

Informe MNII. Estudi de la transmissió d'un paquet gaussià.

Alba Aguilera Montserrat, 1529958

Sofia Almirante Castillo, 1527718

Sergi Picó Cabiró, 1531767

Laia Serradesanferm Córdoba, 1528084

Febrer 2021

Índex

1	Introducció Teòrica	2
1.1	Barrera/Esglaó de potencial	2
1.2	Equació normalitzada	2
1.3	Condicions inicials i de frontera	2
2	Discretització per Crank-Nicholson	3
3	Resultats i discussió	4
3.1	Barrera de Potencial: Variació de V_0	4
3.2	Esglaó de Potencial	5
3.2.1	Trajectòria esperada	5
3.2.2	Probabilitat de transmissió	6
3.2.3	Llei de Snell	6
4	Conclusions	7
5	Annex	8
5.1	Adimensionalització de les equacions	8
5.2	Condicions inicials	8
5.3	Índex de refracció relatiu amb l'esglaó de potencial	9
5.4	Referències	9

1 Introducció Teòrica

En aquest estudi tractarem d'analitzar la funció d'ona d'una partícula que segueix una distribució gaussiana, és a dir, un paquet d'ones, resultat de la superposició de vàries funcions d'ona estacionàries (pròpies del Hamiltonià). Aquesta es fa xocar contra una barrera i un esglaó de potencial amb un cert angle θ_i d'incidència.

Es vol analitzar si aquest cas és anàleg a l'efecte de la refracció i la reflexió clàssica d'una ona electromagnètica que incideix sobre la superfície de separació entre dos medis de diferent índex de refracció. Així doncs, a través de l'estudi quàntic i dels mètodes numèrics resoldrem l'equació de Schrödinger per aquest cas tot variant-ne les condicions inicials per així poder fer un anàlisi complet del problema.

1.1 Barrera/Esglaó de potencial

En aquesta pràctica s'intentarà simular una barrera de potencial i, a continuació, un esglaó de potencial en dues dimensions, que corresponen a l'expressió següent:

$$V(x, y)_{barrera} = \begin{cases} V_0 & \text{si } y_1 < y < y_2 \\ 0 & \text{en altre cas} \end{cases} \quad (1)$$

$$V(x, y)_{esglaó} = \begin{cases} V_0 & \text{si } 0 < y < \infty \\ 0 & \text{en altre cas} \end{cases} \quad (2)$$

1.2 Equació normalitzada

Partint de l'equació de Schrödinger $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, y, t) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} \Psi(x, y, t) + V(x, y) \Psi(x, y, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, y, t)$, l'equació normalitzada corresponent que caldrà resoldre és la següent (veure annex per tot el procediment):

$$\boxed{-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \hat{x}^2} \Psi(\hat{x}, \hat{y}, \hat{t}) - \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \hat{y}^2} \Psi(\hat{x}, \hat{y}, \hat{t}) + \hat{V}(\hat{x}, \hat{y}) \Psi(\hat{x}, \hat{y}, \hat{t}) = i \frac{\partial}{\partial \hat{t}} \Psi(\hat{x}, \hat{y}, \hat{t})} \quad (3)$$

A partir d'ara, malgrat no ho explicitem, a les variables normalitzades $(\hat{x}, \hat{y}, \hat{t}, \hat{V})$ les redefinirem com (x, y, t, V) respectivament, tal i com teníem al principi.

1.3 Condicions inicials i de frontera

Al ser un problema quàntic cal que totes les condicions de frontera siguin 0, tant per la part real com per la part imaginària degut a la continuïtat de la funció d'ona.

$$Re\{\Psi(0, y, t)\} = Re\{\Psi(100, y, t)\} = Re\{\Psi(x, 0, t)\} = Re\{\Psi(x, 100, t)\} = 0 \quad (4)$$

$$Im\{\Psi(0, y, t)\} = Im\{\Psi(100, y, t)\} = Im\{\Psi(x, 0, t)\} = Im\{\Psi(x, 100, t)\} = 0 \quad (5)$$

Com a condició inicial imposarem que la nostra partícula té una funció d'ona que segueix una distribució gaussiana:

$$\Psi(x, y, 0) = \frac{1}{\sqrt{\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(x-x_0)^2 + (y-y_0)^2}{2\sigma^2}} \quad (6)$$

On 2σ és l'amplada de la gaussiana i totes les posicions són normalitzades essent (x_0, y_0) la posició on es troba centrada la gaussiana, que escollirem que siguin punts d'una semicircumferència centrada al centre del pla. Aquesta disposició permet, a banda de facilitar la implementació del codi, que el paquet d'ones impacti al centre de la barrera o l'esglaó i que la distància que recorre abans de xocar sempre sigui la mateixa. S'adjunta un esquema a l'annex.

A tot això es pot afegir un *kick* a la gaussiana, és a dir, un cert moment inicial per tal que la partícula es comenci a moure. L'operador encarregat de la translació en el moment lineal és $U = e^{i\mathbf{p}_0 \cdot \mathbf{r}/\hbar}$, de manera que caldrà multiplicar la part real de la funció d'ona pel $\cos(\mathbf{p}_0 \cdot \mathbf{r}/\hbar)$ i la part imaginària per $\sin(\mathbf{p}_0 \cdot \mathbf{r}/\hbar)$. En particular, escollirem que \mathbf{p}_0 sigui un vector de dues components que tindrà l'expressió $\mathbf{p}_0 = p_0(\sin(\theta_i), \cos(\theta_i))$ i que ens determinarà la direcció en la que es mou la distribució gaussiana i conseqüentment, l'angle d'incidència amb la barrera/esglaó de potencial:

$$Re[\Psi(x, y, 0)] = \cos(ax + by) \frac{1}{\sqrt{\pi\sigma^2}} e^{\frac{(x-x_0)^2 + (y-y_0)^2}{2\sigma^2}} \quad (7)$$

$$Im[\Psi(x, y, 0)] = \sin(ax + by) \frac{1}{\sqrt{\pi\sigma^2}} e^{\frac{(x-x_0)^2 + (y-y_0)^2}{2\sigma^2}} \quad (8)$$

On $a = \frac{p_{0x}}{\hbar} = \frac{p_0 \cos(\frac{\pi}{2} - \theta_i)}{\hbar} = \frac{p_0 \sin(\theta_i)}{\hbar}$, $b = \frac{p_{0y}}{\hbar} = \frac{p_0 \sin(\frac{\pi}{2} - \theta_i)}{\hbar} = \frac{p_0 \cos(\theta_i)}{\hbar}$ i θ_i és l'angle d'incidència.

2 Discretització per Crank-Nicholson

S'utilitza el mètode de Crank-Nicholson per a resoldre l'equació de Schrödinger normalitzada amb la discretització corresponent. Partint de l'equació (3), arribem al següent sistema d'equacions per la funció d'ona:

$$\frac{\partial Re[\Psi]}{\partial t} = -\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) Im[\Psi] + V(x, y) \cdot Im[\Psi] \quad (9)$$

$$\frac{\partial Im[\Psi]}{\partial t} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) Re[\Psi] - V(x, y) \cdot Re[\Psi] \quad (10)$$

Discretitzant les variables x , y i t i tenint en compte que els subíndex i i j fan referència a les coordenades x i y respectivament i n al del temps. Podem calcular el valor de la part real i imaginària de la funció d'ona de la següent manera:

$$R_{i,j}^{n+1} = R_{i,j}^n + \frac{\gamma}{4} (-I_{i+1,j}^{n+1} + 2I_{i,j}^{n+1} - I_{i-1,j}^{n+1} - I_{i+1,j}^n + 2I_{i,j}^n - I_{i-1,j}^n) + \quad (11)$$

$$+ \frac{\gamma}{4} (-I_{i,j+1}^{n+1} + 2I_{i,j}^{n+1} - I_{i,j-1}^{n+1} - I_{i,j+1}^n + 2I_{i,j}^n - I_{i,j-1}^n) + \Delta t V_{i,j} (I_{i,j}^n + I_{i,j}^{n+1}) / 2 \quad (12)$$

$$I_{i,j}^{n+1} = I_{i,j}^n - \frac{\gamma}{4} (-R_{i+1,j}^{n+1} + 2R_{i,j}^{n+1} - R_{i-1,j}^{n+1} - R_{i+1,j}^n + 2R_{i,j}^n - R_{i-1,j}^n) - \quad (13)$$

$$- \frac{\gamma}{4} (-R_{i,j+1}^{n+1} + 2R_{i,j}^{n+1} - R_{i,j-1}^{n+1} - R_{i,j+1}^n + 2R_{i,j}^n - R_{i,j-1}^n) - \Delta t V_{i,j} (R_{i,j}^n + R_{i,j}^{n+1}) / 2 \quad (14)$$

Que és la discretització del mètode Crank Nicholson. R fa referència a la part real de la funció d'ona i I a la part imaginària. També s'ha definit $\gamma = \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2}$, que s'imposarà com a menor o igual a 0.01, valor pel qual el mètode per resoldre l'equació d'Schrödinger convergeix.

A partir d'aquí guardem els valors obtinguts per la part real i imaginària de la funció d'ona i en fem el mòdul quadrat $|\Psi(x, y)|^2 = Re[\Psi(x, y)]^2 + Im[\Psi(x, y)]^2$.

Per tal de comprovar que el codi té poc error es veu que, efectivament, la probabilitat total en tots els temps es manté pràcticament constant (variacions de l'ordre de 10^{-6} al voltant de 1. Altres mètodes per comprovar el poc error del codi són simular l'efecte túnel en el cas més senzill (una funció d'ona que es dirigeix perpendicularment a una barrera de potencial) i veure si una part de la funció d'ona traspasa la barrera o també, amb un potencial nul, imposar com a condició inicial una de les autofuncions del pou de potencial infinit i veure que, al ser una funció pròpia del hamiltonià, no evoluciona en el temps. S'observa que la simulació compleix aquests comportaments.

3 Resultats i discussió

3.1 Barrera de Potencial: Variació de V_0

Es varia l'altura de la barrera de potencial i s'analitza el seu comportament mantenint un angle d'incidència d'uns 45° i amb la barrera situada entre $y_1=50$ i $y_2=55$ (posicions normalitzades)¹.

Es deixa evolucionar el paquet gaussià fins a 1000 iteracions temporals per a que tingui prou temps per rebotar i moure's en el sentit oposat o transmetre's totalment, sense interaccionar amb les parets que simulen les condicions de contorn.

Veurem com a l'exterior de la barrera es manté el paquet gaussià, mentre que a l'interior tenim un decaïment exponencial que generarà una ona de menor amplitud que la incident. És important mencionar que la probabilitat total és sempre 1, tot i que es pugui interpretar diferent en els gràfics, ja que hi ha una fracció de probabilitat, corresponent a la funció d'ona dins la barrera, que no tenim en compte en els nostres coeficients de transmissió i reflexió. Per aquesta raó, s'ha representat gràficament aquesta probabilitat, per analitzar-ho tot plegat.

Es calculen els coeficients de transmissió (T) i reflexió (R) en funció del temps, i el coeficient corresponent a que el paquet es trobi dins la barrera (I). Es defineixen com:

$$R = \frac{p(y > 0.55)}{p_{incident}} \quad ; \quad T = \frac{p(y < 0.5)}{p_{incident}} \quad ; \quad I = \frac{p(0.5 < y < 0.55)}{p_{incident}} \quad (15)$$

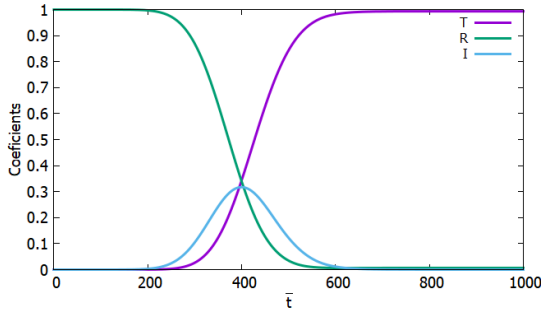


Figura 1: Cas amb potencial normalitzat $V_0 = 1100$.

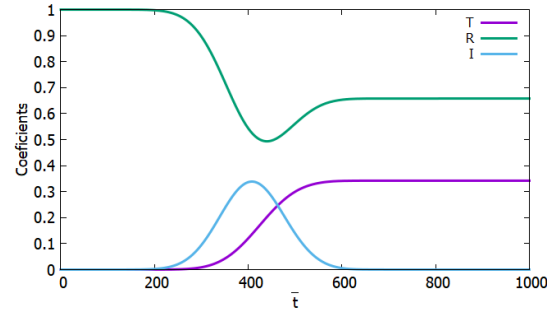


Figura 2: Cas amb potencial normalitzat $V_0 = 4000$.

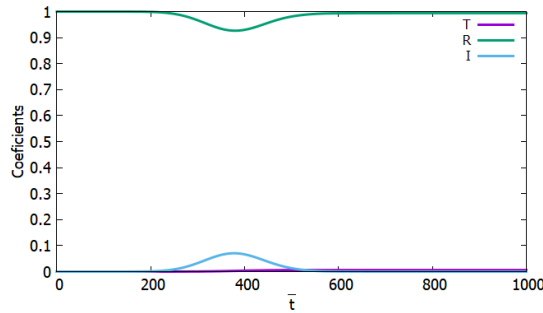


Figura 3: Cas amb potencial normalitzat $V_0 = 8000$.

Figura 4: Coeficients T , R i I en violeta, verd i blau respectivament, variant el valor de la barrera de potencial.

Tal i com s'esperava, quan la barrera de potencial és prou petita es produeix transmissió total. Arriba un moment on el potencial és suficientment gran com perquè es comenci a produir certa reflexió (majors

¹Per practicitat a l'hora de crear gràfics i animacions s'escull la normalització espacial de 0 a 100.

a $V_0 = 1100$) fins que aquest esdevé tant potent que a la funció d'ona li és impossible de travessar ($V_0 = 8000$), produint-se reflexió total.

En el cas d'un potencial normalitzat entremig (en aquest cas de 4000), s'observa com el coeficient de reflexió disminueix dràsticament en el moment que xoca amb la barrera i després torna a augmentar però en menor mesura (es reflecteix part de la gaussiana, però no tota). El comportament del coeficient de transmissió és contrari: fins que no xoca amb la barrera de potencial no comença a augmentar, quan es transmet part de la gaussiana inicial. A més, també es calcula el coeficient corresponent a que el mòdul al quadrat de la funció d'ona es trobi dins la barrera de potencial, que justament té un pic en el moment en què el paquet gaussià travessa la barrera (coincidint amb la baixada del coeficient de reflexió i l'augment del de transmissió).

3.2 Esglaó de Potencial

Estudiem a continuació la funció d'ona de la partícula quan es troba amb un esglaó de potencial. El seu comportament és comparable al cas d'un feix de llum, que viatja com una ona electromagnètica, travessant la superfície que separa un medi de major densitat a un medi de menor. S'escull un valor del *kick* de $p_0 = 150$, prou elevat com per assolir la transmissió màxima i observar millor la refracció.

Un cop la funció d'ona travessi el potencial, s'espera que variï tant la longitud d'ona De Broglie (disminuint), com la velocitat de la partícula (augmentant). Conseqüentment la funció d'ona es refractarà, amb un angle de transmissió que s'allunyarà del pla normal (la justificació matemàtica en l'annex).

3.2.1 Trajectòria esperada

En primer lloc s'analitza la trajectòria de la funció d'ona en cada regió de potencial a través del valor esperat de la posició $\langle \mathbf{r} \rangle = (\langle x \rangle, \langle y \rangle)$ en funció del temps. A continuació s'adjunten alguns exemples representatius.

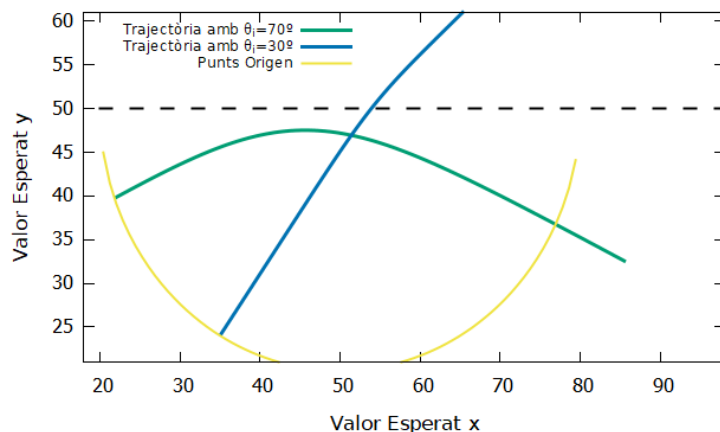


Figura 5: Trajectòria del Valor Esperat per un angle d'incidència de $\theta_i = 30^\circ$ i $\theta_i = 70^\circ$

Tal i com s'observa a la figura 5, abans de xocar amb l'esglaó (línia discontinua) la trajectòria que segueix el valor esperat de la funció d'ona és un moviment rectilini uniforme amb una inclinació corresponent justament a l'angle d'incidència escollit en les condicions inicials. Pel cas de que l'angle incident és $\theta_i = 30^\circ$, la trajectòria es desvia tot seguint la llei de Snell² i es produeix transmissió i reflexió (és un angle inferior al crític). Per altra banda, per un angle incident de $\theta_i = 70^\circ$ ja s'observa que la trajectòria

²Llei de Snell: $n_i \sin \theta_i = n_t \sin \theta_t$ on el subíndex i, t corresponen a l'angle d'incidència i transmissió respecte la normal al pla d'incidència respectivament.

es reflecteix totalment, i per tant retrocedeix amb el mateix angle amb què ha incidit, complint-se així la llei de reflexió clàssica $\theta_i = \theta_r$ (l'angle de reflexió i d'incidència coincideixen). Cal remarcar que la trajectòria es corba abans d'arribar a l'esglaó de potencial. L'explicació és que la posició del valor esperat coincideix amb el centre de la distribució gaussiana i una gran part de la mateixa ja ha estat afectada per l'esglaó abans que el centre de la distribució hagi xocat.

3.2.2 Probabilitat de transmissió

En aquest apartat s'estudia la part de la funció d'ona que es transmet en funció de l'angle d'incidència escollit.

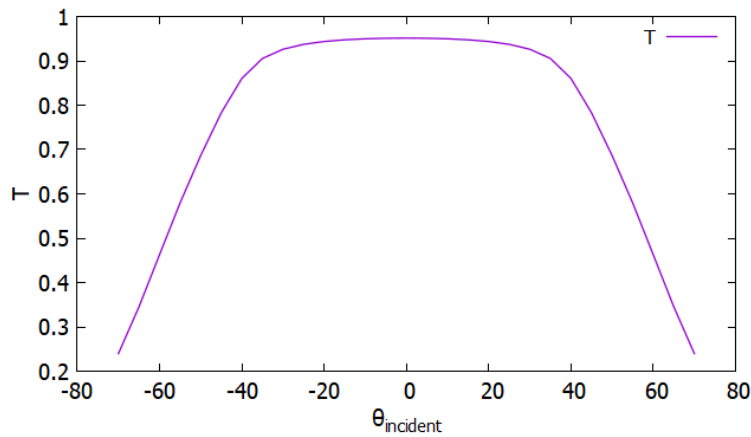


Figura 6: Probabilitat transmesa en funció de l'angle incident.

Com es pot veure al gràfic, la probabilitat de transmissió és màxima amb un angle d'incidència nul, tot i que no s'aprecia en el rang de l'angle transmès del gràfic. Per valors propers al zero comença a disminuir tènuement, mentre que a partir dels $|\theta_i| = 40^\circ$ la transmissió de la funció d'ona decau dràsticament fins arribar a un angle de $|\theta_c| = 70^\circ$ on el coeficient de transmissió és pràcticament nul, per la qual cosa s'infereix que entorn seu se situarà l'angle crític (angle a partir del qual es produeix reflexió total). Aquest comportament té sentit físic, ja que com més ens apropem a l'angle crític les components del moment perpendiculars al pla d'incidència van disminuint fins esdevenir insuficients per traspasar l'esglaó. Així, quan l'angle d'incidència és 0° , la transmissió serà màxima i, en el nostre cas, pràcticament total.

3.2.3 Llei de Snell

S'analitza la refracció de la partícula en funció de diferents angles d'incidència.

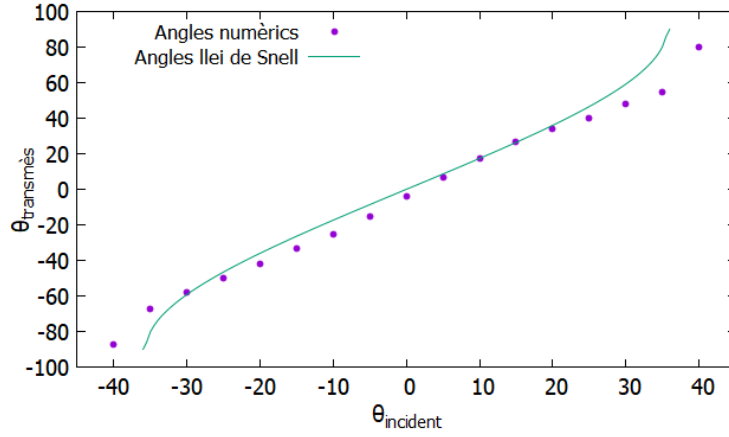


Figura 7: Variació de l'angle transmès en funció de l'angle incident. En punts liles es mostren els angles obtinguts numèricament i en línia verda la predicció teòrica a partir de la llei de Snell.

Emprant la relació (27) de l'annex, es considera una energia normalitzada de $\hat{E} = 6050$, escollida convenientment de manera que l'índex de refracció relatiu teòric³ obtingut sigui proper a la mitjana dels índex de refracció obtinguts per cada angle numèric, essent conseqüentment $n \approx 0.58$. Així, es passa d'un medi amb un índex de refracció major a un de menor.

Es verifica la relació entre les magnituds: a un angle d'incidència major, obtenim més desviació. Els resultats concorden amb la llei de Snell, que són els valors corresponents a la línia contínua de la figura 7. Cal dir que no s'inclouen angles superiors als 40° (inferiors a -40°) degut a les proximitats de la funció d'ona amb la frontera de l'esglaó durant la transmissió, la qual cosa fa que s'interfereixi en el mètode numèric emprat per calcular l'angle de transmissió i s'obtinguin resultats esbiaixats.

Per altra banda, prop dels 40° (i, anàlogament, als -40°) l'angle de transmissió és gairebé de 90° , la qual cosa difereix força amb el comportament detectat a la figura 6, on a partir d'aquest angle el coeficient de transmissió començava a disminuir notablement però no era fins prop dels 70° que s'arribava a la reflexió total.

Es pot concloure que la refracció quàntica d'un paquet gaussià s'adapta força a la llei de Snell per angles d'incidència petits. D'altra banda, per angles grans, difereix amb la clàssica, doncs es dona transmissió tot i sobrepassar l'angle crític incident.

4 Conclusions

Es conclou que donat un *kick*, el valor de la barrera de potencial condiciona que es produeixi o no l'efecte túnel: com major sigui el potencial menys quantitat del mòdul quadrat de la funció d'ona es transmetrà. Així mateix, donat un valor de potencial fix, l'angle d'incidència condiciona la quantitat de probabilitat de la funció d'ona que es transmet en travessar un esglaó de potencial. Es comprova que existeix un angle crític pel qual la reflexió és total entorn els $|\theta_i| \approx 70^\circ$ i al seu torn, que aquest difereix amb el valor teòric $|\theta_i| \approx 36^\circ$.

Finalment, es comprova que un paquet gaussià en impactar contra un esglaó de potencial amb un angle d'incidència d'entre -40° i 40° es propaga seguint la Llei de Snell adaptada a la quàntica, totalment anàloga a la llei de l'òptica clàssica. Aquest resultat implica, per tant, que qualsevol regió de l'espai amb un potencial determinat i en el qual hi incideix una funció d'ona amb una certa energia tindrà associat un índex de refracció. Aleshores el comportament esdevé comparable amb la clàssica si, per exemple, es transmetés un feix de llum per medis amb els mateixos índex de refracció.

³Cada vegada que es parli d'índex de refracció s'estarà parlant en realitat d'índex de refracció relatiu entre els dos medis, és a dir $n = \frac{n_2}{n_1}$ on n_1 és l'índex de refracció del medi on la funció d'ona incideix i n_2 del medi on es refracta.

5 Annex

5.1 Adimensionalització de les equacions

Partim de l'equació de Schrödinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, y, t) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} \Psi(x, y, t) + V(x, y) \Psi(x, y, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, y, t) \quad (16)$$

La nostra funció de potencial té unitats d'energia ($J=kg/m^2s^2$), de manera que podem definir una energia pròpia $E_0 = \frac{\hbar}{t_0}$, on t_0 serà el temps propi que ens servirà per adimensionalitzar-lo.

A continuació definim les variables adimensionals:

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{m}{\hbar t_0}} x \quad (17)$$

$$\hat{y} = \sqrt{\frac{m}{\hbar t_0}} y \quad (18)$$

$$\hat{t} = \frac{t}{t_0} \quad (19)$$

$$\hat{V}(\hat{x}, \hat{y}) = \frac{V(x, y)}{E_0} \quad (20)$$

Dividint-ho tot per E_0 i fent els canvis de variables anteriors finalment obtenim:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{t_0}{\hbar} \frac{m}{\hbar t_0} \frac{\partial^2}{\partial \hat{x}^2} \Psi(x, y, t) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{t_0}{\hbar} \frac{m}{\hbar t_0} \frac{\partial^2}{\partial \hat{y}^2} \Psi(x, y, t) + \frac{V(x, y)}{E_0} \Psi(x, y, t) = i\hbar \frac{t_0}{\hbar} \frac{1}{t_0} \frac{\partial}{\partial \hat{t}} \Psi(x, y, t) \quad (21)$$

Simplificant arribem a l'equació normalitzada desitjada:

$$\boxed{\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \hat{x}^2} \Psi(\hat{x}, \hat{y}, \hat{t}) - \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \hat{y}^2} \Psi(\hat{x}, \hat{y}, \hat{t}) + \hat{V}(\hat{x}, \hat{y}) \Psi(\hat{x}, \hat{y}, \hat{t}) = i \frac{\partial}{\partial \hat{t}} \Psi(\hat{x}, \hat{y}, \hat{t})} \quad (22)$$

5.2 Condicions inicials

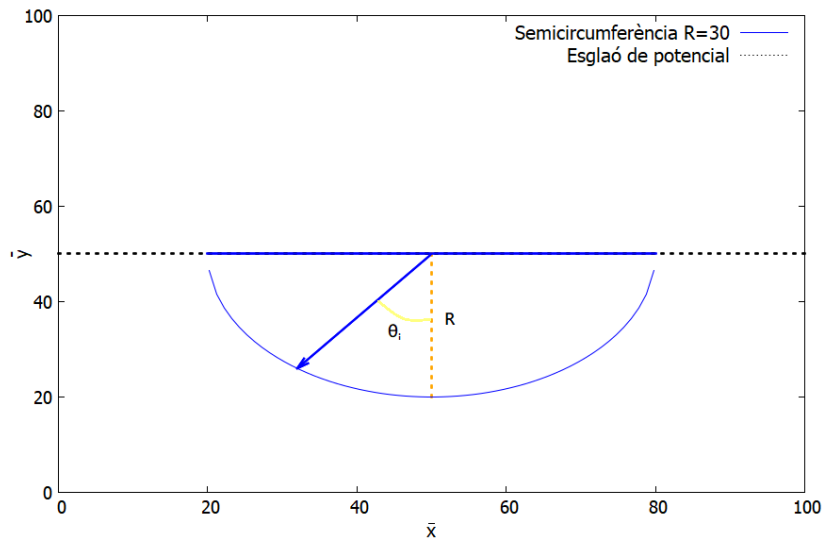


Figura 8: Esquema gràfic de les posicions que prendrà la gaussiana inicial segons l'angle d'incidència θ_i escollit, corresponents a la línia blava de la semicircumferència de radi $R = 30$. La línia discontinueta negra és la separació entre els dos medis, és a dir, a partir d'aquesta, tenim un potencial esglaó determinat.

5.3 Índex de refracció relatiu amb l'esglaó de potencial

Partim de l'expressió de l'energia de la nostra partícula:

$$E = \frac{1}{2}mv_1^2 + V_1 \quad (23)$$

On els subíndex 1 indicarà que ens trobem a la regió on $V = 0$ i 2 per la regió on $V = V_0$.

Així doncs, podem trobar una expressió per la velocitat de la partícula en cada regió:

$$v_1 = \sqrt{\frac{(E - V_1)}{m}} \quad ; \quad v_2 = \sqrt{\frac{(E - V_2)}{m}} \quad (24)$$

Pel que, el moment lineal ens queda:

$$p_1 = m\sqrt{\frac{(E - V_1)}{m}} \quad ; \quad p_2 = m\sqrt{\frac{(E - V_2)}{m}} \quad (25)$$

I aplicant la fórmula de de Broglie:

$$\lambda_1 = \frac{h}{p_1} = \frac{h}{m\sqrt{\frac{(E - V_1)}{m}}} \quad ; \quad \lambda_2 = \frac{h}{p_2} = \frac{h}{m\sqrt{\frac{(E - V_2)}{m}}} \quad (26)$$

I sabent que l'índex de refracció relatiu entre dos medis (imposant que $n_1 = 1$) ve donat per l'expressió $n = \frac{\lambda_1}{\lambda_2}$, ens queda:

$$n = \frac{\lambda_1}{\lambda_2} = \sqrt{\frac{E - V_2}{E - V_1}} \quad (27)$$

5.4 Referències

-Llei de Snell quàntica: <http://la-mecanica-cuantica.blogspot.com/2010/07/transmission-y-reflexion-de-particulas-i.html>