

Métodos Computacionales en Nanomateriales

Profesor: Emmanuel de la Cruz Piña

Contacto: emmanuel.delacruz@uabc.edu.mx

1 de mayo del 2018

Práctica 5 - Estados Cuánticos y Superposición

En esta práctica se estudiarán métodos numéricos de integración, así como la descomposición de funciones dada una base. Para este estudio se le pedirá al estudiante resolver problemas básicos de mecánica cuántica que se emplearán posteriormente en el curso

Palabras clave: Superposición de estados, Integración Numerica, Niveles de energía, Pozo de potencial infinito

Introducción

Una de las implicaciones más sobresalientes de la mecánica cuántica es la discretización de niveles de energía. Es así como el modelo de atómico de Bohr toma completo sentido, ya que al resolver la dinámica entre electrones y núcleos a partir de la Ec. de Schrödinger la discretización de los niveles aparece.

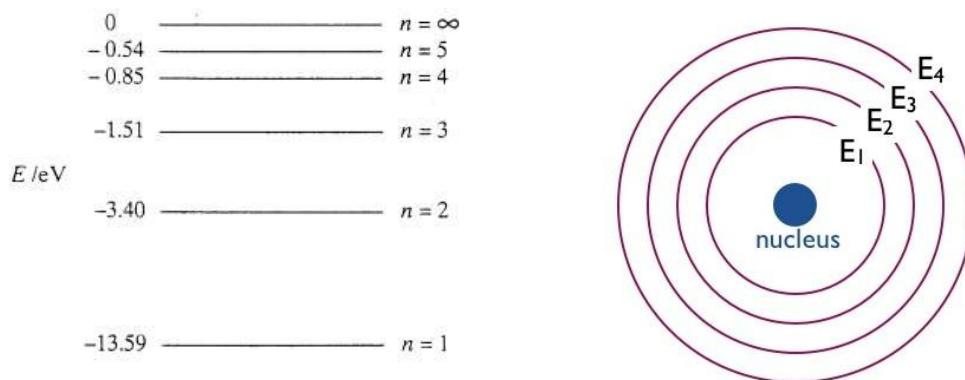


Figura 1. Niveles de energía del átomo de Hidrógeno

Uno de los principales fenómenos que enriquece a la mecánica cuántica es la superposición de estados. Es a partir de la superposición de estados que haces de electrones se pueden enrredar o que se entiende la emisión de ciertos niveles de energía en procesos de Química y de Estado Sólido (ver Figura 1).

La superposición de estados se da cuando una o más partículas se encuentran descritas por los estados característicos (eigen-funciones) de un sistema.

El ejemplo:

Uno de los ejemplos usuales para la ilustración de super-posición de estados es el del gato de Schrödinger, en el cual se tiene un sistema completamente aislado de su entorno. Dentro de la caja se encuentra un gato, un gas venenoso sujeto a un interruptor y un fotodetector junto a un átomo inestable. El átomo tiene un electrón en una superposición de estados $|n\rangle$ y $|n+1\rangle$, con $|n+1\rangle$ un estado inestable. Si la partícula se encuentra en $|n+1\rangle$ está decaerá a $|n\rangle$ emitiendo un fotón, el cual será detectado y activará el interruptor del contenedor liberando el gas para finalmente matar al pobre animal. Si el electrón colapsa al estado $|n\rangle$ no se generará decaimiento y el gato vivirá. Debido a que antes de cerrar la caja el electrón fue colocado en una superposición de estados $\psi = c_1 \cdot |n\rangle + c_2 \cdot |n+1\rangle$, se dice que el gato está en una superposición de vida y muerte. Es importante recalcar que *Schrödinger generó este experimento pensado para mostrar como problemas en mecánica cuántica no tienen su equivalente en el mundo macroscópico* (Ver Figura 2).



Figura 2. Gato de Schrödinger

Actividad:

Por sencillez, en lugar de un electrón sometido al potencial de un átomo se considera una partícula en el potencial de paredes infinitas (Pozo de potencial infinito) de ancho a , tal que si al retirar el potencial y se detecta que la energía de la partícula es mayor a ϵ_1 , la energía del primer estado, se generará una corriente que activará el interruptor.

La partícula se encuentra en una superposición de estados a $t=0$ descrita por la función de onda:

$$\psi(x, t = 0) = \sqrt{\frac{8}{5a}} \sin\left(\frac{\pi}{a}x\right) \left[1 + \cos\left(\frac{\pi}{a}x\right)\right]$$

con los estados y energías propios del pozo de potencial infinito

$$|n\rangle = \phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \quad , \quad E_n = \left(\frac{n\pi\hbar}{a}\right)^2 \frac{1}{2m}$$

1. Por el métodos numéricos vistos en clase, demuestra que la función de onda de la partícula está normalizada (su norma es 1).
2. Al mantener la caja cerrada no es posible saber la condición del gato ¿Cuál es la probabilidad de que el gato esté vivo?
3. ¿Cuáles son las probabilidades de medir cada una de las energías del sistema?
4. A partir de tu descomposición numérica y tus resultados, esboza usando GNUplot la función de onda de la partícula dentro del potencial para $t_0=0$, $t_1 = \frac{\pi \epsilon_1}{4 \hbar}$, $t_2 = \frac{\pi \epsilon_2}{4 \hbar}$

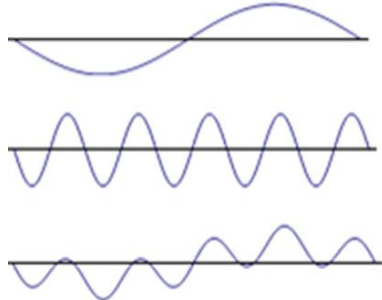
$$|\Psi\rangle = \frac{| \text{gato de pie} \rangle + | \text{gato acostado} \rangle}{\sqrt{2}}$$


Figura 3. Superposición de estados en cuántic.

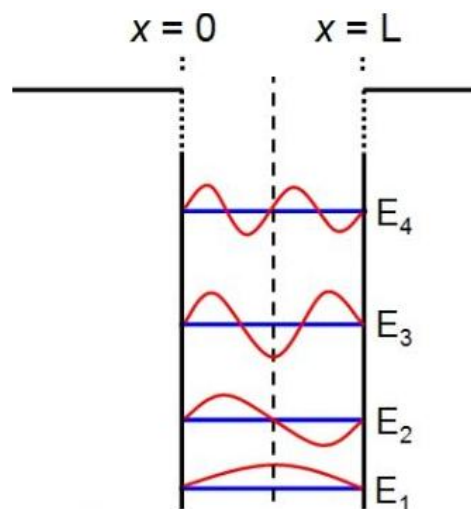


Figura 4. Niveles de energía y estados del pozo de potencial