UNIVERSIDAD DE GRANADA

FACULTAD DE CIENCIAS

Propuesta TFG. Curso 2024/2025

GRADO: Grado en Física

CÓDIGO DEL TFG: 267-072-2024/2025

1. DATOS BÁSICOS DEL TFG:

Título: Estudio de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo y sus aplicaciones

Descripción general (resumen y metodología):

Breve descripción del trabajo:

En este trabajo se propone resolver la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo para diferentes condiciones iniciales. Esto nos permitirá analizar el comportamiento físico de la función de onda en presencia de diferentes potenciales, por lo que podremos estudiar una multitud de fenómenos tales como el efecto túnel, los coeficientes de reflexión y transmisión o la regeneración de la función de onda. Para ello haremos uso del llamado algoritmo de Crank-Nicolson en el que el operador de evolución es unitario (a diferencia del simple truncamiento del operador exponencial a segundo orden). Como objetivo más ambicioso intentaremos extender nuestros resultados a dos dimensiones, generalizando por tanto el algoritmo ya mencionado al caso bidimensional. De esta manera podremos estudiar fenómenos muy interesantes y pedagógicos tales como el famoso experimento de la doble rendija. Por último, y si el tiempo disponible lo permite, intentaremos conectar estas ideas con la teoría de grandes desviaciones, donde se ha demostrado que el cálculo de la probabilidad de grandes fluctuaciones o eventos raros (así como las trayectorias que dan lugar a los mismos) en sistemas gobernados por una ecuación de tipo Langevin, se pueden reducir al problema de encontrar la energía del estado fundamental en sistemas cuánticos.

Metodología:

Para abordar el estudio que aquí se propone, se hará uso tanto de simulaciones por ordenador como de herramientas analíticas. Desde el punto de vista de simulación, se hará uso –como ya hemos mencionado-- del algoritmo de Crank-Nicolson, dado que presenta un operador de evolución que conserva la propiedad de unitariedad. Además, nosotros pretendemos extender dicho algoritmo a dos dimensiones. Esto implica la inversión de grandes matrices tridiagonales en cada paso temporal, lo que constituirá un reto computacional para llevarlo a cabo de manera eficiente. Desde el punto de vista analítico haremos uso de las herramientas habituales para abordar el estudio del problema desde un punto de vista espectral.

Tipología: Estudio de casos, teóricos o prácticos, relacionados con la temática del Grado.

Objetivos planteados:

- Inicialmente se resolverá numéricamente la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo para cualquier condición inicial en un pozo infinito. Esto se llevará a cabo en una dimensión y usando el algoritmo de Crank-Nicolson. De esta forma nos adentrarnos en los detalles de dicho algoritmo para un caso sencillo.
- Seguidamente se estudiará el comportamiento de un paquete Gaussiano en presencia de diferentes potenciales, tales como la barrera de potencial, el pozo cuadrado, o el oscilador armónico cuántico. Exploraremos a su vez la posibilidad de observar el fenómeno de la regeneración cuántica en el régimen adecuado de energías (comportamiento cuasi-clásico). Se podrá estudiar también el efecto túnel, así como los coeficientes de transmisión y reflexión.
- Extenderemos el algoritmo al caso bidimensional con el fin de reproducir el experimento de la doble rendija modificando tanto la función de onda inicial, como las características de la rendija (anchura, posición, una o dos aberturas, etc).
- Por último, si el tiempo disponible lo permite, aplicaremos lo estudiado al campo de las grandes desviaciones, donde la probabilidad de fluctuaciones dinámicas (altamente improbables) en sistemas gobernados por una ecuación de tipo Langevin , se puede estudiar a partir de la energía

del estado fundamental de ciertos sistemas cuánticos.

Bibliografía básica:

1. Bransden, B. H., and Joachain, C.J., Introduction to quantum mechanics. (1989)
2. Visscher, P. B. A fast explicit algorithm for the time-dependent Schrödinger equation. Computers in Physics 5.6 (1991)
3. Robinett R. W., Quantum wave packet revivals, Physics Reports 392 (2004)
4. Styer D. F., Quantum revivals versus classical periodicity in the infinite square well, Am. J. Phys. 69 (2001)
5. Touchette, H., Introduction to dynamical large deviations of Markov processes. Physica A: Statistical Mechanics and its Applications 504 (2018)
6. Tsobgni Nyawo P. and Touchette H., A minimal model of dynamical phase transition, Europhys. Lett. 116, 50009 (2016)

Recomendaciones y orientaciones para el estudiante:

Plazas: 1

2. DATOS DEL TUTOR/A:

Nombre y apellidos: CARLOS PÉREZ ESPIGARES

Ámbito de conocimiento/Departamento: FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA

Correo electrónico: carlosperez@ugr.es

3. COTUTOR/A DE LA UGR (en su caso):

Nombre y apellidos:

Ámbito de conocimiento/Departamento:

Correo electrónico:

4. COTUTOR/A EXTERNO/A (en su caso):

Nombre y apellidos:

Correo electrónico:

Nombre de la empresa o institución:

Dirección postal:

Puesto del tutor en la empresa o institución:

5. DATOS DEL ESTUDIANTE:

Nombre y apellidos: JUAN MIGUEL PADILLA GALERA

Correo electrónico: jmpadillagal@correo.ugr.es