

La Ecuación de Schrödinger

Voluntario 1: Estudio del coeficiente de transmisión

Luis Hallamaa Carmona

Física Computacional
Doble Grado en Física y Matemáticas
Universidad de Granada

Contents

1	Introducción	3
2	Método y resultados	4
2.1	Dependencia de K con N	5
2.2	Dependencia de K con λ	7
3	Conclusiones	8

Abstract

Se ha llevado a cabo el estudio del coeficiente de transmisión para una partícula confinada que colisiona con una barrera de potencial. En particular, se ha tratado su dependencia con la anchura y altura de dicha barrera y se ha comparado con los resultados teóricos.

1 Introducción

Analizar el coeficiente de transmisión (K) no es otra cosa que determinar con qué probabilidad se va a encontrar a la partícula al otro lado de la barrera de potencial. Clásicamente, se termina pronto: $K = 1$ si la energía de la partícula es mayor que la del potencial y $K = 0$ en caso contrario. Cuánticamente, ya no se trata de blanco o negro, pues cuando un paquete de ondas colisiona con una barrera, este en parte se refleja y en parte se transmite, pudiendo una partícula superar una barrera del ancho adecuado aún no teniendo energía a priori para ello. Es el efecto túnel.

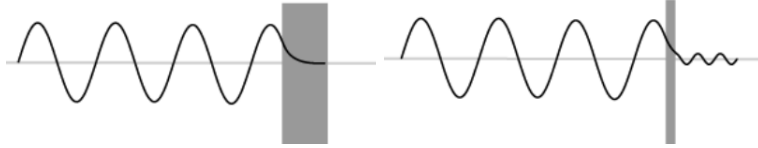


Figure 1: (Izquierda) Cuando la onda choca contra una barrera gruesa esta no desaparece abruptamente en su interior, sino que decae de manera exponencial. (Derecha) Para una barrera más delgada, parte de la onda atraviesa, pudiendo encontrarse la partícula asociada al otro lado.

En la simulación que nos ocupa, mediante un detector en cada extremo del pozo infinito se pondrá de manifiesto cuál ha sido el comportamiento de una onda y, repitiendo 10^3 veces bajo las mismas condiciones, K vendrá dado como el cociente entre partículas lanzadas (desde la izquierda de la barrera) y partículas detectadas a la derecha. Ha de tenerse en cuenta que los detectores no juegan un papel pasivo como ocurriría en el mundo clásico. De hecho, influyen fuertemente en la dinámica del sistema, siendo uno de los parámetros más importantes a fijar en esta simulación n_D , el número de pasos temporales que se producen entre cada dos medidas. Por ejemplo, si se detectara todo el rato, esto es $n_D = 1$, se daría el conocido como Efecto cuántico de Zenón[1], deteniendo la evolución de la partícula: “un sistema no puede cambiar mientras se observa”. En realidad, se trata de buscar un n_D tal que proporcione una probabilidad alta de encontrar la partícula a la derecha de la barrera.

El modelo teórico seguido se fundamenta en que el coeficiente de transmisión es el cociente de los cuadrados de las amplitudes de la onda incidente y transmitida. Dependiendo de la energía de la onda, el desarrollo[2] muestra que:

- Si $0 < E < V(\lambda)$,

$$K = \frac{1}{1 + \frac{\lambda^2 \sinh^2\left(\frac{N}{5} \tilde{k}_0 \sqrt{\lambda-1}\right)}{4(\lambda-1)}} \quad (1)$$

- Si $0 < E = V(\lambda)$,

$$K = \frac{1}{1 + \left(\frac{N}{5}\right)^2 \frac{\tilde{k}_0}{4}} \quad (2)$$

- Si $0 < V(\lambda) < E$,

$$K = \frac{1}{1 + \frac{\lambda^2 \sin^2\left(\frac{N}{5} \tilde{k}_0 \sqrt{1-\lambda}\right)}{4(1-\lambda)}} \quad (3)$$

Como se puede observar, convenientemente fijado \tilde{k}_0 o, en su lugar, n_{ciclos} , que da el número de oscilaciones completas que la función de onda tiene sobre la red, los dos parámetros de los que depende la transmisión son λ , proporcional al potencial, y N , el número de pasos espaciales. Nótese que se está usando una barrera de potencial de ancho $N/5$, luego, en definitiva, se está tratando con el ancho y el alto de la barrera.

2 Método y resultados

Según se ha anticipado, es crucial fijar n_D maximizando la probabilidad de detectar la partícula a la derecha en el tiempo n , esto es,

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

Hay que tener claro que detectar la partícula supone interferir con su estado, forzando el colapso de la función de onda. Es decir, una vez detectada la partícula a la derecha, la probabilidad de medirla ahí en los momentos siguientes es igual a la unidad. Por el contrario, el hecho de medir y no detectarla, asegura que en la región que se ha medido no está, claro. Así, la incertidumbre disminuye y la función de onda ha renormalizarse en la región restante. El algoritmo usado pone especial énfasis en este proceso de renormalización, tanto cuando actúa el detector de la derecha como cuando lo hace el de la izquierda, por supuesto.

Entonces, se corren simulaciones para distintas combinaciones de N y λ y se selecciona n_D en la región común de mayor coeficiente de transmisión:

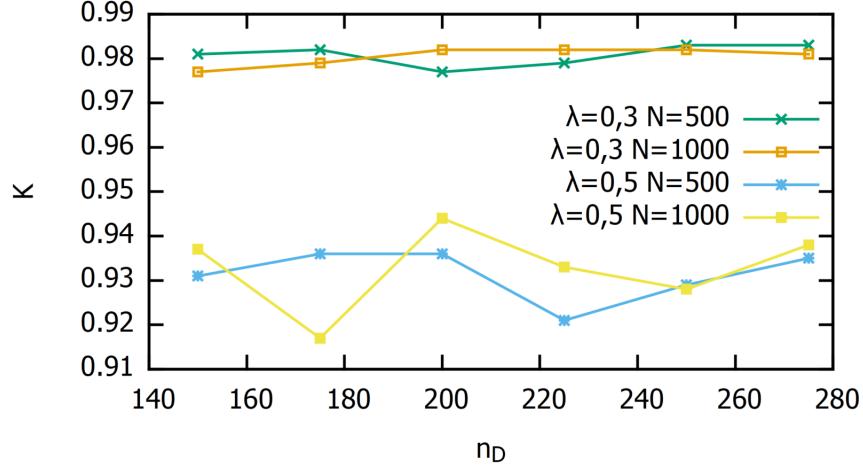


Figure 2: Coeficiente de transmisión en función del número de pasos que se deja evolucionar el sistema entre medidas.

En la zona mostrada, todos los valores parecen arrojar valores de K suficientemente altos. Tómese, pues, por ejemplo $n_D = 200$.

Se comienza ahora el estudio de la dependencia de K con los parámetros anunciados, sin más que notar antes un par de detalles. Mediante varias pruebas, se ha probado funcional mantener $n_{ciclos} = N/10$ durante todas las simulaciones. Por otro lado, puesto que para seguir la regla de Born han de generarse números aleatorios, la semilla elegida ha sido $seed = 176895$.

2.1 Dependencia de K con N

Se pide estudiar, para $N = 500, 1000, 2000$, cómo varía el coeficiente de transmisión. Para ello, fijando diferentes λ , se va a graficar uno frente al otro. Cabe esperar que mientras que λ sea notablemente menor que la unidad, independientemente del ancho de la barrera, la energía será suficiente para que se transmita la mayor parte de la onda. Bien diferente será cuando $\lambda \geq 1$.

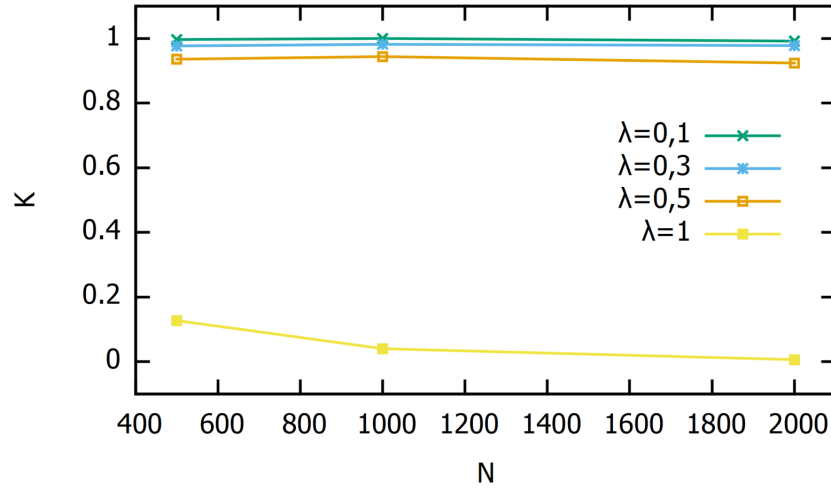


Figure 3: Coeficiente de transmisión en función de la anchura del pozo para $\lambda \leq 1$.

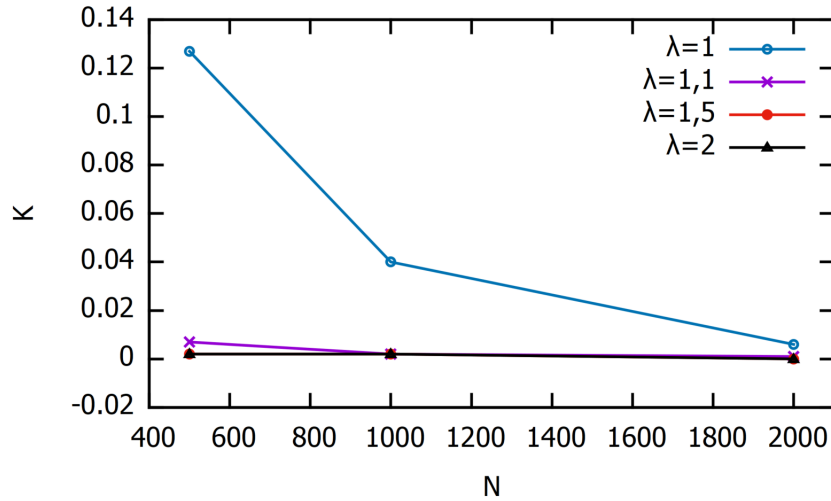


Figure 4: Coeficiente de transmisión en función de la anchura del pozo para $\lambda \geq 1$.

En efecto, para λ pequeños, no hay dependencia del coeficiente de transmisión con N . Sin embargo, si el balance energético es más ajustado, esto es, $\lambda \approx 1$ o mayores, la probabilidad de encontrar la partícula a la derecha de la barrera decae claramente al aumentar el ancho de la barrera.

2.2 Dependencia de K con λ

En esta ocasión se trata de fijar N y observar el comportamiento de K con $\lambda = 0.1, 0.3, 0.5, 1, 2, 5, 10$. Por lo ya visto, se sabe que al variar N la única región que se va a ver afectada es la correspondiente a $\lambda \geq 1$, pero en ese caso no aporta gran información similar para distintos N , pues en una gráfica K frente a λ , la dependencia que vale la pena observar es la que se manifiesta mientras el coeficiente de transmisión decrece desde 1 hasta casi 0, y no tanto la de casi 0 hasta ser nulo. Entonces, basta elegir $N = 500$. Eso sí, se añaden los valores $\lambda = 0.7, 0.9$, pues dan una mejor visualización. Se grafica ahora también la dependencia teórica dada por la expresión (3), pues se trabaja con $\lambda \leq 1$.

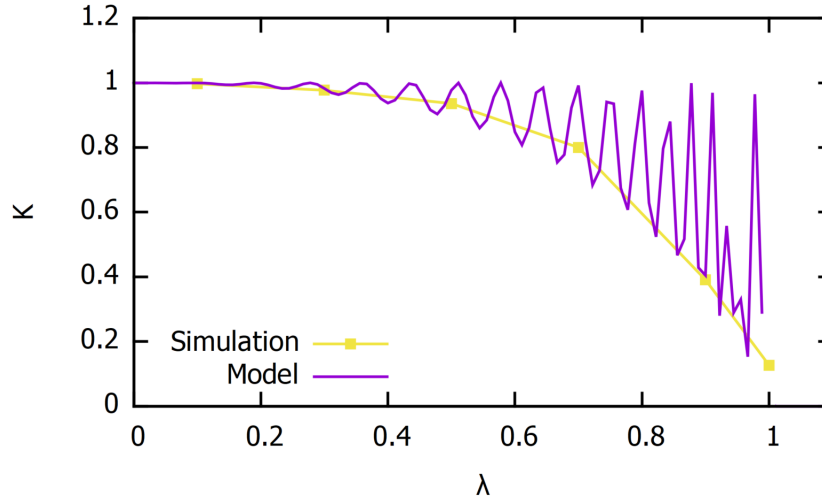


Figure 5: Coeficiente de transmisión en función del alto del potencial, considerando los $\lambda \leq 1$ y para $N = 500$.

Es importante, para después extraer conclusiones correctas, explicar a qué se debe el comportamiento oscilatorio del coeficiente de transmisión teórico y si los picos que se alejan de los datos de la simulación suponen o no un problema de precisión. La interpretación es la siguiente: las partículas que pasan por encima de la barrera de potencial poseen una cierta longitud de onda de acuerdo con la relación de De Broglie; cuando esta guarda una cierta proporción con la altura del potencial, se manifiesta una especie de resonancia que “invita” a la partícula a adentrarse en la barrera, siendo más probable que la llegue a traspasar y así encontrar dicha partícula al otro lado. La simulación llevada a cabo no atiende a este fenómeno, por tanto, basta quedarse con la tendencia general que siguen los picos, la cual se corresponde con la dada por la simulación. Además, cabe decir que la frecuencia de dichas oscilaciones viene marcada por el parámetro n_{ciclos} fijado, como resulta lógico.

Por lo comentado antes, para el estudio de las $\lambda \geq 1$ se omite el método

gráfico y se muestra una tabla comparativa entre los valores obtenidos en la simulación y aquellos dados por el modelo seguido a partir de la expresión (1).

λ	K_{sim}	K_{mod}
1	0.127	$6 \cdot 10^{-4}$
1.1	0.007	$7 \cdot 10^{-18}$
1.5	0.002	$9 \cdot 10^{-39}$
3	0	$2 \cdot 10^{-77}$

Table 1: Coeficientes de transmisión de la simulación y del modelo teórico frente a las $\lambda \geq 1$, para $N = 500$.

Se han modificado los valores del potencial a medir con respecto a los sugeridos en el gui3n dado que a partir de $\lambda = 1.5$, el coeficiente resultaba ser siempre nulo. A3n con ello, los 3rdenes de magnitud entre ambos m3todos son demasiado dispares.

3 Conclusiones

En primer lugar, atendiendo a la variaci3n del coeficiente de transmisi3n con el ancho de la barrera de potencial, es decir, con N , se ha observado que cuando la energ3a de la part3cula es superior a la de la barrera no existe relaci3n entre los par3metros, manteni3ndose la K intacta para los distintos casos. Por el contrario, s3 que aparece dependencia cuando la energ3a de la part3cula est3 re3ñida con la del potencial. En particular, es menos probable encontrar la part3cula a la derecha de la barrera cuanto m3s ancha sea esta. El sentido f3sico es evidente, si la onda decae r3pidamente dentro de la barrera, y no es mucha la energ3a con la que penetra, es muy probable que se extinga antes de pasar al otro lado.

En cuanto a la dependencia de K con la altura del potencial, cuando se ha tratado de $\lambda < 1$, se han obtenido resultados que obedecen a la intuici3n: la probabilidad de encontrar la part3cula al otro lado de la barrera es siempre mayor que cero. Ciertamente es que decae seg3n la energ3a de la part3cula se acerca a la del potencial, totalmente de acuerdo con el modelo te3rico presentado. Cuando $\lambda \geq 1$, se ha comprobado la aparaci3n del efecto t3nel, pues se han medido K_{sim} no nulas, aunque muy superiores a las predichas por el modelo. Es decir, se ha podido ilustrar lo que ocurre en la realidad pero con escaso 3xito a nivel num3rico. Ello puede deberse bien a que se ha elegido n_D favoreciendo la probabilidad de detectar la part3cula a la derecha, lo cual supone un exceso del modelo simulado con respecto al te3rico, o bien, a que mil iteraciones, para estos valores de los par3metros, no son suficientes para capturar correctamente la realidad.

References

- [1] Efecto cuántico de Zenón https://en.wikipedia.org/wiki/Quantum_Zeno_effect
- [2] Modelo teórico <http://la-mecanica-cuantica.blogspot.com/2010/07/transmision-y-reflexion-de-particulas.html>