



# UNIVERSIDAD DE GRANADA

**GRADO EN FÍSICA**

**Física Computacional**

**Voluntario 2: Ecuación de Schrödingr. Coeficiente de  
Transmisión**

José Álvarez García  
2023/2024

## Índice

<b>1. Introducción</b>	<b>2</b>
1.1. Marco teórico. . . . .	2
1.2. Simulación . . . . .	3
<b>2. Resultados</b>	<b>4</b>
2.1. Comparación $K$ con $P_D(nd)$ . . . . .	4
2.2. $K$ en función de los parámetros $N$ y $\lambda$ , comparación teórica . . . . .	4
<b>3. Varias barreras de Potencial</b>	<b>6</b>
<b>4. Conclusión</b>	<b>7</b>
<b>5. Apéndices</b>	<b>8</b>
5.1. Códigos . . . . .	8
<b>6. Bibliografía</b>	<b>9</b>

## Resumen

## 1. Introducción

Todos los programas utilizados para la realización del trabajo se encuentran en el repositorio [JoseAlvarez-Compu2324/Voluntario2](https://github.com/JoseAlvarez-Compu2324/Voluntario2) de GitHub.

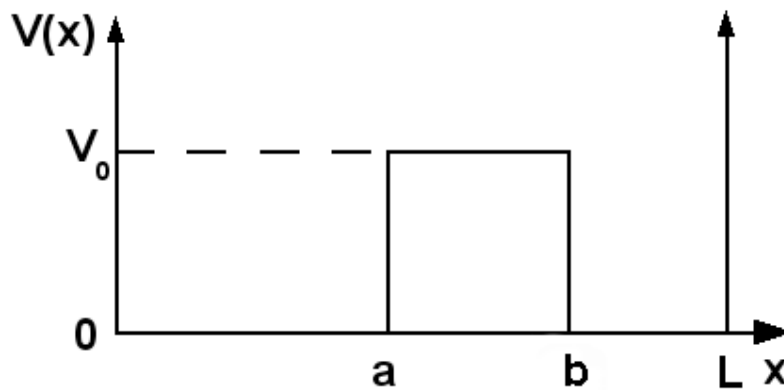
### 1.1. Marco teórico.

Estudiaremos en este informe uno de los problemas más conocidos en el estudio de la función de onda cuántica, por medio de la ecuación de Schrödinger.

En este escenario se tiene una partícula caracterizada por la función de onda  $\Phi(x)$  encerrada en un recinto unidimensional con un potencial de la forma:

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{si } x < 0 \\ 0 & \text{si } 0 < x < a \\ V_0 & \text{si } a \leq x \leq b \\ 0 & \text{si } L > x > b \\ \infty & \text{si } x > L \end{cases} \quad (1)$$

Representado por la siguiente figura:



**Figura 1:** Barrera de Potencial

En el contexto de la física clásica si la energía de la partícula  $E < V_0$ , la partícula se reflejará con una probabilidad de 100 % y si  $E > V_0$  la partícula tendrá una probabilidad del 100 % de sobrepasar la barrera de potencial y acceder a la región  $b < x < L$ .

En Física Cuántica esto puede cambiar, obteniendo una probabilidad no nula de atravesar la barrera de potencial y acceder a la región  $b < x < L$  aunque la energía sea  $E < V_0$ . A este fenómeno se le conoce como **tunelamiento cuántico**.

Estudiaremos en este informe el llamado coeficiente de transmisión **K** que es la razón del flujo de probabilidad de que la partícula sea transmitida a través de la barrera de potencial entre el flujo de probabilidad incidente sobre la barrera.

Representa la probabilidad de que una partícula de energía  $E$  atraviese la barrera de altura  $V_0$ . En el límite clásico valdrá 1 si  $E > V_0$  y 0 si  $E < V_0$ .

Existe otro coeficiente, recíproco a  $K$  llamado coeficiente de Reflexión  $R$  y se cumple que  $K + R = 1$

La norma al cuadrado de la función de onda nos dice la probabilidad de encontrar a la partícula en una cierta región del espacio:

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

## 1.2. Simulación

Debido a las limitaciones de la computación, no podemos estudiar la función de onda en todo el espacio; lo haremos en una región  $[0, N]$  que representará nuestro espacio. El espacio está discretizado con paso espacial  $h = 1$ , por lo que a mayor  $N$ , mayor número de divisiones espaciales. Para garantizar que nos mantenemos en esta región, forzamos  $V(0) = V(N) = \infty$ , de modo que la partícula quede confinada.

Generaremos la barrera de potencial que estará centrada en nuestro sistema, tendrá un ancho de  $\frac{N}{5}$  y su altura vendrá dada por:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } 0 < x < \frac{2N}{5} \\ V_0 = \lambda k_0^2 & \text{si } \frac{2N}{5} \leq x \leq \frac{3N}{5} \\ 0 & \text{si } \frac{3N}{5} < x < N \end{cases} \quad (3)$$

Donde:

- $k_0 = \frac{2\pi n_{\text{ciclos}}}{N}$ : Control sobre el número de oscilaciones completas.
- $\lambda$ : Parámetro que controla la altura del potencial, es la relación entre la altura del potencial y la energía de la partícula.

En nuestro caso, para una función de onda discreta la probabilidad de encontrar a la partícula en una cierta región del retículo espacial será:

$$P\{(x_1, x_2)\} = \sum_{i=x_1}^{x_2} |\Phi_{i,n}|^2 \quad (4)$$

A la derecha de la barrera de potencial colocaremos un detector de ancho  $\frac{2N}{5}$  teniendo en cuenta que la probabilidad de detectar la partícula a la derecha pasado un tiempo  $n$  es  $P_D(n) = \sum_{i=3N/5}^N |\Phi_{i,n}|^2$ , donde  $N$  es el número de divisiones.

Se realiza una medición de la probabilidad  $P_D$  en un tiempo determinado, este tiempo se calcula como el tiempo para el cual se maximiza por primera vez esta probabilidad, lo llamaremos  $n_D$ .

Tras realizar el experimento un número suficientemente grande de veces ( $m$  veces), el coeficiente de transmisión se calcula como  $K = \frac{m_T}{m}$ , siendo  $m_T$  el número de veces que se ha detectado la partícula a la derecha de la barrera.

Puesto que la obtención del coeficiente de transmisión se realiza mediante procesos estadísticos, utilizaremos un número de lanzamientos  $m = 10^3$  para que los resultados sean representativos.

Generamos la dinámica de la partícula mediante su función de onda  $\Phi(x)$

## 2. Resultados

### 2.1. Comparación $K$ con $P_D(nd)$

Como ya hemos explicado anteriormente, el momento en que se mide la probabilidad de encontrar la partícula a la derecha del potencial  $P_D(t)$  será el instante para el cual se maximiza por primera vez esta probabilidad  $t = n_D$ .

Compararemos el coeficiente de transmisión  $K$  con este valor de la probabilidad en el instante de la medición para varios casos obteniendo los resultados se recogen en la tabla 1:

Se observa una clara relación entre  $K$  y  $P_D(n_D)$ , siendo estos cercanos entre si en todos los casos.

Destacamos el caso en el que  $\lambda = 0,1$  y  $N = 1000$  en que todas las partículas lanzadas se detectan al otro lado de la barrera de potencial, ya que el potencial es muy pequeño,  $K=1$  y pese a que la probabilidad  $P_D(n_D)$  es muy cercana a este valor no es exactamente 1, esto se debe a que, aunque la partícula se detecte en el lado derecho hay una probabilidad no nula de encontrarla en otras regiones.

Esto se explica teniendo en cuenta que la partícula está deslocalizada en el espacio por su naturaleza cuántica aunque a la hora de medir, la función de onda colapsa en un único estado de posición, con probabilidad de prácticamente el 100 % de encontrarse al otro lado de la barrera de potencial.

Para el caso de  $\lambda = \{5, 10\}$  en el que  $K=0$ , la probabilidad es extremadamente baja pero no nula. Se podría dar el caso en que alguna partícula atravesase la barrera si se lanzasen las suficientes partículas.

En los casos en los que  $\lambda = \{0,3, 1\}$  observamos el fenómeno previamente mencionado de **Efecto túnel o Tunelamiento cuántico** en el que solo unas pocas partículas son detectadas tras la barrera.

Nuestro método para escoger el tiempo de medida  $t = n_D$  es muy acertado ya que aseguramos que el momento donde "fotografiamos" a la partícula será el momento en el que tenemos más probabilidad de encontrarla en la región de interés.

$K$	0.467	0.467	0.733	0.133	0.933	0.968	1.0	0.333	0.067	0.0	0.0
$P_D(n_D)$	0.547	0.287	0.614	0.091	0.927	0.938	0.838	0.393	0.013	$8 \cdot 10^{-5}$	$3 \cdot 10^{-7}$
$\lambda$	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.1	0.3	1	5	10
$N$	500	1000	2000	5000	10000	20000	1000	1000	1000	1000	1000

**Tabla 1:** Comparación de  $K$  con  $P_D(n_D)$  en función de parámetros  $N$  y  $\lambda$

### 2.2. $K$ en función de los parámetros $N$ y $\lambda$ , comparación teórica

A continuación se estudiará la posible dependencia entre el número de subdivisiones  $N$  y el coeficiente de transmisión. Durante este apartado,  $nciclos$  dependerá de  $N$  en la forma  $nciclos = \frac{N}{10}$ , lo que asegura que el potencial siempre tendrá la misma altura aunque  $N$  cambie.

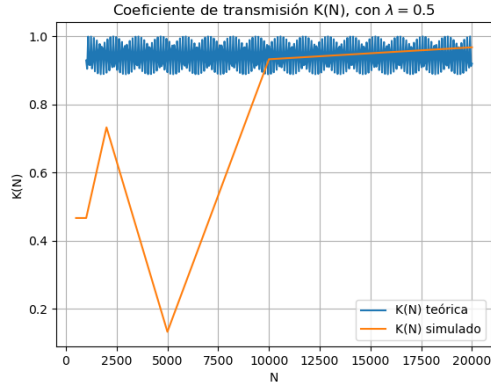
El valor teórico del coeficiente de transmisión, el cual será utilizado para comparar los resultados, en función de nuestros parámetros de control es:

$$K(\lambda, nciclos) = \frac{4(\lambda - 1)}{4(\lambda - 1) + \lambda^2 \sinh^2\left(\frac{2\pi nciclos \sqrt{\lambda - 1}}{5}\right)} \quad \text{para } \lambda > 1 \quad (5)$$

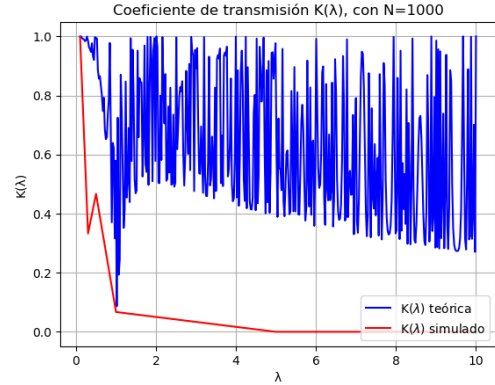
$$K(\lambda, nciclos) = \frac{4(1 - \lambda)}{4(1 - \lambda) + \lambda^2 \sin^2 \left( \frac{2\pi nciclos \sqrt{1 - \lambda}}{5} \right)} \quad \text{para } \lambda < 1 \quad (6)$$

donde  $nciclos = \frac{N}{10}$

Se recoge la comparación en la siguiente gráfica:



**(a)** Coeficiente transmisión en función de  $N$  con  $\lambda = 0,5$



**(b)** Coeficiente transmisión en función de  $\lambda$  con  $N=1000$

**Figura 2:** Coeficiente de transmisión  $K$  en función de los parámetros  $N$  y  $\lambda$

En ambos los valores de  $K$  de la simulación se asemejan en parte a los obtenidos teóricamente

En la primera gráfica vemos como se asemeja más a los resultados teóricos cuando aumentamos  $N$ , y por tanto el número de ciclos.

Esto puede deberse a que el espacio es un medio continuo pero estamos trabajando con un espacio discreto. La discretización del espacio influye en nuestros resultados empeorándolos, pero un mayor número de subdivisiones nos aporta una discretización más fina, acercándonos más a un medio continuo.

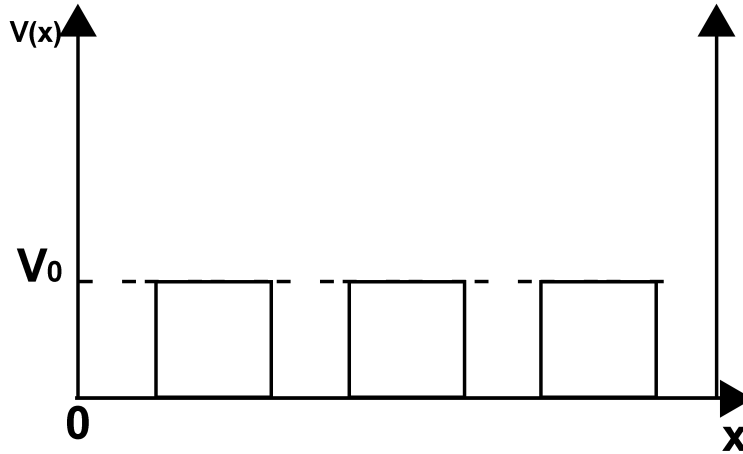
En la segunda gráfica se aprecia que, tal y como predice la teoría para valores  $\lambda < 1$  (energía de la partícula mayor que la altura de la barrera), el coeficiente de transmisión tiene valores cercanos a 1 es decir, la partícula tiene una probabilidad de atravesar la barrera cercana al 100 %. Cuando  $\lambda \approx 1$ , la probabilidad de que atraviese la barrera decae rápidamente y para  $\lambda > 1$  (energía de la partícula menor que la barrera de potencial), el coeficiente de transmisión toma valores muy pequeños pero no exactamente 0, lo cual indica que en este caso es muy poco probable que la partícula atraviese la barrera.

Un fenómeno interesante son las oscilaciones de  $K_{teórica}$  que no se aprecian en los resultados simulados. Este fenómeno se conoce como resonancia, y es que para determinados valores concretos de la energía de la partícula con respecto a la barrera de potencial, a pesar de que  $\lambda > 1$ , la probabilidad de que la partícula atraviese la barrera puede llegar a ser 1.

Los picos en la probabilidad son muy estrecho lo cual justifica el porqué no los apreciamos en los resultados simulados: sería necesario un gran muestreo para poder captar este fenómeno.

### 3. Varias barreras de Potencial

En este apartado tendremos en cuenta un número mayor de barreras de potencial, equiespaciadas entre si y con el mismo alto y ancho, tal y como muestra la siguiente figura:



**Figura 3:** Barrera de Potencial

Nuestro objetivo será calcular el coeficiente de transmisión  $K$  en función del número total de barreras  $B$ .

Trabajaremos de igual forma que en los apartados anteriores, esta vez la variable  $x$  se multiplicará por  $B$ , llegando entonces todo el retículo espacia hasta  $B \cdot N$

Colocaremos las barreras de potencial centradas en  $N/2 + b \cdot N$  donde  $b$  toma valores desde 0 hasta  $B - 1$ , estas barreras tendrán anchura  $N/5$ . Se calcula la probabilidad de que la partícula se encuentre en la región entre  $3N/5 + (B - 1)N$  y  $N$

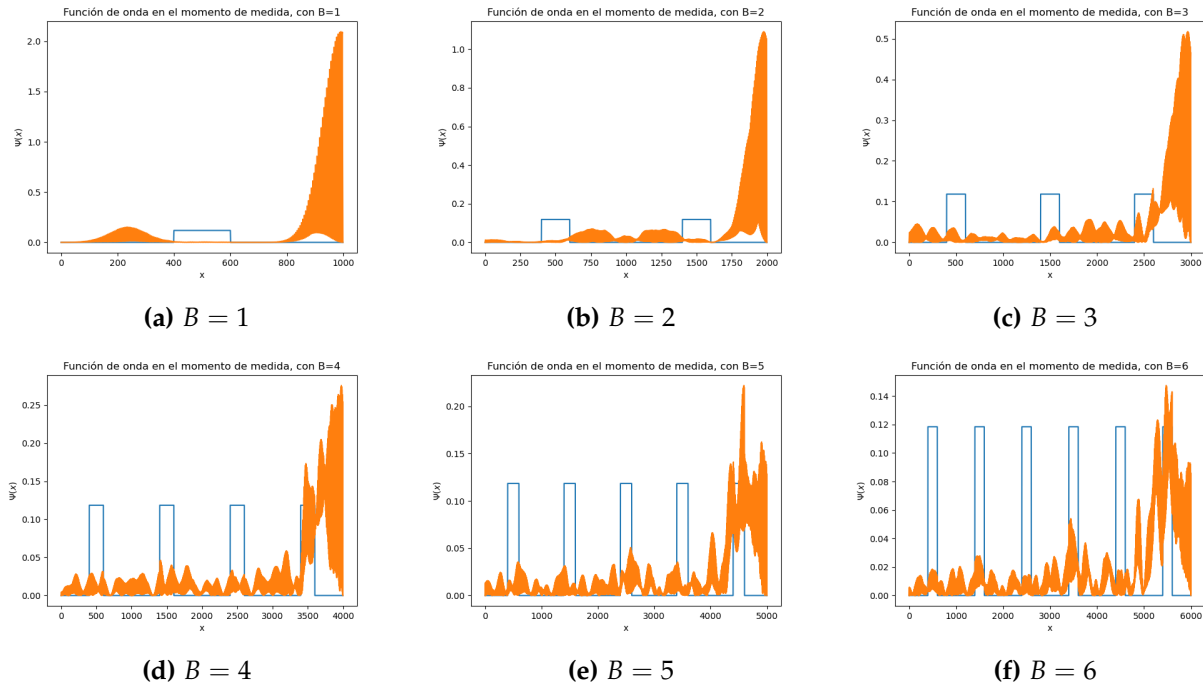
La simulación se realiza para  $N = 1000$  y  $\lambda = 0,3$ . Esta vez, el tiempo de la medida se ha escogido a ojo tras ensayo y error, ya que el método utilizado anteriormente no ofrecía resultados satisfactorios.

Se obtienen los siguientes resultados:

B	1	2	3	4	5	6
K	0.933	0.733	0.667	0.6	0.467	0.2

Como se sospechaba, al aumentar el número de barreras de potencial, el coeficiente de transmisión  $K$  disminuye notoriamente ya que la función de onda deberá superar estas barreras hasta ser detectada, decayendo está y reduciendo así su probabilidad de encontrarse en la región de estudio.

Las siguientes gráficas muestran la función de onda en el momento de la medida para diferentes valores de  $B$ :



**Figura 4:** Función de onda en el instante de medida junto al potencial para diferentes valores de  $B$

## 4. Conclusión

El algoritmo usado para el cálculo del coeficiente de transmisión arroja resultados que concuerdan satisfactoriamente con los valores teóricos. Además del estudio hemos podido obtener las siguientes conclusiones:

- Debido a las limitaciones de la computación,  $N$  afecta a los resultados obtenidos en el coeficiente de transmisión comparado con el teórico. Para valores bajos de  $N$ , los resultados empeoran notoriamente puesto que estamos considerando un medio continuo como discreto, y si las particiones son muy grandes estaremos teniendo una pérdida de información. Cuando  $N$  es lo suficientemente grande (la partición es fina) los resultados se estabilizan y la influencia de  $N$  se reduce. Un  $N \gg 1$  da resultados extremadamente precisos pero el coste computacional sería inabordable.
- Hemos podido establecer la relación entre el coeficiente de transmisión para distintas alturas de la barrera de potencial, obteniendo resultados similares a los establecidos por la teoría. Sin embargo, las limitaciones con respecto al tamaño de  $N$  nos impiden obtener experimentalmente pruebas del fenómeno de resonancia. Esta condición especial se da cuando la longitud de la barrera y la energía de la partícula están en una relación tal que las ondas de la función de onda en la barrera interfieren constructivamente, fruto del carácter ondulatorio de las partículas. En otras palabras, la partícula "resuena" dentro de la barrera, lo que aumenta su probabilidad de atravesarla.
- Un resultado notorio es que para  $\lambda = 10$  hemos obtenido  $K = 0,00$  aunque la teoría nos dice que esto no es así. Este resultado se obtiene puesto que  $K$  es extremadamente pequeño y la precisión de nuestro sistema no alcanza la resolución necesaria para apreciar los primeros dígitos no nulos del coeficiente de transmisión para este caso.



## 5. Apéndices

### 5.1. Códigos

Se explican a continuación cada uno de los códigos utilizados en este informe

- **"schrodinger.py"**

Este código es el principal del informe, con él se calcula el valor de la función de onda en cada instante y en cada punto además de calcular el coeficiente de transmisión **K**.

Los parámetros que podemos cambiar son: Número de divisiones en el retículo espacial:  $N$ .  $nciclos = \frac{N}{10}$  dependiente del número de subdivisiones. Altura del potencial:  $\lambda$ . Iteraciones temporales:  $T$ . Paso espacial:  $h$  (se omite). Número de partículas lanzadas  $m$ . Posición inicial de la onda (media):  $x0$ . Desviación del paquete Gaussiano:  $sigma$

El programa realiza los cálculos del tiempo de medida además de la evolución de la función de onda y devuelve por pantalla el valor del coeficiente de transmisión **K** en función de los parámetros  $\lambda$  y  $N$

- **"grafica\_K.py"**

Este código crea las gráficas del apartado 2.2.

Recoge los valores de la tabla 1 y los muestra en una gráfica acompañados de los valores teóricos calculados con las ecuaciones (5) y (6).

- **"schrodinger\_varias\_barras.py"**

Este código funcional igual que el principal solo que añadiendo la posibilidad de añadir varias barreras de potencial equidistantes entre si con un nuevo parámetro  $B$  para el análisis en el apartado 3.

El programa realiza los mismos cálculos que **"schrodinger.py"** con pequeños cambios para ajustar las barreras de potencial añadidas.

Se devuelve por pantalla el valor del coeficiente de transmisión **K** en función del parámetro  $B$ , además de una gráfica que representa la función de onda en el instante de medida junto con el potencial asociado.

---

## 6. Bibliografía

- [1] J. Bermejo Vega. *Física Computacional. Resolución de ecuaciones en derivadas parciales: la ecuación de Schrödinger*. 2024.
- [2] R. Eisberg, R. M. y Resnick. *Física cuántica: átomos, moléculas, sólidos, núcleos y partículas*. Limusa, 2002.
- [3] Z. Ficek. Problems and solutions in quantum physics. crc press. problem 9.1, pp. 75-79.