

V3: Estudio del coeficiente de transmisión en un sistema cuántico.

15 de julio de 2024



Jesús Adrián Pérez García

FÍSICA COMPUTACIONAL



Índice

1. Introducción histórica	3
1.1. Base teórica	4
2. Resultados	5
2.1. Cálculo del coeficiente de transmisión	5
2.2. Dependencia entre N y K	6
2.3. Dependencia entre $V(x)$ y K	7
2.4. Estimación posición y energía	8
2.5. N pozos	9
2.6. Optimización	10
3. Conclusiones	11
Bibliografía	12

1. Introducción histórica

Entre el siglo XVIII y XIX el físico francés Augustin Fresnel estudió exhaustivamente el campo de la óptica, explicando los conceptos de reflexión y refracción de las ondas. En este ámbito, se le atribuye la introducción del coeficiente de transmisión, el cual describe la amplitud (o la intensidad) de una onda transmitida respecto a la onda incidente cuando se consideran medios con discontinuidades en propagación de ondas [1].

En el contexto de la mecánica clásica, cuando una onda se aproxima a una barrera de potencial, el movimiento resultante de esta se puede resumir en dos posibilidades. Primero, si la energía de la onda es menor que la barrera de potencial, esta rebota. Segundo, si la energía de la onda es mayor, esta supera la barrera y se transmite completamente. En el primer caso, el coeficiente de transmisión es nulo, pues no se ha transmitido la onda tras encontrarse el obstáculo. En el segundo caso, el coeficiente es uno, pues la onda se transmite completamente.

Sin embargo, en el contexto de la mecánica cuántica, al hablar de probabilidades, la onda en el primer caso, posee la probabilidad de traspasar la barrera de potencial, dando lugar al conocido efecto túnel, estipulado por George Gamow en 1928. Durante las décadas siguientes, el coeficiente de transmisión se convirtió en una herramienta esencial en el estudio de diversos fenómenos físicos. En la década de 1950, la teoría de la unión túnel fue desarrollada por Leo Esaki y otros investigadores, lo que condujo a la invención del diodo túnel. Este dispositivo, que aprovecha el efecto túnel para permitir el flujo de corriente en condiciones específicas, marcó un avance significativo en la electrónica y recibió el Premio Nobel de Física en 1973 [2].

El estudio del coeficiente de transmisión en el campo de la cuántica tiene gran importancia en la actualidad. Primeramente, en los semiconductores. La producción de estos conductores a escalas minúsculas hace que entren en juego efectos cuánticos, entre los que destaca el efecto túnel, estrechamente relacionado con el coeficiente de transmisión [3]. En segundo lugar, en la química cuántica, existen reacciones que implican transferencia de electrones a través de barreras de potencial, influenciando la dinámica de procesos catalíticos y enzimáticos, haciendo que el coeficiente sea vital para predecir la evolución de estas reacciones [4].



Figura 1: *Los físicos Benning y Rohrer mostrando el STM, microscopio que usa el efecto túnel.*

1.1. Base teórica

Para el estudio del coeficiente de transmisión, se parte de la onda generada por la ecuación de Schrödinger:

$$i\hbar \frac{\partial \Phi(x, t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \Phi(x, t) = H\Phi \quad (1)$$

Mediante esta onda generada, donde el potencial se calcula como $V(x) = \lambda k_0^2$ en el intervalo $[2N/5, 3N/5]$ y cero fuera de este, se procede a medir, buscando el primer máximo local de la función. Este valor corresponderá al coeficiente de transmisión como se discute en 2.1. Una vez se encuentra, se compara un número aleatorio con este valor, para darle el carácter probabilístico de la mecánica cuántica, haciendo que si el número aleatorio es menor que el valor del máximo obtenido, se detecta la partícula en esa medición. Se mide 1000 veces, por tanto, el coeficiente viene dado por $K = mT/1000$ donde mT es el número de veces que se ha detectado la partícula.

Para el apartado del estudio de $V(x)$ frente a K , se puede deducir una expresión de cómo se comporta el coeficiente de transmisión en función del potencial en [5]:

$$K \sim e^{-2\kappa d} \quad \kappa = \sqrt{\frac{2m(V - E)}{\hbar^2}} \quad (2)$$

Para el cálculo del valor esperado de un observable se hace uso de la siguiente relación dada:

$$\langle O \rangle = \int \phi^*(x) \hat{O} \phi(x) dx \quad \hat{x} = x \quad \hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \quad (3)$$

donde \hat{O} es el operador correspondiente al observable, siendo \hat{x} el de la posición y \hat{T} el de la energía cinética. Como en el de la cinética hay que hacer uso de derivadas, se utiliza el siguiente método numérico:

$$f'(x) \approx \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x} \quad (4)$$

Incertidumbre en las medidas

Se ha calculado el error aleatorio u_a de todas las medidas siguiendo la fórmula:

$$u_a = \frac{\sigma}{\sqrt{N}}$$

Siendo σ la desviación típica de las medidas de un dato, N el número de medidas del dato.

2. Resultados

2.1. Cálculo del coeficiente de transmisión

Como se menciona en el apartado teórico, se calcula el coeficiente de transmisión mediante el método del detector (K) y mediante el máximo local de la función Pd:

N	K	Error K	Pd	Diferencia relativa de K y Pd (%)
500	0.9223	0.0034	0.92031	0.22
1000	0.8330	0.0044	0.828264	0.57
2000	0.5463	0.0069	0.534865	2.1
3000	0.374	0.011	0.362295	3.2
4000	0.2790	0.0062	0.2881820	3.3
5000	0.24033	0.0037	0.23287100	3.1

Tabla 1: Tabla de datos con valores de N, K, Error K, Pd y la diferencia relativa de K y Pd para $\lambda = 0,5$

Se aprecia que la diferencia relativa entre el cálculo de K mediante el método del detector y el de maximización no supera el 4 % lo que indica que ambos métodos son prácticamente equivalentes.

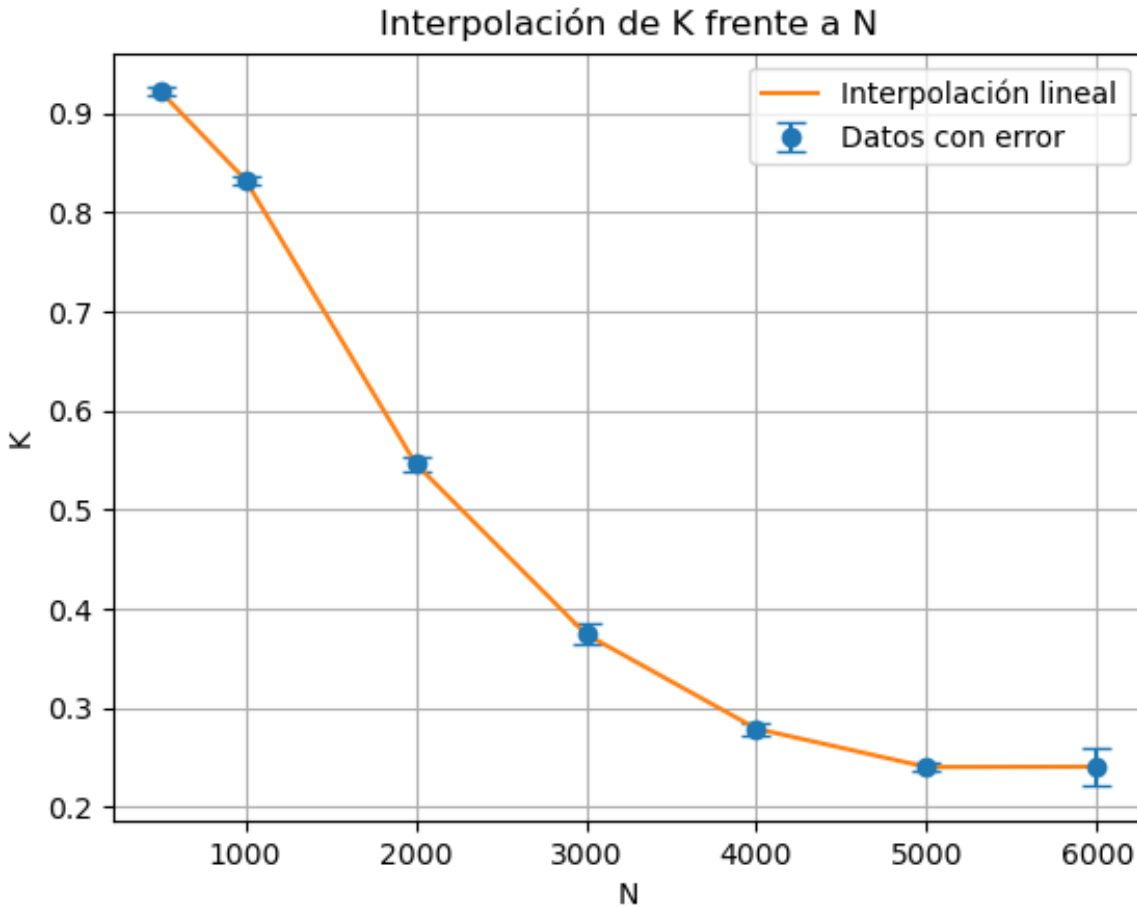
El método de maximización de la función de onda tiene sentido ya que, en la mecánica cuántica, la magnitud de la función de onda se relaciona directamente con la probabilidad de hallar una partícula en una posición específica. Buscar el punto de máximo local implica hallar el lugar donde la detección de la partícula es más probable tras pasar la barrera. Esta cifra máxima proporciona información clara sobre la posibilidad de transmisión, que es el objetivo de esta medición.

El método de K complementa esto al presentar una simulación numérica que calcula el coeficiente de transmisión promedio a través de múltiples experimentos, capturando la naturaleza probabilística de la mecánica cuántica.

En resumen, el método de maximización tiene sentido pues está basado en la amplitud de probabilidad de la función de onda, y el método de comparación estocástica (método de Montecarlo) refuerza esta idea al imitar la naturaleza aleatoria y probabilística de los eventos cuánticos. Ambas formas, en consecuencia, ofrecen una comprensión consistente del fenómeno de pasar a través de una barrera de potencial.

2.2. Dependencia entre N y K

Se representa el valor de K frente a N para $\alpha = 0,5$, $n_{\text{ciclos}} = 50$, y $k_0 = 0,314$, valores usados en el apartado anterior:

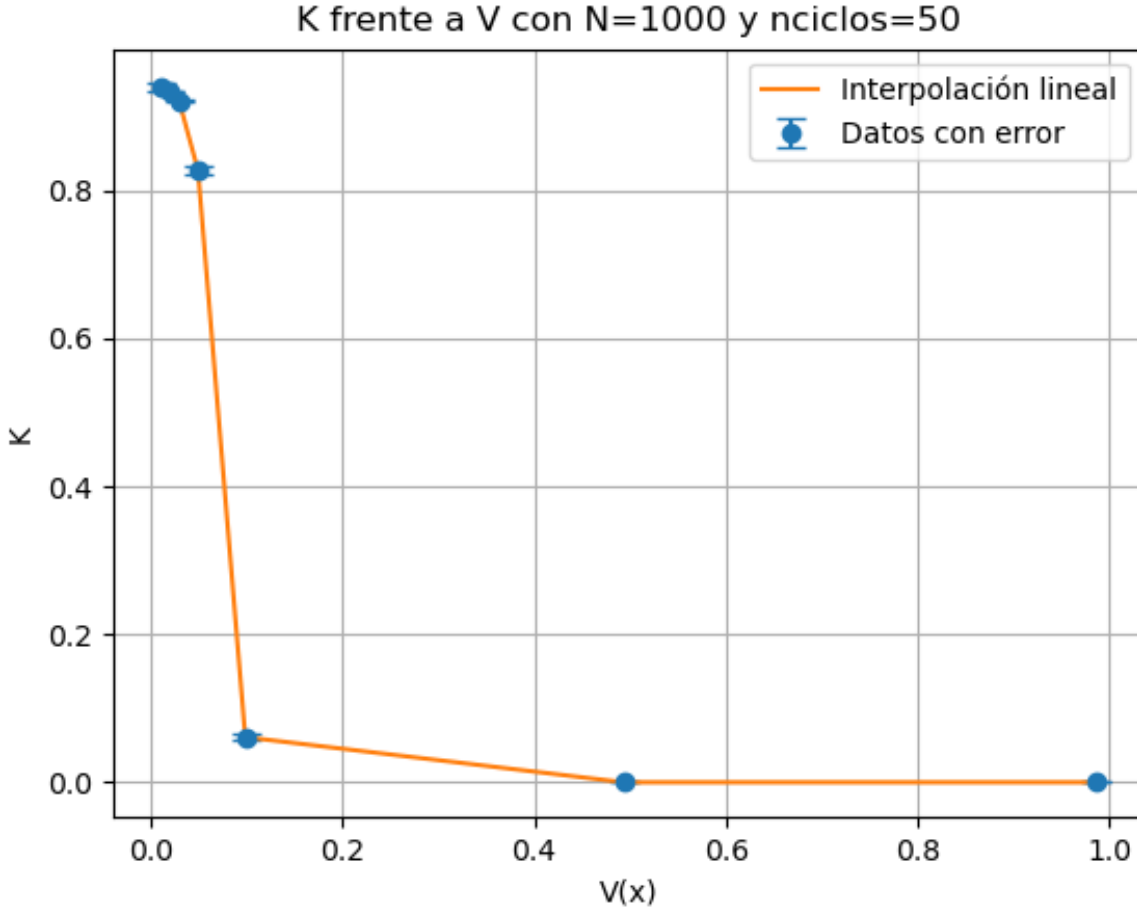


Es fácil ver que el coeficiente de transmisión se estabiliza con suficiente N. En este caso, el coeficiente tiende a 0,23 aproximadamente. A medida que N aumenta, la discretización de la función de onda se vuelve más fina, mejorando la precisión en la evaluación de la transmisión a través de la barrera. Inicialmente, el coeficiente de transmisión K disminuye rápidamente porque se está capturando mejor el decaimiento exponencial de la función de onda dentro de la barrera.

Eventualmente, K alcanza un valor asintótico, que en este caso es aproximadamente 0.23. Esto sugiere que hay un límite en la precisión de la descripción de la función de onda en relación con la transmisión a través de la barrera. El valor asintótico representa el coeficiente de transmisión más preciso que se puede obtener dado el modelo y las condiciones de la barrera.

2.3. Dependencia entre $V(x)$ y K

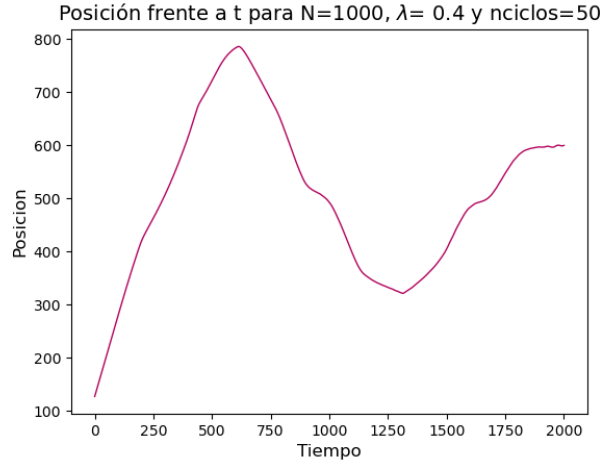
Se representa el valor del coeficiente frente al potencial $V(x)$ mencionado en el apartado teórico, para λ 0.1, 0.3, 0.5, 1, 5, 10 y 20 y donde k_0 sigue tomando el mismo valor que en el apartado anterior:



Como se aprecia, K decrece exponencialmente si $V(x)$ aumenta. Esto se ve en la ecuación expuesta en el apartado teórico, 2. Estas ecuaciones indican que K se comporta de manera exponencial con exponente negativo. En este exponente existe un factor κ que depende del potencial y la energía. Este factor aumenta si $V(x)$ aumenta por lo que al ser K una exponencial negativa de este factor, K decrece exponencialmente cuando $V(x)$ aumenta.

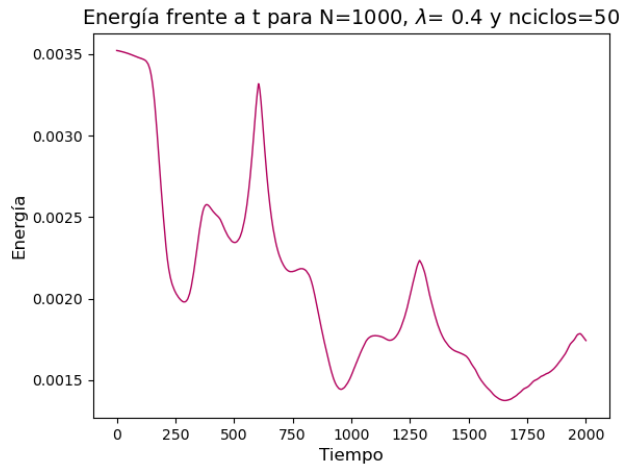
2.4. Estimación posición y energía

Para estimar la posición se utiliza el valor esperado de un observable, usando el operador de posición mencionado en el apartado teórico, se obtiene la posición en función del tiempo:



Como se ve, la posición parece haberse determinado de manera correcta pues, al tener una barrera pequeña de potencial, se ve como a partir de $t=550$ aproximadamente, la partícula rebota en el muro y vuelve hacia el inicio para volver a pasar la barrera de potencial en $t=1750$ aproximadamente. Tras el cálculo del valor medio y su desviación típica se tiene que el valor esperado de la posición es 504 ± 150 U, donde U equivale a las unidades reducidas.

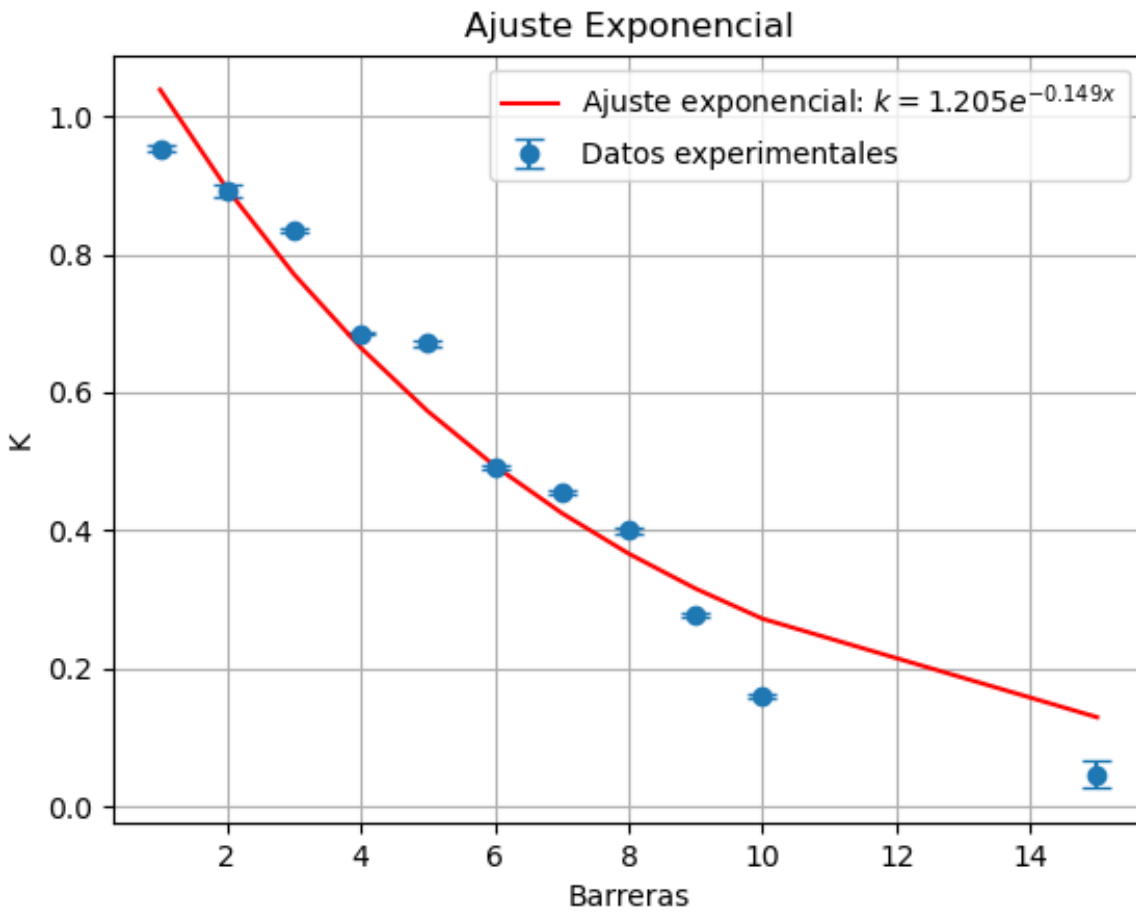
Para estimar la energía se sigue el mismo método siguiendo el apartado teórico:



De nuevo, se puede apreciar como la energía disminuye con el tiempo pues al pasar la onda por la barrera de potencial pierde energía cinética. La energía cinética tiene un valor promedio $0,00207 \pm 0,00059$ U donde de nuevo está expresada en unidades reducidas del sistema.

2.5. N pozos

Se estudia el valor de K frente al incremento de número de pozos para las mismas condiciones que en el apartado 2.1:



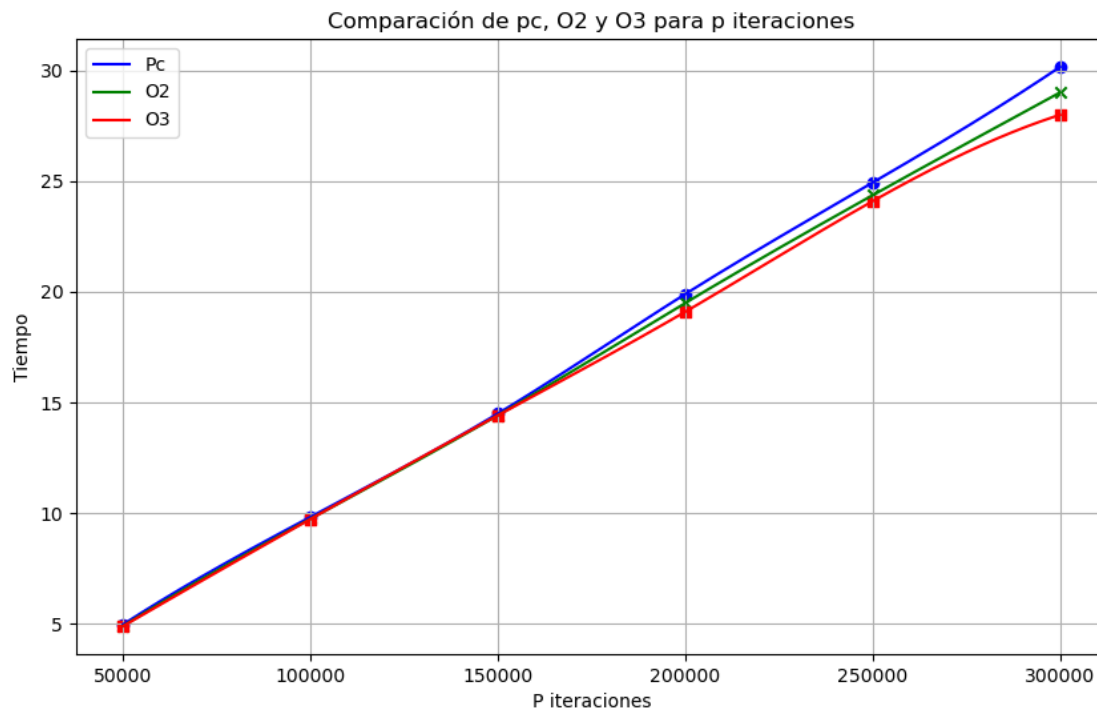
de donde se obtiene que el coeficiente sigue la siguiente expresión:

$$K = 1,205e^{-0,149n} \quad (5)$$

donde n es el número de barreras y el coeficiente de Pearson del ajuste es 0,977 dando a entender que la tendencia se ajusta correctamente a una exponencial.

2.6. Optimización

Se compara el poder de ejecución del dispositivo donde se ha llevado a cabo toda la simulación, un sistema ASUS ROG STRIX G15 con un procesador AMD Ryzen 7 6800HS with Radeon Graphics 3.20 GHz y 16 gb de RAM con sus optimizaciones O2 y O3. Esta comparación se realiza aumentando el número de iteraciones del programa obteniendo la siguiente comparación:



Como se aprecia, la diferencia es apenas notable pero si se empieza a notar que cuanto más grande es el número de iteraciones, como cabe esperar, optimizar el programa con O3 hace que vaya más rápido que con O2 y que de manera normal. A su vez, ejecutarlo con O2 hace que sea más rápido que sin optimizar.

3. Conclusiones

Dando por concluido este experimento, se puede afirmar que los resultados físicos que éste conlleva son de gran interés. Describe de manera clara el cálculo del coeficiente de transmisión y la mecánica cuántica en sí. Resulta aún más interesante sabiendo que el coeficiente de transmisión es útil en múltiples aplicaciones cotidianas como por ejemplo en los circuitos de alta velocidad donde los diodos de efecto túnel son vitales o por ejemplo en las memorias flash que usan este mismo efecto pues en estas memorias la información se almacena en átomos individuales excitando estos átomos haciendo que los efectos cuánticos sean notorios o en la biología ya que ha demostrado que el efecto túnel juega un papel en algunas reacciones bioquímicas, donde protones o electrones se transfieren a través de barreras energéticas enzimáticas. Este conocimiento ayuda en el desarrollo de nuevos fármacos y en la comprensión de procesos biológicos [6].

En conclusión, en este informe, se ha calculado de manera exitosa el coeficiente de transmisión mediante dos métodos distintos, los cuales coinciden, partiendo de condiciones iniciales distintas. También se ha analizado de manera correcta la relación entre el coeficiente de transmisión y N (resolución de la onda) así como la relación entre el coeficiente y el potencial. Asimismo se pudo establecer un valor esperado para dos observables como lo son la posición y la energía cinética, aparentemente de manera correcta. Finalmente se estudió el sistema sometido a M barreras de potencial y se realizó una comparación entre el tiempo de ejecución por el ordenador que simuló el programa y sus diferentes optimizaciones O2 y O3, aumentando el número de pasos de la simulación.

Bibliografía

- [1] G.-A Boutry. *Augustin fresnel: his time, life and work, 1788-1827*. Science Progress (1933-), vol. 36, no. 144, 1948.
- [2] Josep M. Rodríguez. “Efecto túnel”. En: *Cuadernos Hispanoamericanos*. Núm. 725, noviembre 2010 (2017). URL: <https://www.cervantesvirtual.com/nd/ark:/59851/bmc0875505>.
- [3] Evan O Kane. “Theory of tunneling”. En: *Journal of applied Physics* 32.1 (1961), págs. 83-91.
- [4] Jingzhi Pu, Jiali Gao y Donald G Truhlar. “Multidimensional tunneling, recrossing, and the transmission coefficient for enzymatic reactions”. En: *Chemical reviews* 106.8 (2006), págs. 3140-3169.
- [5] Unknown. “Transmisión y reflexión de partículas II”. En: *La Mecánica Cuántica* (2009). URL: <https://la-mecanica-cuantica.blogspot.com/2010/07/transmision-y-reflexion-de-particulas.html>.
- [6] Rosa Liz Benites Condor. “Análisis de la tecnología cuántica aplicada a la transmisión de datos”. En: *Universidad Alas Peruanas* (2014). URL: <https://revistas.uap.edu.pe/ojs/index.php/RCI/article/download/192/133>.

Acceso a github: [aquí](#)