



UNIVERSIDAD  
DE GRANADA

UNIVERSIDAD DE GRANADA

GRADO EN FÍSICA

FÍSICA COMPUTACIONAL

---

## Ecuación de Schrödinger

---

Autor:

RAFAEL GUERRERO ALONSO

Año 2020/2021

# Índice

<b>1. Fundamento Teórico</b>	<b>2</b>
1.1. Coeficiente de transmisión de la función de onda . . . . .	3
1.2. Medida y el colapso de la función de onda . . . . .	3
1.3. Método numérico . . . . .	4
<b>2. Estudio a realizar</b>	<b>6</b>
2.1. Coeficiente de transmisión . . . . .	6
2.2. Incertidumbre de la función de onda . . . . .	8
<b>3. Resultados y discusión</b>	<b>10</b>
3.1. Coeficiente de transmisión y tiempo de detección . . . . .	10
3.2. Coeficiente de transmisión . . . . .	11
3.3. Incertidumbre de la función de onda . . . . .	13
<b>4. Conclusión</b>	<b>13</b>

## Resumen

En este informe se abordará el ejercicio Voluntario 1 del tema de Schrödinger de la asignatura Física computacional. Este tendrá como objetivo el resolver la ecuación de Schrödinger haciendo uso de derivadas parciales, estudiar la dependencia en N de K y la dependencia del potencial V(x) de K (variando el parámetro  $\lambda$ ), comprando dichos resultados con los valores teóricos.

## 1. Fundamento Teórico

Las herramientas necesarias para afrontar el problema de la resolución de la ecuación de Schrödinger unidimensional las expondré a lo largo de este apartado. Trataremos la función de onda como una densidad de probabilidad descrita por la siguiente expresión

$$p(x)dx = |\Phi|^2 dx = \Phi\Phi^*dx \quad (1)$$

con su correspondiente normalización

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Phi\Phi^*dx = 1 \quad (2)$$

En primer lugar, como la función de onda debe ser normalizable, la función debe tender a cero como  $x \rightarrow \infty$ . La ecuación de Schrödinger unidimensional independiente del tiempo viene dada por la siguiente expresión:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + V\Phi = H\Phi \quad (3)$$

simplificando la expresión mediante el siguiente cambio de variable  $t \rightarrow t\hbar^2$  en el tiempo y  $x \rightarrow x\hbar^2/2m$  en el espacio y haciendo uso de las unidades naturales ( $\hbar^2 = 1$  y  $m = 1/2$ ) obtendremos la siguiente expresión

$$-H\Phi = \left[ \frac{\partial^2}{\partial x^2} - V(x) \right] \Phi(x, t) = -i \frac{\partial \Phi}{\partial t} \quad (4)$$

Obteniendo como solución de la función de onda haciendo uso de las autofunciones del hamiltoniano H:

$$\Phi(x, t) = \sum_n a_n e^{-iE_n t} u_n(x) + \int dk a(k) e^{-iE(k)t} u_k(x) \quad (5)$$

teniendo en cuenta que  $u_n$  son los estados acotados y  $u_k$  los estados del continuo. El estado inicial del sistema vendrá dado por  $\Phi = (x, 0)$ , teniendo en cuenta las siguientes dos definiciones

$$\begin{cases} a_n = \langle u_n, \Phi(x, 0) \rangle \\ a(k) = \langle u_k, \Phi(x, 0) \rangle \end{cases} \quad (6)$$

La solución formal de la ecuación de Schrödinger es la siguiente, teniendo en cuenta que el operador  $e^{-itH}$  es unitario.

$$\Phi(x, t) = e^{-i(t-t_0)H} \Phi(x, t_0) \quad (7)$$

Las autofunciones y los autovalores del hamiltoniano no se pueden calcular analíticamente y han de determinarse numéricamente. Además, el estado inicial debe ser necesariamente a una combinación lineal finita de autofunciones y de menor número posible para reducir la carga computacional. [1]

## 1.1. Coeficiente de transmisión de la función de onda

Consideramos una función de onda que incide sobre una barrera de potencial de altura  $V_0 > 0$ . Aplicando las condiciones de contorno y continuidad se obtiene que coeficiente de transmisión depende de las amplitudes de la función de onda incidente  $A_r$  y transmitida  $C_r$  al cuadrado

$$T = \frac{|C_r|^2}{|A_r|^2} \quad (8)$$

Si se relaciona la amplitud transmitida con la amplitud  $B_l$ , el número de onda  $k_1 = \sqrt{2m(V_0 - E)/\hbar}$  y la anchura de la barrera L de la onda reflejada se obtiene la siguiente expresión para el coeficiente:

$$T = \frac{|B_l|^2}{|A_r|^2} e^{-2k_1 L} \quad (9)$$

Si ambas amplitudes son constantes, se tiene que el coeficiente de transmisión decrece de manera exponencial con una caída proporcional a la longitud y la altura de la barrera. [2].

## 1.2. Medida y el colapso de la función de onda

El colapso de la función de onda es un proceso físico relacionado con el problema de la medida de la mecánica cuántica consistente en la variación abrupta del estado de un sistema después de haber obtenido una medida. A día de hoy el colapso de la función de onda no se llega a comprender del todo. No existe una interacción cuántica que actúe sobre un sistema, lo que afecta a la transición de una superposición cuántica en la que un sistema no posee valores bien definidos para ciertas propiedades.

Tendremos que decidir si queremos medir con precisión la posición de una partícula, dicha medida incluye el colapso de la función de onda en un estado de posición bien definida, o por otro lado la de medir con precisión el momento. No se pueden medir ambos valores a la vez. Al no poder medir, el valor de los parámetros promedio esperados observables se puede definir mediante operadores de la manera:

$$\langle O \rangle = \int \Phi^*(x) \hat{O} \Phi(x) dx \quad (10)$$

donde  $\hat{O}$  es el operador en cuestión. Para la posición tenemos  $\hat{x} = x$  y para el momento  $\hat{p} = -i\hbar^2 \frac{\partial}{\partial x}$ .

### 1.3. Método numérico

En primer lugar para poder realizar el cálculo numérico se debe discretizar el espacio y el tiempo tomando  $x_j = jh$  y  $t_n = ns$ , con  $j=0, 1, \dots, N$  y  $n=0, 1, 2, \dots$ , donde  $h$  y  $s$  se corresponde con el espaciado en la discretización del espacio y del tiempo respectivamente, por lo tanto la función de onda viene dada en cada punto por la expresión:

$$\Phi(x_j, t_n) \rightarrow \Phi(jh, ns) = \Phi_{j,n} \quad (11)$$

con  $j=0,1,\dots,N$  y  $n=0,1,2,\dots$ . Las condiciones de contorno para la función de onda en  $\Phi_{0,n} = \Phi_{N,n}$  ya que se supone la acción de un potencial infinito que confina la onda. Conociendo esto, se puede definir la expresión de un primer algoritmo de la siguiente forma:

$$\Phi_{j,n+1} = e^{-isH} \Phi_{j,n} \quad (12)$$

Si  $s$  es suficientemente pequeño, el operador de evolución  $\exp(-isH)$  se puede tratar como su desarrollo de Taylor a primer orden en  $t$ . Operador Hamiltoniano no es más que la aplicación de una derivada segunda lo que hace que su discretización espacial sencilla. La siguiente expresión forma el algoritmo resultante de aplicar estas aproximaciones:

$$\Phi_{j,n+1} = (1 - isH_D + O(sH_D)^2) \Phi_{j,n} \quad (13)$$

donde

$$\Phi''_j \equiv \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} = \frac{1}{h^2} (\Phi_{j+1} - 2\Phi_j + \Phi_{j-1}) + O(h^2) \quad (14)$$

y  $H_D$  viene dado por

$$H_D f_i = -\frac{1}{h^2} (f_{j+1} - 2f_j + f_{j-1}) + V_j f_i \quad (15)$$

con  $V_j = V(jh)$ . Esta gran simplificación presenta un inconveniente: el operador  $(1 - isH)$  no es unitario. Esto implica que durante la iteración del algoritmo para encontrar la evolución de la función de onda variará con el tiempo, lo que es incompatible con

la restricción expresada en (3) y viola la interpretación de Born. Entonces, se debe encontrar un operador unitario evolución temporal haciendo uso de la aproximación de Cayley en este caso.

$$e^{-isH} \simeq \frac{1 - isH_D/2}{1 + isH_D/2} \quad (16)$$

que conduce al algoritmo

$$\Phi_{j,n+1} = \frac{1 - isH_D/2}{1 + isH_D/2} \Phi_{j,n} \quad (17)$$

Nótese que además de ser unitario, este operador es exacto hasta orden  $(sH_D)^2$ . Para completar el algoritmo, se reescribe la anterior ecuación como:

$$\Phi_{j,n+1} = \left( \frac{2}{1 + isH_D/2} - 1 \right) \Phi_{j,n} = \chi_{j,n} - \Phi_{j,n} \quad (18)$$

donde

$$\chi_{j,n} \equiv \frac{2}{1 + isH_D/2} \Phi_{j,n} \quad (19)$$

La solución se puede escribir en forma explícita como:

$$\chi_{j+1,n} + \left[ -2 + \frac{2i}{\tilde{s}} - \tilde{V}_j \right] \chi_{j,n} + \chi_{j-1,n} = \Phi_{j,n} \quad (20)$$

donde  $\tilde{s} = s/h^2$  y  $\tilde{V} = Vh^2$ . El algoritmo de evolución ya ha quedado bien definido pero quedaría resolver la ecuación del tipo (17). Para ello hay que resolver un conjunto de ecuaciones de la forma:

$$A_j^- \chi_{j-1,n} + A_j^0 \chi_{j,n} + A_j^+ \chi_{j+1,n} = b_{j,n}; j = 1, \dots, N-1 \quad (21)$$

con

$$\begin{cases} A_j^- = 1 \\ A_j^0 = -2 + \frac{2i}{\tilde{s}} - \tilde{V}_j \\ A_j^+ = 1 \end{cases} \quad (22)$$

Con las condiciones de contorno, se supone que su solución es de la forma

$$\chi_{j,n} = \frac{A_j^-}{A_j^0 + \alpha_j A_j^+} \chi_{j-1,n} + \frac{b_{j,n} - A_j^+ \beta_{j,n}}{A_j^0 + \alpha_j A_j^+} \quad (23)$$

Identificando las recurrencias correspondientes sustituyendo en (19), se pueden definir los coeficientes alfa y beta como:

$$\begin{cases} \alpha_{j-1} = A_j^- \gamma_j \\ \beta_{j,n} = \gamma_j (b_{j,n} - A_j^+ \beta_{j,n}) \end{cases} \quad (24)$$

donde  $\gamma_j^{-1} = A_j^0 + A_j^+ \alpha_j$ . Se tiene una relación de recursividad inversa para luego hacer la recurrencia de las  $\chi_{j,n}$  de forma creciente y tener el avance de la función inicial  $\Phi_{j,0}$ . Quedaría definir la función de onda inicial y el potencial que se quiere estudiar.

## 2. Estudio a realizar

Utilizaremos en este caso la función de onda plana con una amplitud gaussiana:

$$\Phi(x, 0) = e^{ik_0 x} e^{-(x-x_0)/2\sigma} \quad (25)$$

Notemos que con esta elección, la densidad de probabilidad de encontrar inicialmente la partícula en un punto  $x$  es una gaussiana centrada en  $X_0$  y de anchura  $\sigma$ . Para facilitar el trabajo con complejos en C, se dispone de la biblioteca 'complex.h'. El número de oscilaciones completas que la función de onda tiene sobre la red depende de  $k_0 N h = 2\pi n_{ciclos}$ . Sabiendo esta definición, se dará directamente el valor de  $n_{ciclos}$ . Se restringe el parámetro  $n_{ciclos}$  a los valores  $1, \dots, N/4$  para que tenga más sentido físico. La posición media inicial y la anchura de la gaussiana  $x_0 = Nh/4$  y  $\sigma = N/h/16$ . Por último, el potencial que será una barrera de potencial. Esta estará en el centro, tendrá una anchura  $N/5$  y su altura será proporcional a la energía de la función de onda incidente.

$$\Phi_{j,0} = e^{i\tilde{k}j} e^{-8(4j-N)^2/N^2} \quad (26)$$

$$\tilde{V} = \begin{cases} \lambda \tilde{k}_0^2 & j \in [2N/5, 3N/5] \\ 0 & \text{Otro} \end{cases} \quad (27)$$

Para determinar el parámetro  $\tilde{s}$ , lo óptimo es elegir  $\|H\| s < 1$ , esto es,  $k_0^2 s < 1$ . Por lo que en este caso se toma  $\tilde{s} = 1/4\tilde{k}_0^2$ .

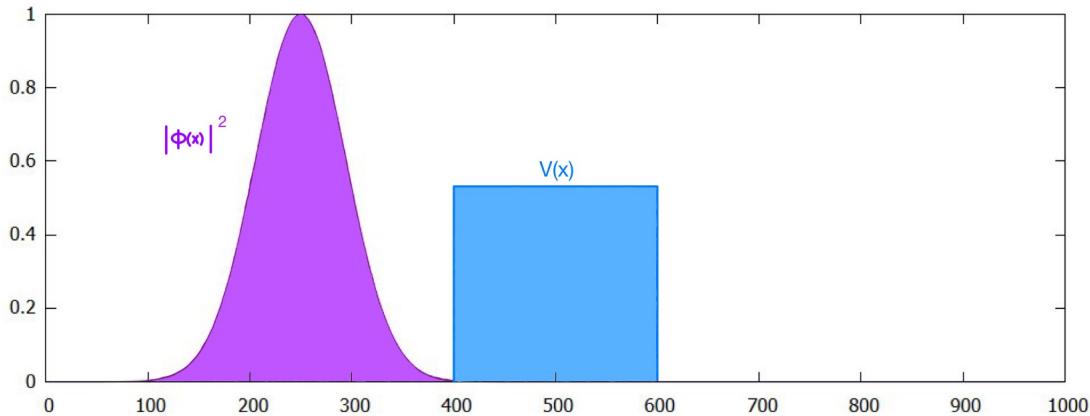


Figura 1: Representación de la función de onda y la barrera de potencial.

### 2.1. Coeficiente de transmisión

Se supone unos detectores finitos, actuando a ambos lados de la barrera. Si estos detectores tienen un ancho de  $N/5$ , la probabilidad a tiempo  $n$  de detectar la partícula

a la derecha vendrá dado por:

$$P_d(n) = \sum_{j=4N/5}^N |\Phi_{j,n}|^2 \quad (28)$$

, y la probabilidad de detectarla a la izquierda es:

$$P_i(n) = \sum_{j=0}^{N/5} |\Phi_{j,n}|^2 \quad (29)$$

Realizaremos la simulación  $m$  veces calculando el coeficiente de transmisión y el parámetro  $m_T$ . Este último parámetro será el número de veces que se ha detectado la partícula a la derecha de la transmisión. El coeficiente de transmisión se calcula como  $K = m_T/m$ . Si la partícula es detectada no hace falta continuar con la simulación, pero si no se detecta hay que proyectarla. Esto significa que a cada paso que no haya detección hay que hacer los coeficientes  $\Phi_j = 0$  para  $j \in [4N/5, N]$  si hemos aplicado el detector derecho,  $\Phi_j = 0$  para  $j \in [0, N/5]$  si ha sido el izquierdo. Para garantizar la normalización tendremos que calcular tras cada paso el valor  $k = \sum_{j=0}^N |\Phi_j|^2$  y multiplicar todos los elementos de la función de onda de la manera  $\Phi_j = \frac{1}{\sqrt{k}}\Phi_j$ . Para detectar una partícula se sortea un numero aleatorio generado por la biblioteca GNU Scientific Library, si este es menor que la probabilidad de encontrar la partícula en la longitud del detector, se da por detectada. Para garantizar la normalización se tendrá que calcular tras cada paso el valor de la norma y normalizar la función. Los detectores solo se activaran tras pasado un tiempo  $n_d$ . Para obtener una buena estadística tomaremos los siguientes parámetros en nuestras simulaciones:

- Se estudiará la dependencia con  $N$  haciendo simulaciones para  $N=500, 1000$  y  $2000$
- Se estudiaron 1000 detecciones en cada ciclo.
- Se estudiará la dependencia con el potencial ( $\lambda = [0,1, 1]$  aumentando  $\lambda$  en 0.1 y  $\lambda = [1, 10]$  aumentando  $\lambda$  en 1.
- Se realizará con un  $n_d = 1000$ .

Además realizaré otro estudio en el que dejaré fijos  $N$  y el potencial para analizar dichos valores respecto de  $n_d$ . Para obtener una visión simplificada del algoritmo de detección se expone en la siguiente Figura un diagrama de flujo de dicho algoritmo:

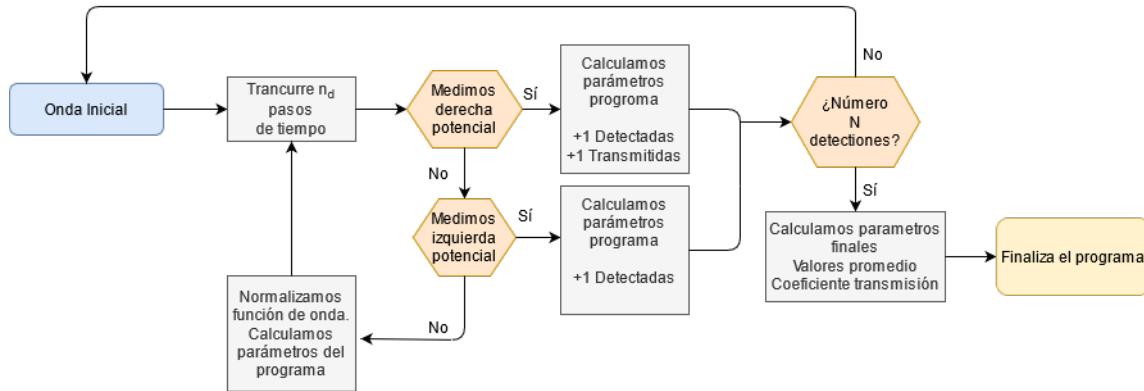


Figura 2: Diagrama de flujo del algoritmo expuesto en el informe (Apartado 3).

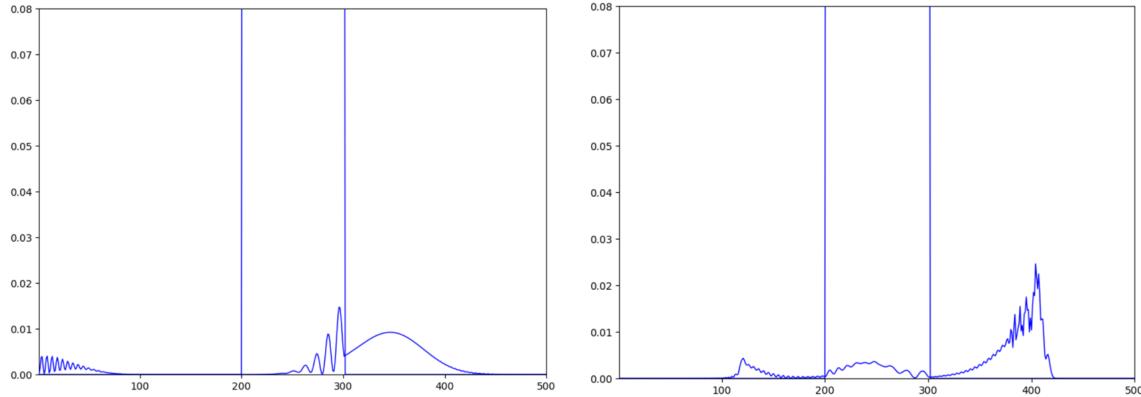


Figura 3: Proceso antes (imagen izquierda) y después (imagen a la derecha) de la medida en la simulación.

## 2.2. Incertidumbre de la función de onda

Aunque no nos es posible calcular con toda precisión la posición y el momento simultáneamente, si podemos determinar el momento y posición promedios. Esto hace que sea posible comprobar que se cumpla el principio de incertidumbre de Heisenberg en la onda:

$$\frac{\hbar}{2} \leq \Delta x \Delta p \quad (30)$$

sabiendo que  $\Delta a = \sqrt{\langle a^2 \rangle - \langle a \rangle^2}$ .

La posición y el momento de la partícula se calcula discretizando las integrales de los operadores mencionados en la teoría y tomado la derivada de x como la pendiente

de la recta entre el punto y su anterior. Se obtienen las siguientes expresiones:

$$\langle x \rangle = \sum_{i=0}^N \Phi_i^* i \Phi_i \quad (31)$$

$$\langle p \rangle = \sum_{i=0}^N -\Phi_i^* (\Phi_i - \Phi_{i-1}) \quad (32)$$

Dichos promedios se calcularán sobre tantas veces como se compruebe el detector.

### 3. Resultados y discusión

En este apartado expondré los diferentes resultados que he obtenido haciendo uso de mi simulación del coeficiente de transmisión y la incertidumbre asociada a la función de onda, discutiendo los diferentes resultados obtenidos.

#### 3.1. Coeficiente de transmisión y tiempo de detección

El objetivo de esta simulación es calcular el valor óptimo del parámetro  $n_d$  para poder realizar las simulaciones que nos piden con la mayor precisión posible sin perder el tiempo realizando cálculos que son innecesarios. Para este tipo de experimentos tendremos que fijar el número de pasos en el tiempo antes de activar la simulación los detectores. Tendremos que tener en cuenta que si el número de pasos no es lo suficientemente grande todas las partículas serán detectadas antes de llegar a interaccionar con el potencial, es decir, ninguna de las partículas se transmitirá o en el peor de los casos llegaría un punto en el que no detectase y quedarse confinada entre los detectores. Debido a esto la probabilidad de encontrar las partículas es mínima en los detectores y que no se obtenga ningún resultado a pesar del largo tiempo de ejecución del programa. Un ejemplo de esto ocurre cuando  $n_d = 1$  y  $n_d = 2$  no logrando obtener resultados tras 3 horas de ejecución.

Realizaré la simulación para  $N = 500$  manteniendo dicho valor constante y variando el potencial. En este caso los realizaremos cambios en el tiempo entre detección y detección. Dicho estudio se puede observar en la Figura 4:

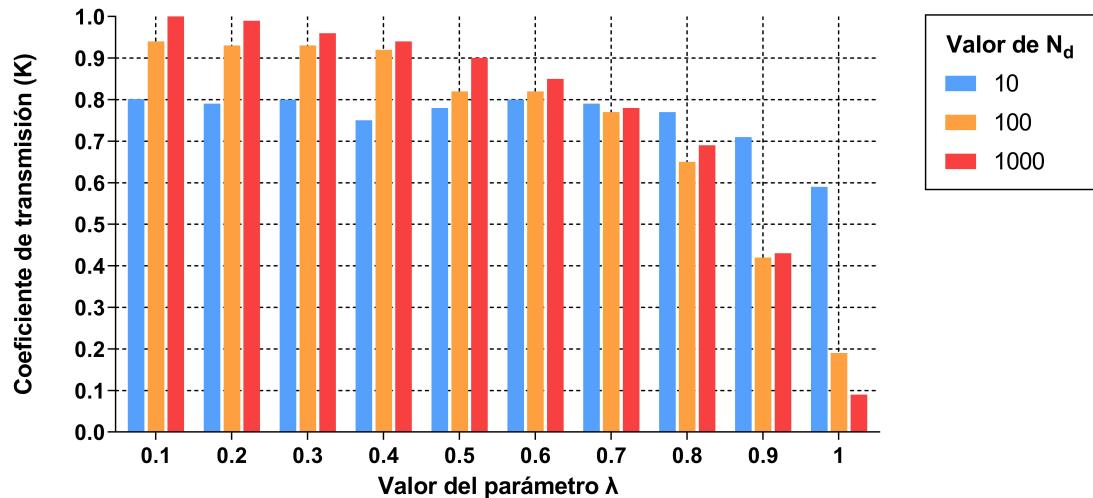


Figura 4: Coeficiente de transmisión en función de  $\lambda[0,1,1,0]$

Para un valor de  $n_d = 10$  no obtenemos valores esperados ya que se observa el decrecimiento exponencial esperado. Tampoco conseguimos que para un valor de potencial ( $\lambda$ ) bajo todas las partículas se transmitan, que sean detectadas a la derecha del potencial (tras haber pasado la barrera de potencial). Dicho estudio lo continuamos estudiando el caso para  $n_d = 100$ , caso en el cual se aprecia un decrecimiento pero aun no observamos una máxima transmisión para valores de potencial bajos. Por último estudiamos el caso para  $n_d = 1000$  en el cual vemos que conseguimos ambos objetivos, consiguiendo un valor óptimo para  $n_d$  sin aumentar significativamente el tiempo de simulación y consiguiendo unos resultados de precisión acordes con los de la teoría.

### 3.2. Coeficiente de transmisión

Los resultados obtenidos tras ejecutar la simulación para el coeficiente de transmisión para diferentes valores del potencial ( $\lambda$ ) y de  $N$  se muestran en las Figuras 5 y Figura 6:

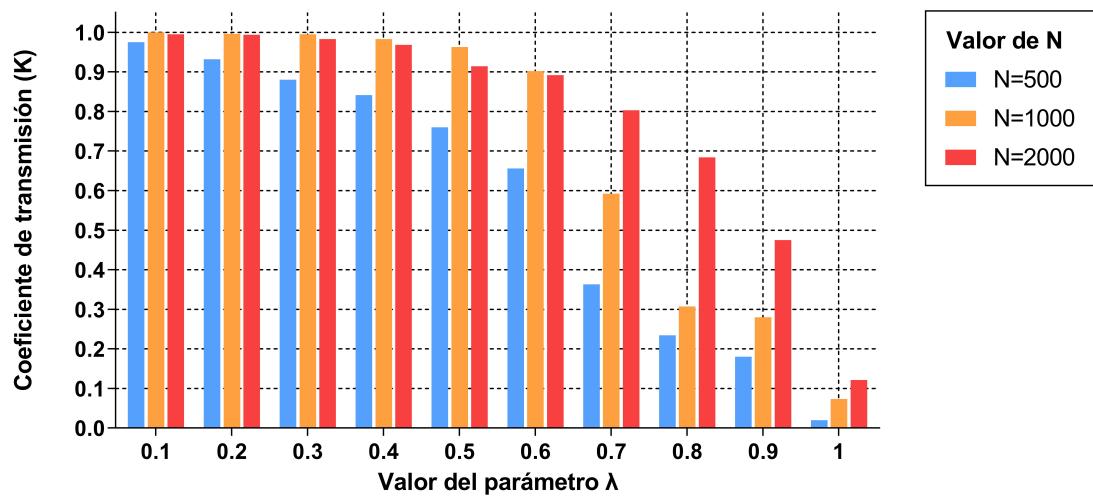


Figura 5: Coeficiente de transmisión en función de  $\lambda[0,1,1,0]$

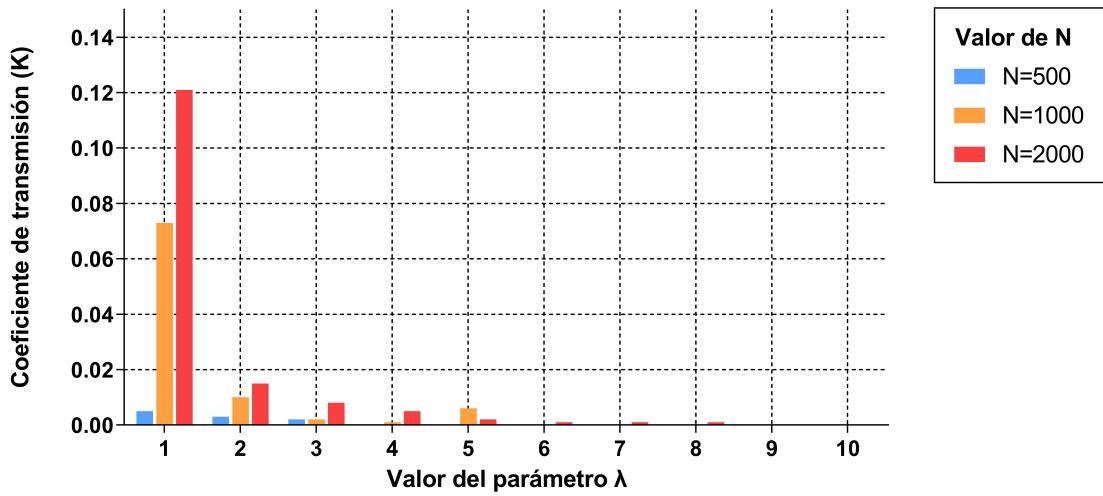


Figura 6: Coeficiente de transmisión en función de  $\lambda[1, 10]$

Podemos observar que con forme aumenta el potencial menor es la cantidad de partículas detectadas tras la barrera de potencial. Podríamos esperar que una vez que el coeficiente de transmisión alcanzará un valor nulo si aumentamos el potencial no encontrariamos partículas al otro lado de la barrera de potencial, sin embargo no siempre veremos esto en nuestra simulación. Podemos ver como para  $N = 1000$  y  $\lambda = 5$  detectamos partículas cuando por la tendencia de los resultados esperábamos no encontrar ninguna. Esto es debido a que la simulación reproduce efecto túnel en la función de onda tal y como cabría esperar ver en la naturaleza.

Podemos observar que para valores de potencial pequeños se tiene que el coeficiente de transmisión es prácticamente equivalente para los tres casos. Con forme aumentamos el potencial podemos ver con mayor claridad que existe un valor del potencial para el cual se produce una caída exponencial del número de partículas que se detecta a la derecha del potencial, el cual depende del número de puntos  $N$ . Si el valor de  $N$  es pequeño tendremos que se necesitará un valor menor de potencial para encontrar dicho punto de disminución de partículas detectadas en el segundo detector. Además podemos observar que dicha caída es más abrupta, es decir, presenta una mayor rapidez para los casos en los que el número de puntos  $N$  es mayor.

Dichos resultados se pueden extraer a una función de onda continua, obteniendo así que existe un potencial para el que la partícula no pueda cruzar a través de él. Una vez que dicho valor se ha alcanzado la probabilidad de que cruce una partícula es mínima, pero no nula debida que tenemos que tener en cuenta el efecto túnel. Comparando los resultados obtenidos de nuestra simulación con aquellos esperados por la teoría y estos coincidir, podemos concluir que la simulación es correcta.

### 3.3. Incertidumbre de la función de onda

En este caso estudiare si para un potencial y función de onda determinados se viola el principio de incertidumbre de Heisenberg. Dicho valor de incertidumbre es  $\hbar/2 = 0,5$ . En la simulación calculamos los diferentes promedios de momento y posición. El mínimo valor que he encontrado tras varias veces de ejecución de mi simulación es de  $\Delta x \Delta p = 0,51942$  para  $N = 500$  y  $\lambda = 0,1$ . Podré afirmar pues que la simulación es correcta al obtener resultados teóricos correctos, en este caso cumplir el principio de incertidumbre de Heisenberg.

## 4. Conclusión

Tras resolver la ecuación de Schrödinger y el cálculo del coeficiente de transmisión de una onda que interactúa con un potencial mediante simulaciones numéricas he podido observar y comprobar, con los resultados predichos por la teoría, el correcto funcionamiento de dicha simulación. Se han obtenidos valores para el coeficiente de transmisión que disminuyen de una manera exponencial proporcional a la altura y la anchura de dicho potencial. Si se discretiza con menor precisión el coeficiente disminuía antes y más lentamente que si se hace una discretización con un mayor número de puntos. Se observa claramente el efecto túnel además de obtener un valor de de coeficiente de transmisión nulo para valores muy altos del potencial ( $\lambda$ ).

También se ha estudiado el tiempo de relajación de los detectores, obteniendo valores nulos o no válidos para  $n_d$  muy bajos y provocando un problema computacional en cuanto al tiempo de ejecución del programa para valores excesivamente altos.

Por último hemos podido calcular uno de los parámetros más importantes para determinar el correcto funcionamiento de la simulación, que se cumpla el principio de indeterminación de Schrödinger. En el caso de esta simulación se obtuvo un valor mínimo de  $\Delta x \Delta p = 0,51942$ , cumpliéndose así dicho principio.

Concluyendo así, al haber obtenidos valores que se ajustan con precisión a la teoría, el correcto funcionamiento de la simulación realizada para este experimento.

## Referencias

- [1] James Cresser. “The Schrodinger Wave Equation.” Department of Physics and Astronomy Faculty of Science Macquarie University. Última edición: 25 Mayo 2005.
- [2] Ibitola, Gilbert A., and Olanrewaju Ajanaku. “Quantum Mechanical Potential Step Functions, Barriers, Wells and the Tunneling Effect.” World Journal of Applied Physics, Science Publishing Group, 22 Dec. 2016, article. [wjap.org/html/10.11648.j.wjap.20160102.15.html](http://wjap.org/html/10.11648.j.wjap.20160102.15.html).