



1. DATOS BÁSICOS DEL TFG:

Título: Simulación numérica de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo y regeneración cuántica de paquetes de onda

Descripción general (resumen y metodología):

Resumen

Este Trabajo de Fin de Grado tiene como objetivo el estudio de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo en una dimensión mediante técnicas numéricas y analíticas, prestando especial atención a la comparación entre la dinámica clásica y la dinámica cuántica en distintos sistemas físicos. En particular, el trabajo se centrará en el análisis de la evolución temporal de paquetes de onda y en el estudio del fenómeno de la regeneración cuántica (quantum revivals), uno de los efectos más característicos de la mecánica cuántica dependiente del tiempo.

La regeneración cuántica consiste en que un paquete de ondas inicialmente localizado y con comportamiento cuasi-clásico evoluciona siguiendo una dinámica aproximadamente clásica durante tiempos cortos, se dispersa posteriormente debido a la interferencia entre los distintos autoestados energéticos y, tras un tiempo característico, recupera de manera aproximada su forma inicial. Este fenómeno está estrechamente relacionado con la estructura discreta del espectro energético y constituye un ejemplo fundamental de interferencia cuántica dependiente del tiempo.

Para estudiar esta fenomenología se considerarán distintos sistemas unidimensionales, como el pozo infinito, el oscilador armónico y el rebotador cuántico. En cada caso se analizará la evolución temporal de paquetes de onda gaussianos y se compararán los resultados cuánticos con las predicciones clásicas correspondientes. Asimismo, se estudiarán magnitudes como la función de autocorrelación temporal, que permite identificar los tiempos característicos asociados a la evolución clásica, las regeneraciones completas y las regeneraciones fraccionarias.

El trabajo permitirá profundizar tanto en los aspectos físicos de la dinámica cuántica dependiente del tiempo como en la conexión entre mecánica clásica y mecánica cuántica, combinando herramientas analíticas con simulaciones numéricas y visualizaciones computacionales de la evolución temporal de la función de onda.

Metodología

La metodología del trabajo combinará técnicas analíticas de mecánica cuántica con métodos numéricos de resolución de ecuaciones diferenciales. En primer lugar, se desarrollará la formulación teórica de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo y se estudiará la descomposición espectral de la función de onda en términos de autofunciones del Hamiltoniano.

Desde el punto de vista numérico, la evolución temporal de los paquetes de onda se implementará mediante el algoritmo de Crank-Nicolson, equivalente a la formulación de Cayley del operador de evolución temporal. Este método presenta la ventaja de conservar la unitariedad de la evolución y garantizar la estabilidad numérica del proceso. La discretización espacial de la ecuación conducirá a sistemas lineales tridiagonales, cuya resolución se llevará a cabo mediante algoritmos específicos eficientes.

Una vez implementado el método numérico, se estudiará la evolución temporal de diferentes condiciones iniciales en varios potenciales unidimensionales. Se analizarán tanto observables físicos como densidades de probabilidad y valores esperados, así como herramientas específicas para el estudio de regeneraciones cuánticas, especialmente la función de autocorrelación temporal. Finalmente, los resultados obtenidos se compararán con las predicciones clásicas correspondientes, permitiendo identificar los regímenes cuasi-clásicos y las desviaciones puramente cuánticas asociadas a la dispersión e interferencia del paquete de ondas.

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

Objetivos planteados:

1. Resolver numéricamente la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo en una dimensión para diferentes potenciales y condiciones iniciales mediante el método de Crank-Nicolson.
2. Implementar y validar algoritmos numéricos estables y unitarios para la evolución temporal de paquetes de onda cuánticos, verificando la conservación de la norma y la correcta reproducción de resultados conocidos.
3. Analizar la evolución temporal de paquetes de onda en distintos sistemas unidimensionales, como el pozo infinito, el oscilador armónico y el rebotador cuántico.
4. Comparar la dinámica cuántica obtenida numéricamente con las predicciones de la mecánica clásica, estudiando la aparición de comportamientos cuasi-clásicos y las diferencias asociadas a efectos de interferencia y dispersión.
5. Estudiar el fenómeno de la regeneración cuántica de paquetes de onda mediante el análisis de funciones de autocorrelación temporal y la relación entre los tiempos característicos de evolución y la estructura espectral del sistema.

Bibliografía básica:

- 1) Robinett R. W., 2004, Physics Reports 392 1-119
- 2) Styer D. F., 2001 Am. J. Phys. 69, 56-62
- 3) Gea-Banacloche J., 1999 Am. J. Phys. 67 776-782
- 4) Aronstein D. L. and Stroud C. R. Jr., 1997 Phys. Rev. A 55 4526-4537
- 5) Robinett R. W., 2000 Am. J. Phys. 68, 410
- 6) Romera E. and de los Santos F., 2007 Phys. Rev. Lett. 99, 263601

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:

Centro de convenio Externo:

5. DATOS DEL ESTUDIANTE:

Nombre y apellidos: Jorge del Río López

Correo electrónico: jorgedrl@correo.ugr.es