



Tunelaje Cuántico en Potenciales Graduales

Quantum Tunneling in Gradual Potentials

Herbert Galarza Cristian Gabriel , Orozco Duarte Rogelio , Roberto Romo Martínez 

Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Baja California. Apartado Postal 1880, 22800
Ensenada, México.

Autor de correspondencia: Romo Martínez Roberto, Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Baja California. Apartado Postal 1880, 22800 Ensenada, México. E-mail: romo@uabc.edu.mx.
ORCID: 0000-0002-9278-1013.

Recibido: 25 de septiembre del 2018 **Aceptado:** 06 de febrero del 2019 **Publicado:** 25 de abril del 2019

Resumen. - *Uno de los fenómenos paradigmáticos de la mecánica cuántica es sin duda el llamado efecto túnel, el cual se manifiesta como la posibilidad que tienen las partículas en la escala nanométrica de atravesar barreras de potencial. Este fenómeno, a pesar de ser poco intuitivo, es tan real que juega un papel prominente en la tecnología de nuestros tiempos y constituye el mecanismo dominante del transporte electrónico en nuevos conceptos de dispositivos nanoelectrónicos. En este trabajo se ilustra mediante mapas de la densidad electrónica, la distribución espacial y energética de los electrones que se propagan a través de barreras de potencial graduales, visualizando la naturaleza ondulatoria de los electrones y el fenómeno de tunelaje. En particular, se discute el efecto de utilizar barreras graduales en lugar de barreras rectangulares.*

Palabras clave: Efecto túnel; Tunelaje cuántico; Barreras graduales.

Abstract. - *One of the paradigmatic phenomena of quantum mechanics is undoubtedly the so-called tunnel effect, which manifests itself as the possibility of particles on the nanometer scale to traverse potential barriers. This phenomenon, although unintuitive, is so real that it plays a prominent role in current technology and constitutes the key mechanism of electronic transport in novel concepts of nanoelectronic devices. In this work, maps of electron density are used to illustrate the spatial and energetic distribution of electrons that propagates through gradual potential barriers, visualizing the wave nature of the electrons and the tunneling phenomenon. In particular, the effect of using gradual barriers rather than rectangular barriers is discussed.*

Keywords: Tunnel effect; Quantum tunneling; Smooth barriers.



1. Introducción

Los notables avances de las últimas décadas en las técnicas para explorar y manipular la materia a escalas nanométricas, ha traído como consecuencia nuevos conceptos de dispositivos electrónicos basados en efectos cuánticos [1]. Desde el trabajo seminal de Leo Esaki (Premio Nobel de Física) y colaboradores [2] se concibe tanto teórica como experimentalmente la posibilidad de diseñar y fabricar estructuras cuánticas artificiales en la escala nanométrica [3].

En estos sistemas, conocidos con el nombre genérico de *nanoestructuras* [4], el control del transporte de electrones resulta un aspecto crucial para aplicaciones tecnológicas [5]. En este contexto, se entiende por transporte electrónico, cualquier desplazamiento espacial de las densidades de probabilidad electrónica, ya sea de un sitio a otro dentro del sistema, o a través de éste. En todos estos procesos, el mecanismo dominante es el llamado *efecto túnel* o *tunelaje cuántico*.

Se trata de uno de los fenómenos más fascinantes y sorprendentes de la mecánica cuántica, el cual se refiere a la posibilidad que tienen las partículas pequeñas de atravesar “paredes” o regiones prohibidas por la física clásica. Esta propiedad de las partículas cuánticas no sólo rige el comportamiento de diversos fenómenos en la naturaleza, como los son, el decaimiento de núcleos radiactivos, el fenómeno de la emisión en frío, y los procesos de fusión en los núcleos de las estrellas [6], por mencionar algunos, sino que también ha sido el motor de grandes desarrollos tecnológicos, como el microscopio electrónico de barrido, diodo de tunelaje resonante, y una amplia variedad de componentes electrónicas que podemos encontrar en la mayoría de los dispositivos que nos rodean.

El tunelaje cuántico, al igual que otros fenómenos de la física cuántica son representados por

cantidades matemáticas complejas y no son fáciles de visualizar de manera simple. En este trabajo se tiene como propósito mostrar mediante representaciones gráficas que faciliten la visualización del tunelaje cuántico, los fenómenos básicos que ocurren en estructuras de barreras y pozos de potencial. Los ejemplos seleccionados permiten exhibir de manera clara la naturaleza ondulatoria del electrón al interactuar con barreras y pozos, distinguir entre el *tunelaje* y el *tunelaje resonante*, observar las regiones en las cuales es más probable encontrar al electrón, mostrar cómo pueden ser atrapados tanto por pozos como por barreras de potencial.

2. Metodología

La ecuación que rige el comportamiento del electrón en un medio descrito por un potencial $V(x)$ es la ecuación de Schrödinger,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x), \quad (1)$$

donde \hbar es la constante de Planck, m es la *masa efectiva* del electrón [7] y E su energía total. Esta ecuación se puede resolver analíticamente en un reducido número de potenciales $V(x)$, entre ellos tenemos por ejemplo los potenciales constantes por tramos (con perfiles abruptos como barreras y pozos rectangulares).

En el presente estudio se pretende estudiar tanto potenciales rectangulares como casos con potenciales no abruptos cuyos perfiles varíen gradualmente con la posición.

Estos últimos en general son extremadamente difíciles de resolver (si es que no imposibles) excepto en casos excepcionales (como el oscilador armónico y otros potenciales especiales), por lo que se requiere hacer algo para eludir esta dificultad técnica. Lo que se hará en el presente estudio es utilizar la *aproximación de escalón* en



el potencial $V(x)$, la cual se ilustra en la figura 1, y consiste en remplazar el potencial suave por un potencial escalonado.

Como el potencial escalonado toma valores constantes en cada subintervalo de la partición del intervalo $[a, b]$, la ecuación (1) tendría soluciones analíticas en cada escalón, las cuales, en el n -ésimo escalón, son combinaciones de exponenciales de la forma

$$\psi_n(x) = \alpha_n e^{ikx} + \beta_n e^{-ikx}, \quad (2)$$

donde $k = \sqrt{E - V(x)}/\hbar$, y puede ser real o imaginario. Los coeficientes α_n y β_n son constantes arbitrarias complejas, cuyos valores se pueden determinar aplicando las condiciones de frontera, las cuales consisten en que $\psi_n(x)$ y su derivada sean continuas en cada salto entre escalones consecutivos. Si $V(x)$ tiene una forma arbitraria en un cierto intervalo finito $a \leq x \leq b$, y es igual a cero para $x < a$ y $x > b$, las funciones de onda a la izquierda y a la derecha se pueden escribir respectivamente como

$$\psi_0(x) = e^{ikx} + r e^{-ikx} \quad (3)$$

y

$$\psi_{N+1}(x) = t e^{ikx}, \quad (4)$$

donde r es la amplitud de reflexión y t la de transmisión considerando la incidencia por la izquierda con amplitud uno. Al aplicar las condiciones de frontera se obtienen relaciones matriciales entre los coeficientes de escalones consecutivos,

$$\begin{bmatrix} \alpha_n \\ \beta_n \end{bmatrix} = A_n \begin{bmatrix} \alpha_{n-1} \\ \beta_{n-1} \end{bmatrix}, \quad (5)$$

Si se tienen N puntos de discontinuidad (*i.e.*, $N - 1$ escalones), la matriz que relaciona los coeficientes de la derecha con los de la izquierda es la *matriz de transferencia* del sistema, la cual es un producto iterado de matrices A_n , $M =$

$A_N A_{N-1} \cdots A_2 A_1$. Dicha relación matricial queda en la forma

$$\begin{bmatrix} \alpha_N \\ \beta_N \end{bmatrix} = M \begin{bmatrix} \alpha_0 \\ \beta_0 \end{bmatrix}, \quad (6)$$

donde $\alpha_0 = 1$, $\beta_0 = r$, $\alpha_N = t$, $\beta_N = 0$, siendo r y t las amplitudes de reflexión y de transmisión respectivamente, las cuales están dadas por

$$r = -\frac{m_{21}}{m_{22}}, \quad (7)$$

$$t = \frac{\det(M)}{m_{22}}, \quad (8)$$

donde m_{ij} son elementos de la matriz M .

Obteniendo los coeficientes r y t , es posible encontrar todas las constantes α_n y β_n en cada escalón, y utilizando recursivamente la ecuación (5) podemos obtener la función de onda electrónica $\psi_n(x, E)$ en cada escalón del potencial.

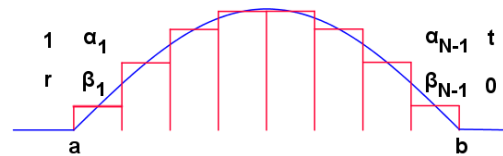


Figura 1. Aproximación de escalón para un potencial arbitrario. El número N se puede incrementar hasta obtener la precisión deseada.

3. Resultados

En esta sección se obtendrán mapas de la *densidad de probabilidad* $|\psi_n(x, E)|^2$ en el espacio de las posiciones y energías. Esta representación gráfica puede considerarse una *densidad local de estados* (DLE), ya que proporciona la localización espacial de los estados cuánticos del sistema. Se calculará para potenciales de barreras rectangulares y para potenciales de perfiles suaves, para visualizar los fenómenos del transporte electrónico mediante el tunelaje cuántico.



a. Barreras rectangulares

En la figura 2 se muestran mapas de DLE para dos barreras rectangulares, una alta y estrecha en la parte (a) y otra baja y ancha en la parte (b), sus correspondientes parámetros se indican en el pie de figura.

Observando el mapa de contorno de la figura 2 (a), lo más llamativo es sin duda el patrón de franjas que se encuentra a la izquierda de la barrera, alternando entre los colores amarillo y azul intenso. Estas son franjas de interferencia, las cuales permiten visualizar con claridad la naturaleza ondulatoria del electrón.

En esta región, de acuerdo a la ecuación (3), la función de onda electrónica es una combinación de dos términos exponenciales, la onda incidente e^{ikx} y la onda reflejada re^{-ikx} , cuya interferencia produce una onda estacionaria que se manifiesta como el patrón de franjas observado en la figura mencionada. Se puede apreciar que parte de las franjas invade la región izquierda de la barrera. De acuerdo a la mecánica clásica, ésta es una región prohibida para partículas materiales. Sin embargo, aquí se aprecia visualmente en este ejemplo que en la mecánica cuántica existe probabilidad de que el electrón se encuentre en la región de la barrera. Este efecto cuántico se conoce como el *fenómeno de penetración de barrera*, y queda exhibido muy claramente en esta representación gráfica.

A la derecha de la barrera, en lugar de una estructura de franjas aparece un fondo azul constante. La ausencia de franjas en esta región se debe a que la onda transmitida, dada por la ecuación (4), consta de sólo un término exponencial, de tal forma que, al tomar el módulo cuadrado de la función de onda transmitida, en lugar de interferencia, se obtiene para cada energía E un valor constante de la DLE, igual a $|t(k)|^2$, o sea, al coeficiente de transmisión.

Por otro lado, a energías de incidencia por encima de la barrera se observan cosas diferentes. En la figura 2 (a) se observa que en aproximadamente $E = 25 \text{ eV}$, una línea horizontal corta las franjas de interferencia que se encuentran en la región izquierda. Se trata de una condición de *resonancia* en la cual la probabilidad de transmisión se incrementa a su valor máximo (que es la unidad) a una energía específica llamada *energía de resonancia*. Para mayor claridad del efecto, se incluye en el mapa de contorno una curva de nivel de valor 0.98, intencionalmente muy cercano a la unidad (línea sólida).

La franja de la resonancia se prolonga hasta la parte derecha de la barrera en donde se aprecia un camino entre dos líneas paralelas definidas por la curva de nivel, un camino por el cual se transmiten los electrones de izquierda a derecha con probabilidad del orden de uno. La razón por la cual las franjas de interferencia del lado izquierdo “se borran” a la energía de resonancia, es porque cuando la transmisión es total, la reflexión es cero, $r = 0$.

En consecuencia, de acuerdo a la ecuación (3), sólo sobrevive uno de los dos términos exponenciales y por lo tanto no habrá interferencia a esa energía, y sin interferencia no hay franjas.

Otro detalle que se aprecia en la gráfica de la figura 2 (a) es una mancha roja intensa entre el borde de la barrera y la energía de resonancia. Esto muestra una acumulación de la densidad de probabilidad que indica que ahí la probabilidad de encontrar al electrón es más alta que en cualquier otro lugar.

Como la mancha roja se extiende en un rango de energías que incluye la resonancia y también energías fuera de resonancia, significa que de los electrones que acumulan ahí, algunos se transmiten a derecha con alta probabilidad, y otros se reflejan. Es interesante el hecho de que aún a energías superiores a la altura de la barrera ocurra reflexión.



Considérese ahora la barrera más ancha y de menor altura de la figura 2 (b). Se puede notar en el mapa de contorno que aparecen resonancias adicionales, todas ellas a energías arriba de la altura de la barrera.

La curva de nivel que se incluye es también de valor 0.98 (líneas sólidas) y exhibe con claridad las posiciones de dichas resonancias. A esas energías la transmisión alcanza valores máximos, los cuales se manifiestan como picos unitarios en la gráfica del coeficiente de transmisión, como podemos apreciarlo en la figura 2 (c).

Las regiones donde es más probable encontrar al electrón vemos que son diferentes a las del caso anterior en donde sólo se apreciaba una mancha roja, ahora vemos que estas manchas se distribuyen en la parte superior de la barrera, alineadas con las resonancias. Esto significa que los electrones que se transmiten con probabilidad alta a las energías de resonancia quedan atrapados momentáneamente por la barrera formando estados resonantes localizados en las regiones rojizas de la gráfica.

A pesar de tratarse de una barrera (potencial repulsivo), ésta tiene la posibilidad de atrapar electrones en los estados cuasi-ligados que se forman en la parte superior de la barrera. Esto no sucede en el mundo clásico con partículas macroscópicas, se trata de un efecto netamente cuántica.

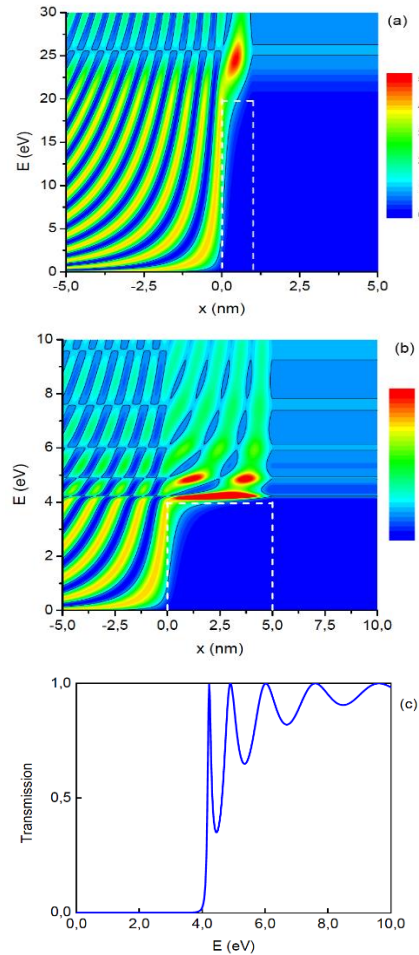


Figura 2. Mapas de la DLE para un potencial de una barrera rectangular de (a) altura $V=20$ eV, anchura $b=1.0$ nm, y (b) altura $V=4$ eV y anchura $b=5.0$ nm. Ambas barreras tienen la misma área (20 eV nm) y se muestran superpuestas sobre las gráficas (líneas claras discontinuas). Se indica en cada mapa una curva de nivel de valor 0.98 (líneas sólidas negras) (c). Coeficiente de transmisión para la barrera del caso (b).

3.2 Barreras graduales

Para analizar casos de barreras de potencial de perfiles suaves y sin discontinuidades abruptas como los potenciales de la subsección anterior, a continuación, se escoge una barrera en la que, por medio de la variación de un parámetro, podamos suavizar gradualmente una barrera rectangular abrupta hasta deformarla a un grado deseado. Esta posibilidad la ofrece la barrera de potencial con el perfil dado por la fórmula siguiente,



$$V(x) = 2 - 0.5V \tanh\left(\frac{|x - 0.5b| - 0.5b}{s}\right) \quad (9)$$

El parámetro de suavización aquí es s y posee unidades de distancia, el cual se expresa aquí en unidades de la anchura b de la barrera. Se usan los parámetros siguientes, $b = 5.0$ nm y $V = 4.0$ eV. Cuando s es muy pequeño, la barrera es similar a la barrera rectangular de la figura 2 (b), y conforme s se incrementa, las partes abruptas de la barrera se suavizan gradualmente. Como se trata de potenciales graduales, se utiliza la aproximación de escalón descrita en la figura 1. En éste y en los restantes ejemplos se usará $N = 200$. Para un grado de suavización pequeño con valor $s=0.05b$, en la figura 3 (a) se muestra el correspondiente mapa de DLE, donde se incluye el perfil de potencial superpuesto sobre la gráfica (líneas claras discontinuas). Como puede apreciarse, la barrera es aún algo abrupta, y por ende el mapa de DLE es muy parecido al de la figura 2 (b) de la barrera rectangular. Al incrementar el valor del parámetro a $s=0.1b$, la DLE empieza a experimentar cambios importantes como se nota en la figura 3 (b).

Desaparecen algunas curvas de nivel a la derecha de la barrera, lo cual indica que los valles entre los picos de resonancia empiezan a elevarse y acercarse a la unidad, tendiendo a desaparecer los picos de resonancia. En la figura 3 (c) el parámetro s se incrementó al valor de $0.2b$, y se ve claramente que la estructura de resonancias desaparece por completo, dando como resultado un mapa muy diferente al de la barrera rectangular inicial mostrado en la figura 2 (b), el cual exhibe mancha roja alargada en la parte izquierda de la barrera, mostrando la región de mayor densidad de probabilidad electrónica. Se trata de principalmente de electrones de reflexión, los cuales inciden en la barrera, penetran un poco en ella como se alcanza a apreciar, y se reflejan formando el patrón de franjas de interferencia a la izquierda de la barrera. La comparación de los

resultados con barreras abruptas vs barreras suaves nos muestra una diferencia dramática tanto en el mapa de DLE y sugiere que la suavidad del potencial de alguna manera inhibe la formación de las resonancias.

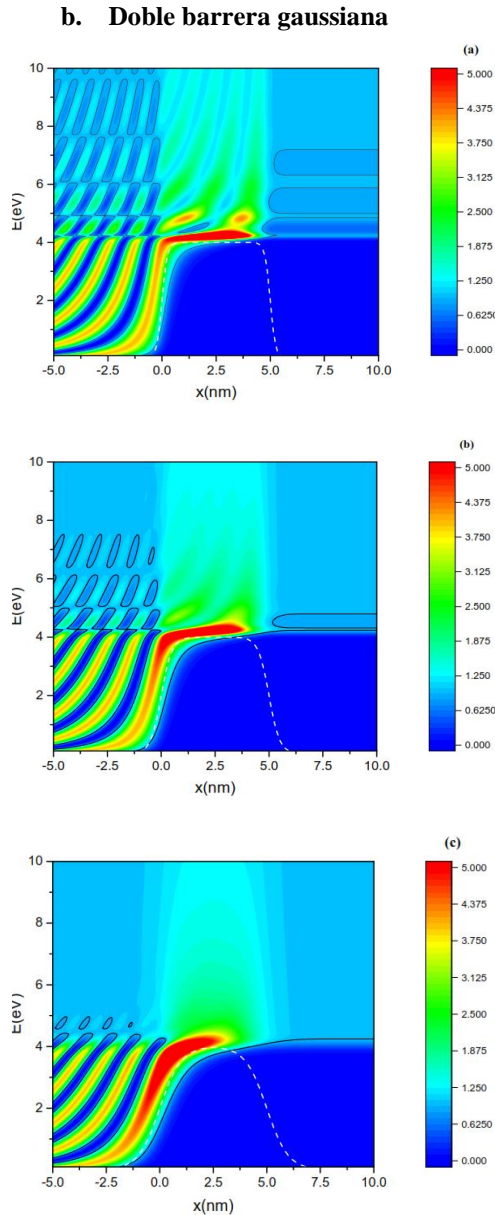


Figura 3. Mapas de la DLE para una barrera de potencial rectangular deformada, dada por la fórmula (9), para: (a) $s=0.05b$, (b) $s=0.1b$, y (c) (a) $s=0.2b$. En cada caso se indica una curva de nivel de valor 0.98 (líneas sólidas).



Considérese ahora la situación en la que el electrón incide en un sistema de doble barrera. El potencial que se escoge es una barrera gaussiana deformada en el centro por un potencial parabólico, la parte parabólica forma un pozo cuántico justo en el centro de la barrera. El potencial $V(x)$ está dado por la expresión

$$V(x) = V_0(x - 2.5)^2 e^{-\frac{\alpha(x-2.5)^2}{b_0^2}}, \quad (10)$$

donde $V_0 = 1/175 \text{ eV}$, $b_0 = 5.0 \text{ nm}$ y $\alpha = 2.772588$. El mapa de contorno de la DLE para este sistema se muestra en la figura 4 (a), en donde se superpone la gráfica de este potencial (líneas claras discontinuas). La principal diferencia que se observa respecto a los potenciales de una sola barrera es que en este caso aparecen regiones con alta probabilidad de hallar al electrón a energías menores que la altura de las barreras en la región del pozo de potencial. Estas regiones de alta densidad de probabilidad no se encuentran a cualquier energía, ocurren a energías específicas que son las resonancias del sistema.

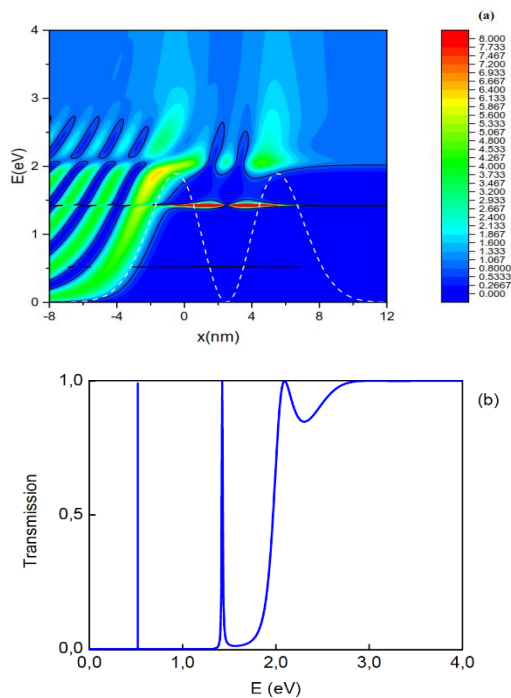


Figura 4. Mapa de la DLE para un potencial de doble barrera gaussiana, dada por la ecuación (10). Se indica

una curva de nivel de valor 0.95 (líneas sólidas) (b) Coeficiente de transmisión para la doble barrera gaussiana (a).

4. Conclusiones

Se realizó un estudio visual del tunelaje cuántico en perfiles de potencial de formas geométricas abruptas (barreras rectangulares), de formas geométricas suaves (barreras rectangulares deformadas gradualmente). Mediante mapas visuales de densidad local de estados, se exhibió la naturaleza ondulatoria del electrón y sus efectos, tales como la interferencia, penetración de barrera, efecto túnel, el fenómeno de resonancia, y la localización espacial en los estados resonantes. Se estudió también el tunelaje resonante en una estructura de doble barrera gaussiana con pozo parabólico, mostrando a localización de los estados electrónicos del pozo y exhibiendo las resonancias del sistema, las cuales son relevantes en aplicaciones tecnológicas para el desarrollo de dispositivos electrónicos de alta velocidad, en donde el ejemplo prominente es el llamado *diodo de tunelaje resonante* [8].

La relevancia de este tipo de estudios, además de facilitar la enseñanza de la física mediante la visualización de los fenómenos en un área tan compleja como es la mecánica cuántica, permite apreciar las diferencias entre las distribuciones electrónicas de potenciales abruptos y potenciales suaves. Las técnicas experimentales que se utilizan para construir estructuras cuánticas de barreras y pozos de potencial, tales como la MBE (*Molecular Beam Epitaxy*) son tan precisas que pueden depositar capas de materiales semiconductores del orden de nanómetros de espesor, lo cual corresponde a barreras rectangulares. Sin embargo, los posibles defectos en el depósito de capas pueden dar lugar a barreras deformadas. Otras causas de deformación en los potenciales pueden surgir por ejemplo de la aplicación de un campo eléctrico externo, o por ejemplo el fenómeno de *acumulación de carga*, el cual produce un campo eléctrico propio que



deforma el potencial, de ahí la importancia de estudiar los efectos de deformaciones en los potenciales. Consideramos que estos resultados inciden tanto en el ámbito de la facilitación de la enseñanza de la física como en la investigación básica del tunelaje en estructuras semiconductoras nanométricas.

Agradecimientos

Los autores agradecen el apoyo recibido del proyecto de la 18va Convocatoria Interna de Apoyo a Proyectos de Investigación FC-UABC 400/1/C/110/18.

Referencias

- [1] R. Waser. *Nanoelectronics and Information Technology*. 2005 WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, Germany. <https://www.wiley.com/en-us/Nanoelectronics+and+Information+Technology+%3A+Advanced+Electronic+Materials+and+Novel+Devices%2C+3rd+Edition-p-9783527409273>
- [2] L. Esaki and R. Tsu, "Superlattice and negative differential conductivity in semiconductors," *IBM J. Res. Develop.* vol. 14, pp. 61-65, 1970. <https://doi.org/10.1147/rd.141.0061>
- [3] R. Tsu and L. Esaki. 1973. "Tunneling in a finite superlattice," *Appl. Phys. Lett.* vol. 22, pp. 562, 1973. <https://doi.org/10.1063/1.1654509>
- [4] J. M. Chamberlain, L. Eaves and J.C. Portal, *Electron Properties of Multilayers and Low-Dimensional Semiconductor Structures*. NY: Ed. Plenum Press, 1990, L. Esaki, The evolution of semiconductor quantum structures in reduced dimensionality. Do-it-yourself quantum mechanics, pp. 124. <https://arxiv.org/pdf/1007.5386>
- [5] D. K. Ferry, S. M. Goodnick and J. Bird. *Transport in nanostructures*. New York, NY, USA: Cambridge University Press, 1997, pp. 91-121. <https://doi.org/10.1017/CBO9780511840463>
- [6] C. Weisbuch and B. Vinter. *Quantum Semiconductor Structures: Fundamentals and Applications*. Inc. San Diego, California, USA: Academic Press, 1991, pp. 189-215. <https://doi.org/10.1016/B978-0-08-051557-1.50010-X>
- [7] S. Mandrà, S. Valleau and M. Ceotto. "Deep Nuclear Resonant Tunneling Thermal Rate Constant Calculations," *Int. J. Quantum Chem. J.*, vol. 113, pp. 1722-1734, 2013. <https://doi.org/10.1002/qua.24395>
- [8] C. Grossert, M. Leder, S. Denisov, P. Hänggi, and M. Weitz, "Experimental control of transport resonances in a coherent quantum rocking ratchet," *Nat. Commun.*, vol. 7, no. 1, p. 10440, 2016. <https://doi.org/10.1038/ncomms10440>
- [9] T.J. Slight and C.N. Ironside. "Investigation into the Integration of a Resonant Tunneling Diode and an Optical Communications Laser: Model and Experiment". *IEEE J. of Quantum Electron.*, vol. 43, no. 7, pp. 580, 2007. <https://doi.org/10.1109/JQE.2007.898847>



Este texto está protegido por una licencia [Creative Commons 4.0](https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/)

Usted es libre para Compartir—copiar y redistribuir el material en cualquier medio o formato— y Adaptar el documento—remezclar, transformar y crear a partir del material— para cualquier propósito, incluso para fines comerciales, siempre que cumpla la condición de:

Atribución: Usted debe dar crédito a la obra original de manera adecuada, proporcionar un enlace a la licencia, e indicar si se han realizado cambios. Puede hacerlo en cualquier forma razonable, pero no de forma tal que sugiera que tiene el apoyo del licenciante o lo recibe por el uso que hace de la obra.

[Resumen de licencia - Texto completo de la licencia](#)