

# INSTITUTO TECNOLÓGICO Y DE ESTUDIOS SUPERIORES DE MONTERREY

CAMPUS MONTERREY



Análisis de sistemas cuánticos

---

Situación problema

Entrega 2

---

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 13, 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.

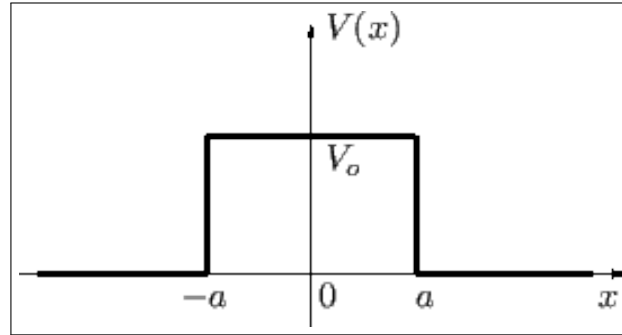


Figure 1: Representación gráfica de un sistema de barrera de potencial.

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.

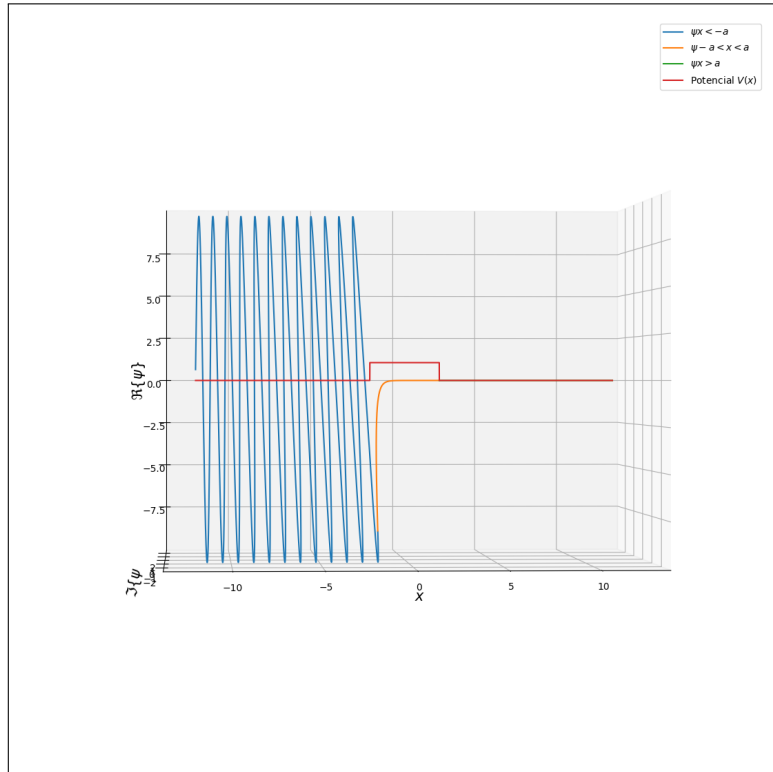


Figure 2:  $\psi_{1,2,3}$  vs  $x$

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

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

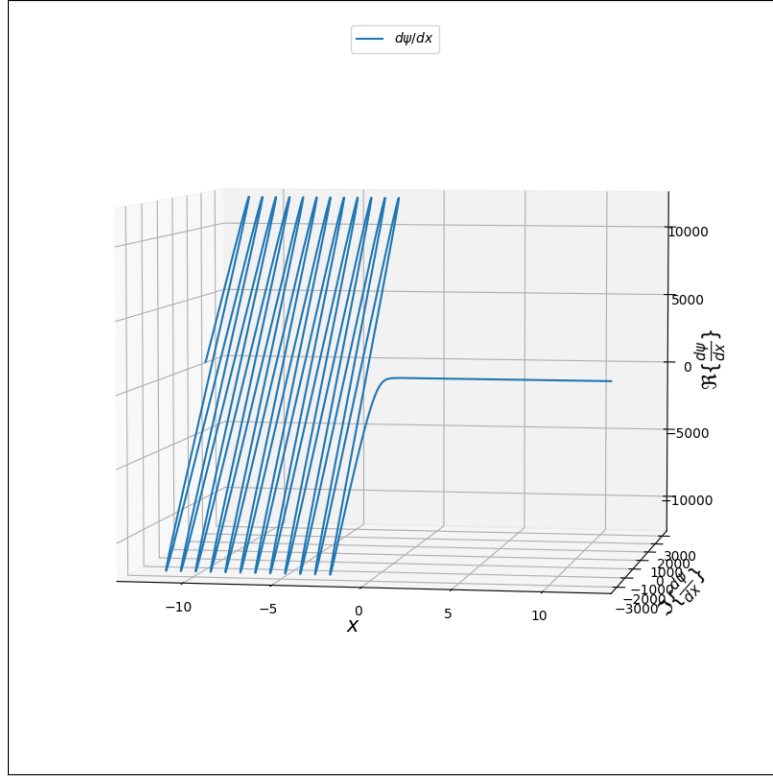


Figure 3:  $\frac{d\psi}{dx}$  vs  $x$

## 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  $a = 2$ .

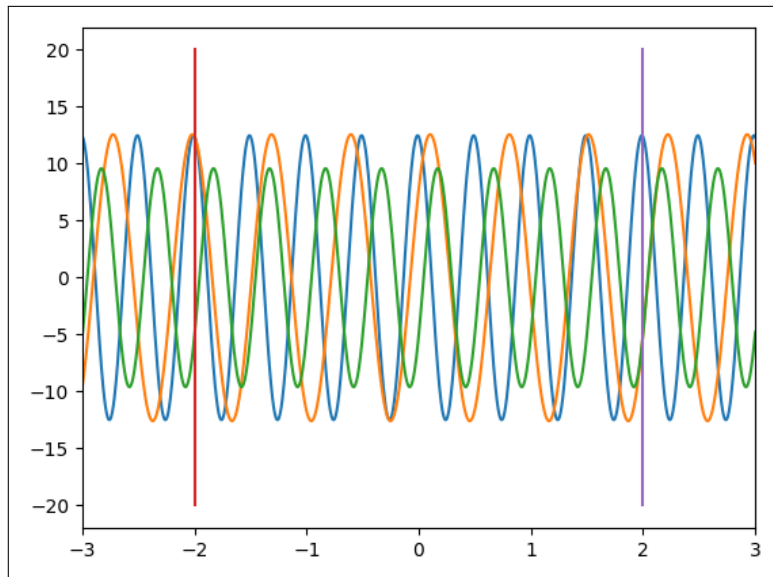


Figure 4:  $\Re\{\psi_{1,2,3}(-a)\}$  y  $\Re\{\psi_{1,2,3}(a)\}$

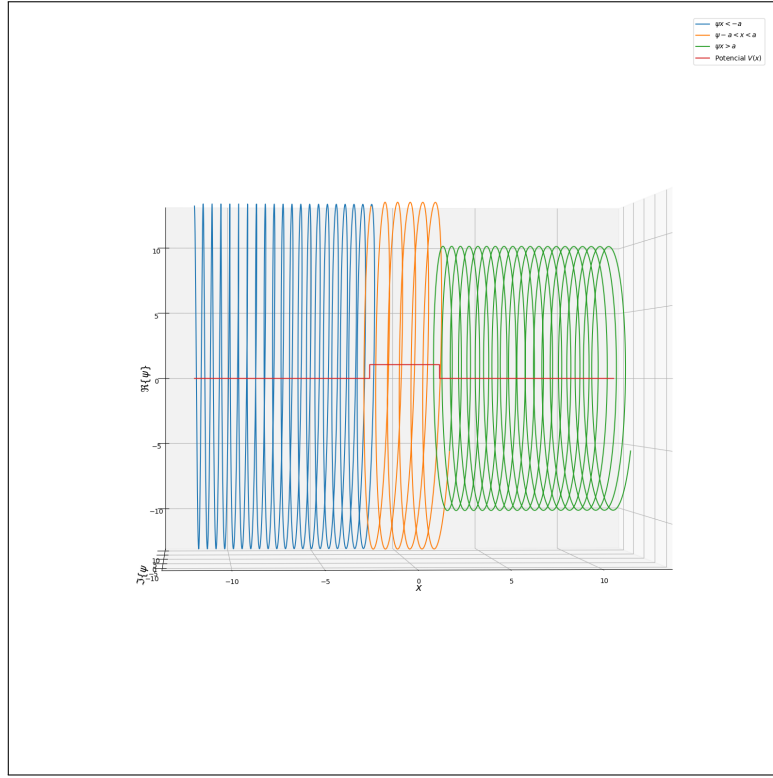


Figure 5:  $\psi_{1,2,3}$  vs  $x$

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.

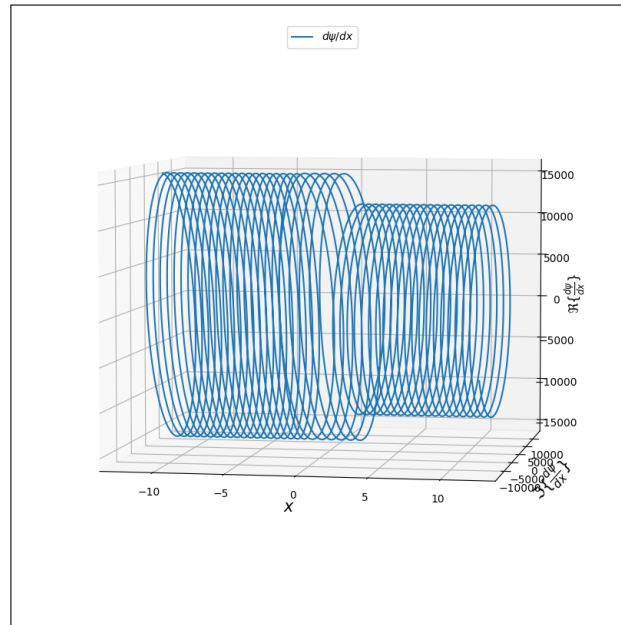


Figure 6:  $\frac{d\psi}{dx}(-\infty < x < \infty)$

### 3 Coeficientes de reflexión y transmisión

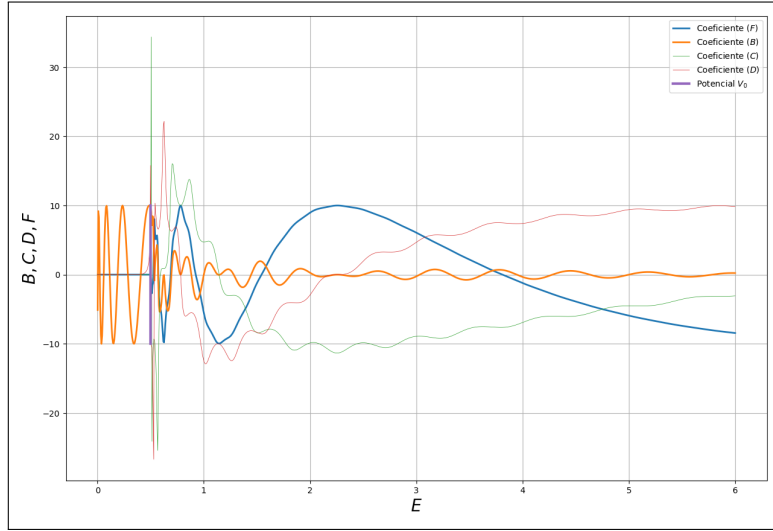


Figure 7: Gráfica de los coeficientes  $(B, C, D, F)$

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.

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

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

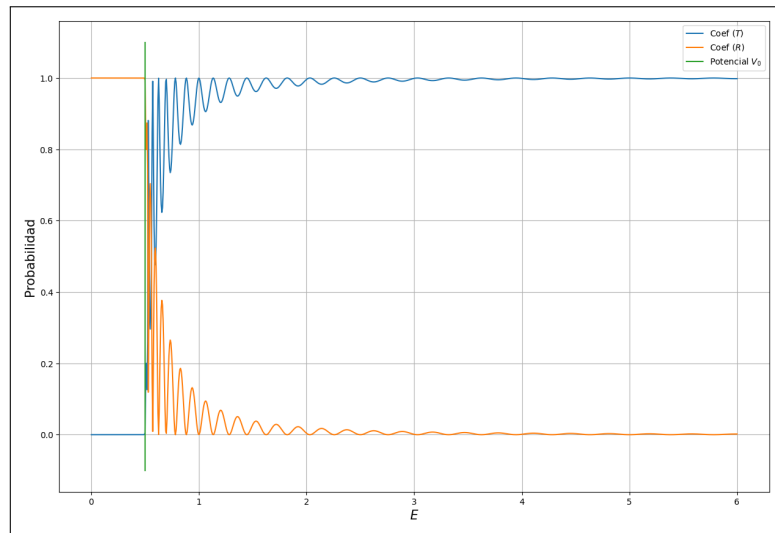


Figure 8: Gráfica de los coeficientes de transmisión y reflexión



## References

[Griffiths and Schroeter, 2018] Griffiths, D. J. and Schroeter, D. F. (2018). *Introduction to quantum mechanics*. Cambridge university press.