

Coeficiente de transmisión

Dominik Pastuszka

28 de junio de 2022

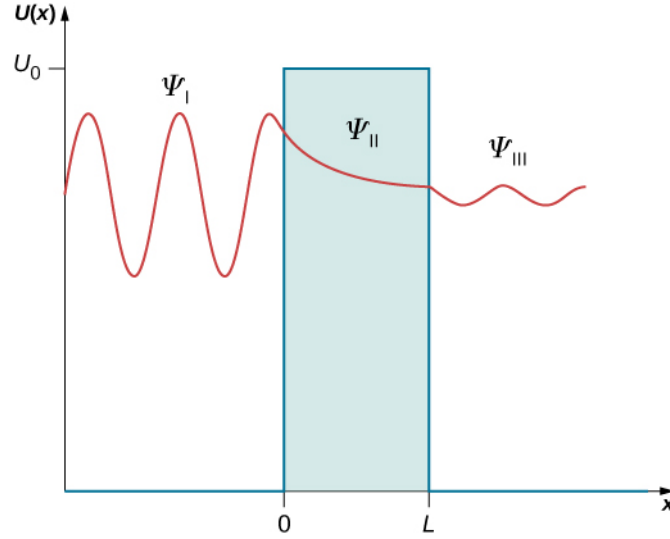


Figura 1: Diagrama del efecto túnel cuántico [1].

Resumen

El objetivo de este informe será el estudio del coeficiente de transmisión de un sistema cuántico con una barrera de potencial rectangular. Para ello, se obtendrá el coeficiente de transmisión teórico de este sistema, que compararemos con los valores obtenidos mediante un algoritmo que calculará el coeficiente numéricamente con su error estadístico. Se estudiará la relación que existe entre este coeficiente y diversos parámetros característicos de nuestra simulación. Además, se calcularán también los valores esperados de diversos operadores.

Finalmente, se tratará de determinar la relación que existe entre el coeficiente de transmisión y el número de barreras de potencial que hay en el sistema, y describiremos brevemente las posibles aplicaciones de estos sistemas.

Índice

1. Introducción y problema a tratar	3
2. Resultados y discusión	5
2.1. Coeficiente de transmisión y probabilidad de encontrar la partícula a la derecha de una barrera de potencial	5
2.2. Estimación del error del coeficiente de transmisión. Teorema de Hoeffding	6
2.3. Dependencia del coeficiente de transmisión en función del número de particiones del eje horizontal	7
2.4. Dependencia del coeficiente de transmisión en función de la altura del potencial . . .	8
2.4.1. Comprobación de la ecuación teórica	9
2.4.2. Resonancias (Caso $E > V$)	10
2.4.3. Efecto túnel (Caso $E < V$)	11
2.5. Valores esperados de distintos observables	11
2.6. Transmisión de un paquete de ondas a través de múltiples barreras de potencial . . .	14
3. Conclusiones	16
4. Apéndice	17
4.1. Expresión teórica del coeficiente de transmisión	17
4.2. Programas utilizados	18
5. Referencias	19

1. Introducción y problema a tratar

El coeficiente de transmisión es un parámetro comúnmente utilizado en casos en los que consideramos la propagación de una onda en un medio con discontinuidades. En un sistema cuántico, si consideramos una onda (partícula) incidente hacia una barrera de potencial, el coeficiente de transmisión representa el flujo de probabilidad de la onda transmitida respecto de la incidente, o equivalentemente, la probabilidad de encontrar a la partícula al otro lado de la barrera [2].

En sistemas clásicos, si la energía de la partícula es menor a la altura de la barrera de potencial, la probabilidad de encontrar la partícula al otro lado de la barrera es nula (denominamos zona clásicamente prohibida al lugar donde esta probabilidad es nula, o equivalentemente, el coeficiente de transmisión es nulo). Sin embargo, los resultados obtenidos mediante la mecánica cuántica nos sugieren que, en sistemas cuánticos, aunque la energía sea menor a la altura del potencial, esta probabilidad no es nula en general. A este fenómeno se le conoce como efecto túnel.

Para determinar el coeficiente de transmisión de un sistema cuántico, vamos a considerar una función de onda plana con amplitud gaussiana incidiendo sobre una barrera de potencial rectangular con altura finita. Además, imponemos que la función de onda es nula en los extremos del sistema, lo cual es equivalente a considerar un pozo cuadrado de potencial infinito dentro del cual tenemos nuestro sistema. Podemos ver este sistema representado en la figura (2).

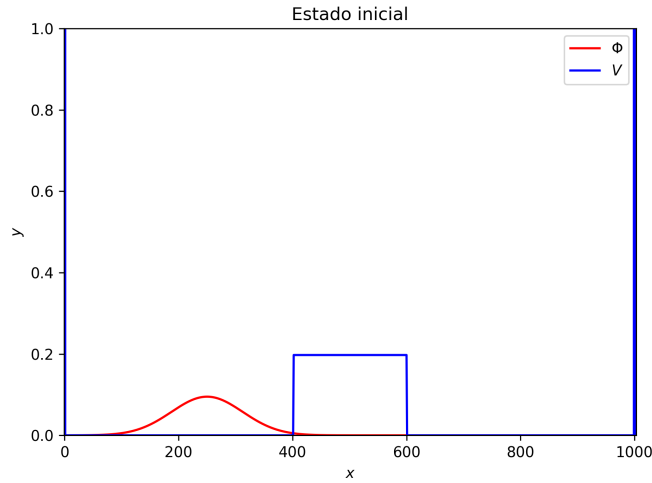


Figura 2: Estado inicial de una función de onda incidente gaussiana y el potencial considerado.

Para estudiar este sistema, hemos seguido el mismo razonamiento matemático que el expuesto en el guión de la ecuación de Schrödinger, es decir, hemos tomado la misma expresión para la función de onda inicial y la barrera de potencial, al igual que los cambios de variables y parámetros pertinentes.

Para estimar el coeficiente de transmisión de este sistema, vamos a considerar que disponemos de detectores finitos a ambos lados de la barrera, con un ancho de $N/5$. La teoría cuántica nos dice que la probabilidad de encontrar la partícula entre los puntos x_1 y x_2 viene dada por:

$$P(x_1, x_2) = \int_{x_1}^{x_2} |\Phi(x)|^2 dx \quad (1)$$

En nuestro caso, las probabilidades de encontrar la partícula a la derecha y a la izquierda de la barrera de potencial a tiempo n serán:

$$P_D(n) = \sum_{j=3N/5}^N |\Phi_{jn}|^2 \quad P_I(n) = \sum_{j=0}^{2N/5} |\Phi_{jn}|^2 \quad (2)$$

Consideramos un experimento en el cual dejamos la función de onda inicial avanzar hacia la barrera de potencial. Durante este proceso, la función de onda interactuará con el potencial de manera que una parte de la onda se reflejará y otra parte se transmitirá. Mediante los detectores y transcurrido un tiempo, podremos realizar una medida que nos dirá si la partícula consigue penetrar la barrera.

El tiempo que debemos dejar evolucionar la simulación es especialmente importante en este algoritmo, ya que si consideramos un tiempo demasiado corto, la partícula puede no llegar hasta el potencial, mientras que para tiempos muy largos, la partícula dejará de estar localizada en el espacio tras varias reflexiones en las paredes del potencial y de los extremos de nuestro sistema.

Para determinar el tiempo en el cual realizaremos la medida, buscaremos el valor $t = n_D$ para el cual la función $P_D(t)$ alcanza el primer máximo local. Dejaremos evolucionar el sistema libremente, y transcurrido el tiempo n_D , simularemos el proceso de medición comparando el valor de la función $P_D(n_D)$ con un número aleatorio generado $p \in [0, 1]$. En particular, consideraremos que hemos detectado la partícula cuando $p < P_D(n_D)$.

Después de realizar el experimento m veces, el coeficiente de transmisión se calculará como:

$$K = \frac{m_T}{m} \quad (3)$$

donde m_T es el número de veces que hemos detectado la partícula a la derecha del potencial.

En el apartado (4.1) del apéndice, se encuentra el desarrollo teórico del coeficiente de transmisión para este sistema. En particular, su expresión viene dada por:

$$T = \begin{cases} \frac{4(1-\lambda)}{4(1-\lambda) + \lambda^2 \sin^2 \left(\frac{6\pi n_{ciclos}}{5} \sqrt{(1-\lambda)} \right)} & \lambda < 1 \\ \frac{4(\lambda-1)}{4(\lambda-1) + \lambda^2 \sinh^2 \left(\frac{6\pi n_{ciclos}}{5} \sqrt{(\lambda-1)} \right)} & \lambda > 1 \\ \frac{4}{4 + \left(\frac{6\pi n_{ciclos}}{5} \right)^2} & \lambda = 1 \end{cases} \quad (4)$$

En la segunda parte de este informe, vamos a estudiar también el coeficiente de transmisión de un sistema cuántico de varias barreras de potencial con iguales características y equiespaciadas. Para ello utilizaremos un algoritmo muy similar, realizando varios experimentos donde medimos la partícula en la zona a la derecha de la última barrera y a partir de los cuales podremos obtener el coeficiente de interés.

A lo largo de este informe, denotaremos por T al coeficiente de transmisión teórico, dado por la ecuación (4), mientras que llamaremos K el coeficiente de transmisión experimental, obtenido a partir de nuestro algoritmo.

2. Resultados y discusión

Antes de comenzar realizando las simulaciones, debemos determinar los parámetros que caracterizan nuestro sistema. Inicialmente, tomamos una discretización $N = 1000$ en el eje horizontal. El potencial estará centrado en $N/2$ y tendrá una anchura $N/5$, mientras que la función de onda inicial será una gaussiana centrada en $N/4$ de anchura $N/16$. Consideraremos también una anchura del detector de $N/5$.

2.1. Coeficiente de transmisión y probabilidad de encontrar la partícula a la derecha de una barrera de potencial

Como valores iniciales, tomamos $\lambda = 0.5$ y $n_{ciclos} = 50.$, y realizaremos 10^3 experimentos, de manera que podemos aplicar la ley de los grandes números y así reducir el error causado por la aleatoriedad de nuestro proceso de medición. De esta forma, hemos obtenido el siguiente valor del coeficiente de transmisión y la probabilidad máxima de encontrar la partícula a la derecha de la barrera:

$$K = 0.931999 \quad P_D(n_D) = 0.936893$$

Como podemos ver, la probabilidad máxima tiene un valor muy cercano a la unidad en el tiempo n_D , en el cual realizaremos la medición. Por tanto, es de esperar que es muy probable que consigamos detectar la partícula. Esto es lógico, ya que el parámetro λ (que relaciona la altura del potencial y la energía de la partícula) es menor que uno, es decir, la energía de la onda incidente es mayor al potencial (en este caso, la energía es el doble de la altura del potencial).

Por otro lado, podemos ver que la probabilidad P_D es ligeramente menor que la constante de transmisión que hemos obtenido. Esto se debe a que calculamos este coeficiente mediante un proceso aleatorio, es decir, cuando medimos, generamos un número aleatorio que posteriormente comparamos con la probabilidad. En el caso idóneo donde los números aleatorios siguiesen una distribución perfectamente uniforme (y, además, dejásemos evolucionar la simulación un número infinito de pasos) obtendríamos un resultado $K = P_D(n_D)$. Sin embargo, debido a la naturaleza de trabajar con números aleatorios y tiempo finito, estos parámetros tendrán valores similares, aunque por lo general no serán iguales. Encontrar el valor máximo de P_D nos permite conocer el número de pasos temporales n_D que debemos dejar evolucionar al sistema, para así obtener un valor de K lo más cercano posible al valor real, T .

Si comparamos este resultado con la expresión teórica (4), cuyo valor es $T_{\lambda < 1} = 0.937878$, podemos ver que el error relativo es de tan sólo 0.63 %, lo cual nos indica que este algoritmo puede servir para estimar el coeficiente de transmisión con bastante precisión.

2.2. Estimación del error del coeficiente de transmisión. Teorema de Hoeffding

Debido la naturaleza aleatoria del proceso de medición simulado en nuestro algoritmo, a la hora de estimar el coeficiente de transmisión estaremos cometiendo un error estadístico. Para determinar este error, vamos a considerar el trabajo de Hoeffding sobre desigualdades de probabilidad para sumas de variables aleatorias acotadas [3]. Mediante los teoremas expuestos en dicho artículo y su aplicación a variables de Bernoulli, podremos obtener una cota superior a la probabilidad de que la suma de variables aleatorias se desvíe una cierta cantidad de su valor esperado.

Definimos las variables de Bernoulli como aquellas variables aleatorias discretas gobernadas por una ley de probabilidad que toma un valor de 1 con probabilidad p_1 y valor 0 con probabilidad $p_0 = 1 - p_1$. En nuestro sistema, podemos ver que el número que nos indica si se ha conseguido medir la partícula a la derecha (m_T) es una variable de Bernoulli (que, a su vez, depende de una variable aleatoria continua distribuida uniformemente). La probabilidad (máxima) de detectar la partícula a la derecha de la barrera (es decir, de obtener $m_T = 1$) fijados los parámetros característicos del sistema será $P_D(n_D)$.

Consideremos entonces n experimentos, de los cuales obtenemos un conjunto $\{m_T^1, m_T^2, \dots, m_T^n\}$ de variables aleatorias independientes acotadas. Esto es:

$$\{m_T^1, m_T^2, \dots, m_T^n\} \text{ con } 0 \leq m_T^i \leq 1; P(m_T^i = 1) = P_D(n_D); P(m_T^i = 0) = 1 - P_D(n_D)$$

La media muestral de estas variables será un estimador del coeficiente de transmisión:

$$K \approx \overline{m_T} = \frac{\sum_{i=1}^n m_T^i}{n} = \sum_{i=0}^n \frac{m_T^i}{n}$$

Aplicando el primer teorema de Hoeffding, y dado que la cota se aplica a ambos lados del valor medio, llegamos a la siguiente desigualdad:

$$P(|\overline{m_T} - K| \geq \varepsilon) \leq 2 \exp(-2n\varepsilon^2) \quad \text{con } 0 \leq \varepsilon \leq 1 - K$$

Podemos interpretar esta probabilidad como un nivel de significación α para un intervalo de confianza alrededor de K de tamaño 2ε . De esta forma, podemos determinar el error cometido en n experimentos con un grado de confianza de $(1 - \alpha)$ usando:

$$\varepsilon \leq \sqrt{\frac{\log(2/\alpha)}{2n}}$$

Para nuestro caso, considerando un grado de significación $\alpha = 0.05$ y realizando n experimentos, el valor obtenido para el coeficiente de transmisión K con un 95 % de confianza será:

$$K = 0.93 \pm 0.04$$

La ventaja de utilizar el teorema de Hoeffding para obtener una cota del error cometido es que no depende de los parámetros característicos de nuestro sistema. Es decir, siempre que consideremos un grado de significación α , el error estará acotado por una función proporcional a $1/\sqrt{n}$, resultado compatible con el error cometido mediante el método Monte Carlo.

2.3. Dependencia del coeficiente de transmisión en función del número de particiones del eje horizontal

En las próximas secciones, vamos a estudiar el efecto que tienen sobre el coeficiente K los distintos parámetros de nuestra simulación. Comenzamos con el número de subdivisiones espaciales que tomamos en el eje horizontal N . La ecuación (4) nos sugiere que no existe una dependencia de N en K , por lo cual su valor no debe influir en el resultado del coeficiente de transmisión obtenido. Para comprobar esta hipótesis, en la figura (3) podemos ver representado el coeficiente K en función de N para varios valores distintos de λ .

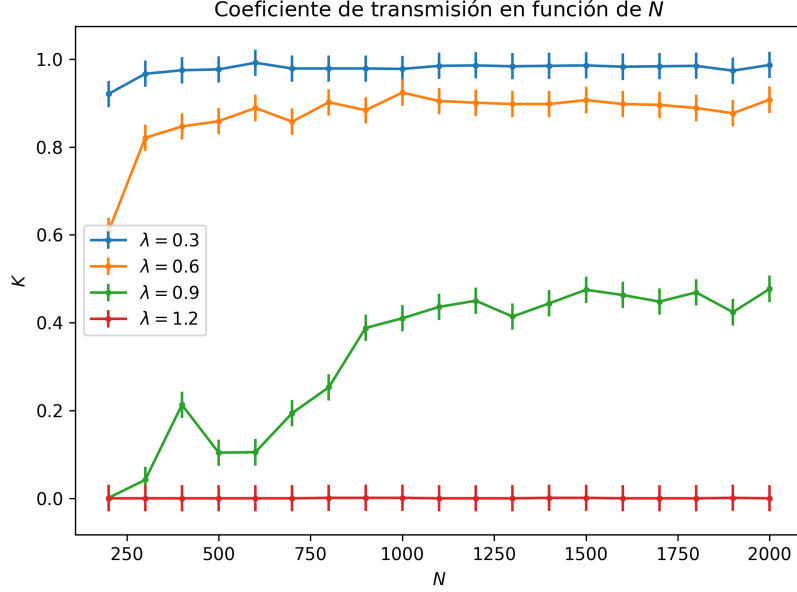


Figura 3: Coeficiente de transmisión K obtenido en función del tamaño del sistema N para varios valores de λ .

Como podemos ver en la gráfica, podemos afirmar que se cumple la hipótesis de que $K \neq K(N)$, al menos para valores N grandes. Parece que para N bajos, el coeficiente de transmisión presenta su mayor desviación con respecto al valor estabilizado, lo cual se puede ver claramente para la curva de $\lambda = 0.6$.

Podemos ver también que la curva para $\lambda = 0.9$ presenta muchas variaciones con respecto al valor del coeficiente K , incluso conforme tomamos N del orden de 700. Esto puede deberse a que se trata de un valor relativamente alto de λ , por lo cual se trata de un caso cerca del límite para el cual el coeficiente de transmisión pasa a ser cero, y conforme disminuimos N , más le costará al sistema obtener el valor real de este estimador. Sin embargo, incluso esta curva parece estabilizarse con $N \sim 1000$, por lo cual está justificado que para el resto de este informe, consideremos este valor para las divisiones del eje espacial.

Las variaciones observadas para N bajos se deben a que estamos simulando un sistema continuo mediante un algoritmo que discretiza tanto el espacio como el tiempo. Al subdividir el eje en cualquier número de puntos, siempre estaremos perdiendo algo de información sobre la función de onda. Conforme hacemos tender $N \rightarrow \infty$, la información que perdemos se hace cada vez menor y la diferencia entra la función de onda real y simulada tiende a cero, mientras que para N pequeño,

esta discretización afecta considerablemente a los resultados.

Además, a partir de esta gráfica podemos también intuir cual será la dependencia de λ en K , ya que conforme aumentamos el parámetro λ , podemos ver cómo el coeficiente tiende a cero. Estudiaremos este comportamiento en el siguiente apartado.

2.4. Dependencia del coeficiente de transmisión en función de la altura del potencial

En las figuras (4) podemos ver representada la función del coeficiente de transmisión teórico T en función del parámetro λ para algunos valores de n_{ciclos} .

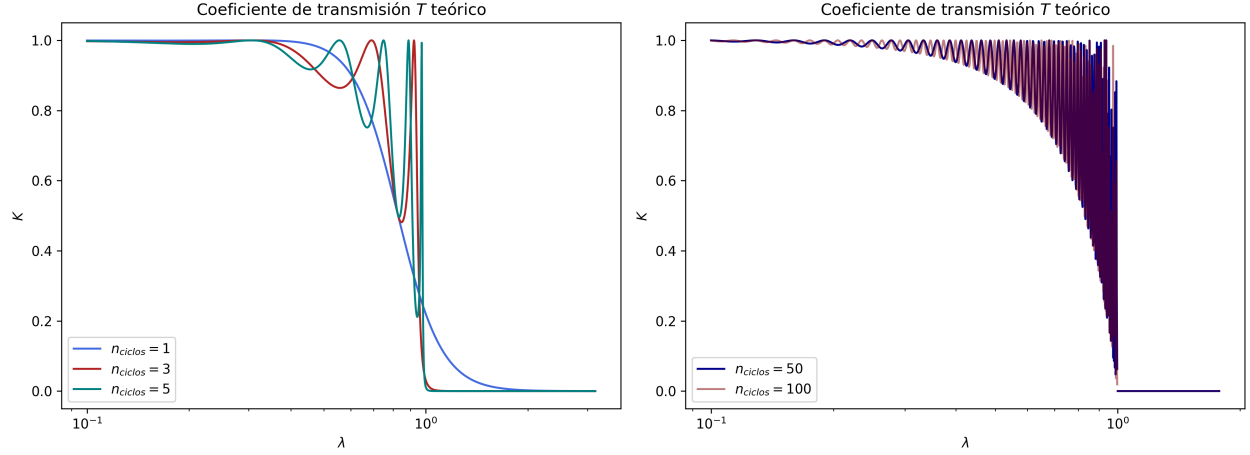


Figura 4: Coeficiente de transmisión T obtenido en función de λ para varios valores de n_{ciclos} .

Podemos observar que, para el valor $n_{ciclos} = 1$, el coeficiente comienza en su valor máximo $T = 1$ y, a medida que aumentamos λ , su valor va decreciendo hasta llegar a $\lambda = 1$, donde la altura de la barrera de potencial y la energía de la onda se igualan. Para un sistema clásico, conforme aumentemos λ , el coeficiente de transmisión decaería hasta cero. Sin embargo, en el caso cuántico, debido al término seno hiperbólico, el coeficiente decae exponencialmente, fenómeno conocido como efecto túnel. Si aumentamos n_{ciclos} , el decaimiento exponencial es más pronunciado, y por tanto el efecto se reduce.

Por otra parte, para $\lambda < 1$, podemos observar que T presenta oscilaciones cuya frecuencia depende de λ . Esto se debe a la predominancia del término sinusoidal en (4) para energías menores a la altura del potencial y a las reflexiones que sufre la función de onda en los extremos de nuestro sistema. A estos estados los conocemos como estados resonantes [4].

2.4.1. Comprobación de la ecuación teórica

En primer lugar, vamos a representar gráficamente el coeficiente de transmisión obtenido K en función del parámetro λ para determinar si nuestro algoritmo sigue la expresión (4). En la gráfica (5) podemos ver representados los datos K obtenidos, además de la curva teórica T , para $n_{\text{ciclos}} = 50$.¹

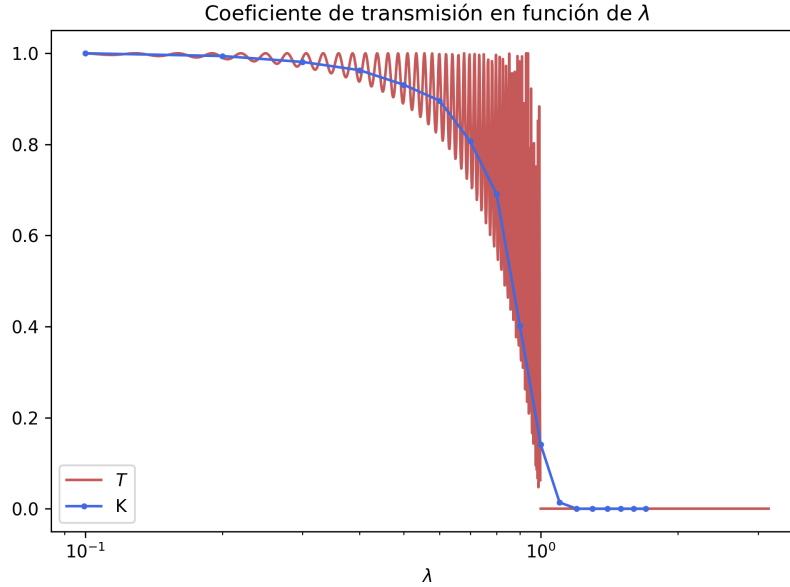


Figura 5: Coeficiente de transmisión K obtenido en función del parámetro λ , junto con la expresión teórica T .

Como podemos ver, los datos obtenidos siguen el comportamiento que se esperaba: para $\lambda < 1$, el coeficiente de transmisión tiene un valor $K \approx 1$; Conforme aumentamos λ , el coeficiente irá disminuyendo su valor; Finalmente, cuando $\lambda > 1$ el coeficiente sigue decreciendo hasta alcanzar rápidamente un valor $K \approx 0$ que se mantendrá constante.

A partir de estos resultados, y teniendo en cuenta los resultados que obtenidos de manera teórica, resulta interesante estudiar más a fondo dos fenómenos.

- Resonancias: para $\lambda < 1$, podemos ver que T es una función oscilante entre el valor máximo 1 y un valor mínimo que va decreciendo exponencialmente. Debido a que no hemos tomado suficientes puntos en la gráfica anterior, no puede apreciarse. Un estudio más detallado de este fenómeno se encuentra en la sección (2.4.2).
- Efecto túnel: para $\lambda > 1$, el valor de K no decrece tan rápidamente como nos indica T . Estudiaremos este efecto en el apartado (2.4.3).

¹La incertidumbre del coeficiente de transmisión para $n = 1000$ experimentos realizados y un grado de significación de $\alpha = 0.05$, como dedujimos a partir del teorema de Hoeffding, es siempre 0.3. No se ha representado en la gráfica para no saturarla.

2.4.2. Resonancias (Caso $E > V$)

A continuación, se va a estudiar el fenómeno de las resonancias que hemos descrito anteriormente. Para casos donde $E > V$, el coeficiente de transmisión oscilará entre sus valores mínimo y máximo [5] dados por:

$$1 - \frac{\lambda^2}{4(1 - \lambda)} \leq T \leq 1$$

De nuevo, hemos realizado 100 simulaciones para $\lambda \in [0.1, 0.6]$, con $N = 1000$ y $n_{ciclos} = 50$. En la gráfica (6) podemos ver los resultados obtenidos, junto con los valores teóricos.

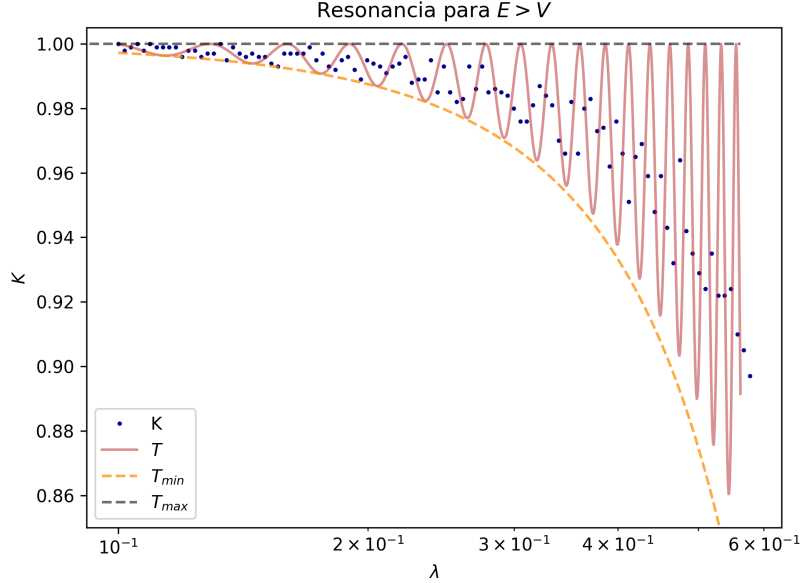


Figura 6: Coeficiente de transmisión K obtenido en función del parámetro λ , junto con la expresión teórica T y sus valores máximo y mínimo.

Podemos observar que en los coeficientes obtenidos K detectamos ciertas oscilaciones, tal y como lo predecía la ecuación (4). Sin embargo, los puntos obtenidos no siempre concuerdan perfectamente con la curva T , aunque esto es de esperar, ya que para ello sería necesario modificar el algoritmo para obtener mayor exactitud. Además, estas desviaciones pueden deberse a fuentes de errores que no se han detectado, o de las posibles limitaciones del algoritmo.

A pesar de esto, vemos que los datos obtenidos de K presentan oscilaciones cuando $\lambda \ll 1$, se mantienen en el intervalo $[T_{min}, T_{max}]$, y siguen el comportamiento general que nos indica la primera ecuación de (4), por lo cual podemos concluir que nuestro algoritmo predice correctamente el comportamiento del coeficiente de transmisión para valores de energía mayores a la altura de potencial.

2.4.3. Efecto túnel (Caso $E < V$)

Para estudiar el efecto túnel, se han intentado realizar simulaciones para $\lambda > 1$. Como podemos ver a partir de las gráficas teóricas (3), el efecto túnel es particularmente observable para valores de n_{ciclos} bajos. Sin embargo, conforme disminuimos este parámetro en nuestro algoritmo, el sistema evoluciona con un paso temporal mucho más bajo, por lo cual tendríamos que aumentar considerablemente el número de iteraciones realizadas, que a su vez requiere de una potencia computacional mayor.

Aun así, analizando la gráfica (7) obtenida para $n_{ciclos} = 50$, podemos ver que se sigue pudiendo observar el efecto túnel, ya que tenemos varios valores de K distintos de cero cuando $\lambda > 1$.

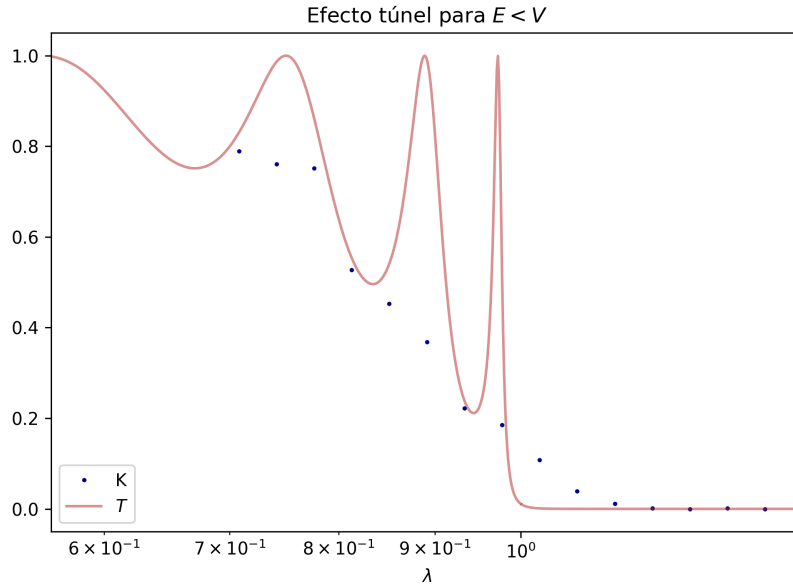


Figura 7: Coeficiente de transmisión K obtenido en función del parámetro λ , junto con la expresión teórica T .

2.5. Valores esperados de distintos observables

En este apartado, se ha tratado de hallar la evolución temporal de los estados esperados de varios observables. En particular, trataremos de estimar el valor esperado de la posición, momento, energía cinética y energía total. Para ello, usaremos que el valor esperado de un operador O viene dado por:

$$\langle \phi | O | \phi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \phi^*(x) O(x) \phi(x) = \sum_{j=0}^N \phi^*(j) O(j) \phi(j)$$

Además, la incertidumbre de un operador O puede calcularse mediante [6]:

$$\Delta O = \sqrt{\langle O^2 \rangle - \langle O \rangle^2}$$

Vamos a realizar dos simulaciones para estudiar además el efecto que tiene el realizar la medición sobre el observable. En una simulación, no realizaremos ninguna medición, mientras que en la

otra mediremos transcurrido un tiempo t_M .

Al medir la partícula, hacemos que la función de onda colapse [7] en una de sus dos posibilidades, que hayamos detectado la partícula a la derecha de la barrera o no. En caso afirmativo, la función de onda a la izquierda de la barrera pasará a valer cero, y la norma se redistribuirá en la zona de la derecha. En caso de que al realizar la medición la partícula no esté a la derecha de la barrera, ocurre la situación inversa, y será en esta zona en la cual la función de onda pasará a valer cero.

En las gráficas (8) podemos ver representados los valores esperados de los operadores posición, momento lineal, energía cinética, y energía total (hamiltoniano), con una simulación con $N = 1000$, $n_{ciclos} = 50$, y $\lambda = 0.5$. En estas gráficas podemos también ver el efecto que tiene realizar la medición en $t = n_D$ (tiempo que maximiza la probabilidad P_D de encontrar la partícula a la derecha de la barrera).

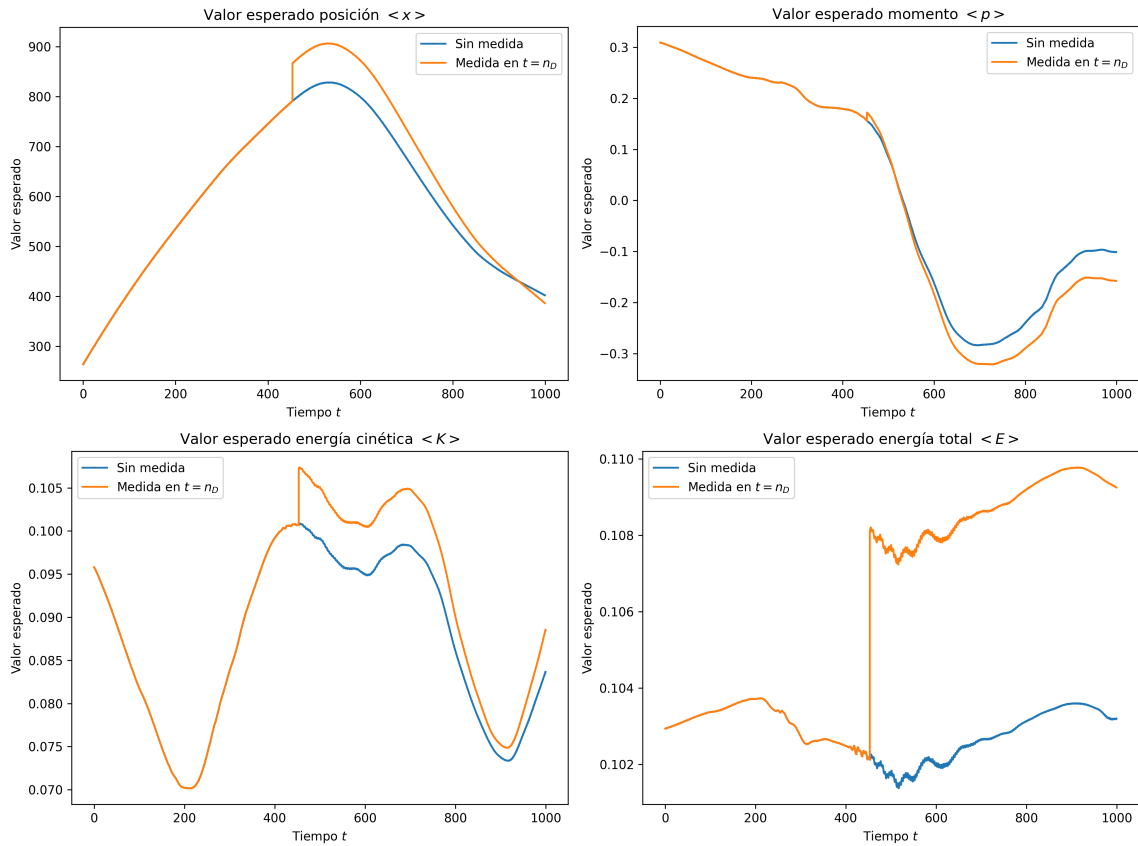


Figura 8: Valores esperados en función del tiempo para los operadores posición, momento, energía cinética y energía total. Se muestran los resultados obtenidos sin realizar la medida y realizando la medida en $t = n_D$. Las gráficas de los valores sin realizar la medida y los obtenidos realizando la medida se solapan en los primeros pasos, por lo cual, inicialmente, en las gráficas sólo se ve una línea.

El hecho de realizar una medida en nuestro sistema cuántico hace que en las gráficas anteriores aparezca una discontinuidad de salto finito. Por ejemplo, en el valor esperado de la posición, podemos ver que el hecho de realizar la medida para el tiempo que maximiza la probabilidad de encontrar la partícula a la derecha de la barrera de potencial hace que, al detectar la partícula, su

valor esperado pasa a tener un valor mayor al extremo derecho de la barrera.

Para el valor esperado de la energía cinética, podemos ver claramente como la partícula disminuye su velocidad cuando pasa por la barrera de potencial. En cuanto a la energía total, podemos ver que su valor se mantiene aproximadamente constante, mientras que la medida en el sistema hace que éste colapse en un valor mayor al original. En la figura (9) se muestran los valores esperados de la energía cinética, potencial y total.

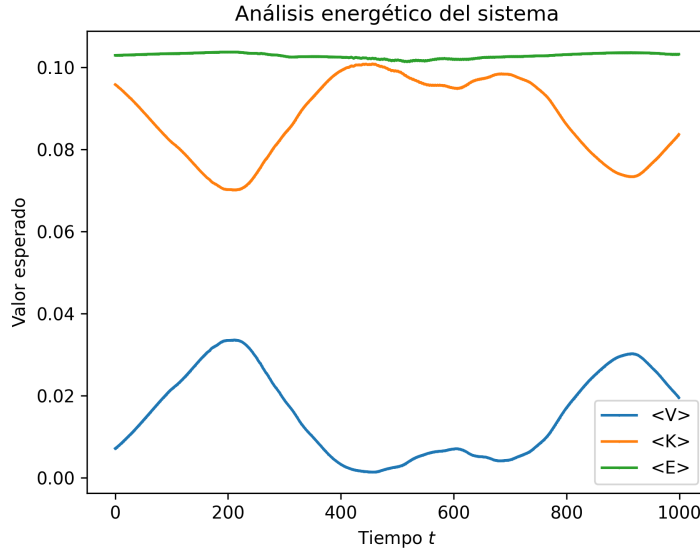


Figura 9: Caption

Finalmente, en la figura (10) podemos encontrar representados las incertidumbres de la posición y el momento de la partícula, junto con el efecto que tiene realizar la medida sobre cada uno de ellos.

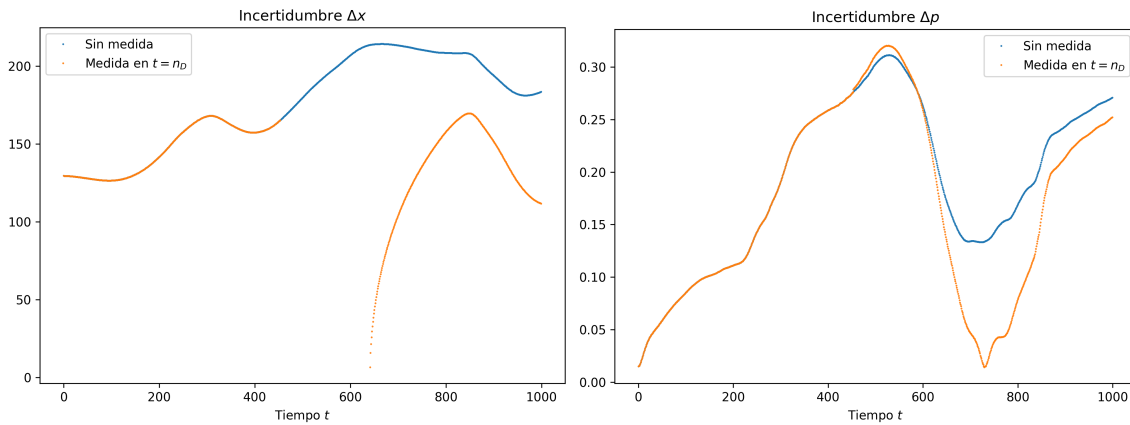


Figura 10: Incertidumbre en función del tiempo para los operadores posición y momento.

Podemos ver que la incertidumbre en ambos valores tiende a crecer con el tiempo, lo cual es lógico, ya que conforme dejamos evolucionar el sistema a partir de su valor inicial más difícil será predecir cual será la posición o el momento de la partícula. Sin embargo, la incertidumbre de la

posición parece oscilar mucho menos a la incertidumbre del momento, la cual alcanza un valor máximo en $t \approx 500$, tras el cual decrece bruscamente. El hecho de medir si la partícula se encuentra a la derecha del sistema hace que, en el caso de la posición, su valor numérico sea cero, mientras que en la incertidumbre el momento hace que la caída brusca mencionada sea más pronunciada.

2.6. Transmisión de un paquete de ondas a través de múltiples barreras de potencial

Finalmente, vamos a considerar un sistema equivalente al estudiado hasta ahora pero con un número b de barreras. La expresión analítica del coeficiente de transmisión para un sistema de dos barreras de potencial iguales puede verse en [8]. Como podemos ver, conforme aumentamos el número de barreras, la expresión exacta se complica bastante. Sin embargo, el estudio del coeficiente de transmisión para sistemas cuánticos con varias barreras de potencial resulta tener muchas aplicaciones útiles, como en el campo de la microscopía de efecto túnel, diseños de células fotovoltaicas, o en el desarrollo de dispositivos semiconductores [9].

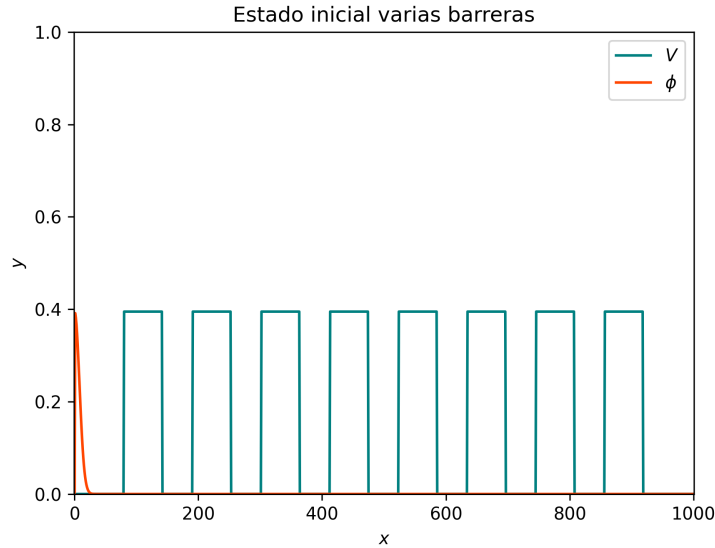


Figura 11: Estado inicial de un pulso de onda gaussiano centrado en el origen que incide sobre 8 barreras de potencial iguales y equiespaciadas.

A lo largo de esta sección cuantificaremos el comportamiento de K en función del número de barreras b . Para ello, seguiremos un procedimiento completamente análogo al caso de una sola barrera, de manera que realizaremos 10^4 experimentos (de manera que el error es del orden de $\Delta K = 0.014$) en los cuales mediremos la partícula a la derecha de la última barrera y estimaremos el valor del coeficiente generando un número aleatorio y comparándolo con la probabilidad máxima de encontrar la partícula a la derecha.

Utilizaremos un parámetro $\lambda = 5$, de forma que la energía de la onda es considerablemente menor a la altura del potencial. De esta forma, el coeficiente de transmisión que obtenemos será debido al efecto túnel. Además, para evitar que las barreras se solapen entre sí, hemos reducido su ancho hasta $N/16$ de manera que podemos llegar hasta un máximo de 8 barreras equiespaciadas. Hemos considerado una función de onda inicial igual pero con un ancho $N/64$ centrada en el origen.

En la gráfica (12) podemos ver representados los datos obtenidos del coeficiente de transmisión K en función del número de barreras b . Además, hemos considerado un ajuste lineal, con función de ajuste:

$$f(x) = A \exp(Bx)$$

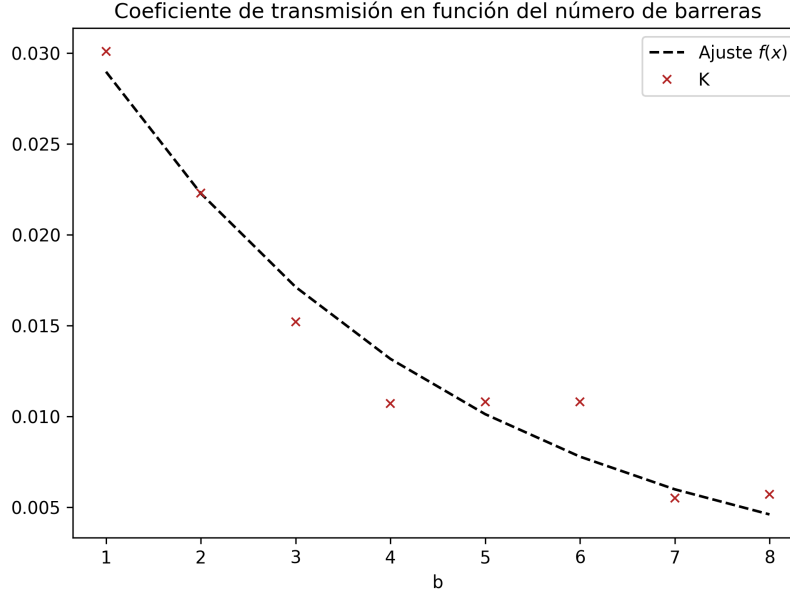


Figura 12: Coeficiente de transmisión K obtenido para cada número de barreras de potencial b , junto con el ajuste realizado.

De esta forma, se ha obtenido la siguiente relación:

$$K(b) = (0.038 \pm 0.003)e^{(-0.26 \pm 0.03)b}$$

Es decir, el coeficiente de transmisión decrece de manera exponencial. Además, para estimar la bondad del ajuste, hemos obtenido un valor $\chi^2 = 0.002$. Con 6 grados de libertad y un grado de significación de $\alpha = 0.05$, comparando con el valor teórico $\chi_{teo}^2 \gg \chi^2$, podemos afirmar con un 95 % de confianza que nuestros datos se ajustan a la función considerada.

Realizando varias simulaciones con distintos parámetros iniciales siempre se ha obtenido una dependencia de tipo exponencial. Esto es coherente con los resultados teóricos expuestos en [10], por lo cual concluimos que el coeficiente de transmisión decrece exponencialmente con el número de barreras en el sistema.

3. Conclusiones

A lo largo de este informe hemos logrado aplicar el algoritmo propuesto para determinar de manera satisfactoria el coeficiente de transmisión de un sistema cuántico consistente en un pulso gaussiano incidente en una barrera de potencial rectangular de altura finita, con un potencial infinito en los extremos del sistema.

En primer lugar, se ha realizado una simulación para determinar tanto el coeficiente de transmisión como la probabilidad máxima de encontrar la partícula a la derecha del potencial, obteniendo resultados similares a los que predice la mecánica cuántica. Además, se ha discutido también el significado físico de la probabilidad calculada.

Mediante la aplicación del teorema de Hoeffding para variables de Bernoulli, hemos logrado también acotar el error que estamos cometiendo en la estimación del coeficiente, llegando a la conclusión coherente con el método de Monte Carlo que el error sigue la relación de proporcionalidad:

$$\varepsilon \propto \frac{1}{\sqrt{n}} \text{ con } n \text{ el número de experimentos realizados}$$

Se ha estudiado también la influencia de los parámetros N (divisiones del eje espacial) y λ (relación altura del potencial y energía) sobre el coeficiente de transmisión. Los resultados obtenidos fueron coherentes con la expresión teórica del coeficiente obtenida anteriormente. En particular, se ha comprobado que este coeficiente no depende del parámetro N (aunque conforme disminuimos N a valores muy bajos, la exactitud del algoritmo disminuye considerablemente):

$$T \neq T(N)$$

También, hemos encontrado que el coeficiente de transmisión se ajusta correctamente a la curva teórica $T(\lambda)$, además de recrear dos fenómenos, el efecto túnel y las resonancias, aunque con ciertas limitaciones (en concreto, la dificultad de disminuir el valor n_{ciclos}).

Se han tratado de calcular también los valores esperados de varios operadores, como la posición, momento, energía cinética y energía total, y se ha determinado su evolución temporal, además de la evolución temporal de la incertidumbre para el caso de la posición y el momento. Hemos podido comprobar el efecto que tiene sobre estos parámetros el realizar una medida sobre el sistema, obteniendo resultados que no parecen contradecir la teoría.

Finalmente, se ha aplicado el algoritmo a un sistema de varias barreras de potencial, llegando a la conclusión de que el coeficiente de transmisión sigue una relación exponencial decreciente en función del número de barreras:

$$T(b) \propto \exp(-b) \text{ con } b \text{ el número de barreras}$$

Podemos concluir, por tanto, que el algoritmo considerado en este informe es capaz de calcular el coeficiente de transmisión de manera eficiente, además de recrear algunos de los fenómenos más interesantes que ocurren para sistemas con una o varias barreras de potencial, a pesar de las limitaciones que presenta.

4. Apéndice

4.1. Expresión teórica del coeficiente de transmisión

Para hallar el coeficiente de transmisión de un sistema formado por una onda incidente en una barrera de potencial finita y constante en el tiempo, partimos de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx'^2} + V(x') - E \right] \phi(x') = 0$$

Aplicamos el cambio de variable $\{x' \rightarrow x\hbar/\sqrt{2m}\}$, de forma que la ecuación queda:

$$\left[-\frac{d^2}{dx^2} + \tilde{V}(x) - E \right] \phi(x) = 0$$

El potencial tras el cambio de variable queda:

$$\tilde{V}(x) = \begin{cases} \lambda \tilde{k}^2 & x \in [2N/5, 3N/5] \\ 0 & x \notin [2N/5, 3N/5] \end{cases}$$

donde los parámetros λ y \tilde{k} se definen según:

$$\lambda = \frac{\tilde{V}}{E} \quad \tilde{k} = \frac{2\pi n_{\text{ciclos}}}{N}$$

Siguiendo el procedimiento típico para resolver la ecuación de Schrödinger [11], llegamos a la siguiente solución para $E < \tilde{V}$ (es decir $\lambda > 1$):

$$\phi(x) = \begin{cases} e^{ix\sqrt{E}} + A_1 e^{-ix\sqrt{E}} & x < 2N/5 \\ A_2 e^{-x\sqrt{\tilde{V}-E}} + A_3 e^{x\sqrt{\tilde{V}-E}} & 2N/5 \leq x \leq 3N/5 \\ A_4 e^{ix\sqrt{E}} & x > 3N/5 \end{cases}$$

donde los coeficientes A_i se obtienen imponiendo continuidad en la función y su derivada primera en los extremos de cada intervalo. En concreto, nos interesa el parámetro A_4 , ya que éste está relacionado con el coeficiente de transmisión, que tendrá la forma:

$$\begin{aligned} T_{\lambda>1} = |A_4|^2 &= \frac{4E(\tilde{V} - E)}{4E(\tilde{V} - E) + \tilde{V}^2 \sinh^2(\sqrt{\tilde{V} - E} 3N/5)} \\ &= \frac{4(\lambda - 1)}{4(\lambda - 1) + \lambda^2 \sinh^2\left(\frac{6\pi n_{\text{ciclos}}}{5} \sqrt{(\lambda - 1)}\right)} \end{aligned}$$

En el caso de que $E > \tilde{V}$ (es decir $\lambda < 1$), obtenemos la misma solución $\phi(x)$ pero con el cambio:

$$\sqrt{\tilde{V} - E} \rightarrow i\sqrt{E - \tilde{V}}$$

Por tanto, el coeficiente de transmisión queda:

$$T_{\lambda<1} = |A_4|^2 = \frac{4(1 - \lambda)}{4(1 - \lambda) + \lambda^2 \sin^2\left(\frac{2\pi n_{\text{ciclos}}}{5} \sqrt{(1 - \lambda)}\right)}$$

Podemos ver que ambas expresiones contienen una indeterminación para el valor $E = \tilde{V}$ ($\lambda = 1$). Tomando límites para $\lambda \rightarrow 1$ en cualquiera de las dos expresiones, llegamos al resultado:

$$T_{\lambda=1} = \lim_{\lambda \rightarrow 1} T_{\lambda < 1} = \lim_{\lambda \rightarrow 1} T_{\lambda > 1} = \frac{4}{4 + \left(\frac{6\pi n_{ciclos}}{5}\right)^2}$$

En resumen, el coeficiente de transmisión teórico en función de λ y n_{ciclos} puede expresarse como:

$$T = \begin{cases} \frac{4(\lambda - 1)}{4(\lambda - 1) + \lambda^2 \sinh^2\left(\frac{6\pi n_{ciclos}}{5} \sqrt{(\lambda - 1)}\right)} & \lambda > 1 \\ \frac{4(1 - \lambda)}{4(1 - \lambda) + \lambda^2 \sin^2\left(\frac{6\pi n_{ciclos}}{5} \sqrt{(1 - \lambda)}\right)} & \lambda < 1 \\ \frac{4}{4 + \left(\frac{6\pi n_{ciclos}}{5}\right)^2} & \lambda = 1 \end{cases} \quad \square$$

Es posible también aplicar este procedimiento, o incluso usar otros más eficientes, para obtener una expresión general para el coeficiente de transmisión para más de una barrera de potencial [12] [13], aunque no consideraremos dichas expresiones en este informe.

4.2. Programas utilizados

Para obtener los resultados obtenidos en cada uno de los apartados de este informe, hemos utilizado varios programas, que enumeraremos a continuación y describimos brevemente su funcionamiento. En la carpeta *Tcoefficient.zip* adjunta, podemos encontrar los siguientes ficheros.

```
/Tcoefficient.zip/
├─ gsl_rng.h.....Librería para números aleatorios
├─ complex.h.....Libería con números complejos
├─ barreras.cpp.....Código para sistema con múltiples barreras de potencial
├─ observables.cpp.....Código para obtener el valor esperado de los observables
└─ tcoef.cpp.....Programa principal para obtener coeficiente de transmisión
```

Cada programa esta debidamente comentado, de manera que compilando y ejecutándolos se debería poder obtener todos los resultados expuestos en este informe. Para los códigos de C++, es necesario instalar la librería *GSL Gnu Scientific Library*, de la cual se utilizará la librería *gsl_rng.h*, e incluir su ruta a la hora de compilar. También se ha utilizado la librería *complex.h* para cálculos con números complejos. Los programas para obtener las gráficas se han realizado con Python3.

Se han omitido todos los programas utilizados para graficar los resultados, además de aquellos programas auxiliares en los que se calcula el coeficiente según algún parámetro (ya que lo único que cambia en éstos es un bucle adicional sobre el parámetro que estamos variando).

5. Referencias

- [1] cnxuniphysics. University Physics Volume 3. Creative Commons Attribution 4.0 International License <https://opentextbc.ca/universityphysicsv3openstax/chapter/the-quantum-tunneling-of-particles-through-potential-barriers/>.
- [2] David Jeffrey Griffiths. *Introduction to quantum mechanics*. Pearson Prentice Hall, 2005.
- [3] Wassily Hoeffding. Probability inequalities for sums of bounded random variables. *Springer Series in Statistics*, page 409–426, 1994.
- [4] A. Uma Maheswari, P. Prema, and C. S. Shastry. Resonant states and transmission coefficient oscillations for potential wells and barriers. *American Journal of Physics*, 78(4):412–417, 2010.
- [5] Claude Cohen-Tannoudji. *Quantum Mechanics*. Wiley-VCH Verlag GmbH; Co. KGaA, 2020.
- [6] Barton Zwiebach. Quantum Physics II. <https://ocw.mit.edu/courses/physics/8-05-quantum-physics-ii-fall-2013/>.
- [7] Douglass Ross. Wavefunction collapse. https://www.southampton.ac.uk/~doug/quantum_physics/collapse.pdf.
- [8] Vittoria Petrillo and Vladislav Olkhovsky. Tunnelling time of a gaussian wave packet through two potential barriers. *Open Physics*, 3(3), 2005.
- [9] S H Prastowo, B Supriadi, Z R Ridlo, and T Prihandono. Tunneling effect on double potential barriers gaas and pbs. *Journal of Physics: Conference Series*, 1008:012012, 2018.
- [10] Z. Carrasco, N. Moreta, R. Pachacama, and C. Vacacela Gomez. Quantum tunneling through two sequential barriers: A simple derivation. *Journal of Physics: Conference Series*, 1391(1):012009, nov 2019.
- [11] Carlos Sánchez del Río. *Física cuántica*. Pirámide, 2020.
- [12] Y S Rao, K Pappootty, and C Radhakrishnan. Quantum mechanical penetration through multiple barriers. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 11(3):501–507, 1978.
- [13] Siddhant Das. Exact solution for one dimensional multibarrier tunneling, Oct 2013.