

Informe Voluntario

Coeficiente de Transmisión

6 de junio de 2023



Jesús García Portero
Grupo: A1
Profesora: Jara Juana Bermejo Vega

Índice

| | |
|---|-----------|
| 1. Introducción | 3 |
| 1.1. Descripción del algoritmo | 4 |
| 1.2. Determinación teórica del coeficiente de transmisión | 4 |
| 2. Resultados | 5 |
| 2.1. Estimación y comparación del valor de K con el $P_D(n_D)$. . . | 6 |
| 2.2. Dependencia de N en K | 6 |
| 2.3. Dependencia de $V(x)$ sobre K | 7 |
| 2.4. Obtención de los observables en un tiempo con medida y sin ella | 10 |
| 3. Conclusiones | 13 |
| 4. Apéndice | 15 |
| 4.1. Error Estadístico | 15 |
| 4.2. Determinación de los valores esperados de los observables . . . | 15 |
| 4.3. Programas utilizados para cada sección | 16 |
| 5. Referencias | 16 |

Resumen

El objetivo de este informe es estudiar el valor del coeficiente de transmisión (que es la probabilidad de encontrar a la partícula al otro lado del obstáculo para tiempos largos) para una barrera cuadrada según diferentes parámetros que simularé mediante un programa realizado en lenguaje C (lo intenté en C++ pero tuve problemas con las librerías).

1. Introducción

El estudio del coeficiente de transmisión consiste en analizar la fracción de intensidad transmitida cuando una partícula incide en la barrera, que clásicamente podemos dividirlo en dos:

1. Si $E < V_0$, esto es que si su energía total no supera la de la barrera, la partícula choca y tenemos un coeficiente de transmisión $K = 0$, y un coeficiente de reflexión $R = 1 - K = 1$.
2. Si $E > V_0$, la partícula atraviesa completamente la barrera de potencial y entonces $K = 1$ y $R = 0$.

Sin embargo, nosotros no estamos abordando un problema de mecánica clásica, sino de Mecánica Cuántica, donde la partícula representa una función de onda $\psi(\vec{r}, t)$ que tiene asociada una densidad de probabilidad, como su módulo al cuadrado $\rho = |\psi(\vec{r}, t)|^2$. Nosotros hemos utilizado un paquete de ondas Gaussiano, centrada en un punto y con un momento bien definido, que al interaccionar con la primera interfase de la barrera, parte de su amplitud se transmite, otra parte se refleja y del mismo modo cuando atraviesa la segunda a partir de la transmitida de la interfase 1. En términos de probabilidad, tendremos una tanto de transmisión y otra de reflexión. Es importante remarcar que $K + R = 1$, ya que la función de onda y la densidad de probabilidad están normalizadas. También es necesario mencionar el efecto túnel que ocurre cuando $E < V_0$ y la partícula traspasa la barrera de potencial o si $E > V_0$ puede rebotar todo ello debido al integrar la descripción probabilística de la mecánica Cuántica.

1.1. Descripción del algoritmo

El coeficiente de transmisión es la probabilidad de encontrar una partícula a un lado u otro de la barrera en tiempos largos. Tenemos dos detectores uno a izquierda y otro a derecha con un grosor de $N/5$, donde hacemos m simulaciones con m_T , el número de veces que detectamos la partícula que con el detector derecho, $K = \frac{m_T}{m}$. Nuestra forma de medir es la siguiente; dejamos de evolucionar un tiempo n_D , con una probabilidad $P(n_D)$, correspondiente con el primer máximo, que al medir con el detector derecho generamos un número aleatorio entre 0 y 1, donde si $P > x$, seguimos midiendo. En el otro caso, si $P < x$, la función de onda colapsa cero, y la probabilidad se redistribuye por todo el espacio.

Con la figura siguiente será más fácil ver cómo se distribuye la intensidad transmitida y reflejada en cada una de las interfases, donde para asegurarnos unos resultados aceptables tenemos que simular 10^3 veces.

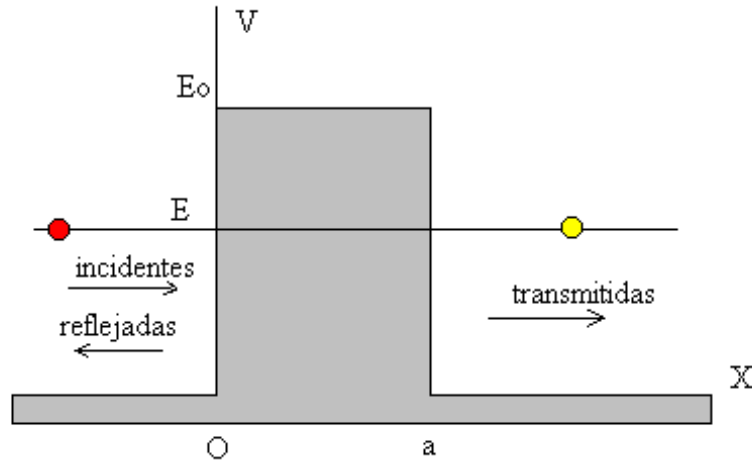


Figura 1: Transmisión y reflexión de la función de onda a través de las dos interfases

1.2. Determinación teórica del coeficiente de transmisión

Una vez explicado brevemente el algoritmo del programa, vamos a incidir en las características del sistema físico estudiado. Tenemos por una parte un potencial V_0 con las siguiente forma:

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{si} & x \leq 0 \\ 0 & \text{si} & 0 < x < 2N/5 \\ V_0 & \text{si} & 2N/5 < x < 3N/5 \\ 0 & \text{si} & 3N/5 < x < N \\ \infty & \text{si} & x \geq N \end{cases} \quad (1)$$

Cuando el potencial es infinito, la función de onda es 0. Por otra parte debemos distinguir los dos casos donde $E \leq V_0$ o $E > V_0$. En la simulación debemos elegir dos parámetros; uno $\lambda = \frac{E}{V_0}$ y otro $n_{ciclos} = \frac{Nk_0}{2\pi}$. A partir de la definición de kL , lo desarrollamos como:

$$kL = \sqrt{|E - V_0|}L = \sqrt{|E - \lambda E|}L = k_0\sqrt{|1 - \lambda|}\frac{N}{5} = \frac{2\pi}{5}n_{ciclos}\sqrt{|1 - \lambda|} \quad (2)$$

Definitivamente si distinguimos entre los dos casos posibles mencionados anteriormente el coeficiente de transmisión se nos queda:

$$K(\lambda, n_{ciclos}) = \begin{cases} \frac{4(1-\lambda)}{4(1-\lambda) + \lambda^2 \sin^2(\frac{2\pi}{5}n_{ciclos}\sqrt{1-\lambda})} & \text{si} \quad \lambda < 0 \\ \frac{4(1-\lambda)}{4(1-\lambda) + \lambda^2 \sinh^2(\frac{2\pi}{5}n_{ciclos}\sqrt{\lambda-1})} & \text{si} \quad \lambda > 0 \end{cases} \quad (3)$$

2. Resultados

Para la simulación se ha utilizado un tiempo ($n_D = 500$) con 10^3 simulaciones con diferentes valores de λ , N y número de ciclos según la altura del potencial y la dimensión del espacio usado y el número de ciclos de la función de onda.

2.1. Estimación y comparación del valor de K con el $P_D(n_D)$

Para este apartado se ha comparado la probabilidad obtenida al medir en el lado derecho para 1000 simulaciones, comparando con el valor del coeficiente de transmisión, donde del total simulaciones, solo un cierto porcentaje de esas simulaciones son detectadas por el detector derecho. Así según el criterio que hemos escogido para medir, se tiene que cumplir que $K \geq P_D(n_D)$. Así representaremos con tres diferentes alturas de potencial λ 0'3, 1 y 5 respectivamente:

| K | $P_D(n_D)$ |
|-------|------------|
| 1 | 1 |
| 0'513 | 0'379 |
| 0'006 | 0'00157 |

Tabla 1: Comparación de K con $P_D(n_D)$

La probabilidad obtenida es el promedio de las probabilidades obtenidas por el detector derecho durante las diferentes experiencias en las que se ha estado midiendo la partícula.

2.2. Dependencia de N en K

Hemos comprobado experimentalmente como varía el coeficiente de transmisión según la dimensión que queramos coger, nosotros lo hemos analizado para diferentes N ; 100, 200, 500, 1000 y 2000 respectivamente, ya que en un primer lugar se hizo con las dimensiones que se proponían y no se obtenía una respuesta lo suficientemente clara. Así mismo, se ha obtenido el siguiente gráfico:

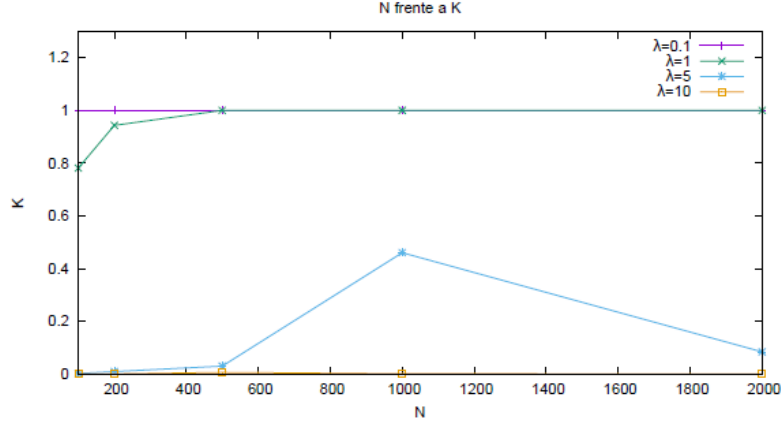


Figura 2: El coeficiente de transmisión para diferentes λ con diferentes N

El parámetro que se ha utilizado en la simulación ha sido $n_{ciclos} = 5$. Observamos que para pequeñas alturas de potencial 0'1, 0'3, 0'5 da los mismos resultados, por lo que solo he representado la de 0'1. Para $\lambda = 1$, vemos que para N pequeños tiene un comportamiento un tanto errático, que parece estabilizarse en N más grandes, algo lógico, porque cuanto menos discretizado es nuestro sistema nuestros resultados tienen más error debido a los operadores que actúan sobre este.

Por otra parte vemos que para $\lambda = 5$ y $\lambda = 10$ se tiene un comportamiento de $K \ll 1$, excepto en un punto para $N = 1000$ y $\lambda = 5$, se obtiene un pico que no tiene demasiada explicación, quizás algún error en el cómputo, pero viendo la tendencia general, no se debe tener mucho en cuenta. Además lo visto experimentalmente se puede ver viendo la ecuación (3), que K no depende de N , aunque en la expresión de n_{ciclos} sí depende de N , se ve que el factor que influye más es la discretización del espacio y no la expresión hallada previamente.

2.3. Dependencia de $V(x)$ sobre K

Se ha utilizado una dimensión $N = 1000$ y $n_{ciclos} = 50$, ya que por lo visto anteriormente en dimensiones más grandes se obtienen valores más estables. Obtenemos la siguiente gráfica:

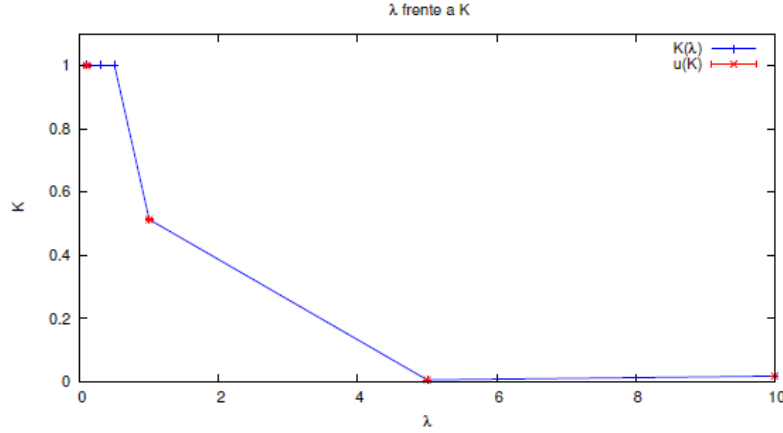


Figura 3: El coeficiente de transmisión para diferentes λ

Como vemos nos salen resultados razonables, ya que como es lógico, en λ pequeñas, correspondientes a un potencial pequeño, las partículas atraviesan con facilidad el potencial y conforme aumenta el potencial, hay un cambio abrupto donde las partículas no atraviesan prácticamente el potencial. Además, podemos ver que los errores obtenidos son muy pequeños, ya que el número de simulaciones es alto. Los errores estadísticos hallados (véase en el apéndice) son los propios de variables aleatorias con el método de cálculo de errores de Montecarlo. En este caso, se ha obtenido este error con un criterio de 3σ , lo que nos proporciona una probabilidad del 99'74 % de que los resultados obtenidos se encuentren entre dicha barra de error.

Por otra parte también tenemos otra fuente para conocer la precisión de nuestros resultados. Y esa es el desarrollo que hemos realizado para obtener (2), arrojando los siguientes resultados con los datos usados para representar la figura (3). Además, si estudiamos la dependencia λ sobre K , vemos que predomina sobre el denominador el término λ^2 , que nos indica a mayor λ , el coeficiente de transmisión decae al cuadrado de forma muy simplificada. Además, vamos a realizar una comparación de la figura (3) entre el coeficiente de transmisión obtenido experimentalmente y el teórico hallado mediante la ecuación (3), para $\lambda > 0$, obteniéndose que:

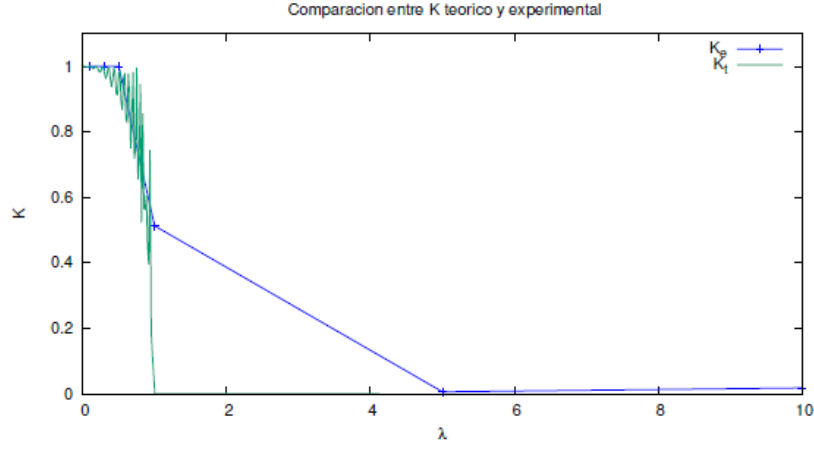


Figura 4: Comparación del coeficiente de transmisión teórico y experimental

Como se puede observar para λ pequeñas se obtiene que el K_t fluctúa entorno al valor experimental y luego hay una discrepancia entre los dos coeficientes debido a que nuestros resultados dependen de la discretización del espacio usado y por eso no observamos el cambio abrupto que se ve claramente con el coeficiente de transmisión teórico.

Por último vamos a comparar distintos K_t con una altura de potencial λ según diferentes n_{ciclos} , obteniendo lo siguiente:

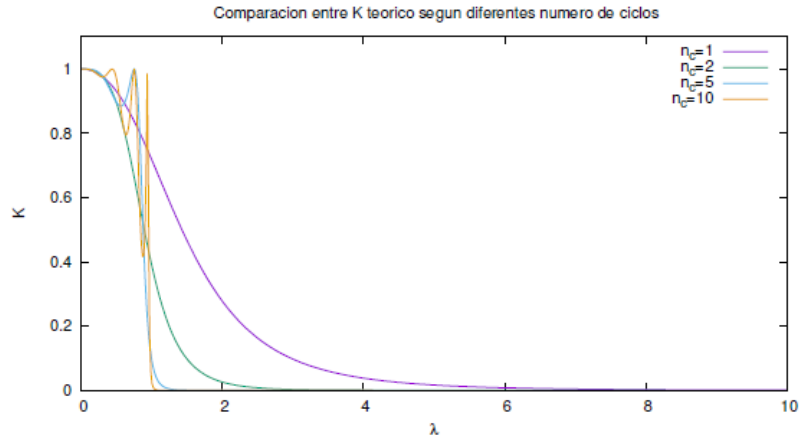


Figura 5: Comparación del coeficiente de transmisión teórico para diferente número de ciclos

Finalmente aquí podemos observar el efecto túnel para un n_{ciclos} bajo, aproximadamente para $n_{ciclos} \leq 5$. Para n_{ciclos} mayores vemos un cambio abrupto donde ya desaparece el efecto túnel. Sin embargo, para poder simular el efecto con nuestros medios necesitaríamos una gran cantidad de pasos temporales, haciendo que la capacidad de cómputo fuera muy elevada, factor que nos complicaría mucho los resultados a menos que tengamos un supercomputador. En nuestras simulaciones hemos utilizados un número de ciclos muy alto para obviar dicho efecto.

2.4. Obtención de los observables en un tiempo con medida y sin ella

A continuación, se ha hecho una comparación de los valores promedios de diferentes observables con sus respectivos operadores \hat{x} , \hat{p} , \hat{E} y \hat{T} , con sus correspondientes errores hallados de la siguiente forma genérica según un operador \hat{O} como:

$$\Delta O = \sqrt{\langle \Delta O \rangle^2 - \langle \Delta O^2 \rangle} \quad (4)$$

En primer lugar se ha representado la posición de la partícula en un tiempo sin medida y en otro con medida en $t = 500$, los resultados obtenidos son para $\lambda = 1$ y $n_{ciclos} = 50$:

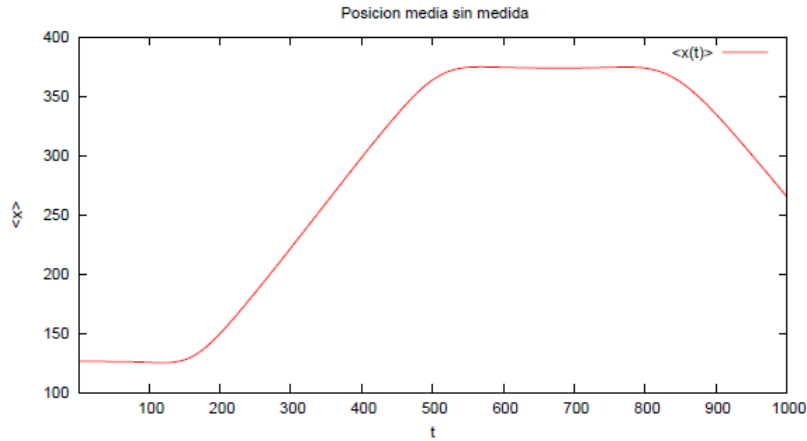


Figura 6: Posición sin medida

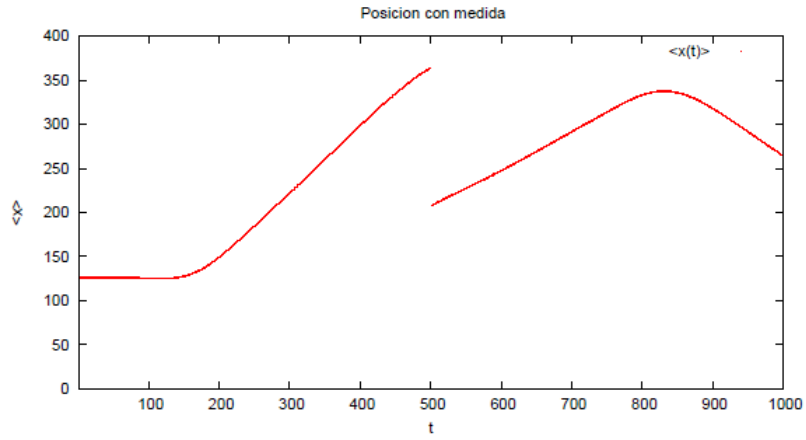


Figura 7: Posición con medida

Como podemos observar en la figura(6), el paquete de ondas se aleja de su origen teniendo el máximo justamente en $t = 500$, correspondiente con el primer máximo de probabilidad hallado previamente y en el otro caso hacemos colapsar la función de onda en este máximo, haciendo que esta probabilidad se haga mínima y se vuelva a distribuir por el espacio generando un nuevo pulso, así es lógico ver una discontinuidad de la posición en el tiempo que hemos medido.

Ahora vamos a observar lo que ha ocurrido con el momento en estas dos situaciones físicas:

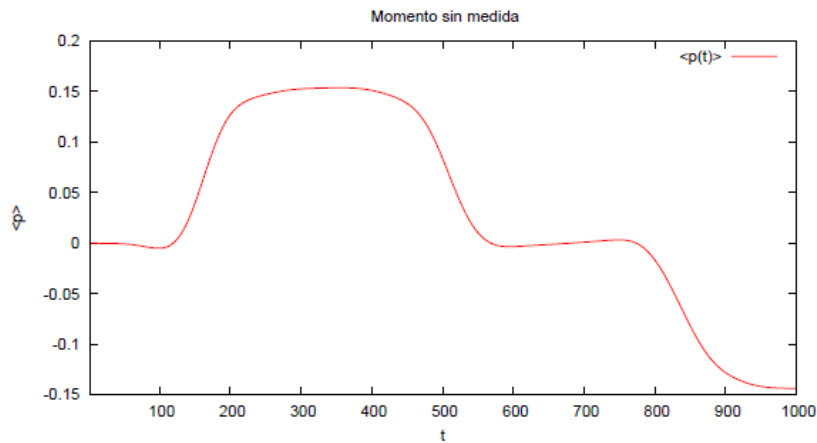


Figura 8: Momento sin medida

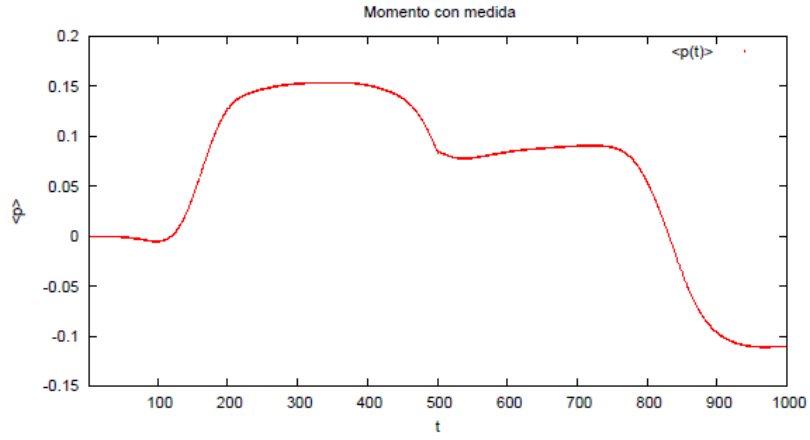


Figura 9: Momento con medida

En este caso, vemos que las gráficas no presentan discontinuidad alguna, algo que parece bastante extraño. Aun así, aunque $t = 500$ no presente discontinuidad y al colapsar la función de onda el momento, sí vemos un cambio en este caso de tendencia entre ambas gráficas, y podemos explicar los mínimos del momento y los máximos cuando el paquete de ondas interacciona o no con la barrera de potencial respectivamente. Además, el cambio de signo del momento indica que la dirección en la que viaja el paquete gaussiano, en la que el cambio de signo en $t \approx 800$ representa la reflexión de este pulso.

Por último, vamos analizar conjuntamente la energía cinética y total para ambos casos, obteniendo estos resultados:

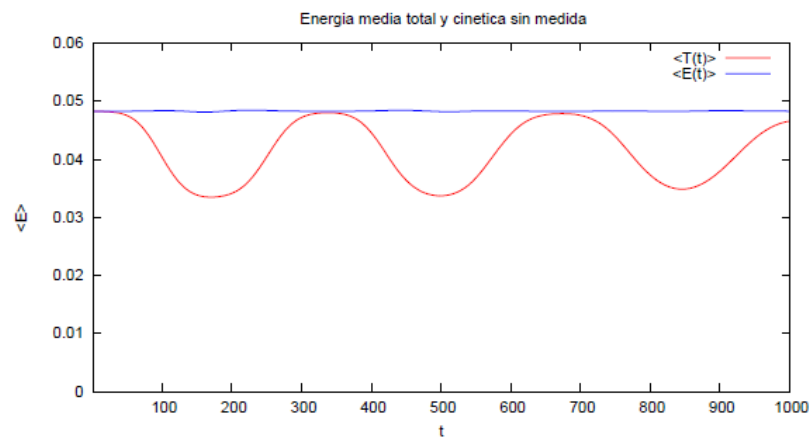


Figura 10: Energía sin medida

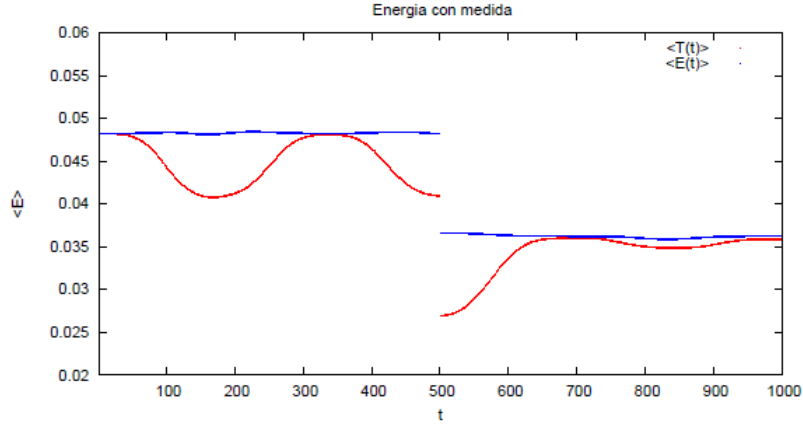


Figura 11: Energía con medida

Para la energía obtenemos resultados acordes a lo visto con la posición media, por una parte se ve que la energía total se mantiene constante con bastante precisión y la energía cinética fluctúa con máximos que son iguales a la energía total del sistema, entonces la energía potencial sería máxima en los puntos donde la energía cinética es mínima. Por ello, podemos resumir que los resultados se ajustan a lo esperado. Para el caso de la Energía sin medida, vemos que en $t = 500$ hay una discontinuidad donde la energía cinética es mínima, lo cual corresponde con que, al hacerse la probabilidad 0, se genere un nuevo paquete con un comportamiento donde la energía cinética tiende a ser igual a la energía total hecho que corresponde con una zona donde no haya barrera de potencial.

Destaco que en el anexo incluyo cómo se obtienen teóricamente los valores esperados de los operadores, ya que no la he podido representar debido a que son de un orden de magnitud igual o mayor al de los valores esperados representados.

3. Conclusiones

Los resultados obtenidos en general son los esperados, aunque hay algunos aspectos que no hemos podido simular debido a algunas limitaciones de nuestra simulación. Las conclusiones que cabe destacar son las siguientes:

1. Se ha visto que el algoritmo propuesto maximiza correctamente la pro-

bilidad en torno a n_D , ya que se cumple que $P(n_D) \leq K$, que coincide con los puntos donde el momento y la energía cinética se hacen mínimos y la posición es máxima, algo que aunque no pueda parecer que tenga correlación se ve cuando estudias la función de onda asociada a la partícula en un tiempo sin medida, ya que a partir de conocer el máximo de la probabilidad tienes garantizado trabajar con una onda estable.

2. Hemos observado que es muy difícil observar el efecto túnel, principalmente por las limitaciones que hay de cómputo ya que deberíamos aumentar considerablemente la dimensión e intentar asemejar nuestras simulaciones a los resultados que obtendríamos teóricamente. El efecto túnel se observa cuando $n_{ciclos} \leq 5$. Para barreras de potencial mayores, se ve un cambio abrupto entre el coeficiente de transmisión y desaparece cualquier aparición del efecto túnel.
3. Acorde con el punto anterior, vemos que hay una estabilización del coeficiente de transmisión a mayor dimensión de N , algo razonable porque discretizamos más el espacio.
4. Hemos comprobado mediante el cálculo de los valores esperados el efecto que tiene medir, esto es que la función de onda colapsa ya que tenemos definido la posición y momento de la partícula, y la probabilidad en dicho punto es cero, lo que genera discontinuidades. En general, hemos visto que la energía total media de la partícula se conserva y la cinética fluctúa según cuando la partícula incide o no sobre la barrera de potencial.
5. El error obtenido ha sido bastante bajo ya que por el método de Técnicas Montecarlo, el factor de que N sea muy grande con respecto a la varianza significa que la incertidumbre tiene que ser baja.
6. Para finalizar, me gustaría incidir que con un programa con un algoritmo relativamente sencillo se ha podido predecir gran cantidad de fenómenos físicos, que son muy útiles para entender el concepto de "medir", la descripción probabilística de la mecánica cuántica, algo que resulta muy enriquecedor para cualquier estudiante de física.

4. Apéndice

4.1. Error Estadístico

El error estadístico hallado del coeficiente de transmisión ha sido mediante Técnicas Montecarlo con variables aleatorias:

$$\bar{K} = \sum_{i=1}^N K_i \quad (5)$$

donde K_i representa el valor del coeficiente de transmisión en cada experimento y \bar{K} , es el valor tras $N = 1000$ simulaciones.

Por tanto su varianza al cuadrado sería:

$$\sigma^2 = \sum_{i=1}^N (K_i - \bar{K})^2 \quad (6)$$

Y finalmente su incertidumbre asociada sería con un criterio de tres sigmas, que nos proporciona una probabilidad del 99'74 % que se encuentre en esa barra de error:

$$\Delta \bar{K} = \pm 3 \frac{\sigma}{\sqrt{N}} \quad (7)$$

4.2. Determinación de los valores esperados de los observables

En resumen, el valor esperado de un observable $\langle O \rangle$, se puede hallar como:

$$\langle O \rangle = \int \langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle dx = \int \psi^*(x) \hat{O}(\psi(x)) dx \quad (8)$$

Los operadores de cada observable son los siguientes, donde consideramos que $\frac{\hbar}{2m} = 1$:

$$\hat{x}|\psi\rangle = x|\psi\rangle \quad (9)$$

$$\hat{p}|\psi\rangle = -i \frac{\partial}{\partial x} |\psi\rangle \quad (10)$$

$$\hat{T}|\psi\rangle = -\frac{\partial^2}{\partial x^2}|\psi\rangle \quad (11)$$

$$\hat{E}|\psi\rangle = \left(-\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right)|\psi\rangle \quad (12)$$

En nuestro caso, los operadores actúan sobre los observables no son continuos sino que están discretizados por N , por tanto tenemos una suma de N términos y no una integral.

4.3. Programas utilizados para cada sección

Para los apartados 2.1, 2.2 y 2.3 se han utilizado los programas `transmision.c` y `transmision_e.c`. Para el apartado 2.4 han sido los programas `schrodinguer_st.c` y `schrodinguer_t.c`.

https://github.com/Estelador/FisicaComputacional/tree/master/Voluntarios/Vol_CoefTrans

5. Referencias

[1] Franco, A. (6 de junio de 2023). *Mecánica Cuántica. Barreras de potencial*. Curso Interactivo de Física en Internet.

sc.ehu.es/sbweb/fisica/cuantica/principios/tunel/tunel.html

[2] Física Cuántica en la Red. (21 de octubre de 2014). *La barrera de potencial*.

fisicacuantica.es/barrera-de-potencial/

[3] Apuntes de Classroom de Física Computacional (Slides de Schrodinger y Apuntes de errores de técnicas Montecarlo)

[4] Apuntes varios de Física Cuántica