UNIVERSIDAD DE GRANADA

FACULTAD DE CIENCIAS

Propuesta TFG. Curso 2025/2026

GRADO: Doble Grado en Física y Matemáticas

CÓDIGO DEL TFG: 295-021-2025/2026

1. DATOS BÁSICOS DEL TFG:

Título: Resolución de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo: aplicaciones a problemas 1D en Mecánica Cuántica

Descripción general (resumen y metodología):

En Mecánica Cuántica es usual plantear problemas con potenciales monodimensionales para entender elementos fundamentales de la misma. Una barrera de potencial, un pozo de potencial o un potencial periódico son ejemplos típicos que pueden encontrarse en cualquier libro de texto de esta disciplina.

En general, para obtener las soluciones de esos problemas se resuelve la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, considerando ondas planas y estudiando el comportamiento de las mismas en las diferentes regiones espaciales que delimitan las características de los potenciales. Sin embargo, una onda plana no describe de forma adecuada el movimiento real de una partícula ya que al tener un momento definido se extiende a todo el espacio.

Para tener una descripción correcta de una partícula es necesario construir “paquetes de ondas” que

garanticen una posición bien definida para la misma. Esto introduce complicaciones serias a la hora de resolver los problemas antes mencionados, incluso en las situaciones más sencillas.

La resolución numérica de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo es una alternativa viable que permite obtener las soluciones de los distintos problemas de manera sencilla con cualquier ordenador hoy en día.

El propósito de este trabajo es, además de analizar varios ejemplos sencillos en 1D usando el formalismo de “paquetes de ondas”, discutir algunos métodos numéricos empleados para la resolución numérica de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo.

En primer lugar, se comenzará con una introducción básica a algunos conceptos matemáticos fundamentales sobre sobre ecuaciones diferenciales en derivadas parciales. Posteriormente, se hará un análisis exhaustivo del modelo explícito, implícito y Crank-Nicolson, siempre en el marco del método de diferencias finitas, además de analizar las características relativas a la precisión y estabilidad de las soluciones. Finalmente, se emplearán dichos métodos a la resolución numérica de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo. Se eligirán condiciones de contorno tipo Dirichlet para estudiar la evolución temporal de un paquete de ondas gaussiano, aplicando diversos potenciales. En los casos que sea posible, se comparará con la solución analítica.

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

Objetivos planteados:

1. Formulación de problemas monodimensionales de mecánica cuántica mediante paquetes de ondas.
2. Estudio de los conceptos matemáticos fundamentales relativos a las ecuaciones diferenciales en derivadas parciales.
3. Resolución de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo mediante algoritmos numéricos y análisis de la idoneidad de los mismos.
4. Resolución numérica de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo, usando los algoritmos analizados en la sección anterior: aplicación a problemas monodimensionales básicos de Mecánica Cuántica y comparación con la solución analítica, cuando sea posible.

Bibliografía básica:

[1] C. Cohen-Tannoudji, et al., “Quantum mechanics”. Wiley-VCH, 2005.
[2] B.H. Bransden, C.J. Joachain, “Quantum mechanics”. Pearson, 2000.
[3] A. Galindo, P. Pascual, “Mecánica cuántica”. Vol. 1 y 2; Eudema; Madrid, 1989.
[4] L. D. Landau, E. M. Lifshitz, “Curso de física teórica, vol. 3: Mecánica Cuántica (Teoría norelativista)”. Reverté, 1978.
[5] A. Messiah, “Mecánica cuántica”. Tecnos, 1973.
[6] R.W. Robinett, “Quantum mechanics: classical results, modern systems, and visualized examples”. Oxford Univ. Press, 2006.
[8] A.Z. Capri, “Problems and solutions in nonrelativistic quantum mechanics”. World Scientific, 2002.
[10] A. Galindo, P. Pascual, “Problemas de mecánica cuántica”. Eudema, 1989.
[11] Y.K. Lim, “Problems and solutions in quantum mechanics”. World Scientific, 1998.
[12] R. Courand, K. Friedrichs and H. Lewy, “On the partial difference equations of mathematical physics”. Mathematische Annalen Springer, Berlin (1928).
[13] J. Crank and P. Nicolson, “A practical method for numerical evaluation of solutions of partial differential equations of the heat conduction type”, Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society. Cambridge University Press, Cambridge (1947).
[14] H. P. Langtangen, S. Linge, “Finite Difference Computing with PDEs: A Modern Software Approach”, Springer International Publishing. Berlin (2017).

Recomendaciones y orientaciones para el estudiante:

Plazas: 1

2. DATOS DEL TUTOR/A:

Nombre y apellidos: MARTA ANGUIANO MILLÁN

Ámbito de conocimiento/Departamento: FÍSICA ATÓMICA, MOLECULAR Y NUCLEAR

Correo electrónico: mangui@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:

Centro de convenio Externo:

5. DATOS DEL ESTUDIANTE:

Nombre y apellidos: Antonio Naranjo Bueno

Correo electrónico: antonionaranjo@correo.ugr.es