Práctica Computacional: La Ecuación de Schrödinger §

I. PARTíCULA EN UNA CAJA DE POTENCIAL (*POTENTIAL BOX*)

A. Parte teórica

La figura 1 representa una "caja de potencial" unidimensional (1-d *potential box*). Resolver la Ecuación de Schrödinger y obtener el espectro de energías posibles del sistema.

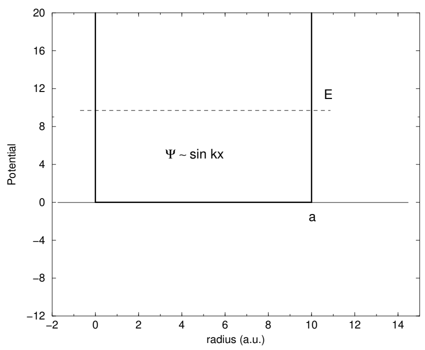


FIG. 1. Caja de potencial unidimensional, de ancho a.

`Procedimiento de solucion: separar el problema en distintos sectores, solucionarlos independientemente y hacer coincidir las funciones (y sus derivadas) en los bordes. Finalmente, normalizar las funciones.`

B. Preguntas

1. Qué particularidad tiene el espectro de energías?
2. Cuál es la mínima energía que puede tener una partícula (no es 0? por qué?)
3. Calcular $< \Psi_n|\Psi_m >$
4. Calcular $< x >= \int_0^\infty x|\Psi|^2 dx$ para los 4 primeros estados.
5. El estado básico de una partícula en una caja (1-d) es 4.4 eV. Cómo cambian las soluciones:
   - si el ancho de la caja se duplica?
   - si el potencial dentro de la caja es una constante U_0 en lugar de cero?
6. Un electron en el estado básico está atrapado en una región (1-d) de 1 Å:
   - Cuánta energía hay que darle para excitarlo al primer estado?
   - Cuál es la probabilidad de que el electrón esté entre 0.09 Å y 0.11 Å?
   - Cuál es la probabilidad de que el electrón esté entre 0 Å y 0.25 Å para el primer estado excitado?
   - En forma intuitiva, ¿cómo serán estas probabilidades en los siguientes estados? ¿Tienden a algún límite? ¿Por qué?

---

§ http://www.df.uba.ar/users/dmitnik/computation/schromath/caja/caja.html

7. Extender el problema general a una caja de 3 dimensiones (3-d).
   (a) Qué particularidad tienen las funciones ondas?
   (b) Qué particularidad tiene el espectro de energías cuando se trata de un cubo?

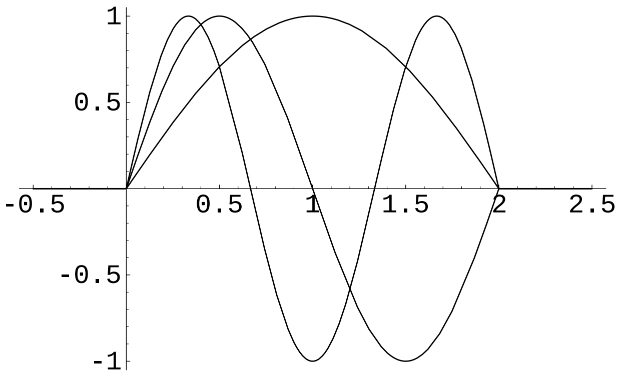
C. Parte computacional

El ejemplo (*Notebook*) SCHRO.NB puede ser utilizado en el programa MATHEMATICA, para resolver los siguientes ejercicios:

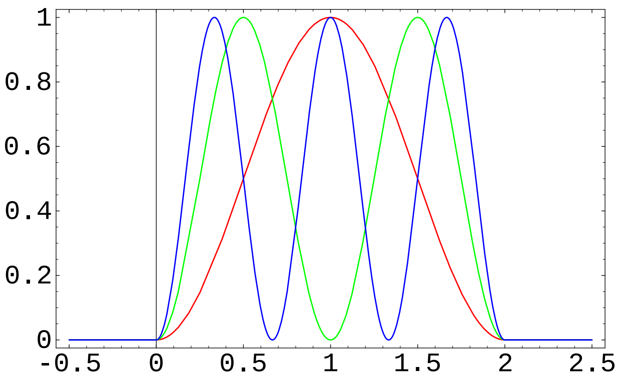
1. Hacer un gráfico con las tres primeras funciones de onda.
2. Comprobar numéricamente si las funciones son ortonormales.
3. Hacer un gráfico con las densidades de probabilidad.
4. Verificar los resultados de las probabilidades obtenidas en la pregunta (I-B-6).
5. Hacer un gráfico con la probabilidad de encontrar una partícula entre 0 y $\frac{a}{4}$, en función del índice de la función de onda.

Ecuacion de Schrodinger Independiente del Tiempo

```
(*--- Calculo de las funciones de onda en el pozo ---*)

phi[x_,n_Integer,a_] := If[0<x<a,Sqrt[2/a]*Sin[(n*Pi*x)/a],0];

Plot[ {phi[x,1,2],phi[x,2,2],phi[x,3,2]},{x,-1/2,5/2}];
```

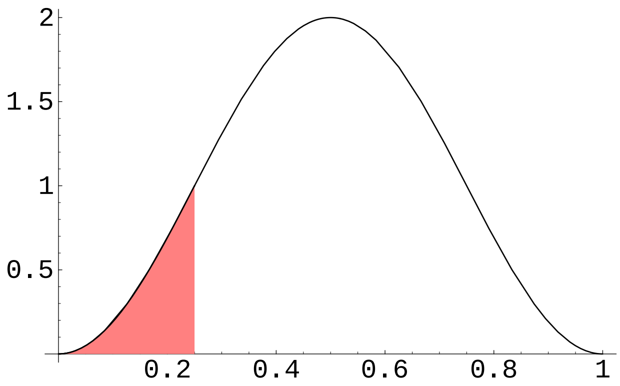



```
In[23]:=

(*---Calculo del Producto Escalar---*)

Ovlap[a_, n1_Integer, n2_Integer] :=
  NIntegrate[phi[x, n1, a] * phi[x, n2, a], {x, 0, a}, AccuracyGoal → 10^-10];

Ovlap[2, 1, 1]
Ovlap[2, 1, 2]

Out[24]= 1.

Out[25]= 3.40414 × 10^-17

In[15]:=

(*---Grafico de Probabilidades---*)

Plot[{phi[x, 1, 2]^2, phi[x, 2, 2]^2, phi[x, 3, 2]^2}, {x, -1 / 2, 5 / 2},
  PlotStyle -> {{RGBColor[1, 0, 0]}, {RGBColor[0, 1, 0]}, {RGBColor[0, 0, 1]}},
  Frame -> True, Ticks -> {{0, 0.5, 1, 1.5, 2}, {None}}];
```



In[16]:=

```
(*---Grafico de Probabilidades Parciales---*)

(*requiere FilledPlot*)
<< Graphics`FilledPlot`

t[liminf_, limsup_, n_Integer] :=
 FilledPlot[phi[x, n, 1]^2, {x, liminf, limsup}, Fills -> {RGBColor[1, .5, 0.5]}]

q = Plot[phi[x, 1, 1]^2, {x, 0, 1}]
a = Show[{q, t[0, 0.25, 1]} ];
```



In[20]:=

```
(*---Probabilidades Parciales---*)

ProbParc[liminf_, limsup_, n_, a_] := NIntegrate[phi[x, n, a]^2, {x, liminf, limsup}];

ProbParc[0.09, 0.11, 1, 1]
```

Out[21]= 0.0038303

In[22]:=

```
(*---Grafico de Probabilidades Parciales segun niveles de energia---*)

ListPlot[Table[ProbParc[0, .25, n, 1] * 100, {n, 1, 100}],
  PlotJoined -> True, PlotRange -> All];
```