

# INSTITUTO TECNOLÓGICO Y DE ESTUDIOS SUPERIORES DE MONTERREY

CAMPUS MONTERREY



## Tecnológico de Monterrey

Análisis de sistemas cuánticos

---

### Situación Problema

Entrega 3: Simulación de un paquete gaussiano

---

**Nombre**

**Matricula**

Daniel Pereira Sandino

A00832699

Daniela Cruz Álvarez

A00572205

Carlos Gabriel Espinosa Contreras

A01198290

Arif Morán Velázquez

A01234442

**Profesores:**

Dr. Alfonso Isaac Jaimes Nájera

**November 29, 2023**

# 1 Eigenfunciones del Hamiltoniano de la barrera de pozo de potencial

## 1.1 Analizando el sistema

Como estamos trabajando con un sistema de barrera de pozo de potencial, será importante dividir el sistema en tres secciones y analizar el sistema dependiendo de si nos encontramos ante estados ligados o ante casos de dispersión, lo cual será definido dependiendo del valor de la energía. Para los casos en los que nos encontremos ante un estado de "confinamiento clásico"  $E < V_0$  nos encontraremos ante un espectro discreto de energías, en cambio, para el caso en el que nos encontremos con  $E > V_0$  tendremos un espectro continuo de energías.

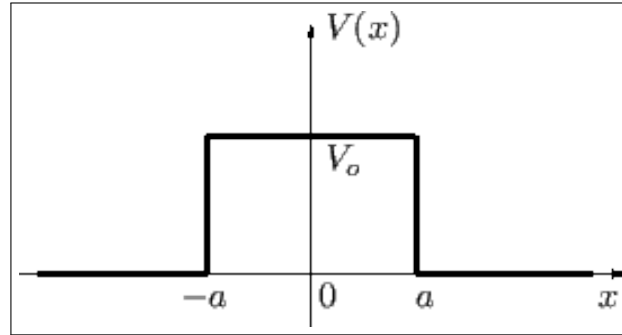


Figure 1: Representación gráfica de un sistema de barrera de potencial.

Para obtener las eigenfunciones del Hamiltoniano para una barrera de pozo de potencial, partimos de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo y la resolvemos para las 3 secciones principales que componen el sistema:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi = E\psi$$
$$E > 0$$

## 1.2 Eigenfunciones para los estados ligados ( $E < V_0$ )

### 1.2.1 Región I ( $x < -a$ )

$$\frac{d^2\psi_1}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi_1 = 0$$
$$\psi_1(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

Donde:  $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$

### 1.2.2 Región II ( $-a \leq x \leq a$ )

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2} + \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}\psi_2 = 0$$
$$\psi_2(x) = Ce^{\kappa x} + De^{-\kappa x}$$

Donde:  $\kappa^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}$

### 1.2.3 Región III ( $x \geq a$ )

$$\frac{d^2\psi_3}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi_3 = 0$$

$$\psi_3(x) = Fe^{ikx}$$

## 1.3 Cálculo de los Coeficientes

Es importante destacar que la función de onda  $\psi_1(x)$  contiene a las ondas incidentes y a las reflejadas, por otro lado,  $\psi_3(x)$  representará las ondas que son transmitidas. Aplicando las condiciones de frontera en  $\psi_1(-a \dots a)$  y  $\psi_2(-a \dots a)$  así como en sus respectivas derivadas se obtuvo la siguiente relación para los coeficientes:

$$\beta_1 \equiv e^{ika-\kappa a} \left( \frac{ik}{\kappa} + 1 \right)$$

$$\beta_2 \equiv e^{ika+\kappa a} \left( \frac{ik}{\kappa} - 1 \right)$$

$$F = 4ikAe^{-ika} [\beta_1 e^{-\kappa a} (ik + \kappa) - \beta_2 e^{\kappa a} (ik - \kappa)]^{-1} \quad (1)$$

$$B = -i \frac{F}{4ke^{ika}} [\beta_1 e^{-\kappa a} (ik - \kappa) - \beta_2 e^{\kappa a} (ik + \kappa)] \quad (2)$$

$$C = \frac{F\beta_1}{2} \quad (3)$$

$$D = -\frac{F\beta_2}{2} \quad (4)$$

## 1.4 Eigenfunciones para los estados dispersivos ( $E > V_0$ )

### 1.4.1 Región I ( $x \leq -a$ )

$$\frac{d^2\psi_1}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi_1 = 0$$

$$\psi_1(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

Donde:  $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$

### 1.4.2 Región II ( $-a \leq x \leq a$ )

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2} + \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}\psi_2 = 0$$

$$\psi_2(x) = Ce^{ilx} + De^{-ilx}$$

Donde:  $l^2 = \frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}$

### 1.4.3 Región III ( $x \geq a$ )

$$\frac{d^2\psi_3}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi_3 = 0$$

$$\psi_3(x) = Fe^{ikx}$$

## 1.5 Cálculo de los Coeficientes

Aplicando las condiciones de continuidad en las eigenfunciones y en sus respectivas derivadas, se obtuvo que la siguiente relación:

$$F = \frac{Ae^{-2ika}}{\cos(2la) - i\frac{(l^2+k^2)}{2kl}\sin(2la)} \quad (5)$$

$$B = iF\frac{\sin(2la)}{2kl}(l^2 - k^2) \quad (6)$$

$$C = Fe^{ika}\left[\sin(la) + \frac{ik}{l}\cos(la)\right] \quad (7)$$

$$D = Fe^{ika}\left[\cos(la) - \frac{ik}{l}\sin(la)\right] \quad (8)$$

## 2 Simulación

Una vez que se obtuvo la relación en los coeficientes, se usó un código en Python que se ocupara de graficar la solución correspondiente a la relación de la energía( $E$ ) con el potencial( $V_0$ ) y su anchura( $a$ ). A continuación se muestran los resultados para los dos casos en los que la energía es mayor al potencial y en el que es menor.

### 2.1 Simulación $E < V_0$

Al observar la figura 2 y 3, se destaca que tanto las dos funciones ( $\psi_1, \psi_2$ ) como sus derivadas ( $\frac{d\psi_1}{dx}, \frac{d\psi_2}{dx}$ ) son continuas. Asimismo, sólo existe una onda plana en el intervalo( $x \leq a$ ) y el coeficiente  $F$  es 0, lo que indica que no se está transmitiendo la onda al otro lado de la barrera de potencial.

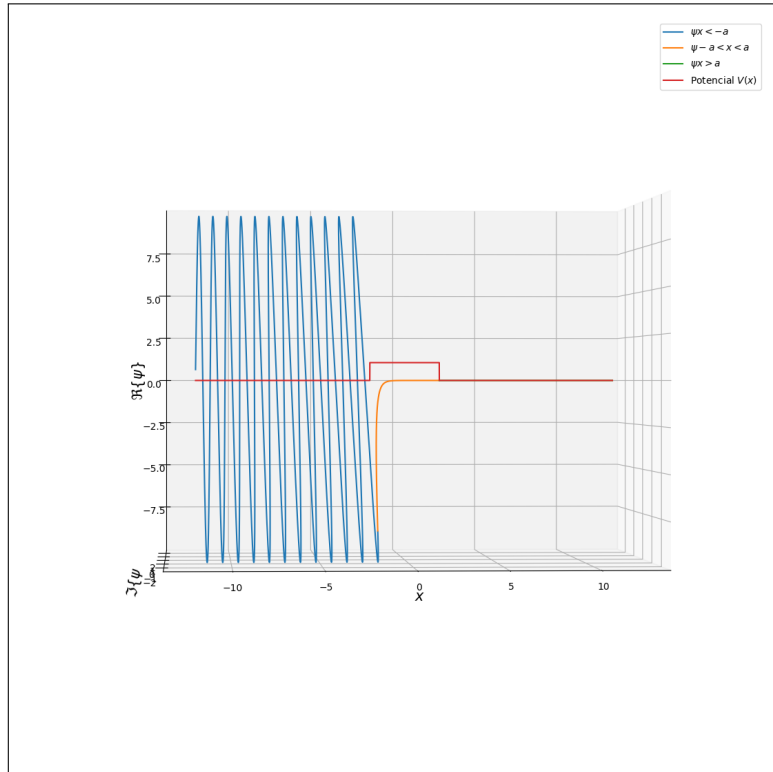


Figure 2:  $\psi_{1,2,3}$  vs  $x$

Utilizando el método de diferencias finitas centradas se derivó la función completa en sus respectivos intervalos.

$$y_i = \frac{y_{i+1} + y_{i-1}}{2\Delta x} \quad (9)$$

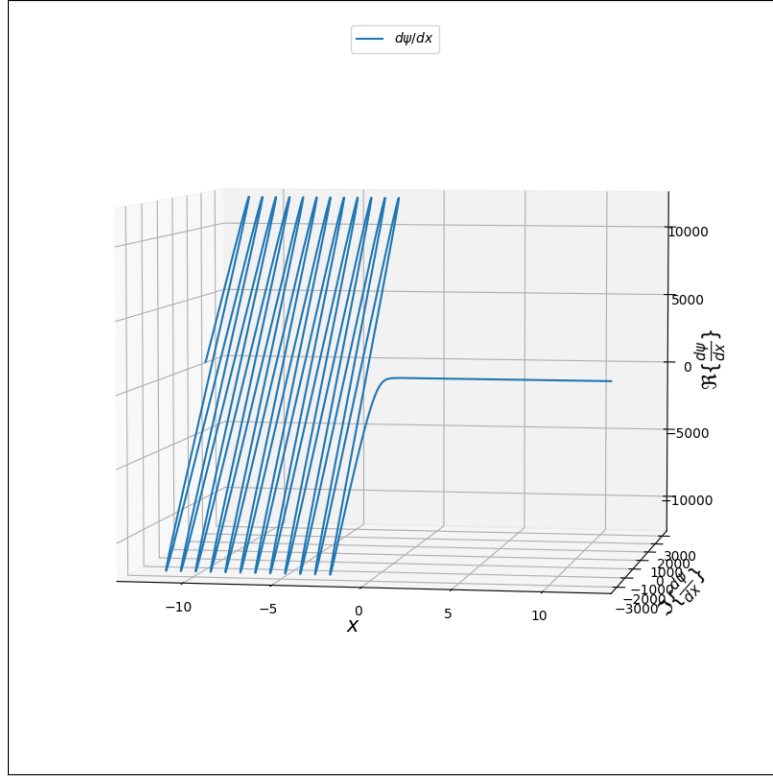


Figure 3:  $\frac{d\psi}{dx}$  vs  $x$

## 2.2 Simulación $E > V_0$

Al analizar la parte real de las funciones, resalta que el comportamiento de las funciones es igual (figura 4). Es decir, se observa como la función  $\psi(-a)$  y  $\psi(a)$  coinciden en los puntos con los puntos en los que  $a = 2$ .

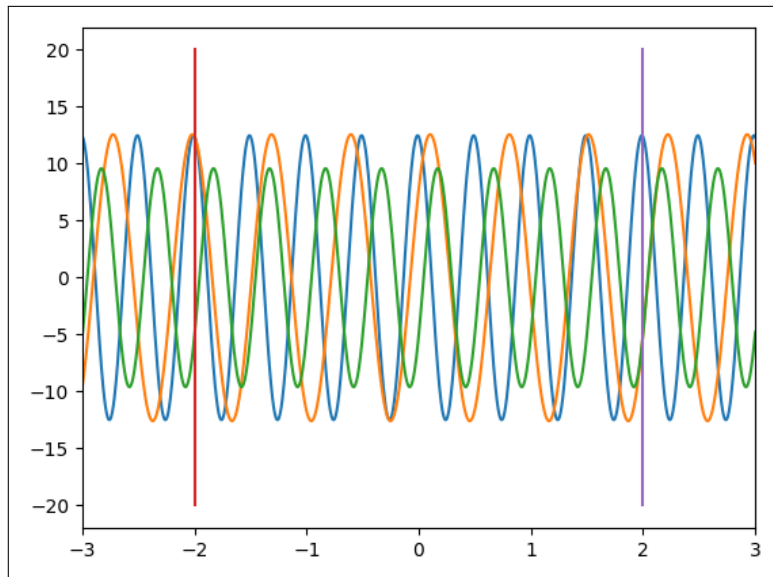


Figure 4:  $\Re\{\psi_{1,2,3}(-a)\}$  y  $\Re\{\psi_{1,2,3}(a)\}$

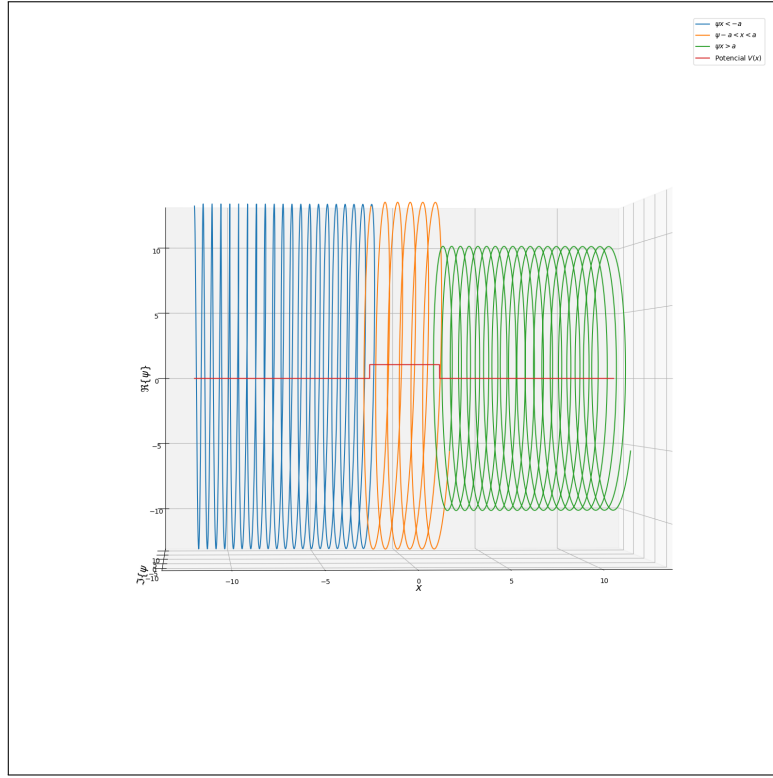


Figure 5:  $\psi_{1,2,3}$  vs  $x$

Nuevamente utilizando la ecuación de diferencias finitas centradas Ec(9), se ve como la derivada es continua y ademas muestra un comportamiento similar a la función  $\psi$  pero escalada.

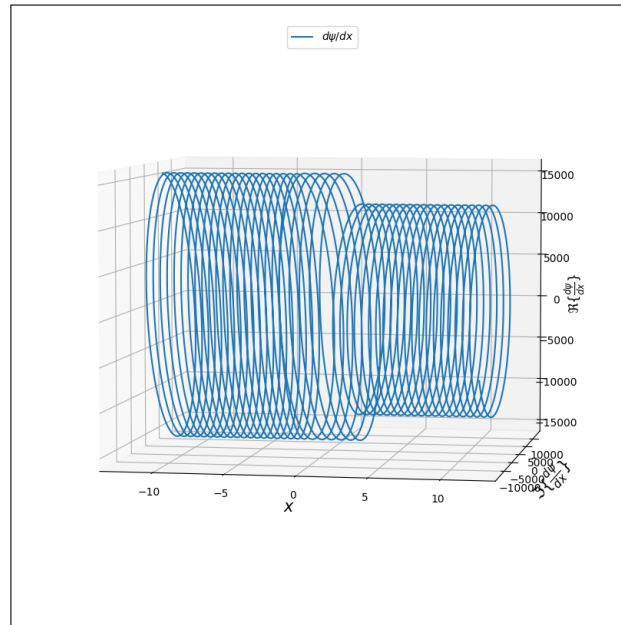


Figure 6:  $\frac{d\psi}{dx}(-\infty < x < \infty)$

### 3 Coeficientes de reflexión y transmisión

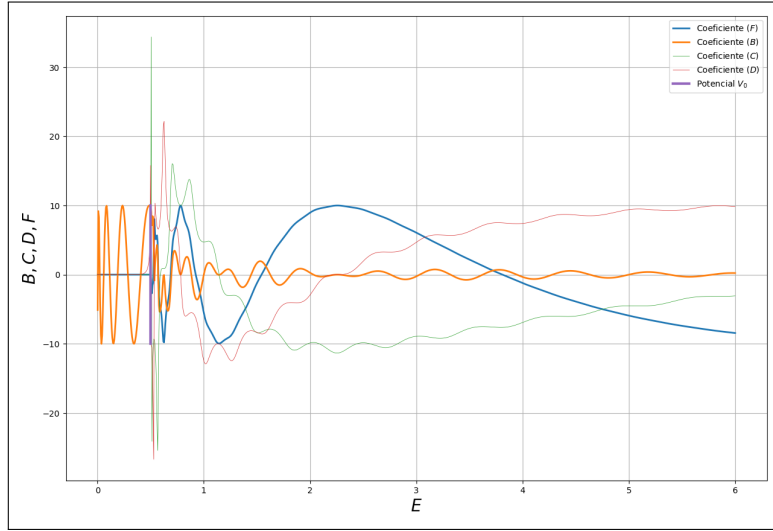


Figure 7: Gráfica de los coeficientes  $(B, C, D, F)$

Una vez que se obtuvo los resultados de los casos y se corroboró que las funciones y sus derivadas fuesen continuas, se calculó los coeficientes  $(B, C, D, F)$  con el código, para distintos valores de energía (figura 7). Asimismo, se obtuvo los valores de Transmitancia  $(T)$  y Reflectancia  $(R)$ , y se graficaron para distintas Energías (Figura 8) a partir de las ecuaciones 10 y 11. Al analizar los resultados, podemos concluir que la reflectancia en efecto son complementarios, es decir, que la suma de  $R + T = 1$ , asimismo se observa como los picos o máximos en los que  $T = 1$  y  $R = 0$ , corresponden a los niveles de Energía  $E_n = n^2\pi^2\hbar^2/2m(2a)^2 + V_0$ . Además de esto, la transmisión es 0 y la Reflectancia es 1 en valores en que  $E < V_0$ , es decir, todo se refleja cuando la energía no supera aquella del potencial. Sin embargo, después de que la energía supera aquel del potencial,  $T$  y  $R$  comienzan a oscilar. Conforme la energía aumenta, el coeficiente  $T$  es más cercano y, por lo tanto, hay mayor probabilidad a que se transmita y con  $R$  ocurre lo contrario.

$$T = \left| \frac{F}{A} \right|^2 \quad (10)$$

$$R = \left| \frac{B}{A} \right|^2 \quad (11)$$

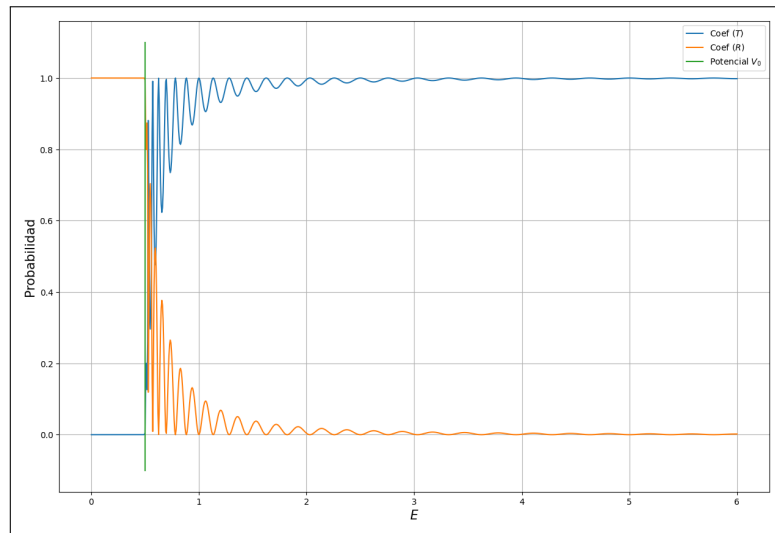


Figure 8: Gráfica de los coeficientes de transmisión y reflexión

## 4 Experimento de Hartman

A lo largo de este apartado se estudia la evolución temporal de un paquete de onda gaussiano en presencia de una barrera de potencial. Esto a partir la ecuación de Shrödinger en una dimensión y el algoritmo de split-step(Fourier). A partir de ello se creó una animación de la evolución temporal de un paquete de onda Gaussiano que interactúa con una barrera de potencial. Posteriormente, se estudia, a través de esta rutina computacional, el efecto Hartman.

### 4.1 Preguntas relativas a los papers

- ¿En qué consiste el sistema estudiado por Hartman?

Hartman analiza el tiempo de retraso de un paquete de ondas en un sistema de barrera de potencial, cuya onda sufrirá un efecto de tunelamiento cuántico. Llegando a la conclusión de que el tiempo de retraso que sufre la partícula en el efecto tunel es independiente de la anchura del potencial.

- ¿Cuál es el estado cuántico que se está estudiando?

Se está estudiando un estado estacionario de dispersión.

- ¿En qué consiste el efecto Hartman?

El efecto Hartman dice que el tiempo de retraso de una partícula que pasa por un efecto tunel es constante e independientemente del ancho de la barrera de potencial. Lo anterior involucra que el efecto Hartman es un efecto superlumínico, esto debido a que si la barrera de potencial es muy ancha, el tiempo que le tardaría a la onda pasar de un extremo de la barrera al otro por efecto túnel sería menor que el de una onda que recorre la misma distancia sin la barrera. Esto se calcula con el método de fase estacionaria y es dado por la derivada de la energía de la fase de transmisión.

### 4.2 Preguntas relativas a la animación

- ¿Cómo se comporta el paquete de onda a medida que transcurre el tiempo?



En un primer momento, el paquete de onda se acerca de forma conjunta a la barrera de potencial, una vez que el paquete de onda interactúa con la barrera este se divide, una parte se ve reflejada y la otra parte logra atravesar la barrera de potencial.

- ¿Cómo es el comportamiento del paquete de onda para diferentes anchos de la Gaussiana (anchos del coeficiente de Fourier)?

El paquete de ondas al ser una superposición de ondas planas, que viajan a diferentes velocidades, conforme el tiempo aumenta se irán separando.

- ¿Qué sucede a medida que aumentas el ancho de la barrera?

A medida que se aumenta el ancho de la barrera, la onda transmitida es menor, mientras que la reflejada es mayor, es decir, las probabilidades de reflexión y transmisión cambian con el ancho de la barrera.

- ¿Qué sucede a medida que aumentas el ancho de la barrera?

A medida que se aumenta el ancho de la barrera, la onda transmitida es menor, mientras que la reflejada es mayor, es decir, las probabilidades de reflexión y transmisión cambian con el ancho de la barrera.

- ¿Qué sucede a medida que aumentas el ancho de la barrera?

A medida que se aumenta el ancho de la barrera, la onda transmitida es menor mientras que la reflejada es mayor, es decir, las probabilidades de reflexión y transmisión cambian con el ancho de la barrera.

- ¿Puedes observar el efecto Hartman?

En un primer momento no se pudo notar el efecto Hartman debido a que el ancho de la barrera de potencial era muy delgado. Posteriormente se aumentó el ancho y se realizó la comparativa de la onda afectada por el potencial contra una onda que no interactuaba con el mismo y se pudo observar que la onda afectada por el potencial, comenzaba a mantenerse mas cercana a la que no era afectada.

- ¿Puede presentarse en este caso un escenario superlumínico?

El efecto Hartman no implica velocidades superlumínicas. Aunque pueda parecer contra intuitivo, ya que la partícula cuántica parece atravesar la barrera de potencial en un tiempo independiente del grosor de la barrera, no implica que la partícula esté viajando a una velocidad mayor que la velocidad de la luz. En el efecto Hartman, la velocidad de la partícula no se mide directamente, y la predicción de independencia del tiempo con respecto al grosor de la barrera se refiere al tiempo de túnel, no a la velocidad de la partícula. El fenómeno sugiere que el tiempo promedio que la partícula tarda en atravesar la barrera puede volverse constante a medida que la barrera cambia de grosor, pero esto no implica que la partícula haya superado la velocidad de la luz en el proceso.

## 5 Algoritmo Split-Step (Fourier)

El metodo de Split-step es un metodo pseudoespectral que nos permite resolver ecuaciones diferenciales parciales no lineales y es común en la solución de la

ecuación no lineal de Schrödinger en óptica. Aplicando el Método de split step (Fourier) SE:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V(x)\Psi$$

$$i \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{1}{\hbar} V(x)\Psi$$

$$\beta = \frac{\hbar}{2m}$$

$$\lambda = \frac{1}{\hbar}$$

$$i \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\beta \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \lambda V(x)\Psi$$

$$\hat{L} \equiv \beta \frac{\partial^2}{\partial x^2}; \hat{N} \equiv -\lambda V(x)$$

Reescribiendo en terminos de  $L$  y  $N$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = (i\hat{L} + i\hat{N})\Psi$$

$$\Psi(x, t) = e^{it(\hat{L}+\hat{N})}\Psi(x, 0)$$

$$\Psi(x, t + dt) = e^{idt(\hat{L}+\hat{N})}\Psi(x, t)$$

$$\Psi(x, t + dt) = e^{idt\hat{L}}e^{idt\hat{N}}\Psi(x, t)$$

Aplicando la transformada de Fourier a la parte Lineal, sabiendo que

$$\mathcal{F}\left\{\frac{\partial^n u}{\partial t^n}\right\} = (\omega i)^n \hat{u} \therefore$$

$$\mathcal{F}\{\hat{L}\Psi\} = \beta \frac{\partial^2 \hat{\Psi}}{\partial t^2} = \beta(\omega i)^2 \hat{\Psi}$$

Sustituyendo:

$$\hat{\Psi}(x, t + dt) = e^{idt(\beta(\omega i)^2)} \mathcal{F}\{e^{idt\hat{N}}\Psi(x, t)\}$$

$$\Psi(x, t + dt) = \mathcal{F}^{-1}\{e^{idt(\beta(\omega i)^2)} \mathcal{F}\{e^{idt\hat{N}}\Psi(x, t)\}\}$$

## 6 Resultados de simulación

Una vez establecido el algoritmo, se procedió a escribir un código en *Julia* para agilizar el tiempo de ejecución de la **simulación**. Este código calcula la función de onda del paquete para un tiempo  $t$  determinado dado un potencial, que en este caso es una barrera con paredes en los extremos para confinar el paquete dentro de nuestra ventana de  $x$ . A este paquete de onda se le asigna una condición inicial

( $t = 0$ ), del lado izquierdo de la barrera, de modo que conforme  $t$  aumenta, el paquete se acerca a la barrera hasta que la encuentra. Condición inicial

$$\Psi(x, 0) = \sqrt{\frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}}} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}} e^{ik_0 x}$$

Dada la condición Inicial, se determinó de tal manera que

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 = 1$$

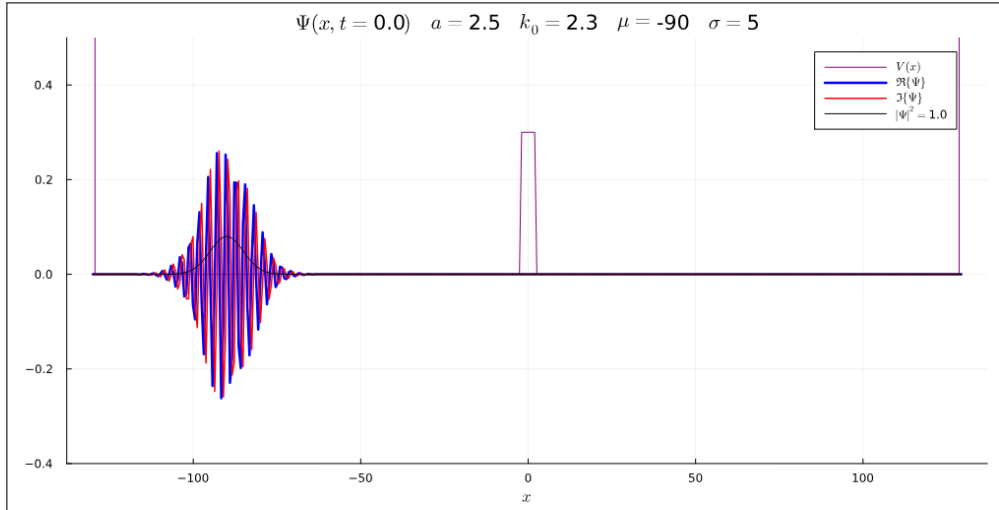


Figure 9:  $\Psi(x, t = 0)$  vs  $x$

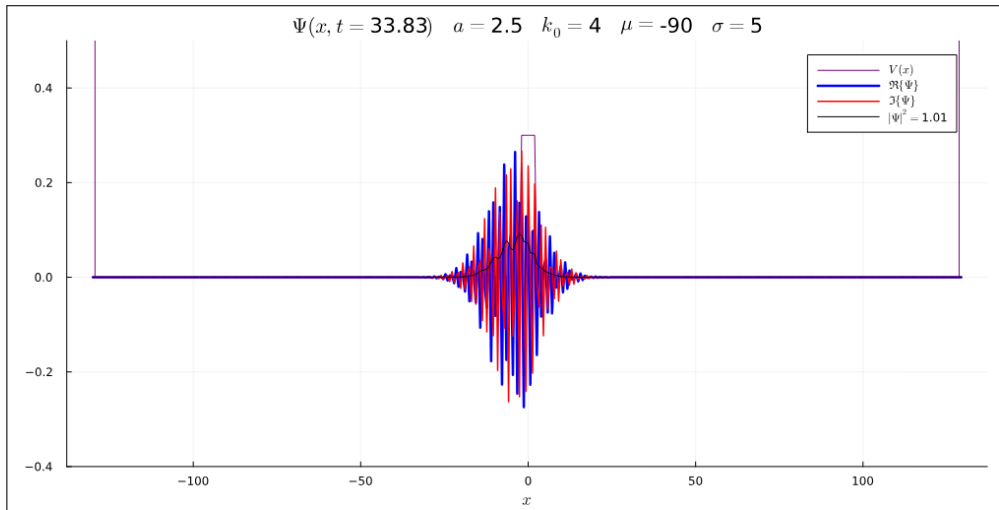


Figure 10:  $\Psi(x, t = 33.83)$  vs  $x$

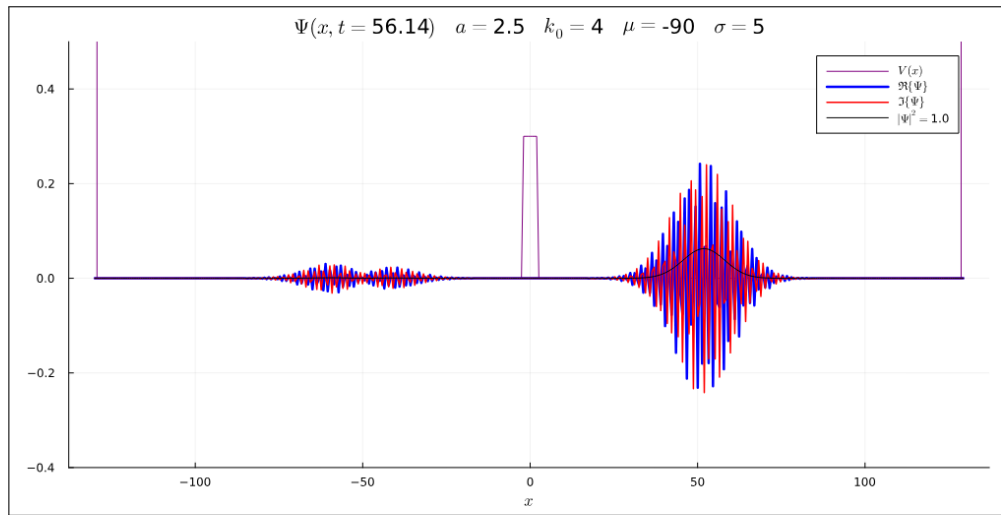


Figure 11:  $\Psi(x, t = 56)$  vs  $x$

### Animación de la simulación

Posteriormente, se procedió a aumentar el ancho de la barrera de potencial para poder estudiar el efecto Hartman.

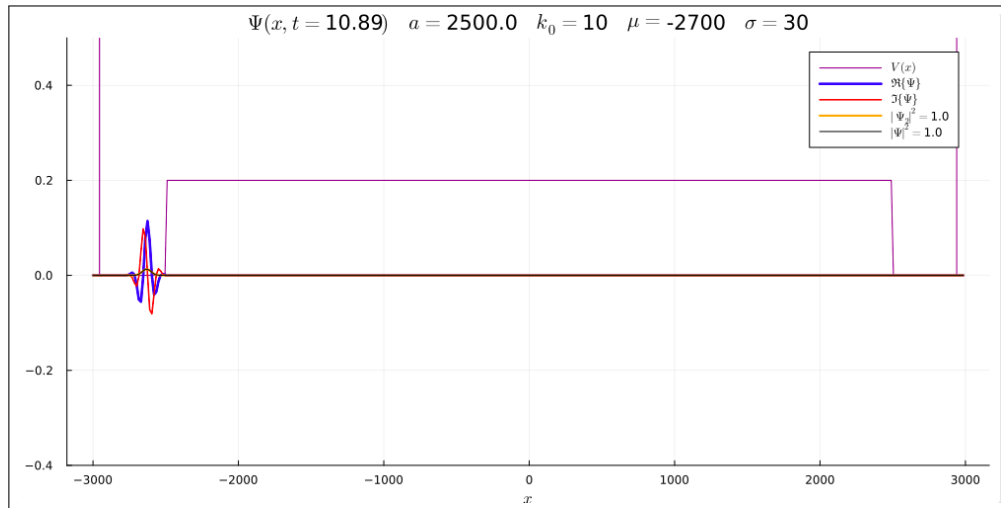


Figure 12:  $\Psi(x, t = 10.89)$  vs  $x$

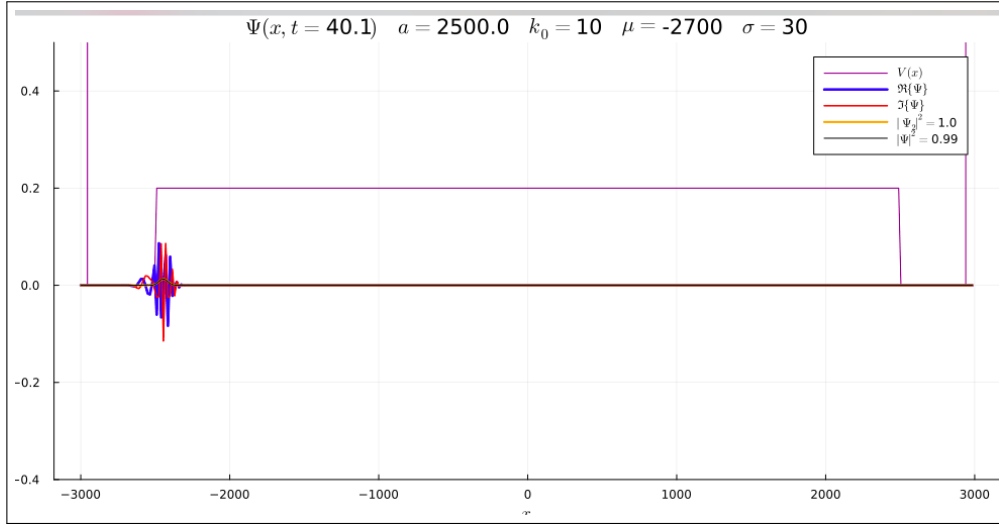


Figure 13:  $\Psi(x, t = 40.1)$  vs  $x$



Figure 14:  $\Psi(x, t = 128.21)$  vs  $x$

A medida que se aumentó el ancho de la barrera se observó que las ondas se mantenían más cercanas, probablemente el efecto Hartman se llegaría a observar si se incrementa aún más el ancho de la barrera del potencial, sin embargo, por limitaciones computacionales no se pudo llevar más allá. Por otro lado, cuándo se hicieron más delgadas las barreras de potencial, se observó que la onda se dispersaba más, esta comparativa se hace evidente en las figuras de la parte superior.

Una de las principales limitantes a lo largo de la simulación consiste en aumentar el tamaño de la ventana de a simular, esto con el fin de aumentar el ancho de la barrera de potencial y analizar el fenómeno estudiado por Hartman. Asimismo, otro punto importante destacar ocurre en la figura 14 en la cual se observa un error numérico, esto debido al número de puntos en los que se discretizó la posición  $x$ , sin embargo, el aumentar la ventana, requiere mayor número de puntos para la discretización; sin embargo, esto aumenta el coste computacional para la propagación en el tiempo, por lo tanto, debíamos sacrificar precisión en la simulación para simular el paquete por mayor tiempo. Algo interesante a resaltar de este error numérico, es que la razón por la que aparece del otro lado de la simulación, es por el método pseudo espectral que estamos usando.

## 7 Conclusiones

La simulación de la propagación de una función de onda a través de una barrera de potencial ha proporcionado valiosa información sobre el comportamiento cuántico en escenarios de tunelamiento cuántico. Sumado a lo anterior, nos pudimos dar cuenta de que realizando una variación del grosor de la barrera, se observan cambios de tiempo en el tunelaje, lo cual invita a estudiar el efecto Hartman. Sin embargo, a pesar de variar los parámetros de grosor  $a, k_0, \sigma$ , no pudimos ver el desfase de tiempo, considerando la definición en la que el tiempo del paquete, debería de ser menor a aquel sin el potencial. Así mismo, como comenta \* el tiempo de retraso de fase no se puede ver como un tiempo de tránsito sino como un tiempo de vida y, por lo tanto, no debe usarse para asignar una velocidad de cruce de barrera, lo cual explica por qué no vimos ese retraso en la simulación.

Los resultados muestran que a medida que incrementamos el grosor de la barrera de potencial, el tiempo de tunelaje exhibe una tendencia a estabilizarse, indicando una aparente independencia frente al aumento de la distancia de barrera. Este fenómeno es consistente con la noción del efecto Hartman, donde el tiempo de tunelaje no crece de manera significativa al aumentar el grosor de la barrera de potencial. Esta observación sugiere una interesante propiedad cuántica: la rapidez con la que una partícula cuántica puede tunelar a través de una barrera parece ser relativamente constante, al menos en el rango de grosores de barrera considerados en esta simulación.

## References

- [Griffiths and Schroeter, 2018] Griffiths, D. J. and Schroeter, D. F. (2018). *Introduction to quantum mechanics*. Cambridge university press.
- [Hartman, 1962] Hartman, T. E. (1962). Tunneling of a wave packet. *Journal of Applied Physics*, 33(12):3427–3433.
- [Winful, 2003] Winful, H. G. (2003). Delay time and the hartman effect in quantum tunneling. *Physical review letters*, 91(26):260401.