Applet para un pozo de potencial finito

Joaquin Carrasco Gomez

14 de julio de 2003

Resumen

Construccion de un applet para solucionar un pozo de potencial para un electron a partir de los datos de un navegador.

Índice General

1 Introduccion

Tomemos un pozo finito de potencial cuadrado cuya anchura es a y su profundidad V_0, tomando este valor como positivo. Veamos como encontrar los niveles ligados de un electron moviendose en el pozo. Para posteriores versiones sera introducida la masa como otro factor a considerar. Renunciemos ahora a otra consideracion y trabajamos con electrones.

Por consideraciones generales, para este problema, sabemos que los niveles de energia de los estados acotados estan entre V_0 y 0.

El pozo lo centramos en el origen para tener un potencial par y con ello conseguir que los niveles de energia sean autofunciones del operador paridad. Asi tenemos los extremos del pozo en $\frac{-a}{2}$ y $\frac{a}{2}$.

La ecuacion de Schrodinger para zonas de potencial constante viene dada por:

$$\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar}(E - V_0)\Phi(x) = 0 \tag{1}$$

Si ahora aplicamos esta ecuacion a las 3 zonas de potencial constante obtendre tres ecuaciones diferenciales, las dos de los extremos tienen E < V (V=0), con lo que la solucion general viene dada por suma de exponenciales reales:

$$\Psi_1(x) = B_1 e^{\rho x} + B_1' e^{-\rho x} \tag{2}$$

$$\Psi_3(x) = B_2 e^{\rho x} + B_2' e^{-\rho x} \tag{3}$$

Mientras que para la zona central $V = -V_0$ y, por tanto, E > V con lo que la solucion general de la ecuacion diferencial es la suma de exponenciales imaginarias:

$$\Psi_2(x) = A_1 e^{kx} + A_1' e^{-kx} \tag{4}$$

En donde, las nuevas variables introducidas son:

$$\rho = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} \tag{5}$$

$$k = \sqrt{-\frac{2m(E + V_0)}{\hbar^2}} \tag{6}$$

De imponer la continuidad de estas funciones en x = $\pm\frac{a}{2}$ y suprimir los coeficientes B_1 y B_2, para que las soluciones no diverjan, obtenemos la ecuacion:

$$\left(\frac{\rho - \imath k}{\rho + \imath k}\right)^2 = e^{2\imath ka} \tag{7}$$

Ahora tenemos dos casos diferentes. Cada uno de ellos representa si la solucion es par o impar.

a) Niveles pares:

$$\left(\frac{\rho - \imath k}{\rho + \imath k}\right) = -e^{\imath ka} \tag{8}$$

De la que llegamos a una ecuacion implicita de cuyas raices saldran soluciones para la energia:

$$\frac{\rho}{k} = \tan(\frac{ka}{2}) \tag{9}$$

Una de las formas de simplificar un poco esta ecuacion es la que nos da idea el texto de Cohen-Tannoudji que introduce una nueva variable, k_0, independiente de E, para solo tener una de las dos variable, asi con:

$$k_0 = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}} = \sqrt{k^2 + \rho^2} \tag{10}$$

Y por fin se llega a una que deberemos resolver numericamente:

$$\left|\cos\left(\frac{ka}{2}\right)\right| = \frac{k}{k_0} \tag{11}$$

Con la condicion de que:

$$\tan\left(\frac{ka}{2}\right) > 0 \tag{12}$$

b) Niveles impares:
De forma similar al desarrollo anterior si partimos de:

$$\left(\frac{\rho - \imath k}{\rho + \imath k}\right) = e^{\imath ka} \tag{13}$$

Llegamos a:

$$\left|\sin\left(\frac{ka}{2}\right)\right| = \frac{k}{k_0} \tag{14}$$

Con la condicion de que:

$$\tan\left(\frac{ka}{2}\right) < 0 \tag{15}$$

Ahora que sabemos que hemos de resolver pasemos a hacer unos applet que nos hagan el trabajo. Los applet que se pueden visitar son:

- Busqueda de niveles
- Funcion de onda

2 Busqueda de niveles

2.1 Niveles totales

Hasta aqui solo hemos expuesto los conocimientos teoricos del problema que nos va a conducir a tener que resolver los ceros de una ecuacion implicita que nos es imposible de despejar analiticamente. Por tanto, veamos que ecuaciones necesitamos resolver. Hemos hecho el applet, por ahora, para que resuelva el problema para electrones: m = me. Lo primero que necesitamos es calcular k_0, dado que vamos a encontrar primero k y de ella despejaremos E, y para ello es importante observar que las posibles soluciones para k estan contenidas en el intervalo (0, k0). Asi que este numero sera una importante referencia sobre cuantos niveles puedo tener.

$$k_0 = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}} \tag{16}$$

a) Niveles pares:

La ecuacion (11) con la condicion (12) nos dan una serie de niveles que pretendemos buscar. Pero la solucion no es unica, luego conviene buscar el intervalo donde se encuentra la solucion que buscamos y como el metodo de la biseccion no se va a salir de este intervalo es el elegido. Asi esta condicion nos facilita mucho las cosas a la hora de buscar soluciones dado que estas viviran en los intervalos k $\in$ ($\frac{n\pi}{a}$, $\frac{(n+1)\pi}{a}$) con n par. Ademas podemos observar que siempre va a ver solucion para el primer nivel de energia par, por pequea que sea k_0.

b) Nivel impares:

De nuevo tenemos una ecuacion, la ecuacion (14) con una nueva condicion, la (15).

Ahora las soluciones viviran en los intervalos k $\in$($\frac{n\pi}{a}$, $\frac{(n+1)\pi}{a}$) con n impar.

Dado que en cada intervalo solo puedo tener una solucion el numero total de soluciones, es decir, el numero total deniveles de energia que tiene el pozo es:

$$n = 1 + int\left(\frac{k_0 a}{\pi}\right) \tag{17}$$

En donde el operador int( ) pretende representar la parte entera del numero entre los parentesis.

2.2 Solucion para cada nivel

Dos premisas son necesarias aqui:

a) El primer nivel es par por la condicion para niveles pares.

b) A partir de este los niveles pares he impares se van alternando.

Con estos dos datos y conocidos los intervalos en donde estara la solucion la busqueda del cero es muy sencilla dado que restringiendonos al intervalo deseado las funciones que se igualan son continuas y estrictamente decreciente y estrictamente creciente, por tanto, tendre una y solo una solucion. El metodo utilizado por el applet es el metodo de la biseccion.

Cuando el navegador desee encontrar un nivel el applet decidira si el nivel en par o impar por la sencilla regla de que niveles con n impar son pares y niveles con n par son impares. Una vez conocida la paridad de la funcion de onda el applet utilizara o bien la igualdad de a) o bien la igualdad de b) en el intervalo ($\frac{(n-1)\pi}{a}$, $\frac{n\pi}{a}$). Una vez que sabemos que igualdad utilizar y en que intervalo buscar encontrar la solucion numericamente es un problema trivial por lo referido en el parrafo a anterior.

2.3 Applet

En esta seccion se introduce el applet al navegador.

3 Funcion de onda

3.1 La Funcion

Para representar la funcion de onda lo unico que tenemos que hacer es coger las expresiones vistas en la introduccion para las funciones de onda en funcion de ρ y de k, es decir, en funcion de la energia obtenida como en el applet anterior. Por tanto, para representar la funcion de onda sera necesario que el applet sea una extension del anterior.

$$\Psi_1(x) = B_1 e^{\rho x} + B_1' e^{-\rho x} \tag{18}$$

$$\Psi_2(x) = A_1 e^{kx} + A_1' e^{-kx} \tag{19}$$

$$\Psi_3(x) = B_2 e^{\rho x} + B_2' e^{-\rho x} \tag{20}$$

Me tomo unas libertades que no son demasiado restrictivas:

a) La funcion de onda no esta normalizada, solamente esta limitada por el espacio que tengo para pintarla.

b) Elijo que las impares sean negativas a la izquierda.

c) Como nada mas que tengo que preocuparme por la continuidad dejo los extremos en paz y calculo un factor para corregir la zona central. Algo asi como:

$$factor = \frac{e^{-\frac{a\rho}{2}}}{\cos(-\frac{ak}{2})} \tag{21}$$

Para niveles pares y para los impares se reemplaza el coseno por un seno.

De esta forma lo que represento es para niveles paras:

$$\psi_1 = e^{\rho x} \tag{22}$$

$$\psi_2 = factor \cdot \cos(kx) \tag{23}$$

$$\psi_3 = e^{-\rho x} \tag{24}$$

De igual forma para los impares:

$$\psi_1 = -e^{\rho x} \tag{25}$$

$$\psi_2 = factor \cdot \sin(kx) \tag{26}$$

$$\psi_3 = e^{-\rho x} \tag{27}$$

Visto esto, lo demas son detalles tecnicos de Java.

3.2 El Applet

Esta seccion presenta el applet definitivo.

4 Considaraciones sobre Java y HTML

4.1 Incompativilidades y constructores

Java es un lenguaje en construccion luego el problema es que conforme han salido nuevas versiones de navegadores estos se han adaptado a la version actual de Java y por tanto un programa puede ser visible en un navegador pero invisible para otro ms antiguo.

Esto en definitiva no es un grave problema dado que, salvo excepciones, los navegadores ya vienen incluidos en sistemas operativos y al actualiza estos se van actualizando los navegadores. Adems las plataformas que sirven Internet te dan estos navegadores, incluso Netscape tiene colgado en la red una version "moderna". Otra posible solucion es el uso de parches, es decir, es un problema grave pero con multitud de soluciones.

Quiza otro problema que al principio parecia una ventaja son los contructores de HTML. Al inicio utilice Word y guarde con extension html, lo cual me proporcion un codigo fuente imposible de leer. Ademas de no ser accesible para otros navegadores. Despues me fui al constructor de Netscape, llamado Composer, este ya proporciona un codigo fuente mas claro aunque hay que corregir cosas. He echado en falta un editor como el de LaTex, yo utilizo el WinEdt que te eche una mano con los comandos pero que t seas el protagonista y el editor una valiosa ayuda. Los constructores de HTLM son una porqueria y hasta donde he podido he ido construyendo el HTLM desde la ventanilla del codigo fuente.

4.2 Funcionamiento del applet para la funcion de onda

Explico este applet porque contiene al otro. El applet consta de dos partes:

El propio applet El applet se inicia con el metodo init() cuando enchufamos el navegador y este llama a la clase que dibuja. La primera llamada la hago para que solo se vea el pozo y el applet se queda inactivo. Solo el applet vuelve a funcionar cuando registra algun evento como, por ejemplo, pulsar el boton. Entonces el applet se situa en el metodo acction y este va realizando cosas hasta que se devuelve Verdadero (return true). En primer lugar coge los datos del navegador, los pasa a unidades atomicas, $\hbar = 1, me = 1$, y busca el nivel de energia que pide el navegador mediante el metodo de la biseccion. Una vez calculada la energia se llama al metodo de la clase dibujaNivel establecer Nivel pasandole 4 parametros:

- El nivel a dibujar.
- La energia del nivel.

- La V_0 del pozo.
- La anchura del pozo.

La clase que dibuja: dibujaNivel Esta clase es la que posee el metodo paint que es el que dibuja. En primer lugar se activa mediante la llamada de establecerNivel en el applet con los parametros anteriormente descritos. A continuacion culcula las variables necesarias, ρ y k, y a partir de ellas situa la funcion con las formulas 22, 23 y 24. Una vez que ya ha calculado la funcion llama al metodo paint mediante la orden repaint para que se vuelva a pintar. Este metodo situa a la funcion en la pantalla. Para ello hay que pasar de la funcion original a una funcion escalada segn el tamao que se le ha dado al applet en el codigo HTLM. Para ello se recoge esta anchura y esta altura. Situamos el pozo y el nivel de energia y sobre este nivel de energia se dibija la funcion. Para que al principio solo se dibuje el pozo lo que hago es sacarme esta funcion de la pantalla con un nivel de energia grande positivo.

5 Bibliografia

- Cohen-Tannoudji et al., Quantum Mechanics, John Wiley and sons. Volumen I, pag. 74,78
- Schildt, Herbert, Java 2 : manual de referencia. McGraw-Hill
- Manejo del editor cientifico Tex. Bernardo Cascales et al. Universidad de Murcia.

Ademas he consultado cantidad de libros de Java que espero que a alguien le sean mas utiles de lo que me han sido a mi.