

UNIVERSIDAD DE SONORA
DIVISION DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES
DEPARTAMENTO DE FISICA



**"El saber de mis hijos
hará mi grandeza"**

Simulaciones de Tunelaje Cuántico para Ondas Gaussianas

TESIS

Sometida para obtener el título de:
Licenciado en física

Presenta:

José Gustavo Bravo Flores

Hermosillo, Sonora
Septiembre 2020

Índice general

1. Introducción	4
1.1. Partícula libre	6
1.2. Normalización de Born	7
1.3. Paquetes de ondas	8
1.3.1. Paquete de ondas gaussiano	9
2. Soluciones analíticas y métodos numéricos	13
2.1. Método de Crank-Nicolson	14
2.2. Solución Analítica	16
2.2.1. Coeficiente de transmisión	16
2.3. Comparación numérica y analítica	17
2.4. Transmisión a través de un pozo de potencial	18
2.4.1. Energía menor a cero y mayor que $-V_0$	18
2.4.1.1. Solución Analítica	18
2.4.1.2. Solución Numérica	19
2.4.2. Energía mayor que cero	21
2.4.2.1. Solución Analítica	21
2.4.2.2. Solución Numérica	21
2.5. Transmisión a través de una barrera de potencial	22
2.5.1. Energía menor a V_0	23
2.5.1.1. Solución Analítica	23
2.5.1.2. Solución Numérica	24
2.5.2. Energía igual a V_0	25
2.5.2.1. Solución Analítica	25
2.5.2.2. Solución Numérica	26
2.5.3. Energía mayor a V_0	27
2.5.3.1. Solución Analítica	27
2.5.3.2. Solución Numérica	27
2.6. Generalidades	29

3. Paquete de ondas gaussiano, barreras y pozos	30
3.1. Ondas gaussianas	30
3.2. Partícula libre	31
3.3. Transmisión a través de un pozo de potencial	33
3.3.1. Energía promedio menor a cero y mayor que $-V_0$. . .	33
3.3.2. Energía promedio mayor a cero	34
3.4. Transmisión a través de una barrera de potencial	35
3.4.1. Energía promedio menor que V_0	35
3.4.2. Energía promedio igual a V_0	37
3.4.3. Energía promedio mayor que V_0	38
3.5. Desfasamiento de onda	40
4. Conclusiones	41

Capítulo 1

Introducción

Resolver la ecuación de Schrödinger puede o no representar una dificultad analítica según la forma del potencial presente, es por ello que puede ser necesario acudir a distintas herramientas numéricas que permitan conseguir soluciones aproximadas o inclusive visualizar la evolución del sistema en el tiempo. En otras ocasiones no se busca solucionar un problema físico con un potencial específico, sino uno que presente algunas características generales para ver cómo se comporta un sistema en presencia de éstas y obtener conclusiones más generales, por lo cual puede ser más conveniente sustituir el potencial exacto por barreras y pozos que imiten dichas características. Con los pozos se modelan potenciales atractivos y con barreras los repulsivos; este método permite solucionar el problema con herramientas matemáticas más básicas o hacer uso de bajos recursos computacionales.

En este trabajo se estudia la colisión de distintos paquetes de ondas con barreras o pozos de potencial con el propósito de presentar una herramienta numérica que permite el estudio teórico de la evolución de sistemas cuánticos unidimensionales que son demasiado complicados para un estudio analítico. Antes de presentar los resultados de las simulaciones se hace un breve repaso de la partícula libre y la normalización de Born para llegar a los paquetes de ondas y demostrar la cualidad de mínima dispersión de los paquetes de ondas gaussianos. Después de dicho repaso, se presenta el método de Crank-Nicolson; sus bases y cómo se utiliza en problemas de la mecánica cuántica unidimensional, a su vez se define qué es el coeficiente de transmisión y se presentan las expresiones analíticas de los coeficientes de transmisión para ondas planas que colisionan con barreras o pozos de potencial. Los primeros paquetes de ondas que se someten a las simulaciones son trenes de ondas, con una integración numérica por medio de `mathematica` se obtiene el porcentaje de onda transmitida y se compara con el coeficiente de transmisión de una onda plana para el mismo potencial. El procedimiento se repite con

los paquetes de ondas gaussianos, con los cuales, debido a que no se pierde la forma de los paquetes al cruzar una barrera o pozo, es posible apreciar distintos fenómenos que ocurren en el efecto tunel.

1.1. Partícula libre

El problema de la partícula libre es uno de los más simples en el estudio de la mecánica cuántica. En este problema el potencial es nulo en todo el espacio por lo cual, para una dimensión, la ecuación estacionaria de Schrödinger tiene la forma:

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\varphi = 0 \quad (1.1)$$

Definimos un vector \vec{k} asociado al momento como:

$$\vec{k} = \frac{\vec{P}}{\hbar} \quad (1.2)$$

Debido a la relación entre el momento y la energía, y la ausencia de potencial, se obtiene que:

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E$$

Sustituyendo k^2 en (1.1) se consigue la siguiente ecuación:

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} + k^2\varphi = 0 \quad (1.3)$$

Con solución general:

$$\varphi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad (1.4)$$

Al incluir la dependencia temporal se obtiene la solución a la ecuación de la partícula libre:

$$\Psi(x, t) = Ae^{-i(\omega t - kx)} + Be^{-i(\omega t + kx)} \quad (1.5)$$

donde $\omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{\hbar k^2}{2m}$.

Cada término de la solución representa una onda plana viajera, la primera se propaga hacia la derecha, y la segunda hacia la izquierda. La velocidad de fase de cada onda sería $v_f = \frac{\omega}{k}$ [1].

Si se considera que el movimiento de la partícula es únicamente hacia la derecha, la constante B toma el valor $B = 0$, y la función de onda queda como:

$$\Psi(x, t) = Ae^{-i(\omega t - kx)} \quad (1.6)$$

1.2. Normalización de Born

La ecuación (1.6) tiene el inconveniente de no ser una función de cuadrado integrable, es decir, no es normalizable:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \Psi dx = |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx = \infty \quad (1.7)$$

Para resolver este problema hay que considerar que el espacio en el cual se propaga la onda plana posee propiedades de periodicidad, es decir, hay que concebir que la onda viajera se parte en una infinidad de fragmentos los cuales se encuentran encerrados cada uno en una región finita de largo L en las cuales ocurre exactamente lo mismo entre unas y otras [2].

Considerando dicha periodicidad, se debe cumplir la condición:

$$\Psi(x, t) = \Psi(x + L, t) \quad (1.8)$$

Sustituyendo la ecuación (1.6) en (1.8) se llega a que:

$$\begin{aligned} Ae^{-i(\omega t - kx)} &= Ae^{-i(\omega t - k(x+L))} \\ e^{-i\omega t} e^{ikx} &= e^{-i\omega t} e^{ikx} e^{ikL} \\ e^{ikL} &= 1 \end{aligned} \quad (1.9)$$

Dicha condición se cumple si:

$$k = \frac{2\pi}{L}n; \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (1.10)$$

Es decir que, tanto el momento como la energía resultan ser discretos dentro de esta región, claro que en el límite en que $L \rightarrow \infty$ se pierde el espectro discreto y se recupera el continuo.

Aplicando la condición de normalización a la función de onda:

$$\begin{aligned} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \Psi^* \Psi dx &= |A|^2 \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} dx \\ &= |A|^2 L = 1 \end{aligned}$$

Por conveniencia se toma a A como real positivo, por lo cual:

$$A = \frac{1}{\sqrt{L}} \quad (1.11)$$

Sustituyendo (1.31) en (1.6), se construye la función de onda como:

$$\Psi_n(x, t) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{-i(\omega_n t - k_n x)} \quad (1.12)$$

en donde:

$$\omega_n = \frac{E_n}{\hbar} = \frac{2\pi^2 \hbar}{mL^2} n^2 \quad (1.13)$$

$$k_n = \frac{P}{\hbar} = \frac{2\pi}{L} n \quad (1.14)$$

Es demostrable que estas funciones de onda son ortogonales:

$$\begin{aligned} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \Psi_n^*(x, 0) \Psi_m(x, 0) dx &= \frac{1}{L} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} e^{2i\pi(m-n)\frac{x}{L}} dx \\ &= \frac{\sin(\pi(m-n))}{\pi(m-n)} \\ &= \begin{cases} 1 & m = n \\ 0 & m \neq n \end{cases} \end{aligned} \quad (1.15)$$

De (1.13) y (1.14) se concluye que la energía y el momento son discretos. Es claro que al tomar el límite en que $L \rightarrow \infty$ se pierde el carácter discreto.

1.3. Paquetes de ondas

La ecuación (1.12) a pesar de ser tan general no es de tanto interés debido a que físicamente si se estudiase el movimiento de una partícula, o incluso un haz de éstas, es de esperarse una función que sea nula en casi todo el espacio excepto por una región donde es físicamente aceptable encontrar al objeto de estudio, una función de onda con estas características es posible de construir al hacer una superposición de soluciones con distintos valores de k donde cada componente tiene una fase y amplitud elegidas de tal forma que se garantice una interferencia constructiva dentro de la región ocupada por la partícula o el haz. Dichas superposiciones son conocidas como paquetes de ondas.

Para construir un paquete de ondas, es necesario que los valores del momento estén distribuidos de tal forma que las k estén en el intervalo (k_1, k_2) ; debido a que es una partícula libre $\omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{\hbar k^2}{2m}$. El paquete puede ser representado como:

$$\Psi(x, t) = \int_{k_1}^{k_2} A(k) e^{-i \frac{\hbar k^2}{2m} t + i k x} dk \quad (1.16)$$

Hay que notar que la forma en que cada componente del paquete de ondas evoluciona con el tiempo depende de su número de onda, por lo cual las componentes más energéticas se adelantarán mientras que las menos energéticas se irán quedando atrás con el paso del tiempo. Este fenómeno es conocido como “*dispersión de los paquetes de ondas*” [2].

1.3.1. Paquete de ondas gaussiano

Los paquetes de ondas con mínima dispersión son aquellos que al evolucionar en el tiempo no pierden su forma tan rápido, es decir, la probabilidad de encontrar a la partícula no se extiende por todo el espacio con el paso del tiempo, sino que se mantiene como un paquete bien definido siempre y cuando no colisione con otra partícula o un potencial.

Para demostrar que los paquetes gaussianos representan partículas con mínima dispersión es necesario demostrar que para un operador \hat{A} y para cualquier estado $|\phi\rangle$:

$$\langle \hat{A}^\dagger \hat{A} \rangle_\phi \geq 0 \quad (1.17)$$

Es posible representar a cualquier operador \hat{B} con sus eigenvectores $|n\rangle$ y eigenvalores b_n :

$$\hat{B} = \sum_n b_n |n\rangle \langle n| \quad (1.18)$$

así:

$$\begin{aligned} \langle \hat{A}^\dagger \hat{A} \rangle_\phi &= \langle \phi | \hat{A}^\dagger \hat{A} | \phi \rangle \\ &= \sum_{k,l} \langle \phi | a_k^* | k \rangle \langle k | a_l | l \rangle \langle l | \phi \rangle \\ &= \sum_{k,l} a_k^* a_l \langle \phi | k \rangle \langle k | l \rangle \langle l | \phi \rangle \\ &= \sum_{k,l} a_k^* a_l \langle \phi | k \rangle \delta_{k,l} \langle l | \phi \rangle \\ &= \sum_k a_k^* a_k \langle \phi | k \rangle \langle k | \phi \rangle \\ \langle \hat{A}^\dagger \hat{A} \rangle_\phi &= \sum_k |a_k|^2 |\langle k | \phi \rangle|^2 \geq 0 \end{aligned} \quad (1.19)$$

De esta forma, (1.17) queda demostrada.

La relación de conmutación de \hat{x} con \hat{p} es:

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \quad (1.20)$$

El conmutador de las desviaciones $\Delta\hat{x}$ y $\Delta\hat{p}$ es:

$$\begin{aligned} [\Delta\hat{x}, \Delta\hat{p}] &= [\hat{x} - \langle\hat{x}\rangle, \hat{p} - \langle\hat{p}\rangle] \\ &= [\hat{x}, \hat{p}] \end{aligned} \quad (1.21)$$

Al definir una función $J(\alpha)$, con α real:

$$\begin{aligned} J(\alpha) &= \langle(\alpha\Delta\hat{x} + i\Delta\hat{p})^\dagger(\alpha\Delta\hat{x} + i\Delta\hat{p})\rangle \\ &= \alpha^2\langle(\Delta\hat{x})^2\rangle + \langle(\Delta\hat{p})^2\rangle + i\alpha\langle\Delta\hat{x}\Delta\hat{p} - \Delta\hat{p}\Delta\hat{x}\rangle \\ J(\alpha) &= \alpha^2\langle(\Delta\hat{x})^2\rangle + \langle(\Delta\hat{p})^2\rangle - \alpha\hbar \end{aligned} \quad (1.22)$$

$J'(\alpha)$ es nula cuando $\alpha = \alpha_{min}$ con:

$$\alpha_{min} = \frac{\hbar}{2\langle(\Delta\hat{x})^2\rangle} \quad (1.23)$$

Por la forma de $J(\alpha)$, junto con (1.17), se obtiene que:

$$J(\alpha) \geq 0 \quad (1.24)$$

Evalutando (1.23) en (1.22) se obtiene que:

$$J(\alpha_{min}) = \frac{\hbar^2}{4\langle(\Delta\hat{x})^2\rangle} + \langle(\Delta\hat{p})^2\rangle - \frac{\hbar^2}{2\langle(\Delta\hat{x})^2\rangle}$$

Juntando este resultado con (1.24):

$$\begin{aligned} \frac{\hbar^2}{4\langle(\Delta\hat{x})^2\rangle} + \langle(\Delta\hat{p})^2\rangle - \frac{\hbar^2}{2\langle(\Delta\hat{x})^2\rangle} &\geq 0 \\ \langle(\Delta\hat{x})^2\rangle\langle(\Delta\hat{p})^2\rangle &\geq \frac{\hbar^2}{4} \end{aligned} \quad (1.25)$$

La ecuación (1.25) es la desigualdad de Heisenberg para la posición y el momento. De la ecuación (1.17) sabemos que para el caso de $J(\alpha)$, la desigualdad de Heisenberg será mínima solo cuando:

$$\left(\frac{\hbar}{2\langle(\Delta\hat{x})^2\rangle} \Delta\hat{x} + i\Delta\hat{p} \right) \psi_{min} = 0 \quad (1.26)$$

Sustituyendo $\Delta\hat{x} \rightarrow x - \langle x \rangle$ y $\Delta\hat{p} \rightarrow -i\hbar \frac{d}{dx} - \langle \hat{p} \rangle$:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\hbar}{2\langle(\Delta\hat{x})^2\rangle} (x - \langle x \rangle) + i(-i\hbar \frac{d}{dx} - \langle \hat{p} \rangle) \right) \psi_{min} &= 0 \\ \left(\frac{x - \langle x \rangle}{2\langle(\Delta\hat{x})^2\rangle} + \frac{d}{dx} - i \frac{\langle \hat{p} \rangle}{\hbar} \right) \psi_{min} &= 0 \end{aligned}$$

Definiendo $\sigma^2 = \langle(\Delta\hat{x})^2\rangle$ y $k_0 = \frac{\langle \hat{p} \rangle}{\hbar}$

$$\begin{aligned} \left(\frac{x - \langle x \rangle}{2\sigma^2} + \frac{d}{dx} - ik_0 \right) \psi_{min} &= 0 \\ \frac{d}{dx} \psi_{min} &= \left(\frac{-x + \langle x \rangle}{2\sigma^2} + ik_0 \right) \psi_{min} \end{aligned}$$

Proponiendo $\psi_{min} = Af(x)e^{ik_0x}$

$$\begin{aligned} A \frac{df(x)}{dx} e^{ik_0x} + iAk_0 f(x) e^{ik_0x} &= \left(\frac{-x + \langle x \rangle}{2\sigma^2} + ik_0 \right) Af(x) e^{ik_0x} \\ A \frac{df(x)}{dx} e^{ik_0x} &= \frac{-x + \langle x \rangle}{2\sigma^2} Af(x) e^{ik_0x} \\ \frac{df(x)}{dx} &= \frac{-x + \langle x \rangle}{2\sigma^2} f(x) \\ \frac{1}{f(x)} \frac{df(x)}{dx} &= \frac{-x + \langle x \rangle}{2\sigma^2} \\ \frac{d \ln f(x)}{dx} &= \frac{-x + \langle x \rangle}{2\sigma^2} \\ d \ln f(x) &= -\frac{x - \langle x \rangle}{2\sigma^2} dx \\ \ln f(x) &= -\frac{(x - \langle x \rangle)^2}{4\sigma^2} \\ f(x) &= e^{-\frac{(x - \langle x \rangle)^2}{4\sigma^2}} \end{aligned} \quad (1.27)$$

De esta forma ψ_{min} queda como:

$$\psi_{min} = Ae^{ik_0x} e^{-\frac{(x - \langle x \rangle)^2}{4\sigma^2}} \quad (1.28)$$

Es necesario normalizar a ψ_{min} integrando sobre todo el espacio:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_{min}^* \psi_{min} dx &= 1 \\ |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{(x-\langle x \rangle)^2}{2\sigma^2}} dx &= |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\left(\frac{x-\langle x \rangle}{\sqrt{2}\sigma}\right)^2} dx \end{aligned} \quad (1.29)$$

Haciendo el cambio de variable $u = \frac{x-\langle x \rangle}{\sqrt{2}\sigma}$, $du = \frac{1}{\sqrt{2}\sigma} dx$:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_{min}^* \psi_{min} dx = |A|^2 \sqrt{2}\sigma \int_{-\infty}^{\infty} e^{-u^2} du \quad (1.30)$$

El lado derecho de (1.30) es una integral gaussiana, por lo tanto:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_{min}^* \psi_{min} dx &= |A|^2 \sqrt{2\pi}\sigma \\ 1 &= |A|^2 \sqrt{2\pi}\sigma \\ A &= \frac{1}{\sqrt{\sqrt{2\pi}\sigma}} \end{aligned} \quad (1.31)$$

Sustituyendo (1.31) en (1.28):

$$\psi_{min} = \frac{e^{ik_0 x}}{\sqrt{\sqrt{2\pi}\sigma}} e^{-\frac{(x-\langle x \rangle)^2}{4\sigma^2}} \quad (1.32)$$

Capítulo 2

Soluciones analíticas y métodos numéricos

Es sabido que muchos problemas físicos no tienen solución analítica, como el problema de los tres cuerpos, o si tienen solución pero obtenerla es más complicado que lo que se esperaría. Para combatir estas situaciones es posible utilizar método numéricos; los cuales por medio de distintos procedimientos, usualmente simples y repetitivos, construyen soluciones numéricas, como tablas de números que describen a la solución, en lugar de las formulas matemáticas que se quisieran obtener por medio de métodos analíticos. Hoy en día el uso de computadoras acelera el rendimiento de estos métodos, disminuyendo el tiempo que toma realizar los cálculos, guardando los datos que se obtienen a lo largo del procedimiento, y construyendo gráficas para visualizar la evolución del problema a resolver.

En general los sistemas mecánico-cuánticos son demasiado complicados como para buscar soluciones analíticas, pensando en moléculas o átomos no hidrogenoides por ejemplo, por lo que en muchas ocasiones es necesario recurrir a simulaciones basadas en la ecuación de Schrödinger y métodos numéricos para ver cómo se comportan estos sistemas.

2.1. Método de Crank-Nicolson

J. Crank y P. Nicolson idearon, en 1947, un método numérico para obtener la evolución de soluciones a ecuaciones parabólicas en derivadas parciales desarrollado originalmente para la ecuación del calor. Debido a que la ecuación de Schrödinger forma parte de dicha familia de ecuaciones diferenciales el método puede utilizarse en ésta [3]. Por su estabilidad, bajo uso de recursos computacionales y capacidad de conservar la probabilidad, es un método ideal para visualizar la evolución de la colisión de una partícula con una barrera o su interacción con un pozo de potencial. Este problema, para una onda plana con una k bien definida es un ejercicio analítico que se puede resolver con facilidad por distintos métodos como, por ejemplo, el método *WKB*. En cambio los paquetes de ondas, como los gaussianos, no pueden ser trabajados analíticamente debido a que éstos pueden estar conformados por una infinidad de componentes con distintas energías.

El método de Crank-Nicolson es un método numérico que consiste en convertir los diferenciales en una ecuación de derivadas parciales en fracciones de las diferencias finitas de la solución y las variables, de esta forma se consigue discretizar la ecuación [4].

Para una primera derivada:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} \rightarrow \frac{\Delta \Psi}{\Delta t} = \frac{\Psi_{j,k} - \Psi_{j,k-1}}{\Delta t} \quad (2.1)$$

donde el subíndice j y k indican el punto en el espacio y tiempo en que se evalúa a la función. Como la derivada es temporal, el primer índice no cambia pero el segundo sí lo hace.

Para una segunda derivada espacial:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \rightarrow \frac{\Delta \Psi^2}{\Delta x^2} = \frac{\Psi_{j+1,k} - 2\Psi_{j,k} + \Psi_{j-1,k}}{\Delta x^2} \quad (2.2)$$

En este caso, al ser la derivada de carácter espacial el índice k no cambia pero j sí lo hace. Para elementos como los de la segunda derivada en Ψ se puede acortar con esta notación:

$$\Psi_{j+1,k} - 2\Psi_{j,k} + \Psi_{j-1,k} \rightarrow \Delta \Psi_{j,k}$$

Sustituyendo en la ecuación de Schrödinger, la cual pasaríamos de:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V(x)\Psi \quad (2.3)$$

a:

$$i\hbar \frac{\Psi_{j,k} - \Psi_{j,k-1}}{\Delta t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta \Psi_{j,k} + \Delta \Psi_{j,k-1}}{2\Delta x^2} + \frac{V_j[\Psi_{j,k} + \Psi_{j,k-1}]}{2} \quad (2.4)$$

Donde se considera evaluar el lado derecho en dos tiempos distintos k y $k-1$, y promediar diviendo por un factor de 2.

Separando según el subíndice temporal:

$$\begin{aligned} & (2 + 2i\alpha + \frac{i\Delta t}{\hbar} V_j) \Psi_{j,k} - i\alpha \Psi_{j+1,k} - i\alpha \Psi_{j-1,k} \\ &= (2 - 2i\alpha - \frac{i\Delta t}{\hbar} V_j) \Psi_{j,k-1} + i\alpha \Psi_{j+1,k-1} + i\alpha \Psi_{j-1,k-1} \end{aligned} \quad (2.5)$$

donde $\alpha = \frac{\hbar \Delta t}{2m \Delta x^2}$.

Esta ecuación puede escribirse en forma matricial:

$$A\Psi_k = B\Psi_{k-1} \quad (2.6)$$

donde Ψ_k y Ψ_{k-1} son arreglos de N elementos que representan a la función de onda, k es el índice temporal correspondiente, y las matrices A y B son:

$$A = \begin{bmatrix} 2 + 2i\alpha + \frac{i\Delta t}{\hbar} V_1 & -i\alpha & 0 & \cdots & 0 \\ -i\alpha & 2 + 2i\alpha + \frac{i\Delta t}{\hbar} V_2 & -i\alpha & \ddots & \vdots \\ 0 & -i\alpha & \ddots & -i\alpha & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & -i\alpha \\ 0 & \cdots & 0 & -i\alpha & 2 + 2i\alpha + \frac{i\Delta t}{\hbar} V_N \end{bmatrix},$$

$$B = \begin{bmatrix} 2 - 2i\alpha - \frac{i\Delta t}{\hbar} V_1 & i\alpha & 0 & \cdots & 0 \\ i\alpha & 2 - 2i\alpha - \frac{i\Delta t}{\hbar} V_2 & i\alpha & \ddots & \vdots \\ 0 & i\alpha & \ddots & i\alpha & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & i\alpha \\ 0 & \cdots & 0 & i\alpha & 2 - 2i\alpha - \frac{i\Delta t}{\hbar} V_N \end{bmatrix},$$

De esta forma, al multiplicar por la matriz inversa de A se obtiene una expresión que al evaluar la función de onda en el lado derecho da como resultado el avance de esta en un intervalo temporal Δt . La matriz resultante, $A^{-1}B$ es conocida como la matriz Crank-Nicolson [4].

Es importante notar que la parte imaginaria de cada elemento en la diagonal de cada matriz está formado por dos elementos, uno relacionado al potencial y otro a la constante α ; es necesario elegir los parámetros de

la simulación cuidadosamente, de no ser el caso, puede ocurrir que α sea dominante sobre todos, o la gran mayoría de los elementos del potencial, por lo cual la matriz no representaría adecuadamente al sistema.

2.2. Solución Analítica

Los sistemas a resolver consisten en un pozo o barrera que divide el espacio en tres regiones distintas; según la energía de la partícula y la forma del potencial se construye la ecuación de onda en cada región.

Para obtener la función de onda es necesario resolver la ecuación de Schrödinger en las tres regiones. Así la ecuación asociada a cada región sería:

$$\frac{d^2\psi_I}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi_I = 0 \quad (2.7)$$

$$\frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi_{II} = \frac{2m}{\hbar^2}V_0\psi_{II} \quad (2.8)$$

$$\frac{d^2\psi_{III}}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi_{III} = 0 \quad (2.9)$$

respectivamente. Cada función de onda debe de ser físicamente aceptable a la vez, por lo tanto no debe divergir en ningún punto, debe también, en conjunto con su derivada, ser continua en todo el espacio y particularmente en las fronteras, y la función de onda final debe estar normalizada en toda el espacio físico.

2.2.1. Coeficiente de transmisión

Para calcular el coeficiente de transmisión de una onda es necesario hacer uso del flujo de probabilidad J , definido como:

$$J = \frac{i\hbar}{2m}(\psi\nabla\psi^* - \psi^*\nabla\psi) \quad (2.10)$$

y el coeficiente de transmisión se define como la razón de la onda transmitida respecto de la incidente:

$$T = \frac{|J_{Transmitida}|}{|J_{Incidente}|} \quad (2.11)$$

Al considerar que la onda incidente llega por la izquierda a un pozo o barrera rectangular:

$$T = \frac{|J_{III}|}{|J_I|} \quad (2.12)$$

$$T = \frac{|\psi_{III} \nabla \psi_{III}^* - \psi_{III}^* \nabla \psi_{III}|}{|\psi_I \nabla \psi_I^* - \psi_I^* \nabla \psi_I|} \quad (2.13)$$

2.3. Comparación numérica y analítica

Realizar el procedimiento de la subsección 2.2.1 para cada uno de los sistemas o funciones a analizar a continuación es un trabajo laborioso e innecesario debido a que las expresiones a las que se desea llegar son bien conocidas, por lo tanto se optará por tomarlas del libro *Quantum Mechanics* de *L. I. Schiff* [5]. Dichas fórmulas son válidas para ondas planas infinitas a tiempos infinitos; debido a que el método de Crank-Nicolson toma una función de onda y desarrolla su evolución en un espacio finito, no es posible implementar ondas de este tipo, por lo tanto, se utilizarán trenes de ondas para comparar el porcentaje de onda transmitida con el coeficiente de transmisión teórico para una onda infinita. Un tren de ondas se construye tomando una parte de una onda plana en una región del espacio, el resto de la onda plana se toma como cero y se normaliza.

Para comparar numéricamente se considerará el movimiento de un electrón con los siguientes parámetros:

Energía	E	=	10 peV
Largo del tren de ondas	L	=	5 μm
Ancho del potencial	a	=	100 nm
Intervalo temporal	Δt	=	10^{-2} ns
Intervalo espacial	Δx	=	10 nm
Dominio físico	D	=	40 μm

Los trenes de ondas a utilizar, ya normalizados, estarían representados por la función de onda en piezas

$$\Psi(x, t) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ik(x - (x_0 + \frac{L}{2}))} & x \in [x_0, x_0 + L] \\ 0 & x \notin [x_0, x_0 + L] \end{cases}$$

con $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$. Según el caso, el potencial será algún múltiplo de la energía promedio del paquete de ondas, a menos que se indique lo contrario.

2.4. Transmisión a través de un pozo de potencial

Los pozos de potencial se utilizan para representar potenciales atractivos, los más simples son los pozos rectangulares como el que se muestra en la figura 2.1, de ancho a y profundidad V_0 . Fuera del pozo consideramos al potencial como cero; de esta manera, una partícula ligada posee energía negativa, mientras que las partículas con energía positiva son dispersadas.

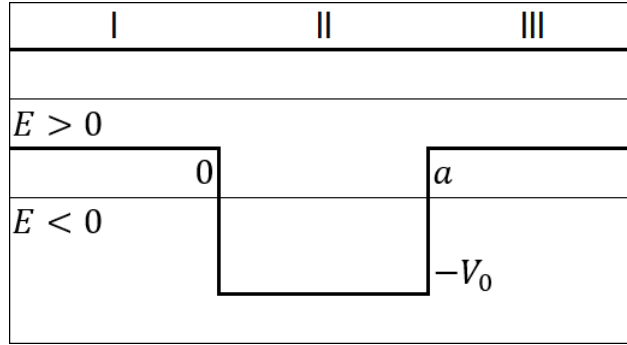


Figura 2.1: Pozo de potencial.

2.4.1. Energía menor a cero y mayor que $-V_0$

2.4.1.1. Solución Analítica

Para resolver analíticamente el problema del pozo hay que plantear la ecuación de Schrödinger estacionaria en cada región:

$$\frac{d^2\psi_I}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2}|E'|\psi_I = 0 \quad (2.14)$$

$$\frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2}|E'|\psi_{II} = -\frac{2m}{\hbar^2}V_0\psi_{II} \quad (2.15)$$

$$\frac{d^2\psi_{III}}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2}|E'|\psi_{III} = 0 \quad (2.16)$$

Es posible pasar el problema del pozo finito al de la caja finita si se suma un término $\frac{2m}{\hbar^2}V_0\psi$ en cada lado de cada ecuación y definiendo una nueva energía $E = V_0 - |E'| > 0$, esto equivale a trasladar el punto de referencia para medir el potencial. Las ecuaciones tomarían la forma:

$$\frac{d^2\psi_I}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi_I = \frac{2m}{\hbar^2}V_0\psi_I \quad (2.17)$$

$$\frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi_{II} = 0 \quad (2.18)$$

$$\frac{d^2\psi_{III}}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi_{III} = \frac{2m}{\hbar^2}V_0\psi_{III} \quad (2.19)$$

Definiendo los parámetros $\xi^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E) = \frac{2m}{\hbar^2}|E'|$, $\eta^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E$ las ecuaciones toman la forma:

$$\frac{d^2\psi_I}{dx^2} = \xi^2\psi_I \quad (2.20)$$

$$\frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} = -\eta^2\psi_{II} \quad (2.21)$$

$$\frac{d^2\psi_{III}}{dx^2} = \xi^2\psi_{III} \quad (2.22)$$

con soluciones, físicamente aceptables en sus respectivas regiones:

$$\psi_I = A_1 e^{\xi x} \quad (2.23)$$

$$\psi_{II} = A_2 e^{i\eta x} + B_2 e^{-i\eta x} \quad (2.24)$$

$$\psi_{III} = A_3 e^{-\xi x} \quad (2.25)$$

Por la forma de las soluciones, que no representan ondas viajeras en las regiones *I* y *III* se puede concluir que una partícula con energía E' , que cumple con $-V_0 < E' < 0$, se vería encerrada en la región *II*, el pozo de potencial, y que podría cruzar las fronteras con las otras regiones, *I* y *III*, pero no atravesarlas debido a que dichas regiones se extienden por todo el espacio.

2.4.1.2. Solución Numérica

Debido a que el método de Crank-Nicolson requiere una función de onda que sea una suma de soluciones a la ecuación de Schrödinger, no es posible visualizar una onda viajera en las regiones *I* y *III*, pero es posible analizar efectos interesantes que ocurren dentro del pozo o la caja finita de potencial, cómo los intentos de tunelaje en la proximidad de las fronteras. Para apreciar mejor el movimiento del tren de ondas en la caja de potencial se considerará una caja de ancho $10 \mu\text{m}$ y energía, o profundidad, $V_0 = 2E$.

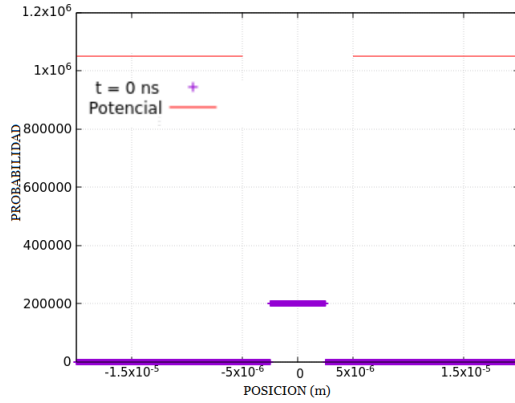


Figura 2.2: tren de ondas en $t = 0$ ns dentro de la caja.

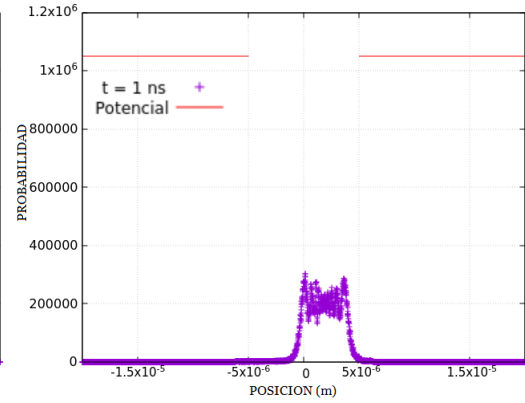


Figura 2.3: tren de ondas en $t = 1$ ns dispersándose.

En la figura 2.2 se encuentra el tren de ondas dentro de una caja de potencial la cual tiene una altura dos veces mayor que la energía del tren de ondas a un tiempo $t = 0$ ns, en la figura siguiente, 2.3, para un tiempo $t = 1$ ns se puede ver cómo el tren de ondas se ha empezado a dispersar debido a que las componentes más energéticas se adelantan a las menos energéticas, a su vez toma una forma más parecida a la de la componente principal.

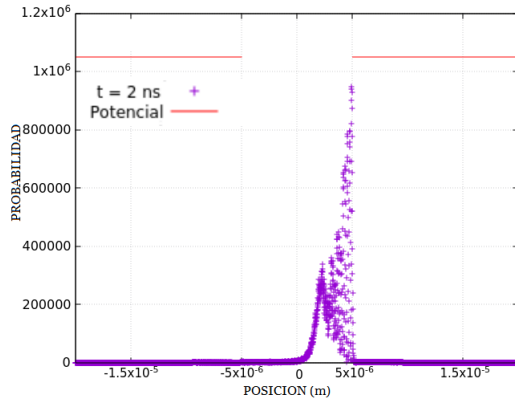


Figura 2.4: tren de ondas en $t = 2$ ns chocando con la pared.

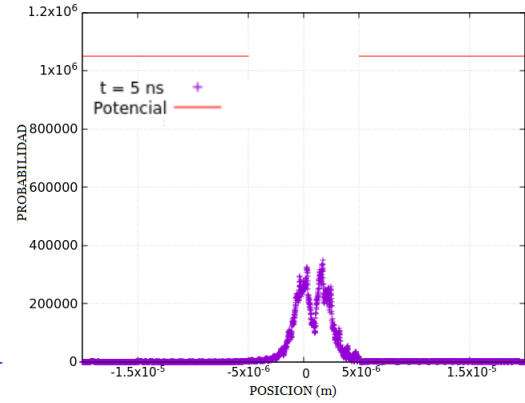


Figura 2.5: tren de ondas en $t = 5$ ns reflejado.

En la figura 2.4 el tren de ondas colisiona con la pared de la caja de potencial, en un tiempo $t = 2$ ns, de tal forma que la probabilidad empieza a acumularse en la pared para ser reflejada, como se observa en la figura 2.5, para dirigirse a la otra pared del potencial.

2.4.2. Energía mayor que cero

2.4.2.1. Solución Analítica

En este caso la partícula tiene una energía E mayor que el potencial en las regiones I y III , por lo cual no son regiones prohibidas y las soluciones generales son de la forma de ondas oscilatorias. Por lo tanto, es posible determinar el coeficiente de transmisión analíticamente.

El coeficiente de transmisión para una onda que incide en un pozo de potencial es [5]:

$$T = \left[1 + \frac{1}{4} \frac{V_0^2}{E(V_0 + E)} \sin^2 \left(\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 + E) a} \right) \right]^{-1} \quad (2.26)$$

Para los parámetros indicados en la sección 2.3, y con un pozo de potencial cuya profundidad es dos veces mayor que la energía del tren de ondas, $V_0 = 2E$, el coeficiente de transmisión es $T_a = 0.9647$.

2.4.2.2. Solución Numérica

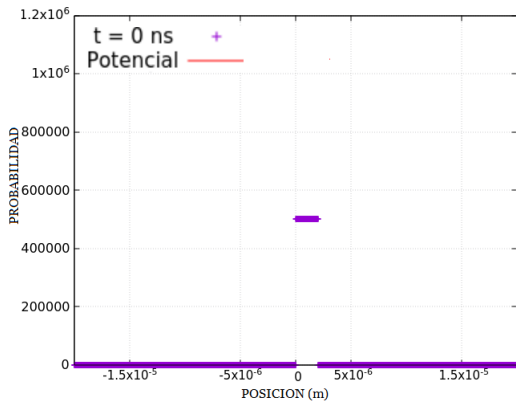


Figura 2.6: tren de ondas $t = 0$ ns junto al pozo.

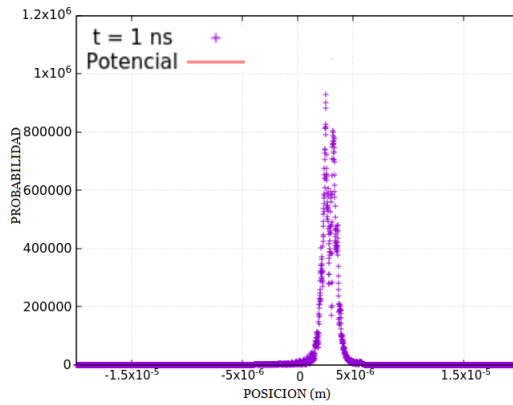


Figura 2.7: tren de ondas $t = 1$ ns dispersándose y cruzando.

En la figura 2.6 se encuentra el tren de ondas junto al pozo de potencial en un tiempo $t = 0$ ns, en la figura siguiente, 2.7 el tren de ondas ya se ha dispersado y está cruzando el potencial.

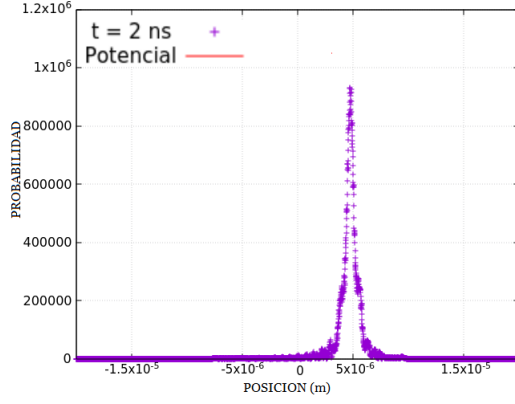


Figura 2.8: tren de ondas $t = 2$ ns terminando de cruzar.

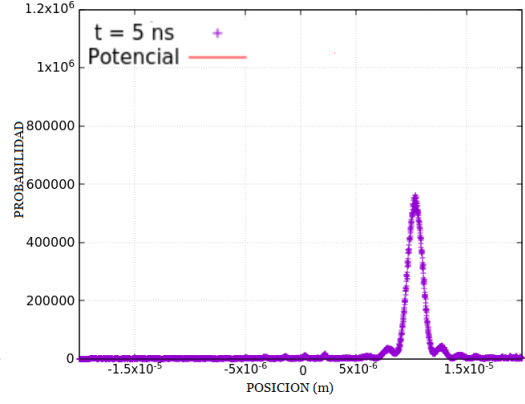


Figura 2.9: tren de ondas $t = 5$ ns del otro lado.

En la figura 2.8 la mayor parte del tren de ondas ha cruzado el potencial y finalmente en la figura 2.9 la gran mayoría del tren de ondas cruza el pozo mientras que una mínima parte se ha reflejado hacia la izquierda.

La probabilidad transmitida a través del pozo en la última figura es $T_s = 0.9853$.

La aproximación entre T_s y T_a es de un 97.9 %.

2.5. Transmisión a través de una barrera de potencial

Las barreras de potencial se utilizan para representar potenciales repulsivos, las más simples son las barreras rectangulares como el que se muestra en la figura 2.10, de ancho a y altura V_0 .

Clásicamente cuando una partícula colisiona con una barrera de potencial, ésta podrá cruzarla únicamente si su energía es mayor que la del potencial, en caso contrario la partícula será detenida y reflejada por la barrera. En el régimen cuántico es posible que una partícula con energía menor que un potencial lo atravesase, este fenómeno se conoce como efecto túnel y es una de las mayores aplicaciones de la teoría cuántica, desde el diseño de dispositivos electrónicos hasta el dar las bases teóricas al fenómeno de decaimiento alfa nuclear. A su vez es probable que una partícula con energía mayor que la del potencial sea reflejada por éste.

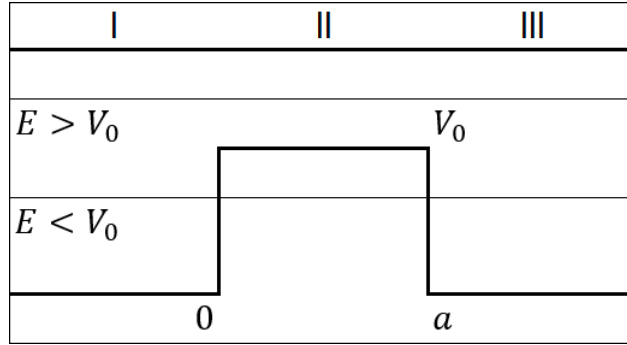


Figura 2.10: Barrera de potencial.

2.5.1. Energía menor a V_0

2.5.1.1. Solución Analítica

En este caso la partícula tiene una energía E mayor que el potencial en las regiones I y III , pero menor que este en la región II , por lo cual las regiones I y III no son regiones prohibidas y las soluciones generales son de la forma de ondas oscilatorias, así que nuevamente es posible determinar analíticamente el coeficiente de transmisión.

El coeficiente de transmisión para una onda que incide sobre una barrera de potencial es [5]:

$$T = \left[1 + \frac{1}{4} \frac{V_0^2}{E(V_0 - E)} \sinh^2 \left(\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} (V_0 - E) a \right) \right]^{-1} \quad (2.27)$$

Para los parámetros indicados en la sección 2.3, y con una barrera cuya altura es 2 veces la energía del tren de ondas, $V_0 = 2E$, el coeficiente de transmisión es $T_a = 0.1453$.

2.5.1.2. Solución Numérica

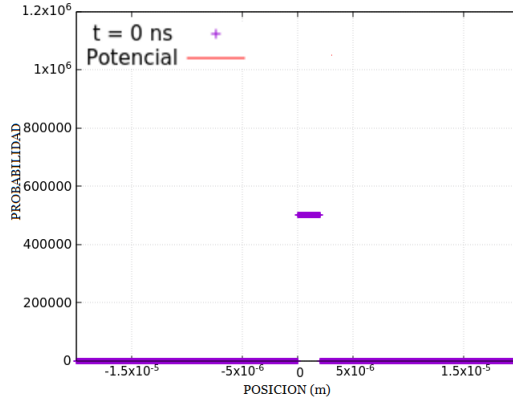


Figura 2.11: tren de ondas $t = 0$ ns junto a la barrera.

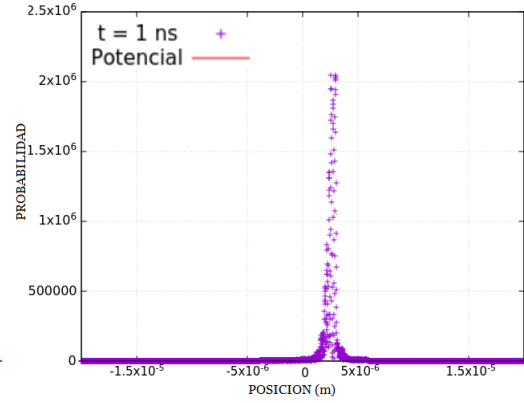


Figura 2.12: tren de ondas $t = 1$ ns dispersándose y colisionando.

En la figura 2.11 se encuentra el tren de ondas junto con la barrera de potencial en un tiempo $t = 0$ ns, en la figura siguiente, 2.12, el tren de ondas ya se ha dispersado y está cruzando el potencial, debido a que la energía de la barrera es mayor que la del tren de ondas, éste se retrasa dentro del potencial y la probabilidad empieza a acumularse, por eso aumenta de esa forma hasta que consigue cruzar o se ve reflejado.

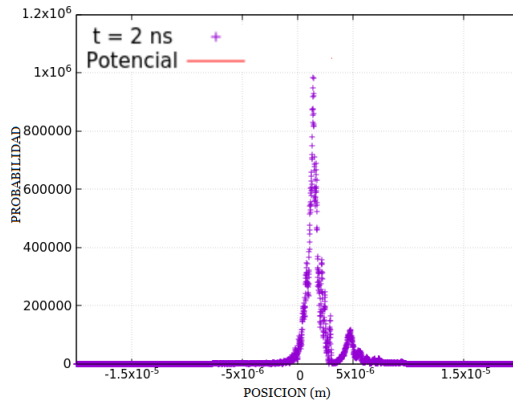


Figura 2.13: tren de ondas $t = 2$ ns terminado de cruzar y reflejarse.

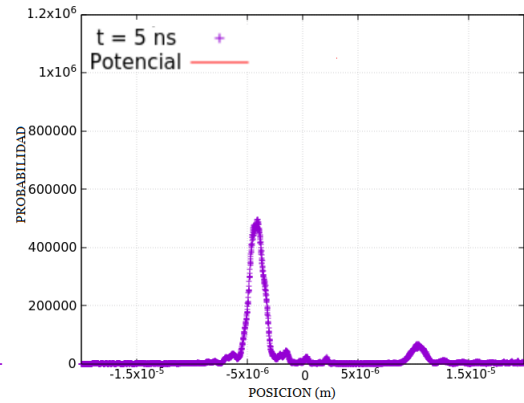


Figura 2.14: tren de ondas $t = 5$ ns reflejado y transmitido finalmente.

En la figura 2.13 se puede apreciar cómo la función de onda ya se ha reflejado y la probabilidad empieza a distribuirse hasta que finalmente cada parte de la función de onda forma dos nuevos paquetes en cada lado, como

se ve en la figura 2.14. Como la energía principal del tren de ondas es menor que la barrera, el porcentaje de onda transmitida es menor que el porcentaje de onda reflejada.

La probabilidad transmitida a través de la barrera en la última figura es $T_s = 0.1371$.

La aproximación entre T_s y T_a es de un 94.35 %.

2.5.2. Energía igual a V_0

2.5.2.1. Solución Analítica

En este caso el coeficiente de transmisión se puede obtener tomando el límite en que la energía de la partícula tiende a la del potencial para el coeficiente del caso anterior:

$$\begin{aligned}
 T &= \lim_{E \rightarrow V_0} \left[1 + \frac{1}{4} \frac{V_0^2}{E(V_0 - E)} \sinh^2 \left(\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E) a} \right) \right]^{-1} \\
 &\quad \text{Para ángulos pequeños } \sinh(x) \rightarrow x \\
 &= \lim_{E \rightarrow V_0} \left[1 + \frac{V_0^2}{4E} \frac{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E) a^2}{V_0 - E} \right]^{-1} \\
 &= \lim_{E \rightarrow V_0} \left[1 + \frac{V_0^2}{4E} \frac{2m}{\hbar^2} a^2 \right]^{-1} \\
 T &= \left[1 + \frac{mV_0}{2\hbar^2} a^2 \right]^{-1} \tag{2.28}
 \end{aligned}$$

Para los parámetros indicados en la sección 2.3, y una barrera con altura igual a la energía del tren de ondas, $V_0 = E$, el coeficiente de transmisión es $T_a = 0.6041$.

2.5.2.2. Solución Numérica

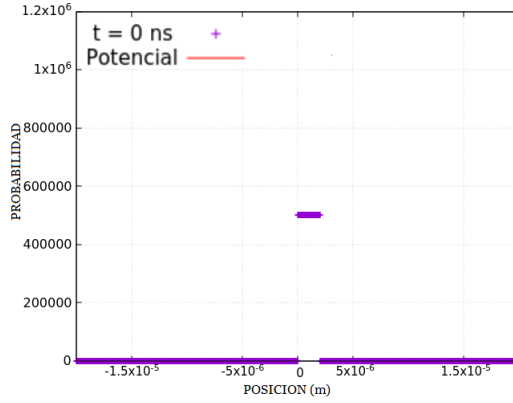


Figura 2.15: tren de ondas $t = 0$ ns junto a la barrera.

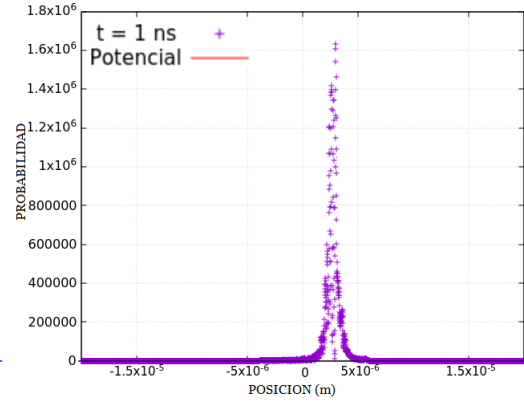


Figura 2.16: tren de ondas $t = 1$ ns dispersándose y colisionando.

Al igual que antes, las primeras dos figuras, 2.15 y 2.16, representan un tren de ondas viajando, y dispersándose, hacia el potencial e interactuando con éste, acumulando la probabilidad hasta que una porción de la función de onda consigue atravesar al potencial o es reflejada hacia la izquierda. Como la energía de la barrera es menor que antes, la probabilidad no se acumula tan drásticamente como en el caso anterior.

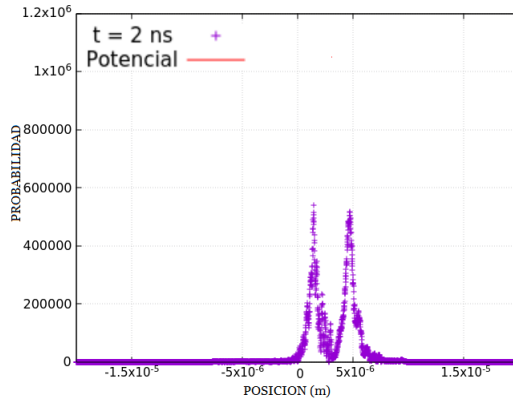


Figura 2.17: tren de ondas $t = 2$ ns terminando de cruzar y reflejarse.

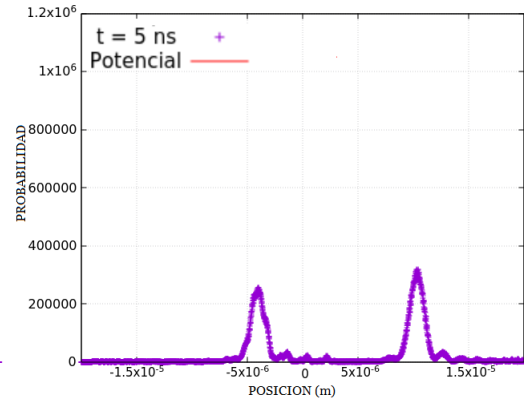


Figura 2.18: tren de ondas $t = 5$ ns reflejado y transmitido finalmente.

En la figura 2.17 se puede apreciar cómo la función de onda ya se ha reflejado y la probabilidad empieza a distribuirse hasta que finalmente cada parte de la función de onda forma dos nuevos paquetes en cada lado, como

se ve en la figura 2.18. Como la energía principal del tren de ondas es igual que la altura de la barrera, el porcentaje de onda transmitida es casi igual que el porcentaje de onda reflejada.

La probabilidad transmitida a través de la barrera en la última figura es $T_s = 0.5644$.

La aproximación entre T_s y T_a es de un 93.43 %.

2.5.3. Energía mayor a V_0

2.5.3.1. Solución Analítica

En este caso el coeficiente de transmisión para una onda que incide sobre una barrera de potencial es [5]:

$$T = \left[1 + \left(\frac{1}{4} \frac{2E - V_0}{E(E - V_0)} - 1 \right) \sin^2 \left(\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) a} \right) \right]^{-1} \quad (2.29)$$

Para los parámetros indicados en la sección 2.3, y una barrera de potencial con altura $V_0 = \frac{1}{2}E$, el coeficiente de transmisión es $T_a = 0.9061$.

2.5.3.2. Solución Numérica

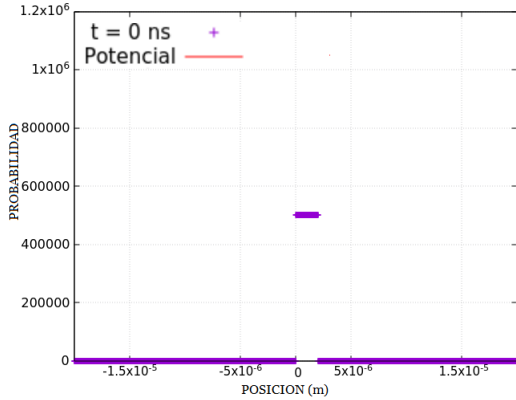


Figura 2.19: tren de ondas $t = 0$ ns junto a la barrera.

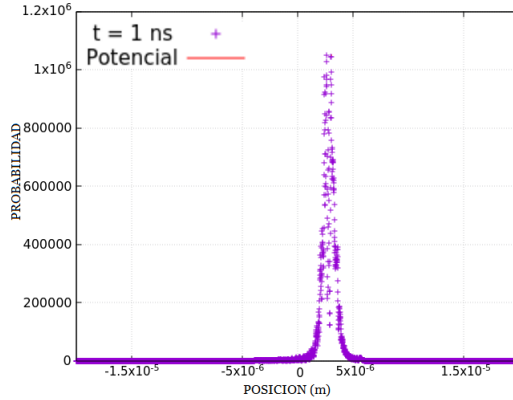


Figura 2.20: tren de ondas $t = 1$ ns dispersándose y colisionando.

Una vez más, las primeras dos figuras, 2.19 y 2.20, representan a un tren de ondas viajando hacia el potencial e interactuando con éste, dispersándose en todo el trayecto. Al llegar a la barrera de potencial la probabilidad empieza acumularse hasta que una porción de la función onda consigue atravesar la

barrera de potencial o es reflejada hacia la izquierda. En este caso el potencial tiene menos energía que el tren de ondas, es por esto que en la figura 2.20 la probabilidad no se acumula como en los casos anteriores, ya que aquí la mayor parte de la función de onda conseguirá cruzar el potencial a diferencia de los casos anteriores.

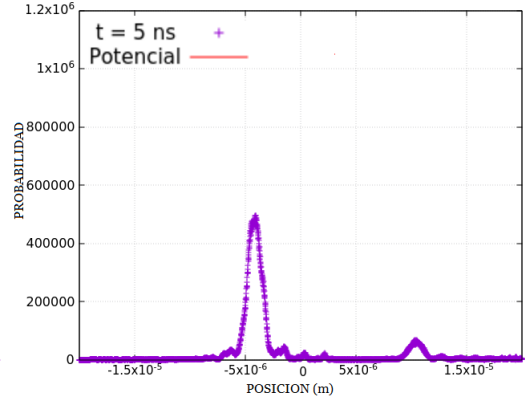
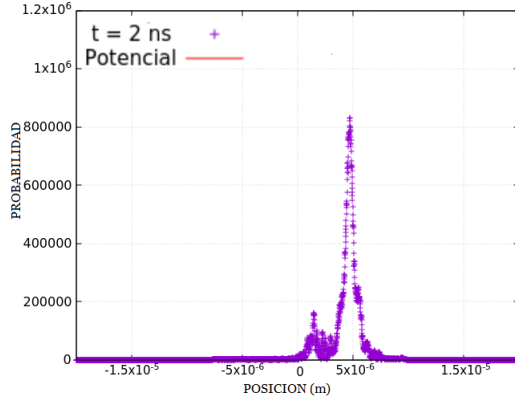


Figura 2.21: tren de ondas $t = 2$ ns terminado de cruzar y reflejarse. Figura 2.22: tren de ondas $t = 5$ ns reflejado y transmitido finalmente.

En la figura 2.21 puede observarse cómo la función de onda ya se ha reflejado y la probabilidad empieza a distribuirse hasta que finalmente cada parte de la función de onda forma dos nuevos paquetes en cada lado, como se ve en la figura 2.22. Como la energía principal del tren de ondas es mayor que la altura de la barrera, el porcentaje de onda transmitida es mayor que el porcentaje de onda reflejada.

La probabilidad transmitida a través de la barrera en la última figura es $T_s = 0.8874$.

La aproximación entre T_s y T_a es de un 97.94 %.

2.6. Generalidades

En todos los casos se observa cómo los trenes de ondas empiezan a dispersarse con el paso del tiempo debido a que, a pesar de que son trenes de ondas con una frecuencia específica, estos se obtienen de recortar una onda plana infinita por lo cual en sus bordes no decaen naturalmente a cero, así que para compensar ese corte en los bordes son necesarias más componentes con distintas frecuencias, y por lo tanto distintas energías; así, las componentes menos energéticas se van quedando atrás y las más energéticas se adelantan.

La aproximación entre los coeficientes de transmisión para ondas infinitas (T_a) con el de los porcentajes de onda transmitida (T_s) era de esperarse ya que la principal componente de cada tren de ondas coincide con la onda infinita para la cual se calculó el coeficiente de transmisión.

Capítulo 3

Paquete de ondas gaussiano, barreras y pozos

3.1. Ondas gaussianas

A diferencia de las distintas funciones de onda que se han mencionado anteriormente (trenes de onda, ondas planas infinitas), los paquetes de ondas gaussianos decaen naturalmente a cero y no hay necesidad de cortarlos, por lo cual estudiarlas con herramientas computacionales ofrece resultados más completos que para las otras ondas. Por otro lado se demostró en la subsección 1.3.1 que estos paquetes representan partículas con mínima dispersión en posición y momento, de ahí el interés de estudiarlas. Debido a que los paquetes gaussianos están formados por una infinidad de componentes, con distintas energías, no es posible determinar analíticamente los coeficientes de transmisión y reflexión como con las ondas planas infinitas, por lo cual es necesario recurrir a métodos computacionales para visualizar y predecir la evolución de estas ondas al encontrarse con distintos potenciales. De igual forma que en el capítulo 2, se comparará el porcentaje de onda transmitida con los coeficientes de transmisión para ondas infinitas cuya energía sea igual a la energía promedio del paquete gaussiano.

El análisis de los distintos potenciales ya fue estudiado en general en el capítulo anterior, por lo cual no hay necesidad de repetirlo en las siguientes secciones, únicamente es necesario retomar las expresiones para los coeficientes de transmisión de cada caso.

Para comparar numéricamente nuevamente se considerará el movimiento de un electrón con los siguientes parámetros:

Energía promedio	E	$=$	$10 \mu\text{eV}$
Desviación	σ	$=$	100 nm
Ancho del potencial	a	$=$	100 nm
Intervalo temporal	Δt	$=$	10^{-2} ns
Intervalo espacial	Δx	$=$	10 nm
Dominio físico	D	$=$	$40 \mu\text{m}$

El paquete gaussiano, ya normalizado, tendría la forma:

$$\Psi(x, t) = \frac{e^{ik_0 x}}{\sqrt{\sqrt{2\pi}\sigma}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4\sigma^2}} \quad (3.1)$$

$$\begin{aligned} k_0 &= \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \\ k_0 &= 1.61897 \times 10^7 \text{ m}^{-1} \end{aligned} \quad (3.2)$$

3.2. Partícula libre

Anteriormente, en la sección 1.3, se mencionó que los paquetes de ondas tienden a dispersarse con el paso del tiempo, esto ocurre con cualquier paquete de ondas, incluso con los trenes de ondas se puede observar en los primeros pasos de las simulaciones, pero una peculiaridad de las funciones de onda gaussianas es que se dispersan de la misma forma tanto para la izquierda como para la derecha, así el centro de la gaussiana avanza como si no existiera esta dispersión [5].

A continuación se presenta la evolución de una onda gaussiana con las características mencionadas anteriormente:

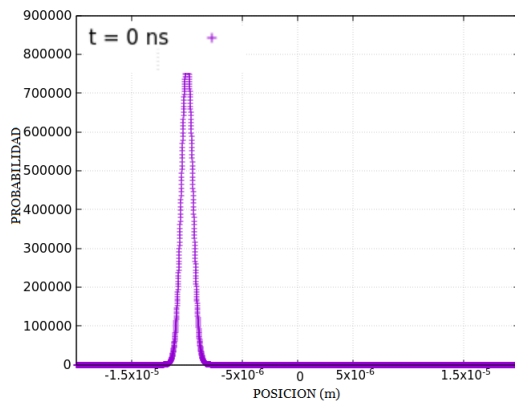


Figura 3.1: Paquete gaussiano descrito anteriormente.

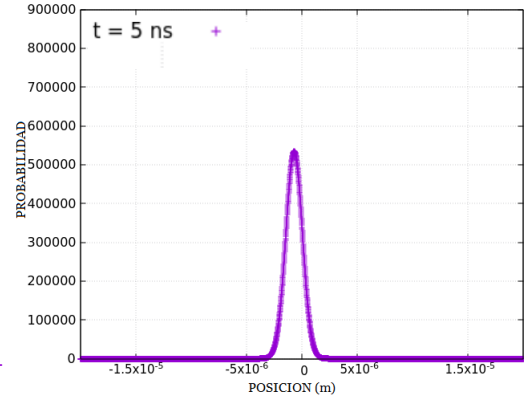


Figura 3.2: Paquete gaussiano tras 5 ns dispersándose.

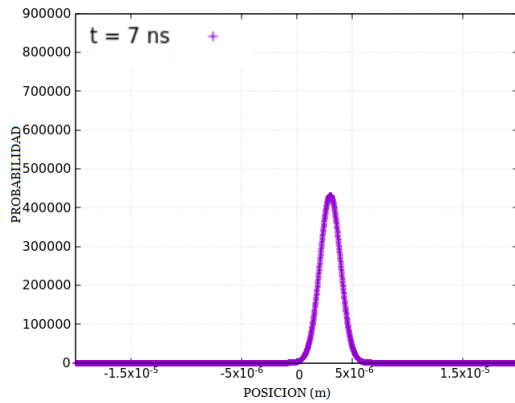


Figura 3.3: Paquete gaussiano tras 7 ns dispersándose.

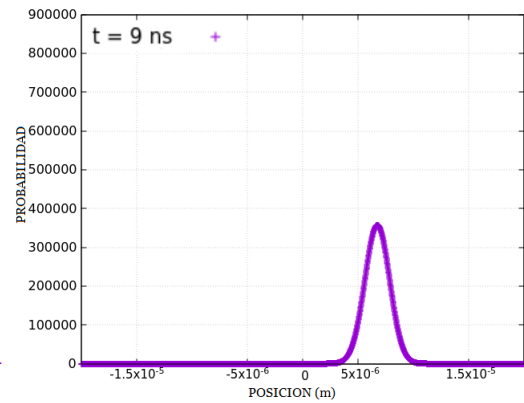


Figura 3.4: Paquete gaussiano tras 9 ns dispersándose.

Para compensar la dispersión, la altura de la función de onda disminuye para conservar la probabilidad. Como se aprecia en la figura 3.4 la amplitud ha disminuido hasta llegar a ser menor que la amplitud original.

La figura 3.1 es la función de onda original que se usará de referencia para el análisis de las subsecciones 3.3.2, 3.4.1, 3.4.2 y 3.4.3.

3.3. Transmisión a través de un pozo de potencial

3.3.1. Energía promedio menor a cero y mayor que $-V_0$

De igual forma que en la subsección 2.4.1, debido a la forma de las soluciones para este sistema, se opta por pasar el problema al de una partícula encerrada en una caja de potencial dos veces mayor que la energía promedio de la partícula y de ancho $10\text{ }\mu\text{m}$.

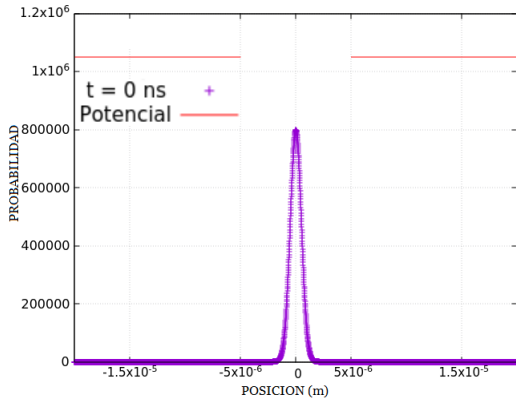


Figura 3.5: Paquete gaussiano dentro de un pozo de potencial.

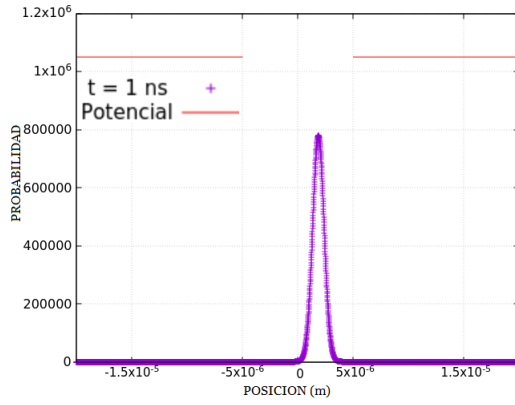


Figura 3.6: Paquete gaussiano tras un tiempo $t = 1\text{ ns}$.

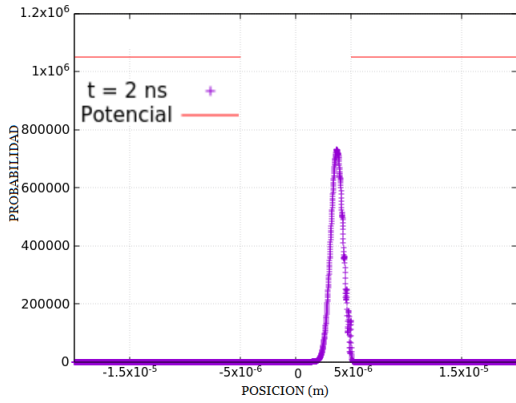


Figura 3.7: Paquete gaussiano tras un tiempo $t = 2\text{ ns}$ colisionando con la pared del pozo.

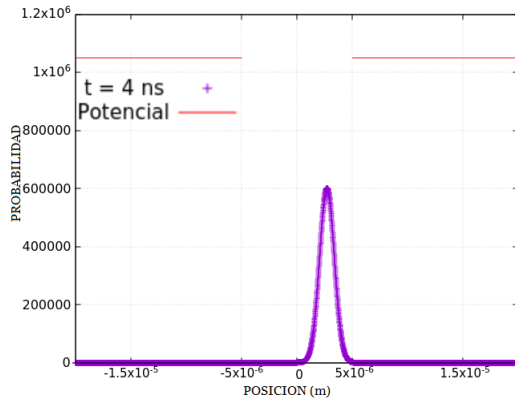


Figura 3.8: Paquete gaussiano tras un tiempo $t = 4\text{ ns}$ reflejado totalmente dentro del pozo.

En las cuatro figuras anteriores podemos ver como una onda gaussiana encerrada en una caja de potencial, de altura dos veces mayor que la energía promedio de la onda, al propagarse colisiona con una de las paredes de ésta, siendo reflejada totalmente para dirigirse a la otra pared.

3.3.2. Energía promedio mayor a cero

Para los parámetros indicados en la sección 3.1, y un pozo de potencial con energía $-V_0$, dos veces mayor que la energía del tren de ondas, $V_0 = 2E$, el coeficiente de transmisión es $T_a = 0.9647$.

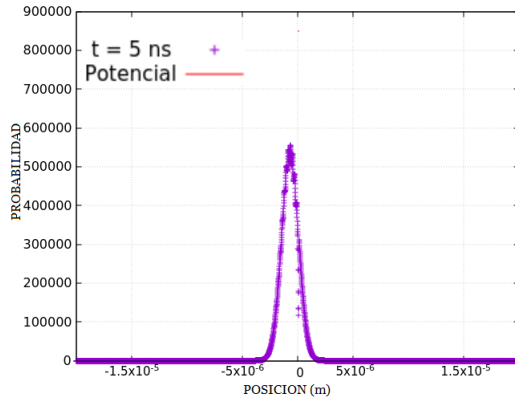


Figura 3.9: Paquete gaussiano tras 5 ns colisionando con el pozo de potencial.

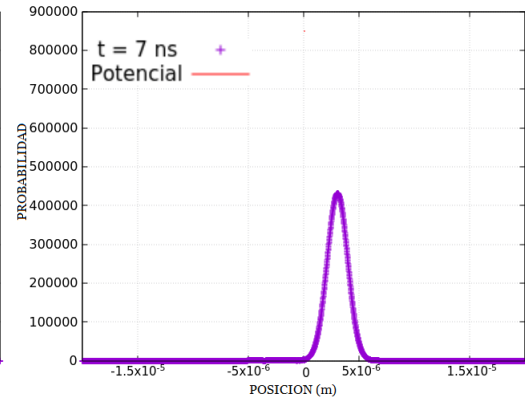


Figura 3.10: Paquete gaussiano tras 7 ns atravesando casi totalmente al pozo.

En la figura 3.9 el paquete gaussiano inicia su interacción con el pozo de potencial, en el instante $t = 5$ ns. En la figura 3.10 se observa cómo la mayor parte del paquete gaussiano consiguió cruzar el pozo de potencial.

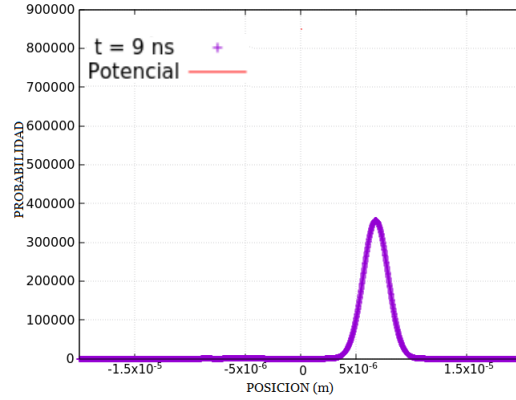


Figura 3.11: Paquete gaussiano tras 9 ns con una porción reflejada por el pozo.

En la figura 3.11 el paquete gaussiano ha terminado por completo su interacción con el pozo de potencial y la fracción reflejada es más apreciable.

La probabilidad transmitida a través de la barrera en la última figura es $T_s = 0.9975$.

Podemos comparar el porcentaje de transmisión para una onda infinita y el de la simulación con una onda gaussiana, obteniendo una aproximación de 96.71 %.

3.4. Transmisión a través de una barrera de potencial

3.4.1. Energía promedio menor que V_0

Para los parámetros indicados en la sección 3.1, y con una barrera de potencial cuya altura es dos veces mayor que la energía promedio de la onda gaussiana, $V_0 = 2E$, el coeficiente de transmisión es $T_a = 0.1453$.

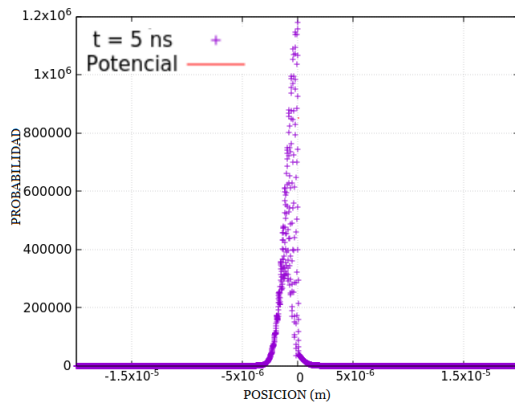


Figura 3.12: Paquete gaussiano tras 5 ns colisionando con la barrera de potencial.

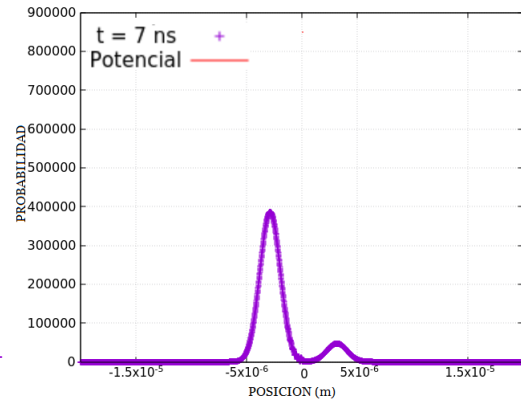


Figura 3.13: Paquete gaussiano tras 7 ns terminando de colisionar con la barrera.

En la figura 3.12 se puede observar como la probabilidad se acumula en la barrera de potencial, esto debido a que la barrera retrasa el movimiento de la onda, por lo cual la probabilidad empieza a concentrarse ahí hasta que una parte de la onda atraviese la barrera y otra parte se vea reflejada. Como se observa a los 2 ns la colisión ha terminado y el paquete de ondas ha sido separado en dos paquetes de ondas a cada lado de la barrera, como se ve en la figura 3.13.

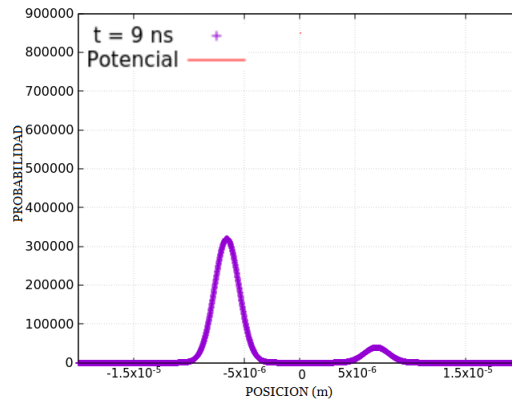


Figura 3.14: Paquete gaussiano tras 9 ns dividido en dos paquetes de ondas a los lados de la barrera.

En la figura 3.14 el paquete de ondas ha sido separado completamente en dos paquetes de ondas a cada lado de la barrera. Debido a que la energía de la barrera es más alta que la energía promedio del potencial, es de esperarse que la porción reflejada sea mayor que la que logró atravesar la barrera.

La probabilidad transmitida a través de la barrera en la última figura es $T_s = 0.1094$.

Podemos comparar el porcentaje de transmisión para una onda infinita y el de la simulación con una onda gaussiana, obteniendo una aproximación de 75.29 %.

3.4.2. Energía promedio igual a V_0

Para los parámetros indicados en la sección 3.1, y con una barrera de potencial cuya energía es igual a la energía promedio de la onda gaussiana, $V_0 = E$, el coeficiente de transmisión es $T_a = 0.6041$.

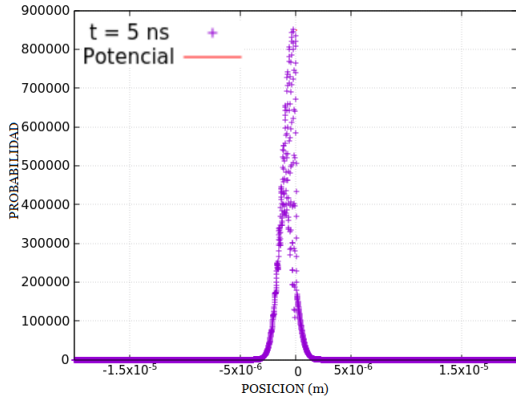


Figura 3.15: Paquete gaussiano tras 5 ns terminando de reflejarse y atravesar la barrera.

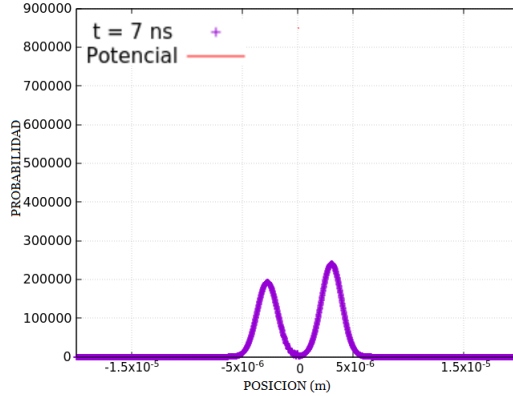


Figura 3.16: Paquete gaussiano tras 7 ns dividido en dos paquetes de onda a los lados de la barrera.

Al igual que antes, la primera figura, 3.15, muestra cómo la probabilidad se acumula durante la colisión de la función de onda con la barrera. Dado a que en este caso la energía del potencial es igual a la energía de la onda gaussiana, y no mayor como en el caso anterior, la probabilidad no se acumula tanto como en dicho caso. En la figura 3.16 se puede apreciar que la onda gaussiana se ha fragmentado en dos paquetes de ondas a cada lado del potencial.

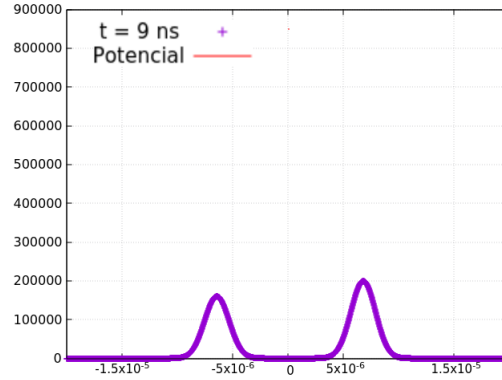


Figura 3.17: Paquete gaussiano tras 9 ns dividido en dos paquetes de ondas a los lados de la barrera.

En la figura 3.17 los paquetes de ondas se han separado completamente y se alejan de la barrera. Debido a que la energía del potencial es igual a la energía promedio del paquete gaussiano, se podía anticipar que la porción de onda transmitida se aproxime a un 50 % de la onda incidente.

La probabilidad transmitida a través de la barrera en la última figura es $T_s = 0.5547$.

Podemos comparar el porcentaje de transmisión para una onda infinita y el de la simulación con una onda gaussiana, obteniendo una aproximación de 91.82 %.

3.4.3. Energía promedio mayor que V_0

Para los parámetros indicados en la sección 3.1, y con una barrera de potencial cuya energía es un medio de la energía promedio de la onda gaussiana, $V_0 = \frac{1}{2}E$, el coeficiente de transmisión es $T_a = 0.9061$.

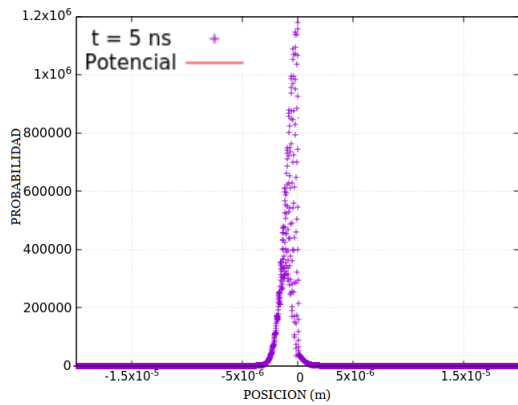


Figura 3.18: Paquete gaussiano tras 5 ns colisionando con la barrera de potencial.

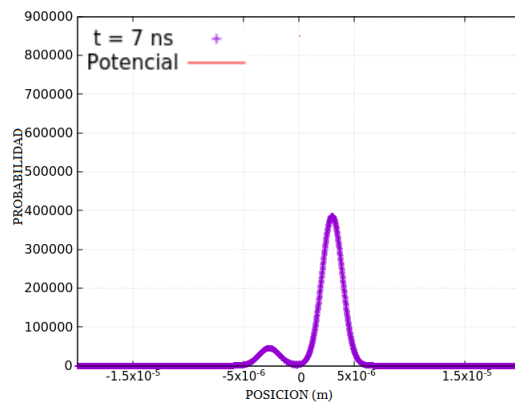


Figura 3.19: Paquete gaussiano tras 7 ns terminando de atravesar la barrera de potencial.

En la figura 3.18 se aprecia la función de onda interaccionando con la barrera de potencial, debido a que la barrera de potencial tiene menos energía que la onda gaussiana, la onda se ve con menor dificultad para cruzar la barrera, por lo cual la probabilidad no se acumula tanto como en los casos anteriores y la onda no se deforma tan drásticamente.

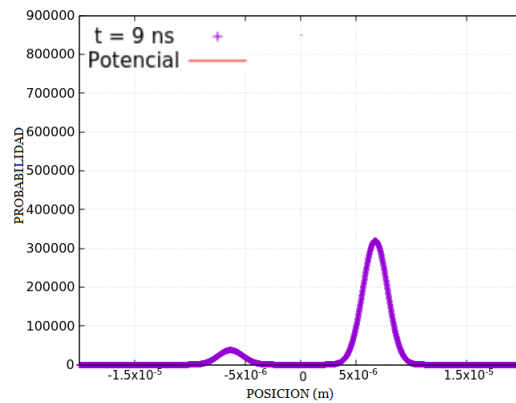


Figura 3.20: Paquete gaussiano tras 9 ns dividido en dos paquetes de ondas a los lados de la barrera.

En la figura 3.20 la onda gaussiana ha terminado su interacción con la barrera de potencial. El paquete de ondas ha sido separado en dos paquetes de ondas a cada lado de la barrera. Debido a que la energía promedio del paquete de ondas es mayor que la energía de la barrera, es de esperarse que la porción reflejada sea menor que la que logró atravesar la barrera.

La probabilidad transmitida a través de la barrera en la última figura es $T_s = 0.8946$.

Podemos comparar el porcentaje de transmisión para una onda infinita y el de la simulación con una onda gaussiana, obteniendo una aproximación de 98.73 %.

3.5. Desfasamiento de onda

Las barreras de potencial ocasionan efectos interesantes en la onda incidente, estos se pueden observar si comparamos las ondas transmitidas:

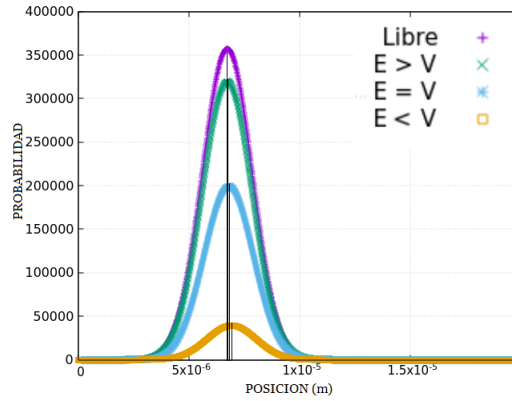


Figura 3.21: Desfasamiento de las ondas transmitidas.

La figura 3.21 muestra las ondas transmitidas de los tres casos anteriores y el de la partícula libre en el tiempo de 9 ns, cada línea vertical indica donde se encuentra el pico de probabilidad de cada una de estas.

Uno de dichos efectos es la reducción de la amplitud de la función de onda, esto es de esperarse pues una porción del paquete de ondas se ve reflejado. El segundo efecto es el desfasamiento de la onda, es decir, cuando una onda colisiona con una barrera de potencial, las componentes más energéticas atraviesan con mayor facilidad la barrera, de tal forma que si la barrera de potencial es más energética, el paquete de ondas transmitido se adelanta al caso en que la barrera es menos energética.

Capítulo 4

Conclusiones

En este trabajo se ha mostrado la versatilidad de los métodos numéricos para mejorar el estudio de distintos fenómenos de la mecánica cuántica. Por medio de simulaciones de la colisión de una partícula, con distintas funciones de onda, con distintos potenciales, pozos o barreras, se pudo visualizar la evolución del sistema en el tiempo. A su vez, permiten visualizar distintos fenómenos, como el efecto túnel, la dispersión o el desfaseamiento.

Los trenes de ondas, estudiados en el capítulo 2, tienden a dispersarse y perder su forma rápidamente. Por otra parte, para los paquetes gaussianos, de los cuales se demostró en la subsección 1.3.1 que su dispersión es mínima, se pudo observar cómo se dispersa una partícula libre en la sección 3.2. Gracias a la distribución de sus componentes no se pierde la forma de campana; en su lugar, el paquete se dispersa de la misma forma para cada lado y la cresta baja para conservar la probabilidad. Tras comparar los paquetes transmitidos a través de barreras de potencial, se pudo observar dos fenómenos distintos; la atenuación, relacionado con la reducción de la amplitud de la función de onda, y el desfaseamiento de los paquetes de ondas, el cual se debe a que las componentes del paquete de ondas que son más energéticas que la barrera de potencial, cruzan con mayor facilidad, de tal forma que el paquete de ondas transmitido es más energético y por lo tanto se adelanta a un paquete de ondas que se transmite a través de una barrera de potencial menos energética.

También se comparó cómo las fórmulas que se utilizan para calcular el coeficiente de transmisión de ondas planas que inciden en barreras o pozos de potencial pueden ser buenas aproximaciones para calcular el porcentaje de transmisión de ondas gaussianas o trenes de ondas para el caso respectivo. Principalmente si la energía del tren de ondas o la onda gaussiana es mucho mayor que la de la barrera.

Bibliografía

- [1] Richard L Liboff. *Introductory quantum mechanics*. Pearson Education India, 2003.
- [2] L. de la Peña. *Introducción a la mecánica cuántica*. Ediciones científicas universitarias: Serie Texto Científico Universitario. Universidad Nacional Autónoma de México, 1991. ISBN: 9789681636487.
- [3] Lokenath Debnath y Tyn Myint-U. *Linear Partial Differential Equations for Scientists and Engineers*. Birkhäuser, 2007.
- [4] Kevin Smith y Guy Blaylock. “Simulations in quantum tunneling”. En: *American Journal of Physics* 85.10 (2017), págs. 763-768. DOI: 10.1119/1.4991367.
- [5] L.I. Schiff. *Quantum Mechanics*. International series in pure and applied physics. McGraw-Hill, 1955.