Facultat de Física

EigenGame: Desenvolupament d'un joc per controlar funcions d'ona

Nom: Francesc Sabater García

Grau: Física

Nom de la institució on ha realitzat l’estada: Institut de Ciències del Cosmos de Barcelona

Nom del Tutor: Bruno Julià, Carles Calero

Període de temps en que s’ha fet l’estada: 16/02/2022 - 15/06/2022

Data d’entrega de l’informe: 27/6/2022

Índex

1 Introducció

L'estada s'ha realitzat a l'Institut de Ciències del Cosmos de Barcelona, institut de recerca pertanyent a la Universitat de Barcelona. L'ICCUB és un centre interdisciplinari dedicat a la investigació fonamental en els camps de la cosmologia, l'astrofísica i la física de partícules.
Les pràctiques s'han dut a terme dins del marc del projecte Simulacions de Mecànica Quàntica i han consistit en la creació i desenvolupament d'un joc per introduir conceptes bàsics de mecànica quàntica al públic general. A més de desenvolupar el joc, aquest s'ha presentat en la Festa de la Ciència de l'Ajuntament de Barcelona i en la Festa de la Ciència de la Universitat de Barcelona. Finalment, s'han desenvolupat una sèrie de materials docents per a poder portar el joc a l'aula i treballar la mecànica quàntica a l'ESO o al batxillerat.

2 Objectius

- Idear un joc per a ordinador útil per a divulgar mecànica quàntica de forma rigorosa.
- Desenvolupar el joc mitjançant programació en python i en kivy.
- Presentar el joc al públic general en una o més fires.
- Realitzar un conjunt de materials docents per poder treballar el joc a l'aula.

3 El joc: EigenGame

En termes generals, l'objectiu del joc és aconseguir que un electró aparegui en una certa posició. Per aconseguir-ho, el jugador ha de dissenyar una funció d'ona adequada que maximitzi les possibilitats que l'electró aparegui en la zona desitjada.
En el joc es treballa amb un electró confinat en una regió unidimensional (caixa de parets impenetrables). El jugador, dins la regió permesa, pot dissenyar un potencial que pot ser harmònic, modificant la constant recuperadora i la posició d'equilibri, de tipus barrera i pou, modificant-ne l'amplada i l'alçada o una combinació dels potencials mencionats anteriorment. Un cop el jugador hagi dissenyat el potencial podrà triar amb quin nivell energètic vol treballar. El programa calcularà el valor propi de l'energia escollida i la funció d'ona (vector propi) mitjançant l'equació de Schrödinger unidimensional i independent del temps.

En iniciar el joc el jugador es troba amb un menú des d'on pot triar si anar directament al joc o primer fer un tutorial on s'ensenya com jugar. També des del menú es pot triar l'idioma del joc (català, castellà o anglès).

Figure 1: Menú del joc.

Si es passa la pantalla del joc l'aparença del joc (on ja s'ha dissenyat una funció d'ona) és la següent:

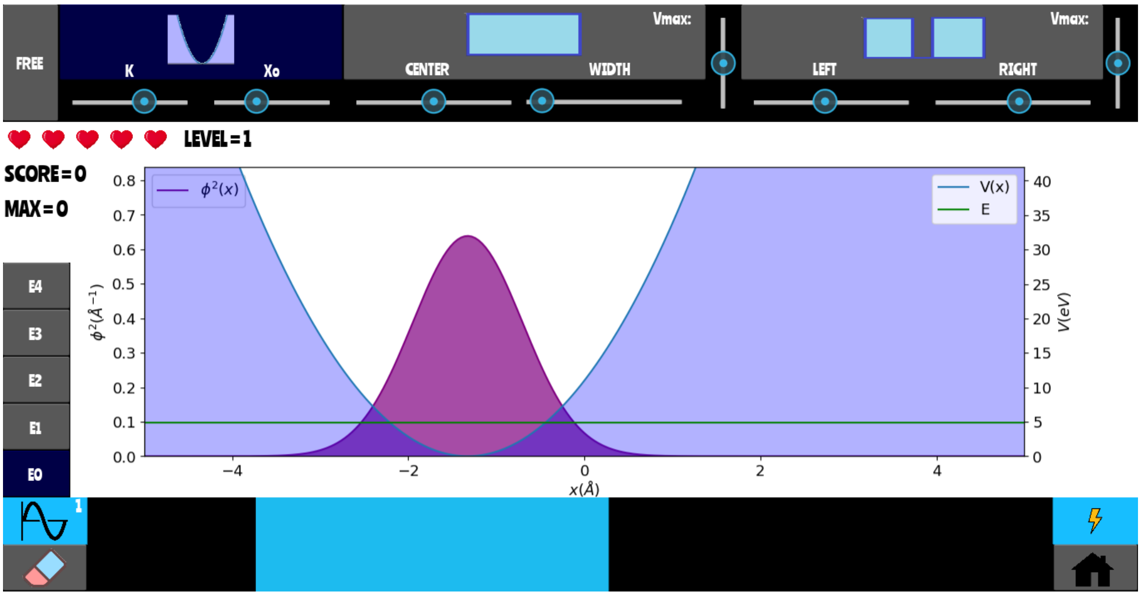


Figure 2: Aparença del joc. A la part superior es poden veure els diferents botons per a dissenyar el potencial. Seguidament anant de dalt a baix hi ha l'indicador de vides restants, juntament amb els indicadors de nivell, puntuació i puntuació màxima. Al centre de la pantalla s'hi observa el gràfic principal on es mostren energia (en verd), potencial (en blau) i funció d'ona al quadrat (en lila). A l'esquerra de la pantalla hi ha els botons per a triar el nivell energètic. A la part inferior hi ha, de color blau, la zona on ha d'aparèixer l'electró quan es realitzi una mesura. També hi ha 4 botons: el botó per dibuixar la funció d'ona, el botó per esborrar la funció d'ona dissenyada, el botó per a realitzar una mesura de la posició de l'electró, i finalment, el botó per tornar al menú.

A l'annex 1: Instruccions es pot trobar una explicació detallada de com funciona el joc pensada per al públic general.

4 Mètodes de càlcul emprats

4.1 Mètode de tir i integració de la funció d'ona per RK4

Aquest va ser el primer mètode que es va implementar per fer funcionar el joc. En aquest mètode, donades unes condicions inicials en què s'imposava que la funció d'ona fos zero en l'extrem esquerre de la caixa, i per un potencial i energia donats, s'anava iterant per Runge-Kutta 4 (RK4) al llarg de la posició x per acabar obtenint tota la funció d'ona segons:

$$\frac{-\hbar^2}{2m_e}\partial_x^2\phi(x) + V(x)\phi(x) = E\phi(x) \tag{1}$$

Per trobar els diferents valors propis de l'energia tals que la funció d'ona es fes zero a l'extrem dret de la caixa s'efectuava un mètode de tir. En aquest mètode de tir s'iterava al llarg de les diferents energies començant per l'energia zero (origen del potencial) amb un cert diferencial d'energia molt més petit que la diferència d'energia entre els diferents nivells d'energia (valors propis). Per cada energia es calculava el valor de la funció d'ona en l'extrem dret de la caixa (x = $5\AA$) i emprant el Teorema de Bolzano es comprovava si entre dues energies consecutives la funció d'ona es feia zero en l'extrem dret de la caixa. Si no hi havia cap zero entre dues energies consecutives es seguia iterant. En cas que si que hi hagués un zero això implicava que entre les dues energies consecutives en qüestió hi havia un valor propi. Aquest es trobava pel mètode de bisecció amb una precisió èpsilon. Un cop trobat un valor propi es calculava la seva funció d'ona corresponent per RK4.

Aquest mètode presentava diferents problemes. Per trobar els valors propis calia haver calculat moltes funcions d'ona abans que no ens interessaven (ja que no es corresponen a cap vector propi) i si volíem augmentar la precisió, el càlcul es convertia en massa lent.
Un altre problema que presentava el mètode és que per a potencials massa elevats (barreres i pous molt elevats) el mètode de tir no convergia i la funció d'ona no complia la condició de partícula compresa en una caixa fent-se diferent de zero en l'extrem dret.

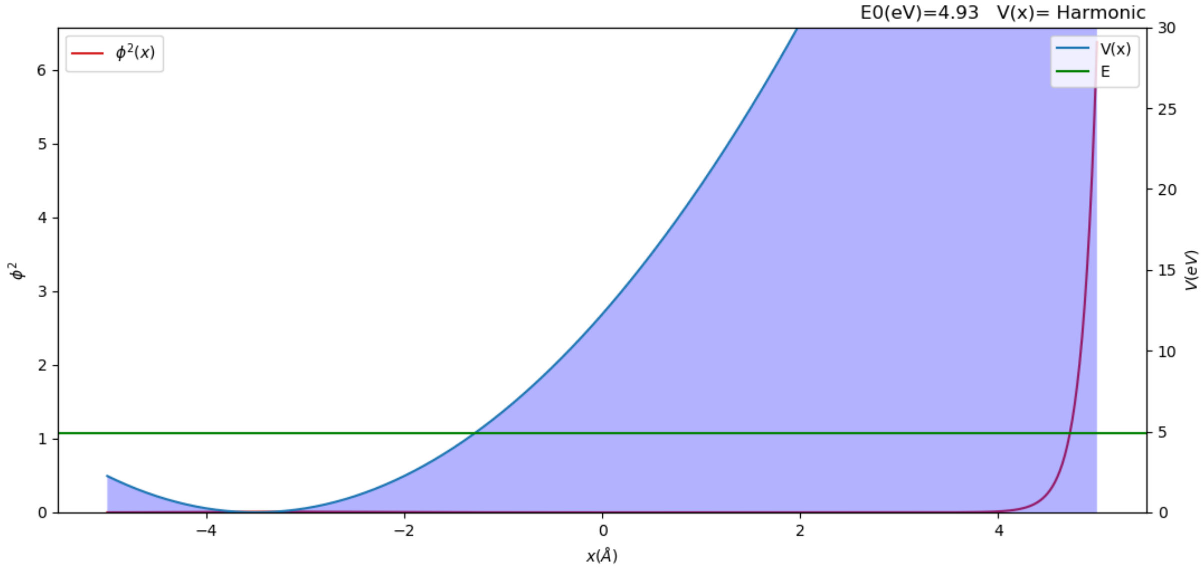


Figure 3: Captura on es mostra que per a un potencial harmònic on el potencial es fa molt gran la funció d'ona no es fa zero a l'extrem dret. Funció d'ona calculada pel primer valor propi trobat E0.
En la figura es representa la densitat de probabilitat i no la funció d'ona, és a dir es representa $\phi(x)^2$.

En canvi per a potencials més baixos el mètode presentava resultats raonables.
Comparant la funció d'ona calculada amb resultats analítics derivats de la mecànica quàntica observàvem que els resultats quadraven perfectament. Per a una partícula tancada en una caixa de parets impenetrables $-a < x < a$:

$$\phi_n(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{a}} \cos\left(\frac{n\pi x}{2a}\right) & n \text{ senar} \\ \frac{1}{\sqrt{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{2a}\right) & n \text{ parell} \end{cases} \tag{2}$$

On per al nostre cas $a = 5\mathring{A}$ i n=1 representa el nivell més baix d'energia. Així doncs per n=4 podíem comparar el resultat analític amb el calculat:

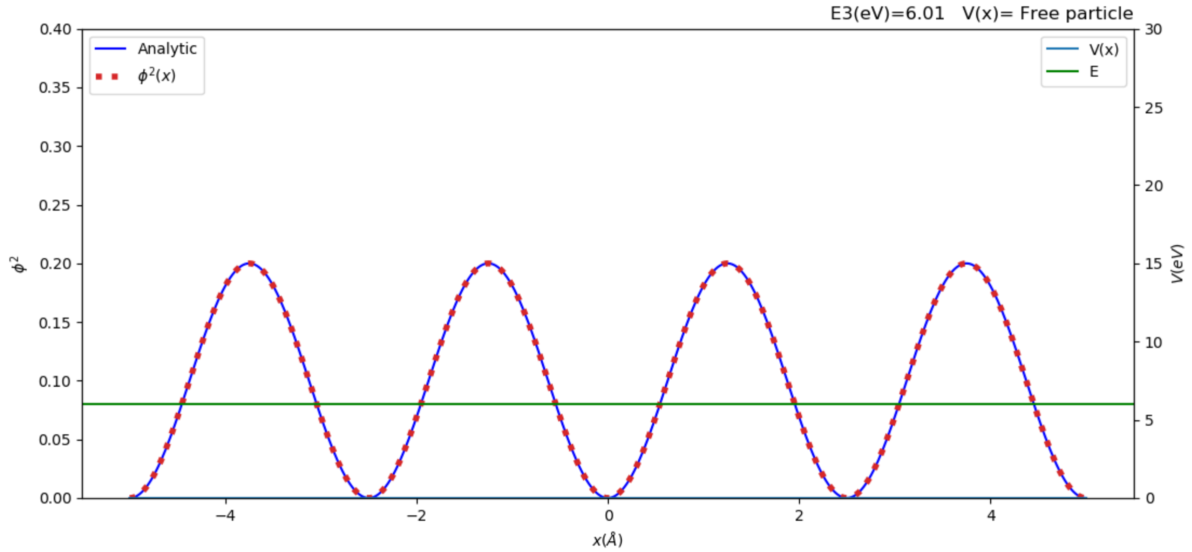


Figure 4: Captura on es mostra la coincidència del càlcul analític de la funció d'ona (línia continua blava) amb la funció d'ona calculada per càlcul numèric (punts vermells) per a una partícula lliure compresa en una caixa de parets impenetrables. Funció d'ona calculada pel quart valor propi trobat E3, n=4.
En la figura es representa la densitat de probabilitat i no la funció d'ona, és a dir es representa $\phi(x)^2$.

Pels problemes del mètode comentats anteriorment aquest va acabar essent substituït.

4.2 Mètode definitiu. Diagonalització del Hamiltonià

Aquest és el mètode definitiu amb què funciona el joc. En aquest mètode es treballa amb una discretització de 251 punts (250 salts de dx) de l'espai unidimensional i llavors l'equació de Schrödinger es transforma a un problema del tipus:

$$A\phi = E\phi \tag{3}$$

On A és una matriu (251) X (251) que conté la informació del potencial, ϕ un vector columna 251-dimensional i E el valor propi en qüestió.
Cal doncs identificar la matriu A per a poder-la diagonalitzar i trobar els seus vectors propis (funció d'ona) i els seus valors propis (nivells energètics).
Primer de tot cal trobar la fórmula discretitzada de l'equació d'Schrödinger a partir de la fórmula de la derivada a dos punts:

$$\frac{-\hbar^2}{2m_e}\partial_x^2\phi_i + V_i\phi_i = \frac{-\hbar^2}{2m_e}\frac{\phi_{i+1} - 2\phi_i + \phi_{i-1}}{dx^2} + V_i\phi_i = E_i\phi_i \tag{4}$$

Les derivades als extrems es calculen imposant:

$$\phi_{-1} = 0 \qquad \phi_{n+1} = 0$$

Aquesta imposició és raonable ja que per el potencial de tipus caixa la funció d'ona es fa zero en els extrems de la caixa i fora la caixa´també.
A partir d'aquestes expressions podem determinar la matriu A de (3).

$$\begin{bmatrix} \frac{\hbar^2}{2m_e dx^2} + V_0 & \frac{-\hbar^2}{2m_e dx^2} & 0 & 0 & 0 & ... \\ \frac{-\hbar^2}{2m_e dx^2} & \frac{\hbar^2}{2m_e dx^2} + V_1 & \frac{-\hbar^2}{2m_e dx^2} & 0 & 0 & ... \\ 0 & \frac{-\hbar^2}{2m_e dx^2} & \frac{\hbar^2}{2m_e dx^2} + V_i & \frac{-\hbar^2}{2m_e dx^2} & 0 & ... \\ 0 & 0 & \frac{-\hbar^2}{2m_e dx^2} & ... & ... & 0 \\ 0 & 0 & 0 & ... & ... & \frac{-\hbar^2}{2m_e dx^2} \\ 0 & 0 & ... & 0 & \frac{-\hbar^2}{2m_e dx^2} & \frac{\hbar^2}{2m_e dx^2} + V_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_0 \\ \phi_1 \\ \phi_i \\ ... \\ ... \\ \phi_n \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} \phi_0 \\ \phi_1 \\ \phi_i \\ ... \\ ... \\ \phi_n \end{bmatrix} \tag{5}$$

Observem ara que tot el problema es simplifica en diagonalitzar la matriu A (que és tridiagonal) i obtenir els seus vectors propis (funció d'ona discretitzada que podrem representar). Això es pot fer amb l'ajuda del modul Numpy de Python. D'aquesta manera obtenim de cop els valors de l'E i les seves corresponents funcions d'ona. El fet que la matriu sigui tridiagonal no és trivial ja que fa que el càlcul sigui molt eficient i ràpid permetent que es pugui jugar al joc de forma fluida i sense esperes.

Pel que fa al potencial caldrà fer una funció que ens retorni els valors de V_i. Aquesta mateixa funció serà l'encarregada d'imposar que V_0 i V_{251} prenguin valors molt alts per simular les parets infinites de la caixa on es troba la partícula.

Podem comprovar el bon funcionament del mètode comparant els resultats amb casos analítics coneguts.

4.2.1 Partícula lliure confinada en una caixa

Els diferents nivells d'energia poden ser calculats analíticament:

$$E_n = \frac{n^2 h^2}{32ma^2} \quad n = 1, 2, 3... \tag{6}$$

Podem ara comparar aquests nivells d'energia analítics amb els valors propis calculats per diagonalització de la matriu tridiagonal:

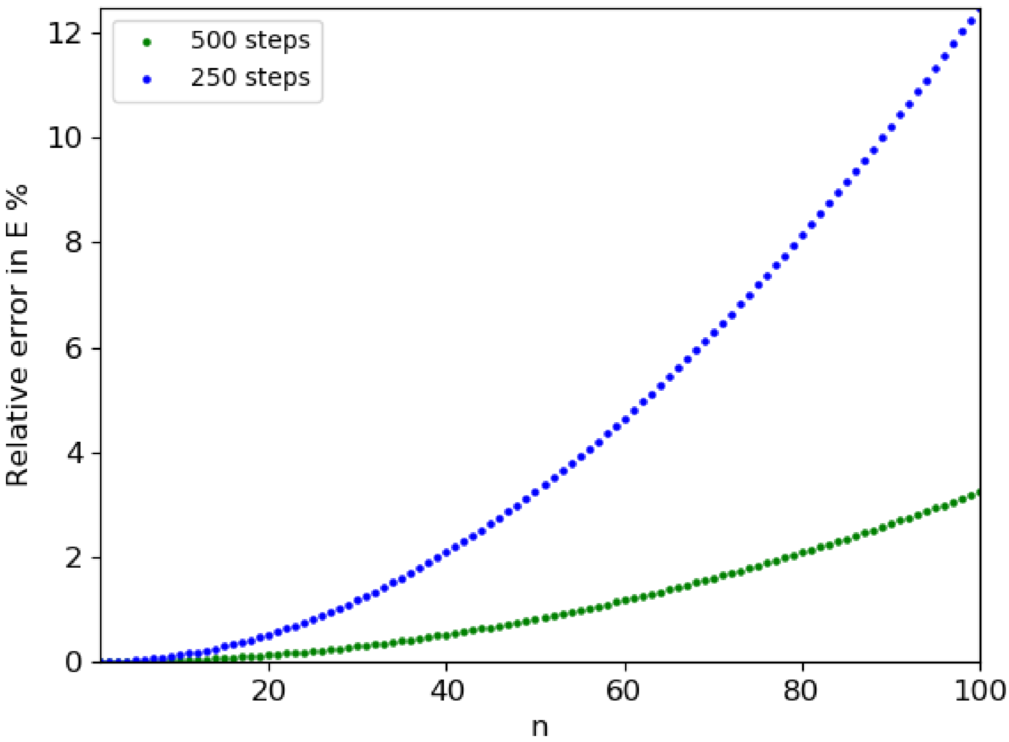


Figure 5: Gràfic on es mostra l'error relatiu de l'energia calculada per diagonalització per 500 i 250 passos en funció del nivell n. L'error relatiu es mostra en tant per cent. El fet de treballar amb 250 passos enlloc de 500 incrementa l'error comès.

Si estudiem l'error per els valors propis que s'utilitzen en el joc (els 5 primers):

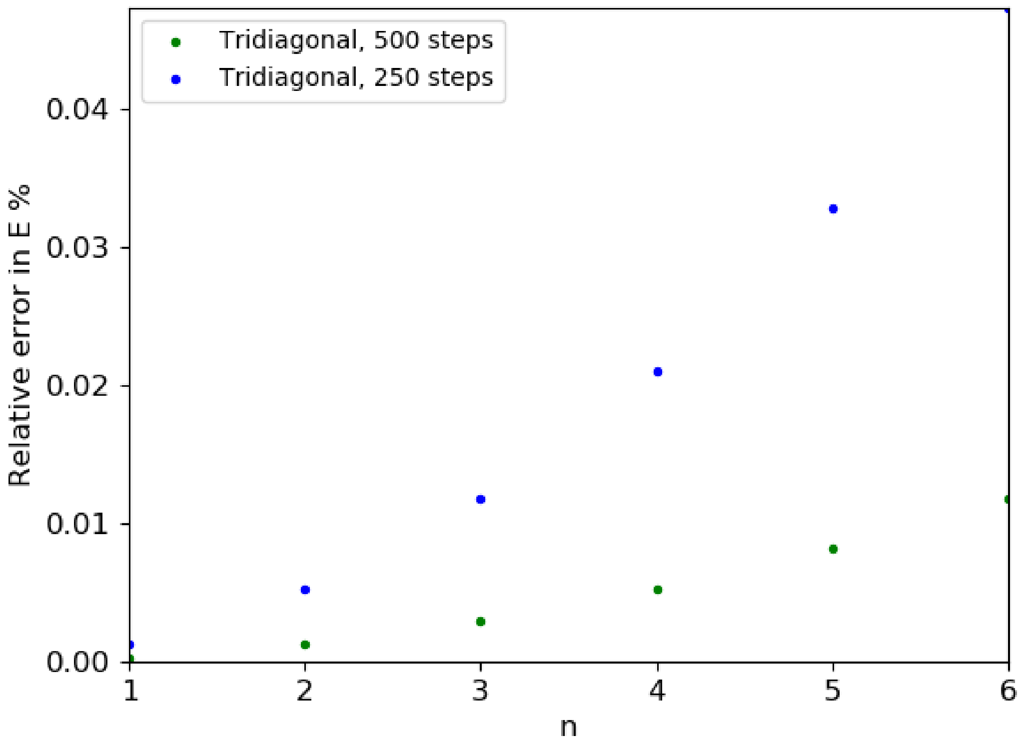


Figure 6: Gràfic on es mostra l'error relatiu de l'energia calculada per diagonalització de la matriu tridiagonal per 500 i 250 passos en funció del nivell n. L'error relatiu es mostra en tant per cent.

S'observa que a mesura que augmenta el nivell d'energia es comet un error major. També observem que l'error és superior per n=250 que per 500 punts com era d'esperar. Per n=5 l'error comès és inferior al 0.04% en ambdós casos. Aquest és un error relatiu petit que ens confirma que el mètode de diagonalització funciona. Tant per 250 passos com per 500 l'error és molt petit i aconseguim una precisió més que suficient pel joc. El joc funciona amb 250 passos ja que suposa una millora significativa en velocitat de càlcul.

4.2.2 Partícula confinada en una caixa i sotmesa a un potencial harmònic

Un altre cas conegut analíticament és el d'una partícula sotmesa a una potencial harmònic del tipus:

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2 \tag{7}$$

Si el potencial harmònic és prou gran en els límits de la caixa, on hi trobem una barrera de potencial infinita, la funció d'ona de la partícula serà la descrita pel potencial harmònic (que coneixem analíticament) sense haver de tenir en compte les parets infinites.

De la mecànica quàntica podem derivar l'expressió analítica de la funció d'ona per a un potencial harmònic:

$$\phi(x) = C_n \exp\Big(-\frac{1}{2}\frac{mw}{\hbar}x^2\Big) H_n\Big(\sqrt{\frac{mw}{\hbar}}x\Big) \tag{8}$$

On $w = \sqrt{\frac{k}{m}}$, H_n és l'enèsim polinomi d'Hermite i n fa referència a l'estat excitat en el que ens trobem ($n = 0, 1, 2, 3...$). C_n és una constant de normalització i la seva expressió és:

$$C_n = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega}}2^n n!}} \tag{9}$$

Així doncs podem avaluar si els resultats son coherents amb l'expressió analítica en qüestió:

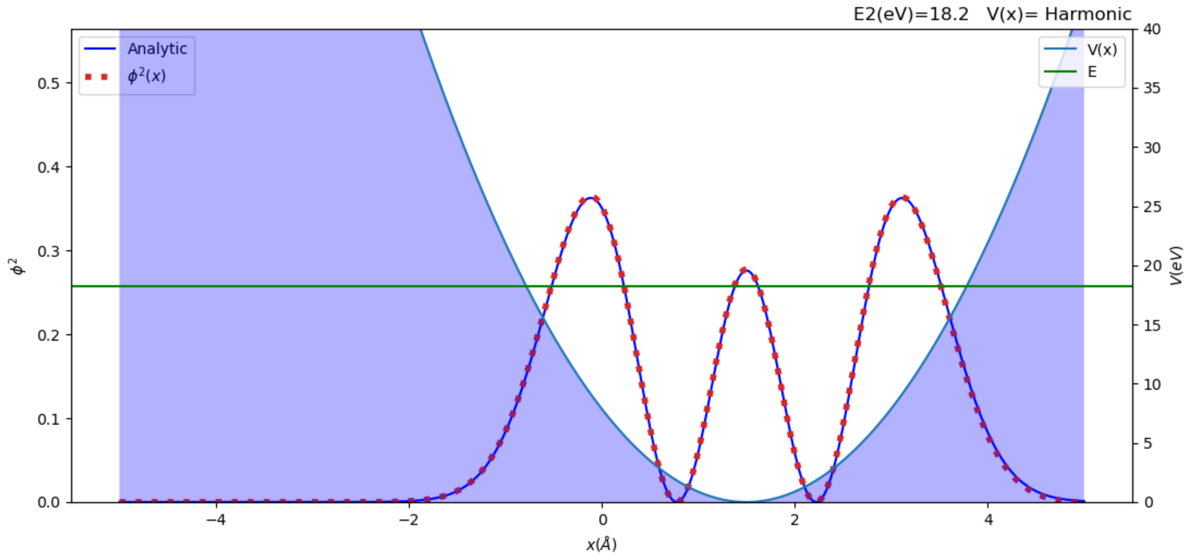


Figure 7: Captura on es mostra la coincidència del càlcul analític de la funció d'ona (línia continua blava) amb la funció d'ona calculada per càlcul numèric (punts vermells) per a una partícula sotmesa a un potencial harmònic K=7 $eV/\AA$ compresa en una caixa de parets impenetrables. Funció d'ona calculada pel tercer valor propi trobat E2. En la figura es representa la densitat de probabilitat i no la funció d'ona, és a dir es representa $\phi(x)^2$.

Els diferents nivells d'energia també poden ser calculats analíticament:

$$E_n = \frac{n^2h^2}{32ma^2} \quad n = 1, 2, 3... \tag{10}$$

Podem ara comparar aquests nivells d'energia analítics amb els valors propis calculats per diagonalització de la matriu:

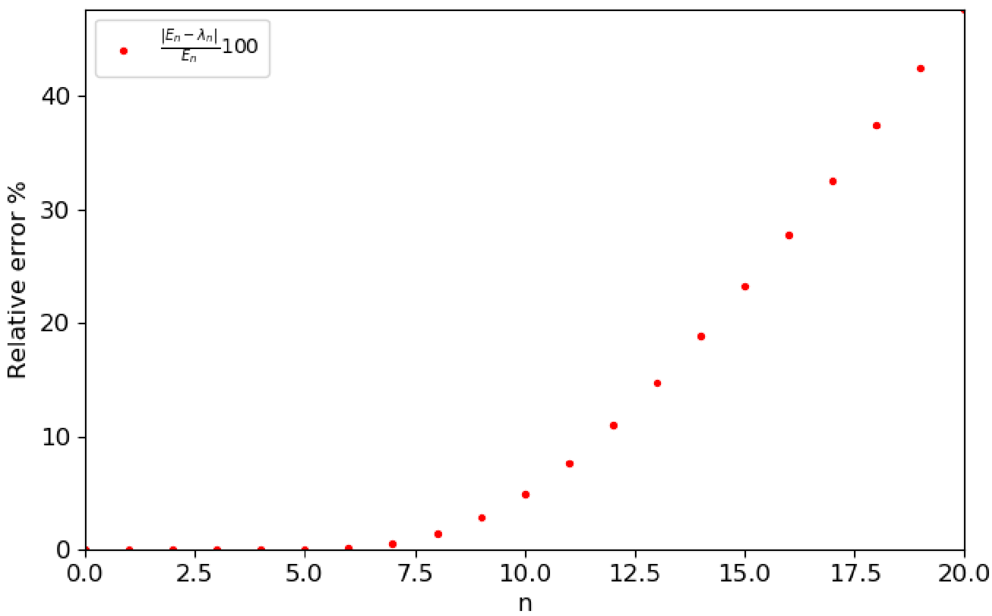


Figure 8: Gràfic on es mostra l'error relatiu de l'energia calculada per diagonalització λ_n respecte a E_n, l'energia analítica, en funció del nivell n. S'ha estudiat el cas de $k = 5\ eV/\AA$ i $x_0 = 0\ \AA$ L'error relatiu es mostra en tant per cent.

S'observa que l'error augmenta quan ens trobem a nivells d'energia superiors, arribant a obtenir un error superior al 40% per a n=20. Aquest error, a diferència del cas de la partícula lliure no és degut a la falta de precisió del càlcul sinó a què, en els extrems de la caixa, el potencial pren valors infinits en lloc de prendre els valors d'un potencial harmònic: el cas analític és un potencial harmònic que s'estén en tota la recta real mentre que en el joc el potencial és harmònic en $(-5, 5)\AA$ i infinit en els extrems. Per tant, el cas analític amb què estem comprovant el nostre resultat no s'adequa completament al cas en què ens trobem. Malgrat aquest fet, si prenem la posició d'equilibri del potencial el més allunyada de les parets possible, és a dir, a $x_0 = 0\ \AA$ i per a energies baixes, el cas analític és una bona comparació amb el cas calculat ja que el potencial als extrems de la caixa es fa molt gran en comparació a l'energia.

Podem veure fins a quin punt la comparació amb el cas analític d'un oscil·lador harmònic negligint les parets infinites de la caixa és vàlida estudiant l'amplada, és a dir, la desviació típica σ de la distribució de probabilitats per al cas analític:

$$\sigma = \sqrt{(n + \frac{1}{2})\frac{\hbar}{mw}} \tag{11}$$

Si l'amplada de la solució analítica és menor a l'amplada de la caixa, llavors l'aproximació serà correcte, ja que la distribució de probabilitats analítica serà propera a zero en els extrems de la caixa. En canvi, si l'amplada de la solució és més gran que la de la caixa, la solució analítica no es farà zero en els extrems de la caixa i estarem comparant el nostre resultat amb un cas analític que no es correspon al potencial utilitzat en el joc. Representant la desviació típica en funció de l'estat excitat n:

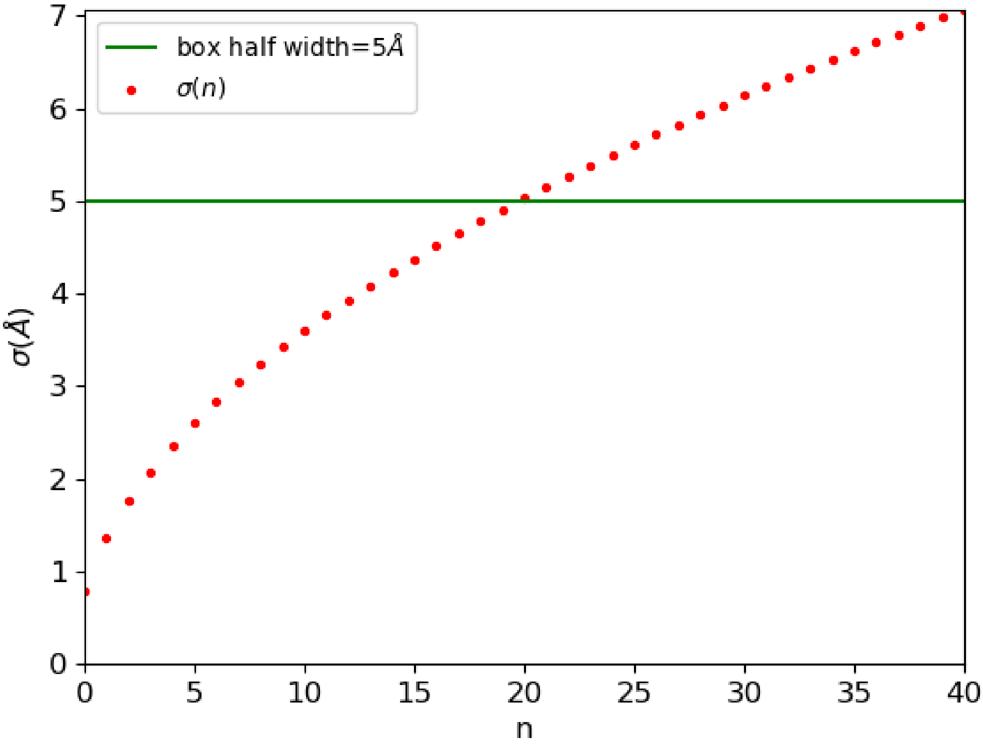


Figure 9: Gràfic on es mostra la desviació típica dels estats analítics de l'oscil·lador harmònic en funció de l'estat excitat n. S'observa que quan augmenta l'estat excitat n augmenta la desviació típica. La mida de mitja caixa es representa en verd ($5\mathring{A}$).

Considerant σ una bona mesura de la meitat de l'amplada de la distribució s'observa que per a n = 20 l'amplada de la solució analítica ja iguala l'amplada de la caixa i l'aproximació al cas analític ja no és vàlida. Ara bé el que volem que hi càpiga a la "caixa" és tota la distribució de probabilitat, incloent-hi les cues, per tant, per veure si l'aproximació al cas analític és correcte serà més adequat estudiar l'amplada de la distribució amb 2σ enlloc que amb 1σ.

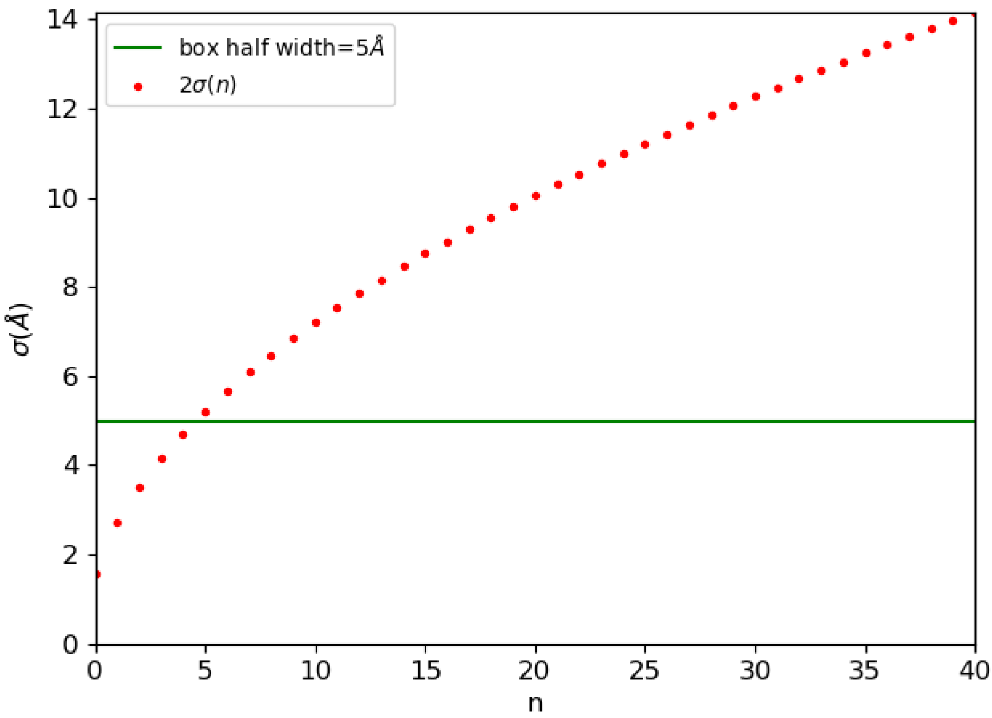


Figure 10: Gràfic on es mostra la desviació típica dels estats analítics de l'oscil·lador harmònic multiplicada per 2 (2σ) en funció de l'estat excitat n. S'observa que quan augmenta l'estat excitat n augmenta 2σ. La mida de mitja caixa es representa en verd ($5\AA$).

Considerant 2σ una bona mesura de la meitat de l'amplada de la distribució s'observa que per a n = 5 l'amplada de la solució analítica ja iguala l'amplada de la caixa i l'aproximació al cas analític ja no és vàlida. Per $n < 5$ s'observa que l'amplada de la solució és menor que l'amplada de la caixa i, per tant, l'aproximació al cas analític d'un oscil·lador harmònic per corroborar els resultats del programa és prou bona. Per exemple, per n=5 podem corroborar que la funció d'ona analítica comença a no cabre en la caixa, i per a n=10, clarament ja no hi cap (la funció d'ona no es fa zero en els extrems de la caixa) i és per això que a partir de n = 7 observem un augment important en l'error en la figura 8.

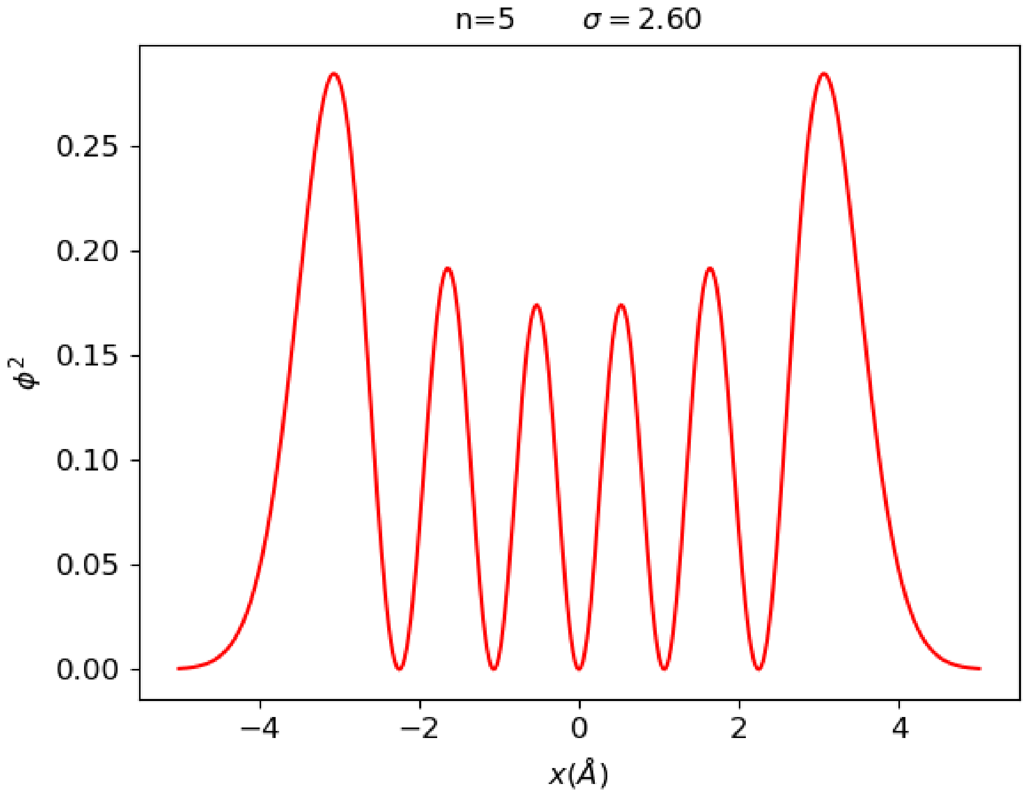


Figure 11: Gràfic on es mostra la densitat de probabilitat analítica per a n=5.

S'observa que amb una $\sigma = 2.60$ i $2\sigma = 5.20$ la densitat de probabilitat s'encabeix de forma justa dins la caixa (observem els 6 nodes corresponents a n=5).

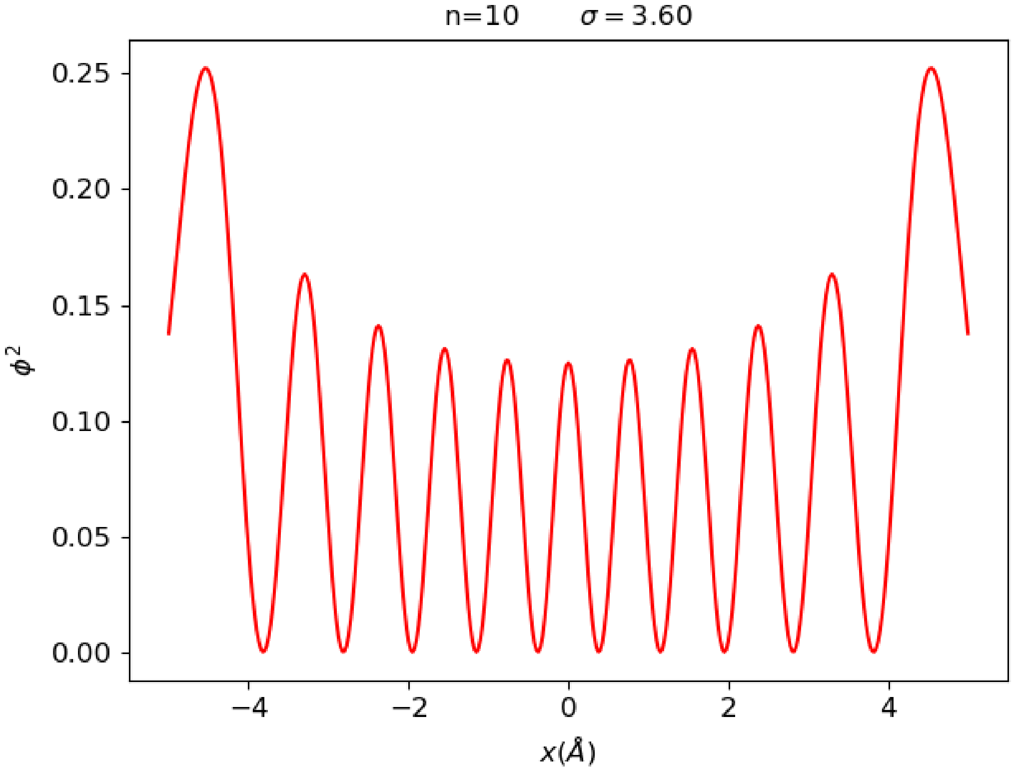


Figure 12: Gràfic on es mostra la densitat de probabilitat analítica per a n=10.

S'observa que amb una $\sigma = 3.60$ i $2\sigma = 7.20$ la densitat de probabilitat no s'encabeix dins la caixa i aquest seria un cas on clarament l'aproximació de l'oscil·lador harmònic no és bona.

Així doncs, tota aquesta justificació ens serveix per a poder dir que er a energies baixes ($n < 5$), es pot veure l'error de càlcul comés comparant els resultats amb el cas analític d'un potencial harmònic.

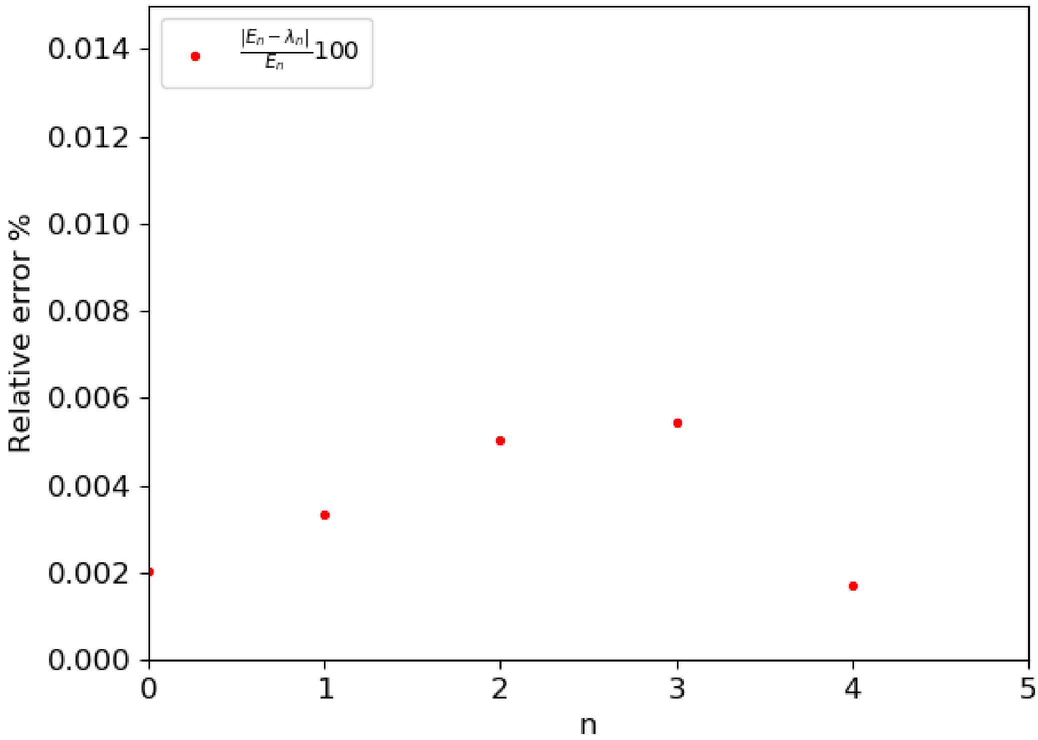


Figure 13: Gràfic on es mostra l'error relatiu de l'energia calculada per diagonalització λ_n comparada amb E_n, l'energia analítica calculada segons (10) en funció del nivell n. S'ha estudiat el cas de $k = 5\ eV/\AA$ i $x_0 = 0\ \AA$ L'error relatiu es mostra en tant per cent.

Per als 5 primers valors propis s'observa que l'error relatiu comès en l'energia és inferior al 0.008%. Per tant podem corroborar, ara comparant amb un potencial harmònic, que el mètode de càlcul emprat funciona.

5 Presentació del joc en fires

Un cop desenvolupat tot el joc aquest s'ha presentat en dues fires.

5.1 Festa de la Ciència de la Universitat de Barcelona

En aquesta fira realitzada el divendres 27 de maig a l'edifici històric de la Universitat de Barcelona disposàvem d'un estand amb 3 portàtils on el públic podia seure i jugar a diversos jocs de divulgació de mecànica quàntica. Entre aquests jocs hi havia el joc realitzat durant aquestes pràctiques. Les persones que s'acostaven a l'estand podien jugar al joc mentre se'ls hi explicaven diferents conceptes de física i de mecànica quàntica: energia potencial, distribució de probabilitat, funció d'ona, efecte túnel, principi d'incertesa etc.

Figure 14: Fotografia de l'estand a la Fira de la Ciència de la UB.

Figure 15: Fotografia de l'estand a la Fira de la Ciència de la UB.

5.2 Festa de la Ciència de l'Ajuntament de Barcelona

En aquesta fira realitzada el dissabte 28 de maig a la Rambla del Raval várem impartir 2 tallers d'una hora. El taller consistia en una presentació sobre mecànica quàntica impartida pel Dr. Bruno Julià seguida d'una part pràctica on el públic jugava al joc.

Figure 16: Fotografia del taller a la Fira de la Ciència de l'Ajuntament de Barcelona.

Figure 17: Fotografia del taller a la Fira de la Ciència de l'Ajuntament de Barcelona.

6 Materials docents per a portar el joc a l'aula

L'objectiu principal i el motiu de ser d'aquest joc és la divulgació de la mecànica quàntica. És per això que s'han desenvolupat una sèrie de materials docents per treballar-los abans de començar a jugar. Aquests materials estan pensats per a ser utilitzats en una sessió a ESO o batxillerat. En primer lloc, hi ha les instruccions del joc (Annex 1) que a més de fer d'instruccions introdueixen els diferents elements i conceptes del joc. També s'ha desenvolupat un glossari (Annex 2) de conceptes físics, una mena de diccionari amb definicions explicatives i concises de les diferents idees que es poden extreure del joc per treballar a l'aula. Finalment, s'han desenvolupat 3 exercicis per a fer a l'aula (Ànnex 3 - versió amb solucions), el primer introdueix el concepte d'energia potencial, el segon treballa la probabilitat i el tercer tracta de l'efecte túnel.

7 Conclusions

Els objectius de l'estada s'han complert. El joc s'ha pogut acabar i tancar, s'ha presentat a dues fires i s'han desenvolupat una sèrie de materials docents per a dur el joc a l'aula.

Personalment, valoro molt positivament l'estada. És el primer cop que interacciono amb un entorn professional amb reunions setmanals on havia de presentar la feina feta i això ha suposat un aprenentatge. Per altra banda, he gaudit molt durant la realització del joc ja que ha estat un projecte que me l'he sentit meu des del principi. M'ha suposat un repte personal ja que he hagut d'aprendre molts aspectes de programació nous i en aquest sentit, crec que el meu coneixement sobre programació un cop feta l'estada és significativament superior al que tenia abans de començar-la. Finalment, agrair al Dr. Bruno Julià i al Dr. Carles Calero el seguiment i consells durant tota l'estada. També agrair a l'Anna i en Martí, estudiants que han realitzat un projecte paral·lel al meu i que també assistien a les reunions pels consells i ànims.

ANNEX 1 - INSTRUCCIONS

OBJECTIU:

L'objectiu del joc consisteix en fer aparèixer un electró en l'objectiu de color blau que es veu a la pantalla. Per aconseguir que l'electró aparegui en la posició que volem haurem de dissenyar una funció d'ona adequada escollint un potencial i energia adequats. Un cop tinguem la funció d'ona haurem de mesurar la posició de l'electró, si l'electró apareix dins l'objectiu sumarem un punt i si no perdem una vida. Cada cop que sumem un punt l'objectiu s'anirà fent més petit fins que superem el nivell 1. A partir del nivell 2 haurem d'encertar més d'un electró en diferents objectius, per tant, mesurarem simultàniament la posició de diversos electrons. Quants punts ets capaç de sumar abans de quedar-te sense vides?

Pas 1: Crear un potencial V(x)

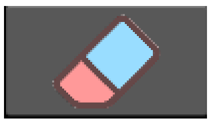
Primer de tot cal tenir clar que és un potencial. Els potencials van estretament lligats a la forces per la següent relació (en una dimensió):

$$\vec{F} = -\frac{dV(x)}{dx}$$

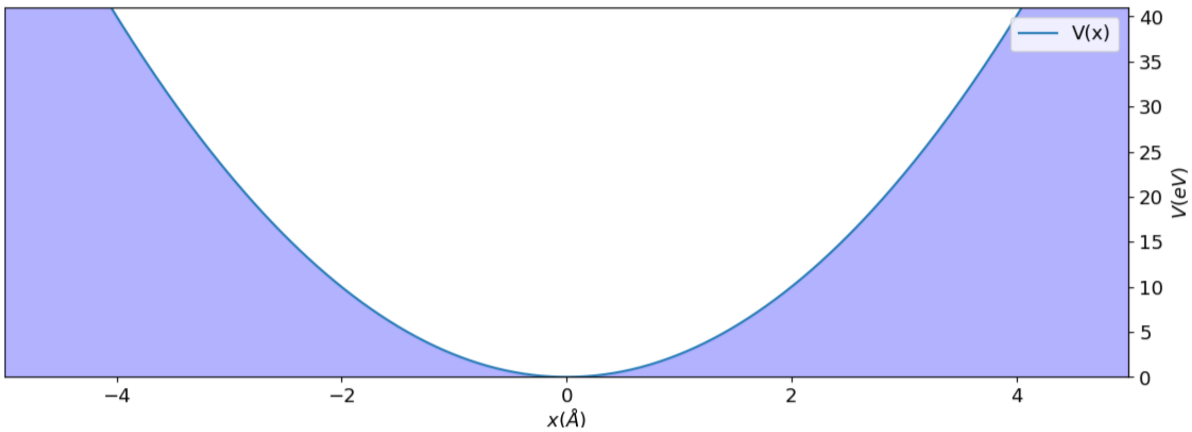
Aquesta relació el que ens diu és que la força apunta cap a potencials petits. És a dir, si tenim una pilota al punt més alt d'un potencial les forces que actuaran sobre aquesta faran que la pilota vagi cap a zones on el potencial siguin menor. Així doncs, la naturalesa mitjançant les seves forces sempre actuarà sobre els objectes per fer que aquests vagin cap a potencials menors, és per això que pujar una muntanya ens costa molt més (anem cap a potencials elevats) que no pas quan la baixem (anem cap a potencials menors).

En la creació del nostre potencial podrem triar entre quatre tipus de potencials:

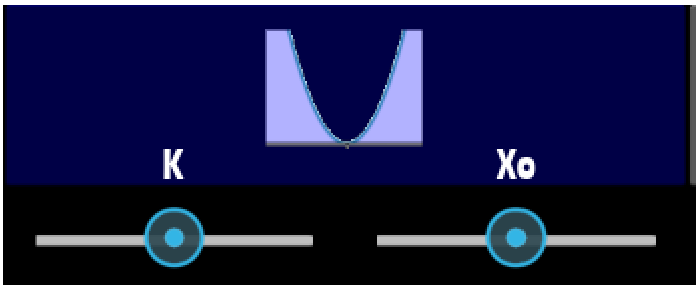
- **Partícula lliure:** En aquest cas el potencial és zero a tot arreu dins la zona on pot aparèixer l'electró. No hi ha forces que actuïn sobre l'electró a part de les que fan que aquest no s'escapi de la "caixa" on juguem.
  Aquest potencial no es pot combinar amb d'altres i el podem aplicar prement el botó FREE o prement a la goma d'esborrar que esborra tot potencial i el fa zero:



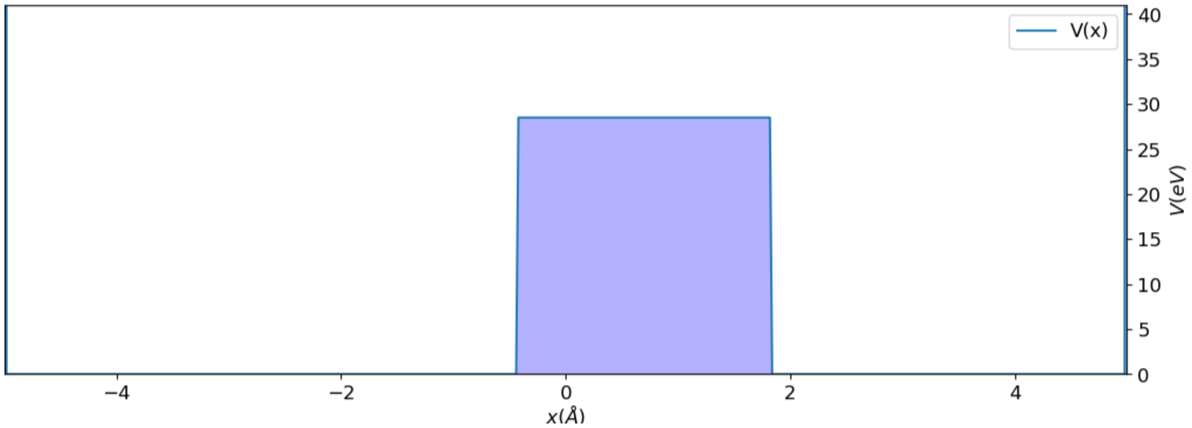
- **Potencial harmònic:** És el potencial que s'aplica per explicar les forces en una molla o en un pèndol. És de gran utilitat en física. Té la següent forma:



Seguint la lògica que la força va cap a potencials menors en aquest cas les forces aniran dirigides cap a la part més baixa del potencial, és a dir, cap al centre d'aquesta mena de U a la que li diem potencial harmònic. Per tant, qualsevol partícula que s'allunyi del centre del potencial sentirà un força que la farà retornar cap al centre.
Aquest potencial el podrem dibuixar prement el botó amb la icona corresponent a la forma del potencial. Podrem modificar l'amplada de la U fent més grossa o més petita la K (constant de Hooke) lliscant a través de la barra i de la mateixa manera també podrem desplaçar-ne el centre:



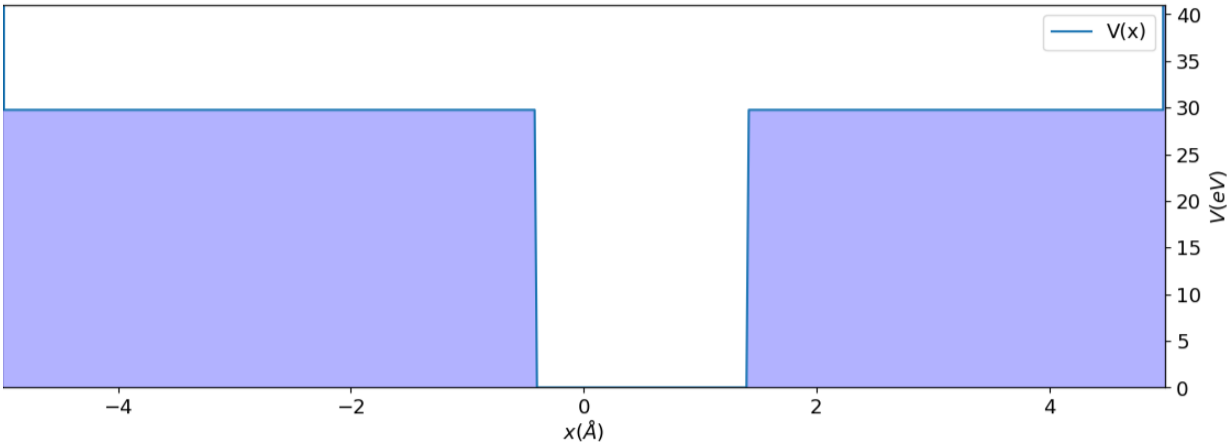
- **Barrera de potencial:** Aquest potencial serveix per representar forces repulsives i és com una paret:



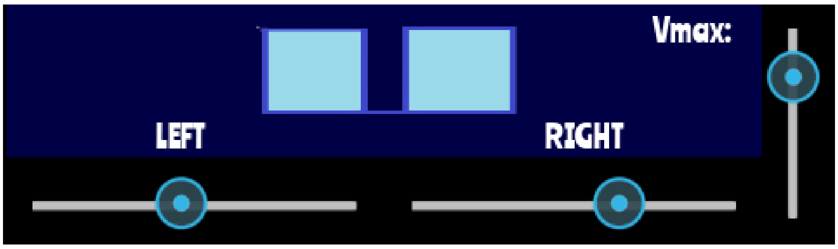
Quan vas contra una paret i xoques et fas mal ja que existeix una força en direcció contrària a la de la paret (zona on no hi ha barrera i per tant el potencial és menor). Per superar una d'aquestes parets en física clàssica cal que la partícula tingui més energia

que l’alçada de la paret, en quàntica però, pot ser que travessem la paret sense tenir l’energia necessària, és el que s’anomena efecte túnel. D’energies en parlarem al següent pas.
Aquest potencial el podrem dibuixar prement el botó amb la icona corresponent a la forma de paret. Podrem modificar l’amplada de la paret, l’alçada i la seva posició.

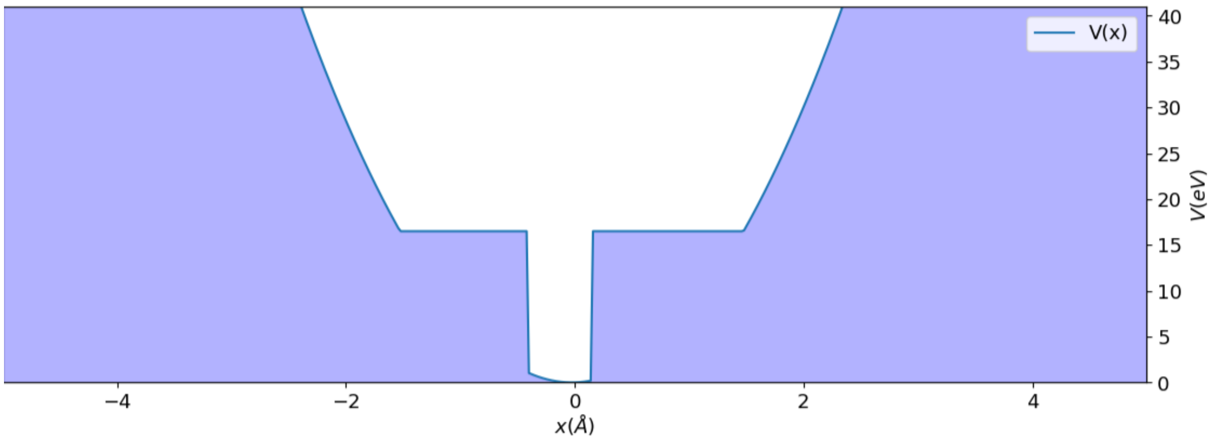
- **Pou de potencial:** Aquest potencial serveix per representar forces repulsives i consisteix en dues parets de les mencionades anteriorment posades d’avant de l’altre:



Aquest potencial el podrem dibuixar prement el botó amb la icona corresponent a la forma de pou. Podrem modificar l’amplada de la paret, l’alçada i la seva posició:



Podrem combinar més d’un d’aquests potencials dibuixant un potencial sobre un que ja està dibuixat. Per exemple, combinant un pou i un potencial harmònic podem obtenir:



Pas 2: Escollir una energia

En aquest pas triarem quina energia volem que tingui el nostre electró. És aquí on trobarem la primera gran diferència entre la física clàssica i la quàntica: les energies estan quantificades, és a dir, l'electró no pot tenir qualsevol energia sinó que hi ha una sèrie de nivells energètics disponibles en els quals l'electró es pot trobar. Aquests nivells energètics venen donats per l'equació d'Schrödinger (sí, el del gat):

$$\frac{-\hbar^2}{2m_e}\partial_x^2\phi(x) + V(x)\phi(x) = E\phi(x)$$

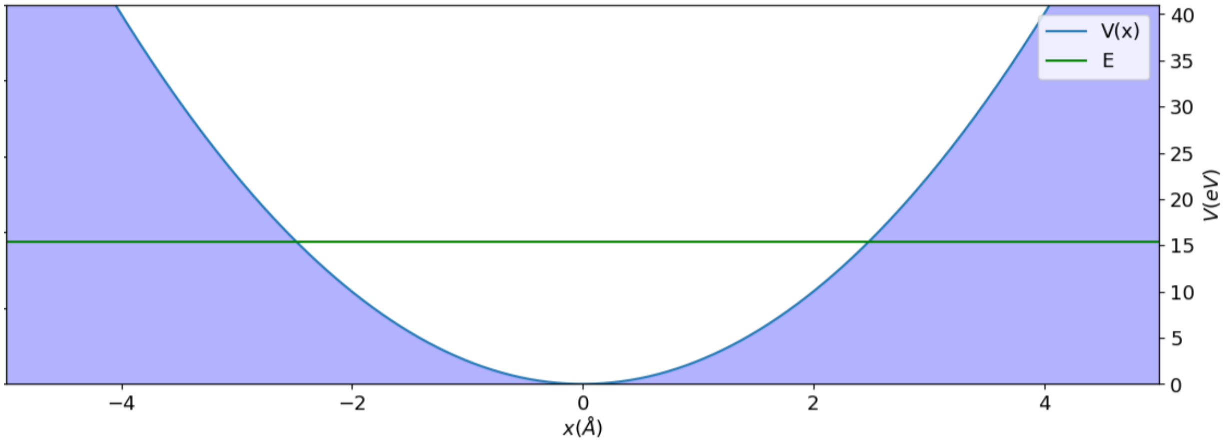
On $\phi(x)$ és la funció d'ona de la qual en parlarem més endavant. Els valors de E que compleixen aquesta equació són els anomenats autovalors i són les energies disponibles. D'aquests nivells n'hi poden haver uns quants o n'hi poden haver infinits però sempre n'hi haurà un, l'E_0, que serà el mínim i al que anomenarem estat fonamental. Per tant, i per posar un exemple, l'electró no podrà tenir una energia que es trobi entre l'estat fonamental i el primer estat excitat (així és com en diem de la resta de nivells energètics) sinó que haurà de tenir o bé l'energia fonamental o bé la primera energia.

Aquests nivells energètics dependran del potencial que hàgim triat en el pas anterior. Podrem triar entre 5 nivells energètics ordenats de menys energia a més energia mitjançant els següents botons:

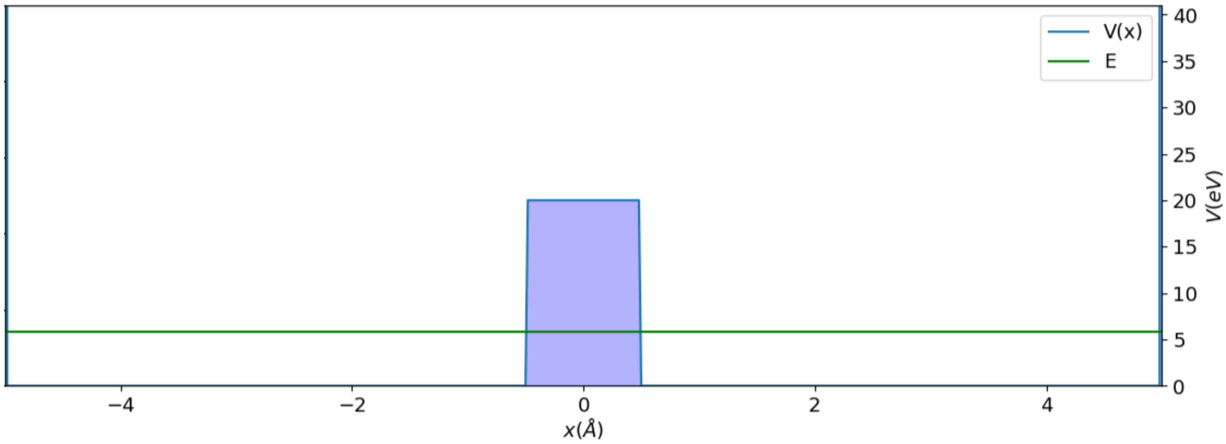
Per defecte, si no premem cap d'aquests botons, l'energia seleccionada serà la de l'estat fonamental.

Vegem ara per exemple alguns nivells energètics per els diferents potencials que hem pogut crear en el pas 1.

Potencial harmònic amb el segon nivell d'energia excitat:



Barrera de potencial amb el segon nivell d'energia excitat:



S'observa que per a diferents potencials el segon nivell d'energia es correspon a diferents valors.

Pas 3: Dibuixar la funció d'ona

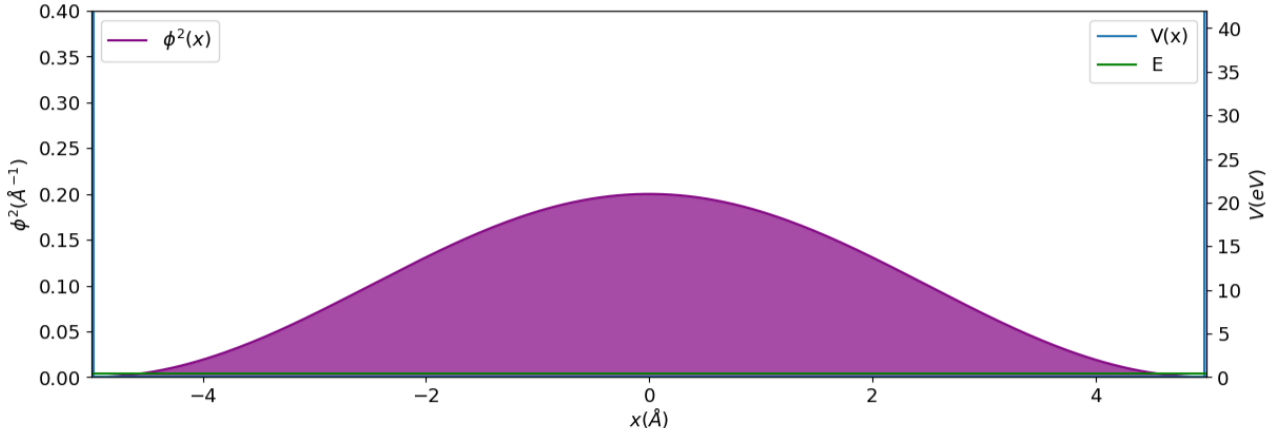
La funció d'ona és potser l'element més important de la física quàntica. Tota la informació sobre una partícula quàntica ve donada per la funció d'ona. Aquesta funció d'ona resulta de resoldre l'equació d'Schrödinger mostrada abans i és el terme $\phi(x)$.

Una de les propietats més rellevants de la funció d'ona, i la que més ens interessa en aquest joc, és que quan l'elevem al quadrat obtenim la densitat de probabilitat de trobar la partícula en un cert punt. Això el que vol dir és que la funció d'ona al quadrat ens diu on és més probable que aparegui l'electró o la partícula que vulguem mesurar.

Un tret important i diferenciant respecte a la física clàssica és que en la física clàssica podem calcular la trajectòria d'una partícula i per tant conèixer amb certesa on i quan estarà aquesta partícula, en canvi, en física quàntica tot el que podem predir és la funció d'ona, que no ens dona res més que probabilitats, així doncs, és impossible saber on és una partícula abans de mesurar-la. És per això, que en la paradoxa del gat d'Schrödinger, no sabem si el gat és mort o viu fins que no obrim la caixa (fem una mesura).

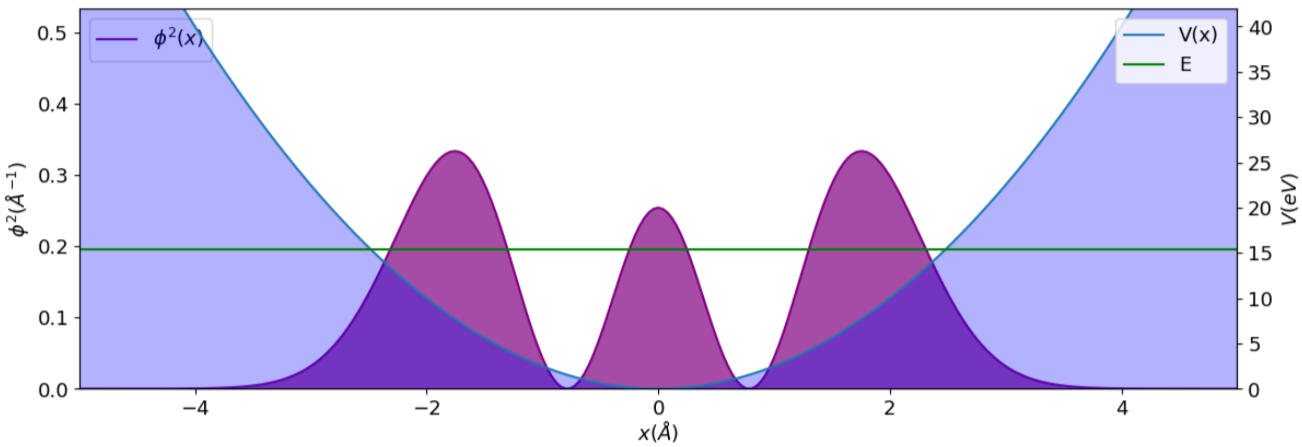
Vegem alguns exemples de funcions d'ona:

Per a una partícula lliure en l'estat fonamental:



L'electró tindrà més possibilitats d'aparèixer en el centre de la caixa.

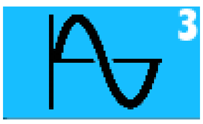
Per a un potencial harmònic en el segon nivell excitat:



L'electró tindrà més possibilitats d'aparèixer al voltant de x=0 A, x=2 A i x= -2 A què es corresponen als punts amb màxims de probabilitat.

Abans de mesurar la posició de l'electró podrem dibuixar fins a 3 funcions d'ones amb diferents potencials i energies. Quan tinguem la funció d'ona desitjada o bé hàgim gastat els 3 intents haurem de mesurar la posició de l'electró (pas 4).

Per dibuixar una funció d'ona caldrà prémer:



On el nombre blanc indica el nombre de funcions d'ona que podem dibuixar abans de mesurar la posició de l'electró.

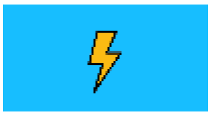
Pas 4: Efectuar una mesura

En aquest pas mesurarem la posició de l'electró, en cas que estiguem en el nivell 1, o de 2n-1 electrons en cas que estiguem al nivell n.

Quan efectuem una mesura en física quàntica fem col·lapsar la funció d'ona, és a dir, si tenim una funció d'ona i mesurem la posició de l'electró i aquest apareix a x=0 la funció d'ona valdrà zero a tot arreu excepte en x=0.

Cal recordar que la posició de l'electró vindrà determinada per la densitat de probabilitats (funció d'ona al quadrat) que s'haurà dissenyat en el pas anterior. Els llocs amb valor més gran de funció d'ona al quadrat serà on més possibilitats hi haurà de què l'electró hi aparegui.

Per mesurar la posició de l'electró caldrà prémer:

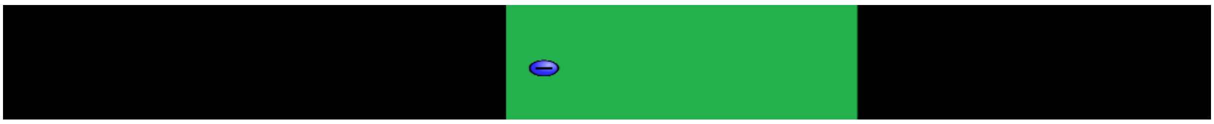


Aquest botó només apareixerà activat quan tinguem una funció d'ona dibuixada: sense funció d'ona no podrem mesurar la posició de l'electró.

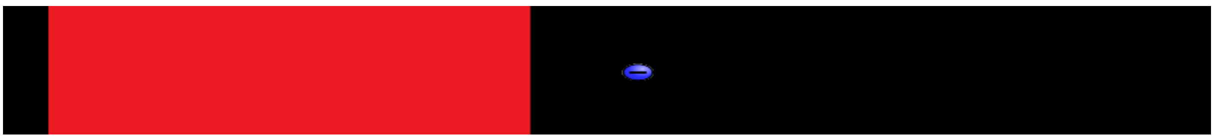
L'objectiu del joc, recordem, és que l'electró aparegui dins l'objectiu, que té aquesta forma:

En nivells superiors a l'1 en què mesurem més d'un electró a la vegada haurem d'encertar més d'un objectiu. Per exemple, en el nivell dos haurem d'encertar dos objectius:

Si aconseguim que l'electró aparegui dins de l'objectiu aquest canviarà de color a verd, sumarem tants punts com objectius encertats i un nou o varis objectius nous (depenent del nivell en el que ens trobem) apareixeran en noves posicions. En el cas del nivell 1 el nou objectiu que aparegui serà cada cop més petit.



Si fallem, l'objectiu apareixerà vermell i perdrem una nova vida. No es generaran nous objectius fins que no encertem l'objectiu en qüestió.



En el cas de nivells amb més d’un objectiu caldrà encertar tots els objectius amb, com a mínim un electró per passar de nivell.

En aquest cas corresponent al nivell 2 observem que dels dos objectius només n’hem encertat un. En aquest cas perdríem una vida i no passaríem de nivell ni sumariem punts.

Durant el joc podem recuperar vides en cas que n’haguem perdut alguna anteriorment. Aleatòriament i de tant en tant ens trobarem amb objectius d’aquest tipus:

En aquest cas, si encertem l’objectiu, a part de sumar un punt i seguir avançant recuperaríem una vida.

El recompte de punts i vides, conjuntament amb un marcador que registra la màxima puntuació efectuada apareixen en pantalla de la següent manera:

A l’inici del joc comencem amb 5 vides.

El joc està disponible en català, castellà i anglès.

ANNEX 2 – GLOSSARI

Probabilitat discreta: Són els valors de 0 a 1 que dictaminen com de molt probable és que succeeixi un esdeveniment. Per exemple si tirem una moneda la probabilitat de què surti cara serà 0.5 i la que surti creu serà 0.5. Si tirem un dau cada cara del dau tindrà una probabilitat associada de 1/6. La suma de totes les probabilitats sempre ha de ser 1. Aquestes probabilitats no tenen per què ser totes iguals, per exemple, si tenim una bossa amb 5 boles, 3 vermelles i 2 blaves, la probabilitat de treure una pilota blava és 2/5=0.4 mentre que la probabilitat de treure'n una de vermella és 3/5=0.6.

Probabilitat continua: Si l'esdeveniment que estem estudiant no té valors discrets (el dau és discret perquè pot sortir 1,2,3,4,5 o 6) sinó que pot prendre infinits valors no comptables diem que la variable que estudiem és continua. Per exemple, si estudiem la probabilitat de que una partícula aparegui en una certa posició dins d'una caixa que va de x = 0 a x = 1, el valors possibles de la posició no seran 0 o 1 sinó que serà qualsevol dels infinits nombres que podem trobar entre 0 i 1. La funció que ens marca la probabilitat o pes de cada posició és la **densitat de probabilitat** f(x). Allà on la densitat de probabilitat prengui valors més elevats serà on més probable és trobar la partícula en qüestió. La probabilitat que la partícula aparegui entre a i b vindrà donada per la integral definida entre a i b de la densitat de probabilitat.

Electró: Partícula subatòmica amb càrrega negativa de $1.6 * 10^{-19}\, C$ i massa de $9.1 * 10^{-31}\, kg.$ Els electrons formen part dels àtoms i els podem trobar en els orbitals d'aquests. La mecànica dels electrons no pot ser explicada per la física clàssica ja que aquest responen als fenòmens quàntics.

Energia potencial o potencial: És l'energia associada a un punt de l'espai degut a la presència d'un camp de forces. És a dir, si un excursionista puja a dalt d'una muntanya, adquirirà una energia potencial diferent de la que tenia sota la muntanya, degut a que es troba sota els efectes de la força gravitatòria. Aquest potencial es relaciona amb les forces seguint la següent relació (en una dimensió):

$$\vec{F} = -\frac{dV(x)}{dx}$$

Aquesta relació ens diu que les forces apunten en la direcció en què l'energia potencial es fa més petita. Seguint amb l'exemple de l'excursionista, quan puja la muntanya ha de fer més esforç que quan la baixa perquè la força gravitatòria l'empeny cap avall. Aquesta força apunta cap avall de la muntanya ja que el potencial gravitatori és menor al peu de la muntanya que al cim. Totes les forces amb què es treballen en el joc tenen associada una energia potencial a cada punt.

Nivells d'energia quantificats: Són les diferents energies que pot tenir una partícula. A diferència del que perceben els nostres sentits en el món macroscòpic, en el món quàntic una partícula no pot tenir qualsevol energia sinó que l'energia està dividia en nivells. Quan xutem una pilota de futbol li estem donant una certa energia, aquesta energia pot valdre 1 (en unitats arbitràries) o 10 si la xutem molt més fort. Si anem variant la força amb què xutem la pilota li podem donar l'energia que vulguem: 9,9 si la xutem una mica més fluix que 10 i etc. En canvi, les partícules quàntiques no poden adquirir qualsevol energia, si el nivells permesos son 1, 2, 3, 4... i així fins a 10 no podrem trobar la partícula amb energia 1,5 o 9,9 ja que no son nivells permesos. Aquests nivells energètics es poden calcular resolent l'equació d'Schrödinger:

$$\frac{-\hbar^2}{2m_e}\partial_x^2\phi(x) + V(x)\phi(x) = E\phi(x)$$

Els valors d'E que compleixen l'equació són els nivells d'energia permesos.

Funció d'ona: La funció d'ona d'una partícula representa l'estat físic d'aquesta. Aquesta funció d'ona es dedueix en resoldre l'equació d'Schrödinger (presentada anteriorment) on apareix com $\phi(x)$. El mòdul al quadrat de la funció d'ona és la densitat de probabilitat de la posició de la partícula. És a dir, malgrat no puguem saber on es troba la partícula fins que no efectuem una mesura, sí que podem conèixer les probabilitats d'aparèixer en una certa posició d'aquesta partícula.

Superposició d'estats i col·lapse de la funció d'ona: Un estat quàntic definit per una funció d'ona pot estar format per la combinació de diferents estats quàntics. Per exemple, que l'electró estigui en x=3 és un estat quàntic però la funció d'ona de l'estat total és la suma de les diferents posicions cada una amb la seva probabilitat. Un altre exemple prou conegut és el del gat d'Schrödinger, l'estat del gat dins la capsa pot ser una combinació de gat mort + gat viu amb les seves respectives probabilitats. No és fins que efectuem una mesura que la superposició es trenca i observem un dels estats: Quan enviem un fotó contra l'electró aquest apareix a una posició determinada i quan obrim la capsa el gat apareix viu o mort però no les dues a la vegada. Quan s'efectua una mesura i s'observa un dels estats de la superposició es diu que la funció d'ona ha col·lapsat.

Efecte túnel: En física clàssica podem definir l'energia total d'una partícula com la suma de les energies cinètica i potencial. L'energia cinètica sempre és positiva ja que és proporcional a la massa i a la velocitat al quadrat. Per tant, quan ens trobem en una regió de l'espai on el potencial és major que l'energia total de la partícula diem que aquesta regió és una regió prohibida ja que l'energia cinètica hauria de ser negativa. En física quàntica però, això no sempre és així. L'efecte túnel fa que en algunes regions clàssicament prohibides la funció d'ona no sigui zero, és a dir, hi hagi probabilitat de que la partícula aparegui en aquella regió prohibida.

.

ANNEX 3 – EXERCICIS PER TREBALLAR A L'AULA

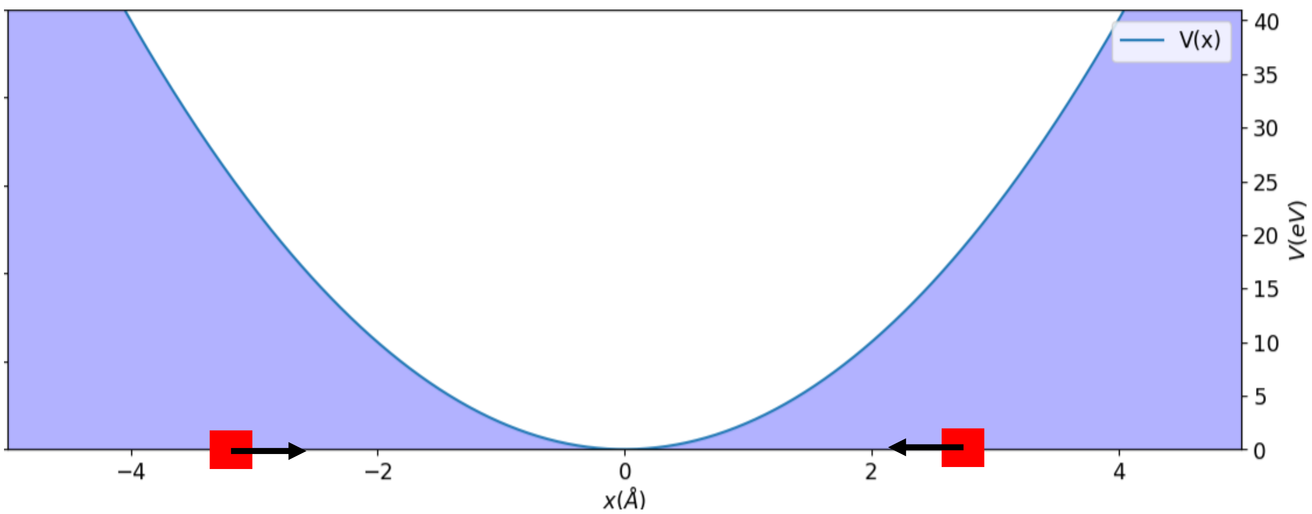
EXERCICI 1. ENERGIA POTENCIAL - *SOLUCIONS*

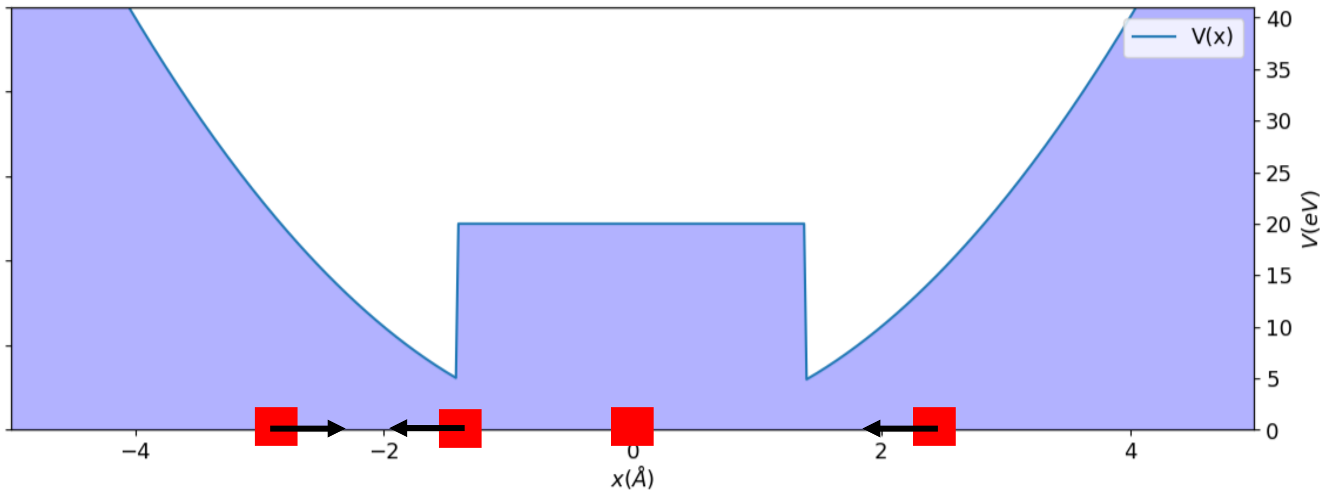
Recorda: L'Energia potencial o potencial és l'energia associada a un punt de l'espai degut a la presència d'un camp de forces. És a dir, si un excursionista puja a dalt d'una muntanya, adquirirà una energia potencial diferent de la que tenia sota la muntanya, degut a que es troba sota els efectes de la força gravitatòria. Aquest potencial es relaciona amb les forces seguint la següent relació (en una dimensió): $\vec{F} = -\frac{dV(x)}{dx}$

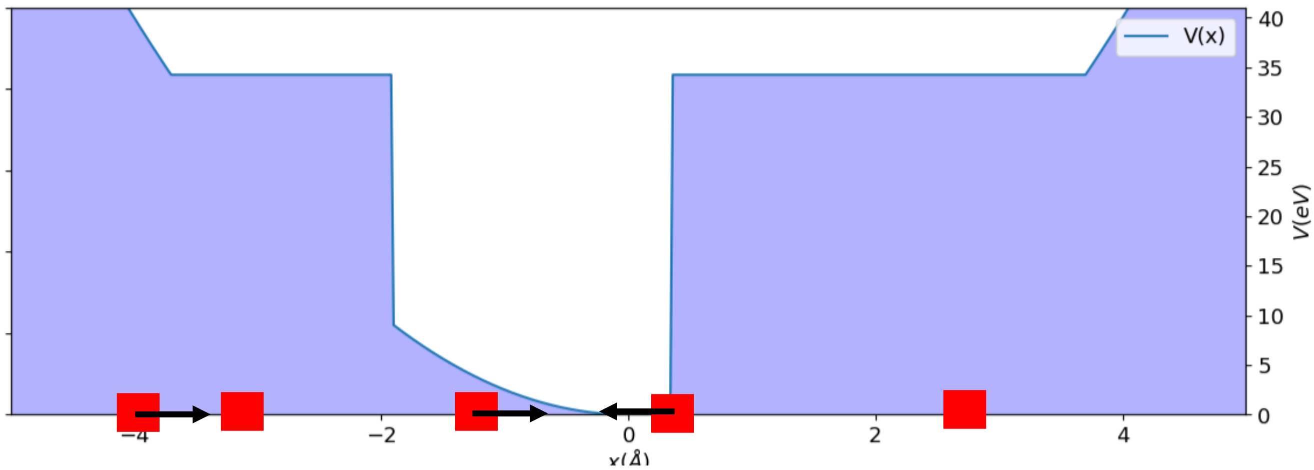
Aquesta relació ens diu que les forces apunten en la direcció en què l'energia potencial es fa més petita. Seguint amb l'exemple de l'excursionista, quan puja la muntanya ha de fer més esforç que quan la baixa perquè la força gravitatòria l'empeny cap avall. Aquesta força apunta cap avall de la muntanya ja que el potencial gravitatori és menor al peu de la muntanya que al cim. Totes les forces amb què es treballen en el joc tenen associada una energia potencial a cada punt.

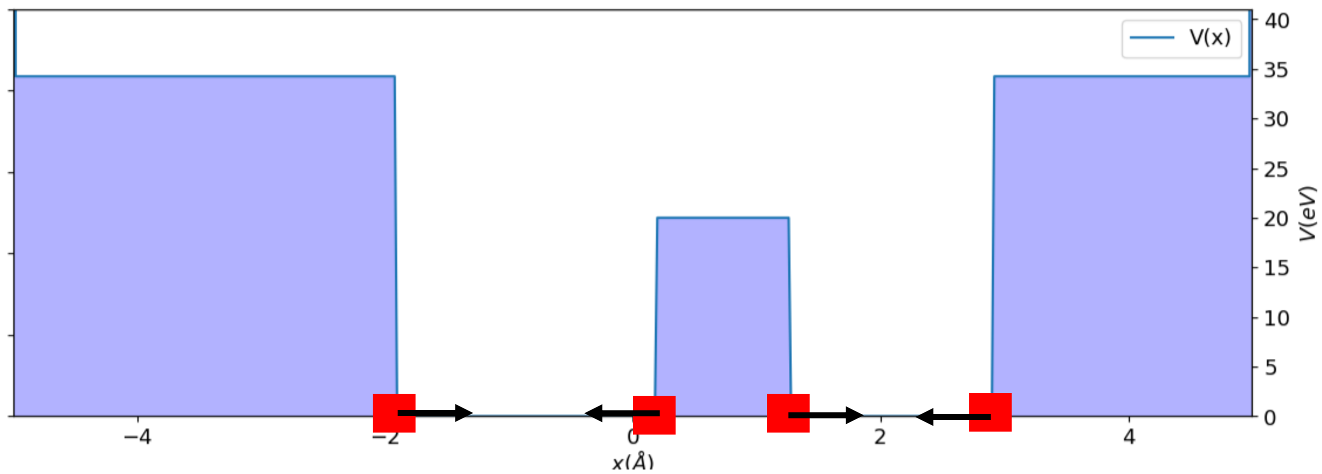
a) **En els següents exemples d'energies potencials dibuixa una fletxa (dreta o esquerra) en els punts indiciats en vermell segons la força apunti cap a la dreta o cap a l'esquerra. Si la força és nul·la en el punt, no hi dibuixis cap fletxa.**

Per resoldre l'exercici cal aplicar que a cada punt la força apunta en la direcció on el potencial disminueix localment.









b) Si la mida de la fletxa representa la magnitud de la força, quines fletxes haurien de ser més grosses: les que es corresponen a barreres verticals o les que es corresponen a barreres inclinades?

Les corresponents a parets verticals, ja que el pendent (derivada) és major i, per tant, també ho és el mòdul de la força.

EXERCICI 2. PROBABILITAT - *SOLUCIONS*

Recorda:

Probabilitat discreta: Són els valors de 0 a 1 que dictaminen com de molt probable és que succeeixi un esdeveniment. Per exemple si tirem una moneda la probabilitat de què surti cara serà 0.5 i la que surti creu serà 0.5. Si tirem un dau cada cara del dau tindrà una probabilitat associada de 1/6. La suma de totes les probabilitats sempre ha de ser 1. Aquestes probabilitats no tenen per què ser totes iguals, per exemple, si tenim una bossa amb 5 boles, 3 vermelles i 2 blaves, la probabilitat de treure una pilota blava és 2/5=0.4 mentre que la probabilitat de treure'n una de vermella és 3/5=0.6.

Probabilitat continua: Si l'esdeveniment que estem estudiant no té valors discrets (el dau és discret perquè pot sortir 1,2,3,4,5 o 6) sinó que pot prendre infinits valors no comptables diem que la variable que estudiem és continua. Per exemple, si estudiem la probabilitat de que una partícula aparegui en una certa posició dins d'una caixa que va de $x = 0$ a $x = 1$, el valors possibles de la posició no seran 0 o 1 sinó que serà qualsevol dels infinits nombres que podem trobar entre 0 i 1. La funció que ens marca la probabilitat o pes de cada posició és la **densitat de probabilitat** $f(x)$. Allà on la densitat de probabilitat prengui valors més elevats serà on més probable és trobar la partícula en qüestió. La probabilitat que la partícula aparegui entre a i b vindrà donada per la integral definida entre a i b de la densitat de probabilitat.

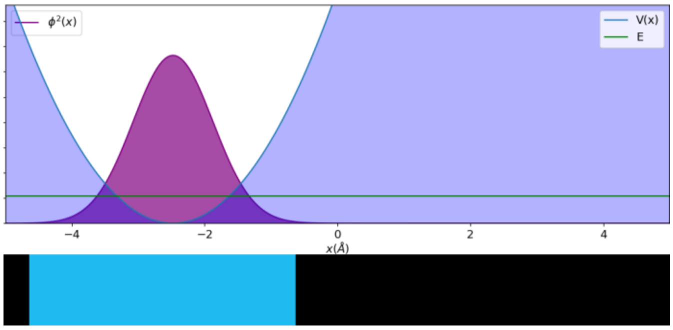
a) Classifica les següents variables aleatòries entre discretes i continues:

Variable discreta	Variable continua
El nombre corresponent a la cara que surt al tirar un dau.	El temps que triga un corredor a fer 100m.
El nombre de gols que marca Messi en una temporada.	L'alçada d'una persona.
El nombre d'arbres en un bosc.	La posició d'un electró quan fem una mesura.
El nivell d'energia en el que es troba un electró.	La nota en un examen entre els alumnes d'una classe.

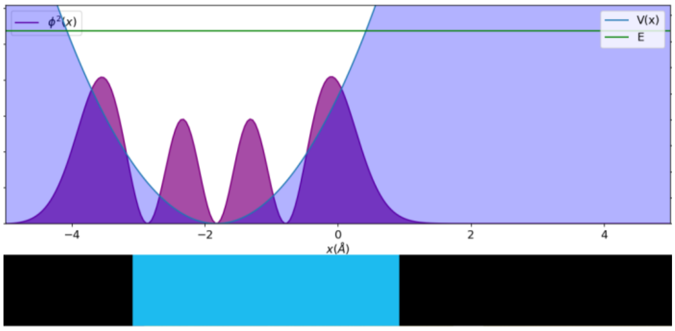
b) Ordena els següents gràfics del 1 al 5 segons sigui més probable que l'electró aparegui dins la zona de color turquesa. En lila es representa la densitat de probabilitat de la posició d'un electró i en blau el potencial ja treballat en l'exercici 1.

De més probable a menys:

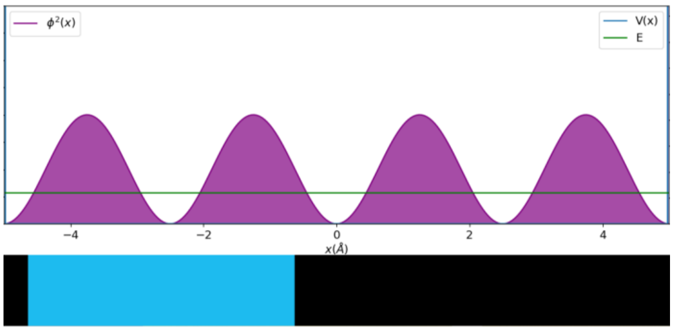
1.



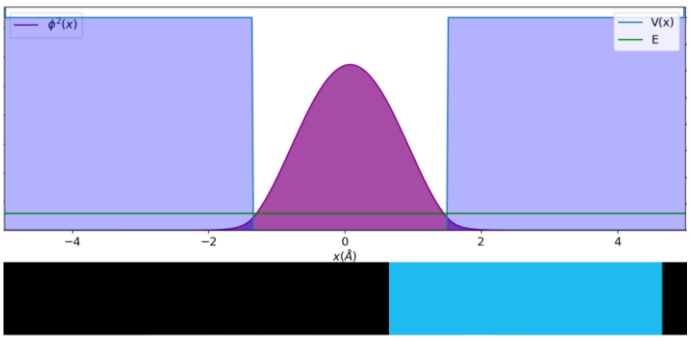
2.



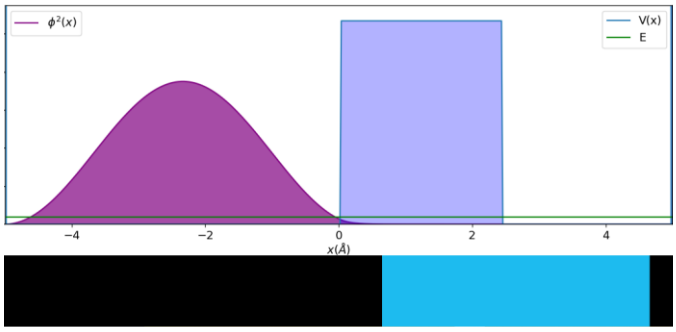
3.



4.



5.



EXERCICI 3. EFECTE TÚNEL *-SOLUCIONS*

Recorda:

Funció d'ona: La funció d'ona d'una partícula representa l'estat físic d'aquesta. Aquesta funció d'ona es dedueix en resoldre l'equació d'Schrödinger (presentada anteriorment) on apareix com $\phi(x)$. El mòdul al quadrat de la funció d'ona és la densitat de probabilitat de la posició de la partícula. És a dir, malgrat no puguem saber on es troba la partícula fins que no efectuem una mesura, sí que podem conèixer les probabilitats d'aparèixer en una certa posició d'aquesta partícula.

Efecte túnel: En física clàssica podem definir l'energia total d'una partícula com la suma de les energies cinètica i potencial. L'energia cinètica sempre és positiva ja que és proporcional a la massa i a la velocitat al quadrat. Per tant, quan ens trobem en una regió de l'espai on el potencial és major que l'energia total de la partícula diem que aquesta regió és una regió prohibida ja que l'energia cinètica hauria de ser negativa. En física quàntica però, això no sempre és així. L'efecte túnel fa que en algunes regions clàssicament prohibides la funció d'ona no sigui zero, és a dir, hi hagi probabilitat de que la partícula aparegui en aquella regió prohibida.

a) **En presència del potencial gravitatori terrestre per a altures petites (V(h)=mgh) llancem un canó de massa m verticalment amb energia cinètica inicial igual a K_o. Fins a quina alçada arribarà el canó? Si el canó es trobés per sobre d'aquesta alçada quin signe tindria l'energia cinètica? Doneu el resultat en funció de m, g i K_o.**

Com bé sabem l'energia total es conserva i sempre serà:

$$E = V + K$$

Inicialment el potencial és nul així doncs.

$$E = E_o = K_o$$

A mesura que augmenti l'alçada l'energia cinètica anirà disminuint fins a fer-se zero en el punt més alt. Així doncs:

$$E = V$$

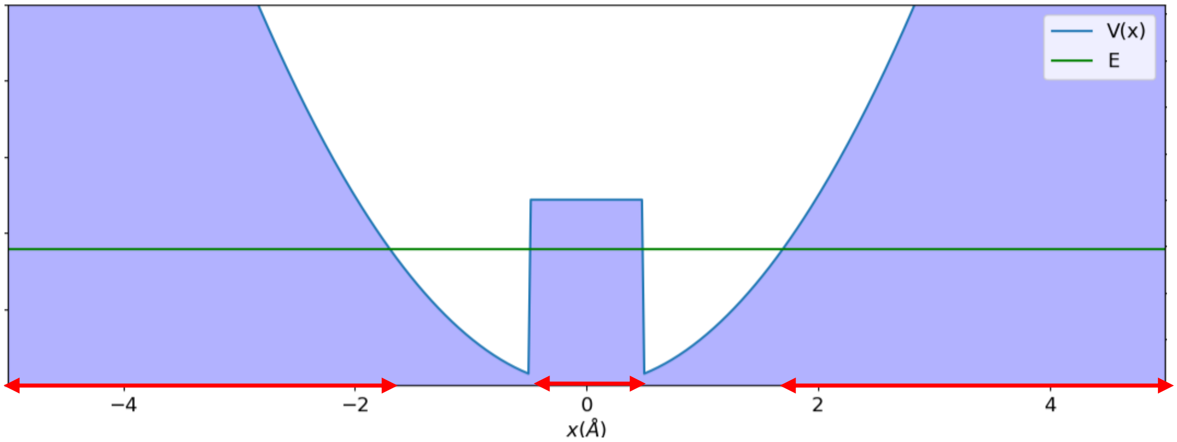
$$K_o = mgH$$

Així doncs l'alçada fins on arriba és:

$$H = \frac{K_o}{mg}$$

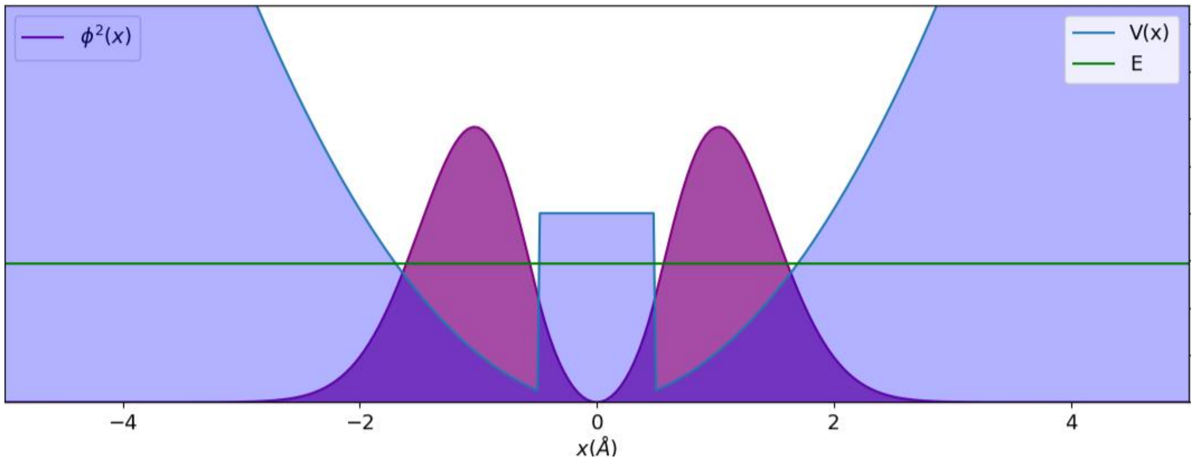
Si superéssim aquesta alçada el potencial seria major que l'energia total del canó, així doncs l'energia cinètica seria negativa: la regió de l'espai per sobre de H és una regió prohibida .

b) Assenyala les zones clàssicament prohibides (zones on l'energia cinètica hauria de ser negativa) en la següent figura: (L'energia es representa en verd i el potencial en blau).



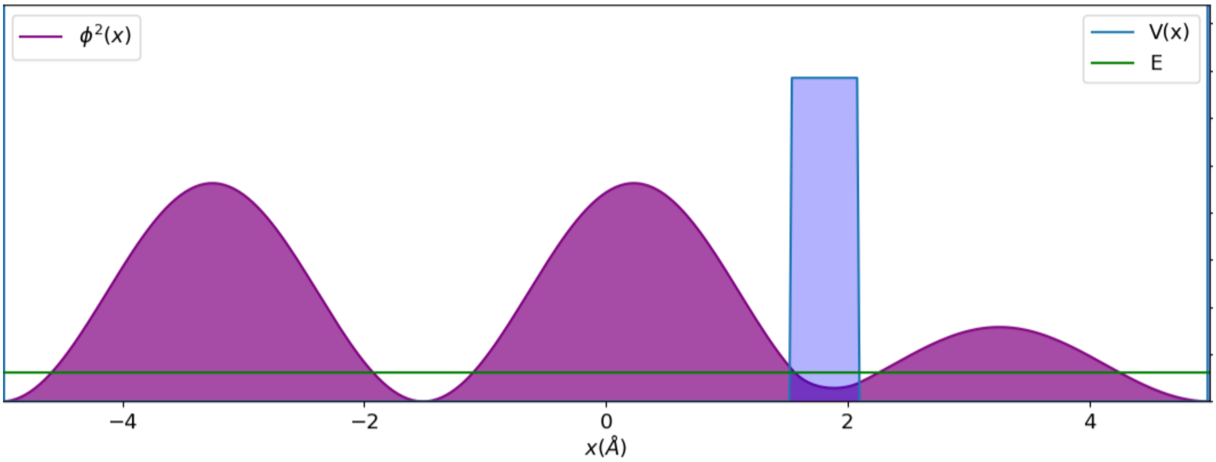
Son zones prohibies ja que el potencial és major que l'energia total, la cinètica hauria de ser negativa.

c) Representem ara la funció d'ona al quadrat, és a dir, la densitat de probabilitat: hi ha probabilitat de trobar l'electró en les zones anteriorment marcades com a prohibides? En cas afirmatiu, és major o menor que la probabilitat en les zones permeses?



Sí, s'observa en les zones clàssicament prohibides que la probabilitat que aparegui l'electró no és nul·la. Aquesta probabilitat és menor que en les zones clàssicament permeses però mesurant uns quants cops podríem aconseguir un electró en una zona clàssicament prohibida sense massa dificultat.

d) Què passa en el següent cas?



En aquest exemple tenim una barrera de potencial molt més gran que l’energia disponible, clàssicament, és una barrera que no es pot penetrar. Observem però, que dins la mateixa barrera hi ha una certa probabilitat que l’electró aparegui i també tenim probabilitat als dos cantons de la barrera fet que fa que l’electró pugui superar aquesta barrera.

e) AMPLIACIÓ: Si realitzem una mesura i observem l’electró en una d’aquestes posicions clàssicament prohibides, quina energia cinètica tindrà? Serà negativa?

En física quàntica no té sentit parlar de posició i velocitat a la vegada. El principi d’incertesa de Heisenberg ens diu que no podem conèixer a la vegada i amb certesa la posició i velocitat d’un electró. Per tant, quan mesurem un electró i aquest apareix en una zona prohibida en coneixem la posició, però no té sentit preguntar-nos quina velocitat té ja que no la podem conèixer.