

Proyecto Python

Kevin Albeiro Zapata Ciro¹

1 Teoria general

La ecuacion de Schrödinger independiente del tiempo unidimensional esta dada por:

$$[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)]\psi(x) = E\psi(x) \quad (1)$$

Donde \hbar es la constante de planck reducida; m es la masa de la particula; $V(x)$ es el potencial al que esta sujeto la particula y se asumira independiente del tiempo; E es la energia total de la particula; y $\psi(x)$ es la funcion de onda de la particula (en verdad es la funcion de onda en el tiempo $t = 0$).

Esta ecuacion puede interpretarse como uno de los postulados de la mecanica cuantica, y esta nos dara indicios de como es la evolucion del sistema (vease [1]). La ecuacion 1 se ha separado la parte espacial (asociada a x) con la parte temporal. La parte temporal tiene una solucion de la forma:

$$f(t) = ce^{-iEt/\hbar} \quad (2)$$

Por lo tanto, la funcion de onda estara dada por:

$$\psi(x, t) = \psi(x)f(t) = c\psi(x)e^{-iEt/\hbar} \quad (3)$$

Toda energia que cumpla 1 tendra asociado un $\psi(x)$, estas energias son conocidas como los eigen valores del operador Hamiltoniano y solo algunas son solucion a 1 (la energia no es un espectro continuo si no uno discreto; esto se puede justificar con que el Hamiltoniano es un observable y uno de los postulados, vease [1], indica que todo valores medibles son eigenvalores de algun observable), por eso en lugar de E , $\psi(x)$ y c se suelen denotar con E_n , $\psi_n(x)$ y c_n .

Por lo tanto, usando el principio de superposicion, la funcion de onda general esta dada por:

$$\psi(x, t) = \sum_{n=0} c_n \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar} \quad (4)$$

Aqui el n iria hasta todas las soluciones que tenga el sistema dado. Toda solucion que cumpla 4 se llama estado estacionario de la funcion de onda. Las constantes c_n pueden ser halladas con:

$$c_n = \int \psi_n^*(x) \psi(x, 0) dx \quad (5)$$

Y estas estan asociadas con la probabilidad y su normalizacion (otro de los postulados, vease [1]). En terminos generales, la densidad de probabilidad estara dada por $|\psi(x, t)|^2$.

1.1 Potencial de paredes infinitas

Si

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{para } 0 \leq x \leq \frac{a}{2} \\ \infty, & \text{otro lugar} \end{cases} \quad (6)$$

La solucion estara dada por:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{4}{a}} \sin\left(\frac{2n\pi}{a}x\right), \text{ para } 0 \leq x \leq \frac{a}{2} \quad (7)$$

$$\psi(x) = 0, \text{ para otro lugar} \quad (8)$$

1.2 Potencial paredes finitas

Si

$$V(x) = \begin{cases} -V_0, & \text{para } |x| \leq \frac{a}{2} \\ 0, & \text{otro lugar} \end{cases} \quad (9)$$

La solucion pueden ser simetricas o antisimetricas, respectivamente:

$$\psi(x)^{(+)} = \begin{cases} Be^{kx}, & \text{para } x < -\frac{a}{2} \\ D\cos(qx), & \text{para } |x| \leq \frac{a}{2} \\ Be^{-kx}, & \text{para } x > \frac{a}{2} \end{cases} \quad (10)$$

$$\psi(x)^{(-)} = \begin{cases} -Be^{kx}, & \text{para } x < -\frac{a}{2} \\ D\sin(qx), & \text{para } |x| \leq \frac{a}{2} \\ Be^{-kx}, & \text{para } x > \frac{a}{2} \end{cases} \quad (11)$$

$$\text{con } k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{-2mE} \text{ y } q = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E - V_0)}.$$

1.3 Potencial cuadratico (oscilador armonico cuantico)

Si

$$V(x) = x^2 \quad (12)$$

La solucion estara asociada a los polinomios de Hermite de la forma:

$$\psi_n(y) = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(y) e^{-y^2/2} \quad (13)$$

$$\text{Donde } y = \sqrt{\alpha}x, \alpha = \frac{m\omega}{\hbar} \text{ y } \omega = \sqrt{\frac{2}{m}}.$$

¹albeiro.zapata@udea.edu.co

2 Procedimiento

Se siguió el método propuesto en [4] para hallar los estados ligados de la energía E_n en el caso de las paredes finitas, el cual consiste en:

1. Tomar un valor de $x \ll -a$ para empezar un arreglo que ira aumentando hasta un punto de encuentro x_0 , junto con un valor de E_n .

2. Tomar el solucionador de ED numericas de python odeint para solucionar la ecuacion 1 desde el punto de inicio escogido hasta x_0 con las condiciones iniciales de posicion en 0 y velocidad en 1, generando una solucion "por la izquierda".

3. Tomar un valor de $x \gg a$ para empezar un arreglo que ira disminuyendo hasta un punto de encuentro x_0 .

4. Tomar el solucionador de ED numericas de python odeint para solucionar la ecuacion 1 desde el punto de inicio escogido hasta x_0 con las condiciones iniciales de posicion en 0 y velocidad en 1 (para la solucion simetrica) o -1 (para la solucion antisimetrica), generando una solucion "por la izquierda".

5. Tomar la derivada logaritmica por la izquierda en el punto x_0 y restarle la derivada logaritmica por la derecha en el punto x_0 , entre menor sea la diferencia entre estas dos derivadas mejor sera la aproximacion de E_n .

6. Se repetira el paso 1 para diferentes valores de E_n hasta encontrar todos los estados ligados de manera "manual".

7. Para verificar los valores y ver que se cumplan las condiciones de continuidad y suavidad se graficara $\psi(x)$.

8. Una vez hallados los estados ligados se graficaran las densidades de probabilidad, se hallara la solucion dependiente del tiempo y se graficara su densidad de probabilidad solucionando 5.

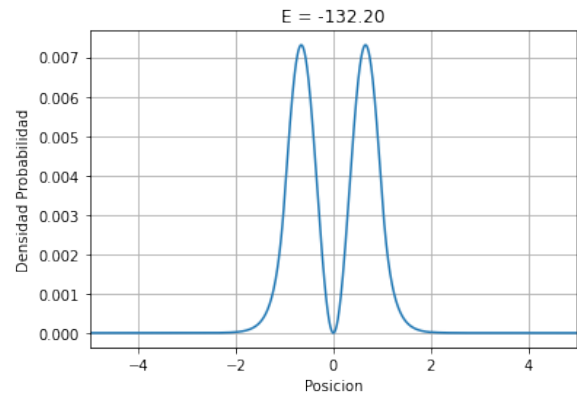
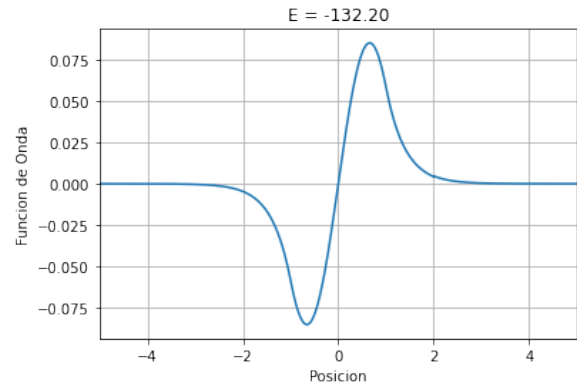
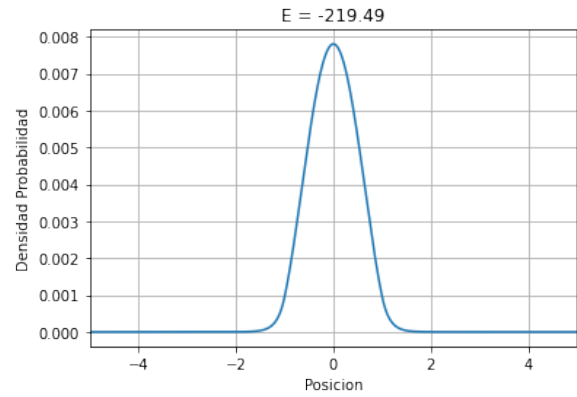
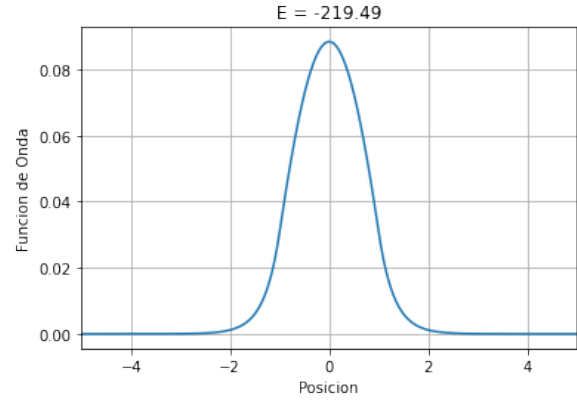
Todo el código usado y comentado se puede hallar en el github.

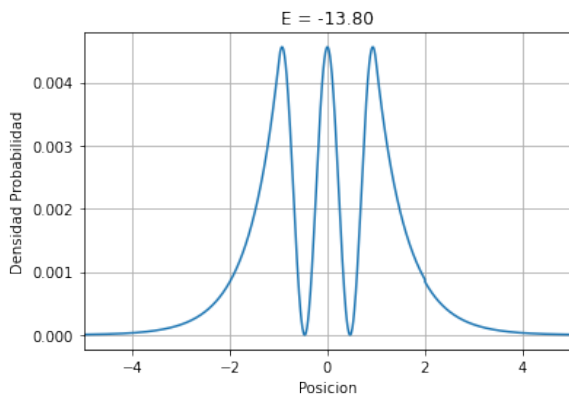
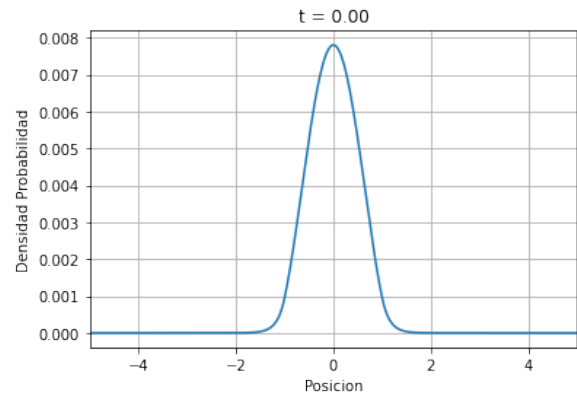
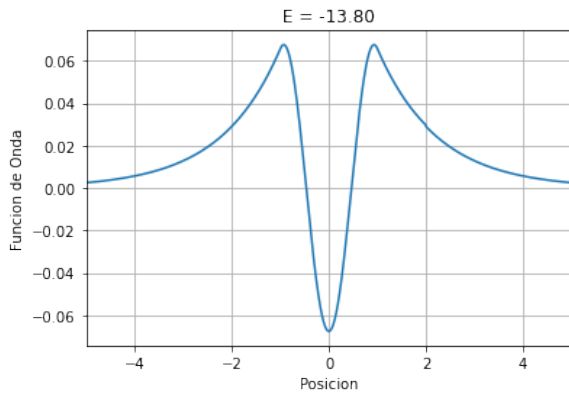
3 Resultados

Para solucionar el problema numericamente se usaron las constantes de $a = 2fm$, $-V_0 = -250MeV$ y $\frac{2m}{\hbar^2} \approx 0.0483MeV^{-1}fm^{-2}$, estos valores fueron tomados siguiendo como ejemplo a [4].

3.1 Potencial paredes finitas

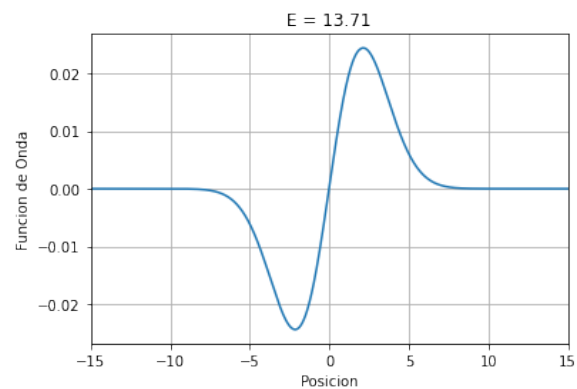
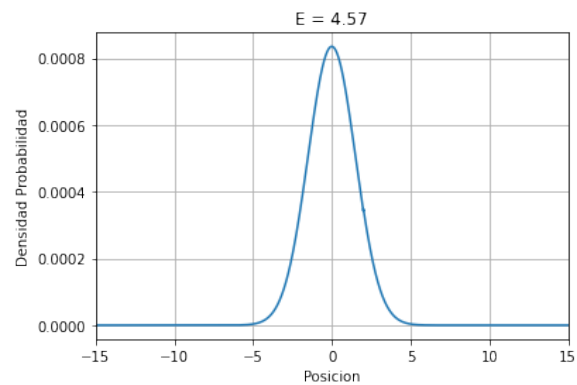
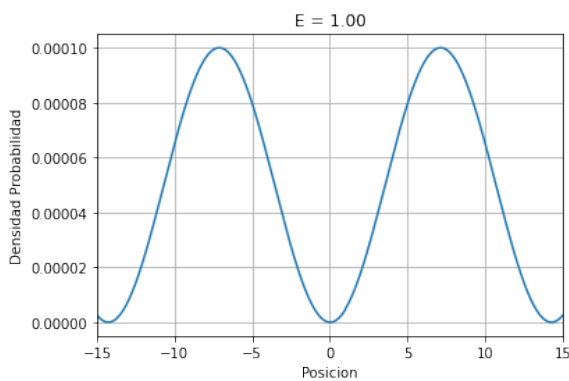
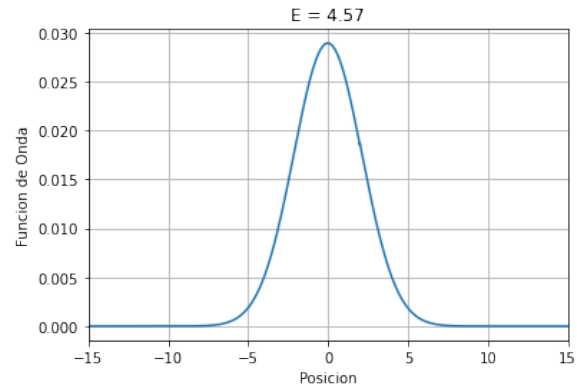
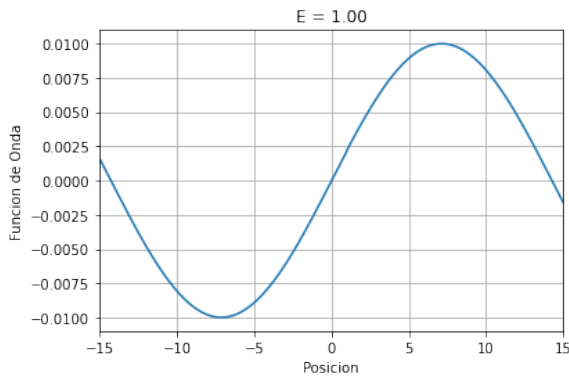
Los primeros cuatro niveles de energía hallados en este caso fueron (con sus respectivas densidades):



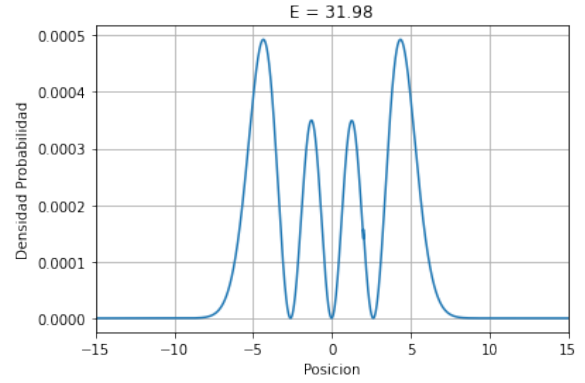
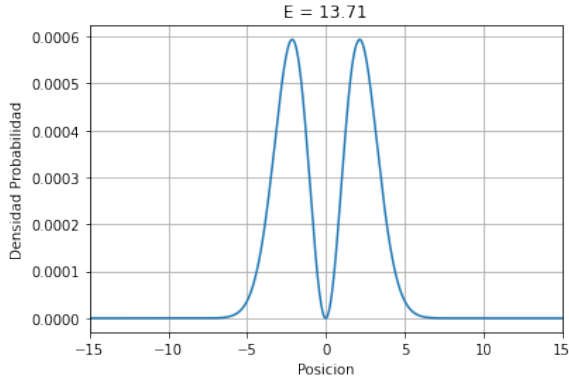


3.2 Potencial cuadrático

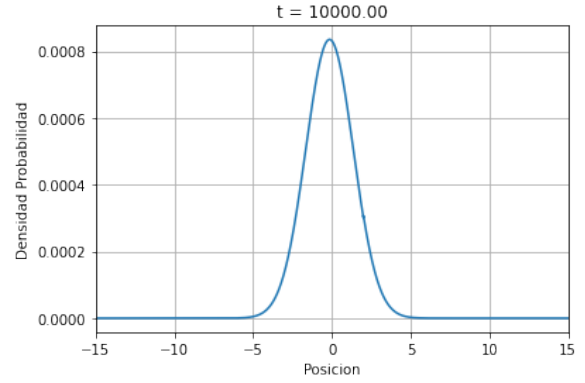
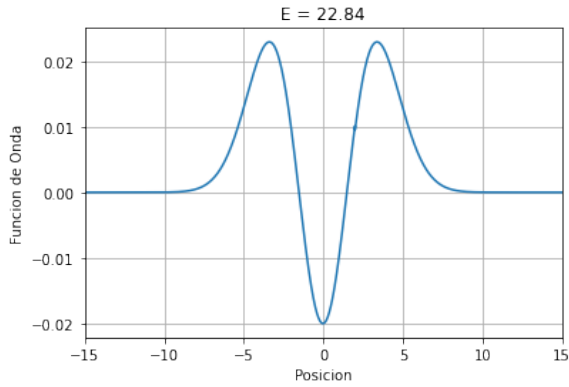
Los primeros cuatro niveles de energía hallados en este caso fueron (con sus respectivas densidades):



La densidad de la funcion de onda dependiente del tiempo en $t = 0s$ coincide con la densidad del primer nivel de energía y es:



La densidad de la funcion de onda dependiente del tiempo en $t = 1000s$:



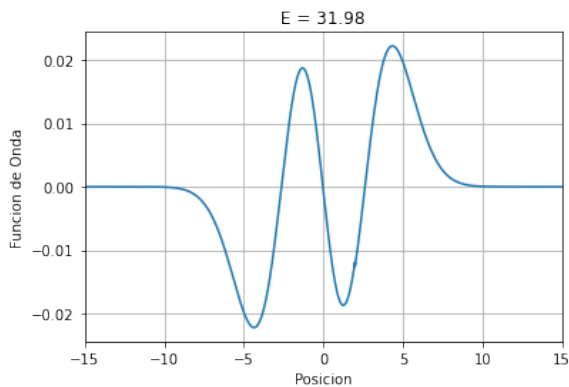
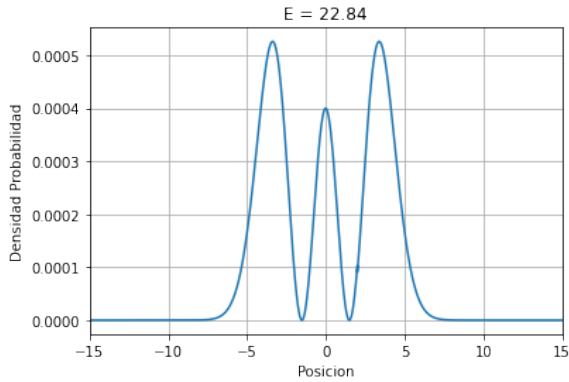
4 Conclusiones

Me basare en analisis grafico para evitar volver muy complejo el analisis. En general los resultados obtenidos estan bien dentro de las unidades de fm y MeV , un cambio en estas (para una unidad mas pequena) podria ocasionar underflows o overflows dentro del codigo por lo que se debe tener cuidado.

El metodo usado muestra ser eficaz y eficiente, aun asi se deben probar diferentes valores de energia a mano hasta hallar los valores que mejor se ajusten siguiendo el "criterio de las graficas" (que en el punto de union la solucion por la izquierda y por la derecha coincidan); en[4] proponen una manera de automatizar la busqueda (mediante un algoritmo de biseccion), pero esta puede hacer que el algoritmo sea ineficiente e ineficaz y por eso opte por no realizarla.

4.1 Teoria vs Resultados

La parte de el pozo de potencial coincide con las graficas que se suelen mostrar en la literatura (vease por ejemplo [3]), tambien se cambio el valor de V_0 y se vio que a menor pozo menos estados ligados aparecian, lo cual coincide enormemente con la teoria dada por ecuaciones en las que se intercepta una grafica de la tangente con una raiz cuadrada, generalmente presentada para solucionar este problema. Algo que en lo que



no coincidía es en los estados dados por la formula en la que aproximan las energias de estados ligados, generalmente dadas en la literatura (como en [1]) y que sale de la formula de la tangente; pero por falta de tiempo no pude estudiar bien la teoria y ver hasta que punto utilice bien esta formula.

La parte del oscilador armonico cuantico concide enormemente con las soluciones dadas en [2], donde los dos primeros niveles son limites clasicos y a medida que se aumenta la energia los estados ligados se deforman debido a la aparicion de los polinomios de Hermite. Este caso sirve para comprobar que el algoritmo soluciona bien el prooblema planteado, dandonos mas confianza para usarlo en futuros problemas.

En todos los casos el uso de la solucion dependiente del tiempo condujo a la misma grafica (misma distribucion de probabilidad), independientemente del tiempo que se usara.

References

- [1] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. Laloe. *Quantum mechanics*. Wiley-VCH, 1 edition, s.f.
- [2] Hyperphysics. Quantum harmonic oscillator, s.f. <http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbasees/quantum/hosc5.html>, accedido el 20-09-2021.
- [3] Hyperphysics. Schrodinger equation, s.f. <http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/quantum/pbox.html>, accedido el 20-09-2021.
- [4] R. H. Landau, M. J. Paez, and C. C. Bordeianu. *A Survey of Computational Physics Introductory Computational Science*, volume 1. Princeton University Press, 1 edition, 2010.