Voluntario 2: Coeficiente de transmisión

Carlos García Palomo

27 de junio de 2023

1. Introducción

En mecánica cuántica, el estudio de la transmisión de partículas a través de barreras de potencial ha sido objeto de un amplio interés. Estas barreras pueden manifestarse en diferentes formas, una de las cuales es un pozo de potencial. Un pozo de potencial es un sistema en el cual una partícula se encuentra confinada en un espacio limitado por una región de potencial más alto.

En este informe, se investigará el coeficiente de transmisión de una partícula que colisiona con un pozo de potencial de altura λV_o. Aquí, λ representa un factor de escala que permite variar la altura del pozo en relación a una energía de referencia V_o. La determinación del coeficiente de transmisión es de vital importancia para comprender la probabilidad de que una partícula incidente atraviese la barrera de potencial y continúe su trayectoria más allá de ella.
Para abordar este problema, proponemos el siguiente método. Comenzamos con una partícula inicialmente ubicada a la izquierda de una barrera de potencial y dirigida hacia ella. Dejamos que el sistema evolucione durante un tiempo t y estudiamos el comportamiento de la función $P_D(t)$. Para determinar un tiempo de evolución adecuado, buscamos el valor $t = n_D$ correspondiente al primer máximo local de $P_D(t)$.

Para calcular el coeficiente de transmisión, presentamos el siguiente algoritmo:

1. Establecemos $m_T = 0$.

2. Generamos la función de onda inicial.

3. Buscamos el valor $t = n_D$ correspondiente al primer máximo local de $P_D(t)$.

4. Evolucionamos el sistema durante n_D pasos.

5. Calculamos $P_D(n_D)$. En la simulación del proceso de medición, generamos un número aleatorio $p \in [0, 1]$. Si $p > P_D(n_D)$, consideramos que hemos detectado la partícula y actualizamos el valor de m_T a $m_T + 1$. Si$p < P_D(n_D)$, no se ha detectado la partícula y actualizamos m_T a $m_T + 0$.

6. Luego, volvemos al paso 2 para repetir el proceso y obtener información adicional sobre el coeficiente de transmisión.

Este enfoque se basa en la resolución computacional de la ecuación de Schrödinger y nos permite estudiar de manera eficiente la evolución del sistema y la interacción de la función de onda con la barrera de potencial.

2. Resultados

2.1. Estudia la dependencia en N de K realizando simulaciones para distintos valores de N

Obtenemos que el valor del coeficiente de transimisión para cada N donde hemos considerado $\lambda = 3$ es:

N	K
250	0.980198
500	0.930693
1000	0.910891
2000	0.841584

Cuadro 1: Valores del coeficiente de transmisión K para N =250, 500, 1000, 2000.

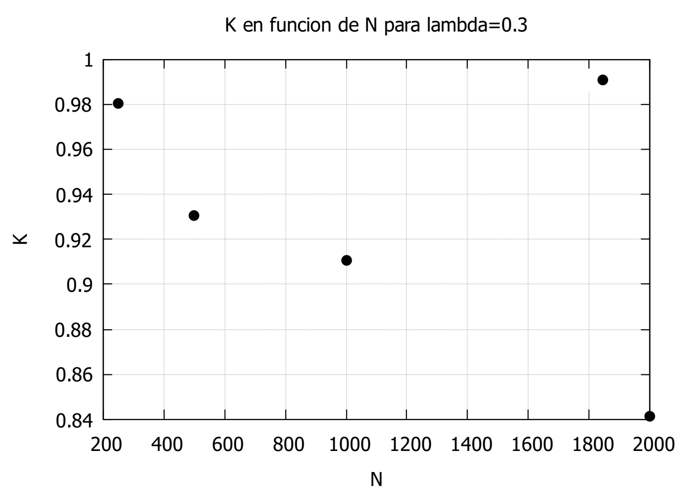

Figura 1: Representacion de K en funcion de N

Conforme aumenta N disminuye K como se puede apreciar. Debemos tener en cuenta que al resolver numéricamente la ecuación de Schrodinguer al aumentar

N cada vez hay menos espacio entre los valores que discretizan la posición luego debemos de considerar más correcto el valor de K con N=2000.

2.2. Estudiar la dependencia en V (x) de K, usando valores λ = 0, 1; 0,3; 0,5; 1; 5; 10.

A medida que aumenta el factor λ que multiplica a V_0 de la barrera de potencial, el coeficiente K de transmisión experimentará cambios significativos. La variación en el valor de K dependerá de la relación entre λ y V_0 y cómo afecta la altura de la barrera de potencial.

Si λ es pequeño en comparación con V_0, lo que implica una barrera de potencial baja en relación a la energía de referencia, es probable que el coeficiente de transmisión K sea alto. Esto significa que hay una mayor probabilidad de que las partículas atraviesen la barrera de potencial y se transmitan al otro lado.

Por el contrario, si λ es grande en comparación conV_0, lo que resulta en una barrera de potencial alta en relación a la energía de referencia, es probable que el coeficiente de transmisión K sea bajo. En este caso, la probabilidad de que las partículas superen la barrera y sean transmitidas será menor. Veamos que esto se cumple:

λ	K
0,1	0.970297
0,3	0.90099
0,5	0.653465
1	0.267327
5	0.0990099
10	0.029703

Cuadro 2: Valores del coeficiente de transmisión K para λ = 0, 1; 0,3; 0,5; 1; 5; 10

2.3. Pulso gaussiano de la energía y valor esperado del momento

En esta sección vamos a estudiar lo que ocurre con distintos observables‘en el estudio del coeficiente de transmisión.
En primer lugar se puede apreciar en los resultados que la energía no se conserva. Si consideramos $\lambda = 0{,}7$ se puede ver que la gráfica se podría aproximar a un pulso gaussiano si se realizasen más iteraciones. Esto se podría entender como que en esta zona la partícula «frena», es decir, pierde energía cinética.Además, al atravesar la barrera de potencial se producirán discontinuidades en el momento (véase repositorio de GitHub).

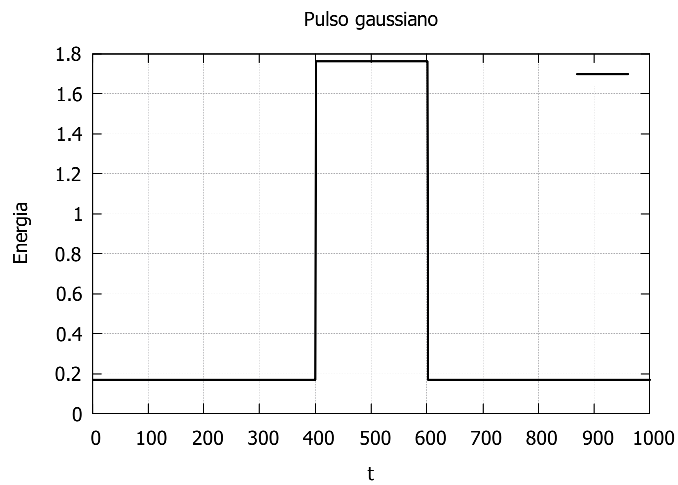

Figura 2: Pulso gaussiano

3. Conclusiones

Tras la realización de la simulación se concluye que cuanto más alta y ancha es la barrera de potencial menos probabilidad hay de que una partícula la atraviese, por lo que disminuye K, como se ha comprobado. Esto se pudo ver en los gifs del ejercicio obligatorio. Además, vemos que cuanto mayor sea el valor de N, menor será el coeficiente de transmisión.
Por otro lado se comprueba que la energía no se conserva ya que se produce un pulso gaussiano cuando la partícula llega a la barrera.

Referencias

[1] https://github.com/carlosgarciapalomo/Voluntario2_CoeficienteDeTransmision

[2] A. Galindo, P. Pascual: Mecánica Cuántica, Ed. Eudema Universidad.