada y no compromete la validez física de los resultados.

Los resultados obtenidos para los valores esperados de los distintos observables son, en conjunto, coherentes con lo que se espera desde el punto de vista de la mecánica cuántica. La posición y el momento medios reflejan correctamente el movimiento del paquete de onda hacia la derecha y su interacción con la barrera de potencial. La energía cinética sufre ligeras variaciones debido a la redistribución de la función de onda entre las regiones reflejada y transmitida, mientras que la energía total se mantiene prácticamente constante, lo cual confirma la

validez del esquema numérico empleado.

En particular, la conservación de la energía total es una evidencia clara de que el algoritmo preserva la unitariedad y respeta la estructura hermítica del hamiltoniano. Las pequeñas fluctuaciones observadas en algunos observables se explican por la interferencia cuántica y por los efectos numéricos asociados a la discretización espacial y temporal. En resumen, los resultados son los esperados y confirman tanto la correcta implementación del método como la validez del modelo físico utilizado.

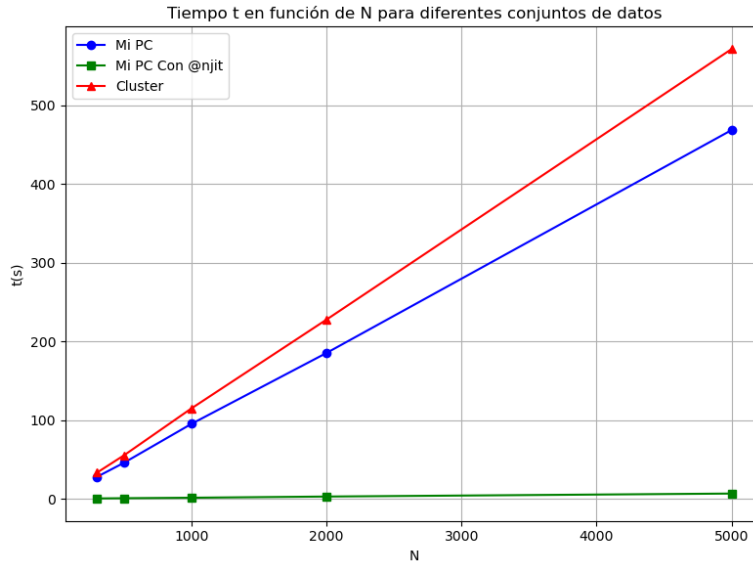
## 4. Coste Computacional

En esta sección compararemos el tiempo empleado para la simulación de ciertas pruebas utilizando mi propio ordenador sin optimizar con numba, mi propio ordenador optimizando con numba y el cluster.

Cabe destacar que todas las simulaciones mostradas en las gráficas hasta este punto en el informe fueron generadas compilando los programas con mi propio ordenador sin el previo uso de numba.

Las características del sistema son las siguientes:

- Procesador: AMD Ryzen 7 4800H with Radeon Graphics 2.90 GHz
- RAM: 16 Gb con velocidad 3200 MHz
- Tarjeta gráfica: NVIDIA GeForce GTX 1650 (4 Gb)
- Núcleos (Cores): 8
- Hilos (Threads): 16



**Figura 6:** Valores obtenidos para tiempo en función de N.

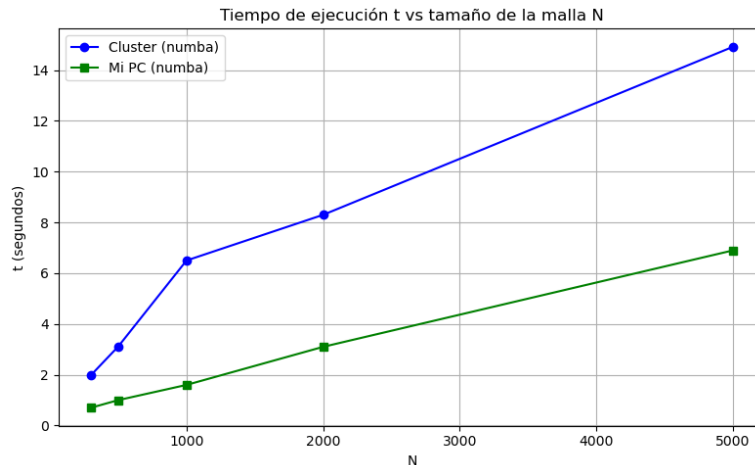
En la figura 6 se puede observar la comparación en el tiempo empleado para la simulación utilizando mi propio ordenador sin utilizar numba, mi propio ordenador utilizando numba y el cluster.

Para esta comparación se han realizado múltiples simulaciones del cálculo del coeficiente de transmisión  $K$  con  $nciclos = 60$  y  $m = 100$  con distintos valores para  $N$ .

Cabe destacar que se ha utilizado la herramienta "@njit" de numba para optimizar los bucles temporales en los cuales calculamos la evolución temporal.

Claramente podemos observar como los resultados más lentos han sido los obtenidos para la compilación utilizando el cluster; esto puede deberse a la buena potencia de mi sistema, proporcionada por las características mostradas anteriormente.

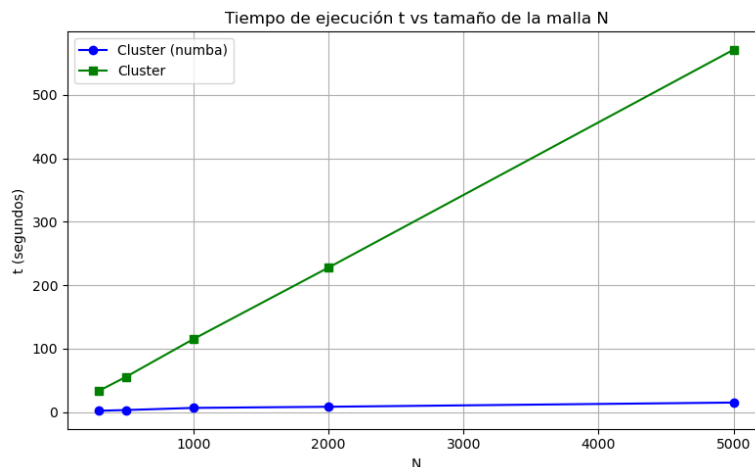
Una vez se optimizó el código con la ayuda de "@njit" la diferencia observada fue enorme, se pasó, en el caso más extremo para una simulación de  $N = 5000$ , de un tiempo de 468.5 s a un tiempo de 6.9 s, lo que demuestra una clarísima mejoría en el código utilizando numba.



**Figura 7:** Valores obtenidos para tiempo en función de N utilizando numba.

Dada la clara mejora utilizando numba para optimizar vista en la figura 6 se muestra ahora en la figura 7 la comparación de tiempos entre mi ordenador utilizando numba y el cluster utilizando numba.

El tiempo para el cluster sigue siendo más elevado, pero la diferencia con y sin utilizar "@njit" en el cluster también es enorme como se puedes observar en la figura 8.



**Figura 8:** Valores obtenidos para tiempo en función de N utilizando el cluster.

En conclusión, la utilización de numba es altamente recomendada para la optimización, pero en mi caso, el uso del cluster no supuso ninguna mejora en el coste computacional.

La implementación del algoritmo con @njit de Numba ha demostrado ser altamente eficaz, reduciendo los tiempos de simulación en más de un orden de magnitud sin comprometer la precisión de los resultados. Gracias a esta mejora, ha sido posible realizar estudios extensos variando parámetros como  $N$  y  $\lambda$  sin que el tiempo de ejecución se volviera prohibitivo.

En cuanto al uso del clúster, no se han observado mejoras sustanciales respecto al rendimiento del equipo local. Este resultado puede atribuirse a las características específicas del código (serie temporal secuencial) y a la buena capacidad del hardware personal utilizado. No obstante, para tareas altamente paralelizables —como simulaciones múltiples con diferentes condiciones iniciales o parámetros— el clúster podría ofrecer ventajas significativas en contextos más exigentes, como estudios en dos o más dimensiones.

En resumen, el análisis computacional confirma que una buena elección del algoritmo y su correcta optimización permiten realizar simulaciones cuánticas eficientes, incluso en entornos de escritorio.

## 5. Conclusiones

- **Simulación del efecto túnel:** Se ha logrado simular satisfactoriamente el efecto túnel cuántico en una dimensión mediante la resolución numérica de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo. El modelo reproduce con fidelidad la transmisión parcial de la onda a través de una barrera de potencial, incluso en casos donde la energía del paquete es menor que la altura de la barrera.
- **Comparación entre  $K$  y  $P_D(n_D)$ :** Se ha verificado que el coeficiente de transmisión  $K$  coincide, dentro del error estadístico, con la probabilidad  $P_D(n_D)$  medida en el instante del primer máximo local. Esto confirma que el procedimiento de detección propuesto es físicamente válido y coherente con una interpretación frecuentista de la probabilidad cuántica.
- **Dependencia de  $K$  con  $N$ :** Al aumentar el número de puntos espaciales  $N$ , la resolución mejora y el valor de  $K$  se estabiliza, reflejando una mejor aproximación al régimen continuo. Esto indica que, a partir de cierta resolución, la discretización no altera significativamente el resultado físico.
- **Dependencia de  $K$  con la altura de la barrera  $\lambda$ :** Los resultados muestran que  $K$  disminuye al aumentar  $\lambda$ , en línea con la predicción teórica. En particular, para  $\lambda > 1$ , la transmisión tiende a cero, y para  $\lambda < 1$ , se observan oscilaciones que siguen el patrón inverso a  $\sin^2(\sqrt{1-\lambda})$ , tal como predice la expresión analítica.
- **Valores esperados de observables:** Los valores esperados de la posición, momento, energía cinética y energía total han mostrado una evolución coherente con la física del sistema. En particular, la conservación de la energía total valida tanto el método numérico (Crank-Nicolson / Cayley) como la implementación.
- **Coste computacional y optimización:** La implementación con Numba ha reducido drásticamente los tiempos de simulación, mejorando la eficiencia sin alterar la precisión. Sin embargo, el uso del clúster no ha ofrecido mejoras adicionales en este caso particular, posiblemente debido al buen rendimiento del equipo local.
- **Conclusión general:** Los resultados obtenidos son consistentes con la teoría cuántica y las expectativas físicas del problema planteado. El modelo numérico, así como el procedimiento de medida y análisis, han demostrado ser robustos, precisos y físicamente interpretables.

## Referencias

- [1] J. Bardeen. Tunneling from a many-particle point of view. *Physical Review Letters*, 6(2):57–59, 1961.
- [2] Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu, and Franck Laloë. *Quantum Mechanics*. Wiley-VCH, 2006.
- [3] J. Crank and P. Nicolson. A practical method for numerical evaluation of solutions of partial differential equations of the heat-conduction type. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 43(1):50–67, 1947.
- [4] David J. Griffiths. *Introduction to Quantum Mechanics*. Pearson Prentice Hall, 3rd edition, 2018.
- [5] Enrico Merzbacher. Quantum tunneling: A brief review. *American Journal of Physics*, 30(4):237–244, 1962.
- [6] J. J. Sakurai and Jim Napolitano. *Modern Quantum Mechanics*. Cambridge University Press, 3rd edition, 2020.