

Estudio del coeficiente de transmisión

Nils van Es Ostos

Mayo 2021

1 Introducción

En mecánica cuántica, el efecto túnel es un fenómeno cuántico por el que una partícula viola los principios de la mecánica clásica penetrando una barrera potencial con mayor energía cinética que la propia partícula.

$$K = \frac{|C_r|^2}{|A_r|^2} \quad (2.3)$$

Además, el valor esperado de un observable se puede calcular como

$$\langle O \rangle = \int \Phi^*(x) \hat{O} \Phi(x) dx \quad (2.4)$$

2 Fundamento teórico

El sistema de una partícula unidimensional viene dado por la ecuación de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \Phi(x, t)}{\partial t} = \left[\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x) \right] \Phi(x, t) = H\Phi \quad (2.1)$$

donde $V(x)$ es el potencial al que se somete la partícula, H el operador Hamiltoniano, y \hbar la constante de Planck reducida.

La solución para esta ecuación es

$$\Phi(x, t) = \Phi(x, t_0) e^{-i(t-t_0)H} \quad (2.2)$$

Para estudiar el coeficiente de transmisión de esta onda, debemos usar

donde \hat{O} es el operador correspondiente al observable ($\hat{x} = x, \hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \dots$).

3 Método numérico

Para poder realizar el cálculo numérico, primero debemos discretizar el espacio y el tiempo haciendo $x_j = jh$ y $t = ns$, con $j = 0, 1, 2, \dots, N$ y $n = 0, 1, 2, \dots$, y donde h se corresponde con el espaciado en la discretización de espacio y del tiempo. La función de onda queda entonces

$$\Phi_{j,n+1} = e^{-isH} \Phi_{j,n} \quad (3.1)$$

donde $\Phi_{0,n} = \Phi_{N,n} = 0$. Además, si s es suficientemente pequeño, el operador de evolución e^{-isH} se puede aproximar como su desarrollo de Taylor, obteniendo

$$\Phi_{j,n+1} = (1 - isH_D + O(sH_D)^2) \Phi_{j,n} \quad (3.2)$$

Como $(1 - isH)$ no es unitario, se debe encontrar un operador evolución temporal similar al anterior que sea unitario. Esto se consigue aplicando la aproximación de Cayley

$$e^{-isH} = \frac{1 - isH_D/2}{1 + isH_D/2} \quad (3.3)$$

que llega a la expresión

$$\Phi_{j,n+1} = \frac{1 - isH_D/2}{1 + isH_D/2} \Phi_{j,n} \quad (3.4)$$

Para completar, podemos escribir la ecuación anterior como

$$\Phi_{j,n+1} = \left(\frac{2}{1 + isH_D/2} - 1 \right) \Phi_{j,n} = \chi_{j,n} - \Phi_{j,n} \quad (3.5)$$

siendo

$$\chi_{j,n} = \frac{2}{1 + isH_D/2} - 1 \Phi_{j,n} \quad (3.6)$$

cuya solución es

$$\chi_{j,n} + \left[-2 + \frac{2i}{\tilde{s}} - \tilde{V}_j \right] \chi_{j,n} + \chi_{j-1,n} = \Phi_{j,n} \quad (3.7)$$

donde $\tilde{s} = s/h^2$ y $\tilde{V}_j = h^2 V_j$. Además, esta se puede escribir como

$$A_j^- \chi_{j-1,n} + A_j^0 \chi_{j,n} + A_j^+ \chi_{j+1,n} = b_{j,n} \quad (3.8)$$

con

$$\begin{cases} A_j^- = 1 \\ A_j^0 = -2 + \frac{2i}{\tilde{s}} - \tilde{V}_j \\ A_j^+ = 1 \end{cases}$$

Sustituyendo en la ecuación (2.8)

$$\chi_{j,n} = \frac{A_j^-}{A_j^0 + \alpha_j A_j^+} \chi_{j-1,n} + \frac{b_{j,n} - A_j^+ + \beta_{j,n}}{A_j^0 + \alpha_j A_j^+} \quad (3.9)$$

definiendo así, las relaciones de recurrencia α y β

$$\begin{cases} \alpha_{j-1} = -A_j^- \gamma_j \\ \beta_{j,n} = \gamma_j (b_{j,n} - A_j^+ \beta_{j,n}) \end{cases}$$

donde $\gamma_j^{-1} A_j^0 + A_j^+ \alpha_j$, de tal forma que todas las α y β parten de $j = N1$ y van obteniendo α y β en orden decreciente con $j = N - 1, \dots, 2, 1, 0$.

En el estudio a realizar, se partirá de la siguiente función de onda

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

donde $\tilde{k}_0 = k_0 h = 2\pi n_{\text{ciclos}}/N$ donde $n_{\text{ciclos}} = 1, \dots, N/4$. Además, el potencial que se utilizará de obstáculo, será un potencial cuadrado del tipo

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

Juntandolo todo, nos quedará el siguiente algoritmo:

- (1) Generar la función de onda inicial.
- (2) Evolucionar n_D pasos.

- (3) Calcular P_D . Si $x < P_I$ e ir a (1).
 - (4) Generar un número aleatorio x . Si $x < P_D$ aumentarm $_T$ e ir a (1).
 - (5) Hacer $\Phi_j = 0$ para $j \in [4N/5, N]$, calcular $k = \sum_{j=0}^N |\Phi_j|^2$ y hacer $\Phi_j = \frac{1}{\sqrt{k}} \Phi_j$ para todo j .
 - (6) Calcular P_I .
 - (7) Generar un número aleatorio x .
 - (8) Hacer $\Phi_j = 0$ para $j \in [0, N/5]$, calcular $k = \sum_{j=0}^N |\Phi_j|^2$ y hacer $\Phi_j = \frac{1}{\sqrt{k}} \Phi_j$ para todo j .
 - (9) Ir a (2).
- Finalmente, el la figura 1 podemos ver el diagrama de flujo de este programa

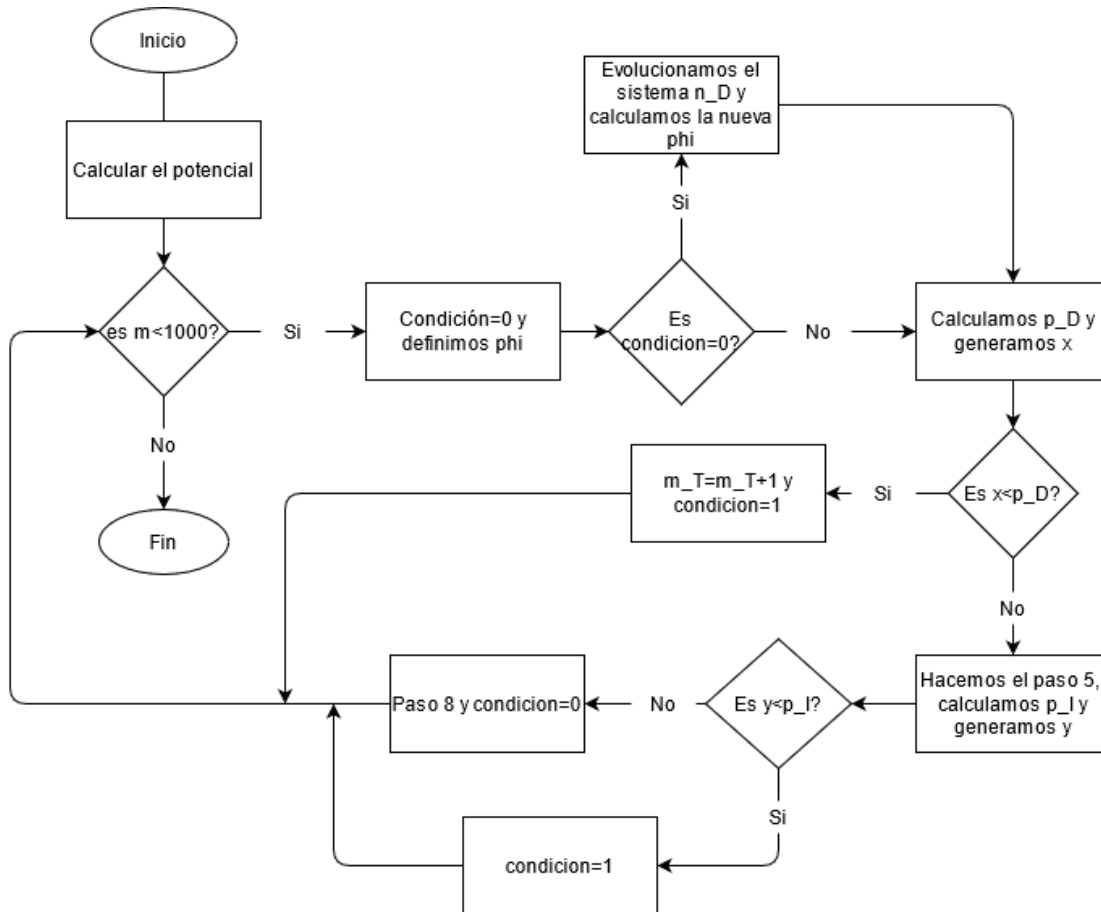
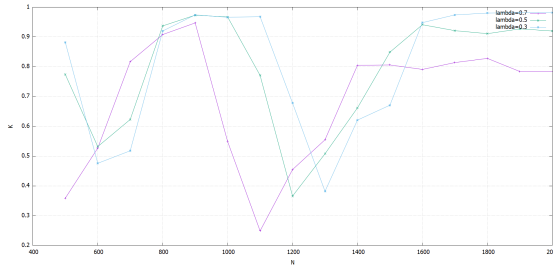


Figura 1: Diagrama de flujo del programa

4 Resultados

4.1 Estudio de la dependencia en N de K

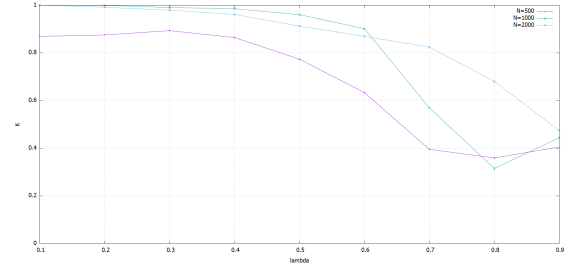
Lo primera es estudiar la dependencia de N sobre K , para ello vamos a representar el coeficiente para $\lambda = 0.7, 0.5, 0.3$, respectivamente. Además, usaremos $n_{ciclos} = N/10$ y $n_D = 1000$:



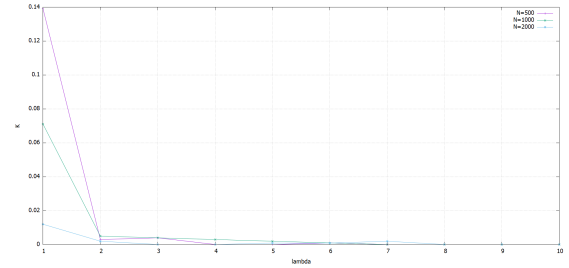
En la figura anterior se puede observar como para valores de N pequeños, el comportamiento de K es bastante aleatorio, oscilando en un rango de valores de casi el 80 %. Sin embargo, al tomar N lo suficientemente grande, comienza a tender a un valor constante.

4.2 Estudio de la dependencia $V(x)$ de K

En segundo lugar, vamos a estudiar como varía el coeficiente de transmisión, al variar el potencial V , para ello, variaremos los valores de la longitud de onda λ y observaremos los valores obtenidos para K . A continuación, se muestran los resultados obtenidos para distintos valores para distintos valores de N . Por comodidad, haremos esto primero para $\lambda \in [0, 1]$



y luego para $\lambda \in [1, 10]$

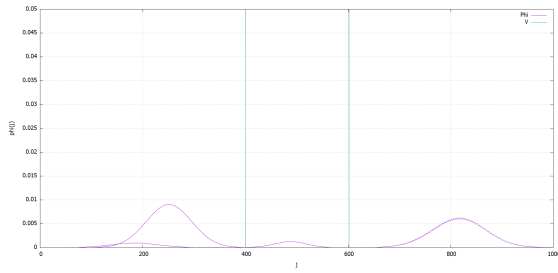


queda recalcar, que al igual que en el apartado anterior, estos resultados se han obtenido para $n_{ciclos} = N/10$ y $n_D = 1000$.

De esta manera, se aprecia como el coeficiente de transmisión disminuye cuando se aumenta el valor de λ y en consiguiente, el del potencial $V(x)$. Pero, a parte, se puede observar la manera en la que la curva oscila para $N = 500, 1000$, y como para $N = 2000$ esta es mucho más estable y predecible.

4.3 Estudio del número de pasos

En todo el procedimiento, hemos evolucionado el sistema $n_D = 1000$ pasos sin discutir acerca de ella en ningún caso. Sin embargo, este valor a sido cuidadosamente elegido. Si evolucionamos el sistema para $\lambda = 0.7$ y $N = 1000$, sin medir en el sistema obtenemos el siguiente esta tras la evolución de $n_D = 1000$ pasos:



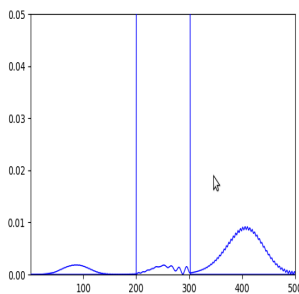
Como podemos observar, el estado resultante es uno en el cual tenemos una doble gaussiana a ambos lados del potencial. Es por esto mismo, que se ha querido estudiar esta distribución.

4.4 Medida y colapso de la función de onda

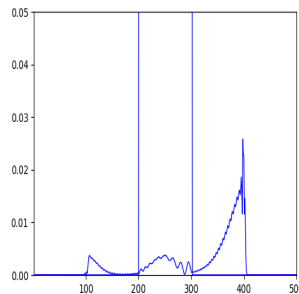
Sabemos que el colapso de la función de onda es un proceso físico relacionado con

el problema de la medida de la mecánica cuántica. En problema erradica en el momento que nosotros medidos si la partícula se encuentra a la derecha de la barrera potencial o no. Al medir, obligamos a la partícula a 'decidir' si esta se encuentra en la región medida o no. Esto es algo que se puede observar en el propio programa. Al medir en una región, debemos anular $\Phi(x)$ en esta en caso de no encontrar la partícula ahí.

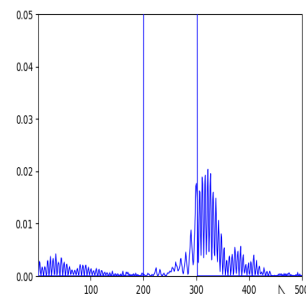
Esto es algo que condiciona en gran medida la situación, ya que una vez medida por primera vez, se debe reescribir $\Phi(x)$ y continuar.



(a) Antes del colapso



(b) En el colapso



(c) Después del colapso

Figura 2: Colapso de la función de onda

A modo de curiosidad se ha añadido un gif llamado "Colapso" en el repositorio de la asignatura ("<https://github.com/Nilsvanesostos/Compu/tree/master/schrodinger/voluntario>").

4.5 Principio de Incertidumbre de Heisenberg

Otra característica que se puede analizar en nuestro estudio es si se cumple el Principio de Incertidumbre de Heisenberg. En el caso de no hacer ningún tipo de medición, y como se ha visto varias veces a lo largo de la carrera, se cumple que

$$\Delta x \Delta p \geq \hbar/2 \quad (4.1)$$

Por otro lado, si queremos estudiar cuando se hacen mediciones, debemos estudiar los valores absolutos tanto de x como p ,

$$\langle x \rangle = \int \Phi(x) x \Phi^*(x) \quad (4.2)$$

$$\langle p \rangle = \int \Phi(p) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) \Phi^*(p) \quad (4.3)$$

tal que $\Delta A = \sqrt{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}$. Al realizar esto, hemos obtenido que aún tras realizar mediciones, se mantiene el principio. Lo cuál esta de acuerdo con lo estudiado teóricamente.

5 Conclusiones

Tras un estudio exhaustivo del coeficiente de transmisión, se puede observar co-

mo el este disminuye de una manera exponencial proporcional a la altura y anchura del pozo potencial. Sin embargo, en este estudio, hay que ser muy cauteloso con los parámetros asignados a la simulación, pues una mala elección de estos puede acarrear grandes consecuencias en los resultados, como se ha podido ver anteriormente.

Analogamente, se ha estudiado el fenómeno del colapso de la función de onda, comparándolo los resultados obtenidos midiendo o no en diferentes regiones del espacio. Al hacer esto, se han visto tanto resultados comunes en ambos experimentos como diferentes, haciendo de la medición otro parámetro a tener en cuenta a la hora de hacer un estudio de estas características.

Referencias

- [1] D. Bohm,
"Quantum Theory",
Dover; New York, 1989.
- [2] P. A. M. Dirac,
"The Principles of Quantum Mechanics",
Oxford Univ. Press; Oxford, 1958