GRADO EN FÍSICA, CURSO 2023-2024

MECÁNICA CUÁNTICA

J. FERNÁNDEZ-ROSSIER
UNIVERSIDAD DE ALICANTE, OCTUBRE DE 2023

Guión de la primera sesión de practicas

1 Objetivos

Los objetivos principales de estas prácticas son:

1. Aprender a resolver la ecuación de Schrödinger en una dimensión de forma numérica, para potenciales arbitrarios. Consideramos los dos tipos de problemas, estados ligados y estados de scattering y presentamos un método numérico para cada uno de ellos.

2. Disponer de programas de Python que llevan a cabo estos cálculos e incluirlos en la *caja de herramientas*.

3. Estudiar el espectro de estados ligados de varios potenciales de interés en 1D.

4. Estudiar el efecto túnel y el efecto túnel resonante en problemas de scattering

2 Método de evaluación

El día **11 de Octubre** *se os entregarán dos problemas personalizados cuya solución requerirán que uséis los códigos de python las prácticas. Cada estudiante tendrá una tarea ligeramente diferente, dependiendo de la numeración de su DNI. Cada alumno entregará:*

- *Un documento pdf de 2 caras, fuente de 11 puntos, y un máximo de 3 figuras con la respuesta razonada a las tareas.*

- *El pequeño código python que tendréis que hacer para obtener las respuestas, invocando las funciones del programa que se entrega para las prácticas*

El tiempo estimado de elaboración de este informe, el código la solución de las tareas es de 2 horas. Se valorará la consecución de los objetivos listados en la sección anterior.

En el examen de a asignatura puede haber preguntas relativas a las prácticas. **Este informe cuenta un 10% de la nota final de la asignatura.**

Fecha límite de entrega:. 18 de Diciembre de 2021 CHECK, a media noche.

3 Teoría

Consulta el fichero de teoría del UA cloud y apuntes de la clase de 2 de octubre de 2023

4 Plan de trabajo durante las prácticas

1. Descarga los programas de la carpeta PRACTICAS NUMERICAS 1 del UA-CLOUD: *PRAC1-2023.py* y ábrelo
2. Familiarizate con las principales funciones del código: *ham, trans, plot-states, plotT*
3. Ejecuta python en el directorio donde hayas descargado el código (o abre un lector de python notebook como *jupyter* o *google collab*
4. Si estás usando el terminal, ejecuta el comando *exec(open("PRAC1-2023.py").read())*
5. Lleva a cabo las tareas sugeridas más abajo.

5 Errores frecuentes

- Asegúrate de que el potencial está bien definido dentro de la celda de simulación
- Comprueba que las funciones de onda que te interesan toman valores despreciables en los bordes de la celda de simulación
- En las tareas 3 y 8 comprueba que la variación de la distancia es mayor que el valor de a (longitud del retículo).

6 Tareas: Estados ligados

- **Tarea 1** Calcula numéricamente los $nmax \simeq 5$ primeros niveles de energía de un potencial tipo pozo infinito y de un potencial armónico. Si etiquetamos las estados en orden creciente de energía, con el índice $n = 1, 2, 3, ...$, comprueba que las energía del potencial infinito escalan con n^2 y que las energías del potencial armónico escalan linealmente con n.

- **Tarea 2** Estudia el problema de una partícula confinada en un pozo de potencial cuadrado, que toma valor $-V_0$, cuando $-\frac{d}{2} < x < \frac{+d}{2}$. Fija el valor de d y calcula el número de estados con $E < 0$ como función de V_0. Fijando el valor de V_0. Comprueba que, en el límite en el que V_0 es muy grande y d muy pequeño, siempre hay un estado ligado.

- **Tarea 3**. En el límite en el que tenemos un pozo infinitamente profundo y estrecho, el potencial se puede aproximar por una función Delta de Dirac. Con esta información, define una función que implemente la función Delta de Dirac $V(x) = -|V_0 a|\delta(x)$, donde V_0 tiene dimensiones de energía y a de longitud. Calcula la energía y función de onda del estado fundamental con $E < 0$ (estado ligado) y compara con la solución analítica:

$$E_B = -\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m}$$

$$\Psi(x) = e^{-\kappa|x|}$$

  con $\kappa = \frac{m|V_0 a|}{\hbar^2}$

7 Scattering

7.1 Comparación con resultado analítico

Tarea 4 Escribe una función que calcule la transmisión de la barrera cuadrada de anchura L, que viene dada por la fórmula, y altura V_0:

$$\begin{aligned} T(E) &= \frac{1}{1+\frac{V_0^2\sinh(k_b L)}{4E(V_0-E)}} \quad E > V_0 \\ T(E) &= \frac{1}{1+\frac{V_0^2\sin(k_b L)}{4E(V_0-E)}} \quad E < V_0 \\ T(E) &= \frac{1}{1+\frac{mL^2V_0^2}{2\hbar^2}} \quad E = V_0 \end{aligned} \tag{1}$$

donde

$$\begin{aligned} k_b &= \sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}} \quad E > V_0 \\ k_b &= \sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}} \quad E < V_0 \end{aligned} \tag{2}$$

Tareas:

- **Tarea 5** Compara las curvas $T(E)$, el resultado del cálculo numérico con el analítico, considerando varios valores de m, d y V_0

- **Tarea 6** Comprueba, numéricamente, cómo varía $T(E)$ en función del grosor de la barrera cuando $E < V_0$ (efecto túnel), para varios valores de m.

7.2 Estudio túnel resonante doble barrera

- **Tarea 7** Calcula numéricamente la curvas $T(E)$ de un potencial de doble barrera de la figura (1). Comprueba que, para ciertos valores de $E < V_0$, la transmisión puede ser mucho mayor para la doble barrera que para una única barrera, $T(E_R) = 1$. Este fenómeno se conoce como túnel resonante. Comprueba cómo depende E_r de m, d y W (masa de la partícula, distancia entre barreras, anchura de las barreras).

- **Tarea 8** Calcula numéricamente $T(E, d)$, variando d contínuamente, para unos cuantos valores de E. Deberías obtener una curva periódica.

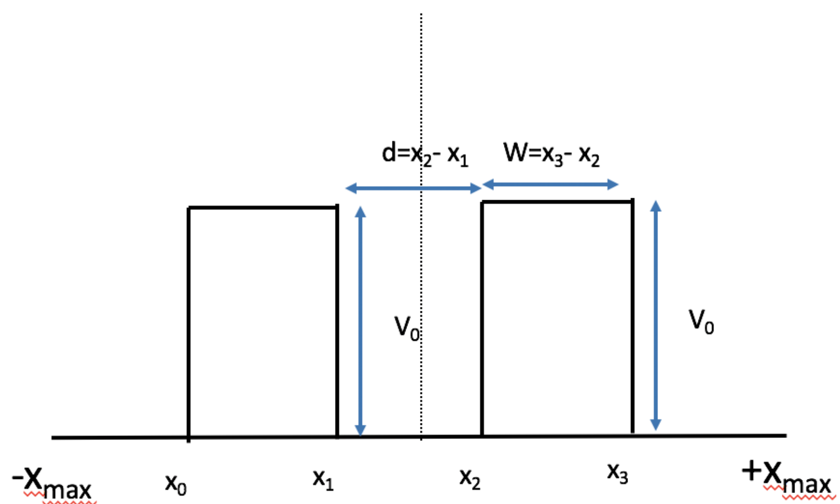

Figure 1: . Doble barrera de potencial.