

(TB070) Dispositivos Semiconductores

Trabajo Práctico N°1 Ecuación de Schrödinger

Grupo 6 : 106213 Sebastián Lazo (slazo@fi.uba.ar) | 108024 Jose Valls (jovalls@fi.uba.ar)

18 de Septiembre 2025

1 Resumen:

El informe aborda la implementación de un algoritmo computacional que permite resolver la ecuación de Schrödinger unidimensional para una partícula sometida a diferentes potenciales (escalón y barrera de potencial) que no tienen la capacidad de ligar a la partícula.

Utilizando el algoritmo se determinó la función de onda a distintos valores de tiempo para cada caso, luego se calculó la densidad de probabilidad y los valores medios de la coordenada espacial, la energía potencial, el momentum y la energía total de la partícula.

Se detallará el modelo utilizado, herramientas analíticas y justificaciones teóricas acerca de la resolución de cada resultado obtenido.

2 Introducción:

La ecuación de Schrödinger unidimensional es una ecuación diferencial parcial que describe la evolución temporal de la función de onda de una partícula cuántica en una dimensión. Resolverla de forma analítica solo es posible en casos muy simples (pozo cuadrado, oscilador armónico, átomo de hidrógeno, etc.).

$$j\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t) + V(x) \Psi(x, t) \quad (1)$$

Para aproximar y resolver la ecuación de Schrödinger mediante un algoritmo se utilizan técnicas de discretización del espacio tiempo, en lugar de un continuo, se usan una grilla de puntos x_n y pasos de tiempo t_m .

3 Origen de la ecuación de Schrödinger

En 1926, Schrödinger desarrolló un patrón unificado para la mecánica, basándose en las ideas físicas de la teoría cuántica de Planck, y utilizando los conceptos de De Broglie sobre la naturaleza ondulatoria de la materia. En este contexto, se denomina la cantidad compleja Ψ denominada función de onda, que se relaciona con el sistema dinámico que se modela para cada partícula del mismo.

Dado un sistema clásico se puede expresar la energía total de este con la suma de la energía cinética y potencial.

$$E_{Cinética} + E_{Potencial} = \frac{p^2}{2m} + V(x, y, z) = E_{Total} \quad (2)$$

Schrödinger propuso trasladar esa relación al dominio cuántico mediante operadores asociados (Tabla 1) a la función de onda, se puede expresar la suma de energías para el modelo cuántico 3.

Variable $[\alpha]$	Operador Asociado $[\alpha_{op}]$
x, y, z	x, y, z
$V(x, y, z)$	$V(x, y, z)$
p	$\frac{\hbar}{j} \nabla$
E_{Total}	$j \hbar \frac{\partial}{\partial t}$

Table 1: Operadores

Para hallar cada variable dinámica se multiplica la función de onda con su operador y se plantea la expresión 2 para hallar la ecuación de Schrödinger.

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 \Psi(x, y, z, t) + V(x) \Psi(x, y, z, t) = j \hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, y, z, t) \quad (3)$$

Siendo la expresión 1 la reducción unidimensional.

Las cantidades $\Psi(x, y, z, t)$ y $\nabla \Psi$ deben ser funciones finitas, continuas y monovaluadas.

La cantidad $\Psi^* \Psi$, donde Ψ^* es el conjugado de Ψ , es una cantidad real que se interpreta como la densidad de probabilidad de que la partícula asociada este dentro del elemento de volumen dv en el instante t . Para todo el espacio se define la probabilidad 1.

$$\int_v \Psi^* \Psi dv = 1 \quad (4)$$

El promedio o valor esperado ($\bar{\alpha}$) se obtiene por medio del operador asociado multiplicándose por la densidad de probabilidad integrando en todo el volumen.

$$\bar{\alpha} = \int_v \Psi^* (\alpha_{op}) \Psi dv \quad (5)$$

Para los casos donde el potencial es constante en el tiempo $V(x, y, z, t) = V(x, y, z)$, es posible efectuar la separación una separación de variables en dos funciones.

$$\Psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z) \cdot \phi(t) \quad (6)$$

Coefficientes de transmisión: Se trata de probabilidades relativas de reflejarse o transmitirse cuando una partícula se enfrenta a un cambio de potencial. El coeficiente de reflexión tiene la siguiente expresión:

$$R(x_i^-) = \frac{v_r I_r^* I_r}{v_i I_i^* I_i} \quad (43)$$

donde $v_{r,i}$ y $I_{r,i}$ son las velocidades e intensidades de las ondas reflejada e incidente en x_i^- , respectivamente.

De igual manera, el coeficiente de transmisión se define como:

$$T(x_i^+) = \frac{v_t I_t^* I_t}{v_i I_i^* I_i} \quad (44)$$

4 Resolución de ecuación de Schrödinger :

Se utilizará el método de las diferencias finitas en el dominio del tiempo (FDTD), es un método que permite observar la propagación de la partícula en el tiempo a medida que avanza en una zona específica.

Se trabaja utilizando las componentes reales e imaginarias evitando así el uso de números complejos de forma directa. La ecuación se reformula como la suma de su parte real con la parte imaginaria.

$$\Psi(x, t) = \Psi_{Real}(x, t) + j \cdot \Psi_{Imag}(x, t) \quad (7)$$

En lugar de los parámetros continuos se discretizaran:

$$x \longrightarrow x_n = n \cdot \Delta x \quad t \longrightarrow t_m = m \cdot \Delta t$$

Se aproximan las derivadas con estos parámetros discretos para lograr resolverla de forma computacional.

Aproximación de la derivada temporal primera:

$$\frac{\partial \Psi_{real}(x, t)}{\partial t} \approx \frac{\Psi_{real}(x, (m+1) \Delta t) - \Psi_{real}(x, m \Delta t)}{\Delta t} \quad (8)$$

Aproximación de la derivada temporal segunda o Laplaciano:

$$\frac{\partial^2 \Psi_{imag}(x, t)}{\partial x^2} \approx \frac{\Psi_{imag}((n+1)\Delta x, m\Delta t)}{(\Delta x)^2} - \frac{2\Psi_{imag}(n\Delta x, m\Delta t)}{(\Delta x)^2} + \frac{\Psi_{imag}((n-1)\Delta x, m\Delta t)}{(\Delta x)^2} \quad (9)$$

4.1 Descomposición de la Función de Onda en Partes Real e Imaginaria

Reemplazando en la ecuación de Schrödinger (1) por sus componentes reales e imaginarios (7) .

$$j\hbar \frac{\partial}{\partial t} [\Psi_{Real} + j\Psi_{Imag}] = \frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2}{\partial x^2} [\Psi_{Real} + j\Psi_{Imag}] + V(x) [\Psi_{Real} + j\Psi_{Imag}] \quad (10)$$

Desarrollando:

$$j\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_{Real} - \hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_{Imag} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2 \Psi_{Real}}{\partial x^2} - j \frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2 \Psi_{Imag}}{\partial x^2} + V(x) \Psi_{Real} + jV(x) \Psi_{Imag} \quad (11)$$

Despejando derivadas:

Parte Imaginaria:

$$j\hbar \frac{\partial \Psi_{Real}}{\partial t} = -j \frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2 \Psi_{Imag}}{\partial x^2} - jV(x) \Psi_{Imag} \quad (12)$$

$$\boxed{\frac{\partial \Psi_{Real}}{\partial t} = -\frac{\hbar}{2m_0} \frac{\partial^2 \Psi_{Imag}}{\partial x^2} + \frac{1}{\hbar} V(x) \Psi_{Imag}} \quad (13)$$

Parte Real:

$$-\hbar \frac{\partial \Psi_{Imag}}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2 \Psi_{Real}}{\partial x^2} + V(x) \Psi_{Real} \quad (14)$$

$$\boxed{\frac{\partial \Psi_{Imag}}{\partial t} = \frac{\hbar}{2m_0} \frac{\partial^2 \Psi_{Real}}{\partial x^2} - \frac{1}{\hbar} V(x) \Psi_{Real}} \quad (15)$$

4.2 Diferencias Finitas

Para resolver mediante un algoritmo computacional se utiliza la aproximación por diferencias finitas. La derivada temporal es aproximada por la ecuación 8 en cuanto que la aproximación del laplaciano se demuestra a continuación concluyendo en la expresión 17. El algoritmo comienza conociendo el valor de $\Psi(x, t)$ en el punto $(x_0, t = 0)$ y calculara el resto de los valores usando diferencias finitas.

Para demostrar la aproximación 9 , partimos de las expansiones de Taylor de $\Psi(x, t)$ alrededor de x_0 :

$$\begin{aligned}\Psi(x_0 + \Delta x, t) &= \Psi(x_0, t) + \Delta x \frac{\partial \Psi}{\partial x}(x_0, t) + \frac{(\Delta x)^2}{2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}(x_0, t) + \frac{(\Delta x)^3}{6} \frac{\partial^3 \Psi}{\partial x^3}(x_0, t) + \frac{(\Delta x)^4}{24} \frac{\partial^4 \Psi}{\partial x^4}(\xi_+, t), \\ \Psi(x_0 - \Delta x, t) &= \Psi(x_0, t) - \Delta x \frac{\partial \Psi}{\partial x}(x_0, t) + \frac{(\Delta x)^2}{2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}(x_0, t) - \frac{(\Delta x)^3}{6} \frac{\partial^3 \Psi}{\partial x^3}(x_0, t) + \frac{(\Delta x)^4}{24} \frac{\partial^4 \Psi}{\partial x^4}(\xi_-, t),\end{aligned}$$

donde ξ_+ y ξ_- son puntos intermedios entre x_0 y $x_0 \pm \Delta x$.

Sumando ambas expresiones se obtiene:

$$\Psi(x_0 + \Delta x, t) + \Psi(x_0 - \Delta x, t) = 2\Psi(x_0, t) + h^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}(x_0, t) + \frac{(\Delta x)^4}{12} \frac{\partial^4 \Psi}{\partial x^4}(\xi, t),$$

donde $\xi \in (x_0 - \Delta x, x_0 + \Delta x)$.

Finalmente, despejamos la segunda derivada:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}(x_0, t) = \frac{\Psi(x_0 + \Delta x, t) - 2\Psi(x_0, t) + \Psi(x_0 - \Delta x, t)}{\Delta x^2} + \mathcal{O}((\Delta x)^2). \quad (16)$$

Por lo tanto, la aproximación en diferencias finitas para la segunda derivada es:

$$\boxed{\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}(x_i, t) \approx \frac{\Psi(x_{i+1}, t) - 2\Psi(x_i, t) + \Psi(x_{i-1}, t)}{(\Delta x)^2}} \quad (17)$$

con un error de truncamiento de orden $\mathcal{O}(\Delta x)^2$.

Reemplazando las aproximaciones obtenidas en las expresiones 13 y 15, la ecuación discreta para la parte real se puede describir de forma discreta de la siguiente forma:

$$\frac{\Psi_{\text{Real}}(x_i, t_{n+1}) - \Psi_{\text{Real}}(x_i, t_n)}{\Delta t} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\Psi_{\text{Imag}}(x_{i+1}, t_n) - 2\Psi_{\text{Imag}}(x_i, t_n) + \Psi_{\text{Imag}}(x_{i-1}, t_n)}{(\Delta x)^2} + \frac{1}{\hbar} V(x_i) \Psi_{\text{Imag}}(x_i, t_n). \quad (18)$$

y de manera análoga para la parte imaginaria:

$$\frac{\Psi_{\text{Imag}}(x_i, t_{n+1}) - \Psi_{\text{Imag}}(x_i, t_n)}{\Delta t} = \frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\Psi_{\text{Real}}(x_{i+1}, t_n) - 2\Psi_{\text{Real}}(x_i, t_n) + \Psi_{\text{Real}}(x_{i-1}, t_n)}{(\Delta x)^2} - \frac{1}{\hbar} V(x_i) \Psi_{\text{Real}}(x_i, t_n). \quad (19)$$

El método no calcula el valor de la solución en el punto siguiente basándose directamente en el punto anterior, sino que calcula los puntos impares y pares de la malla de forma separada y alternada.

Es por esta razón que las ecuaciones 18 y 19 pueden reordenarse con ayuda de la siguiente notación:

$$\Psi(n \cdot \Delta x, m \cdot \Delta t) = \Psi^m(n)$$

$$\Psi_{\text{real}}^{m+1}(n) = \Psi_{\text{real}}^m(n) - \frac{\hbar \Delta t}{2m_0 \Delta x^2} \Psi_{\text{imag}}^{m+1/2}(n+1) - 2\Psi_{\text{imag}}^{m+1/2}(n) + \Psi_{\text{imag}}^{m+1/2}(n-1) + \frac{\Delta t}{\hbar} V(n) \Psi_{\text{imag}}^{m+1/2}(n) \quad (20)$$

$$\Psi_{\text{imag}}^{m+3/2}(n) = \Psi_{\text{imag}}^{m+1/2}(n) + \frac{\hbar \Delta t}{2m_0 \Delta x^2} \Psi_{\text{real}}^{m+1}(n+1) - 2\Psi_{\text{real}}^{m+1}(n) + \Psi_{\text{real}}^{m+1}(n-1) - \frac{\Delta t}{\hbar} V(n) \Psi_{\text{real}}^{m+1}(n) \quad (21)$$

El algoritmo usa un esquema escalonado en el tiempo: la parte real y la parte imaginaria no se calculan en los mismos instantes, sino en pasos alternados con un leve desfase, lo que permite estabilidad y conservación de la norma en la evolución de la ecuación de Schrödinger.

Conociendo el estado inicial $\Psi(x, t_o = 0)$ se podrá iterar utilizando Δt y Δx adecuados para calcular en todo el recinto y tiempo.

4.3 Condiciones Iniciales

Se establecieron distintos valores iniciales propuestos mientras que otros, detallados a continuación, se establecieron en base a las condiciones del postulado de de Broglie, criterios de estabilidad del método, relaciones de Planck y Schrodinger respectivamente. En la lista 4.3.4 se encuentran todos los valores utilizados.

4.3.1 Longitud de onda asociado

Se obtuvo la longitud de onda asociada λ mediante el postulado de Broglie.

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{m \cdot v} \quad (22)$$

Teniendo en cuenta la relación:

$$E_{\text{cinetica}} = \frac{1}{2 \cdot m} v^2 \quad , \quad v = \sqrt{2 \cdot E_{\text{cinetica}} \cdot m} \quad (23)$$

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{m \cdot \sqrt{2 \cdot E_{\text{cinetica}} \cdot m}} \quad (24)$$

4.3.2 Criterio de Estabilidad del Método

Se define un parámetro adimensional ra (25) que establece un criterio para que el método sea estable, se requiere para partícula libre sea menor a un valor de 0.15.

$$ra = \frac{\hbar \cdot \Delta t}{2 \cdot m \cdot \Delta x^2} \quad (25)$$

De aquí se establece un diferencial de tiempo máximo.

$$\Delta t_{\text{max}} = \frac{0.15 \cdot 2 \cdot m \cdot \Delta x^2}{\hbar} \quad (26)$$

4.3.3 Función de Onda Inicial

Las siguientes expresiones caracterizan la función de onda inicial para la simulación.

$$\Psi_{\text{real}}(x, 0) = \exp \left[- \left(\frac{x - x_0}{\sigma} \right)^2 \right] \cdot \cos \left(2\pi \frac{x - x_0}{\lambda} \right) \quad (27)$$

$$\Psi_{\text{imag}}(x, 0) = \exp \left[- \left(\frac{x - x_0}{\sigma} \right)^2 \right] \cdot \sin \left(2\pi \frac{x - x_0}{\lambda} \right) \quad (28)$$

A continuación se detallan las condiciones iniciales :

4.3.4 Lista de Valores iniciales

- Masa m_o : $9,11 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$
- Carga q : $1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$
- Energía cinética media inicial $\langle Ek_0 \rangle = 0,05 \text{ eV}$
- largo región del espacio $L_x = 240 \text{ nm}$.
- Posición más probable inicial de la partícula $x_o = 110 \text{ nm}$
- Desvío estándar $\sigma = 4 \text{ nm}$.
- Longitud de diferencias $\Delta x = 0,05 \text{ nm}$
- Longitud de onda : $\lambda = 5,48 \cdot 10^{-9} \text{ m} = 5,48 \text{ nm}$

5 Representación de Función de onda inicial

A continuación en la figura 1 se observa un gráfico representativo de las condiciones iniciales, se gráfica en el eje vertical los valores de densidad de probabilidad y las componentes real e imaginaria de la función de onda en función de la distancia en el recinto (eje horizontal). Se detalla en el gráfico información de interés como el calculo de la probabilidad total cercano a la unidad para todo el recinto, los valores del parametro ra , Δx y Δt hallados para la aproximación.

Para llegar a la función de probabilidad (ecuación 4) se aproxima de forma discreta mediante la sumatoria y una vez que se obtiene la función de onda, se debe modificar de forma tal que dicha probabilidad de uno para todo el espacio, por lo que se debe dividir por la constante de normalización A dada por:

$$A = \sum_{n=1}^{N_x} [\psi_{Real} + \psi_{imag}]^{1/2}, \quad N_x : \text{Cantidad de puntos usados para definir el eje } x. \quad (29)$$

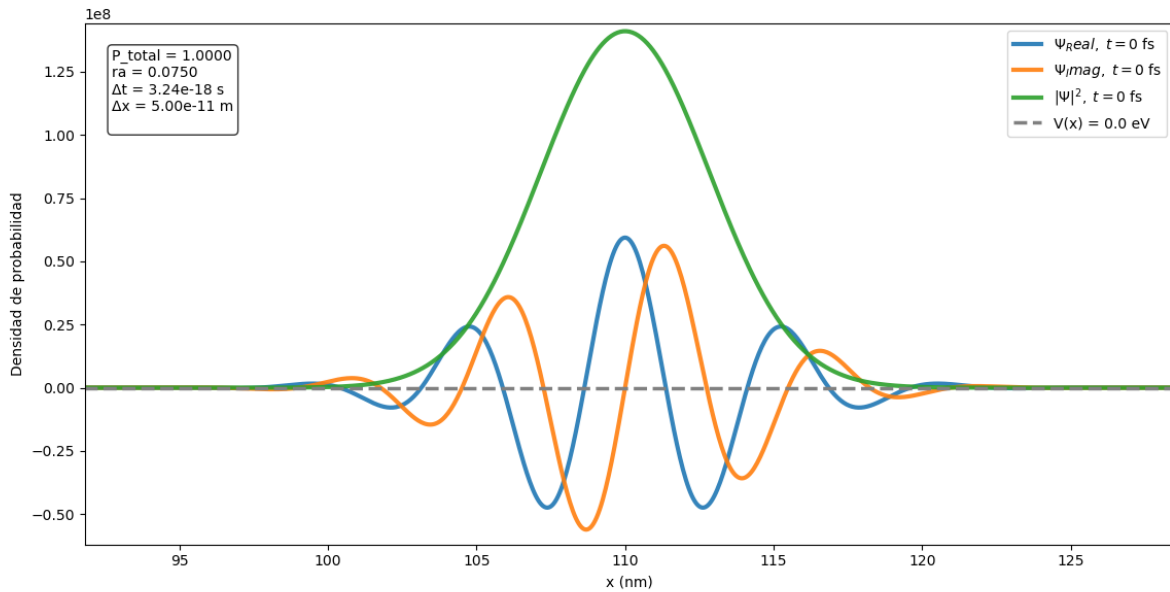


Figure 1: Condición inicial de la función de onda, densidad de probabilidad y componentes real e imaginaria en función de la distancia x .

6 Valores Esperados

Utilizando la definición de la ecuación 5 y los operadores detallados en la tabla 1 se encuentran los valores esperados de los siguientes parámetros de interés.

6.1 Valor Esperado de la Posición

$$\bar{x} = \int_{L_x} \Psi^*(x) \Psi \, dx \quad (30)$$

En forma discreta:

$$\bar{x} = \sum_{L_x} (\Psi_{real}^2[n] + \Psi_{imag}^2[n]) n \cdot \Delta x \quad (31)$$

6.2 Valor Esperado del Momento

$$\bar{p} = \int_{L_x} \Psi^* \left(\frac{\hbar}{j} \nabla \right) \Psi \, dx = -j\hbar \int_{L_x} \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \, dx \quad (32)$$

En forma discreta:

$$\bar{p} = \frac{-j\hbar}{\Delta t} \sum_{n=0}^{L_x} \Psi^*(n) [\Psi(n+1) - \Psi(n-1)] \quad (33)$$

6.3 Valor Esperado de la Energía Cinética

El valor esperado de la energía cinética se demuestra partiendo de la ecuación de Schrödinger 1 para el caso unidimensional y la relación con la expresión de energía total clásica referida en la ecuación 2, la energía cinética esta compuesta por el operador $E_{k_{Operador}}$ detallado a continuación:

$$E_k = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t) \quad , E_{k_{Operador}} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 \quad (34)$$

$$\bar{E}_k = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{L_x} \Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \, dx \quad (35)$$

En forma discreta:

$$\bar{E}_k = -\frac{\hbar^2}{2m\Delta x^2} \sum_{n=2}^{N_x-1} \Psi^*(n) [\Psi(n+1) - 2\Psi(n) + \Psi(n-1)] \quad (36)$$

6.4 Valor Esperado de la Energía Potencial

$$\bar{E}_p = \int_{L_x} \Psi^* \cdot V(x) \cdot \Psi \, dx \quad (37)$$

En forma discreta:

$$\bar{E}_p = \sum_{n=1}^{N_x} \Psi^*(n) V(n) \Psi(n) \quad (38)$$

7 Incertidumbres

De la teoría de probabilidad se desprende el termino varianza para una distribución de probabilidades, es una medida de dispersión definida como la esperanza del cuadrado de la desviación de dicha variable respecto a su media. De este parámetro se desprende el rango de incertidumbre en los valores posibles para cada parámetro.

$$Var(X) = E[X^2] - E[X]^2 \quad , \quad X : \text{Variable aleatoria} \quad , E[X] : \text{Valor esperado de } X \quad (39)$$

7.1 Posición

Describe la región $[x_o - \sigma, \quad x_o + \sigma]$, donde se espera con mayor probabilidad encontrar a la partícula.

$$\delta x = 2\sigma_x = 2\sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} \quad (40)$$

7.2 Momento

El momentum de la partícula puede tener una incertidumbre de acuerdo a su valor real de acuerdo a la siguiente expresión.

$$\delta p = 2\sigma_p = 2\sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2} = 2\sqrt{2m_0 \langle E_k \rangle - \langle p \rangle^2} \quad (41)$$

8 Simulaciones

Utilizando el algoritmo se realizaron las simulaciones para los tiempos propuestos (0 fs, 30 fs, 80 fs y 450 fs) para diferentes escenarios afectando al paquete de ondas.

8.1 Partícula Libre

En el siguiente gráfico se observa como evoluciona el paquete de ondas a través del tiempo cuando se la aplica un potencial nulo, es decir no hay fuerzas afectándolo, se observa como inicia en la posición propuesta y se propaga en la dirección positiva siendo consistente con la velocidad de propagación, también se observa que a medida que crece la longitud de probabilidad no nula, disminuye la amplitud de la densidad de probabilidad siendo consistente con el hecho de que la integral del espacio se debe conservar con valor unitario.

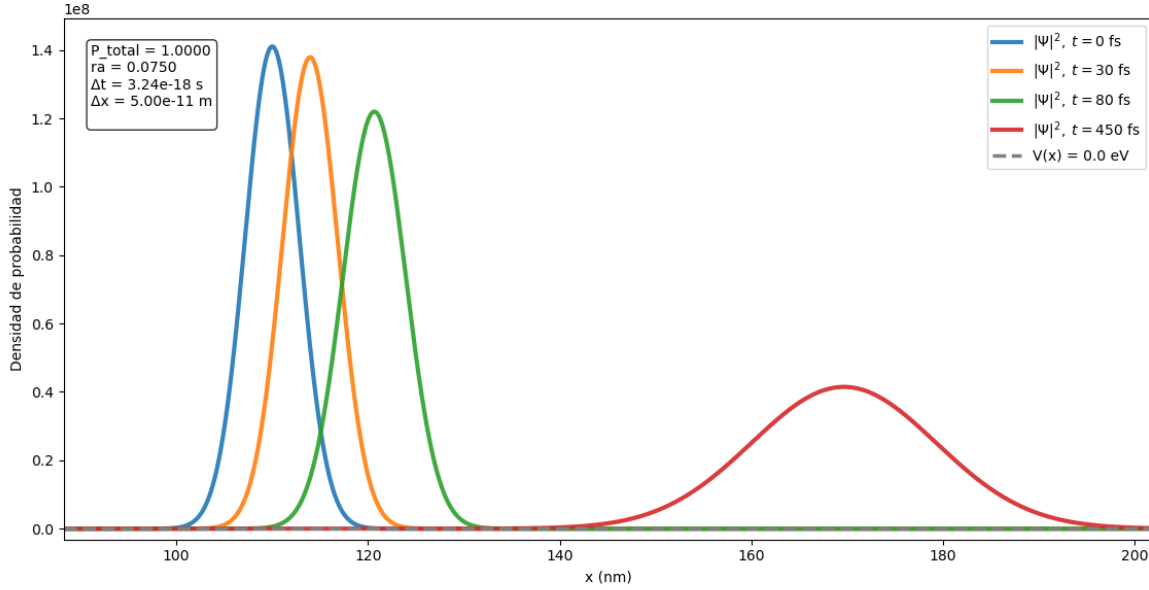


Figure 2: Evolución en el tiempo, caso $V(x) = 0$ eV

t	$\langle x \rangle$	$\langle E_k \rangle$	$\langle E_p \rangle$	$\langle p \rangle$	E_T	δx	δp	$\frac{\delta x \cdot \delta p}{\hbar/2}$
0 fs	$1.100 \cdot 10^{-7}$ m	0.05 eV	0.000 eV	$1.207 \cdot 10^{-25}$ kg · m/s	0.05	$7.22 \cdot 10^{-9}$ m	$3.83 \cdot 10^{-26}$ kg · m/s	5.24
30 fs	$1.139 \cdot 10^{-7}$ m	0.05 eV	0.000 eV	$1.207 \cdot 10^{-25}$ kg · m/s	0.05	$7.43 \cdot 10^{-9}$ m	$3.83 \cdot 10^{-26}$ kg · m/s	5.39
80 fs	$1.206 \cdot 10^{-7}$ m	0.05 eV	0.000 eV	$1.207 \cdot 10^{-25}$ kg · m/s	0.05	$8.18 \cdot 10^{-9}$ m	$3.83 \cdot 10^{-26}$ kg · m/s	5.94
450 fs	$1.696 \cdot 10^{-7}$ m	0.05 eV	0.000 eV	$1.207 \cdot 10^{-25}$ kg · m/s	0.05	$2.05 \cdot 10^{-8}$ m	$3.83 \cdot 10^{-26}$ kg · m/s	14.85

Table 2: Valores esperados y dispersión de magnitudes dinámicas para distintos tiempos de simulación (partícula libre).

8.2 Escalón Potencial

En el siguiente escenario se el paquete de ondas se encuentra con una diferencia de potencial a cierta distancia.

8.2.1 Escalón $E_{esc} = 0,025$ eV

$$V(x) = \begin{cases} 0 \text{ eV}, & x < \frac{L_x}{2} \\ 0,025 \text{ eV}, & x > \frac{L_x}{2} \end{cases}$$

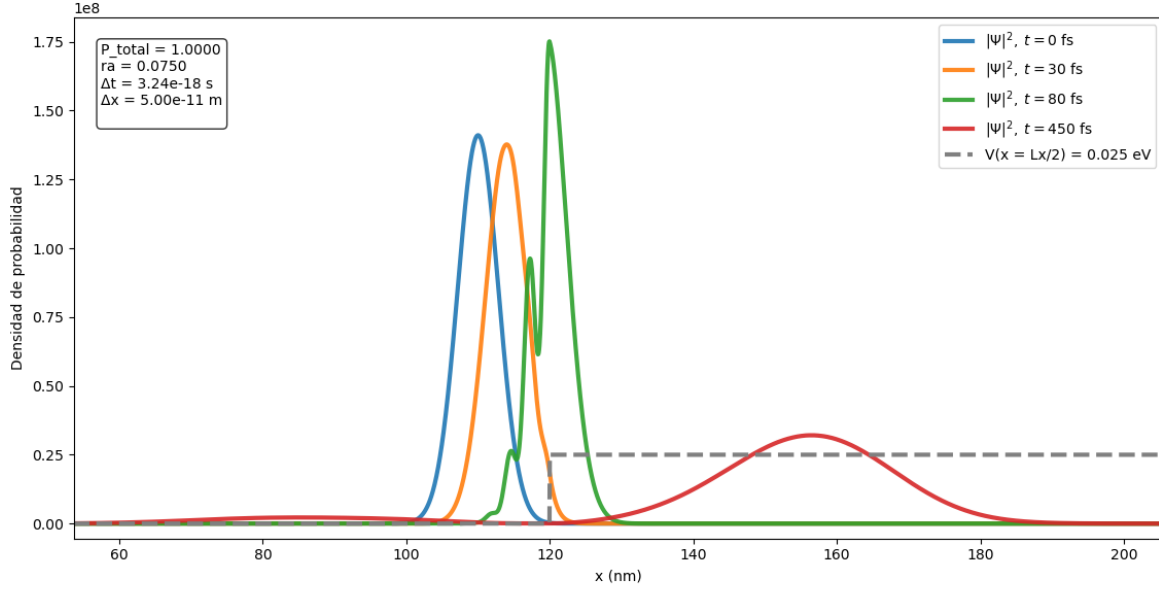


Figure 3: Evolución temporal del paquete frente a escalon de potencial 0.025 eV.

t	$\langle x \rangle$	$\langle E_k \rangle$	$\langle E_p \rangle$	$\langle p \rangle$	E_T	δx	δp	$\frac{\delta x \cdot \delta p}{\hbar/2}$
0 fs	$1.10 \cdot 10^{-7} \text{ m}$	0.05 eV	0 eV	$1.21 \cdot 10^{-25} \text{ kg} \cdot \text{m/s}$	0.05	$7.22 \cdot 10^{-9} \text{ m}$	$3.82 \cdot 10^{-26} \text{ kg} \frac{\text{m}}{\text{s}}$	5.24
30 fs	$1.139 \cdot 10^{-7} \text{ m}$	0.05 eV	0 eV	$1.20 \cdot 10^{-25} \text{ kg} \cdot \text{m/s}$	0.05	$7.40 \cdot 10^{-9} \text{ m}$	$3.93 \cdot 10^{-26} \text{ kg} \frac{\text{m}}{\text{s}}$	5.51
80 fs	$1.201 \cdot 10^{-7} \text{ m}$	0.037 eV	0.014 eV	$9.83 \cdot 10^{-26} \text{ kg} \cdot \text{m/s}$	0.05	$7.46 \cdot 10^{-9} \text{ m}$	$7.03 \cdot 10^{-26} \text{ kg} \frac{\text{m}}{\text{s}}$	9.957
450 fs	$1.504 \cdot 10^{-7} \text{ m}$	0.028 eV	0.023 eV	$7.24 \cdot 10^{-26} \text{ kg} \cdot \text{m/s}$	0.05	$4.425 \cdot 10^{-8} \text{ m}$	$1.09 \cdot 10^{-25} \text{ kg} \frac{\text{m}}{\text{s}}$	91.5

Table 3: Valores esperados y dispersión de magnitudes dinámicas para distintos tiempos de simulación.

Analizando la tabla 3 se observa como al inicio ($t = 0$ fs) toda la energía del sistema corresponde con la energía cinética, a medida que se enfrenta al escalón potencial, empieza a crecer la parte de energía potencial y decrecer la energía cinética, pero conservándose la energía total del sistema. El paquete se ensancha en el espacio a medida que el tiempo transcurre, esto se refleja en el aumento de incertidumbre en la posición (δx).

Caso	Coeficiente de Reflexión R	Coeficiente de Transmisión T	Distancia de Penetración λ
Paquete de ondas
Onda monocromática

Table 4: Coeficientes de transmisión y reflexión, y distancia de penetración en un escalón de potencial alto para los casos de paquete de ondas y onda monocromática.

8.2.2 Escalón $E_{esc} = 0,25$ eV

$$V(x) = \begin{cases} 0 \text{ eV}, & x < \frac{L_x}{2} \\ 0,25 \text{ eV}, & x > \frac{L_x}{2} \end{cases}$$

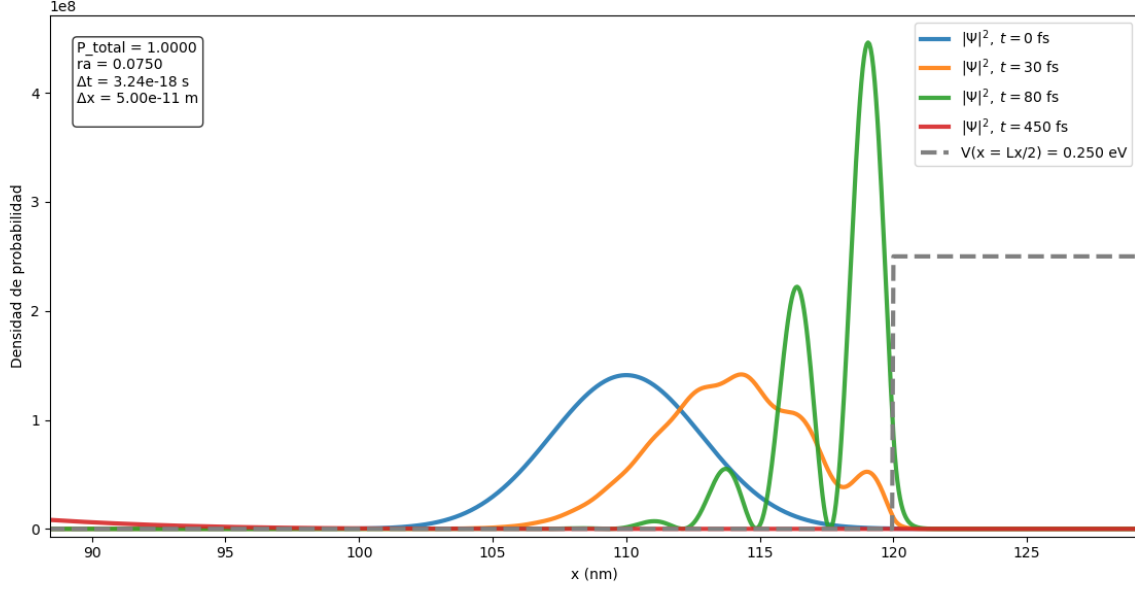


Figure 4: Evolución temporal del paquete frente a escalon de potencial 0.25 eV.

t	$\langle x \rangle$	$\langle E_k \rangle$	$\langle E_p \rangle$	$\langle p \rangle$	E_T	δx	δp	$\frac{\delta x \cdot \delta p}{\hbar/2}$
0 fs	$1.100 \cdot 10^{-7}$ m	0.051 eV	0.000 eV	$1.207 \cdot 10^{-25}$ kg · m/s	0.05	$7.22 \cdot 10^{-9}$ m	$3.83 \cdot 10^{-26}$ kg · m/s	5.24
30 fs	$1.139 \cdot 10^{-7}$ m	0.051 eV	0.001 eV	$1.169 \cdot 10^{-25}$ kg · m/s	0.05	$7.27 \cdot 10^{-9}$ m	$6.61 \cdot 10^{-26}$ kg · m/s	9.12
80 fs	$1.177 \cdot 10^{-7}$ m	0.046 eV	0.005 eV	$-1.328 \cdot 10^{-26}$ kg · m/s	0.05	$6.62 \cdot 10^{-9}$ m	$2.30 \cdot 10^{-25}$ kg · m/s	28.9
450 fs	$7.111 \cdot 10^{-8}$ m	0.051 eV	0.000 eV	$-1.207 \cdot 10^{-25}$ kg · m/s	0.05	$1.96 \cdot 10^{-8}$ m	$3.88 \cdot 10^{-26}$ kg · m/s	14.5

Table 5: Valores esperados y dispersión de magnitudes dinámicas para distintos tiempos de simulación.

Caso	Coefficiente de Reflexión R	Coefficiente de Transmisión T	Distancia de Penetración λ
Paquete de ondas
Onda monocromática

Table 6: Coeficientes de transmisión y reflexión, y distancia de penetración en un escalón de potencial alto para los casos de paquete de ondas y onda monocromática.

8.3 Barrera Rectangular de Potencial

En el siguiente escenario se el paquete de ondas se encuentra con una diferencia de potencial finita de dimensión d a cierta distancia de la posición inicial.

$$V(x) = \begin{cases} 0 \text{ eV}, & 0 < x < \frac{L_x}{2} \\ 0, 150 \text{ eV}, & \frac{L_x}{2} < x < \frac{L_x}{2} + d \\ 0 \text{ eV}, & \frac{L_x}{2} + d < x < \frac{L_x}{2} \end{cases}$$

8.3.1 Barrera de Ancho $d = 1$ nm

Para la barrera de ancho 1nm

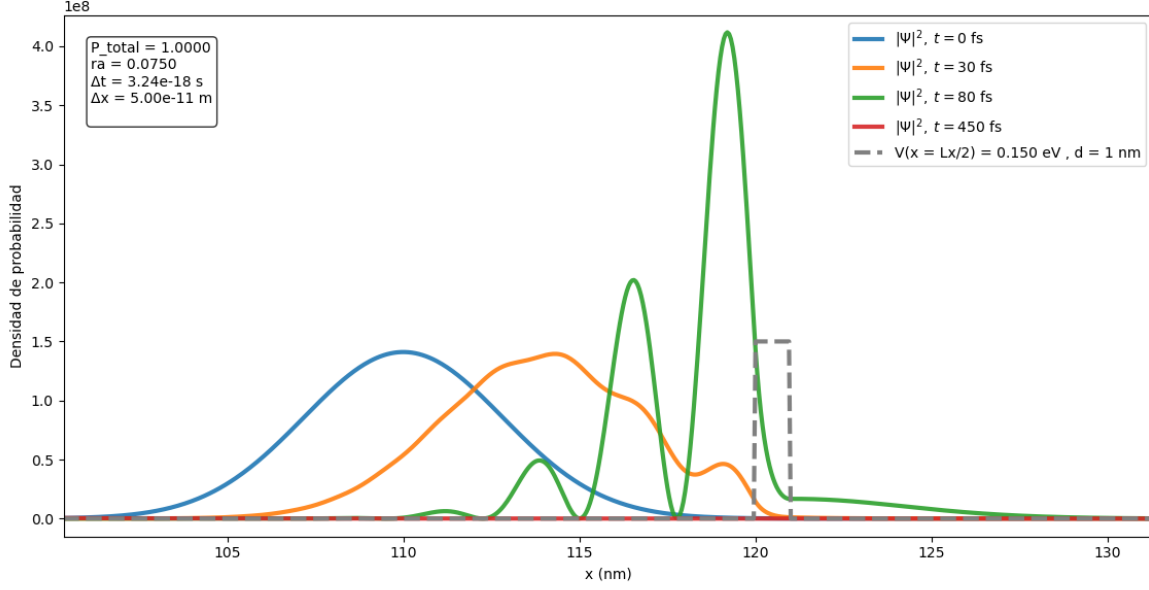


Figure 5: Evolución frente a barrera potencial ($d = 1$ nm).

t	$\langle x \rangle$	$\langle E_k \rangle$	$\langle E_p \rangle$	$\langle p \rangle$	E_T	δx	δp	$\frac{\delta x \cdot \delta p}{\hbar/2}$
0 fs	$1.100 \cdot 10^{-7}$ m	0.05 eV	0.000 eV	$1.207 \cdot 10^{-25}$ kg · m/s	0.05	$7.22 \cdot 10^{-9}$ m	$3.83 \cdot 10^{-26}$ kg · m/s	5.24
30 fs	$1.139 \cdot 10^{-7}$ m	0.05 eV	0.001 eV	$1.179 \cdot 10^{-25}$ kg · m/s	0.05	$7.31 \cdot 10^{-9}$ m	$5.80 \cdot 10^{-26}$ kg · m/s	8.04
80 fs	$1.183 \cdot 10^{-7}$ m	0.043 eV	0.008 eV	$1.204 \cdot 10^{-26}$ kg · m/s	0.05	$7.14 \cdot 10^{-9}$ m	$2.24 \cdot 10^{-25}$ kg · m/s	30.3
450 fs	$8.579 \cdot 10^{-8}$ m	0.05 eV	0.000 eV	$-8.572 \cdot 10^{-26}$ kg · m/s	0.05	$7.21 \cdot 10^{-8}$ m	$1.74 \cdot 10^{-25}$ kg · m/s	238.4

Table 7: Valores esperados y dispersión de magnitudes dinámicas para distintos tiempos de simulación.

Caso	Coeficiente de Reflexión R	Coeficiente de Transmisión T
Paquete de ondas
Onda monocromática

Table 8: Coeficientes de transmisión y reflexión en un escalón de potencial alto para los casos de paquete de ondas y onda monocromática.

8.3.2 Barrera de Ancho $d = 2$ nm

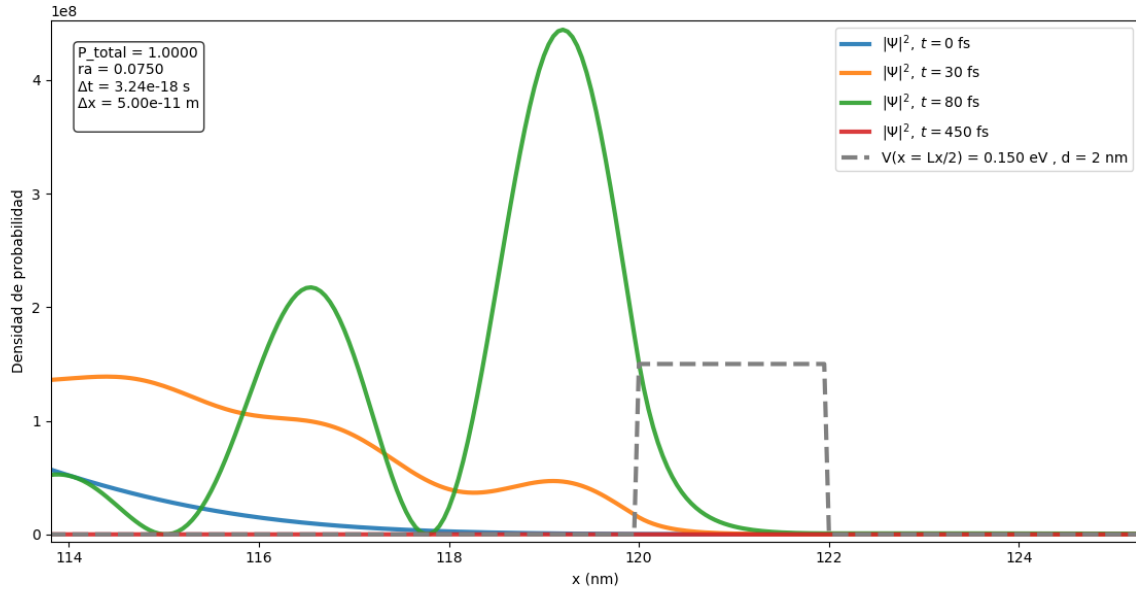


Figure 6: Evolución frente a barrera potencial ($d = 2$ nm).

t	$\langle x \rangle$	$\langle E_k \rangle$	$\langle E_p \rangle$	$\langle p \rangle$	E_T	δx	δp	$\frac{\delta x \cdot \delta p}{\hbar/2}$
0 fs	$1.100 \cdot 10^{-7}$ m	0.05 eV	0.000 eV	$1.207 \cdot 10^{-25}$ kg · m/s	0.05	$7.22 \cdot 10^{-9}$ m	$3.83 \cdot 10^{-26}$ kg · m/s	5.24
30 fs	$1.139 \cdot 10^{-7}$ m	0.049 eV	0.001 eV	$1.176 \cdot 10^{-25}$ kg · m/s	0.05	$7.30 \cdot 10^{-9}$ m	$6.01 \cdot 10^{-26}$ kg · m/s	8.32
80 fs	$1.179 \cdot 10^{-7}$ m	0.043 eV	0.008 eV	$-6.403 \cdot 10^{-27}$ kg · m/s	0.05	$6.60 \cdot 10^{-9}$ m	$2.24 \cdot 10^{-25}$ kg · m/s	28.11
450 fs	$7.225 \cdot 10^{-8}$ m	0.051 eV	0.000 eV	$-1.189 \cdot 10^{-25}$ kg · m/s	0.05	$2.61 \cdot 10^{-8}$ m	$5.72 \cdot 10^{-26}$ kg · m/s	28.29

Table 9: Valores esperados y dispersión de magnitudes dinámicas para distintos tiempos de simulación (caso d2).

8.3.3 Barrera de Ancho $d = 10$ nm

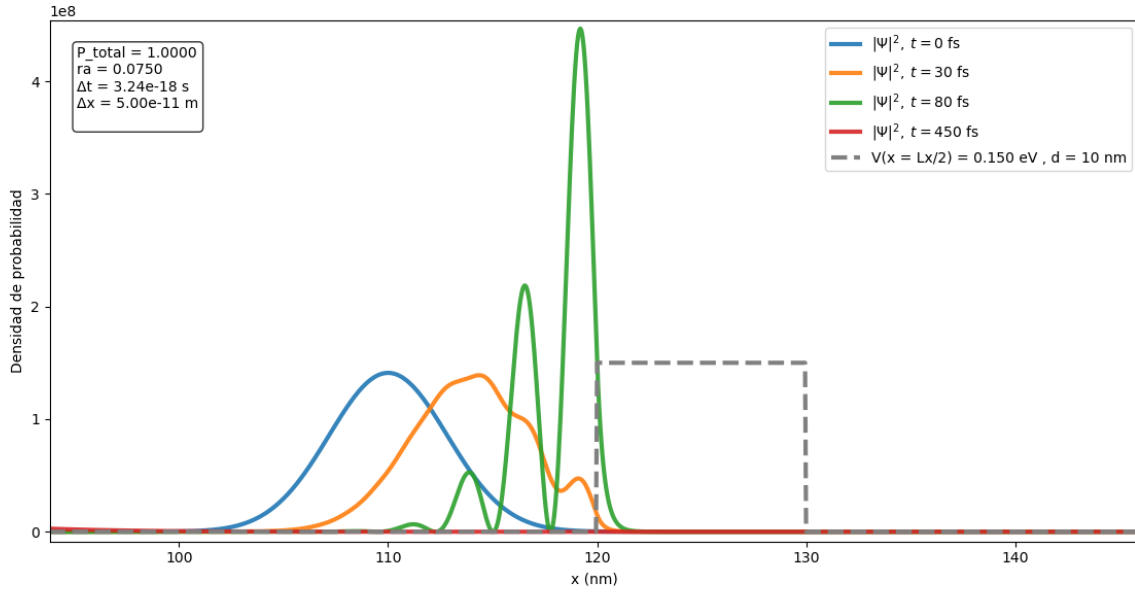


Figure 7: Evolución frente a barrera potencial ($d = 10$ nm).

t	$\langle x \rangle$	$\langle E_k \rangle$	$\langle E_p \rangle$	$\langle p \rangle$	E_T	δx	δp	$\frac{\delta x \cdot \delta p}{\hbar/2}$
0 fs	$1.100 \cdot 10^{-7}$ m	0.05 eV	0.000 eV	$1.207 \cdot 10^{-25}$ kg · m/s	0.05	$7.22 \cdot 10^{-9}$ m	$3.83 \cdot 10^{-26}$ kg · m/s	5.24
30 fs	$1.139 \cdot 10^{-7}$ m	0.049 eV	0.001 eV	$1.175 \cdot 10^{-25}$ kg · m/s	0.05	$7.30 \cdot 10^{-9}$ m	$6.06 \cdot 10^{-26}$ kg · m/s	8.38
80 fs	$1.179 \cdot 10^{-7}$ m	0.043 eV	0.008 eV	$-7.723 \cdot 10^{-27}$ kg · m/s	0.05	$6.54 \cdot 10^{-9}$ m	$2.24 \cdot 10^{-25}$ kg · m/s	27.84
450 fs	$7.148 \cdot 10^{-8}$ m	0.051 eV	0.000 eV	$-1.207 \cdot 10^{-25}$ kg · m/s	0.05	$1.94 \cdot 10^{-8}$ m	$3.88 \cdot 10^{-26}$ kg · m/s	14.30

Table 10: Valores esperados y dispersión de magnitudes dinámicas para distintos tiempos de simulación (caso d10).

9 Resolución analítica de la ecuación de Schrödinger

En esta sección se considera una onda monocromática ($\delta x \rightarrow \infty$) proveniente del eje negativo hacia el positivo de la coordenada x .

Para cada caso se llega a :

- Las funciones de onda para cada una de la regiones en las que se divide el problema
- Los coeficientes de transmisión y reflexión
- La distancia de penetración (solo para el caso escalón “alto”)

10 Conclusión

A Apendice Script

Solución de la ecuación de Schrödinger usando diferencias finitas

Para resolver la ecuación de Schrödinger unidimensional dependiente del tiempo

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x)\Psi(x, t), \quad (42)$$

con una computadora, se utiliza el **método de diferencias finitas en el dominio del tiempo (FDTD)**. La ventaja del FDTD es que permite observar la propagación de la partícula en el tiempo a medida que avanza en una zona específica.

1. Separación en partes real e imaginaria

Se escribe la función de onda como

$$\Psi(x, t) = \psi_{\text{real}}(x, t) + i \psi_{\text{imag}}(x, t), \quad (43)$$

y se sustituye en la ecuación (42), obteniendo un sistema acoplado:

$$\begin{cases} \frac{\partial \psi_{\text{real}}}{\partial t} = -\frac{\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \psi_{\text{imag}}}{\partial x^2} + \frac{V}{\hbar} \psi_{\text{imag}}, \\ \frac{\partial \psi_{\text{imag}}}{\partial t} = \frac{\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \psi_{\text{real}}}{\partial x^2} - \frac{V}{\hbar} \psi_{\text{real}}. \end{cases} \quad (44)$$

2. Aproximación de la segunda derivada espacial

Se discretiza el espacio con paso Δx y se usa la **diferencia centrada** para la segunda derivada:

$$\frac{\partial^2 \psi_i}{\partial x^2} \approx \frac{\psi_{i+1} - 2\psi_i + \psi_{i-1}}{\Delta x^2}, \quad (45)$$

donde i indica la posición en la malla discreta. En el código Python se implementa con:

```
lap_imag = (np.roll(psi_imag, -1) - 2*psi_imag + np.roll(psi_imag, 1)) / dx**2  
lap_real = (np.roll(psi_real_new, -1) - 2*psi_real_new + np.roll(psi_real_new, 1)) / dx**2
```

`np.roll(psi, -1)` : desplaza el array hacia la izquierda (ψ_{i+1})

`np.roll(psi, 1)` : desplaza hacia la derecha (ψ_{i-1})

Aquí, `np.roll(psi, -1)` corresponde a ψ_{i+1} y `np.roll(psi, 1)` a ψ_{i-1} .

3. Evolución temporal

Se discretiza el tiempo con paso Δt usando un esquema explícito:

$$\psi_{\text{real}}^{n+1} = \psi_{\text{real}}^n - \frac{\hbar \Delta t}{2m} \frac{\partial^2 \psi_{\text{imag}}^n}{\partial x^2} + \frac{\Delta t}{\hbar} V \psi_{\text{imag}}^n, \quad (46)$$

$$\psi_{\text{imag}}^{n+1} = \psi_{\text{imag}}^n + \frac{\hbar \Delta t}{2m} \frac{\partial^2 \psi_{\text{real}}^{n+1}}{\partial x^2} - \frac{\Delta t}{\hbar} V \psi_{\text{real}}^{n+1} \quad (47)$$

- lap_{real} y lap_{imag} son las derivadas espaciales aproximadas por diferencias centradas. - n indica el paso temporal. - Este esquema corresponde a un **método explícito de diferencias finitas** para el sistema acoplado real-imaginario.

4. Actualización y snapshots

En cada paso de tiempo se actualizan las variables:

```
psi_real, psi_imag = psi_real_new, psi_imag_new
```

y se calcula la densidad de probabilidad:

$$|\Psi(x, t)|^2 = \psi_{\text{real}}^2 + \psi_{\text{imag}}^2. \quad (48)$$

Cada cierto número de pasos se guardan **snapshots** para graficar la evolución de la función de onda:

```
if n % 400 == 0:  
    psi_sqr_snapshots.append(prob_density.copy())
```

—

5. Relación con el método de diferencias finitas

- La segunda derivada en x se aproxima mediante diferencias centradas. - La derivada temporal se implementa mediante pasos discretos pequeños Δt . - La precisión del método mejora al disminuir Δx y Δt , mostrando la convergencia de la solución hacia la solución analítica (cuando existe). - Este esquema permite observar la propagación de la onda a lo largo del tiempo en regiones específicas del dominio.

—

Conclusión: El esquema usado en el código corresponde exactamente a un *método de diferencias finitas en espacio y tiempo* (FDTD) aplicado a la ecuación de Schrödinger unidimensional, separando la función de onda en sus partes real e imaginaria y evolucionando paso a paso.