# Física Quàntica I: Entrega 7

**Laura Domingo (1420968) i Nil Ponsa (1264895)**

January 22, 2020

**Abstract**

En aquest document volem presentar l'estudi d'una funció d'ona representant una gaussiana i també una funció misteriosa, donada separadament en un txt. En aquesta part de l'entrega s'hi podan trobar les respostes escrites i certes imatges. Tant mateix, una altra part de l'entrega és el pròpi codi i certs fitxers mp4 que es trobaran adjunts al document d'entrega.

# 1 Qüestió 1:

**Per a simular el procés que estem estudiant necessitem discretitzar l'espai, el temps i les energies en increments dx; dt; dE respectivament. Utilitzeu els resultats teòrics pel pou infinit per donar la diferència d'energies més petita en l'espectre i comproveu que l'increment dE escollit en la simulació és "substancialment"menor que aquest valor. Doneu també una estimació del temps t que hauria de córrer la simulació perquè sigui apreciable l'error en l'estimació del valor real de l'energia.**
Primer, mirem teòricament el valor de l'energia que surt per un $\Delta E$. Savem que l'expressió vé donada per

$$\Delta E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2}(n+1)^2 - n^2) = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2}(2n+1) \tag{1}$$

El mínim que pot prendre aquesta equació és quan $n = 0$ i aleshores tenim aquesta expressió:

$$\Delta E_{min} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} = \frac{(3.14)^2 (6.62 * 10^{-16} eVs)^2}{(2 * 9.1 * 10^{-31} Kg)(12 * 10^{-9} m)^2} = 0.0026 eV \tag{2}$$

Veiem doncs, que el valor predeterminat a la simulació és efectivament més petit que aquest. Perquè a la simulació sigui apreciable l'error, el temps t ha de ser prou gran com perquè es produeixi un desfasament de $\pi$. De fet doncs, t≈1/dE

# 2 Questió 2:

**Estudieu l'evolució temporal del paquet per a diferents valors de la patada (podeu fer una animació/gif). Compareu la velocitat de propagació del paquet amb valor tèoric de la partícula lliure. Segurament us haureu adonat que quan el paquet passa per les zones properes a les parets, el paquet perd la forma gaussiana i presenta una sèrie de "pics" periòdics. Com ho interpreteu físicament?**
Primer de tot hem agafat un valor de dt=0.09999 per estudiar l' impacte de totes les patades. Tot seguit hem anat incrementant el valor de T, és a dir, l' energia cinètica. Quan el paquet d'ones gaussià entra en contacte amb la paret dreta de la nostra caixa, que és un potencial infinit, les funcions d'ona que composen el paquet es reflexen totalment. Llavors estem en el cas, R=1 $\Leftrightarrow$ $J_{inc} = J_{ref}$. Òbviament, la part dreta del paquet d'ones interaccionarà primer amb la paret i existirà un corrent reflexat mentres encara entra un d'incident i es produïra el fenòmen d'interferència entre les ones que composen el paquet Hem calculat la velocitat del paquet d' ones per diversos valor de l' energia cinètica. Per T=5 eV obtenim $v = 26.93 \times 10^5 m/s$. Per T=10 eV, $v = 29.79 \times 10^5 m/s$ i per T=15 eV obtenim $v = 35.35 \times 10^5 m/s$. Pel que fa als valors teòrics de la velocitat d'un electró lliure, s' ha de tenir en compte que vindrien donats per la següent expressió:

$$v = \sqrt{\frac{2E}{m}} \tag{3}$$

S'obtenen els següents valors teòrics: Per T=5 eV, $v = 13.27 \times 10^5$ m/s ; per T=10 eV,$v = 18.76 \times 10^5$ m/s i finalment per T=15eV, $v = 22.98 \times 10^5$ m/s. Veiem que, tot i que són del mateix ordre, els valors experimentals són majors que els teòrics.

## 3 Questió 3:

**Quin problema apareix a la simulació si donem una patada molt grossa al paquet? Comproveu-ho amb el programa, doneu una explicació i proposeu una possible solució (no cal que la implementeu). Ara passem a estudiar l'efecte túnel. Comenceu fixant $V_0 > 0$ de manera que tenim una barrera dins del pou infinit.**

Quan l'enerfia amb la que donem la patada és prou gran, el nostre programa peta. Et ploteja una caixa buida. Això és perquè s'ha excedit el límit teòric que correspondria al potencial que s'hi ha aplicat. Veiem que el límit superior es pot veure en el txt que imprimeix el programa contenint-hi les energies. Per això mateix, una solució seria fer que el programa acceptés energies més grans que la del màxim que hem dit.

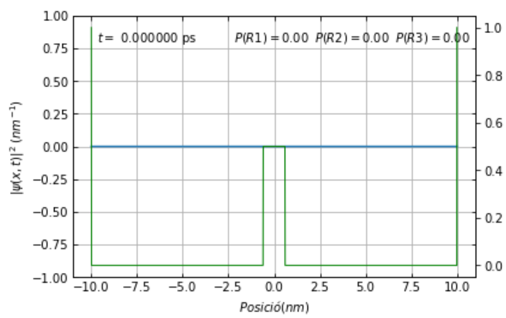


Figure 1: Representació amb T=150, $V_0 > 0$

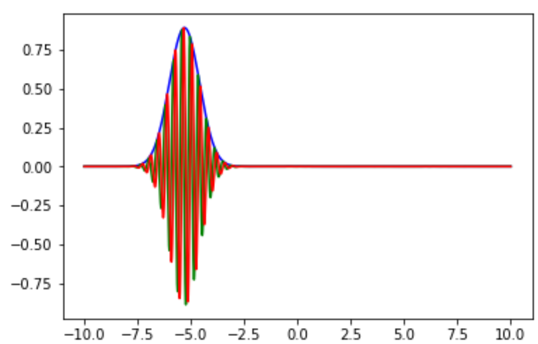

Figure 2: Representació amb T=10, $V_0 > 0$. Reconstrucció de la gaussiana en combinació lineal dels seus estats pròpis. Veiem que es veu bé. La simulació funciona correctament. A la pregunta 5, donem exemples de quan la funció peta, o està a punt de petar.

Quan T > 70 ja no podem parlar d' un paquet d' ona que evoluciona en el temps. Es forma una funció amb $|\psi(x,t)|^2 \approx 0$,, però no perquè realment sigui això, sinó perquè el nostra programa ja no fa bé la reconstrucció.

# 4 Questió 4:

**Per una determinada barrera, representeu l'animació per a tres valors de la patada, un per sota de $V_0$, un per $T \approx V_0$ i un per sobre de V0. Comenteu en cada cas què predomina (transmissió o reflexió) i si és el que esperaríeu. Per cadascun d'aquests casos estimeu numèricament el coeficient de transmissió i de reflexió, és a dir quina fracció del paquet es transmet/reflecteix. Per fer-ho, calculeu la probabilitat de trobar la partícula a cada costat de la barrera en funció del temps. Si la caixa fos infinitament gran, veuríem que la probabilitat d'estar a la dreta augmenta des de zero a un valor constant (corresponent a la fracció del paquet que s'ha transmès). Comenteu els resultats observats i compareu-los amb la fórmula utilitzada a classe pel coeficient de transmissió deduïda a partir dels corrents de probabilitat. A continuació fixeu $V_0 < 0$, de manera que tingueu un pou finit dins el pou infinit.**

En aquest apartat hem mantingut fixat el valor de $V_0$, el qual hem fixat a 8eV i hem anat variant l' energia cinètica. S' ha començat estudiant el cas $T = 2eV$, en el qual es veu que predomina la reflexió. L' animació generada per la simulació mostra que $|\psi(x,t)|^2$=0 darrere la barrera. Això no significa que el factor de transmissió sigui 0, sinó que $|\psi(x,t)|^2$ és tan proper a 0 que el programa no és capaç de mostrar-ho gràficament. Segurament, si s' optimitzés la simulació i ens premetés mostrar valors molt petits de $|\psi(x,t)|^2$, veuriem que la probabilitat de trobar la partícula darrere la barrera no és nul·la.
S' ha continuat amb el valor T=8.3eV. Veiem que ara la reflexió i la transmissió prdominen de forma igual.
Finalment s' ha estudiat el cas en què T=15eV. S' ha tornat a veure que la reflexió i la transmissió són aproximadament iguals. A la taula 1 es presenta l' estimació dels factors de transmissió i reflexió per les energies que just s' han comentat.

| Energia Cinètica(eV) | R (factor reflexió) | T (factor de transmissió) |
|---|---|---|
| 2 | 1 | 0 |
| 8.3 | 0.5 | 0.5 |
| 15 | 0.5 | 0.5 |

Table 1: Valors aproximats dels coeficients de transmissió i reflexió per diferents energies

| Energia Cinètica(eV) | R (factor reflexió) | T (factor de transmissió) |
|---|---|---|
| 2 | 1-2.67.$10^{-13}$ | 2.67.$10^{-13}$ |
| 8.3 | 0.41 | 0.59 |
| 15 | 0.09 | 0.91 |

Table 2: Valors teòrics dels coeficients de transmissió i reflexió per diferents energies

Com veiem, els valors teòrics i experimentals s'assemblen força, exceptuant el cas en què T=15 eV.

## 5 Questió 5:

**Repetiu la Qüestió 3 pel cas $V_0 < 0$.**
En el cas $V_0 < 0$, passa exàctament igual que en el cas $V_0 > 0$. Si l'energia cinètica és massa gran, aleshores el programa directament ja no representa la forma de la gausiana habitual. Amb el mateixos marges que els que hem vist a la pregunta 3.

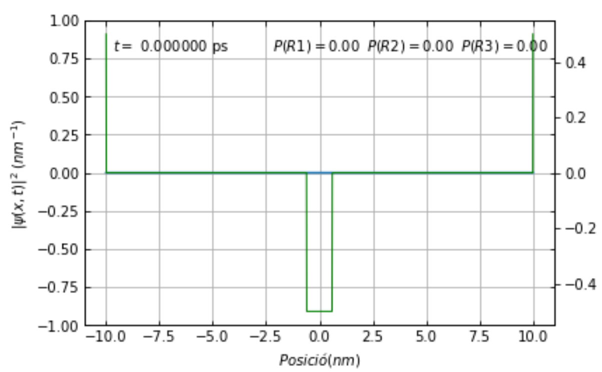


Figure 3: Representació amb T=150, cas $V_0 < 0$

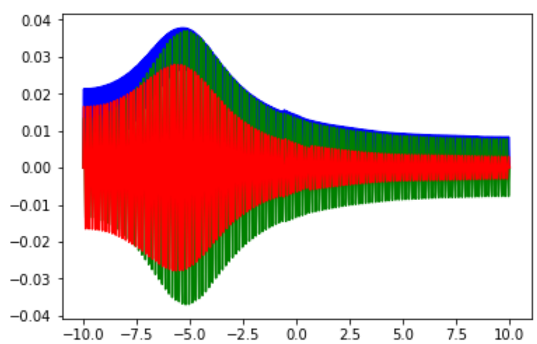

Figure 4: Representació de la recosntrucció de la gaussiana com a combinació dels estats pròpis quan T=70, cas límit de $V_0 < 0$. Aquest gràfic ens indica que si superem aquesta energia, el programa ja no pot fer una bona reconstrucció.

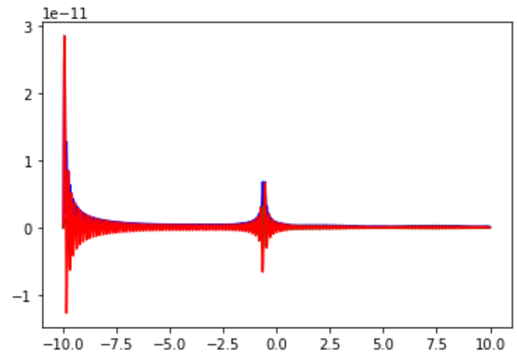


Figure 5: Representació de la recosntrucció de la gaussiana com a combinació dels estats pròpis quan T=150, cas límit de $V_0 < 0$. Veiem que ha petat.

# 6 Questió 6:

**Per a $V_0 = 10eV$,$L = 10.0$ nm, $l = 0.6$ nm i $N_x$ =1024, estudia el comportament de la funció d'ona $\phi$ donada en el $fitxer - funcio - ona - misteriosa.txt$. En aquest document trobareu els punts (x, $\phi$) per a t=0. Representeulos gràficament. Després feu l'evolució temporal de $\phi$ (podeu fer una animació/gif). Què observeu? Sabríeu donar una explicació?**

Una vegada havent incorporat les linies de codi corresponent al codi base, estudiem el mateix que estudiavem abans. Primer mirem la quantitat d'estats lligats que tenim dins el pou. Veiem que els estats lligats que tenim són 6.

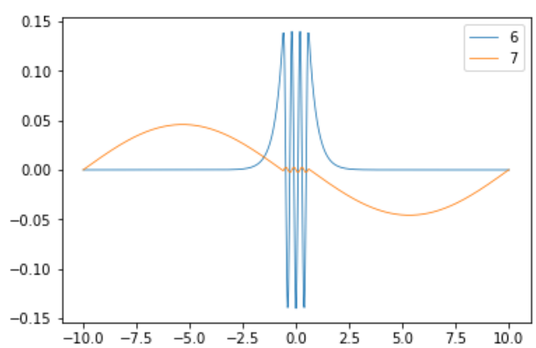


Figure 6: Estats lligats i el que està lliure a t=0

Després, fem que es reconstrueixi la nostra funció en estats pròpis d l'hamiltonià. En fer-ho ens queda:

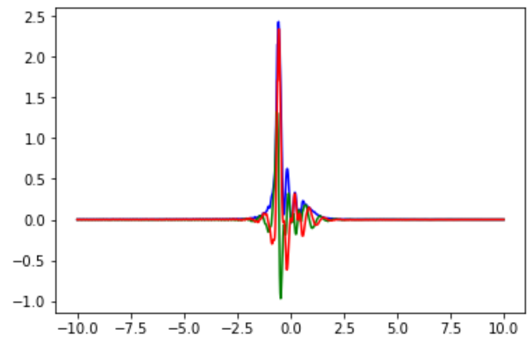


Figure 7: Reconstrucció de la funció misteriosa en funcions pròpies.a t=0

Una vegada s'introdueixi el kick, obrim el firxer FMs01.mp4 i podem veure que dins el pou és on tenim la major probabilitat de trobar la partícula. Això no ens sorprèn, doncs hi ha 6 estats lligats,i per tant, la probabilitat de trobar la funció dins el pou ha de ser bastant gran considerant que l'hem deixat anar des d'allà. Tant mateix, tenim un estat que no està lligat, i veiem que a mesura que el temps evoluciona, aquest comença a transitar per la caixa. Això fa que es formi el patró d'interferència que esperariem trobar quan una part de la funció xoca, i interfereix amb la que encara no ha xocat.En un temps prou gran veiem que la probabilitat de trobar la partícula a la dreta i a l'esquerra de la xarxa és igual. ( Amb certes fluctuacions)

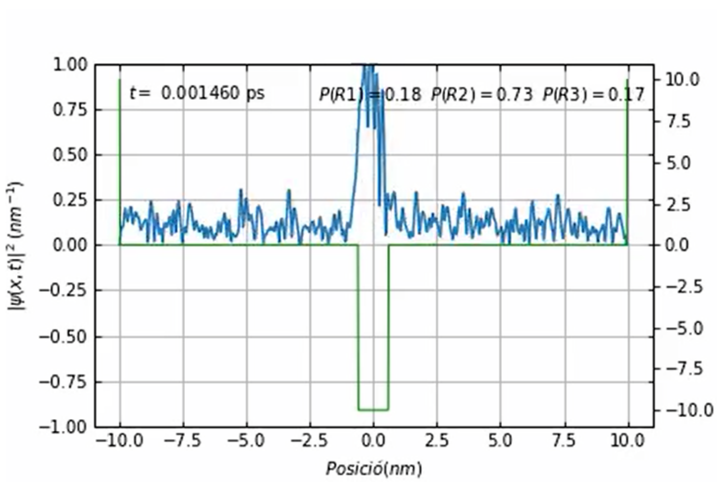


Figure 8: Després de deixar evolucionar el sistema una mica obtenim això. Veient que les probabilitats a cada banda són prou iguals.

## 7 Questió 7:

**Trieu un valor de potencial $V_0 < -0.5eV$. Quants estats confinats al pou hi ha? Compareu-ho amb el valor predit per la teoria donada a classe. Construïu una funció d'ona totalment confinada al pou. Comproveu-ho amb el programa.**
Posant els valors de $V_0 = -0.5$ $l = 0.6$, veiem que hi ha 1 estat confinat en el pou.
Vam veure a classe que

$$|V_0| > \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{8ma^2} \tag{4}$$

$$a > \frac{n\pi}{2}\sqrt{\frac{\hbar^2}{2mV_0}} \tag{5}$$

Per tant, fent servir tant l' expressió 4 com la 5 per els valors $V_0 = -0.5$ i $l = 0.6$ tindrem que $n < 7$, cosa que concorda amb els resultats experimentals.

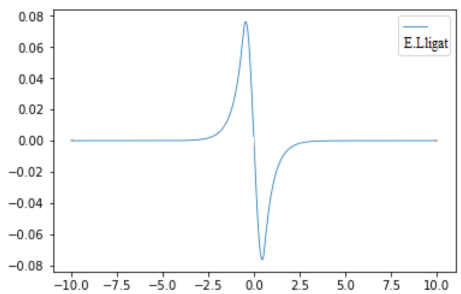


Figure 9: Representació de l'estat confinat al punt amb $l = 0.6$ , $V_0 < -0.5$, codicions imposades segons l'enunciat, i confinada tal i com voliem veure.

# 8 Questió 8:

**Considera un paquet gaussià que estigui centrat i no sobresurti massa del pou i doneu-li una petita patada. Com es comporta al llarg del temps? Sense canviar el potencial, construeix, a partir d'aquest paquet gaussià, una funció d'ona que no tingui cap component lligada al pou i estudieu la seva evolució. Explica com ho has fet i mostra amb el programa que, efectivament, és com esperes.** En aquest cas, hem fixat un potencial que es situa al valor de -1 i l'energia, que té un valor de T=1.1, supera una mica la barrera. D'aquesta manera aconseguim que a dins el pou hi hagi estats lligats i que a fora n'hi hagi que s'escapin. Aquests evolucionaran normalment, intereccionant entre si, cosa que explica els pics que es poden observar. Per fer-ho hem centrat la gaussiana al mig del pou i després hem fet que evolucioni normalment com en els altres apartats. Presentem un video mp4 (pregunta$8_t = 1.1, v = -1) adjuntonesveuclaramentelfenòmen$.
Hem construit una gaussiana amb $V_0 = 8eV$ i $T = 8.1$. En el primer frame del video, anomenat pregunta$8t = 1.1, v = -1.MP4$, ja veiem que la gaussiana perd la seva forma. També podem observar que van apareixent

# 9 Questió 9:

**Trobeu un cas com el de la qüestió anterior, i.e. que no tingui component lligada, però que tingui una probabilitat de presència important dins el pou. Podeu per exemple, fer el cas amb un sol estat lligat i utilitzar sàviament la seva simetria, o aplicar-li un kick (patada) al paquet de tal forma que la funció d'ona de partida sigui més ortogonal als estats lligats.**

# 10 Questions opcionals:

## 10.1 a)

Per $V_0 > 0$ haureu vist que quan la gaussiana s'apropa a la paret perd la forma de gaussiana. Tot i això, hi ha un moment en el qual recupera la forma original però es troba en la posició oposada de la caixa, és a dir $|\psi(x,t)| = |\psi(-x,0)|$. Calculeu aquest temps teòricament i a la simulació. NOTA: Jugueu amb el fet que les energies van com $n^2$. Escriviu la funció d'ona en la base pròpia del Hamiltonià i separeu les funcions d'ona simètriques de les antisimètriques.
Escrivim la funció amb l'evolució temporal de la següent manera:

$$\psi(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} e^{-iE_n t/\hbar} C_n \phi_n(x) \tag{6}$$

On $\phi_n(x)$ són les funcions pròpies i $E_n$ les corresponents energies pròpies. Aleshores, Imposem $\psi(x,t) = \psi(-x,0)$ tenint en compte que per n parell les funcions pròpies $\phi_n(x)$ són senars i per n senars són parelles obtenim la següent equació:

$$\psi(x,t)=\sum_{n=1}^{\infty}[C_{2n-1}\phi_{2n-1}(x)-C_{2n}\phi_{2n}(x)] \tag{7}$$

Per comparació i recordant que el quadrat d'un nombre parell és parell, i el d'un nombre senar segueix sent senar, obtenim el següent:

$$e^{-iE_nt/\hbar}=e^{-i\beta n^2t}=(-1)^{n+1}\rightarrow t=\pi/\beta \tag{8}$$

Sabent doncs que $\beta=\frac{\hbar\pi^2}{8mL^2}$, traiem que el t teòric és:

$$\boxed{t=\frac{8mL^2}{\hbar\pi}} \tag{9}$$

Tot i així difereix una mica del valor de la simulació, que es al voltant de 0.0014ps

## 10.2 b)

Per a una energia cinètica fixada (menor que la barrera), estudieu com varien les parts transmesa/reflectida si variem l'amplada de la barrera o si variem l'alçada de la barrera.
En aquesta part, ens haurem de basar en els fitxers mp4 adjunts. Doncs d'allà s'han extret totes les conclusions. Tots els casos han estat fets amb una energia cinètica T=3 Començem,

- Cas $l=0.6, V_0=5$ nom fitxer $opcionalb_[0.6,3,5]$: En aquest cas és clar el que passa. Com el potencial és bastant més gran que l'energia cinètica, no es transmet massa a la regió 3, es veuen unes petites fluctuacions però són despreciables. Pel que fa la regió 2, allà si que hi passa una part, encara que és reflectida totalment per la "segona" paret quan es troben a dins aquesta regió. Així doncs, podem dir que pràcticament tota la funció es troba a la primera regió

- Cas $l=0.6, V_0=4$, nom fitxer $opcionalb[0.6,3,4]$: En aquests paràmetres, la part d'na que passa a l'altra banda ja no és tant despreciable. Malgrat que al començament el valor és petit, aquest arriva fin a un no tant despreciable P(3)=0.1.

- Cas $l=0.6, V_0=3.5$, nom fitxer $opcionalb[0.6,3,3.5]$: En aquest cas, on l'energia està només una mica per sota del potencial, veiem (augmentant el temps de la simulació) que malgrat que la majoria segueix reflectint-se, la probabilitat de tobar l'ona a la Regió va augmentant fins a trobar valors de P(3)=0.4 versus el P(1)=0.57 de la regió 1.

- Cas $l=0.6, V_0=3.1$, nom fitxer $opcionalb[0.6,3,3.1]$:

  En aquest cas, evidentment ja passa bastanta part de primeres. La probabilitat de trobar la particula a l'altra banda de la caixa va augmentant fins que podem trobarla als 2 llocs per igual.

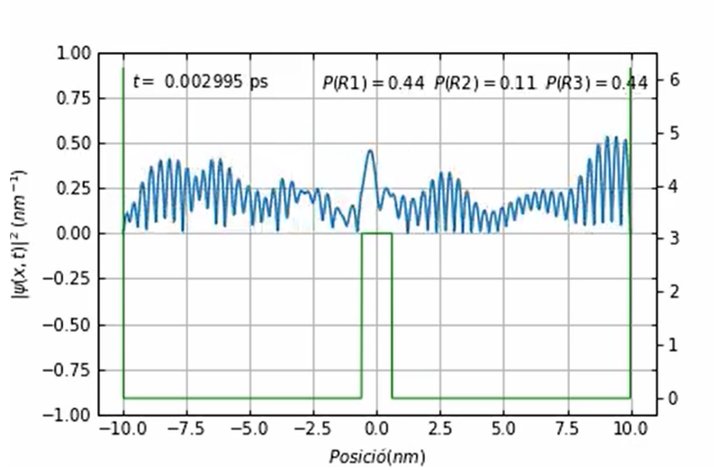


Figure 10: Representació de la nostra gaussiana en aquestes condicions [0.6,3,3.1]. Fixem-nos que les probabilitats de banda dreta i esquerra són idèntiques.

Si ara en comptes de mirar el potencial i també el deixem fixat (encara amb un valor superior al de l'energia cinètica), veiem el següent:

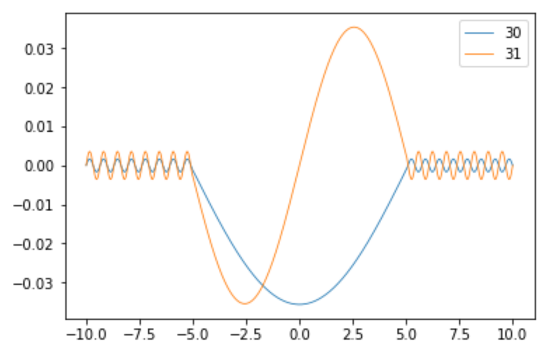


Figure 11: Representació del que tenim augmentant la barrera a l= 5

Es veuen algunes oscil.acions. Malgrat això després, consistentment en les imatges dels estats amb l=petites veiem que per molt que augmentem el potencial, les oscil.lacions dins la caixa desapareixen. Però augmenten (les de fora) conforme augmenta el potencial.

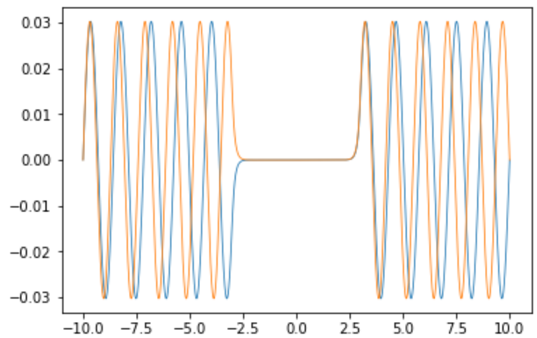


Figure 12: Representació del que tenim augmentant la barrera a l= 2.5