

UNIVERSIDAD DE GRANADA

FÍSICA COMPUTACIONAL

DOBLE GRADO EN FÍSICA Y MATEMÁTICAS

---

# La ecuación de schrödinger. Estudio del coeficiente de transmisión.

---



Pilar Pérez Piedra

# Índice

<b>1. Fundamento teórico</b>	<b>2</b>
<b>2. Algoritmos</b>	<b>4</b>
<b>3. Resultados y discusión</b>	<b>5</b>
3.1. Dependencia del coeficiente de transmisión con $N$ , tamaño del retículo . . .	6
3.2. Dependencia del coeficiente de transmisión respecto al potencial $V(x)$ . . .	8
<b>4. Conclusiones</b>	<b>12</b>

# Resumen

El comportamiento de la función de onda asociada a una partícula confinada en una región finita que se topa con una barrera de potencial unidimensional fue estudiado en el programa obligatorio previamente presentado. A continuación, nos disponemos a estudiar el coeficiente de transmisión y su dependencia respecto a los parámetros implicados.

## 1. Fundamento teórico

Recuperamos aquellos aspectos más importantes de la base teórica que sustentaba el programa obligatorio:

Desde el punto de vista de la Mecánica Cuántica, podemos conocer el comportamiento de un sistema unidimensional de una partícula gracias a la denominada Ecuación de Schrödinger:

$$i\hbar \frac{\partial \Phi(x, t)}{\partial t} = \left( \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \Phi(x, t) = H\Phi(x, t) \quad (1)$$

En ella,  $\Phi(x, t)$  es la función de onda compleja asociada al estado físico del sistema,  $V(x)$  denota al potencial al que está sometida la partícula,  $\hbar$  es la constante de Planck reducida y  $H$  es el operador Hamiltoniano.

Por otro lado, vimos que la densidad de encontrar a la partícula en un volumen  $dV$  alrededor de un punto  $x$  en el instante  $t$  es  $dP = |\Phi(x, t)|^2 dV$ . Por tanto, la probabilidad de encontrar a la partícula entre los puntos  $x_1$  y  $x_2$  viene dada por:

$$P(x_1, x_2) = \int_{x_1}^{x_2} |\Phi(x, t)|^2 dx \quad (2)$$

La magnitud propia de nuestro estudio es el **coeficiente de transmisión**  $K$ . Este representa la probabilidad de encontrar a la partícula al otro lado del obstáculo.

En sistemas clásicos, si la energía de la partícula es mayor que la energía del potencial escalón, esta atravesará siempre la barrera y por tanto el coeficiente de transmisión valdrá siempre 1. Sin embargo, si la energía de la partícula  $E$  es menor que la asociada al escalón  $V_0$ , la mecánica clásica afirma que la onda rebota como si se tratase de un obstáculo impenetrable por lo que  $K = 0$ .

Desde el punto de vista cuántico, la situación se ve modificada. En particular, se observa que el coeficiente de transmisión toma valores en el intervalo  $(0,1)$ . En otras palabras, parte de la onda penetra la impedancia, fenómeno conocido como efecto túnel, cuando la energía de la partícula es menor que la asociada al potencial y no toda la onda tiene porqué ser transmitida cuando el potencial es pequeño respecto a la energía de la partícula.

Las ecuaciones que modelan los diferentes casos vienen dadas por las expresiones encontradas en [3] que transcribimos en términos de nuestras constantes como:

- $0 < V_0 < E$ .

La energía de la partícula es mayor que la asociada a la barrera de potencial lo que

supone  $\lambda < 1$ . Entonces, el coeficiente de transmisión viene dado por:

$$K = \left[ 1 + \frac{\lambda^2 \sin^2(k_0 \sqrt{1 - \lambda} N/5)}{4(1 - \lambda)} \right]^{-1} \quad (3)$$

- $E = V_0$ .

La energía de la partícula es igual a la energía de la barrera de potencial lo que supone  $\lambda = 1$ . En consecuencia, el coeficiente de transmisión viene dado por:

$$K = \left[ 1 + (N/5)^2 k_0/4 \right]^{-1} \quad (4)$$

- $0 < E < V_0$ .

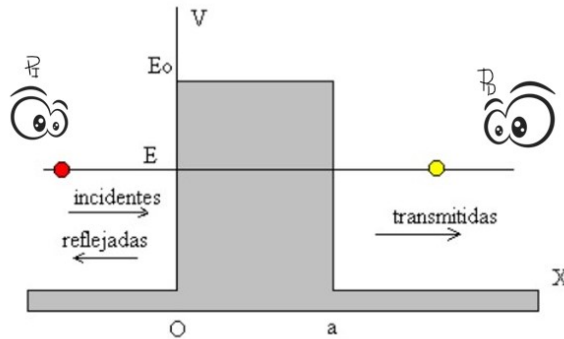
La energía de la partícula es menor que la asociada al escalón lo que supone  $\lambda > 1$ . Por tanto, el coeficiente de transmisión viene dado por:

$$K = \left[ 1 + \frac{\lambda^2 \sinh^2(k_0 \sqrt{\lambda - 1} N/5)}{4(\lambda - 1)} \right]^{-1} \quad (5)$$

Estas ecuaciones se utilizarán para obtener el resultado teórico asociado al sistema y poder comparar y calificar nuestras simulaciones.

Nuestro experimento constará de dos detectores, cada uno a un lado de la barrera de potencial, con un ancho de  $N/5$ . Así, la probabilidad a tiempo  $n$  de detectar a la partícula a la derecha vendrá dada por  $P_D(n) = \sum_{j=4N/5}^N |\Phi_{j,n}|^2$ , y la probabilidad de detectarla a la izquierda sería  $P_I(n) = \sum_{j=0}^{N/5} |\Phi_{j,n}|^2$ .

Por tanto, si se detecta la partícula a la derecha  $m_T$  veces de las  $m$  que se lleva a cabo el experimento, el coeficiente de transmisión se obtiene como  $K = \frac{m_T}{m}$ .



Por último, resaltar que para cada medida en la que la partícula no sea detectada, los correspondientes coeficientes de la función de onda colapsarán a cero, y por ende, se debe renormalizar dicha función.

## 2. Algoritmos

En propósito de afinar y contrastar los resultados objeto de estudio, se plantean dos algoritmos alternativos para el cálculo del coeficiente de transmisión. Estos se pueden consultar detalladamente en [1] mas apuntamos la idea principal de cada uno y las especificaciones de la simulación:

### 1ºAlgoritmo:

- Se genera la función de onda inicial.
- Evolucionamos el sistema  $n_D$  pasos.
- Comprobamos si hay detección de la partícula a la derecha del potencial: Calculamos  $P_D(n_D)$  y generamos un **numero aleatorio**  $x \in [0, 1]$  tal que si  $x < P_D$  ha habido detección y pasamos al siguiente experimento. La **semilla** utilizada para generar el número aleatorio es 13514.
- En caso de no ser detectada a la derecha, colapsamos la función de onda fruto de la medida a la derecha, renormalizamos y comprobamos el detector de la izquierda razonando de forma análoga; Calculamos  $P_I(n_D)$  y generamos un numero aleatorio  $y \in [0, 1]$  tal que si  $y < P_I$ , ha habido detección, y pasamos al siguiente experimento.
- Si no ha habido detección en ningún extremo, colapsamos de nuevo la función de onda fruto de la medida en el lado izquierdo, renormalizamos y volvemos a dejar evolucionar el sistema  $n_D$  pasos para repetir el proceso de medida en ambos extremos.
- Finalmente, calculamos el coeficiente de transmisión como el número de detecciones a la derecha entre el número de experimentos totales.

### 2ºAlgoritmo:

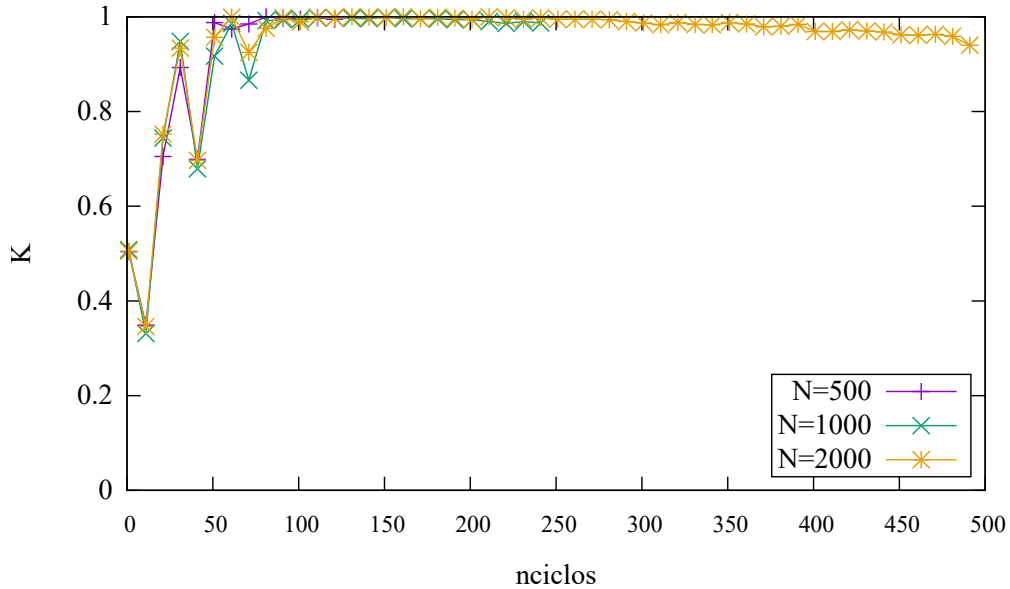
- Localizamos la partícula a la izquierda del escalón con movimiento hacia la derecha.
- Calculamos  $P_D(n_D)$  para múltiples valores de  $n_D$ . En mi caso,  $n_D = 95, \dots, 1000$  con saltos de 10 en 10.
- El coeficiente de transmisión se calculará como el máximo de la probabilidad de encontrar a la partícula a la derecha de entre todos los  $n_D$  calculados.

### 3. Resultados y discusión

La dinámica del sistema se ve afectada por el uso de los detectores. La causa radica en el colapso de la función de onda tras llevar a cabo la medida. Así, con el fin de reducir esta alteración, se deja evolucionar el sistema un intervalo de tiempo  $n_D$  antes de aplicarlos. Observamos que los resultados obtenidos dependerán fuertemente del valor asociado a dicho parámetro  $n_D$ . Por ello, se optimizará de forma que evite las reflexiones en las paredes del retículo a la vez que permita la evolución del sistema.

No obstante, previo al estudio de la dependencia del coeficiente de transmisión respecto al tamaño del retículo  $N$  y el potencial asociado  $V(x)$ , se han de fijar el resto de parámetros que intervienen en el estudio. En particular, se dejará evolucionar el sistema  $10^3$  veces y, con el fin de concretar el valor de  $n_{ciclos}$ , se lleva a cabo un análisis del coeficiente de transmisión a potencial cero y  $n_D$  fijo pero arbitrario, en este caso,  $n_D = 250$ , para los diferentes tamaños de la red.

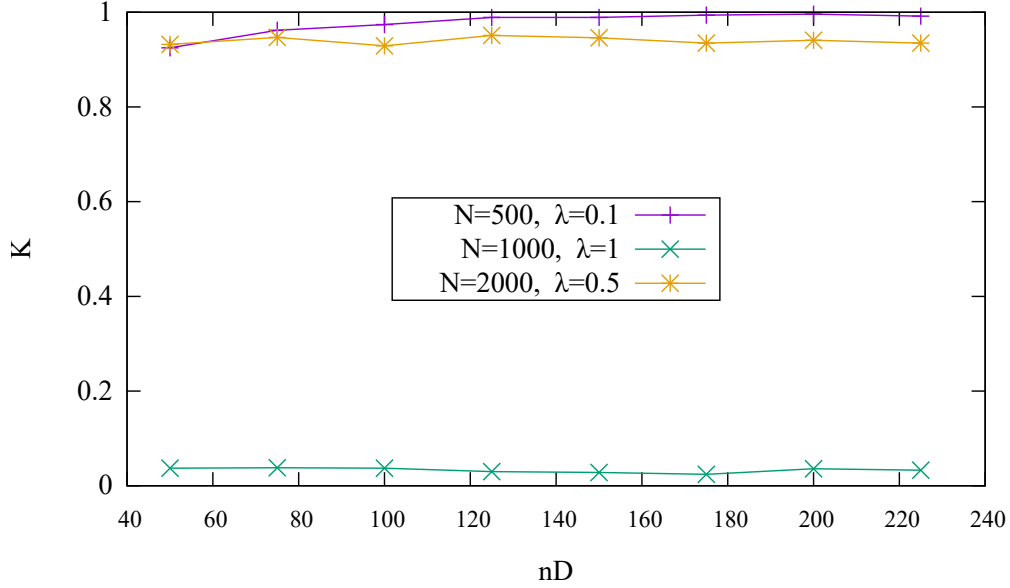
Figura 1: Dependencia del coeficiente de transmisión con el número de  $n_{ciclos} = 1, \dots, N/4$ .



En primer lugar, puntualizar la existencia de picos pronunciados en la gráfica debidos a la representación de  $n_{ciclos}$  de 10 en 10. Asimismo, destacamos el similar comportamiento de los datos representados para los diferentes tamaños  $N$ . En consecuencia, fijamos el valor  $n_{ciclos} = 111$  ya que maximiza el coeficiente de transmisión para todo  $N$ .

A continuación, procedemos a optimizar el valor de  $n_D$ . Para ello, se busca un valor de  $n_D$  tal que  $P_D(n_D)$  sea lo suficientemente grande. En otras palabras, llevamos a cabo la simulación de nuestro sistema variando  $N$  y  $\lambda$  de modo que el coeficiente de transmisión sea alto.

Figura 2: Dependencia del coeficiente de transmisión con  $n_D$  para distintos valores de los parámetros  $N$  y  $\lambda$ .



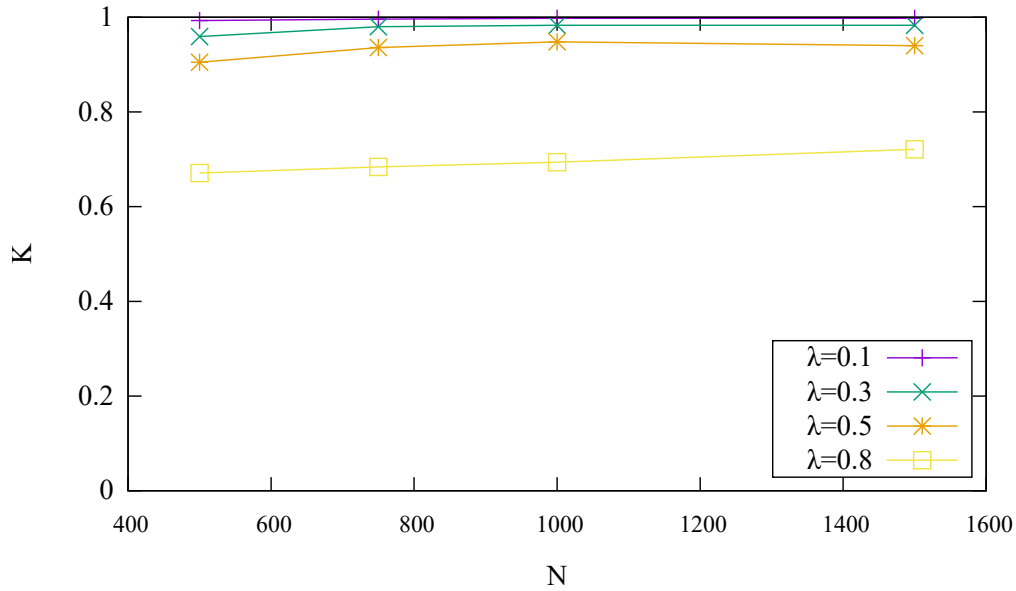
Los resultados de las simulaciones permiten estimar un valor  $n_D = 200$  ya que, como podemos observar en la Figura 2, los valores de  $K$  se vuelven suficientemente grandes en torno a dicho valor de  $n_D$ . Además, llevando a cabo la animación de la simulación observamos que este valor es a su vez lo suficientemente pequeño como para evitar reflexiones. Así, fijados dichos parámetros, procedemos al análisis siguiente.

### 3.1. Dependencia del coeficiente de transmisión con $N$ , tamaño del retículo

El tamaño del retículo  $N$  afecta a la anchura del potencial,  $N/5$ , de la cuál estudiamos su peso en el coeficiente de transmisión  $K$ . Para su estudio llevamos a cabo la simulación del sistema fijando distintos potenciales y analizando el comportamiento de  $K$  para distintos valores de  $N$ , en particular,  $N = 500, 750, 1000, 1500$ .

Para visualizar mejor los resultados, procedemos a distinguir dos casos: En el primer caso, consideramos una altura del pozo pequeña tal que  $\lambda < 1$ . Así, la energía de la partícula es mayor que la energía del potencial.

Figura 3: Dependencia del coeficiente de transmisión respecto al tamaño del retículo para distintos potenciales con  $\lambda < 1$ .

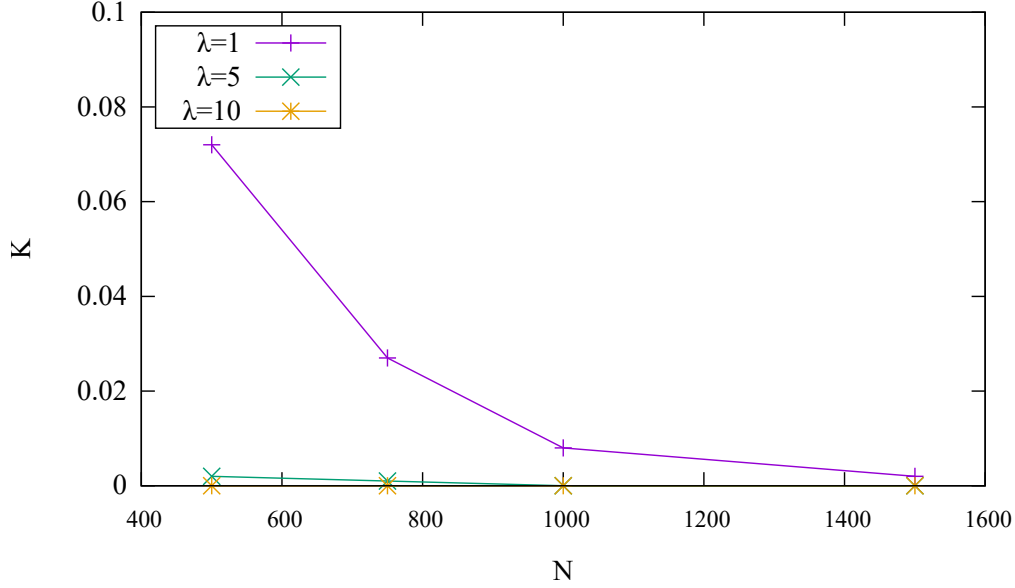


Clásicamente, cabría esperar que la partícula atravesara el escalón para todo  $N$ , y por ende,  $K = 1$ . No obstante, atendiendo a los resultados obtenidos en la simulación, se dilucida el comportamiento cuántico del sistema: el coeficiente de transmisión  $K$  se mantiene aproximadamente constante para todo  $N$  mas va tomando valores menores que la unidad al aumentar la altura del pozo.

En el segundo caso, tomamos  $\lambda \geq 1$ , es decir, la energía de la partícula es menor que la energía asociada al potencial barrera. Clásicamente, se esperaría que el coeficiente de transmisión fuera nulo para todo  $N$  mas veamos la aparición del conocido como **efecto túnel**.



Figura 4: Dependencia del coeficiente de transmisión respecto al tamaño del retículo para distintos potenciales con  $\lambda \geq 1$ .



Observamos cómo hemos debido reducir el rango de valores de  $K$  en la gráfica para poder visualizar con algo más de claridad los resultados.

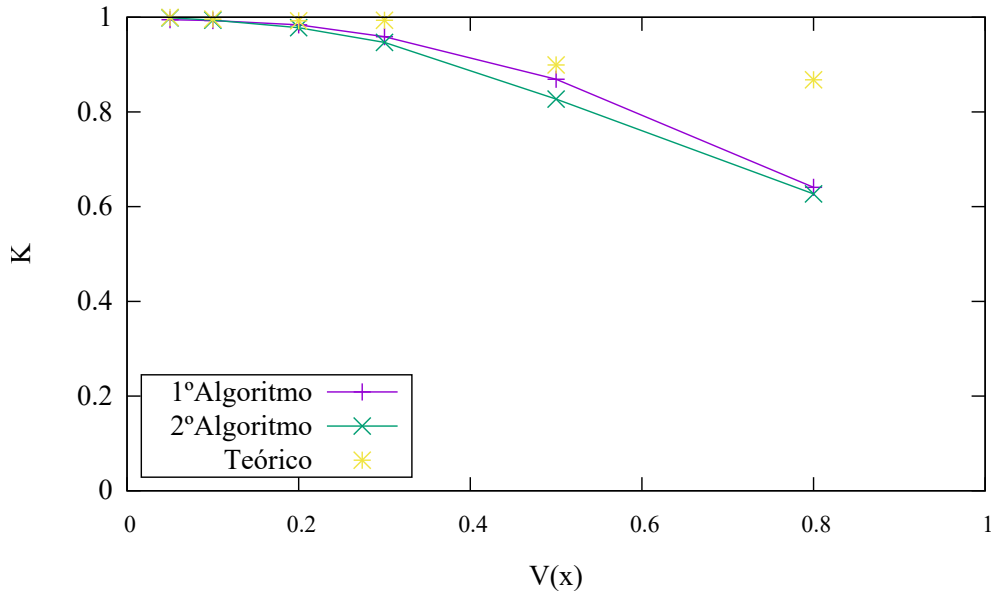
En primer lugar, cabe destacar que, al igualar la energía de la partícula a la energía del potencial, la simulación conduce a intuir que la probabilidad de atravesar el escalón se ve reducida al aumentar el ancho del potencial. En segundo lugar, resaltar el comportamiento cuántico del sistema ya que  $K \neq 0$  en muchos casos a pesar de tomar valores muy pequeños, efecto túnel.

### 3.2. Dependencia del coeficiente de transmisión respecto al potencial $V(x)$

A continuación, procedemos a investigar el papel que juega la altura del pozo de potencial en la probabilidad de encontrar la partícula a la derecha del escalón. Para ello, no sólo contaremos con el 1º algoritmo ya utilizado sino que sumamos las aportaciones del 2º algoritmo y de los datos teóricos fruto de las ecuaciones descritas en el Fundamento Teórico.

Primeramente, fijamos  $N = 500$  y graficamos los resultados para  $\lambda < 1$  ya que en este caso  $K$  toma valores lo suficientemente grandes como para poder llevar a cabo un análisis cualitativo de la simulación.

Figura 5: Dependencia del coeficiente de transmisión  $K$  con la altura  $\lambda$  del potencial  $V(x)$  para  $N = 500$ .



De la figura 5 podemos extraer el siguiente análisis:

- El coeficiente de transmisión  $K$  disminuye a medida que aumenta la altura del potencial, es decir, la probabilidad de encontrar a la partícula a la derecha de la barrera se ve reducida al aumentar la energía del escalón.
- Destacamos la similitud de los valores teóricos con los resultados de la simulación para potenciales pequeños. No obstante, el error absoluto comienza a ser considerable para valores superiores del potencial. En estos errores intervienen la discretización del espacio y el tiempo así como el efecto de los detectores.
- Tomando como referencia los datos fruto de las ecuaciones teóricas se distingue una mayor similitud con los resultados asociados al primer algoritmo. Sin embargo, cabe apuntar que la diferencia con los resultados ligados al segundo algoritmo tampoco es demasiado grande.

Por otro lado, se adjunta la tabla con los datos graficados en la Figura 5 sumando aquellos resultados asociados a  $\lambda \geq 1$  ya que estos últimos alcanzan valores muy pequeños.

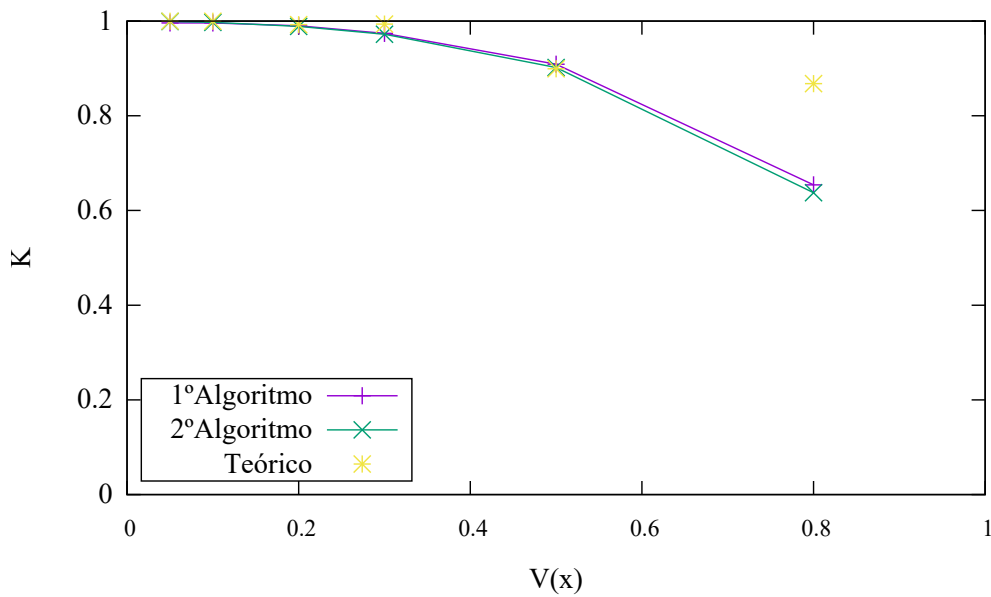
$N = 500$				
$\lambda$	$K_{1Alg}$	$K_{2Alg}$	$K_{teórico}$	$\varepsilon_{absoluto_{Alg1}}$
0,05	0,99500	0,998682	0,9996181749	0,004
0,1	0,99300	0,994028	0,9996144788	0,006
0,2	0,98400	0,977844	0,9923524711	0,008
0,3	0,95299	0,947029	0,9936027934	0,04
0,5	0,83499	0,827089	0,8992687401	0,06
0,8	0,64090	0,626998	0,8678325485	0,22
1	0,00200	0,000374	0,0002866835	0,0017
5	$1,3 \cdot 10^{-15}$	$1,67 \cdot 10^{-15}$	$1,24 \cdot 10^{-24}$	$1,3 \cdot 10^{-15}$
10	0,00000	0,000000	$1,37 \cdot 10^{-40}$	$1,37 \cdot 10^{-40}$

Observamos cómo nuestra simulación anula el coeficiente de transmisión para  $\lambda = 10$ , este resultado se debe al redondeo propio del programa ya que en el resultado teórico podemos observar el valor tan pequeño que alcanza  $K$  para este potencial. Además, se mantiene la relación decreciente de la probabilidad de encontrar la partícula a la derecha del escalón conforme aumentamos la energía de la barrera. Por último destacamos el conocido como efecto túnel ya que a pesar de que  $K$  tome valores muy pequeños para  $\lambda \geq 1$ , no siempre es nulo.

Asimismo, apuntar que se hace uso del error absoluto y se evita el uso del error relativo ya que contamos con cantidades muy pequeñas que producirán un alto valor de error relativo a pesar de que los resultados sean semejantes.

Acto seguido repetimos el análisis para  $N = 750$ .

Figura 6: Dependencia del coeficiente de transmisión  $K$  con la altura  $\lambda < 1$  del potencial  $V(x)$  para  $N = 750$ .



$N = 750$				
$\lambda$	$K_{1Alg}$	$K_{2Alg}$	$K_{teórico}$	$\varepsilon_{absoluto_{Alg1}}$
0,05	0,99600	0,999185	0,9996181749	0,004
0,1	0,99600	0,997251	0,9996144788	0,004
0,2	0,98999	0,988717	0,9923524711	0,0023
0,3	0,97400	0,972259	0,9936027934	0,019
0,5	0,90900	0,902110	0,8992687401	0,009
0,8	0,65400	0,637445	0,8678325485	0,21
1	0,00800	0,002580	0,0001911406	0,008
5	$1 \cdot 10^{-15}$	$1,02 \cdot 10^{-15}$	$1,19 \cdot 10^{-24}$	$1 \cdot 10^{-15}$
10	0,00000	0,00000	$1,8 \cdot 10^{-40}$	$1,8 \cdot 10^{-40}$

La Figura 6 corrobora las conclusiones extraídas para  $N = 500$  mas sumamos los siguientes apuntes:

- Para  $N = 750$  se aproximan en mayor medida los resultados obtenidos de ambos algoritmos lo que parece apuntar una mejoría del 2º algoritmo al incrementar el tamaño del retículo, así como una mayor similitud con los resultados teóricos.
- Para  $\lambda < 1$  se tienen los mismos valores de  $K$  teóricos independientemente del valor de  $N$  utilizado lo que corrobora el resultado obtenido en la sección previa: la probabilidad de encontrar a la partícula a la derecha del potencial se mantiene aproximadamente constante para todo  $N$ .
- Para  $\lambda \geq 1$  los valores teóricos del coeficiente de transmisión se van reduciendo a medida que aumenta  $N$  tal y como concluimos en el estudio de la dependencia de  $K$  con  $N$ .

Además, destacar que en el segundo algoritmo la probabilidad de detectar la partícula a la derecha del potencial se maximizó en la mayoría de los casos para  $n_D = 175$ , valor cercano al fijado para el primer algoritmo.

Finalmente, simulamos el sistema para  $N = 1000$  y  $N = 1500$ . De este modo, corroboramos el análisis anterior gracias a los siguientes resultados:

$N = 1000$				$N = 1500$			
$\lambda$	$K_{1Alg}$	$K_{teórico}$	$\varepsilon_{absoluto}$	$\lambda$	$K_{1Alg}$	$K_{teórico}$	$\varepsilon_{absoluto}$
0,1	0,99800	0,9996144788	0,0016	0,1	0,99800	0,9996144788	0,0016
0,3	0,98300	0,9936027934	0,011	0,3	0,98230	0,9936027934	0,011
0,5	0,94800	0,8992687401	0,05	0,5	0,93999	0,8992687401	0,04
0,8	0,63180	0,8678325485	0,23	0,8	0,74100	0,8678325485	0,12
1	0,02700	0,0001433623	0,03	1	0,07200	0,0000955794	0,07
5	$0,8 \cdot 10^{-16}$	$1,13 \cdot 10^{-24}$	$0,8 \cdot 10^{-16}$	5	0,00000	$0,83 \cdot 10^{-25}$	$0,83 \cdot 10^{-25}$
10	0,00000	$1,32 \cdot 10^{-40}$	$1,32 \cdot 10^{-40}$	10	0,00000	$1,7 \cdot 10^{-41}$	$1,7 \cdot 10^{-41}$

## 4. Conclusiones

A pesar de los valores considerables de error respecto a los datos teóricos para la escala de trabajo, se califica de exitosa la simulación pues se desligan las siguientes conclusiones:

- El valor de los parámetros escogidos, en especial, el intervalo temporal  $n_D$  afecta considerablemente a la dinámica del sistema. Además, el valor asociado a  $n_{ciclos}$  produce un comportamiento similar del coeficiente de transmisión para los diferentes tamaños  $N$ .
- Cuando el *potencial barrera es menor que la energía de la partícula*, el coeficiente de transmisión se mantiene aproximadamente constante para todo valor de  $N$  tal y como predicen los datos de referencia. Asimismo, resulta una relación de proporcionalidad inversa entre  $K$  y la altura del escalón, es decir, conforme aumenta  $\lambda$  el coeficiente de transmisión decrece.
- Cuando el *potencial barrera es mayor o igual que la energía de la partícula*, el coeficiente de transmisión decrece al aumentar la anchura del escalón. No obstante, este no es siempre nulo por lo que se puso de manifiesto el efecto túnel, en especial, apreciable para  $\lambda = 1$  y  $\lambda = 5$ . Además, permanece la relación de proporcionalidad inversa entre  $K$  y la altura de la barrera de potencial.
- Se declara al primer algoritmo ganador del duelo pues proporciona resultados con mayor analogía a los datos de referencia. En particular cabe destacar el pequeño error asociado a las alturas de potencial  $\lambda = 0,05, 0,1, 0,2, 0,3, 0,5$ .

## Referencias

- [1] <https://ergodic.ugr.es/cphys/index.php?id=lecschroedinger>
- [2] <http://www.sc.ehu.es/sbweb/fisica/cuantica/tunel/tunel.htm>
- [3] <http://www.fisicacuantica.es/barrera-de-potencial/>
- [4] <http://la-mecanica-cuantica.blogspot.com/2010/07/transmision-y-reflexion-de-particulas-i.html>