



**UNIVERSIDAD  
DE GRANADA**

UNIVERSIDAD DE GRANADA

FÍSICA COMPUTACIONAL

## **Ejercicios voluntarios:**

**Formación de galaxias a partir de sistemas solares y estudio  
cuántico del coeficiente de transmisión para una barrera  
cuadrada**

Alumno:

*Adrián D. Escañuela Copado*

`adec@correo.ugr.es`

Profesora:

*Juani Bermejo Vega*

Repositorios:

`https://github.com/adruas/galaxia`

`https://github.com/adruas/transmision-schrodinger`

8 de abril de 2021

# Índice

<b>1 Formación de galaxias a partir de sistemas solares</b>	<b>3</b>
1.1 Introducción y objetivo . . . . .	3
1.2 Resultados . . . . .	4
1.2.1 Metodología . . . . .	4
1.2.2 Resultados de la simulación . . . . .	4
1.3 Conclusiones . . . . .	8
<b>2 Estudio cuántico del coeficiente de transmisión para una barrera cuadrada</b>	<b>10</b>
2.1 Introducción y objetivo . . . . .	10
2.2 Resultados . . . . .	11
2.2.1 Metodología . . . . .	11
2.2.2 Resultados de la simulación . . . . .	11
2.3 Conclusiones . . . . .	13

# 1. Formación de galaxias a partir de sistemas solares

## 1.1. Introducción y objetivo

Para la simulación del sistema se ha creado un programa en C++ que, con unas condiciones iniciales aleatorias y con el uso del algoritmo de velocidades de Verlet, consigue simular la evolución de una galaxia desde su formación.

Dicha galaxia está constituida principalmente por un agujero negro supermasivo central y por sistemas solares que giran a su alrededor. Como es evidente, cuanto más se acerque el número de sistemas solares al real, mejor; por razones de tiempo de ejecución esto es prácticamente imposible.

La escala de longitudes, masas y tiempos ( $L$ ,  $M$ ,  $T$ ) que se ha utilizado en este programa no es la usual de segundos, metros y kilogramos; esto es así porque los números asociados a las magnitudes de una galaxia suelen ser muy grandes, así que se ha preferido usar  $L[\text{klyr}]$ ,  $M[M_{\text{sol}}]$ ,  $T[\text{Myr}]$ , es decir, las longitudes en kilo-años-luz, la masa en masas solares y el tiempo en mega-años.

El cambio de dichas unidades conlleva un cambio en la constante de gravitación universal, que pasa a ser:

$$G = 6,67430 \times 10^{-11} \frac{\text{m}^3}{\text{kg s}^2} = 6,35169 \times 10^{-10} \frac{\text{klyr}^3}{M_{\text{sol}} \text{Myr}^2} \quad (1)$$

El programa se ha dividido en clases, existiendo una clase para el agujero negro donde guardamos sus características, una clase para cada sistema solar, y una clase para la galaxia completa (contiene a sistemas solares y al agujero negro).

Los métodos de la clase del agujero negro son todos getters (devuelven un valor) y setters (modifican un valor). Los de la clase de sistemas son getters, setters, obtención del momento angular individual, cambio de posición a la frontera si ha sido absorbido y cambios de velocidad si ha habido un choque. Y por ultimo, los métodos de la clase de la galaxia son la inicialización de aceleraciones, el algoritmo de Verlet, la absorción de sistemas solares, los choques de los sistemas solares, los momentos de inercia y angular totales, las excentricidades y la energía total.

El algoritmo se basa en estos pasos [1]:

1. Dar una  $h$  inicial,  $t = 0$ , y las posiciones y velocidades de las partículas inicialmente.
2. Evaluar  $\mathbf{a}_i(t) = -G \sum_{j \neq i}^N \frac{\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|^3}$ ,  $\forall i = 1, \dots, N$ .
3. Evaluar  $\mathbf{r}_i(t+h) = \mathbf{r}_i(t) + h\mathbf{v}_i(t) + \frac{h^2}{2}\mathbf{a}_i(t)$  y  $\mathbf{w}_i = \mathbf{v}_i(t) + \frac{h}{2}\mathbf{a}_i(t)$ ,  $\forall i = 1, \dots, N$
4. Evaluar  $\mathbf{a}_i(t+h)$  como en el paso 2 usando las nuevas posiciones,  $\mathbf{r}_i(t+h)$ ,  $\forall i = 1, \dots, N$ .
5. Evaluar  $\mathbf{v}_i(t+h) = \mathbf{w}_i + \frac{h}{2}\mathbf{a}_i(t+h)$ .
6.  $t = t + h$ . Ir a 3.

Las posiciones de cada uno de los sistemas solares son aleatorias, dadas por el Mersenne twister MT19937 [7], dentro de unos valores radiales de 0 a 100 klyr (el tamaño típico de una galaxia).

Lo que estamos determinando en realidad es el semieje mayor, al cual se le hace una pequeña perturbación en la distancia, para así tener órbitas con cierta excentricidad (llegando a poderse ver excentricidades de cercanas a 1). Esta perturbación es motivada por lo conocido como «aproximación epicíclica» [9, Cap. 3.3].

A su vez, las velocidades las obtenemos con la «ecuación Vis-Viva» [6, Pág. 29–31]:

$$v = \sqrt{GM_{\text{BH}} \left( \frac{2}{r} - \frac{1}{a} \right)} \quad (2)$$

Donde el subíndice BH refiere a «black hole» o agujero negro.

El objetivo será llegar a un estado estacionario en el cual poder determinar cada una de las magnitudes de las que se ha hablado anteriormente, para poder hacer un estudio de las propiedades de dicha galaxia.

## 1.2. Resultados

### 1.2.1. Metodología

En la simulación se han usado  $N = 500$  sistemas solares.

Para el algoritmo de Verlet se ha utilizado un paso temporal de 0,1 Myr y un tiempo de evolución de  $6 \times 10^5$  Myr =  $6 \times 10^{11}$  yr (nuestra galaxia tiene unos  $\sim 10^{10}$  yr [5]). Dicho algoritmo permite la interacción de los sistemas con el agujero negro y con el resto de sistemas solares, y está optimizado para que solo opere si el sistema solar ajeno está a una distancia menor de 1000 años-luz. El motivo de esto es que la aceleración ejercida por el agujero negro en el caso extremo de un sistema a 100 klyr del centro es  $\sim 400$  veces superior a la que ocurre entre dos sistemas a 1 klyr.

A su vez, la perturbación en el eje semimayor viene dada por:

$$a = r + 0,07r, \quad r \in [0, 100] \text{ aleatorio} \quad (3)$$

Donde  $a$  es el semieje mayor. El valor 0,07 reproduce bastante bien el comportamiento típico de una galaxia, cuanto mayor sea, mayores serán las excentricidades (un valor muy grande no produce una galaxia en forma de disco).

Algunos observables para los cuales es más interesante el rastreo se escriben en un fichero 1000 veces (las posiciones, el momento angular, el momento de inercia, la energía, las absorciones del agujero negro y los choques entre sistemas solares). Mientras que guardamos solo 10 veces los observables con una evolución menos interesante (las velocidades y las distribuciones de excentricidad y masa).

A la hora del recuento de los momentos angular y de inercia, de la energía, de las colisiones y de las absorciones, simplemente se ha representado sus valores frente al número de pasos.

Para las posiciones, velocidades, excentricidades y masas se han generado gifs.

### 1.2.2. Resultados de la simulación

Comencemos por la visualización de las trayectorias de los sistemas solares, que se encuentran en el archivo `trayectorias.gif`. Vemos como las posiciones iniciales aparecen de manera aleatoria, y también vemos como - según evoluciona - van girando alrededor de la galaxia formando un disco giratorio, como podemos ver en la figura 2. Dichas trayectorias están mediadas por el algoritmo de velocidades de Verlet.

En el centro o «bulge» se concentran las trayectorias con una mayor excentricidad, algo parecido a lo que vemos en el sistema alrededor de SgrA\*, véase la figura 1. Esto no puede apreciarse en `trayectorias.gif`, porque - por razones de tamaño de archivo - se han tomado 1000 fotogramas y nuestros sistemas se ven demasiado rápido en la zona del bulge. Sin embargo, podemos verlo en el recorte del centro hecho para otra simulación con un tiempo de evolución menor en la que estos movimientos excéntricos pueden verse mejor, véase `bulge.gif`.

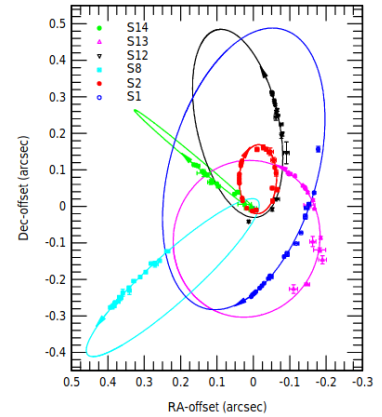


Figura 1: Trayectorias de algunas de las estrellas que rotan cercanamente respecto a el agujero negro supermasivo de la Vía Láctea. [3]

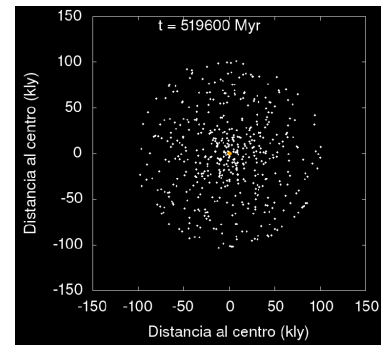


Figura 2: Muestra del archivo `trayectorias.gif`.

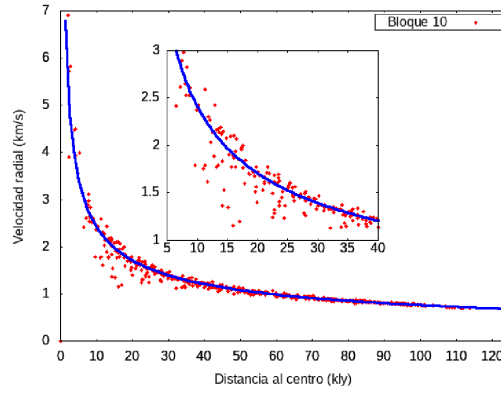


Figura 3: Último bloque de datos de la evolución de las velocidades frente al radio de los sistemas solares.

En `velocidades-radiales.gif` podemos ver como cambian las velocidades con el paso del tiempo en nuestro sistema. La evolución temporal no nos da una gran cantidad de información sobre el sistema, es por esto por lo que un fotograma muestra del gif nos es suficiente. Esta muestra aparece en la figura 3. Vemos como los sistemas solares se sitúan en velocidades alrededor de la curva kepleriana, que decae como  $r^{-1/2}$ . Esto es así porque nuestro modelo es clásico (no incluye materia oscura) y porque la mayor parte de la masa está concentrada en el centro. Es decir, es consecuencia de que el potencial gravitatorio se puede aproximar muy bien según la ecuación:

$$V(r) = -\frac{GM_{BH}}{r} \quad (4)$$

Con lo que, si suponemos trayectorias circulares (sabemos que no es así, pero es buena aproximación) llegamos a que las velocidades han de situarse cercanas a la curva siguiente [6]:

$$v_{orb}(r) \approx \sqrt{\frac{GM_{BH}}{r}} \quad (5)$$

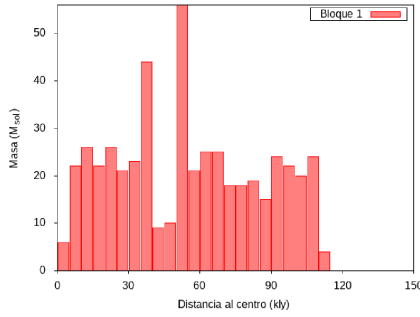
Y en efecto esto se cumple, como ya hemos podido apreciar en la figura 3.

En lo que respecta a los choques elásticos, las nuevas velocidades que aparecen tras un choque siguen la ecuación siguiente [10]:

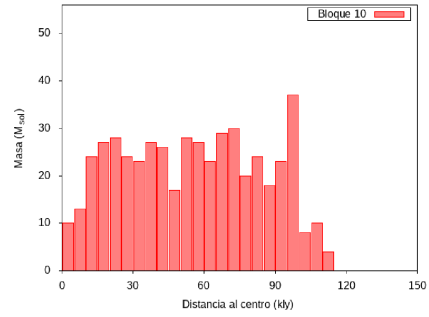
$$\begin{cases} \mathbf{v}'_1 = \mathbf{v}_1 - \frac{2m_2}{m_1+m_2} \frac{\langle \mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2, \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2 \rangle}{\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2\|^2} (\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \\ \mathbf{v}'_2 = \mathbf{v}_2 - \frac{2m_1}{m_1+m_2} \frac{\langle \mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1, \mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1 \rangle}{\|\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1\|^2} (\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1) \end{cases} \quad (6)$$

En nuestra simulación no se han detectado ni choques ni absorciones. Para las absorciones, esto es en gran parte porque el radio de Schwarzschild del agujero negro es pequeño; podría aumentarse y sí que veríamos como cambian las absorciones en el tiempo (tendiendo a desaparecer) pero esta sería una simulación poco realista. Y para los choques, igualmente ocurre para el radio de cada sistema solar, son demasiado pequeños como para poder acercarse lo suficiente para que ocurra un choque. Como tenemos pocos sistemas solares, la densidad es relativamente pequeña, y es por esto por lo que las «interacciones fuertes» son prácticamente despreciables. Son incluso despreciables en el entorno de nuestra galaxia - la Vía Láctea -, como se explica en [9, Pág. 125-126], donde ocurre una interacción fuerte cada  $t_s \sim 10^{15}$  yr, es decir, en un tiempo mucho mayor a la edad del universo. Es importante remarcar que esto es así para cuando ya estamos en equilibrio, ya que en una de las simulaciones con mayor densidad,  $N = 750$ , se dio un choque en los tiempos más tempranos de su formación. Esto lo podemos ver en el archivo adjunto llamado `choq.gif`.

Para la densidad de masa encontramos que se va homogeneizando según avanza el tiempo (esto se puede ver en el archivo `densidad-de-masa.gif`). En el archivo se ha representado la cantidad de masa que hay cada 5 klyr en histogramas. Según podemos ver, el sistema empieza teniendo dos picos



(a) Distribución de masas inicial.



(b) Distribución de masas final.

Figura 4: Comparación de la distribución de masas para diferentes momentos de la simulación.

de masa alrededor de los 50 kly, que se corresponden con la mitad del radio galáctico; pero esta masa se va repartiendo con el tiempo hasta que se llega a una distribución relativamente equitativa en el espacio. Esto pudiera ser uno de los marcadores de que se ha llegado a un estado estacionario. Podemos ver esto en la figura 4.

Mientras tanto, en la distribución de excentricidades - que podemos encontrar en el archivo `distribucion-de-excentricidad.gif` - vemos como el perfil de distribución es similar a uno logarítmico o lognormal, concentrándose los valores de mayor excentricidad en el centro y decayendo según se aleja uno de éste. La función de distribución acumulada es más representativa en este caso. Esto suele ser lo aparece en otras simulaciones, como apunta el artículo [11, Fig. 14]. Una muestra de este comportamiento puede verse en la figura 5.

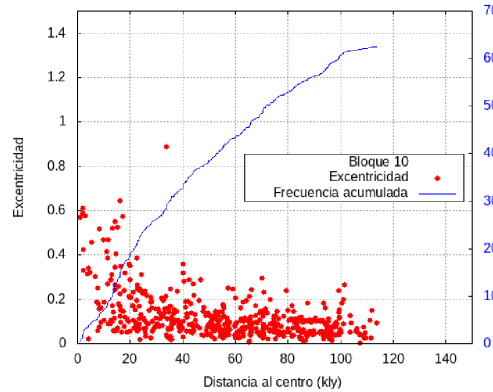


Figura 5: Último bloque de datos de la evolución de las excentricidades con el radio galáctico. La curva se corresponde a la función de distribución acumulada.

Ahora bien, probablemente la manera más sencilla de comprobar si se ha llegado a un estado estacionario sea mirar si las magnitudes que se han de conservar se conservan. En una galaxia - aunque depende del tipo - suelen conservarse la energía total, el momento angular y el momento de inercia (en especial para que tienen forma de disco). Es por esto por lo que en nuestra simulación también se han guardado estas magnitudes para después poderlas representar gráficamente.

La primera gráfica de las magnitudes conservadas, la de la energía total, podemos verla en la figura 6. Notamos como en dicha figura aparecen unos valores de energía variantes, en principio podría parecer que no se conserva la energía, pero hay que contemplar cuales son los valores de energía que estamos tratando en nuestro problema. En un sistema tan grande como el que tenemos se dan unas energías potencial y cinética inmensas (de signo contrario), que acaban compensándose en valores de energía total que varían muy poco. En términos astrofísicos se podría considerar que la energía total que se obtiene prácticamente constante, ya que

$$E \in [-0,02182, -0,02179] \text{ u.e.} \Rightarrow E = 0,02181 \pm 0,00002 \text{ u.e.} \quad (7)$$

Esto es un buen indicador de que la conservación de energía se da.

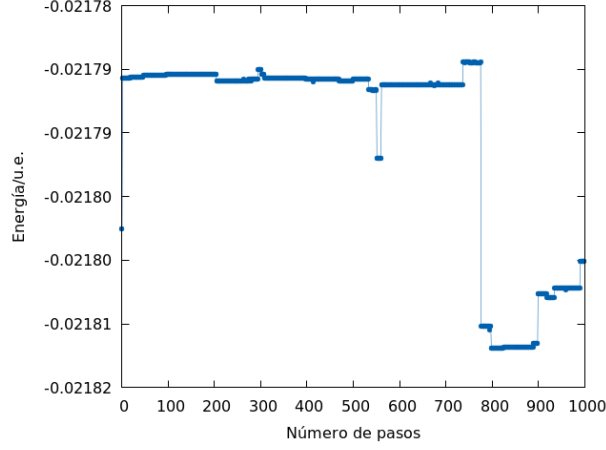


Figura 6: Evolución de la energía total (medida en unidades de energía u.e.) en el tiempo para la galaxia.

Una de las otras magnitudes que son susceptibles de conservarse es el momento angular total. La representación gráfica de esta magnitud queda recogida en la figura 7.

Podemos ver como el momento angular se mueve en cierto rango, es decir, no es una magnitud constante. Pese a ello, podemos aplicar la estadística, y llegamos a lo siguiente:

$$L = 11200 \pm 5775 \text{ u.m.a.}, \quad \varepsilon \approx 51 \% \quad (8)$$

Es decir, podemos concluir que en nuestra galaxia el momento angular no se conserva, aunque sí que podemos dar una estimación de entre que valores se encuentra, pese a que no va a ser una estimación fina (u.m.a.=unidades de momento angular).

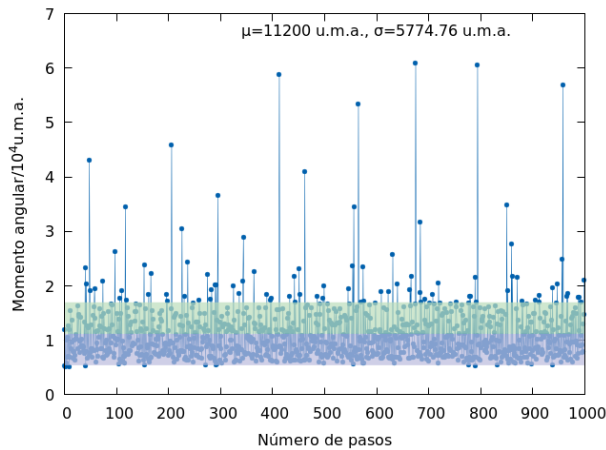


Figura 7: Valores de momento angular (medido en unidades de momento angular u.m.a.) en el tiempo para la galaxia. Dos colores separan los valores por encima y por debajo de la media, este sombreado cubre la desviación típica de la variable.

El momento de inercia es otra de estas magnitudes candidatas a conservarse. Para un disco con masa perfectamente distribuida, el momento de inercia es  $I_z = \frac{1}{2}MR^2$ . Sustituyendo nuestros valores de  $M \approx 500 M_{\text{sol}}$ , que son las masas en movimiento, y  $R \approx 100 \text{ klyr}$  llegamos a la estimación de

$$I_z^{\text{teo}} \approx 2,5 \times 10^6 \text{ u.m.i.} \quad (9)$$

donde u.m.i. son las unidades de momento de inercia.

En la realidad ocurre lo que vemos en la figura 8, donde hay una convergencia hacia valores ligeramente inferiores a los predichos por la ecuación anterior. Esto es así porque las asunciones de que el disco es homogéneo no son del todo ciertas, su validez será mayor cuanto mayor sea la densidad de estrellas. Aun así el orden de magnitud es el predicho, y tan solo se aleja del valor teórico en un paso de  $\sim 0,5$  en su orden de magnitud.

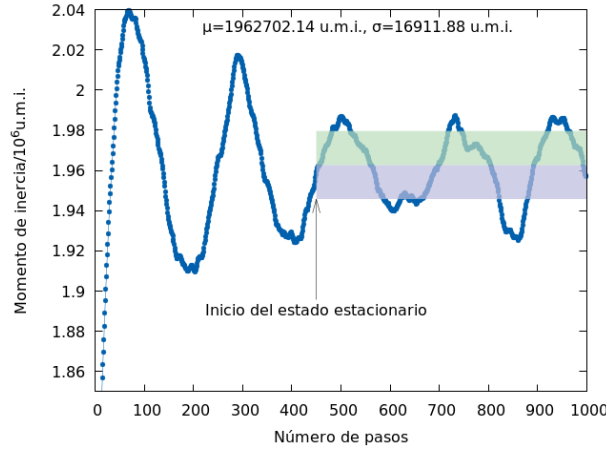


Figura 8: Momento de inercia (en u.m.i.) de la galaxia en cada paso temporal. Se indica en que lugar parece llegar a un estado estacionario. Dos colores separan los valores superiores e inferiores a la media, abarcados en la desviación típica.

Se ha determinado que el estado estacionario aparece a los  $\sim 450$  pasos, es decir,  $\sim 2,7 \times 10^5$  Myr, porque la convergencia oscilante no parece disminuir en amplitud a partir de ese punto, encontrándose 3 periodos de amplitud y frecuencia muy similares.

Además, el valor que se obtiene al aplicar la estadística desde el momento en el que ya parece converger es más que aceptable, con un muy pequeño error relativo, como podemos ver:

$$I_z^{exp} = 1962702,14 \pm 16911,88 \text{ u.m.i.}, \quad \varepsilon \approx 0,86\% \quad (10)$$

### 1.3. Conclusiones

Primeramente, en esta simulación en especial las limitaciones en tiempo de ejecución se hacen evidentes. Es por esto que se han buscado maneras de optimizar el programa. La densidad de sistemas solares es uno de esos parámetros en los que siempre se echa en falta una mayor abundancia, pero el algoritmo que se estaba testeando funciona como  $\mathcal{O}(n^2)$  y cada aumento en el número de sistemas complica mucho más las cosas. Pese a ello, cosas como el momento de inercia siguen curvas bastante continuas, en simulaciones con un menor número de sistemas se evidencia mucho más la discretización. Igual ocurre con el tiempo de simulación, cuanto más mejor, pero en nuestro caso nos es suficiente porque ya por la mitad de ésta comienza a evidenciarse la aparición del estado estacionario. Hubiese sido mejor ver más allá y encontrarnos más periodos en el momento de inercia (por ejemplo), pero siempre hay limitaciones que hay que asumir.

Las trayectorias que siguen los sistemas solares reproducen lo que nos dice la experiencia, aunque en esta galaxia no se dan brazos espirales, podría ser perfectamente una galaxia elíptica en forma de disco, como la de la figura 9.

Para las velocidades, nuestro programa nos da algo diferente a lo que vemos experimentalmente, y es que muchas veces - si el número de sistemas es muy grande - el potencial que se crea no es del agujero negro únicamente, hay una aportación de los sistemas (y de la materia oscura también) y esto hace que la curva de rotación sea diferente. Pese a ello, como estamos trabajando con un número



limitado de sistemas solares, vemos lo que esperamos - la curva kepleriana - con algunas pequeñas desviaciones que pueden estar causadas por interacciones gravitatorias entre sistemas que hagan que se frenen/aceleren en el trayecto, y por las distintas velocidades a las que se recorre una trayectoria elíptica, habiendo la máxima diferencia en el afelio y el perihelio.

Los choques y las absorciones por desgracia, y por las razones ya comentadas, no nos dan ninguna información.

Aunque, gracias a la densidad de masa podemos ver claramente que existe una evolución en nuestra galaxia. Hemos visto como la tendencia es hacia la homogeneidad, y esto ha podido ser un indicativo de la llegada a un estado estacionario, ya que hacia la segunda mitad de la simulación las grandes diferencias de  $\sim 50$  sistemas solares por 5 klyr frente a  $\sim 20 - 25$  desaparecen.

La distribución de excentricidades nos ha indicado que las trayectorias más excéntricas se encuentran en el bulge, y dicha distribución podría ser una manera de determinar del tamaño del bulge.

La energía ha sido un parámetro conservado a lo largo de toda la simulación, como era de esperar. Sin embargo, la gran sorpresa la ha dado el momento angular, que se ha movido entre unos valores de relativamente distintos, aunque esta no es necesariamente una magnitud conservada en galaxias elípticas enanas (dE) o cúmulos de estrellas (que podría encajar en lo que en realidad se está simulando).

Sin duda, el mejor indicador de la llegada al estado estacionario y un buen cuantificador de las propiedades de dicha galaxia ha sido el momento de inercia. Se ha visto que en este parámetro existen oscilaciones, pero que son periódicas y convergentes sobre un valor medio determinado.



Figura 9: Galaxia elíptica NGC 1316, imagen del European Southern Observatory.

## 2. Estudio cuántico del coeficiente de transmisión para una barrera cuadrada

### 2.1. Introducción y objetivo

Se ha diseñado un programa capaz de simular la detección de una partícula al otro lado de un potencial, es decir, se ha podido cuantificar el efecto túnel a través de la determinación del coeficiente de transmisión.

Para esto, se ha creado un programa en C++ que, dada una función de onda inicial gaussiana, realiza un algoritmo para cuantificar dicho coeficiente. El algoritmo de detección es el siguiente, [2]:

1. Generar la función de onda inicial.
2. Evolucionar  $n_D$  pasos.
3. Calcular la probabilidad de que esté a la derecha  $P_D = \sum_{j=\frac{4N}{5}}^N |\Phi_j, n|^2$ .
4. Generar un número aleatorio  $x$ . Si  $x < P_D$  aumentar  $m_T$  (contador de detección a la derecha) e ir a 1.
5. Hacer  $\Phi_j = 0$  para  $j \in [4N/5, N]$ , calcular  $k = \sum_{j=0}^N |\Phi_j, n|^2$  y renormalizar  $\Phi_j = \sqrt{\frac{1}{k}} \Phi_j$  para todo  $j$ .
6. Calcular  $P_I = \sum_{j=0}^{N/5} |\Phi_j, n|^2$ .
7. Generar un número aleatorio  $x$ . Si  $x < P_I$  e ir a 1.
8. Hacer  $\Phi_j = 0$  para  $j \in [0, N/5]$ , calcular  $k = \sum_{j=0}^N |\Phi_j, n|^2$  y renormalizar  $\Phi_j = \sqrt{\frac{1}{k}} \Phi_j$  para todo  $j$ .
9. Ir a 2.

Esto lo hacemos  $m$  veces y el coeficiente de transmisión (de la onda a la derecha) queda como:

$$K = \frac{m_T}{m} \quad (11)$$

Esto nos da un porcentaje de las veces que pasa al otro lado.

Para esto, primero se ha tenido que haber generado la función de onda gaussiana, que evoluciona según el siguiente algoritmo (n son los pasos temporales y j los espaciales):

1. Dar los parámetros iniciales:  $N$ ,  $n_{ciclos}$  y  $\lambda$ . Generar  $\tilde{k}_0 = \frac{2\pi n_{ciclos}}{N}$ ,  $\tilde{s} = \frac{1}{4\tilde{k}_0}$ ,  $\tilde{V}_j = \lambda \tilde{k}_0$  si  $j \in [2N/5, 3N/5]$  y 0 en otro caso,  $\Phi_{j,0} = e^{i\tilde{k}_0 j} e^{-8(4j-N)^2/N^2}$  (incluyendo las condiciones de contorno  $\Phi_{0,0} = \Phi_{N,0} = 0$ ) y  $\alpha_{j-1} = -A_j^- \gamma_j$  en orden decreciente  $j = N-2, \dots, 1, 0$  ( $\alpha_{N-1} = 0$ ).
2. Calcular  $\beta_{j-1,n} = \gamma_j (b_{j,n} A_j^+ \beta_{j,n})$  en orden decreciente  $j = N-2, \dots, 1, 0$  ( $\beta_{N-1,n} = 0$ ).
3. Calcular  $\chi_{j+1,n} = \alpha_j \chi_{j,n} + \beta_{j,n}$ , con  $j = 0, \dots, N-1$  ( $\chi_0 = \chi_N = 0$ ).
4. Calcular  $\Phi_{j,n+1} = \chi_{j,n} - \Phi_{j,n}$ .
5.  $n = n + 1$ , ir a al paso 2.

Donde  $A_j^- = 1$ ,  $A_j^0 = -2 + 2i/\tilde{s} - \tilde{V}_j$ ,  $A_j^+ = 1$ ,  $\gamma_{j-1} = A_j^0 + A_j^+ \alpha_j$  y  $b_{j,n} = 4i\Phi_{j,n}/\tilde{s}$ .

De esta manera podremos experimentar con nuestro ordenador como funcionan los colapsos de las funciones de onda, y también, como es que se da el efecto túnel.

## 2.2. Resultados

### 2.2.1. Metodología

El programa ha sido simulado con  $n_D = 1000$ , porque teniendo un gran número de funciones de onda generadas se afina el valor del coeficiente. También se ha repetido cada uno de los experimentos 100 veces para poder conseguir 100 coeficientes y de la desviación estándar obtener el error. En definitiva, cada vez que era ejecutado, se hacían  $100 \times 1000 = 10^6$  generaciones de funciones de onda.

Como es evidente los valores objeto de estudio como son  $N$ ,  $n_{ciclos}$  y  $\lambda$  variarán según el experimento y en la subsección «Resultados de la simulación» se indicará cuáles están siendo usados, afectando así a los valores de  $\tilde{k}_0$ ,  $\tilde{s}_0$  y  $\tilde{V}_j$ .

El propio programa calcula la media de los 100 coeficientes de transmisión obtenidos y la desviación estándar, guardando estos dos valores en un fichero llamado `estadistica.txt`. Los 100 coeficientes se guardan de manera «cruda» en otro fichero llamado `coeficientes.txt`, para poder ver cuales son los valores entre los cuales se ha ido moviendo  $K$  en cada experimento, como podemos ver en la figura 10.

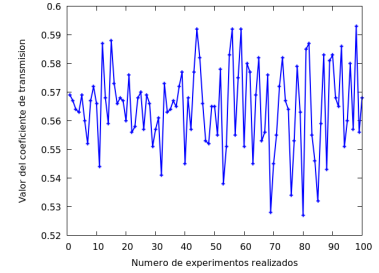


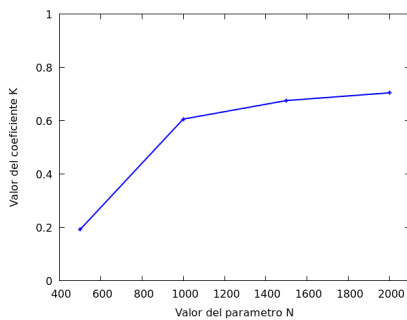
Figura 10: Valores entre los que oscila el coeficiente de transmisión de una de las simulaciones realizadas.

### 2.2.2. Resultados de la simulación

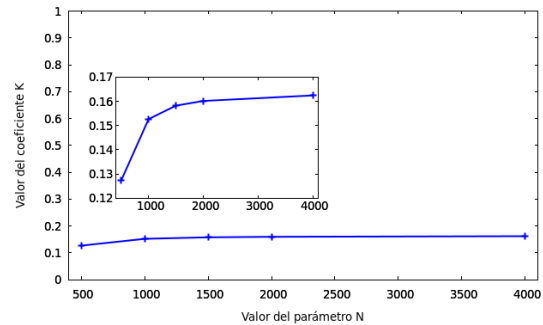
#### Dependencia en $N$ de $K$

En este apartado determinaremos la dependencia del coeficiente de transmisión al variar los valores de  $N$ , que es la discretización espacial. En un principio y dadas estas condiciones, esperamos que cuanto mayor sea el valor de  $N$  más nos acercaremos a la realidad.

Primero se realizó la prueba con parámetros que resultan en un valor de  $K$  grande - que son  $\lambda = 0,5$ ,  $n_{ciclos} = 70$  y  $n_D = 600$  - y con ello se obtiene lo que vemos en la figura 11a. Tras ver estos resultados, se decidió hacer una nueva simulación con unos parámetros que resultasen en un valor de  $K$  pequeño, para extraer nuevas conclusiones -  $\lambda = 0,9$ ,  $n_{ciclos} = 30$  y  $n_D = 300$  - y dicha gráfica podemos verla en la figura 11b. Para la elección de los valores de  $\lambda$  y  $n_{ciclos}$  se simuló en el programa obligatorio para comprobar que no hubiese problemas al chocar con los bordes del pozo infinito en el que se encuentra sumergida la función de onda.



(a)  $\lambda = 0,5$ ,  $n_{ciclos} = 70$  y  $n_D = 600$



(b)  $\lambda = 0,9$ ,  $n_{ciclos} = 30$  y  $n_D = 300$

Figura 11: Comparación de la convergencia para distintos parámetros iniciales.

Fijémonos que en ambos ocurre que para  $N = 500$  se parte de un valor de  $K$  pequeño, de lo cual podemos concluir que el uso de un valor de  $K < 1000$  no nos va a permitir obtener un coeficiente de transmisión correcto, siempre nos dará  $K(N \approx 500) \approx 0,2$ . Esto quiere decir que para valores de  $N$  lo

suficientemente pequeños no va a haber dependencia con  $K$ , y esta dependencia es algo que se busca, por lo tanto evitaremos tomar valores de  $N$  pequeños en el resto de simulaciones.

Es por esto por lo que la convergencia es mucho más exagerada en la figura 11a que acaba en un mayor  $K$ , porque ambos parten de más o menos el mismo valor para  $N = 500$ .

La función que se usa en la teoría para poder describir cual va a ser el coeficiente de transmisión obtenido dados unos determinados parámetros es, [8, Apéndice B.3]:

$$T = \begin{cases} \left\{ 1 + [V_0^2/4E(V_0 - E)] \sinh^2 \left( 2a\sqrt{2m(V_0 - E)\hbar^2} \right) \right\}^{-1}, & \text{si } E < V_0 \\ \left\{ 1 + [V_0^2/4E(E - V_0)] \sin^2 \left( 2a\sqrt{2m(E - V_0)\hbar^2} \right) \right\}^{-1}, & \text{si } E > V_0 \end{cases} \quad (12)$$

Donde  $a$  es la anchura de la barrera de potencial. Y sustituyendo  $m = 1/2$  y  $\hbar = 1$ , y suponiendo que  $E = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m}$ , se obtiene:

$$T = \begin{cases} \left\{ 1 + [\lambda^2/4(\lambda - 1)] \sinh^2 \left( 2a\tilde{k}_0\sqrt{\lambda - 1} \right) \right\}^{-1}, & \text{si } \lambda > 1 \\ \left\{ 1 + [\lambda^2/4(1 - \lambda)] \sin^2 \left( 2a\tilde{k}_0\sqrt{1 - \lambda} \right) \right\}^{-1}, & \text{si } \lambda < 1 \end{cases} \quad (13)$$

Para ( $\lambda = 0,5$ ,  $n_{ciclos} = 70$ ) en el límite de  $N = 2000$  usando la fórmula anterior obtenemos el valor de  $K_{teo} = 0,898$ , mientras que en la simulación se obtuvo  $K_{exp} = 0,705 \pm 0,015$ . De igual manera, para ( $\lambda = 0,9$ ,  $n_{ciclos} = 30$ ) en el límite de  $N = 4000$  con la fórmula se da  $K_{teo} = 0,349$ , mientras que en la simulación se obtuvo  $K_{exp} = 0,162 \pm 0,012$ .

Estas discrepancias entre teoría y experimento se discutirán más adelante.

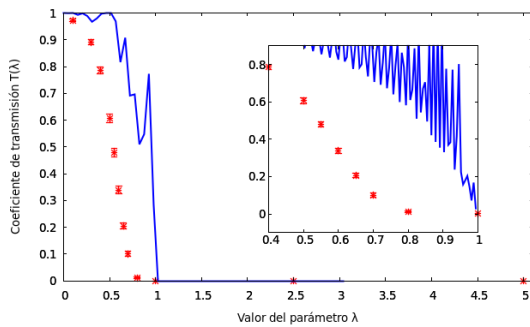
### Dependencia en $V(x)$ de $K$

En este apartado se determinará la dependencia del coeficiente de transmisión con el potencial. Es decir, como ya hemos visto que  $\lambda$  es el mediador de la altura del potencial, en definitiva veremos la dependencia de  $K$  con  $\lambda$ .

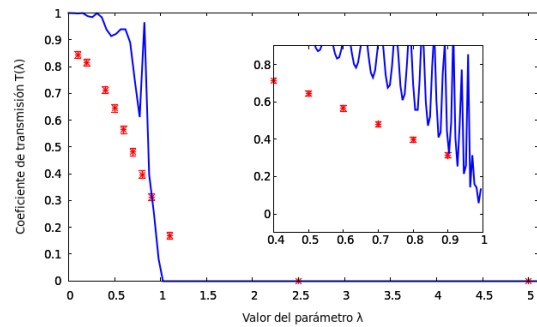
Para ello, primeramente se simula el sistema con  $N = 1000$ ,  $n_{ciclos} = 70$  y  $n_D = 600$ , y en cada una de las simulaciones utilizamos un valor de  $\lambda$ . En esta simulación se han usado

$\lambda = 0,1; 0,3; 0,4; 0,5; 0,55; 0,6; 0,65; 0,7; 0,8; 1; 2,5; 5$  obteniéndose lo que podemos ver en la figura 12a.

Como podemos comprobar, los valores de  $K$  no siguen exactamente lo que predice la teoría. La tendencia al decrecimiento según aumenta la barrera de potencial existe, pero no podemos predecir de manera exacta cual va a ser el valor de  $K$  con el uso de la ecuación (13), puesto que no cae encima de los datos experimentales.



(a)  $N = 1000$ ,  $n_{ciclos} = 70$  y  $n_D = 600$



(b)  $N = 2000$ ,  $n_{ciclos} = 10$  y  $n_D = 100$

Figura 12: Comparación de la coherencia teoría-experimento cuando se varía el parámetro  $\lambda$  en la simulación en dos casos distintos.

Es por esto por lo que se hizo una nueva simulación con un  $N$  mayor y con menos  $n_D$  y  $n_{ciclos}$ , por si había influencia de estos parámetros. La nueva simulación utiliza  $N = 2000$ ,  $n_{ciclos} = 10$  y  $n_D = 100$ . En esta última prueba se usan los valores de  $\lambda = 0,1; 0,2; 0,4; 0,5; 0,6; 0,7; 0,8; 0,9; 1,1; 2,5; 5$  consiguiéndose lo que vemos en la figura 12b.

Notamos que ni aún cambiando los parámetros a unos de valor más bajo se consigue predecir teóricamente lo que ocurre en nuestra simulación. Los posibles motivos de esto se discutirán a continuación, en el apartado «Conclusiones»

## 2.3. Conclusiones

Primeramente, hemos podido comprobar que con  $10^6$  experimentos por simulación - de donde surgen 100 coeficientes de transmisión distintos - se puede hacer una buena estadística para obtener el valor junto a un pequeño error, que suele ser de entre el 1 y el 10%.

También hemos visto que la dependencia de  $K$  con  $N$ ; es decir,  $K(N)$ ; tiene una tendencia a converger a un valor. Esta convergencia se da porque la discretización espacial es cada vez más fina, alcanzándose así un valor más correcto cuando se aumenta  $N$ . Podemos concluir que a partir de valores de  $N \geq 1000$  la simulación da un  $K$  correcto, mientras que si  $N < 1000$  el coeficiente  $K$  no es de fiar.

Ya en este apartado podíamos ver como la ecuación que nos es dada por la teoría no daba unos valores muy correctos comparando con lo que se obtenía simulando (incluso para valores de  $N = 4000$ ).

En el siguiente apartado, donde se determinaba la dependencia con la altura de la barrera de potencial; es decir,  $K(\lambda)$ ; se obtuvo un número de puntos lo suficientemente grande como para ver que, como era de esperar, el coeficiente de transmisión desciende con la altura de la barrera, pero la forma funcional de lo que se obtiene de manera experimental no es la misma que la que nos daba la fórmula teórica, ecuación (13).

Esto puede deberse a diversos motivos. Uno de ellos puede ser que el programa tenga algún fallo, lo cual no descarto pese a que haya repasado el código exhaustivamente en busca de algún error. Otro puede ser que, debido a que estamos trabajando con una función de onda gaussiana, y no con una onda  $\sim e^{ikx}$ , las fórmulas que se han obtenido de la teoría no sean del todo correctas. Estas fórmulas están derivadas para una onda monodimensional. Esta onda está totalmente indeterminada en el espacio pero ello implica una determinación absoluta en el momento, y aquí es donde pueden estar los problemas, puesto que la gaussiana tiene indeterminación tanto en espacio como en momento, y esto puede causar que el coeficiente de transmisión no sea el mismo. Pregunté en *Physics Stack Exchange* y efectivamente el parámetro es distinto [4], pero la solución que se me daba asumía que se estaba variando la energía de la partícula incidente (o el momento, porque viene a ser lo mismo), pero en realidad se buscaba ver la dependencia con la altura de la barrera de potencial, es por esto por lo que la integral dada como solución a la pregunta con  $dk$  no tiene sentido puesto que no estamos tratando de barrer todos los valores de momento, y mi duda no ha sido resuelta.

En definitiva, se ha conseguido crear un programa que puede cuantificar al efecto túnel pero los datos que surgen de este no coinciden con los teóricos.

## Referencias

- [1] Departamento de Electromagnetismo y Física de la Materia. Apuntes de la asignatura: Introducción a la dinámica molecular el sistema solar y las galaxias. [https://ergodic.ugr.es/cphys/index.php?id=lec\\_sistemasolar](https://ergodic.ugr.es/cphys/index.php?id=lec_sistemasolar).
- [2] Departamento de Electromagnetismo y Física de la Materia. Apuntes de la asignatura: Resolución de ecuaciones en derivadas parciales: la ecuación de schrödinger. [https://ergodic.ugr.es/cphys/index.php?id=lec\\_schroedinger](https://ergodic.ugr.es/cphys/index.php?id=lec_schroedinger).
- [3] F. Eisenhauer, R. Genzel, T. Alexander, R. Abuter, T. Paumard, T. Ott, A. Gilbert, S. Gillessen, M. Horrobin, S. Trippe, and et al. Sinfoni in the galactic center: Young stars and infrared flares in the central light-month. *The Astrophysical Journal*, 628(1):246–259, Jul 2005.
- [4] Physics Stack Exchange. Transmission coefficient of a gaussian wave packet through a potential barrier. <https://physics.stackexchange.com/questions/560859>.
- [5] Lawrence Maxwell Krauss and Brian Charles Chaboyer. Age estimates of globular clusters in the milky way: constraints on cosmology. *Science*, 299 5603:65–9, 2003.
- [6] J.J. Lissauer and I. de Pater. *Fundamental Planetary Science: Physics, Chemistry and Habitability*. Cambridge University Press, 2019.
- [7] Makoto Matsumoto and Takuji Nishimura. Mersenne twister: A 623-dimensionally equidistributed uniform pseudo-random number generator. *ACM Trans. Model. Comput. Simul.*, 8(1):3–30, January 1998.
- [8] J.J. Sakurai and J. Napolitano. *Modern Quantum Mechanics*. Cambridge University Press, 2017.
- [9] L.S. Sparke and J.S. Gallagher. *Galaxies in the Universe: An Introduction*. Galaxies in the Universe: An Introduction. Cambridge University Press, 2000.
- [10] Wikipedia, the free encyclopedia. Inelastic collision. [https://en.wikipedia.org/wiki/Inelastic\\_collision](https://en.wikipedia.org/wiki/Inelastic_collision).
- [11] Frank van den Bosch, Geraint Lewis, George Lake, and Joachim Stadel. Substructure in dark halos: Orbital eccentricities and dynamical friction. *The Astrophysical Journal*, 515, 11 1998.