

# Coeficiente de transmisión y colapso de la función de onda

Héctor Casas Ruiz

14 de julio de 2022

Física computacional del Grado en Física. Universidad de Granada.



## Índice

<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
<b>2. Resultados y discusión</b>	<b>3</b>
2.1. Estudio del coeficiente de transmisión . . . . .	3
2.2. Dependencia de $K$ con $N$ . . . . .	3
2.3. Dependencia de $K$ con $V$ . . . . .	4
2.4. Valores esperados . . . . .	4
<b>3. Conclusiones</b>	<b>7</b>

## 1. Introducción

En este informe se va a estudiar una simulación de la ecuación de Schrödinger. Esta se va a utilizar para estudiar el coeficiente de transmisión y como varía este modificando el tamaño del sistema y la altura de la barrera de potencial. Además, el estudio del coeficiente de transmisión implicará el proceso físico del colapso de la función de onda, producido al realizar mediciones en un sistema cuántico. Este proceso se va a analizar mediante el estudio de los valores esperados de diferentes observables, en los que se esperará una discontinuidad producida por el mismo proceso.

## Fundamento teórico

Para estudiar la evolución temporal de la ecuación de Schrödinger se ha utilizado el método de Crank-Nicholson, que es un método de diferencias finitas que se usa para resolver ecuaciones en derivadas parciales. A partir de esto se va a estudiar el coeficiente de transmisión de la onda para un barrera de potencial finita. Este coeficiente en términos generales describe la amplitud o intensidad de la onda transmitida a través de una discontinuidad respecto de la reflejada. En cuántica, se define como la probabilidad de que una partícula (con determinada función de onda) pase a través de una barrera por efecto túnel. Su expresión teórica para una barrera de potencial finita con altura  $V_0$  y anchura  $a$  es

$$K = \left(1 + \frac{V_0^2 \sinh^2(k_1 a)}{4E(V_0 - E)}\right)^{-1} \quad E < V_0 \quad (1)$$

$$K = \left(1 + \frac{V_0^2 \sin^2(k_2 a)}{4E(V_0 - E)}\right)^{-1} \quad E > V_0 \quad (2)$$

$$K = \frac{1}{1 + ma^2 V_0 / 2\hbar^2} \quad E = V_0 \quad (3)$$

siendo  $E$  la energía,  $k_1 = \sqrt{2m(V_0 - E)/\hbar^2}$  y  $k_2 = \sqrt{2m(E - V_0)/\hbar^2}$ . Cabe destacar que este coeficiente no será exactamente igual, ya que, para el cálculo de este no se ha considerado un sistema con las mismas condiciones de contorno. Para el programa conviene dejar  $K$  en función de  $N$ ,  $n_{ciclos}$  y  $\lambda = \frac{V_0}{E}$  y además tomar  $\hbar = 1$  y  $m = 1/2$ . Así se obtiene

$$K = \left(1 + \frac{\lambda^2 \sinh^2\left(\sqrt{\frac{2\pi n_{ciclos}}{N}}(\lambda - 1)\frac{N}{5}\right)}{4(\lambda - 1)}\right)^{-1} \quad \lambda > 1 \quad (4)$$

$$K = \left(1 + \frac{\lambda^2 \sin^2\left(\sqrt{\frac{2\pi n_{ciclos}}{N}}(1 - \lambda)\frac{N}{5}\right)}{4(1 - \lambda)}\right)^{-1} \quad \lambda < 1 \quad (5)$$

$$K = \frac{1}{1 + \frac{2\pi\lambda N n_{ciclos}}{25}} \quad \lambda = 1 \quad (6)$$

En la simulación se va a calcular como el cociente entre  $n$  el número de veces que se realiza el experimento y  $n_T$  el número de veces que se ha transmitido la partícula, es decir,  $K = n_T/n$ . Para estudiar cuando se transmite la partícula se simula un detector, de manera que, se calcula la probabilidad de que la partícula esté en los puntos a la derecha de la barrera  $P_D$  y se genera un número aleatorio  $p \in (0, 1)$  y si  $p < P_D$  la partícula se considera detectada. El instante se comprueba la detección de la partícula es en el primer máximo de  $P_D(t)$

También se van a estudiar algunos valores esperados. El valor esperado de un observable viene dado por

$$\langle O \rangle = \int \phi^*(x) O \phi(x) dx \quad (7)$$

siendo los observables que se van a estudiar los operadores posición, momento, energía cinética y energía, respectivamente (en una dimensión):

$$\hat{X} = x \quad (8)$$

$$\hat{P} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad (9)$$

$$\hat{E}_c = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \quad (10)$$

$$\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad (11)$$

Estas derivadas se han calculado numéricamente mediante el método de las diferencias finitas.

## Sobre la implementación

La simulación del modelo se ha realizado en *Python* concretamente en un *Jupyter Notebook*, que se encuentra adjunto en la carpeta de *GitHub* (Enlace). Los cálculos para los tres primeros apartados se han realizado con *voluntario2.ipynb*, mientras que los cálculos del último apartado se han realizado con *voluntario2\_valores.ipynb* que es una versión modificada del anterior que calcula los valores esperados.

## 2. Resultados y discusión

### 2.1. Estudio del coeficiente de transmisión

En primer lugar se ha estudiado el coeficiente de transmisión para  $N = 200$  y  $\lambda = 0,5$ . Para calcular el coeficiente se ha realizado la simulación  $n = 10^3$  veces y se ha repetido 15 veces de las que se ha tomado un promedio y se ha calculado el error mediante el Teorema del límite central. Así se ha estimado  $K = 0,776 \pm 0,012$  y se ha promediado también  $P_D$ , que se encuentra en la Tabla 1, junto al valor teórico calculado con 5.

Tabla 1: Coeficiente de transmisión calculado mediante la simulación,  $P_D$  y coeficiente de transmisión teórico.

$K$	$P_D$	$K_{teórico}(\lambda = 0,5)$
$0,776 \pm 0,012$	0,773	0,768

Sobre estos resultados en primer lugar cabe destacar que el coeficiente calculado acota entre sus barras de error al teórico. También se ha observado un gran parecido entre  $K$  y  $P_D$  y esto tiene sentido ya que, como inicialmente se comentó,  $K$  en la física cuántica indica la probabilidad de que una partícula atraviese una barrera de potencial, mientras que  $P_D$  es la probabilidad de que la partícula esté a la derecha del potencial, lo que en esencia es lo mismo.

### 2.2. Dependencia de K con N

Según las ecuaciones teóricas del coeficiente de transmisión este no debería de variar con el tamaño del sistema. En la Figura 1 se puede observar esta variación para  $\lambda = 0,5$  y  $\lambda = 0,7$ . Se ve que la variación es pequeña y no sigue ninguna tendencia, sino que se debe a la aleatoriedad de la medición.

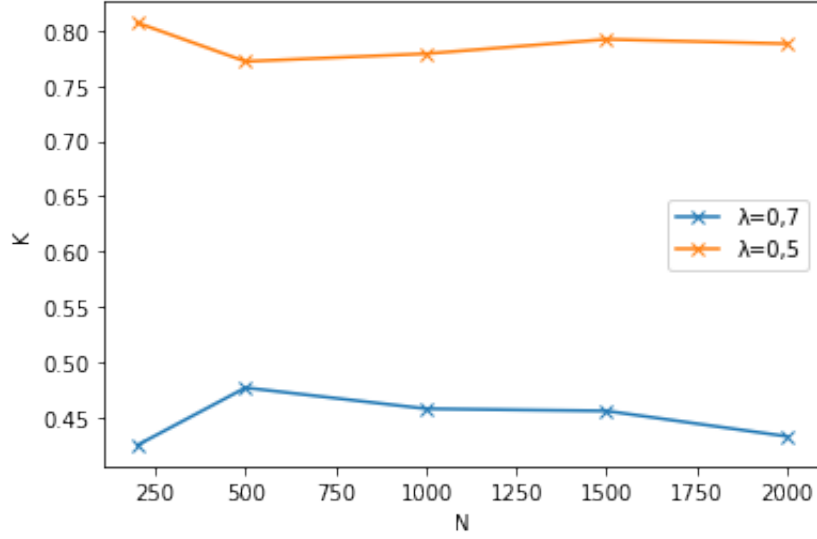


Figura 1: Coeficiente de transmisión al variar el tamaño del sistema

### 2.3. Dependencia de K con V

En este caso se ha estudiado la dependencia del coeficiente de transmisión con el tamaño de la barrera de potencial, lo que viene determinado por  $\lambda$ . Como se puede observar en la Figura 2, el coeficiente disminuye, hasta que  $\lambda = 1$  a partir del cual la transmisión es nula. También está representado el coeficiente teórico, el cual sigue una tendencia descendente parecida, pero tiene también una variación sinusoidal, que no se aprecia en los datos experimentales. Esta diferencia se puede deber a que el sistema experimental tiene un tamaño limitado, encontrándose barreras de potencial infinito en  $x = 0$  y  $x = N$ , mientras que en el sistema que se ha utilizado para el cálculo teórico esto no sucede. También se puede deber al hecho de que el sistema sea discreto. Para  $\lambda > 1$  si que coinciden.

### 2.4. Valores esperados

A continuación se ha estudiado el valor esperado de la posición, momento, energía y energía cinética del sistema. Se ha diferenciado el caso en el que la partícula evoluciona sin detector y los casos en los que la partícula es detectada y no detectada, dando lugar a un colapso en la función de onda. El colapso se ha implementado en el caso de que la partícula no se detecta igualando a cero la probabilidad de que la onda estuviese en la zona del detector y normalizando de nuevo el resto de la función de onda para repartir esa probabilidad. En el caso de que la partícula se detecta se ha realizado el proceso análogo pero esta vez igualando a uno la probabilidad de que la partícula estuviese en la zona del detector. En todos los cálculos se ha tomado  $\lambda = 0,5$  y  $N = 500$ , además se ha dejado evolucionar el sistema 1000 iteraciones.

En la Figura 3 se puede observar como evoluciona el valor esperado de la posición a lo largo del tiempo. Hasta la medición la evolución es la misma para las tres configuraciones. Cuando no hay colapso (verde) la función es simétrica respecto del máximo de la posición, que se da cuando la

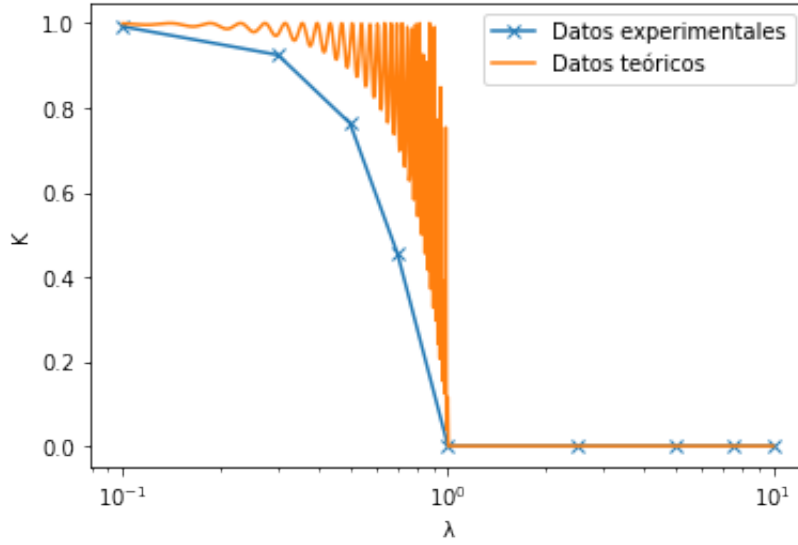


Figura 2: Dependencia de  $K$  con  $V$  experimental y teórico

partícula se refleja en la pared en  $N = 500$ . Sin embargo, cuando se realiza la medida y no se detecta la partícula (naranja), la posición media vuelve a antes de la barrera de potencial en  $N = 200$  de forma abrupta y luego sigue avanzando aumentando su posición. Por otro lado, cuando la partícula es detectada (azul), el valor esperado aumenta de forma discontinua hasta encontrarse en la zona del detector y disminuye debido a que se refleja en la pared del final del sistema.

En la Figura 4 se observa el valor esperado del momento. Este resultado es coherente con el anterior, en el caso sin detector (verde) se observa que el momento medio se hace negativo al ir en dirección negativa en el eje  $x$ . Además se detecta una disminución en el momento cuando la partícula está recorriendo la barrera de potencial. Al realizar la medida sin detectar (naranja) la partícula se observa también para tiempo a partir de  $n = 800$  también una disminución en el momento que se produce cuando la partícula vuelve a recorrer la barrera de potencial. Cuando la partícula es detectada (azul) se observa un máximo en el valor esperado del momento cuando la partícula está reflejándose en la pared.

En la Figura 5 se observa el valor esperado de la energía cinética. En el caso en que no se realiza la medición (verde) se ven dos mínimos que se corresponden a cuando la partícula recorre la barrera de potencial. Por otro lado, cuando la función de onda colapsa y no se detecta la partícula (naranja) se tiene un máximo en la energía cinética en la región en la que sin detección es mínima. Además, cuando la partícula es detectada (azul) la gráfica es muy parecida y se observa también un mínimo en la energía.

Por último, en la Figura 6 se observa el valor esperado de la energía total. En todos los casos este es constante, como era de esperar. La pequeña fluctuación que se ve cuando la partícula se somete a la detección probablemente se deba a que la derivada es numérica y la discontinuidad da lugar a eso.

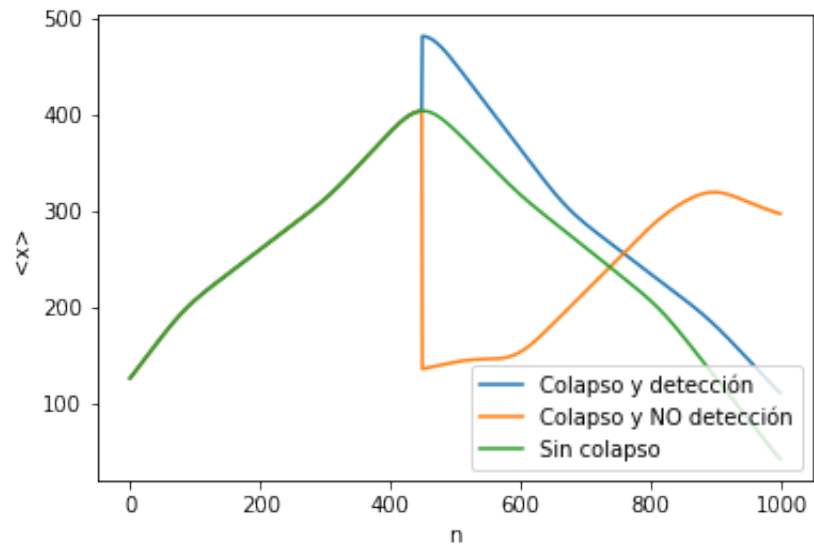


Figura 3: Valor esperado de la posición en función del tiempo

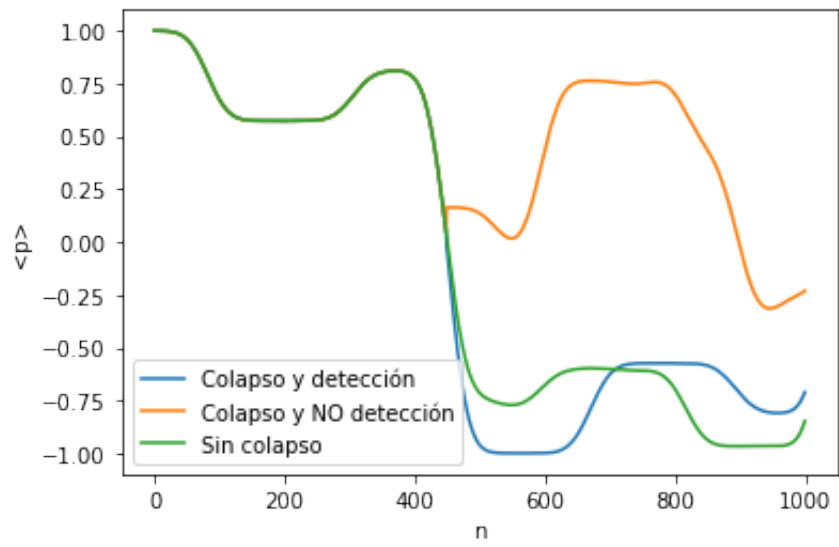


Figura 4: Valor esperado del momento en función del tiempo

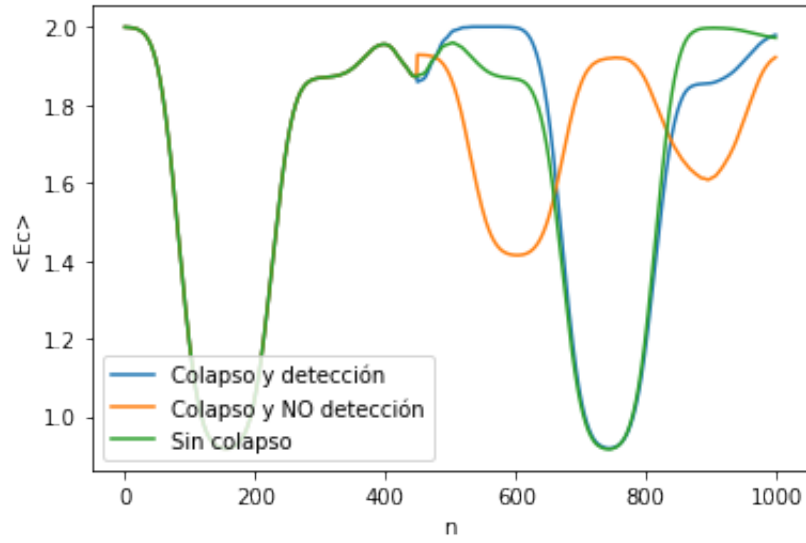


Figura 5: Valor esperado de la energía cinética en función del tiempo

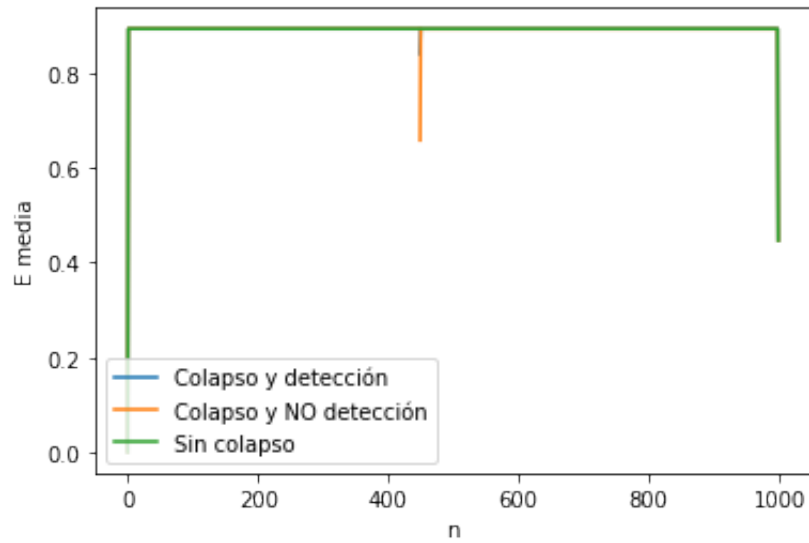


Figura 6: Valor esperado de la energía en función del tiempo

### 3. Conclusiones

En primer lugar, al estudiarse la relación entre el coeficiente de transmisión y la probabilidad de que la onda estuviese a la derecha del potencial se ha observado su parecido, concluyéndose que tiene sentido físico que estos valores fuesen los mismos.

También se ha estudiado la dependencia del coeficiente de transmisión con el número de partículas y se ha visto que no había ninguna tendencia concreta y que estos valores eran parecidos, con ciertas fluctuaciones debidas a la aleatoriedad del método.

Por otro lado, se ha estudiado la dependencia del coeficiente de transmisión con el potencial, y se ha observado una tendencia similar a la teórica, aunque con ciertas diferencias probablemente debidas a que el sistema que se ha estudiado es finito y no cumple las condiciones exactas que el coeficiente calculado teóricamente.

Por último, se ha estudiado el comportamiento los valores esperados de distintos observables, tanto cuando no se realizaba la medida y cuando la partícula era detectada o no. Se han observado las variaciones en estos observables generadas por el colapso de la función de onda al estado medido, viéndose discontinuidades producidas por este proceso físico, como era de esperar.

## Referencias

- [1] Wikipedia método de Crank-Nicholson
- [2] Wikipedia Transmission coefficient
- [3] Wikipedia Operador (Mecánica cuántica)
- [4] Wikipedia Energy in Quantum Mechanics
- [5] Wikipedia Derivación numérica
- [6] Wikipedia Wave Function Collapse