

Métodos Computacionales en Nanomateriales

Profesor: Elmer Cruz Mendoza
email: elmer.cruz.mendoza@gmail.com

20 de abril de 2016

Práctica 7

En la presente práctica se solucionará la ecuación de Schrödinger considerando distintos potenciales unidimensionales. Particularmente, se analizarán el potencial cuadrado infinito y un doble pozo cuadrado simétrico. El objetivo es calcular las eigenenergías y las eigenfunciones características.

1. Mecánica Cuántica: Estados ligados

La ecuación de Schrodinger nos permite estudiar la dinámica de una partícula que se encuentra bajo la acción de un potencial. En el caso unidimensional, dicha ecuación puede expresarse como

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

En donde ψ es la función de onda, $V(x)$ es el potencial dependiente de la posición y E es la energía. La expresión (1) es una ecuación de eigenvalores, en donde los valores propios y funciones propias representan los estados ligados característicos del potencial al cual se encuentran sujetas las partículas.

Actividades:

- Investigar las aplicaciones de los modelos de potenciales unidimensionales (pozos y barreras cuánticas).
- Demuestre que si se hace el cambio de variable $x \rightarrow \tilde{x} = x/L$ la ecuación (1) puede reescribirse de manera adimensional como

$$\frac{d^2\psi(\tilde{x})}{d\tilde{x}^2} + (\epsilon - v(\tilde{x}))\psi(\tilde{x}) = 0, \quad (2)$$

en donde $v(\tilde{x}) = \frac{2mL^2}{\hbar^2}V(x)$ y $\epsilon = \frac{2mL^2}{\hbar^2}E$.

- Resuelva la ecuación (2) para el pozo cuántico infinito (Fig. 1 I), en el cual el potencial está dado de la siguiente manera

$$v(x) = \begin{cases} 0 & \text{para } 0 \leq x \leq L \\ \infty & \text{para } x < 0 \text{ y } x > L \end{cases} \quad (3)$$

- Encuentre analíticamente las soluciones de la ecuación (2) para este potencial y determine las eigenenergías.
- Ahora, resuelva (2) de manera numérica obtenga las eigenfunciones y eigenenergías y compare con los resultados obtenidos analíticamente.
- verifique que la solución final obtenida se encuentre normalizada, es decir que cumpla

$$\int \psi^*(x)\psi(x)dx = 1 \quad (4)$$

- Resuelva numéricamente la ecuación (2) para el doble pozo (ver Fig. 1 II) cuantico definido como

$$v(x) = \begin{cases} 0 & \text{para } 0 < x < a \\ V_0 & \text{para } a \leq x \leq 2a \\ 0 & \text{para } 2a < x < L \\ \infty & \text{para } x \leq 0 \text{ y } x \geq L \end{cases} \quad (5)$$

- Calcule las eigenfunciones y eigenenergías.
 - Normalice la solución.
- Escriba un reporte con formato de artículo científico con los resultados obtenidos.

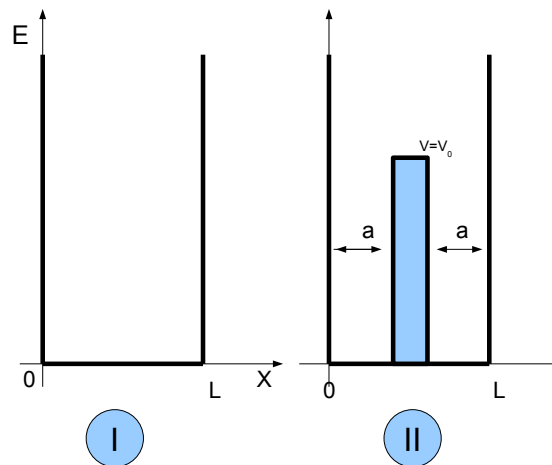


Figura 1: I) Pozo cuántico y II) doble pozo cuántico simétrico.