

Entrega 6: Simulació

FÍSICA QUÀNTICA I

A entregar com a data límit dimecres 16 de gener en grups d'entre 3 i 4 persones

1 Sistema a estudiar

L'objectiu d'aquesta entrega és estudiar numèricament diversos efectes quàntics que es donen amb barreres i pous de potencial. En particular, estudiarem què ocorre quan una partícula o conjunt de partícules es troben en el seu camí amb algun obstacle en el potencial. Clàssicament, en el cas de tenir un esglaió, si les partícules tenen menys energia que l'alçada de la barrera, aquestes reboten i és impossible trobar-les a l'altre costat. Però quànticament, a causa del tractament ondulatori de la matèria, hi ha zones “prohibides” clàssicament on la probabilitat de trobar la partícula és diferent de zero. Aquest és el conegut com *efecte túnel*. D'altra banda, si tenim un pou de potencial i les partícules passen per sobre, clàssicament esperaríem que totes poguessin passar. No obstant això, quànticament trobem que hi ha partícules que reboten amb el pou.

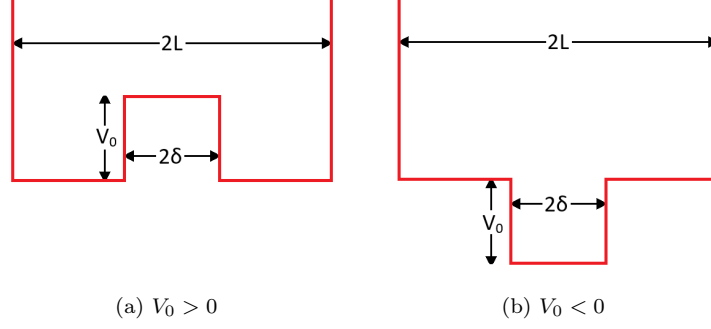
A classe heu estudiat aquests efectes com l'efecte que té la barrera o el pou sobre els estats estacionaris calculant la relació entre el corrent incident, el transmès, i el reflectit. Ara bé, aquests estats estacionaris són estats lliures (no lligats) no normalitzables i, per tant, no són estats físics d'una partícula (tot i que sí es pot interpretar com un fluxe constant de partícules). Aquí veurem quin és l'efecte de la barrera i el pou en la propagació d'un estat físic normalitzable.

Per tractar numèricament aquestes situacions considerarem que tot el nostre sistema es troba en una caixa unidimensional. D'aquesta manera, qualsevol funció d'ona que vulguem fer evolucionar dins la caixa la podrem expressar com una combinació lineal d'un nombre discret de funcions pròpies del sistema, que haurem de truncar adequadament.

Així doncs, el sistema que necessitem resoldre, sigui quina sigui la funció que volem fer evolucionar, és el següent:

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{si } |x| < l \\ 0 & \text{si } l < |x| < L \\ +\infty & \text{si } |x| > L \end{cases} \quad (1)$$

N'estudiarem els dos casos, quan $V_0 > 0$ i $V_0 < 0$, que es representen a la figura següent.



En aquesta simulació treballarem amb una funció d'ona gaussiana (paquet gaussià), però és convenient que tingueu clar que tot el que farem ho podeu fer amb qualsevol funció d'ona (contínua, normalitzable, etc.).

L'equació de Schrödinger per aquest sistema és

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x)\psi = E\psi \implies \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \frac{2m(V(x) - E)}{\hbar^2} \psi \equiv k^2(V(x) - E)\psi \quad (2)$$

Veiem que, per conveniència, definim la constant $k \equiv \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}}$ (no confondre amb $k = p/m$), si utilitzem una massa de $0,5 \text{ MeVc}^{-2}$, k pren un valor de $5,13 \text{ eV}^{-1/2} \text{ nm}^{-1}$.

Cal resoldre l'equació (2) per a tots els possibles casos. Ràpidament ens adonem que el potencial és parell, $V(-x) = V(x)$ i, per tant, les solucions seran necessàriament, o bé parelles, o bé senars. Les solucions es separen en tres casos en funció de E i V_0 :

1.1 Si $0 < E < V_0$:

$$\psi_p = N \begin{cases} \sin(k\sqrt{E_p}(x+L)) & -L < x < -l \\ \frac{\sin(k\sqrt{E_p}(L-l))}{\cosh(k\sqrt{V_0-E_p}l)} \cosh(k\sqrt{V_0-E_p}x) & |x| < l \\ -\sin(k\sqrt{E_p}(x-L)) & l < x < L \end{cases} \quad (3)$$

$$\psi_s = N \begin{cases} \sin(k\sqrt{E_s}(x+L)) & -L < x < -l \\ -\frac{\sin(k\sqrt{E_s}(L-l))}{\sinh(k\sqrt{V_0-E_s}l)} \sinh(k\sqrt{V_0-E_s}x) & |x| < l \\ \sin(k\sqrt{E_s}(x-L)) & l < x < L \end{cases} \quad (4)$$

on els subíndexs p i s fan referència a les solucions parelles i senars respectivament. Imposant condicions de contorn obtenim que les energies vénen donades per les següents equacions:

$$\sqrt{V_0-E_p} \tanh(k\sqrt{V_0-E_p}l) \sin(k\sqrt{E_p}(L-l)) = -\sqrt{E_p} \cos(k\sqrt{E_p}(L-l)) \quad (5)$$

$$\sqrt{V_0 - E_s} \sin(k\sqrt{E_s}(L-l)) = -\sqrt{E_s} \tanh(k\sqrt{V_0 - E_s}l) \cos(k\sqrt{E_s}(L-l)) \quad (6)$$

1.2 Si $V_0 < E$, $E > 0$:

$$\psi_p = N \begin{cases} \sin(k\sqrt{E_p}(x+L)) & -L < x < -l \\ \frac{\sin(k\sqrt{E_p}(L-l))}{\cos(k\sqrt{E_p-V_0}l)} \cos(k\sqrt{E_p-V_0}x) & |x| < l \\ -\sin(k\sqrt{E_p}(x-L)) & l < x < L \end{cases} \quad (7)$$

$$\psi_s = N \begin{cases} \sin(k\sqrt{E_s}(x+L)) & -L < x < -l \\ -\frac{\sin(k\sqrt{E_s}(L-l))}{\sin(k\sqrt{E_s-V_0}l)} \sin(k\sqrt{E_s-V_0}x) & |x| < l \\ \sin(k\sqrt{E_s}(x-L)) & l < x < L \end{cases} \quad (8)$$

Amb les energies definides per

$$\sqrt{E_p - V_0} \sin(k\sqrt{E_p - V_0}l) \sin(k\sqrt{E_p}(L-l)) = \sqrt{E_p} \cos(k\sqrt{E_p - V_0}l) \cos(k\sqrt{E_p}(L-l)) \quad (9)$$

$$\sqrt{E_s - V_0} \cos(k\sqrt{E_s - V_0}l) \sin(k\sqrt{E_s}(L-l)) = -\sqrt{E_s} \sin(k\sqrt{E_s - V_0}l) \cos(k\sqrt{E_s}(L-l)) \quad (10)$$

1.3 Si $V_0 < E < 0$:

$$\psi_p = N \begin{cases} \sinh(k\sqrt{-E_p}(x+L)) & -L < x < -l \\ \frac{\sinh(k\sqrt{-E_p}(L-l))}{\cos(k\sqrt{E_p-V_0}l)} \cos(k\sqrt{E_p-V_0}x) & |x| < l \\ -\sinh(k\sqrt{-E_p}(x-L)) & l < x < L \end{cases} \quad (11)$$

$$\psi_s = N \begin{cases} \sinh(k\sqrt{-E_s}(x+L)) & -L < x < -l \\ -\frac{\sinh(k\sqrt{-E_s}(L-l))}{\sin(k\sqrt{E_s-V_0}l)} \sin(k\sqrt{E_s-V_0}x) & |x| < l \\ \sinh(k\sqrt{-E_s}(x-L)) & l < x < L \end{cases} \quad (12)$$

$$\sqrt{E_p - V_0} \sin(k\sqrt{E_p - V_0}l) \tanh(k\sqrt{-E_p}(L-l)) = -\sqrt{-E_p} \cos(k\sqrt{E_p - V_0}l) \quad (13)$$

$$\sqrt{E_s - V_0} \cos(k\sqrt{E_s - V_0}l) \tanh(k\sqrt{-E_s}(L-l)) = \sqrt{-E_s} \sin(k\sqrt{E_s - V_0}l) \quad (14)$$

No ens preocupem per les constants de normalització N , ja que les podrem calcular numèricament. També cal notar que totes les funcions d'ona valen 0 si $|x| > L$.

2 Aplicació numèrica

En aquesta entrega haureu de simular l'evolució del paquet gaussià sota el potencial (1), aquí explicarem una manera de fer-ho i us proporcionem una part del codi necessari (en *Python*), però els que us sentiú còmodes programant podeu fer la vostra simulació des de 0 seguint altres estructures.

2.1 PART I. Càlcul de les energies

Per començar necessitem solucionar les equacions de les energies (5), (6), (9), (10), (13), (14). Aquestes equacions són transcendents i, per tant, no es poden solucionar analíticament. Per tant trobarem les solucions numèricament. En la Part I del codi que us proporcionem trobareu ja definides les 6 equacions que volem solucionar i les solucionem pel mètode de Bolzano.

El programa comença des de l'energia més baixa possible i va incrementant-la en dE i avaluant les equacions corresponents, cada cop que alguna equació canvia de signe el programa guarda l'energia corresponent.

És important que trieu adequadament el valor de dE , ja que si salteu alguna energia el programa us donarà resultats sense sentit.

Finalment el codi guardarà aquestes energies en un fitxer, raó per la qual us recomanem que guardeu el codi en una carpeta a part.

2.2 PART II. Definició de les funcions pròpies

Un cop calculades les energies podem calcular totes les funcions d'ona, en aquesta Part II trobareu definides les 6 funcions, junt amb un *loop* que retorna totes les funcions d'ona com una matriu: cada fila representa una funció d'ona i cada columna el valor de la funció en un punt de l'espai.

A més, calculem numèricament les integrals corresponent per a normalitzar les funcions.

Ara és un bon moment per assegurar-vos que no us heu oblidat cap energia en la part anterior. Feu la gràfica de vàries de les funcions d'ona, si aquestes no són contínues i diferenciables, hi ha hagut un error. Comproveu també que es compleix el teorema dels nodes, és a dir, que l'estat fonamental no té cap 0 i que el n -èssim estat excitat té n nodes.

2.3 PART III. Definició de la gaussiana i aplicació de la patada

En aquesta part el programa defineix una funció gaussiana, la normalitza, i guarda el valor de cada posició en un vector.

Nota: Una cosa que heu de vigilar és que la gaussiana que definiu es trobi “sencera” dins la caixa i en la regió de fora la barrera o el pou. Si no és així, tindreu problemes amb el programa.

En Mecànica Quàntica, l'operador corresponent a donar una patada s'escriu com:

$$U_{p_0} = e^{ip_0\hat{x}/\hbar} \quad (15)$$

Aquest correspon a donar-li un moment net p_0 a la partícula, $U_{p_0} |p\rangle = |p + p_0\rangle$. A Física Quàntica II tornareu a trobar-vos amb aquest operador, agafat de la mà de l'operador encarregat de fer una translació. A aquest operador conjunt li'n direu operador desplaçament, i juntament amb uns nous operadors que us definiran, us permetrà calcular els valors esperats de l'oscil·lador harmònic (i moltes altres coses) sense fer cap integral.

Amb el sistema d'unitats que hem escollit, i considerant que $T = \frac{p_0^2}{2m}$ és l'energia que li donem amb la patada, l'operador patada en la base de posicions s'escriu com

$$U_{p_0} = e^{\frac{i}{\hbar} \sqrt{2mT} x} = e^{ik\sqrt{T}x} \quad (16)$$

on k és el factor que hem calculat al principi.

Noteu que en introduir aquest operador, per primer cop en tot el programa ens apareixen nombres complexos. El que recomanem en aquesta part és separar la part real i la part imaginària, i treballar-les per separat.

Per tant, la gaussiana amb la patada a $t = 0$ es pot separar en:

$$\text{Part real} = \cos(k\sqrt{T}x) \cdot \text{gaussiana} \quad (17)$$

$$\text{Part imaginària} = \sin(k\sqrt{T}x) \cdot \text{gaussiana} \quad (18)$$

Al programa es defineixen vectors per guardar els punts de cadascuna de les dues parts, de la mateixa manera que ho hem fet per a la gaussiana inicial. També hi ha un vector on es guarda la distribució de probabilitat.

Un cop arribats a aquest punt ja tenim calculades les funcions d'ona corresponents als estats propis del Hamiltonià, hem definit la gaussiana i li hem aplicat la patada. Ara cal que vosaltres implementeu el que falta del codi, que és:

- Com que voldrem estudiar l'evolució temporal del paquet, ens caldrà escriure'l com una combinació lineal de les funcions de la base pròpia de la caixa (per això les hem calculat).
- Un cop tinguem calculats tots els coeficients, només haurem d'aplicar l'operador d'evolució temporal a cadascun d'ells per veure com evolucionen, i guardar els resultats per fer posteriors plots.
- Finalment, ja podrem jugar amb el nostre sistema i interpretar el que observem. El que també podrem fer són plots a temps real del paquet i veure explícitament què li passa al topar amb la barrera.

2.4 PART IV. Descomposició en la base pròpia

Els coeficients a $t = 0$ corresponents a cada funció pròpia vindran donats per

$$C_n = \langle \psi_n | \phi \rangle = \int_{-L}^{+L} \psi_n(x) \phi(x) dx \quad (19)$$

on $\phi(x)$ és la gaussiana amb la patada i $\psi_n(x)$ són les funcions pròpies. Noteu que cada coeficient tindrà una part real i una part imaginària. Podeu fer dos *loops* (un per a la part real i un altre per a la part imaginària) amb la mateixa estructura que l'utilitzat per a les normalitzacions.

Guardau els coeficients que aneu obtenint. Podeu fer-ho en una matriu de dimensió $N \times Nt$, d'aquesta manera, a la primera columna hi tindreu els coeficients a $t = 0$, i podreu afegir a la resta de columnes els coeficients a qualsevol t quan els calculem.

Nota: Aquí és un bon moment per mirar si aneu bé o l'heu liat pel camí. Si us reconstruïu la gaussiana sumant les contribucions de cada funció pròpia, hauríeu d'obtenir la gaussiana inicial, tant per a la part real, com la part imaginària, com la probabilitat.

2.5 PART V. Evolució temporal i paquet de probabilitat en funció del temps

Ara només queda calcular l'evolució temporal de cada coeficient aplicant l'operador d'evolució temporal. Com ja sabeu, aquest operador és molt fàcil d'aplicar si es té la funció expressada en la base pròpia, com és el nostre cas, i fa evolucionar els coeficients C_n afegint la fase $e^{-iE_n t/\hbar}$. Tingueu en compte que aquesta fase també té una part real i una part imaginària, de manera que en fer el producte amb els coeficients haureu de vigilar quins termes pertanyeran ara a la nova part real i quins a la nova part imaginària. Aneu afegint els valors que trobeu a la matriu de coeficients que teníeu, omplint les columnes per a cada instant de temps.

Doncs ja ho hem calculat tot! Ara només us queda reconstruir les funcions de la mateixa manera que ho heu fet al recuperar la gaussiana inicial, però per a tots els instants de temps. Podeu fer-ho definint una matriu amb Nt files, de manera que cada fila representa la funció en un instant de temps, i cada columna és una posició de la caixa.

3 Qüestions

Un cop ja tenim el codi preparat podem començar a simular el sistema, per començar podem posar $V_0 = 0$ per estudiar l'evolució de la nostra funció gaussiana. Per veure l'evolució de la gaussiana com una partícula lliure poseu un valor de L suficientment gran perquè no us molesti.

Qüestió 1: Notem que per fer aquesta simulació necessitem discretitzar tant l'espai com el temps com les energies. A partir de les energies que coneixeu del pou infinit, calculeu quin és el valor *mínim* que ha de tenir dE en funció de L . A més, l'energia i el temps estan relacionats, calculeu quin és el temps *màxim* que podeu simular en funció de dE .

NOTA: Evidentment la simulació només seria 100% perfecta si dx, dt i $dE \rightarrow 0$. Els valors que obtingueu en aquesta qüestió són orientatius, us donen un màxim i mínim on podeu treballar, però com més lluny estigueu d'aquests valors molt millor.

Qüestió 2: Com podeu veure, quan la gaussiana s'apropa a la paret perd la forma de gaussiana, tot i això, hi ha un moment en el qual recupera la forma original, però es troba en la posició oposada de la caixa, és a dir $|\psi(x, t)| = |\psi(-x, 0)|$. Calculeu aquest temps teòricament i comproveu que això passa en la simulació.

NOTA: Jugueu amb el fet que les energies van com n^2 . Escriviu la funció d'ona en la base pròpia del Hamiltonià i separeu les funcions d'ona simètriques de les antisimètriques.

Qüestió 3: Segurament us haureu adonat que quan el paquet passa per les zones properes a les parets, el paquet perd la forma gaussiana i presenta una sèrie de “pics” periòdics. Com ho interpreteu físicament?

Ara passem a estudiar el cas de l'efecte túnel. Amb aquest objectiu, cal fixar un valor positiu de V_0 .

Qüestió 4: Per una determinada barrera, representeu l'animació per a tres valors de la patada, un per sota de V_0 , un per $T \sim V_0$ i un per sobre de V_0 . Comenteu en cada cas què predomina (transmissió o reflexió) i si és el que esperaríeu. Per cadascun d'aquests casos calculeu numèricament el coeficient de transmissió i de reflexió. Per fer-ho, calculeu la probabilitat de trobar la partícula a cada costat de la barrera un cop tot s'ha transmès o reflectit. Compareu amb la fórmula utilitzada a classe pel coeficient de transmissió deduïda a partir dels corrents de probabilitat. Coincideixen?

A continuació fixeu un valor negatiu de V_0 , de manera que tingueu un pou finit dins el pou infinit.

Qüestió 5: Per un pou suficientment profund, representeu les primeres funcions d'ona pròpies del Hamiltonià. Quines característiques tenen? Què representen?

Qüestió 6: Repetiu la qüestió 4 per un valor concret de la patada. Comenteu què observeu i doneu-li una interpretació física.

Qüestió opcional: Jagueu amb el programa i comenteu el que us sembli interessant. Per exemple, podeu modificar l'amplada de la barrera, o donar-li una energia cinètica molt gran a la gaussiana.

QUÈ S'HA D'ENTREGAR?

- El programa utilitzat per a la simulació
- Un breu informe de què heu fet, amb les respostes a les qüestions.
- Els arxius de vídeo (si n'heu fet) amb les evolucions temporals.

Ho podeu entregar tot en un fitxer comprimit (un fitxer per grup).
Bones Festes!