

# RESOLUCIÓN DE ECUACIONES EN DERIVADAS PARCIALES: LA ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER. ESTUDIO DEL COEFICIENTE DE TRANSMISIÓN.

ISMAEL QUIRANTES BAMOHAMED

Física Computacional 2020/2021



## ÍNDICE

1. Fundamento teórico.	3
1.1. Imagen de Schrödinger y valores esperados.	3
1.2. Coeficiente de transmisión.	3
2. Metodología.	4
2.1. Cálculo numérico de la evolución de la función de onda.	4
2.2. Estudio del coeficiente de transmisión.	6
3. Resultados y discusión.	7
3.1. Sistema con $N=500$	7
3.2. Sistema con $N=1000$	9
3.3. Sistema con $N=2000$	10
4. Conclusiones.	12
5. Bibliografía.	12

## 1. FUNDAMENTO TEÓRICO.

Imaginemos que tenemos una partícula de masa  $m$ , en mecánica clásica diremos que hemos resuelto el problema cuando resolvemos la ecuación diferencial que nos proporciona la 2ª ley de Newton, ya que obtenemos  $x(t)$  y a partir de la posición podremos obtener la velocidad, aceleración, fuerza... En mecánica cuántica [1] abordamos el problema de una forma totalmente distinta. Se resuelve la *ecuación de Schrödinger* para obtener  $\psi(x, t)$ , que es la función de onda. A partir de la función de onda puede obtenerse la información sobre el sistema. Dicha ecuación es:

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

La mecánica cuántica supone una nueva visión del problema, que es íntegramente probabilista. La probabilidad de encontrar a la partícula en la posición  $x \in [x, x + dx]$  en el tiempo  $t$  vendrá dada por:

$$P = |\Psi(x, t)|^2 dx \quad (2)$$

Vamos a trabajar con un Hamiltoniano independiente del tiempo [2], luego podemos escribir la solución de la función de onda como

$$\Psi(x, t) = e^{-i(t-t_0)H} \psi(x, t_0) \quad (3)$$

donde  $\psi(x, t)$  cumplen la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo:

$$H\psi = E\psi \quad (4)$$

**1.1. Imagen de Schrödinger y valores esperados.** La imagen de Schrödinger es un formalismo de la mecánica cuántica que es la que se ha utilizado en este documento. Esta dicta que el estado  $|\Psi\rangle$  es la que tiene la dependencia con el tiempo, cosa que no pasa con los observables. Entonces, estos estados cumplen la ya nombrada ecuación de Schrödinger.

El valor esperado de un observable  $A$  viene dado por:

$$\langle A \rangle = \langle \Psi | A | \Psi \rangle \quad (5)$$

y representa el valor más probable de obtener al realizar una medida de este observable en nuestro sistema.

**1.2. Coeficiente de transmisión.** En este apartado vamos a analizar brevemente lo que le sucede a una partícula representada por  $|\Psi\rangle$  al toparse con un potencial  $V(x)$ .

La mecánica clásica establece dos casos extremos para la interacción de una partícula con un potencial: o pasa porque esta tiene una energía superior al potencial ( $T=1, R=0$ ) o no lo hace porque su energía es menor ( $T=0, R=1$ ). Sin embargo, la cuántica establece que la probabilidad de que suceda cualquiera de los dos sucesos (transmisión o reflexión) no es nula (efecto tunel), siendo más probable uno u otro dependiendo de la situación.

Según [4] los coeficientes de transmisión teóricos son, para nuestro caso (escalón de potencial):

$$T = \frac{V_0^2 \sinh^2(k_1 a)}{4E(V_0 - E) + V_0^2 \sinh^2(k_1 a)} \quad E < V_0 \quad (6)$$

$$T = \frac{4E(E - V_0)}{4E(E - V_0) + V_0^2 \sin^2(k_1 a)} \quad E > V_0 \quad (7)$$

Si sustituimos y utilizando nuestro reescalamiento obtenemos:

$$T = \frac{4(\lambda - 1)}{4(\lambda - 1) + \lambda^2 \sinh^2\left(\frac{2\pi n_{\text{ciclos}}}{5} \sqrt{\lambda - 1}\right)} \quad E < V_0 \quad (8)$$

$$T = \frac{4(1 - \lambda)}{4(1 - \lambda) + \lambda^2 \sin^2\left(\frac{2\pi n_{\text{ciclos}}}{5} \sqrt{1 - \lambda}\right)} \quad E > V_0 \quad (9)$$

## 2. METODOLOGÍA.

**2.1. Cálculo numérico de la evolución de la función de onda.** Para simplificar y evitar el uso reiterado de constantes se realizarán los siguientes cambios de variable:

$$x \rightarrow x\hbar/\sqrt{2m} \qquad t \rightarrow t\hbar$$

Luego, la ecuación de Schrödinger nos queda de la siguiente forma:

$$\left[ \frac{\partial^2}{\partial x^2} - V(x) \right] \Psi(x, t) = -i \frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad (10)$$

El siguiente paso será discretizar el espacio y el tiempo para poder resolver la ecuación de forma numérica. Las posiciones podrán determinarse por una constante  $j$  tal que  $x = jh$ , donde  $h$  es el espaciado. Se hace lo mismo con el tiempo, una constante  $n$  determina el tiempo de la siguiente manera:  $t = ns$ , donde  $s$  es el espaciado temporal. Entonces diremos que  $\Psi(x, t) = \Psi(jh, ns) = \Psi_{jn}$

Nuestro sistema estará confinado entre unas barreras de potencial infinito situadas en  $x = 0$  y  $x = L = Nh$ , luego la función de onda en estos puntos será nula (esto es  $\Psi_{0n} = \Psi_{Nn} = 0$ ).

Podemos definir un primer algoritmo de recurrencia para obtener las funciones de onda a partir de una onda inicial:

$$\Psi_{j,n+1} = e^{-isH} \Psi_{j,n} \quad (11)$$

El operador Hamiltoniano, en nuestro caso, consistirá a groso modo en una derivada segunda espacial, luego con métodos aproximados podemos encontrar una expresión para calcular derivadas primeras y segundas de la función de onda:

$$\frac{\partial \Psi_{j,n}}{\partial x} = \frac{\Psi_{j,n} - \Psi_{j+1,n}}{h = 1} \quad (12)$$

$$\frac{\partial^2 \Psi_{j,n}}{\partial x^2} = \frac{1}{h^2 = 1} (\Psi_{j+1,n} - 2\Psi_{j,n} + \Psi_{j-1,n}) \quad (13)$$

Podemos desarrollar en series de Taylor la exponencial si  $s$  es muy pequeño, quedando la recurrencia:

$$\Psi_{j,n+1} = (1 - isH + O^2(isH))\Psi_{j,n} \quad (14)$$

Pero la exponencial aproximada de esta forma no nos queda como un operador unitario por lo que nos presentará problemas relacionados con la normalización de la función de onda. Es por eso que usaremos la *aproximación de Cayley*, quedando finalmente la recurrencia:

$$\Psi_{j,n+1} = \frac{1 - isH_D/2}{1 + isH_D/2} \Psi_{j,n} \quad (15)$$

Podemos reescribir la recurrencia:

$$\Psi_{j,n+1} = \left[ \frac{2}{1 + isH_D/2} - 1 \right] \Psi_{j,n} = \frac{2}{1 + isH_D/2} \Psi_{j,n} - \Psi_{j,n} = \chi_{j,n} - \Psi_{j,n} \quad (16)$$

Dada una función de onda  $\Psi_{j,n}$  puede obtenerse un valor de  $\chi_{j,n}$ :

$$\chi_{j+1,n} + \left[ -2 + \frac{2i}{\tilde{s}} - \tilde{V}_j \right] \chi_{j,n} + \chi_{j-1,n} = \frac{4i}{\tilde{s}} \Psi_{j,n} \quad (17)$$

donde  $\tilde{s} = s/h^2$ ,  $\tilde{V}_j = h^2 V_j$  y  $V_j = V(j)$  el potencial en la posición  $x = hj$ . Luego ya tenemos todas las herramientas para calcular la evolución de una función de onda dada  $\Psi_{j,n}$ : a partir de esta se calculan las  $\chi_{j,n}$  y se aplica la recurrencia (16).

Nos queda ver como resolver la ecuación (17). Vamos a suponer que sus soluciones son del tipo:

$$\chi_{j+1,n} = \alpha_j \chi_{j,n} + \beta_{j,n} \quad (18)$$

Sustituyendo en (17) nos queda:

$$\chi_{j,n} = -\frac{1}{-2 + 2i/\tilde{s} - \tilde{V}_j + \alpha_j} \chi_{j-1,n} + \frac{b_{j,n} - \beta_{j,n}}{-2 + 2i/\tilde{s} - \tilde{V}_j + \alpha_j} \quad (19)$$

Podemos obtener los coeficientes alpha y beta:

$$\alpha_{j-1} = -\frac{1}{-2 + 2i/\tilde{s} - \tilde{V}_j + \alpha_j}, \quad \beta_{j-1,n} = \frac{(b_{j,n} - \beta_{j,n})}{-2 + 2i/\tilde{s} - \tilde{V}_j + \alpha_j} \quad (20)$$

El cumplimiento de las condiciones de contorno implica que  $\chi_{N,n} = \alpha_{N-1} = \beta_{N,n} = 0$ , luego se pueden calcular estos coeficientes en orden decreciente.

Una vez calculados estos coeficientes ya estamos en condiciones de obtener las  $\chi_{j,n}$ , luego podremos calcular la evolución de la función de onda.

Cabe destacar que el sistema que hemos simulado consiste en una región de longitud  $N$  en el que se ha aplicado un potencial positivo de la siguiente forma:

$$\tilde{V}_j = V_j h^2 = \begin{cases} 0 & \text{si } j \notin [2N/5, 3N/5] \\ \lambda \tilde{k}_0^2 & \text{si } j \in [2N/5, 3N/5] \end{cases} \quad (21)$$

donde  $k_0^2$  es la energía de la onda y en nuestras unidades:

$$k_0^2 = \frac{2\pi n_{ciclos}}{N} \quad (22)$$

y  $n_{ciclos}$  son las oscilaciones completas de la función onda que tiene sobre nuestro sistema.

**2.2. Estudio del coeficiente de transmisión.** Ya tenemos las herramientas para poder evolucionar cualquier función de onda dada. Ahora vamos a estudiar el coeficiente de transmisión, magnitud ya definida en la sección del fundamento teórico.

Simularemos un sistema con un potencial escalón finito de longitud  $N/5$  y de valor  $\lambda \tilde{k}_0^2$ . Nuestro experimento consistirá en colocar dos detectores de la partícula en los dos extremos de nuestra región (a la izquierda y a la derecha del potencial) de longitud cada uno  $N/5$ . Haremos evolucionar una función de onda inicial de tipo gaussiana

$$\Psi_{j,0} = e^{i\tilde{k}_0 j} e^{-8(4j-N)^2/N^2} \quad (23)$$

$n_D$  pasos temporales (se ha elegido esta cifra de modo que no sea demasiado pequeña para que no llegue a interactuar con el potencial, ni demasiado grande para que el efecto del borde derecho de nuestro sistema perturbe nuestras medidas). A continuación se comprueba si se ha detectado a la partícula en el detector derecho evaluando la siguiente probabilidad:

$$P_D(n) = \sum_{j=4N/5}^N |\Phi_{j,n}|^2 \quad (24)$$

Si se ha detectado se anota y se repite el experimento. Por el contrario, si no se detecta, vemos si se ha detectado en el de la izquierda. Para ello se evalúa la siguiente probabilidad (después de hacer la función de onda 0 en la región que ocupa el detector de la derecha y renormalizando la función de onda):

$$P_I(n) = \sum_{j=0}^{N/5} |\Phi_{j,n}|^2 \quad (25)$$

Si se ha detectado la partícula entonces se repite el experimento. Si no, se hace evolucionar la función de onda unos pasos temporales extra (después de hacer la función de onda 0 en el detector de la izquierda y renormalizándola) y se vuelve a repetir el experimento.

Nuestro coeficiente de transmisión experimental será el cociente entre las veces que la partícula ha sido detectada en el detector derecho y las veces que se ha repetido el experimento. En nuestro caso el número de experimentos ha sido de 1000, y se ha realizado para diferentes  $N$  (longitud del

sistema) y diferentes  $n_D$  (tiempo de evolución) para estudiar la dependencia de este coeficiente con estas magnitudes.

$$T = \frac{m_T}{m} = \frac{\text{número de veces detectadas a la derecha}}{\text{experimentos realizados}} \quad (26)$$

### 3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN.

En esta sección vamos a comparar los resultados obtenidos por la simulación con los resultados teóricos dados por las expresiones (8) y (9).

**3.1. Sistema con N=500.** Los coeficientes arrojados por la simulación son los siguientes:

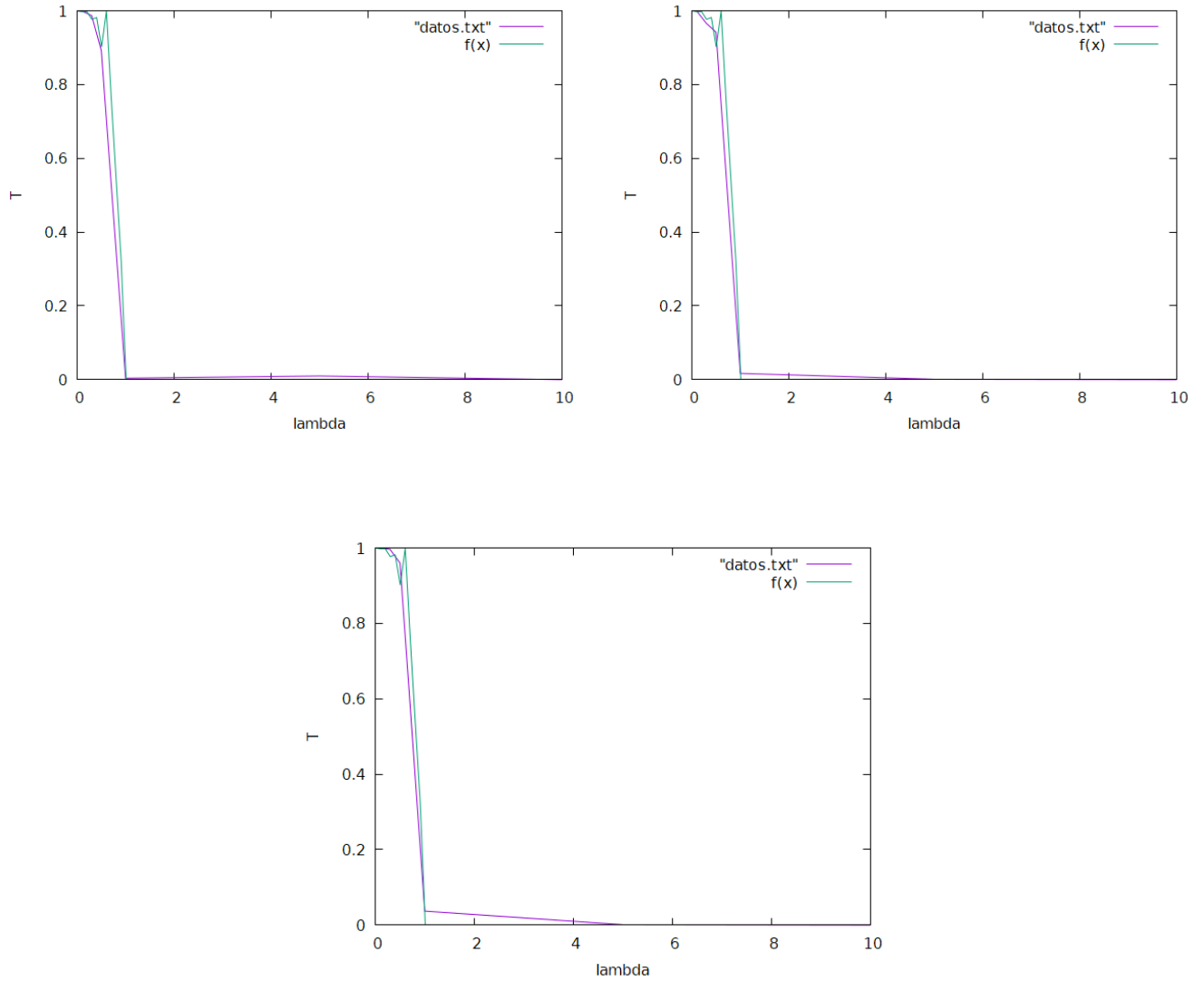
$\lambda$	$T_e$	$T_t$	$\epsilon_r$
0	1	1	0,0
0,1	0,999	0,997	0,2
0,3	0,987	0,976	1,1
0,5	0,892	0,891	0,1
1	0,004	0,001	300,0
5	0,01	0	-
10	0	0	-

$\lambda$	$T_e$	$T_t$	$\epsilon_r$
0	1	1	0,0
0,1	1	0,997	0,3
0,3	0,966	0,976	1,0
0,5	0,942	0,891	5,7
1	0,017	0,001	1600,0
5	0,001	0	—
10	0	0	—

$\lambda$	$T_e$	$T_t$	$\epsilon_r$
0	1	1	0,0
0,1	1	0,997	0,3
0,3	0,996	0,976	2,0
0,5	0,96	0,891	7,7
1	0,037	0,001	3600,0
5	0,001	0	—
10	0	0	—

TABLAS 1, 2 y 3. Comparativa de datos experimentales con los teóricos para N=500 y  $n_D = 70, 75, 80$  respectivamente.

Si representamos gráficamente los resultados obtenidos y los comparamos con la curva teórica del fundamento teórico:



FIGURAS 1, 2 y 3. Representaciones gráficas de los coeficientes de transmisión en función de  $\lambda$  para  $n_D = 70, 75, 80$  respectivamente.



**3.2. Sistema con N=1000.** Para este sistema hemos obtenido los siguientes resultados:

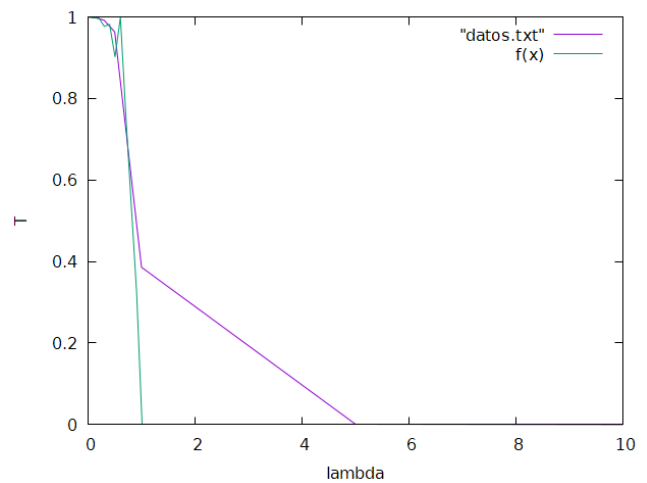
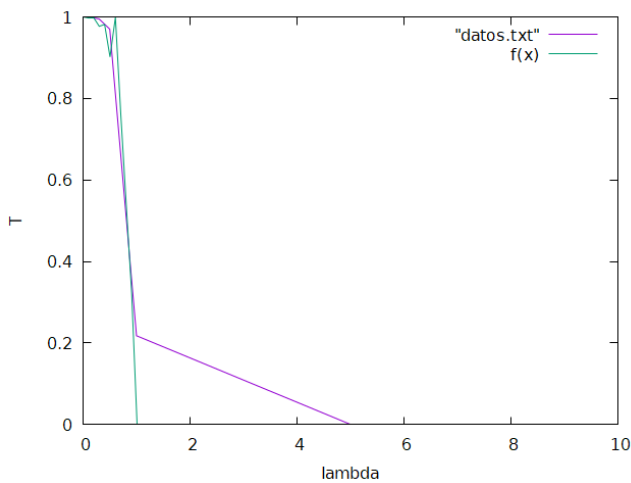
$\lambda$	$T_e$	$T_t$	$\epsilon_r$
0	1	1	0,0
0,1	1	0,998	0,2
0,3	0,995	0,975	2,1
0,5	0,97	0,986	1,6
1	0,218	0,00025	87100,0
5	0	0	
10	0	0	—

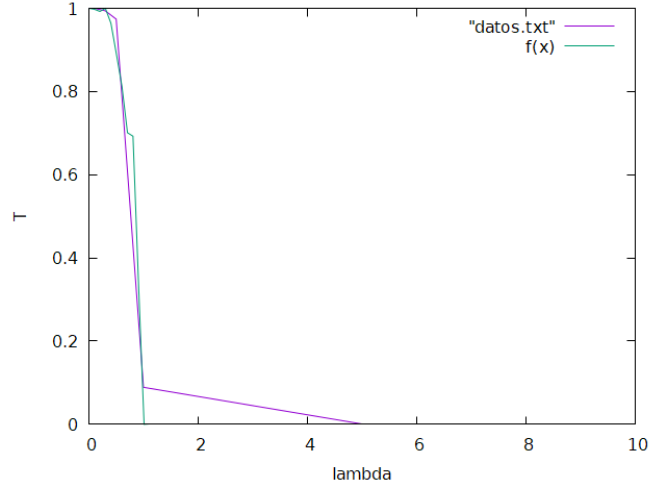
$\lambda$	$T_e$	$T_t$	$\epsilon_r$
0	1	1	0,0
0,1	0,999	0,998	0,1
0,3	0,992	0,975	1,7
0,5	0,963	0,986	2,3
1	0,386	0,00025	154300,0
5	0,001	0	—
10	0	0	—

$\lambda$	$T_e$	$T_t$	$\epsilon_r$
0	1	1	0,0
0,1	1	0,998	0,2
0,3	0,994	0,975	1,9
0,5	0,974	0,986	1,2
1	0,089	0,00025	35500,0
5	0	0	—
10	0	0	—

TABLAS 4, 5 y 6. Comparativa de datos experimentales con los teóricos para N=1000 y  $n_D = 100, 120, 150$  respectivamente.

Nuevamente, vemos como se parecen la curva de ajuste con los datos experimentales obtenidos:





FIGURAS 4, 5 y 6. Representaciones gráficas de los coeficientes de transmisión en función de  $\lambda$  para  $n_D = 100, 120, 150$  respectivamente.

**3.3. Sistema con N=2000.** Por ultimo repetimos lo mismo pero para el caso N=2000:

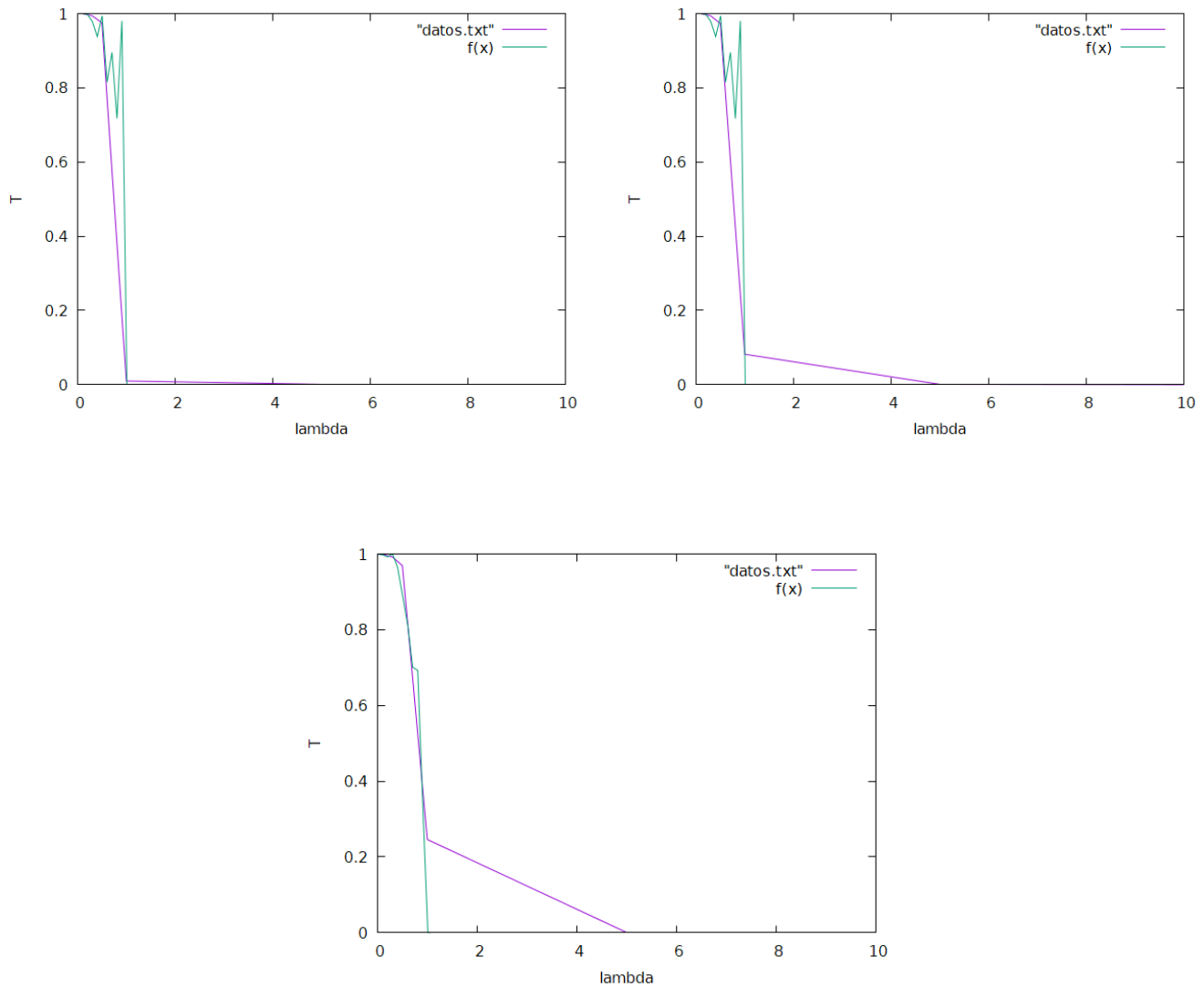
$\lambda$	$T_e$	$T_t$	$\epsilon_r$
0	1	1	0,0
0,1	1	0,997	0,3
0,3	0,994	0,977	1,7
0,5	0,975	0,953	2,3
1	0,01	0,00006	16566,7
5	0	0	—
10	0	0	—

$\lambda$	$T_e$	$T_t$	$\epsilon_r$
0	1	1	0,0
0,1	1	0,997	0,3
0,3	0,994	0,977	1,7
0,5	0,973	0,953	2,1
1	0,082	0,00006	136566,7
5	0,001	0	—
10	0	0	—

$\lambda$	$T_e$	$T_t$	$\epsilon_r$
0	1	1	0,0
0,1	0,999	0,997	0,2
0,3	0,992	0,977	1,5
0,5	0,969	0,953	1,7
1	0,246	0,00006	409900,0
5	0	0	—
10	0	0	—

TABLAS 7, 8 y 9. Comparativa de datos experimentales con los teóricos para N=2000 y  $n_D = 250, 270, 290$  respectivamente.

Finalmente representando análogamente a los casos anteriores:



FIGURAS 7, 8 y 9. Representaciones gráficas de los coeficientes de transmisión en función de  $\lambda$  para  $n_D = 250, 270, 290$  respectivamente.

En nuestros resultados se ha evidenciado el conocido efecto tunel, cuando la energía de la partícula se acerca al potencial, el coeficiente de transmisión cae rápidamente a 0, pero vemos que en algunos casos no se anula, es decir, en alguna ocasión aún habiendo sido más energético el potencial que la partícula, esta última ha pasado la barrera.

Vemos también que para energías mayores de la de la partícula el error relativo crece mucho. Esto es debido a que el coeficiente de transmisión a esas energías es muy bajo y cualquier variación, aunque sea muy pequeña, supone un aumento considerable del error relativo.

#### 4. CONCLUSIONES.

Hemos comprobado de primera mano el efecto de medir sobre un sistema cuántico. Al realizar una medida las probabilidades en cada punto de la región cambian drásticamente (se dice que la función de onda ha colapsado). Este concepto es algo complejo de visualizar porque es poco intuitivo, pero sin embargo, realizar este tipo de experimentos ayuda en eso.

Vemos que los resultados no son muy dispares entre sí, si que hay alguna diferencia entre los resultados obtenidos a diferentes tiempos de evolución, pero en general se parecen todos. Podría notarse una leve mejora de resultados conforme aumenta  $N$ , pero tampoco es muy significativa (al menos con mis resultados).

Cabría notar que las gráficas habrían salido mucho más visuales y con mejor apariencia de ajuste si se hubiesen tomado más puntos intermedios, porque el programa que representa los puntos une a estos por el camino más corto, por eso se aprecian diferentes saltos que quedan un poco extraños. El problema de tomar más medidas es que el tiempo que sería necesario invertir sería demasiado grande porque, igual que nos pasa con el modelo de ising, se requiere bastante potencia de resolución para realizar la simulación de los experimentos.

Como se ha notado antes, estas simulaciones nos han servido para visualizar el *efecto tunel*, la intuición clásica nos dice que es imposible que una partícula atraviese una barrera de potencial más energética que ella. Sin embargo vemos que la probabilidad de que pase no es nula.

#### 5. BIBLIOGRAFIA.

1. Introduction to Quantum Mechanics - D. Griffiths.
2. Diapositivas de [ergodic.ugr.es/cphys](http://ergodic.ugr.es/cphys)
3. Imagen de evolución temporal. Wikipedia.
4. Barrera de potencial. Wikipedia.