

# Trabajo Práctico N°1

## Ecuación de Schrödinger

### Condiciones del trabajo

- La fecha de entrega y devolución es la que se indica en el campus o en la página web de la materia.
- El trabajo deberá ser claro, conciso y correctamente redactado.
- Los gráficos y tablas deberán llevar títulos y estar numerados (por ejemplo: ver Fig. 1).
- El trabajo completo, incluyendo la carátula o primera página, deberá tener **15 páginas o menos**, y debe utilizarse tipografía tamaño 10pt.
- No es necesaria una carátula en una hoja aparte: en la primera página, además del nombre de los autores, los datos del curso y el resumen, puede presentarse también parte de los contenidos del trabajo.

### Objetivos del trabajo

#### Objetivos generales

- Comprender la dualidad onda partícula.
- Entender y aplicar el postulado de de Broglie y el principio de incertidumbre.
- Comprender los puntos esenciales de la teoría de Schrödinger.
- Desarrollar una intuición acerca de los sistema mecánico-cuánticos.
- Utilización de la ecuación de Schrödinger para resolver problemas.
- Comprender que a partir de la función de onda se puede obtener el valor medio de cualquiera de las cantidades dinámicas relevantes para este trabajo.

#### Objetivos particulares

- Implementar un algoritmo computacional que permita resolver la ecuación de Schrödinger unidimensional para una partícula sometida a diferentes potenciales que no tienen la capacidad de ligar a la partícula.
- Determinar la función de onda a distintos valores de tiempo para los casos de potencial: escalón y barrera de potencial.
- Calcular la densidad de probabilidad y los valores medios de la coordenada espacial, la energía potencial, el momentum y la energía total de la partícula.
- Analizar los resultados obtenidos y extraer conclusiones.

## 1. Modelo numérico para resolver la ecuación de Schrödinger

La ecuación de Schrödinger unidimensional para una partícula con masa  $m_0$  sometida a un potencial se detalla a continuación:

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

donde  $\hbar$  es la constante de Planck dividida por  $2\pi$ ,  $V$  la energía potencial en función de la variable espacial  $x$  y  $\Psi$  la función de onda dependiente del tiempo y del espacio. La función  $\Psi$  no tiene un significado físico directo pero todos los parámetros físicos relevantes pueden ser determinados a partir de ésta.

Para resolver (1) con una computadora se utilizará el método de las diferencias finitas en el dominio del tiempo (FDTD). La ventaja del FDTD es que es un método que permite observar la propagación de la partícula en el tiempo a medida que avanza en una zona específica. El método es descrito brevemente a continuación.

Para evitar el uso de números complejos en la simulación, se escribe  $\Psi$  en función de su parte real e imaginaria:

$$\Psi(x, t) = \Psi_{\text{real}}(x, t) + j \cdot \Psi_{\text{imag}}(x, t) \quad (2)$$

Reemplazando (2) en (1) y separando en parte real e imaginaria, quedan dos ecuaciones acopladas:

$$\frac{\partial}{\partial t} \Psi_{\text{real}}(x, t) = -\frac{\hbar}{2m_0} \frac{\partial^2 \Psi_{\text{imag}}(x, t)}{\partial x^2} + \frac{1}{\hbar} V(x) \Psi_{\text{imag}}(x, t) \quad (3)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \Psi_{\text{imag}}(x, t) = \frac{\hbar}{2m_0} \frac{\partial^2 \Psi_{\text{real}}(x, t)}{\partial x^2} - \frac{1}{\hbar} V(x) \Psi_{\text{real}}(x, t) \quad (4)$$

**Problema 1:** verificar las expresiones (3) y (4) detallando los pasos intermedios para llegar a ellas a partir de (1).

Para llevar esto a un algoritmo computacional se usa la aproximación por diferencias finitas. La derivada temporal es aproximada por la siguiente ecuación:

$$\frac{\partial \Psi_{\text{real}}(x, t)}{\partial t} \simeq \frac{\Psi_{\text{real}}(x, (m+1) \cdot \Delta t) - \Psi_{\text{real}}(x, m \cdot \Delta t)}{\Delta t} \quad (5)$$

donde  $\Delta t$  es el paso de tiempo. Por otro lado, el Laplaciano se puede escribir como:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \Psi_{\text{imag}}(x, t)}{\partial x^2} \simeq & \frac{\Psi_{\text{imag}}(\Delta x \cdot (n+1), m \cdot \Delta t)}{(\Delta x)^2} - \frac{2\Psi_{\text{imag}}(\Delta x \cdot n, m \cdot \Delta t)}{(\Delta x)^2} + \\ & + \frac{\Psi_{\text{imag}}(\Delta x \cdot (n-1), m \cdot \Delta t)}{(\Delta x)^2} \end{aligned} \quad (6)$$

donde  $\Delta x$  es el tamaño de los elementos usado en esta simulación. Por simplicidad se utiliza la siguiente notación:

$$\Psi(n \cdot \Delta x, m \cdot \Delta t) = \Psi^m(n) \quad (7)$$

donde el superíndice  $m$  indica el tiempo en unidades de paso de tiempo ( $t = m \cdot \Delta t$ ) y  $n$  indica la posición en unidades de elementos ( $x = n \cdot \Delta x$ ). Usando esta notación (3) se puede escribir en diferencias finitas:

$$\begin{aligned} \frac{\Psi_{\text{real}}^{m+1}(n) - \Psi_{\text{real}}^m(n)}{\Delta t} = & -\frac{\hbar}{2m_0} \frac{\Psi_{\text{imag}}^{m+1/2}(n+1) - 2\Psi_{\text{imag}}^{m+1/2}(n) + \Psi_{\text{imag}}^{m+1/2}(n-1)}{\Delta x^2} + \\ & + \frac{1}{\hbar} V(n) \Psi_{\text{imag}}^{m+1/2}(n) \end{aligned} \quad (8)$$

La última ecuación se puede reescribir de la forma que se muestra a continuación:

$$\begin{aligned}\Psi_{\text{real}}^{m+1}(n) = & \Psi_{\text{real}}^m(n) - \frac{\hbar\Delta t}{2m_0\Delta x^2} \left[ \Psi_{\text{imag}}^{m+1/2}(n+1) - 2\Psi_{\text{imag}}^{m+1/2}(n) + \Psi_{\text{imag}}^{m+1/2}(n-1) \right] + \\ & + \frac{\Delta t}{\hbar} V(n) \Psi_{\text{imag}}^{m+1/2}(n)\end{aligned}\quad (9)$$

Con un procedimiento similar se puede convertir (4) a la siguiente expresión:

$$\begin{aligned}\Psi_{\text{imag}}^{m+3/2}(n) = & \Psi_{\text{imag}}^{m+1/2}(n) + \frac{\hbar\Delta t}{2m_0\Delta x^2} \left[ \Psi_{\text{real}}^{m+1}(n+1) - 2\Psi_{\text{real}}^{m+1}(n) + \Psi_{\text{real}}^{m+1}(n-1) \right] \\ & - \frac{\Delta t}{\hbar} V(n) \Psi_{\text{real}}^{m+1}(n)\end{aligned}\quad (10)$$

Las expresiones (9) y (10) permiten calcular el valor de  $\Psi$  en el tiempo  $(m+1) \cdot \Delta t$  o  $(m + \frac{3}{2}) \cdot \Delta t$  en función de los valores anteriores. La diferencia de  $1/2$  en los superíndices entre la parte real e imaginaria es la esencia en la cual se basa este método. Para completar, resta sólo elegir adecuadamente los valores que deben tener  $\Delta t$  y  $\Delta x$ .

Esta diferencia de  $1/2$  en el índice  $m$  complica un poco las cuentas. En este sentido, se define un parámetro **adimensional** que combina los términos que anteceden a los corchetes de las ecuaciones mostradas más arriba:

$$ra \equiv \frac{\hbar\Delta t}{2m\Delta x^2} \quad (11)$$

Para **mantener la estabilidad del método**, el parámetro  $ra$  debe tener un valor “pequeño”. Para una partícula libre ( $V = 0$ ) debe ser menor que 0,15. Para los otros casos también se debe cumplir que el término  $\Delta t \cdot \max\{|V(n)|\} / \hbar$  sea menor que 0,15. Con este valor de  $ra$  se asegura un paso temporal pequeño que permite considerar, sin mucho error, que los valores de  $\Psi_{\text{imag}}$  en  $m+1/2$  y  $m+3/2$  se pueden aproximar usando sus valores en  $m$  y  $m+1$ , respectivamente. Teniendo en cuenta esto, es imperativo calcular primero  $\Psi_{\text{real}}$  en  $m+1$  para todo  $n$  y luego con esos valores determinar  $\Psi_{\text{imag}}$  en  $m+1$ .

## 2. Interpretación de las funciones de onda

La conexión básica entre las propiedades de la función de onda  $\Psi(x, t)$  y el comportamiento de la partícula asociada está expresada en términos de la densidad de probabilidad:

$$DP(x, t) = \Psi^*(x, t) \cdot \Psi(x, t) \quad (12)$$

donde  $\Psi^*(x, t)$  representa el complejo conjugado de  $\Psi(x, t)$ . Esta cantidad especifica la probabilidad, por unidad de longitud del eje  $x$ , de encontrar a la partícula en la vecindad de la coordenada  $x$  al tiempo  $t$ .

**Problema 2:** demostrar que  $DP(x, t)$  es una función real y positiva.

Para normalizar  $DP(x, t)$  se debe tener en cuenta que la probabilidad total de encontrar a la partícula asociada, en algún lugar del eje  $x$ , es igual a uno:

$$\int_{-\infty}^{\infty} DP(x, t) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t) \cdot \Psi(x, t) dx = 1 \quad (13)$$

Por lo tanto, la constante  $A$  para normalizar las funciones  $\Psi_{\text{real}}$  y  $\Psi_{\text{imag}}$  se puede calcular a través de la siguiente expresión:

$$A = \left[ \sum_{n=1}^{N_x} \Psi_{\text{real}}^2(n) + \Psi_{\text{imag}}^2(n) \right]^{\frac{1}{2}} \quad (14)$$

donde  $N_x$  es la cantidad de puntos usados para definir el eje  $x$ .

### 3. Obtención de los valores medios

Si  $f(x, p, t)$  es cualquier cantidad dinámica que es función de  $x$ ,  $p$  y  $t$ , útil para describir el estado de movimiento de la partícula asociada con la función de onda  $\Psi(x, t)$ , entonces su valor medio  $\langle f(x, p, t) \rangle$  está dado por:

$$\langle f(x, p, t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t) \cdot f_{\text{op}}(x, -j\hbar \frac{\partial}{\partial x}, t) \cdot \Psi(x, t) \cdot dx \quad (15)$$

donde  $f_{\text{op}}$  es un operador y las funciones de onda se encuentran normalizadas. Por ejemplo, el valor de expectación de la coordenada  $x$  es:

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t) \cdot x \cdot \Psi(x, t) \cdot dx \quad (16)$$

Por otro lado, para la determinación de los valores medios del momentum, de la energía cinética y la energía potencial de la partícula asociada, se deben utilizar las expresiones que se muestran a continuación:

$$\langle p \rangle = -j\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t) \cdot \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} \cdot dx \quad (17)$$

$$\langle E_k \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t) \cdot \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} \cdot dx \quad (18)$$

$$\langle E_p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t) \cdot V(x) \cdot \Psi(x, t) \cdot dx \quad (19)$$

Las ecuaciones (16)-(19) expresadas en diferencias finitas:

$$\langle x \rangle = \sum_{n=1}^{N_x} [\Psi_{\text{real}}^2(n) + \Psi_{\text{imag}}^2(n)] \cdot n \cdot \Delta x \quad (20)$$

$$\langle p \rangle = -\frac{j\hbar}{2\Delta x} \sum_{n=2}^{N_x-1} \Psi^*(n) [\Psi(n+1) - \Psi(n-1)] \quad (21)$$

$$\langle E_k \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m\Delta x^2} \sum_{n=2}^{N_x-1} \Psi^*(n) [\Psi(n+1) - 2\Psi(n) + \Psi(n-1)] \quad (22)$$

$$\langle E_p \rangle = \sum_{n=1}^{N_x} \Psi^*(n) \cdot V(n) \cdot \Psi(n) \quad (23)$$

**Problema 3:** mostrar cómo se obtiene el operador presentado en (18) para determinar  $\langle E_k \rangle$ .

A partir de las expresiones anteriores y de la definición de variancia usada en probabilidad y estadística, es posible calcular la incertidumbre en la posición  $\delta x$  y en el momentum  $\delta p$ :

$$\delta x = 2\sigma_x = 2\sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} \quad (24)$$

$$\delta p = 2\sigma_p = 2\sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2} = 2\sqrt{2m_0 \langle E_k \rangle - \langle p \rangle^2} \quad (25)$$

## 4. Simulaciones a llevar a cabo

Se debe simular el comportamiento de una partícula con masa  $m_0 = 9,11 \times 10^{-31}$  kg, carga  $q = 1,6 \times 10^{-19}$  C y energía cinética media inicial  $\langle E_{k_0} \rangle = 0,05$  eV bajo la influencia de distintas funciones  $V(x)$  definidas en una región del espacio de largo  $L_x = 240$  nm.

La función de onda inicial se debe representar a través de las siguientes expresiones:

$$\Psi_{\text{real}}(x, 0) = \exp \left[ - \left( \frac{x - x_0}{\sigma} \right)^2 \right] \cdot \cos \left( 2\pi \frac{x - x_0}{\lambda} \right) \quad (26)$$

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

donde  $x_0$  es la posición más probable inicial de la partícula,  $\sigma$  un parámetro que refleja aproximadamente la incertidumbre en posición y  $\lambda$  la longitud de onda asociada obtenido a través del postulado de de Broglie. En este trabajo se debe considerar  $x_0 = 110$  nm y  $\sigma = 4$  nm.

El tamaño de elemento debe ser fijado en  $\Delta x = 0,05$  nm y junto con el largo total del eje x se pueden definir los valores de  $N_x$  y  $\Delta t$  (recordar el parámetro adimensional  $ra$ ).

Se deberán simular las funciones potenciales que se detallan debajo.

### 1. Escalón de potencial:

$$V(x) = \begin{cases} 0 \text{ eV} & x < \frac{L_x}{2} \\ E_{\text{esc}} & x > \frac{L_x}{2} \end{cases} \quad (28)$$

donde  $E_{\text{esc}}$  es la altura del escalón. En este caso se deben realizar simulaciones para las alturas  $E_{\text{esc}} = (0,025 \text{ eV}; 0,25 \text{ eV})$ .

### 2. Barrera rectangular de potencial:

$$V(x) = \begin{cases} 0 \text{ eV} & 0 < x < \frac{L_x}{2} \\ E_{\text{barr}} & \frac{L_x}{2} < x < \frac{L_x}{2} + d \\ 0 \text{ eV} & \frac{L_x}{2} + d < x < \frac{L_x}{2} \end{cases} \quad (29)$$

donde  $E_{\text{barr}} = 0,150$  eV y  $d$  son la altura y ancho de la barrera, respectivamente. En este caso se deben realizar simulaciones para los anchos  $d = (1 \text{ nm}; 2 \text{ nm}; 10 \text{ nm})$

En todos los casos se pide la función de onda en función de la posición para los tiempos  $t_m = 0 \text{ fs}, 40 \text{ fs}, 80 \text{ fs}$  y  $450 \text{ fs}$ .

## Sugerencias

- Para la determinación numérica de los **coeficientes de reflexión y transmisión** se debe usar la densidad de probabilidad.
- Cuando haya paquetes de onda reflejados y transmitidos, en el cálculo de los valores medios es necesario separar la solución numérica de  $\Psi$  por **regiones y renormalizar**.
- Tomar los recaudos necesarios en los bordes ya que se están usando **condiciones de contorno de Dirichlet nulas**, o sea, en los bordes  $V \rightarrow \infty$ .
- Prestar mucha atención para no mezclar unidades: utilizar el sistema internacional.
- Si en el gráfico hay varias curvas y el informe es presentado en blanco y negro, se debe confeccionar las figuras de modo que puedan ser correctamente interpretadas por el lector.

## 5. Resolución analítica de la ecuación de Schrödinger

En esta sección hay que encontrar la solución de la ecuación Schrödinger para las funciones potenciales de la sección anterior. Para llevar a cabo esta tarea hay que considerar una **onda monocromática** ( $\delta x \rightarrow \infty$ ) que viene desde  $-x$ . Para cada caso se pide:

- 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”)

## 6. Detalles sobre el informe

### Resumen del trabajo

El trabajo deberá estar encabezado por un breve resumen que detalle su contenido (objetivos, lo realizado, resultados y conclusiones). El resumen debe ser escrito de forma tal de despertar el interés y la curiosidad del lector por el trabajo.

### Desarrollo

En el informe se debe

- a) Presentar las ecuaciones usadas en el trabajo en esta sección, tanto para la parte numérica como la parte analítica. Por otro lado, el *script* del algoritmo utilizado se debe insertar como apéndice.
- b) Realizar **un gráfico** que muestre la condición inicial de la función de onda (parte real e imaginaria por separado) y la densidad de probabilidad. Escalar para que se puedan apreciar correctamente las formas de onda. En la Fig. 1 se muestra un ejemplo.
- c) Para el caso **escalón de potencial** confeccionar **dos gráficos**, uno por cada valor de  $E_{\text{esc}}$ , en el que se grafiquen las funciones  $|\Psi(x, t_m)|^2$  para los tiempos pedidos  $t_m$ .
- d) Para el caso **barrera rectangular de potencial** confeccionar **tres gráficos**, uno por cada valor de  $d$ , en el que se grafiquen las funciones  $|\Psi(x, t_m)|^2$  para los tiempos pedidos  $t_m$ .
- e) En **los gráficos de los ítem (c) y (d)** el eje de abscisa corresponde a  $x$  en nm y el eje de ordenadas a la amplitud normalizada en eV. En el caso de  $|\Psi(x, t)|^2$  se debe normalizar por  $\langle E_{k_0} \rangle / \max \{ |\Psi(x, 0)|^2 \}$  para que su valor pico sea comparable con los valores de  $V(x)$  (ver Fig. 2).
- f) **Cada figura** del ítem (c) tiene asociada **dos tablas**.  
La **primera tabla** debe contener los valores esperados para los distintos tiempos simulados de las siguientes variables:  $x$ ,  $E_k$ ,  $E_p$ ,  $p$  y la energía total  $E_T = E_k + E_p$ . En la misma tabla también deben estar los valores de  $\delta x$  y  $\delta p$  y su producto, este último normalizado por  $\hbar/2$ .  
En la **segunda tabla** deben estar los valores calculados de los coeficientes de transmisión

y reflexión y la distancia de penetración (solo para el caso escalón de potencial “alto”) para los casos **paquete de ondas** y **onda monocromática**.

g) Cada figura del ítem (d) tiene asociada **dos tablas**.

La **primera tabla** debe contener los valores esperados para los distintos tiempos simulados de las siguientes variables:  $x$ ,  $E_k$ ,  $E_p$ ,  $p$ ,  $E_T$ ,  $\delta x$ ,  $\delta p$  y su producto, este último normalizado por  $\hbar/2$ .

En la **segunda tabla** deben estar los valores calculados de los coeficientes de transmisión y reflexión para los casos **paquete de ondas** y **onda monocromática**.

h) También se debe presentar todo lo necesario que aporte al análisis de los resultados de cada uno de los casos simulados.

En total se deben presentar **6 gráficos y 10 tablas**.

### Análisis y comparación de los resultados

Todo resultado presentado en el informe debe estar analizado. Se deben comparar los resultados obtenidos para los diferentes casos simulados. Debe analizarse si los resultados son compatibles o no con la mecánica clásica. De existir diferencias, éstas deben ser cuantificadas y deben presentarse posibles explicaciones para estas diferencias. Los gráficos deben ser claros, siguiendo lo lineamientos mencionados más arriba y con una leyenda indicando a qué corresponde cada curva. A modo de ejemplo se pueden apreciar las Figs. 1 y 2.

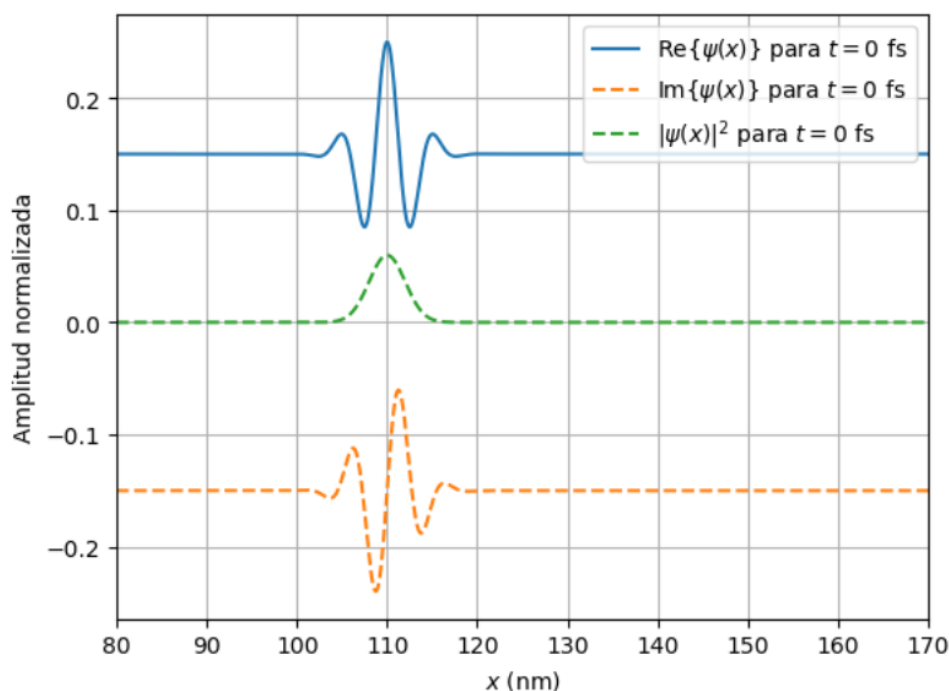


Figura 1: Simulación de la condición inicial.

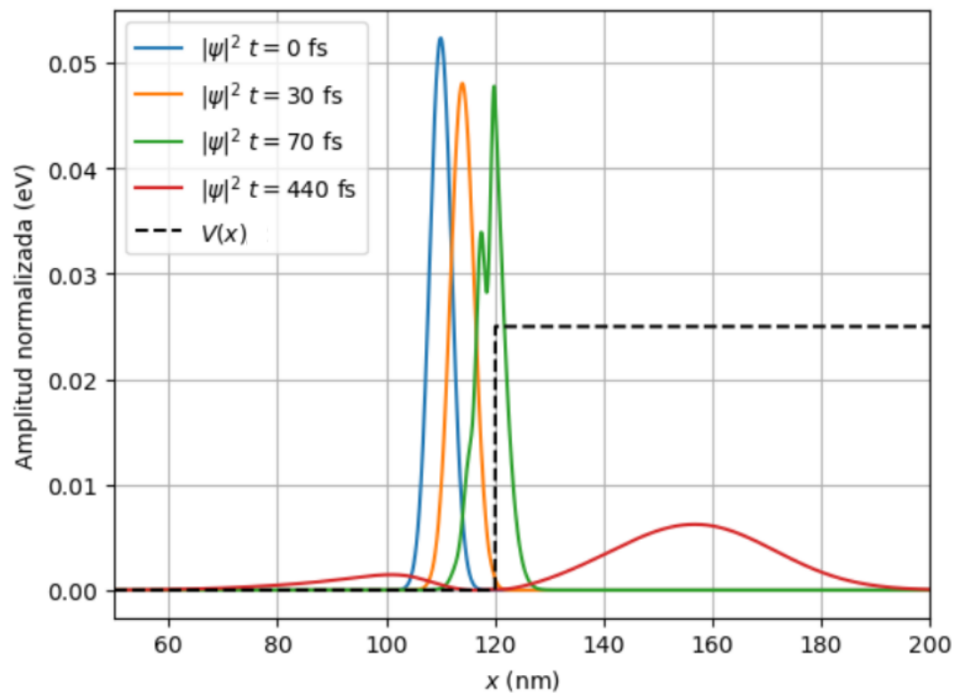


Figura 2: Simulación de un escalón con energía potencial menor a la partícula.

## Conclusiones

El informe debe culminar con las conclusiones, que deben ser breves y conceptuales. Deben estar focalizadas en los objetivos que se cumplieron en el trabajo y eventualmente en resultados interesantes adicionales que se hubieran obtenido.