



UNIVERSIDAD MICHOACANA DE SAN NICOLAS DE HIDALGO

*Facultad de Ciencias Físico-Matemáticas
"Mat. Luis Manuel Rivera Gutiérrez"*

Transporte en una Secuencia de Potenciales Ordenados y
Desordenados

TESIS

PARA OBTENER EL TITULO DE

LIC. EN CIENCIAS FÍSICO MATEMÁTICAS

PRESENTA

ERIC JOVANI GUZMÁN ORTÍZ

ASESORES

DR. ORACIO NAVARRO CHÁVEZ

DR. OUTMANE OUBRAM

MORELIA, MICH., NOVIEMBRE 2012

Índice general

1. Introducción	1
2. Preámbulo Teórico	5
2.1. Ecuación de Schrödinger	5
2.2. Matriz de transferencia	7
2.3. Teoría de bandas de energía	10
2.4. Funciones de Bloch	12
3. Potenciales rectangulares	13
3.1. Barrera de potencial	13
3.2. Pozo de potencial	18
3.3. Transmisión en una secuencia de n barreras	21
3.4. Modelo de Kronig-Penney	26
3.5. Resultados y discusión	28
4. Potencial tipo delta de Dirac	37
4.1. Potencial delta	37
4.2. Transmisión en una secuencia de n deltas	40
4.3. Modelo de Kronig-Penney	45
4.4. Resultados y discusión	46
Conclusiones	55
A. Identidad de Chebyshev	57

Capítulo 1

Introducción

Dentro de las diversas áreas de estudio de la física, la materia condensada es una de las áreas de investigación de mayor importancia a nivel mundial. Su objetivo es estudiar las propiedades estructurales y electrónicas de los materiales entendiendo el comportamiento de las distintas fases de la materia y las configuraciones atómicas, usando las leyes de la física, principalmente las de la mecánica cuántica, el electromagnetismo y la mecánica estadística. Debido a la naturaleza interdisciplinaria de su campo de estudio, el desarrollo de la materia condensada requiere del trabajo y la colaboración de investigadores tanto teóricos como experimentales, conformados por físicos, matemáticos, químicos e ingenieros. Las técnicas de fabricación y caracterización de materiales han permitido la creación de nuevas tecnologías que son de gran impacto en la sociedad, encontrando aplicaciones y enormes adelantos en las áreas de la medicina, la biología, la química, las telecomunicaciones y la tecnología doméstica.

Los primeros estudios que se hicieron respecto a la conductividad eléctrica provienen de G. Ohm en 1827 analizando metales. Más tarde estos resultados y muchos otros experimentos sobre las conductividades térmica y eléctrica fueron muy bien explicados utilizando métodos de la teoría cinética clásica. En particular, el modelo de Lorentz-Drude del electrón libre fue capaz de explicar la resistencia al flujo de electrones bajo condiciones normales de temperatura y presión. Sin embargo, el modelo no pudo diferenciar el comportamiento de la conductividad entre conductores, semiconductores y aislantes; igualmente falló en predecir los resultados experimentales de la conductividad de los metales como función de la temperatura; y a bajas temperaturas le fue imposible predecir el efecto de la desaparición completa de la resistencia eléctrica en algunos sólidos. Este fenómeno cuánti-

co de magnitud macroscópica conocido como *superconductividad* [1, 2] aparece cuando se alcanza una determinada temperatura crítica.

Debido a estos problemas de la mecánica clásica se tuvo que esperar el desarrollo de la mecánica cuántica y la aparición del concepto de la superficie de Fermi, lo cual ocurrió hacia los años 50, para lograr un mejor entendimiento del transporte electrónico en metales [3, 4, 5, 6]. Con estas bases Bardeen, Cooper y Schrieffer desarrollaron la primera teoría microscópica de la superconductividad conocida como la teoría BCS, con lo cual obtuvieron el premio Nobel de la Física en 1972. A partir de 1986 con el descubrimiento de un superconductor a 30⁰K por Berdnotz y Muller, comenzó una carrera sin precedentes por descubrir nuevos materiales superconductores de alta temperatura crítica, lo que daría lugar a impresionantes aplicaciones en las áreas de la electrónica, la ingeniería eléctrica y las comunicaciones.

La electrónica convencional desde su origen ha usado la carga eléctrica para codificar los datos informáticos basados en un sistema binario de unos y ceros (bits), dependiendo de si los electrones circulan o no dentro del material. Actualmente, el transistor es el dispositivo encargado de conmutar esta corriente eléctrica, y además es el elemento principal del que están hechos los circuitos integrados. Desde su aparición, los circuitos integrados fueron aumentando sus capacidades duplicando el número de transistores empaquetados en un mismo chip de silicio cada 24 meses, según lo había predicho Moore en 1975 (Ley de Moore), volviéndose tan complejos y avanzados que las conexiones se han reducido a escalas micrométricas. Aunque esta evolución continúa, se predice que para el año 2016 esta reducción ya no será posible, por lo que los investigadores están buscando nuevas alternativas para mejorar las características y propiedades del transporte electrónico.

Una alternativa a esta limitante tecnológica es poder explotar, dentro del mismo transporte electrónico, los estados del espín como una representación binaria, los llamados *qubits* o *bits cuánticos*, por lo que se podrá transmitir mucho más información por cada electrón. Con esta idea nace una nueva rama dentro de la física de la materia condensada denominada *espintrónica* [7, 8]. El objetivo principal de la espintrónica es poder construir dispositivos que dispongan de un sistema que pueda generar y mantener una corriente de electrones con espines polarizados y de otro sistema que sea sensible a esa polarización. Un paso más radical sería tener una unidad intermedia que realice algún tipo de procesamiento en la corriente, de acuerdo con los estados de los espines. Esta rama puede

dar lugar a una nueva generación de computadoras y dispositivos electrónicos con nuevas funcionalidades, iniciando la era de la computación cuántica.

Uno de los principales fenómenos en que se basan algunos dispositivos espintrónicos es *la magnetorresistencia* [9], descubierto por William Thomson en 1857. Este fenómeno es una propiedad que presentan ciertos materiales de variar su resistencia eléctrica cuando son sometidos a la presencia de un campo magnético. Aunque desde un principio la mayor dificultad era que no se podía variar de manera significativa la resistencia eléctrica de un material, incluso en presencia de un campo magnético fuerte, el fenómeno sufrió grandes avances gracias a los descubrimientos hechos por parte de Peter Grünberg y Albert Fert sobre la magnetorresistencia gigante GMR [10, 11, 12, 13, 14]. Este trabajo fue reconocido con el Premio Nobel de la Física en 2007. Los efectos de la GMR son muy estudiados en compuestos con estructura tipo perovskita [15, 16] a base de manganeso con valencia mixta, conocidos como manganitas. La GMR además de tener muchas aplicaciones tecnológicas, como el funcionamiento de los discos duros actuales, sirvió de base para el origen de algunas variantes del fenómeno como la magnetorresistencia colosal CMR y la magnetorresistencia túnel TMR [17, 18, 10].

En años recientes se ha tenido mucha actividad en el estudio de la propagación, refracción, absorción y dispersión de partículas subatómicas a través de medios cristalinos y cuasicristalinos [19, 20, 21, 22, 23, 24]. Existe un amplio conocimiento acerca del espectro de bandas de las partículas que se propagan en medios que son estrictamente puros o relativamente simples, sin embargo, uno de los intereses actuales es estudiar y conocer la influencia de imperfecciones aleatorias [25, 26, 27, 28, 19, 24] que están presentes en las muestras experimentales. Estas imperfecciones se originan, por ejemplo, de las variaciones en los parámetros del medio de propagación tales como la constante dieléctrica, la permeabilidad magnética, el índice de refracción y las dimensiones geométricas.

En este trabajo modelamos el transporte de los electrones a través de un cristal a escala nanométrica [29, 30, 31, 32], haciendo un análisis de la transmisión o propagación de las ondas asociadas a través de una secuencia periódica de potenciales rectangulares [33, 34, 35, 36, 19] y tipos delta [37, 38, 19, 32]. Los potenciales rectangulares y los tipos delta son frecuentemente utilizados para representar campos de fuerza con un determinado alcance o para representar la interacción entre los electrones móviles y los iones fijos dentro de un conductor.

La tesis está estructurada de la siguiente forma: En el primer capítulo se introduce la ecuación de Schrödinger, que es la herramienta principal para tratar los fenómenos cuánticos, seguido de una explicación del método de la matriz de transferencia [39, 19, 34], una técnica ampliamente utilizada para describir el proceso de transporte y de dispersión de electrones a través de secuencias ordenadas y desordenadas; luego se mostrará la manera en que se clasifican los materiales respecto a su conductividad eléctrica a partir de la estructura de bandas de energía [40, 41, 42, 43, 44, 45]; finalmente se expondrá el teorema de Bloch [34, 41, 42] utilizado por el Modelo de Kronig-Penney [19, 41, 45] para describir los estados de energía en estructuras cristalinas.

En el segundo capítulo se resuelve la ecuación de Schrödinger para potenciales rectangulares en una dimensión, y hacemos uso de la matriz de transferencia para investigar las propiedades de la transmisión en este tipo de potencial. Este capítulo inicia con la obtención de una expresión analítica del coeficiente de transmisión para una barrera y para un pozo de potencial, donde se observa el efecto túnel, un fenómeno físico con importantes aplicaciones en el área de semiconductores [46, 47, 48, 41]; posteriormente se obtiene una expresión para el cálculo numérico de la transmisión en una secuencia finita de barreras de potencial y se abordará el modelo de Kronig-Penney, donde se obtiene la relación de dispersión que muestra la estructura de bandas para una secuencia infinita de barreras de potencial. Finalmente, se analizan y discuten los resultados obtenidos para el coeficiente de transmisión en potenciales tipo barrera variando el tamaño, el número de potenciales y la inserción de impurezas en alguna posición de la secuencia.

En el tercer capítulo se investigan las propiedades de la transmisión en una secuencia de potenciales tipo delta de Dirac, haciendo el mismo análisis desarrollado para los potenciales rectangulares en el capítulo anterior. Este capítulo inicia con la obtención de una expresión analítica del coeficiente de transmisión para un simple potencial tipo delta; luego se aborda el caso para una secuencia de muchos potenciales tipo delta y se obtiene la relación de dispersión en el modelo de Kronig-Penney; finalmente se analizan y discuten los resultados obtenidos para el coeficiente de transmisión cuando se cambian las dimensiones y el número de potenciales, además de la inserción de impurezas en alguna posición.

Capítulo 2

Preámbulo Teórico

2.1. Ecuación de Schrödinger

En 1924, Louis de Broglie propuso que la materia poseía propiedades de onda y de partícula. Más tarde, en 1927, esta hipótesis fue corroborada con evidencias experimentales que demostraron de manera contundente que las partículas (escala atómica y subatómica) se mueven de acuerdo a las leyes de movimiento ondulatorio. Este principio de dualidad sirvió de punto de partida para el exitoso desarrollo de *la teoría de la mecánica cuántica*.

En la mecánica cuántica se asocia una función de onda al movimiento de las partículas cuando se encuentran bajo la acción de fuerzas externas. Aunque esta función carece de interpretación física, su magnitud al cuadrado es proporcional a la probabilidad de encontrar a la partícula en un punto y en un instante determinado. La forma de la función de onda Ψ está determinada por *la ecuación de Schrödinger*, la cual se escribe matemáticamente de la siguiente manera

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(\mathbf{r},t) + V(\mathbf{r},t)\Psi(\mathbf{r},t) = i\hbar\frac{\partial\Psi(\mathbf{r},t)}{\partial t}, \quad (2.1)$$

que en una dimensión se reduce a

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x,t)\Psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}. \quad (2.2)$$

La deducción de esta ecuación diferencial se hizo a partir de los postulados de la mecánica cuántica. Es importante mencionar que esta ecuación fue diseñada para ser congruente con la ecuación de la energía clásica, por lo que no es válida para partículas que se mueven a velocidades relativistas; en ese caso se usa la teoría desarrollada por Dirac en 1929.

Una manera de resolver la ecuación de Schrödinger (2.2) consiste en utilizar la técnica de separación de variables, debido a que de inmediato se reduce la ecuación diferencial parcial a un conjunto de ecuaciones diferenciales ordinarias. La técnica propone una solución en forma de un producto de funciones, cada una de las cuales contiene sólo una de las variables independientes, por lo que la función de onda Ψ , se escribe como

$$\Psi(x, t) = \psi(x)\phi(t) . \quad (2.3)$$

Esta solución se puede proponer siempre y cuando la energía potencial $V(x, t)$ no dependa explícitamente del tiempo, de modo que la función potencial se pueda escribir como $V(x)$. Puesto que en la mecánica cuántica, como en la mecánica clásica, casi todos los sistemas tienen energías potenciales de esta forma, la condición no es una restricción muy seria.

La separación de variables nos conduce al siguiente par de ecuaciones diferenciales ordinarias:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) , \quad (2.4)$$

$$i\hbar \frac{d\phi(t)}{dt} = E\phi(t) . \quad (2.5)$$

La primera ecuación es conocida como *la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo*, cuya solución ψ dependerá del potencial $V(x)$. La solución de la segunda ecuación tiene la forma

$$\phi(t) = e^{-iEt/\hbar} = \cos\left(\frac{Et}{\hbar}\right) - i \sin\left(\frac{Et}{\hbar}\right) , \quad (2.6)$$

es decir, una función que oscila en el tiempo, con frecuencia $\nu = E/\hbar$, donde la constante de separación o acoplamiento E concuerda exactamente con la energía total de la partícula según los postulados de de Broglie-Enstein.

La función de onda que resulta es

$$\Psi(x, t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar} . \quad (2.7)$$

La probabilidad de encontrar la partícula en algún punto e instante determinado, para este tipo de potencial es

$$|\Psi(x, t)|^2 = |\psi(x)e^{-iEt/\hbar}|^2 = |\psi(x)|^2 , \quad (2.8)$$

de manera que no dependerá del momento en el que se haga la medición.

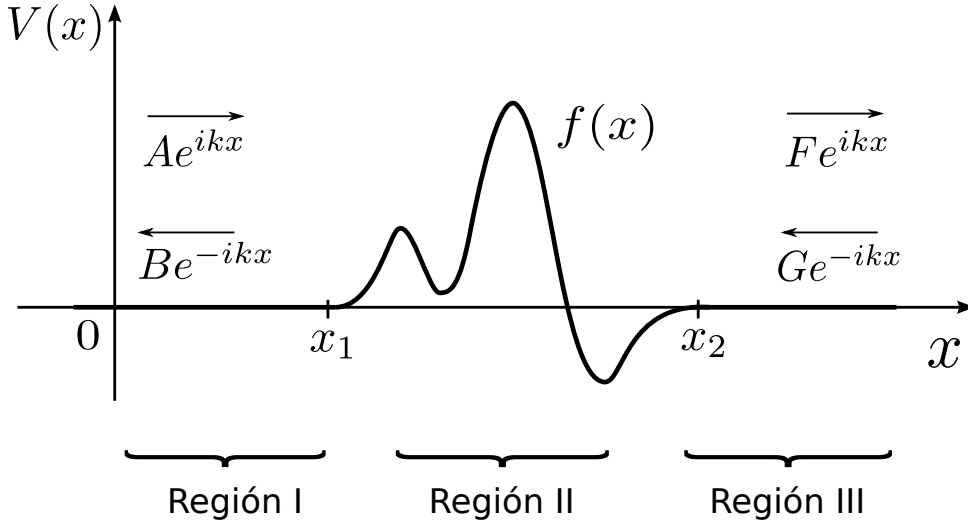


Figura 2.1: Potencial localizado $V(x) = f(x)$ en la región II.

2.2. Matriz de transferencia

La técnica de *la matriz de transferencia* [19, 34, 39] resulta ser una excelente opción para analizar la propagación de una partícula a través de un sistema compuesto por una secuencia de potenciales localizados en regiones adyacentes [21, 24, 33, 35, 36, 38]. En esta técnica se resuelve la ecuación de Schrödinger para cada potencial de manera individual, cuyas soluciones serán acopladas aplicando las condiciones de frontera mediante el uso de matrices, y por lo tanto poder calcular la probabilidad de que la partícula sea transmitida.

Para entender este método consideremos el potencial mostrado en la Fig. 2.1

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x \in \text{Región I} \\ f(x) & \text{si } x \in \text{Región II} \\ 0 & \text{si } x \in \text{Región III} . \end{cases} \quad (2.9)$$

Debido a que en las regiones I y III el potencial es nulo ($V(x) = 0$), la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo (Ec. 2.4) se escribe como

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x) , \quad (2.10)$$

la cual corresponde al caso de la partícula libre. Las soluciones serán entonces:

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad \text{en la región I,} \quad (2.11)$$

$$\psi(x) = Fe^{ikx} + Ge^{-ikx} \quad \text{en la región III,} \quad (2.12)$$

donde

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} . \quad (2.13)$$

El término $\exp(ik_1x)$ se le atribuye a una onda que se propaga en la dirección en la que x crece y el término $\exp(-ik_1x)$ a una onda que se propaga en la dirección contraria, mientras que las constantes A , B , F y G representan sus amplitudes.

En la región II por supuesto no se puede obtener explícitamente la función de onda ψ , hasta que se especifique la forma del potencial ($V(x) = f(x)$) en esta región. Sin embargo, recordemos que la ecuación de Schrödinger es una ecuación diferencial lineal de segundo grado, de manera que la solución tendrá la forma

$$\psi(x) = Cg(x) + Dh(x) , \quad (2.14)$$

donde $g(x)$ y $h(x)$, son dos soluciones particulares linealmente independientes.

Si se aplica la condición de continuidad de la función de onda (ψ) y su derivada ($\frac{d\psi}{dx}$) en la frontera de las regiones ($x = x_1$ y $x = x_2$), se obtiene el siguiente sistema de ecuaciones

$$\begin{aligned} Ae^{ikx_1} + Be^{-ikx_1} &= Cg(x_1) + Dh(x_1) \\ ikAe^{ikx_1} - ikBe^{-ikx_1} &= Cg'(x_1) + Dh'(x_1) \\ Cg(x_2) + Dh(x_2) &= Fe^{ikx_2} + Ge^{-ikx_2} \\ Cg'(x_2) + Dh'(x_2) &= ikFe^{ikx_2} - ikGe^{-ikx_2} , \end{aligned} \quad (2.15)$$

el cual se puede expresar en forma matricial como

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} e^{ikx_1} & e^{ikx_1} \\ ik e^{ikx_1} & -ik e^{-ikx_1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} g(x_1) & h(x_1) \\ g'(x_1) & h'(x_1) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} g(x_2) & h(x_2) \\ g'(x_2) & h'(x_2) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} e^{ikx_2} & e^{ikx_2} \\ ik e^{ikx_2} & -ik e^{-ikx_2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} , \end{aligned} \quad (2.16)$$

tomando

$$M_1(x) = \begin{pmatrix} e^{ikx} & e^{ikx} \\ ik e^{ikx} & -ik e^{-ikx} \end{pmatrix} \quad (2.17)$$

y

$$M_2(x) = \begin{pmatrix} g(x) & h(x) \\ g'(x) & h'(x) \end{pmatrix} , \quad (2.18)$$

podemos escribir

$$\begin{aligned} M_1(x_1) \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} &= M_2(x_1) \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} \\ M_2(x_2) \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} &= M_1(x_2) \begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} . \end{aligned} \quad (2.19)$$

Si las matrices M_1 y M_2 son invertibles, es decir, sus determinantes son distintos de cero, que en el caso particular de M_1 es cierto, se tendrá

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} &= M_1^{-1}(x_1) \cdot M_{x_1}(x_1) \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} &= M_2^{-1}(x_2) \cdot M_1(x_2) \begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} . \end{aligned} \quad (2.20)$$

Las ecuaciones del sistema se combinan para relacionar las amplitudes de entrada en términos de las amplitudes de salida, es decir,

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} &= M_1^{-1}(x_1) \cdot M_2(x_1) \cdot M_2^{-1}(x_2) \cdot M_1(x_2) \begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} \\ &= \mathbf{M} \begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{M}_{11} & \mathbf{M}_{12} \\ \mathbf{M}_{21} & \mathbf{M}_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F \\ 0 \end{pmatrix} , \end{aligned} \quad (2.21)$$

donde \mathbf{M} es una matriz 2×2 conocida como *la matriz de transferencia*.

La constante G se toma igual a cero, ya que no existe un obstáculo en la región III que pueda originar una reflexión, por lo tanto las amplitudes de la onda reflejada B y la onda transmitida F en términos de la amplitud de la onda de incidencia A se escriben como

$$B = \frac{\mathbf{M}_{21}}{\mathbf{M}_{11}} A \quad (2.22)$$

$$F = \frac{1}{\mathbf{M}_{11}} A , \quad (2.23)$$

donde \mathbf{M}_{11} y \mathbf{M}_{21} son las entradas (1,1) y (2,1) respectivamente de la matriz de transferencia.

A partir de estos resultados se calcula el *coeficiente de transmisión* T , el cual especifica la probabilidad de que la partícula sea transmitida a través del potencial ($V(x) = f(x)$) desde la región I hasta la región III. Tal coeficiente está definido matemáticamente como el cociente de la magnitud al cuadrado de la amplitud de la onda transmitida entre la magnitud al cuadrado de la amplitud de la onda de incidencia, es decir,

$$T \equiv \frac{|F|^2}{|A|^2} = \frac{1}{|\mathbf{M}_{11}|^2} . \quad (2.24)$$

Análogamente se calcula la probabilidad de que la onda sea reflejada, la cual se define como

$$R \equiv \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{|\mathbf{M}_{21}|^2}{|\mathbf{M}_{11}|^2} . \quad (2.25)$$

Ambos coeficientes se pueden relacionar usando la expresión

$$T + R = 1 , \quad (2.26)$$

la cual es consecuencia de la conservación de la densidad de corriente [19].

2.3. Teoría de bandas de energía

En un átomo aislado los niveles de energía que los electrones pueden ocupar son niveles discretos. Cada uno de estos niveles tendrá una determinada degeneración de las funciones de onda (estados cuánticos) de acuerdo con el principio de exclusión de Pauli.

Los niveles de energía en un sólido de N átomos se traslapan desdoblándose en un conjunto de N niveles con la misma degeneración. Los niveles de más baja energía no se desdoblan con tanta facilidad debido a que pertenecen a las subcapas más internas del átomo (1s, 2s, 2p), por lo que se requerirá de una distancia interatómica extremadamente pequeña (1 o 2 Å). Si en el sólido se considera un orden de 10^{23} átomos, los niveles estarán tan próximos entre sí, que prácticamente formaran *bandas de energía* continuas, separadas por regiones donde no existen niveles de energía permitidos, conocidas como *bandas prohibidas (gap)*. La estructura de las bandas de energía dependerá de la geometría de la red y de la clase de átomos que la constituyen [40, 41, 42, 43, 44, 45, 47, 48].

A una temperatura de $T = 0^0 K$, los electrones ocuparán las bandas de energía desde el nivel más bajo hasta el nivel más alto, conocido como nivel de Fermi. Si se aumenta la temperatura algunos electrones próximos al nivel de Fermi se excitarán térmicamente, de manera que podrán ocupar niveles de energía más elevados. La última banda que contiene electrones se conoce como banda de valencia, y la siguiente es conocida como banda de conducción.

Si la banda de valencia de un sólido se encuentra parcialmente ocupada, los electrones pueden liberarse fácilmente bajo la acción de un campo eléctrico externo, y entonces ocupar estados de niveles de energía más elevados dentro de la misma banda, produciendo un flujo de corriente, por lo que el sólido se comportará como un *conductor o metal*. También exhibirá este comportamiento si la banda de valencia está totalmente ocupada, siempre y cuando esta banda esté superpuesta a la banda de conducción.

En el caso de un sólido *aislante* la banda de valencia se encuentra completamente llena y separada de la banda de conducción por una banda prohibida muy ancha (de más de

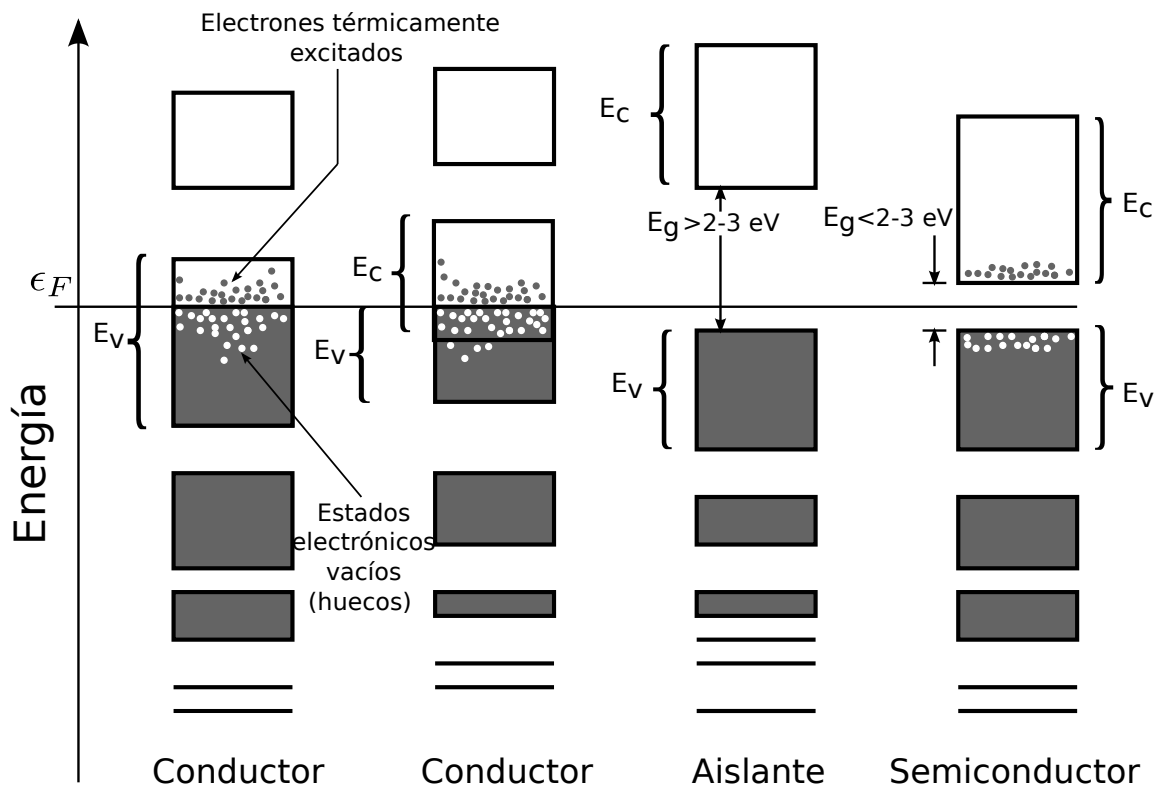


Figura 2.2: Ocupación de las bandas por los electrones: donde E_V , es la banda de valencia; E_C , la banda de conducción; E_g , el ancho de la banda prohibida; y ϵ_F es la energía de Fermi.

2 o 3 eV). Por esta razón es prácticamente imposible que los electrones puedan saltar a la banda de conducción bajo la acción de un campo eléctrico externo o por excitación térmica, por lo que no circulará corriente eléctrica. La diferencia entre un aislante y un conductor es muy notable: la conductividad eléctrica de los metales oscila de 10^4 a $10^6 \Omega^{-1} \cdot \text{cm}^{-1}$, mientras que en los aislante es menor a $10^{-10} \Omega^{-1} \cdot \text{cm}^{-1}$.

Los sólidos *semiconductores* se caracterizan por que la banda prohibida es muy estrecha (menor que 2 o 3 eV). A $T = 0^0K$ la banda de valencia está completamente llena comportándose como un aislante. Sin embargo, al aumentar la temperatura, un número apreciable de electrones adquieren la suficiente energía térmica para saltar de la banda de valencia a la banda de conducción. Los electrones dentro de la banda de conducción podrán moverse libremente bajo la acción de un campo eléctrico externo, generando una corriente eléctrica y, además, los estados vacíos que quedaron en la banda de valencia contribuyen al flujo de la corriente a través del mecanismo de conducción por huecos. La conductividad eléctrica de los semiconductores es menor que la de los metales debido a que tiene una concentración limitada de electrones libres y huecos.

2.4. Funciones de Bloch

F. Bloch demostró un importante teorema que ayuda a comprender la formación de bandas de energía de los sólidos cristalinos en el modelo de Kronig-Penney. El teorema de Bloch [34, 41, 42] enuncia lo siguiente:

Las funciones propias de la ecuación de onda para un potencial periódico son el producto de una onda plana por una función moduladora que posee la periodicidad de la red cristalina.

es decir, las soluciones de la ecuación de Schrödinger para un potencial periódico deben ser de la forma

$$\psi_{\mathbf{K}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{K}}(\mathbf{r})e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}} , \quad (2.27)$$

donde \mathbf{K} es el vector de onda y $u_{\mathbf{K}}(\mathbf{r})$ tiene periodo igual al de la red cristalina

$$u_{\mathbf{K}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{K}}(\mathbf{r}+\mathbf{R}) , \quad (2.28)$$

donde

$$\mathbf{R} = n_1\mathbf{a} + n_2\mathbf{b} + n_3\mathbf{c} , \quad (2.29)$$

\mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c} son los vectores primitivos de la red y n_1 , n_2 , n_3 son números enteros arbitrarios.

Si se la función de onda ψ se traslada en el vector \mathbf{R} , se obtiene

$$\psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}}\psi(\mathbf{r}) , \quad (2.30)$$

la cual en una dimensión se escribirá como

$$\psi(x + R) = e^{iKR}\psi(x) , \quad (2.31)$$

donde

$$K \equiv |\mathbf{K}| = \frac{2\pi}{\lambda} \quad (2.32)$$

es el número de onda y su sentido físico es el del número de longitudes de onda λ que caben en el segmento 2π .

Capítulo 3

Potenciales rectangulares

3.1. Barrera de potencial

En esta sección se resolverá la ecuación de Schrödinger para una barrera de potencial rectangular que se muestra en la Fig. 3.1. El potencial se puede escribir como sigue

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & b < x < b + a \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases}, \quad (3.1)$$

donde V_0 es una constante positiva.

De acuerdo con la mecánica clásica, una partícula de energía $E < V_0$ en la región $x < b$ que incide sobre una barrera en la dirección en la que x crece tendrá una probabilidad de ser reflejada igual a uno, y una probabilidad de ser transmitida a la región $x > b + a$ igual a uno si $E > V_0$.

Ninguna de estas afirmaciones describe de manera adecuada los resultados de la mecánica cuántica. Si $E < V_0$, la teoría predice que existe cierta probabilidad de que

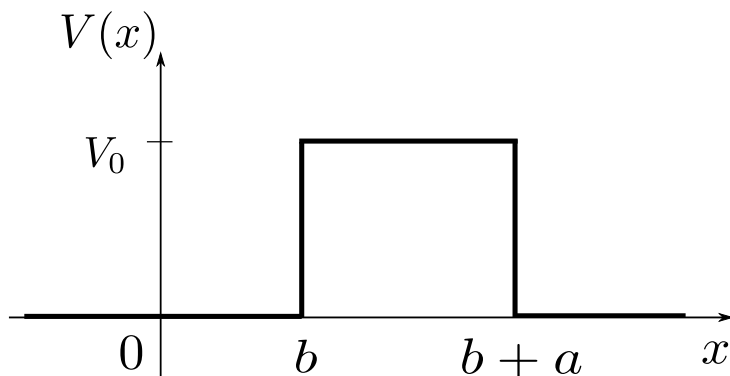


Figura 3.1: Barrera de potencial de altura V_0 y ancho a .

la partícula sea transmitida a través de la barrera a la región $x > b + a$, un fenómeno conocido como *efecto túnel*. En el caso de que $E > V_0$, la teoría predice que habrá algo de reflexión.

Para este potencial, la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo (2.4) se resuelve en forma separada para cada una de las tres regiones: en la izquierda de la barrera ($x < b$), en el interior de la barrera ($b < x < b + a$) y en la derecha de la barrera ($x > b + a$).

En las regiones de la izquierda y de la derecha de la barrera, el potencial es cero ($V_0 = 0$), por lo tanto, la ecuación corresponde a la ecuación de una partícula libre

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

con soluciones generales

$$\psi(x, E) = A_0 e^{ik_1 x} + B_0 e^{-ik_1 x} \quad x < b \quad (3.2)$$

$$\psi(x, E) = A_2 e^{ik_1 x} + B_2 e^{-ik_1 x} \quad x > b + a , \quad (3.3)$$

donde

$$k_1(E) = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (3.4)$$

y A_0, B_0, A_2, B_2 son constantes.

En la región interior de la barrera la ecuación tomará la forma

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V_0\psi(x) = E\psi(x) , \quad (3.5)$$

cuya solución general dependerá si $E < V_0$ o si $E > V_0$.

Analicemos el primer caso, es decir, cuando la energía de la partícula es menor que la altura de la barrera ($E < V_0$). La solución de la ecuación de Schrödinger (3.5) es

$$\psi(x, E) = A_1 e^{k_2 x} + B_1 e^{-k_2 x} , \quad (3.6)$$

donde

$$k_2(E) = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} . \quad (3.7)$$

Observe que la función de onda contiene exponenciales reales, por lo que no representan ondas.

Usando las condiciones de continuidad de la función de onda (ψ) y su derivada ($\frac{d\psi}{dx}$) en el punto $x = b$ y en $x = b + a$, se obtiene un sistema de cuatro ecuaciones que relaciona las constantes arbitrarias A_0, B_0, A_1, B_1, A_2 y B_2 de la siguiente manera

$$\begin{aligned} A_0 e^{ik_1 b} + B_0 e^{-ik_1 b} &= A_1 e^{k_2 b} + B_1 e^{-k_2 b} \\ ik_1 A_0 e^{ik_1 b} - ik_1 B_0 e^{-ik_1 b} &= k_2 A_1 e^{k_2 b} - k_2 B_1 e^{-k_2 b} \\ A_1 e^{k_2(b+a)} + B_1 e^{-k_2(b+a)} &= A_2 e^{ik_1(b+a)} + B_2 e^{-ik_1(b+a)} \\ k_2 A_1 e^{k_2(b+a)} - k_2 B_1 e^{-k_2(b+a)} &= ik_1 A_2 e^{ik_1(b+a)} - ik_1 B_2 e^{-ik_1(b+a)}, \end{aligned} \quad (3.8)$$

que en forma matricial se escribe como sigue

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} e^{ik_1 b} & e^{-ik_1 b} \\ ik_1 e^{ik_1 b} & -ik_1 e^{-ik_1 b} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} e^{k_2 b} & e^{-k_2 b} \\ k_2 e^{k_2 b} & -k_2 e^{-k_2 b} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} e^{k_2(b+a)} & e^{-k_2(b+a)} \\ k_2 e^{k_2(b+a)} & -k_2 e^{-k_2(b+a)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} e^{ik_1(b+a)} & e^{-ik_1(b+a)} \\ ik_1 e^{ik_1(b+a)} & -ik_1 e^{-ik_1(b+a)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (3.9)$$

Renombrando las matrices

$$M_1(x, E) = \begin{pmatrix} e^{ik_1 x} & e^{-ik_1 x} \\ ik_1 e^{ik_1 x} & -ik_1 e^{-ik_1 x} \end{pmatrix} \quad (3.10)$$

y

$$M_2(x, E) = \begin{pmatrix} e^{k_2 x} & e^{-k_2 x} \\ k_2 e^{k_2 x} & -k_2 e^{-k_2 x} \end{pmatrix}, \quad (3.11)$$

las ecuaciones (3.9) se pueden reescribir como

$$\begin{aligned} M_1(b, E) \begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} &= M_2(b, E) \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} \\ M_2(b+a, E) \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} &= M_1(b+a, E) \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (3.12)$$

Dado que los determinantes de las matrices (3.10) y (3.11) son distintos de cero, M_1 y M_2 son invertibles, es decir,

$$M_1^{-1}(x, E) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} e^{-ik_1 x} & -\frac{i}{2k_1} e^{-ik_1 x} \\ \frac{1}{2} e^{ik_1 x} & \frac{i}{2k_1} e^{ik_1 x} \end{pmatrix} \quad (3.13)$$

y

$$M_2^{-1}(x, E) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} e^{-k_2 x} & \frac{1}{2k_2} e^{-k_2 x} \\ \frac{1}{2} e^{k_2 x} & -\frac{1}{2k_2} e^{k_2 x} \end{pmatrix}, \quad (3.14)$$

se tendrá

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} &= M_1^{-1}(b, E) \cdot M_2(b, E) \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} &= M_2^{-1}(b+a, E) \cdot M_1(b+a, E) \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (3.15)$$

lo cual permite obtener las amplitudes de entrada en términos de las amplitudes de salida,

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} &= M_1^{-1}(b, E) \cdot M_2(b, E) \cdot M_2^{-1}(b+a, E) \cdot M_1(b+a, E) \begin{pmatrix} A_2 \\ 0 \end{pmatrix} \\ &= \mathbf{M}(E) \begin{pmatrix} A_2 \\ 0 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (3.16)$$

la constante B_2 es igual a cero, ya que en la región de la derecha sólo puede haber una onda transmitida y no existe nada en esta región que produzca una reflexión. La matriz de transferencia \mathbf{M} está dada por

$$\mathbf{M}(E) = \begin{pmatrix} D & e^{-2ik_1(b+a)} F \\ e^{2ik_1(b+a)} G & H \end{pmatrix} \quad (3.17)$$

donde

$$\begin{aligned} D &= e^{ik_1 a} \left(\cosh(k_2 a) - \frac{i(k_1^2 - k_2^2)}{2k_1 k_2} \sinh(k_2 a) \right), \\ F &= e^{ik_1 a} \left(\frac{i(k_1^2 + k_2^2)}{2k_1 k_2} \sinh(k_2 a) \right), \\ G &= -e^{-ik_1 a} \left(\frac{i(k_1^2 + k_2^2)}{2k_1 k_2} \sinh(k_2 a) \right), \end{aligned}$$

y

$$H = e^{-ik_1 a} \left(\cosh(k_2 a) + \frac{i(k_1^2 - k_2^2)}{2k_1 k_2} \sinh(k_2 a) \right). \quad (3.18)$$

Resolviendo la ecuación (3.16) se pueden encontrar los valores de las amplitudes de la onda reflejada B_0 y de la onda transmitida A_2 en términos de la amplitud de la onda de incidencia A_0 , es decir,

$$B_0 = \frac{-e^{2ik_1 b} \left(\frac{i(k_1^2 + k_2^2)}{2k_1 k_2} \sinh(k_2 a) \right) A_0}{\cosh(k_2 a) - \frac{i(k_1^2 - k_2^2)}{2k_1 k_2} \sinh(k_2 a)} \quad (3.19)$$

y

$$A_2 = \frac{e^{-ik_1a} A_0}{\cosh(k_2a) - \frac{i(k_1^2 - k_2^2)}{2k_1k_2} \sinh(k_2a)} . \quad (3.20)$$

Por lo tanto, el coeficiente de transmisión para una partícula de energía $E < V_0$ será

$$T = \frac{|A_2|^2}{|A_0|^2} = \frac{1}{1 + \frac{(k_1^2 + k_2^2)^2}{4k_1^2k_2^2} \sinh^2(k_2a)} , \quad (3.21)$$

el cual en términos de la energía se escribe como

$$T(E) = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} \sinh^2\left(\frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} a\right)} . \quad (3.22)$$

donde la constante a es el ancho de la barrera.

En el caso de una partícula con $E > V_0$, la solución general de la ecuación (3.5) será

$$\psi(x, E) = A_1 e^{ik_3x} + B_1 e^{-ik_3x} , \quad (3.23)$$

donde:

$$k_3(E) = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar} . \quad (3.24)$$

Observe que esta ecuación contiene exponenciales complejas, representando ondas que se mueven en direcciones contrarias.

Procediendo de la misma manera como se hizo en el caso anterior, se obtiene la siguiente expresión

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} &= M_1^{-1}(b, E) \cdot M_3(b, E) \cdot M_3^{-1}(b + a, E) \cdot M_1(b + a, E) \begin{pmatrix} A_2 \\ 0 \end{pmatrix} \\ &= \mathbf{M}(E) \begin{pmatrix} A_2 \\ 0 \end{pmatrix} . \end{aligned} \quad (3.25)$$

donde

$$M_3(x, E) = \begin{pmatrix} e^{ik_3x} & e^{-ik_3x} \\ ik_3 e^{ik_3x} & -ik_3 e^{-ik_3x} \end{pmatrix} \quad (3.26)$$

y su inversa

$$M_3^{-1}(x, E) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} e^{-ik_3x} & -\frac{i}{2k_3} e^{-ik_3x} \\ \frac{1}{2} e^{ik_3x} & \frac{i}{2k_3} e^{ik_3x} \end{pmatrix} . \quad (3.27)$$

Por tanto, el coeficiente de transmisión para el caso de una partícula con energía $E > V_0$ resultará ser

$$T = \frac{1}{1 + \frac{(k_1^2 - k_3^2)^2}{4k_1^2 k_3^2} \sin^2(k_3 a)} . \quad (3.28)$$

Este resultado se puede obtener directamente partiendo de la ecuación (3.21), haciendo la sustitución

$$k_2 = ik_3 . \quad (3.29)$$

La ecuación (3.28) en términos de la energía se puede escribir como

$$T(E) = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(E - V_0)} \sin^2 \left(\frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar} a \right)} . \quad (3.30)$$

Note que para transmisión perfecta ($T = 1$) se cumple

$$E_n = V_0 + \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2} , \quad (3.31)$$

donde n es un número entero positivo.

3.2. Pozo de potencial

Considere una partícula que incide desde la izquierda en dirección en la que x crece sobre el pozo de potencial, que se muestra en la Fig. 3.2 y cuyo potencial esta dado por

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & b < x < b + a \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases} , \quad (3.32)$$

donde $V_0 > 0$.

De acuerdo con la mecánica clásica toda partícula de energía $E > 0$ que incide sobre un pozo tendrá una probabilidad igual a uno de ser transmitida. Pero dentro de la teoría de la mecánica cuántica esta afirmación es incorrecta ya que existe cierta probabilidad de que la partícula sea reflejada.

Para este potencial también se resuelve la ecuación de Shrödinger en tres regiones diferentes: en la izquierda del pozo ($x < b$), en el interior del pozo ($b < x < b + a$) y en la derecha del pozo ($x > b + a$).

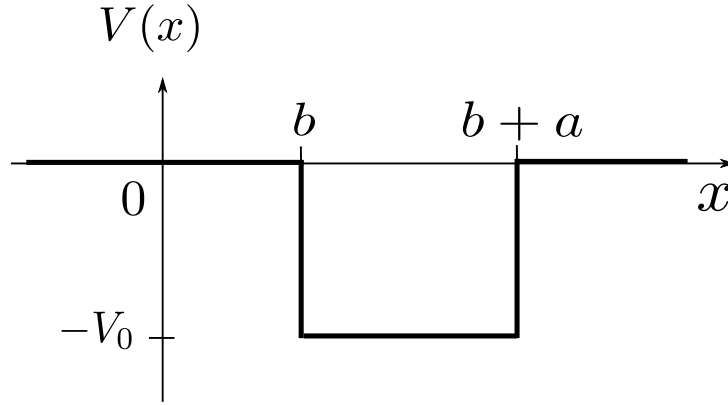


Figura 3.2: Pozo de potencial de profundidad V_0 y ancho a .

En las regiones izquierda y derecha del pozo el potencial es nulo ($V_0 = 0$), de manera que la ecuación de Schrödinger corresponde a la ecuación de una partícula libre

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

con soluciones generales

$$\begin{aligned} \psi(x, E) &= A_0 e^{ik_1 x} + B_0 e^{-ik_1 x} & x < b \\ \psi(x, E) &= A_2 e^{ik_1 x} + B_2 e^{-ik_1 x} & x > b + a , \end{aligned}$$

donde

$$k_1(E) = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

y A_0, B_0, A_2, B_2 son constantes.

En la región interior del pozo la ecuación de Schrödinger tomará la forma

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - V_0\psi(x) = E\psi(x) . \quad (3.33)$$

Dado que estamos considerando el caso en el que $E > 0$, la solución general será una combinación lineal de dos ondas que viajan en direcciones opuestas, es decir,

$$\psi(x, E) = A_1 e^{ik_4 x} + B_1 e^{-ik_4 x} , \quad (3.34)$$

donde

$$k_4(E) = \frac{\sqrt{2m(V_0 + E)}}{\hbar} . \quad (3.35)$$

A partir de esto podemos calcular el coeficiente de transmisión de la misma manera como se hizo para la barrera de potencial, por lo que se obtendrá la expresión análoga a la ecuación (3.16)

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} &= M_1^{-1}(b, E) \cdot M_4(b, E) \cdot M_4^{-1}(b+a, E) \cdot M_1(b+a, E) \begin{pmatrix} A_2 \\ 0 \end{pmatrix} \\ &= \mathbf{M}(E) \begin{pmatrix} A_2 \\ 0 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (3.36)$$

donde

$$M_4(x, E) = \begin{pmatrix} e^{ik_4x} & e^{-ik_4x} \\ ik_4e^{ik_4x} & -ik_4e^{-ik_4x} \end{pmatrix} \quad (3.37)$$

y su inversa

$$M_4^{-1}(x, E) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}e^{-ik_4x} & -\frac{i}{2k_4}e^{-ik_4x} \\ \frac{1}{2}e^{ik_4x} & \frac{i}{2k_4}e^{ik_4x} \end{pmatrix}. \quad (3.38)$$

Calculando la matriz de transferencia en la ecuación (3.36) se obtiene el siguiente resultado

$$T(E) = \frac{1}{1 + \frac{(k_1^2 - k_4^2)^2}{4k_1^2k_4^2} \sin^2(k_4a)}, \quad (3.39)$$

el cual se deduce directamente de la ecuación (3.21), haciendo la sustitución:

$$k_2 = ik_4. \quad (3.40)$$

Por lo tanto el coeficiente de transmisión para una partícula que incide sobre un pozo, como función de la energía será

$$T(E) = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 + E)} \sin^2\left(\frac{\sqrt{2m(V_0 + E)}}{\hbar}a\right)}. \quad (3.41)$$

Nuevamente se puede notar que para tener transmisión perfecta ($T = 1$) se cumple que

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} - V_0, \quad (3.42)$$

donde n es un número entero positivo.

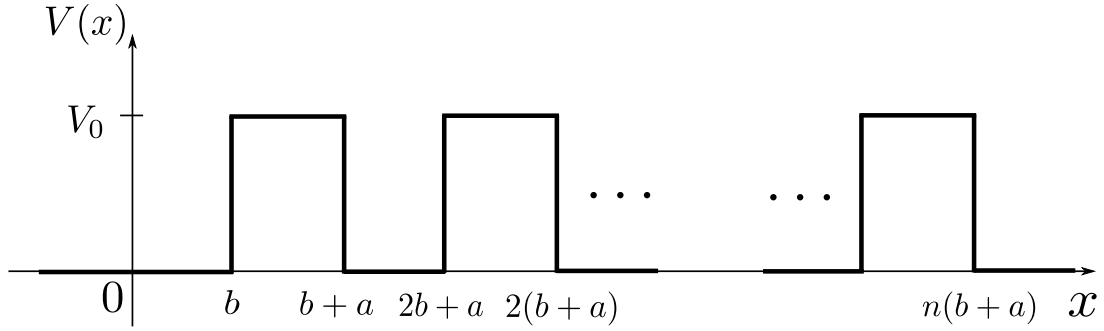


Figura 3.3: Arreglo de n barreras de altura V_0 , ancho a y separación b .

3.3. Transmisión en una secuencia de n barreras

Ahora calculamos el coeficiente de transmisión para una secuencia periódica y finita de n barreras de potencial (ver la Fig. 3.3), el cual como ya se ha mencionado, es un buen modelo para explicar el transporte de un electrón a través de un cristal. El potencial se puede escribir matemáticamente de la siguiente forma

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & jb + (j-1)a < x < j(b+a) \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases}, \quad (3.43)$$

donde $V_0 > 0$ y $j = 1, 2, 3, \dots, n$.

Las ecuaciones de Schrödinger que se deben resolver para cada una de las regiones del potencial son de dos tipos; como la ecuación (2.10) de la partícula libre y como la ecuación (3.5), cuyas soluciones dependerán de si la energía E es mayor o menor que la altura del potencial V_0 .

Para el caso en el que $E < V_0$, las soluciones generales para cada región serán:

$$\begin{aligned} \psi_0(x, E) &= A_0 e^{ik_1 x} + B_0 e^{-ik_1 x} & x < b \\ \psi_1(x, E) &= A_1 e^{k_2 x} + B_1 e^{-k_2 x} & b < x < b+a \\ \psi_2(x, E) &= A_2 e^{ik_1 x} + B_2 e^{-ik_1 x} & b+a < x < 2b+a \\ \psi_3(x, E) &= A_3 e^{k_2 x} + B_3 e^{-k_2 x} & 2b+a < x < 2(b+a) \\ & \vdots & \vdots \\ \psi_{2n-1}(x, E) &= A_{2n-1} e^{k_2 x} + B_{2n-1} e^{-k_2 x} & nb + (n-1)a < x < n(b+a) \\ \psi_{2n}(x, E) &= A_{2n} e^{ik_1 x} + B_{2n} e^{-ik_1 x} & x > n(b+a), \end{aligned} \quad (3.44)$$

donde

$$k_1(E) = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad \text{y} \quad k_2(E) = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar},$$

los coeficientes $A_0, B_0, A_1, B_1, \dots, A_{2n}, B_{2n}$ son constantes.

Aplicando la condición de continuidad de la función de onda (ψ) y su derivada ($\frac{d\psi}{dx}$) en las fronteras de cada región, obtenemos los siguientes sistemas de ecuaciones:

para la frontera en $x = b$

$$\begin{aligned} A_0 e^{ik_1 b} + B_0 e^{-ik_1 b} &= A_1 e^{k_2 b} + B_1 e^{-k_2 b} \\ ik_1 (A_0 e^{ik_1 b} - B_0 e^{-ik_1 b}) &= k_2 (A_1 e^{k_2 b} - B_1 e^{-k_2 b}), \end{aligned}$$

para la frontera en $x = b + a$

$$\begin{aligned} A_1 e^{k_2(b+a)} + B_1 e^{-k_2(b+a)} &= A_2 e^{ik_1(b+a)} + B_2 e^{-ik_1(b+a)} \\ k_2 (A_1 e^{k_2(b+a)} - B_1 e^{-k_2(b+a)}) &= ik_1 (A_2 e^{ik_1(b+a)} - B_2 e^{-ik_1(b+a)}), \end{aligned}$$

para la frontera en $x = 2b + a$

$$\begin{aligned} A_2 e^{ik_1(2b+a)} + B_2 e^{-ik_1(2b+a)} &= A_3 e^{k_2(2b+a)} + B_3 e^{-k_2(2b+a)} \\ ik_1 (A_2 e^{ik_1(2b+a)} + B_2 e^{-ik_1(2b+a)}) &= k_2 (A_3 e^{k_2(2b+a)} + B_3 e^{-k_2(2b+a)}), \\ &\vdots \end{aligned}$$

y para la frontera en $x = n(b + a)$

$$\begin{aligned} A_{2n-1} e^{k_2 n(b+a)} + B_{2n-1} e^{-k_2 n(b+a)} &= A_{2n} e^{ik_1 n(b+a)} + B_{2n} e^{-ik_1 n(b+a)} \\ k_2 (A_{2n-1} e^{k_2 n(b+a)} + B_{2n-1} e^{-k_2 n(b+a)}) &= ik_1 (A_{2n} e^{ik_1 n(b+a)} + B_{2n} e^{-ik_1 n(b+a)}). \end{aligned}$$

Lo anterior se puede expresar en forma matricial como sigue

$$\begin{aligned} M_1(b, E) \begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} &= M_2(b, E) \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} \\ M_2(b+a, E) \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} &= M_1(b+a, E) \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} \\ M_1(2b+a, E) \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} &= M_2(2b+a, E) \begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix} \\ &\vdots \\ M_2(n(b+a), E) \begin{pmatrix} A_{2n-1} \\ B_{2n-1} \end{pmatrix} &= M_1(n(b+a), E) \begin{pmatrix} A_{2n} \\ B_{2n} \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (3.45)$$

donde M_1 y M_2 son las matrices (3.10) y (3.11) respectivamente. La constante B_{2n} es igual a cero, debido a que corresponde a una reflexión en la región derecha de todos los potenciales ($z > n(b+a)$), lo cual no es posible.

Al combinar las ecuaciones del sistema (3.45) obtenemos el resultado

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} &= M_1^{-1}(b, E) \cdot M_2(b, E) \cdot M_2^{-1}(b+a, E) \cdot M_1(b+a, E) \cdots \\ &\cdots M_2^{-1}(n(b+a), E) \cdot M_1(n(b+a), E) \begin{pmatrix} A_{2n} \\ 0 \end{pmatrix} \\ &= \mathbf{M}(E) \begin{pmatrix} A_{2n} \\ 0 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (3.46)$$

donde

$$\begin{aligned} \mathbf{M}(E) &= \prod_{j=1}^n M_1^{-1}(j(b+a)-a, E) \cdot M_2(j(b+a)-a, E) \cdot M_2^{-1}(j(b+a), E) \cdot M_1(j(b+a), E) \\ &= \prod_{j=1}^n \begin{pmatrix} D & e^{-2ik_1j(b+a)}F \\ e^{2ik_1j(b+a)}G & H \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (3.47)$$

y las constantes D , F , G y H estan dadas por las ecuaciones (3.18).

Haciendo el cálculo numérico de la matriz (3.47) podemos conocer el coeficiente de transmisión para una partícula con energía $E < V_0$ que incide sobre una secuencia de n barreras de potencial. Sin embargo, podemos obtener el coeficiente analíticamente si la reescribimos como sigue

$$\mathbf{M}(E) = \prod_{j=1}^n \begin{pmatrix} e^{-ik_1j(b+a)} & 0 \\ 0 & e^{ik_1j(b+a)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} D & F \\ G & H \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ik_1j(b+a)} & 0 \\ 0 & e^{-ik_1j(b+a)} \end{pmatrix}.$$

Desarrollando el producto obtenemos

$$\mathbf{M}(E) = \begin{pmatrix} e^{-ik_1(b+a)}D & e^{-ik_1(b+a)}F \\ e^{ik_1(b+a)}G & e^{ik_1(b+a)}H \end{pmatrix}^n \begin{pmatrix} e^{ik_1n(b+a)} & 0 \\ 0 & e^{-ik_1n(b+a)} \end{pmatrix}.$$

El determinante de la matriz izquierda es igual a uno, lo cual implica poder calcular su potencia n usando la *identidad de Chebyshev* (ver apéndice A), por lo que

$$\mathbf{M}(E) = \begin{pmatrix} \frac{e^{-ik_1(b+a)}D \sin n\theta - \sin(n-1)\theta}{\frac{\sin \theta}{e^{ik_1(b+a)}G \sin n\theta}} & \frac{e^{-ik_1(b+a)}F \sin n\theta}{\frac{\sin \theta}{e^{ik_1(b+a)}H \sin n\theta - \sin(n-1)\theta}} \\ \frac{e^{ik_1(b+a)}G \sin n\theta}{\sin \theta} & \frac{e^{ik_1(b+a)}H \sin n\theta - \sin(n-1)\theta}{\sin \theta} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ik_1n(b+a)} & 0 \\ 0 & e^{-ik_1n(b+a)} \end{pmatrix}, \quad (3.48)$$

donde

$$\theta = \cos^{-1} \left(\cos(k_1 b) \cosh(k_2 a) - \frac{k_1^2 - k_2^2}{2k_1 k_2} \sin(k_1 b) \sinh(k_2 a) \right), \quad (3.49)$$

Calculamos el coeficiente de transmisión a partir de la definición

$$T = \frac{|A_{2n}|^2}{|A_0|^2} = \frac{1}{|\mathbf{M}_{11}|^2}, \quad (3.50)$$

donde \mathbf{M}_{11} es la primer entrada de la matriz de transferencia, que de acuerdo con la ecuación (3.48) resulta ser

$$\mathbf{M}_{11} = \frac{e^{ik_1 n(b+a)} [e^{-ik_1(b+a)} D \sin n\theta - \sin(n-1)\theta]}{\sin \theta}, \quad (3.51)$$

o bien

$$|\mathbf{M}_{11}|^2 = 1 + \frac{(k_1^2 + k_2^2)^2 \sinh^2(k_2 a) \sin^2 n\theta}{4k_1^2 k_2^2 \sin^2 \theta}. \quad (3.52)$$

Por lo tanto, el coeficiente de transmisión para una secuencia de n potenciales rectangulares es

$$T(E) = \frac{1}{1 + \frac{(k_1^2 + k_2^2)^2 \sinh^2(k_2 a) \sin^2 n\theta}{4k_1^2 k_2^2 \sin^2 \theta}}, \quad (3.53)$$

donde θ está dada por la ecuación (3.49). Note que para el caso de una barrera de potencial, es decir, para $n = 1$, el resultado se reduce al obtenido previamente en la ecuación (3.21).

Para el caso en el que $E > V_0$, las soluciones generales para cada región serán:

$$\begin{aligned} \psi_0(x, E) &= A_0 e^{ik_1 x} + B_0 e^{-ik_1 x} & x < b \\ \psi_1(x, E) &= A_1 e^{ik_3 x} + B_1 e^{-ik_3 x} & b < x < b + a \\ \psi_2(x, E) &= A_2 e^{ik_1 x} + B_2 e^{-ik_1 x} & b + a < x < 2b + a \\ \psi_3(x, E) &= A_3 e^{ik_3 x} + B_3 e^{-ik_3 x} & 2b + a < x < 2(b + a) \\ & & \vdots & \vdots \\ \psi_{2n-1}(x, E) &= A_{2n-1} e^{ik_3 x} + B_{2n-1} e^{-ik_3 x} & nb + (n-1)a < x < n(b + a) \\ \psi_{2n}(x, E) &= A_{2n} e^{ik_1 x} + B_{2n} e^{-ik_1 x} & x > n(b + a), \end{aligned} \quad (3.54)$$

donde

$$k_1(E) = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad \text{y} \quad k_3(E) = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar},$$

y los coeficientes $A_0, B_0, A_1, B_2, \dots, A_{2n}, B_{2n}$ son constantes.

Siguiendo el mismo proceso, el sistema que corresponde a este caso es

$$\begin{aligned}
 M_1(b, E) \begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} &= M_3(b, E) \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} \\
 M_3(b+a, E) \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} &= M_1(b+a, E) \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} \\
 &\vdots \\
 M_3(n(b+a), E) \begin{pmatrix} A_{2n-1} \\ B_{2n-1} \end{pmatrix} &= M_1(n(b+a), E) \begin{pmatrix} A_{2n} \\ B_{2n} \end{pmatrix}, \tag{3.55}
 \end{aligned}$$

donde M_3 es la matriz (3.26).

Por lo tanto, la matriz de transferencia que resulta es

$$\begin{aligned}
 \mathbf{M}(E) &= \prod_{j=1}^n M_1^{-1}(j(b+a) - a, E) \cdot M_3(j(b+a) - a, E) \cdot M_3^{-1}(j(b+a), E) \cdot M_1(j(b+a), E) \\
 &= \prod_{j=1}^n \begin{pmatrix} D' & e^{-2ik_1j(b+a)} F' \\ e^{2ik_1j(b+a)} G' & H' \end{pmatrix}, \tag{3.56}
 \end{aligned}$$

donde

$$\begin{aligned}
 D' &= e^{ik_1a} \left(\cos(k_3a) - \frac{i(k_1^2 + k_3^2)}{2k_1k_3} \sin(k_3a) \right), \\
 F' &= e^{ik_1a} \left(\frac{i(k_1^2 - k_3^2)}{2k_1k_3} \sin(k_3a) \right), \\
 G' &= -e^{-ik_1a} \left(\frac{i(k_1^2 - k_3^2)}{2k_1k_3} \sin(k_3a) \right)
 \end{aligned}$$

y

$$H' = e^{-ik_1a} \left(\cos(k_3a) + \frac{i(k_1^2 + k_3^2)}{2k_1k_3} \sin(k_3a) \right), \tag{3.57}$$

con la cual se puede calcular numéricamente el coeficiente de transmisión para una partícula con energía $E > V_0$.

Nuevamente se puede calcular el coeficiente de manera analítica como se hizo para el caso anterior, y obtener como resultado

$$T(E) = \frac{1}{1 + \frac{(k_1^2 - k_3^2)^2 \sin^2(k_3a) \sin^2 n\theta}{4k_1^2 k_3^2 \sin^2 \theta}}, \tag{3.58}$$

con

$$\theta = \cos^{-1} \left(\cos(k_1 b) \cos(k_3 a) - \frac{k_1^2 + k_3^2}{2k_1 k_3} \sin(k_1 b) \sin(k_3 a) \right). \quad (3.59)$$

Para $n = 1$, es decir, para el caso de una barrera, el resultado se reduce al obtenido previamente en la ecuación (3.28).

3.4. Modelo de Kronig-Penney

En esta sección explicamos el comportamiento del coeficiente de transmisión en una secuencia periódica e infinita de barreras de potencial con la ayuda del modelo de Kronig-Penney. El potencial se escribe matemáticamente como

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & jb + (j-1)a < x < j(b+a) \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases}, \quad (3.60)$$

donde $V_0 > 0$ y $j = 1, 2, 3, \dots, \infty$.

Para esto solo nos concentramos en las soluciones de la ecuación de Schrödinger en la región interior y las regiones vecinas de una de las barreras del arreglo periódico, por simplicidad se hará el cálculo sobre la primer barrera ($j = 1$).

En el caso en el que la energía de la partícula incidente sea menor que la altura de la barrera ($E < V_0$) las soluciones son:

$$\begin{aligned} \psi_0(x, E) &= A_0 e^{ik_1 x} + B_0 e^{-ik_1 x} & 0 < x < b \\ \psi_1(x, E) &= A_1 e^{k_2 x} + B_1 e^{-k_2 x} & b < x < b + a \\ \psi_2(x, E) &= A_2 e^{ik_1 x} + B_2 e^{-ik_1 x} & b + a < x < 2b + a, \end{aligned} \quad (3.61)$$

donde

$$k_1(E) = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad \text{y} \quad k_2(E) = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar},$$

y los coeficientes A_0, B_0, A_1, B_1, A_2 y B_2 son constantes.

Aplicamos la condición de continuidad de la función de onda (ψ) y su derivada ($\frac{d\psi}{dx}$)

en $x = b$ y $x = b + a$ para obtener el siguiente sistema

$$\begin{aligned} \psi_0(b, E) &= \psi_1(b, E) \\ \frac{d\psi_0}{dx}(b, E) &= \frac{d\psi_1}{dx}(b, E) \\ \psi_1(b + a, E) &= \psi_2(b + a, E) \\ \frac{d\psi_1}{dx}(b + a, E) &= \frac{d\psi_2}{dx}(b + a, E) . \end{aligned} \quad (3.62)$$

De acuerdo a la ecuación (2.31) equivalente al teorema de Bloch en una dimensión, las funciones de onda ψ_2 y ψ_0 se relacionan por medio de la expresión

$$\psi_2(x, E) = \psi_0(x - (b + a), E)e^{iK(b+a)} , \quad (3.63)$$

donde $R = b + a$ es la periodicidad de la red de barreras de potencial.

Haciendo uso de la relación anterior y de las ecuaciones (3.61), el sistema (3.62) se reescribe como

$$\begin{aligned} A_0e^{ik_1b} + B_0e^{-ik_1b} &= A_1e^{k_2b} + B_1e^{-k_1b} \\ ik_1(A_0e^{ik_1b} - B_0e^{-ik_1b}) &= k_2(A_1e^{k_2b} - B_1e^{-k_2b}) \\ A_1e^{k_2(b+a)} + B_1e^{-k_2(b+a)} &= (A_2 + B_2)e^{iK(b+a)} \\ k_2(A_1e^{k_2(b+a)} - B_1e^{-k_2(b+a)}) &= ik_1(A_2 - B_2)e^{iK(b+a)} . \end{aligned} \quad (3.64)$$

Este sistema de ecuaciones tendrá una única solución si el determinante de los coeficientes A_0 , B_0 , A_1 y B_1 se anula, es decir, si se cumple

$$\cos(K(b + a)) = \cosh(k_2a) \cos(k_1b) + \frac{k_2^2 - k_1^2}{2k_1k_2} \sinh(k_2a) \sin(k_1b) . \quad (3.65)$$

En caso de que la partícula tenga energía $E > V_0$, es necesario hacer en los cálculos anteriores el siguiente cambio

$$k_2 = ik_3 ,$$

donde

$$k_3(E) = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar} ,$$

de manera que la ecuación (3.65) se escribe como

$$\cos(K(b + a)) = \cos(k_3a) \cos(k_1b) - \frac{k_1^2 + k_3^2}{2k_1k_3} \sin(k_3a) \sin(k_1b) . \quad (3.66)$$

Esta condición también es conocida como la relación de dispersión para los elementos que se propagan en un cristal periódico.

3.5. Resultados y discusión

En esta sección se discuten los resultados obtenidos para el coeficiente de transmisión para secuencias de barreras de potencial variando el tamaño, el número de potenciales y la inserción de impurezas.

El transporte de una partícula que incide sobre una barrera rectangular de altura finita se ve afectado por el aumento del ancho de la barrera. En la Fig. 3.4, se puede observar que para una partícula de energía menor que la altura del potencial ($E < 100\text{meV}$) existe cierta probabilidad de que penetre la barrera por efecto túnel, la cual disminuye conforme el ancho de la barrera aumenta. Cuando la energía excede la altura de la barrera, aparecen más valores de la energía con transmisión perfecta a medida que el ancho crece, tal efecto se puede inferir de la ecuación (3.31).

Analizamos una partícula que incide sobre un arreglo de dos barreras de altura finita, en las que fijamos un ancho para estudiar el transporte cuando hacemos variar la separación de las barreras. En la Fig. 3.5, se puede observar que existen valores de energía menores a la altura del potencial (100meV) en los que la partícula puede transmitirse perfectamente a través de las barreras, un efecto túnel que no era concebido clásicamente, y que además el número de estos valores va aumentando conforme la separación entre las barreras crece.

Estudiemos el coeficiente de transmisión de un partícula que incide sobre una secuencia de n barreras manteniendo la altura, el ancho y la separación fijas, para analizar su comportamiento mientras aumentamos el número de este tipo de potenciales. En la Fig. 3.6, notamos el efecto túnel que se observó en el caso de dos barreras, es decir, existen valores energéticos menores a 100meV que permiten a la partícula transmitirse. También podemos notar que conforme el número de barreras aumenta, las energías con transmisión perfecta se desdoblán en más valores muy próximos entre sí; además, notamos la aparición de regiones donde será improbable que la partícula pueda transmitirse, incluso para valores que superan la altura de las barreras. Cuando la secuencia tiende a un número infinito de barreras, el coeficiente de transmisión tenderá a un perfil de bandas de energía continua tanto permitida como prohibida.

El modelo de Kronig-Penney es capaz de predecir la formación de estas bandas de energía para una secuencia periódica e infinita. En la Fig. 3.7, se grafica el coeficiente de transmisión en función de la energía para una secuencia de 100 barreras de altura

100meV, un ancho de 10Å y separados una distancia de 20Å junto con la función

$$f(E) = \begin{cases} \cosh(k_2 a) \cos(k_1 b) + \frac{k_2^2 - k_1^2}{2k_1 k_2} \sinh(k_2 a) \sin(k_1 b) & E < 0 \\ \cos(k_3 a) \cos(k_1 b) - \frac{k_1^2 + k_3^2}{2k_1 k_3} \sin(k_3 a) \sin(k_1 b) & E > 0, \end{cases} \quad (3.67)$$

donde

$$k_1(E) = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad k_2(E) = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \quad \text{y} \quad k_3(E) = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar}.$$

En la Fig. 3.7, se observa como la formación de bandas permitidas de energía coincide con los valores donde las ecuaciones (3.65) y (3.66) tienen solución, es decir, para valores de la función $f(E)$ en el intervalo $[-1, 1]$, por lo que las fronteras entre energía permitida y energía prohibida ocurren cuando

$$f(E) = \cos K(b + a) = \pm 1, \quad (3.68)$$

es decir, para los valores de K dados por

$$K = \frac{\pi}{b + a}, \frac{2\pi}{b + a}, \frac{3\pi}{b + a}, \dots, \quad (3.69)$$

donde $b + a$ es la periodicidad de la red. Esto podría entenderse como consecuencia de una reflexión de Bragg de la onda viajera que representa al electrón propagándose por la red. Si una onda que viaja hacia la derecha incide sobre un conjunto de potenciales que representan regiones entre los iones de la red, espaciadas una distancia uniforme, será parcialmente reflejada por cada uno de los potenciales. Por lo general, las ondas reflejadas que viajan hacia la izquierda no estarán exactamente en fase entre sí y por lo tanto no podrán combinarse constructivamente para producir una onda reflejada neta de amplitud grande. Sin embargo, estarán en fase si la longitud de onda λ (de las ondas incidente y reflejada) está relacionada con el espaciamiento entre potenciales $b + a$ de la condición de Bragg

$$2(b + a) = \lambda, 2\lambda, 3\lambda, \dots, \quad (3.70)$$

$2(b + a)$ es la distancia extra que viaja la onda por la reflexión de potenciales sucesivos, de modo que si es igual a un número entero de longitudes de onda λ , las ondas reflejadas estarán exactamente en fase y habrá una onda reflejada neta cuya amplitud sea igual a la amplitud de la onda incidente. Como λ está dada por

$$\lambda = \frac{2\pi}{K}, \quad (3.71)$$

la condición de Bragg será

$$2(b+a) = \frac{2\pi}{K}, 2\left(\frac{2\pi}{K}\right), 3\left(\frac{2\pi}{K}\right), \dots, \quad (3.72)$$

lo cual es equivalente a la ecuación (3.69), es decir, los valores de K donde se encuentran las fronteras de energía, son justamente aquellos valores del número de onda para los cuales λ satisface la condición de Bragg.

Finalmente consideramos la presencia de impurezas en las secuencias de potenciales rectangulares. En primer lugar consideramos una partícula que incide sobre una secuencia de 10 barreras de potencial de altura 100meV, de ancho 10Å y separados una distancia de 20Å, donde tomaremos como una impureza a una barrera de mismo ancho pero de altura diferente a la del resto. En la Fig. 3.8, se grafica el coeficiente de transmisión para el caso de una sola impureza de altura menor a la del resto de la secuencia (75meV, 50meV y 10meV), además del caso donde se incluye un pozo de profundidad 100meV. En esta gráfica se puede observar la aparición de un valor energético en cada una de las regiones prohibidas con el que la partícula podrá ser transmitida. Nótese que este valor se adentra cada vez más en la región prohibida conforme la altura de la impureza disminuye. Es importante hacer mención que la impureza fue colocada a la mitad del arreglo debido a que en esta posición se hace evidente el efecto ya descrito. Para el caso de una impureza de mayor altura a la del resto de la secuencia, no se observa la aparición del valor energético, como lo muestra la Fig. 3.9 para los valores de 200meV, 300meV, 400meV y 500meV. Sin embargo, podemos notar una baja considerable en la transmisión conforme la altura de esta impureza se incrementa.

En segundo lugar consideramos una partícula que incide sobre la misma secuencia de barreras de potencial, pero ahora se tomará como impureza una longitud de separación diferente a la del resto. En la Fig. 3.10, se grafica el coeficiente de transmisión para los casos de 1, 2, 3 y 10 impurezas de longitud 28Å en la secuencia. En esta gráfica se observa que el número de valores de energía que aparecen en cada una de las regiones prohibidas es igual el número de impurezas presentes en la secuencia. Nótese que conforme el número de impurezas aumenta la estructura de bandas desaparece, y a partir de 6 impurezas la estructura se reconstruye. El caso de 10 impurezas corresponde a la transmisión para una secuencia de 10 barreras de potencial con separación 28Å sin impurezas, por lo que poseerá una estructura de bandas bien definida.

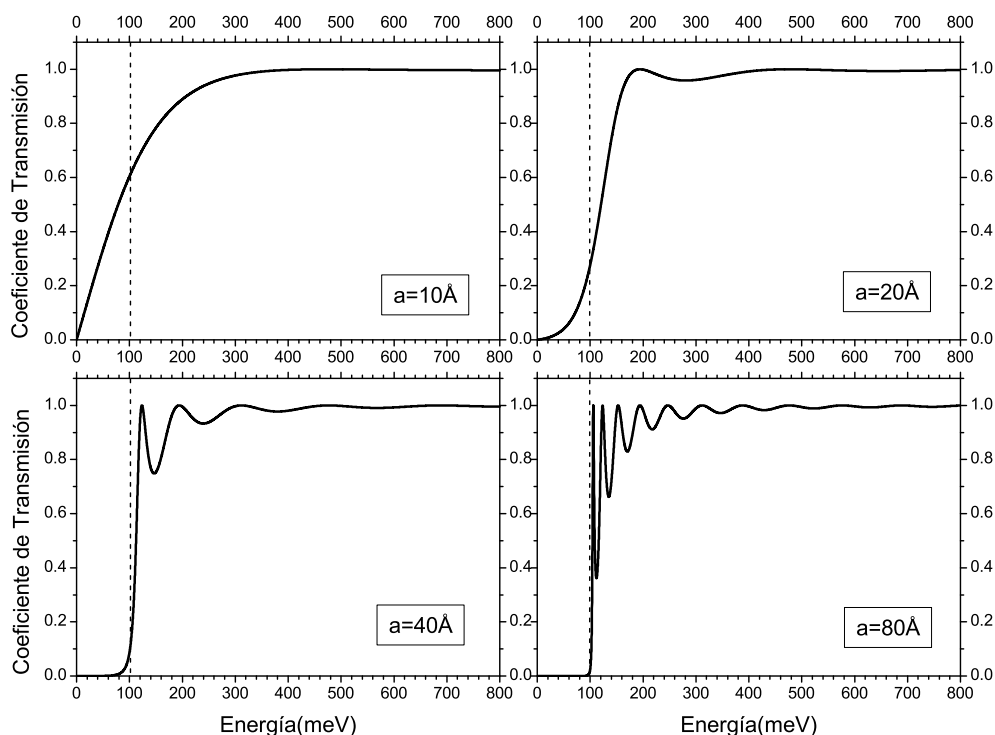


Figura 3.4: Coeficiente de transmisión como función de la energía para una barrera con una altura de 100 meV y diferentes anchos: 10 Å, 20 Å, 40 Å y 80 Å.

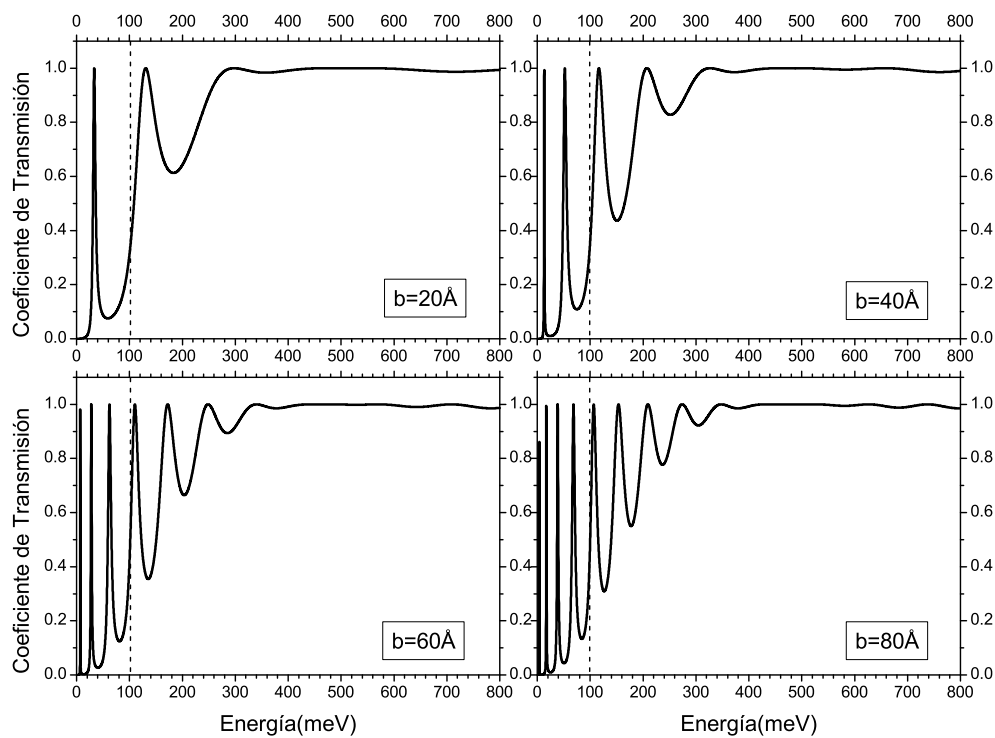


Figura 3.5: Coeficiente de transmisión como función de la energía para una secuencia de dos barreras de altura 100 meV, un ancho de 10 Å y una separación entre barreras de 10 Å, 30 Å, 50 Å y 100 Å respectivamente.

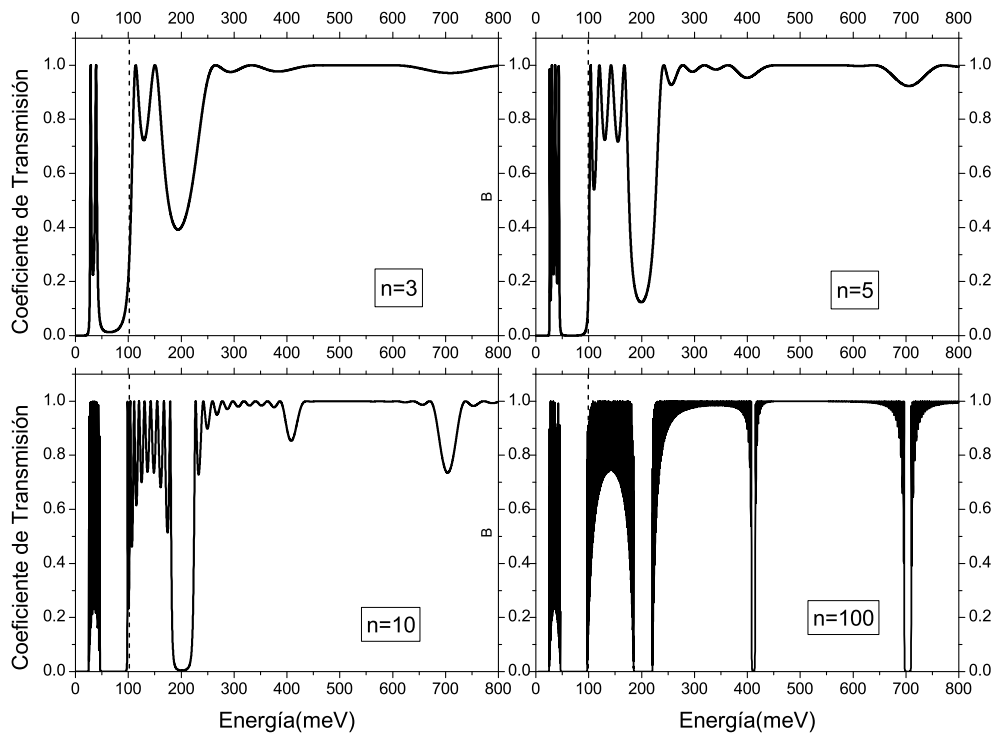


Figura 3.6: Coeficiente de transmisión como función de la energía para una secuencia de 3, 5, 10 y 100 barreras de altura 100meV, un ancho de 10Å y una separación entre barreras de 20Å.

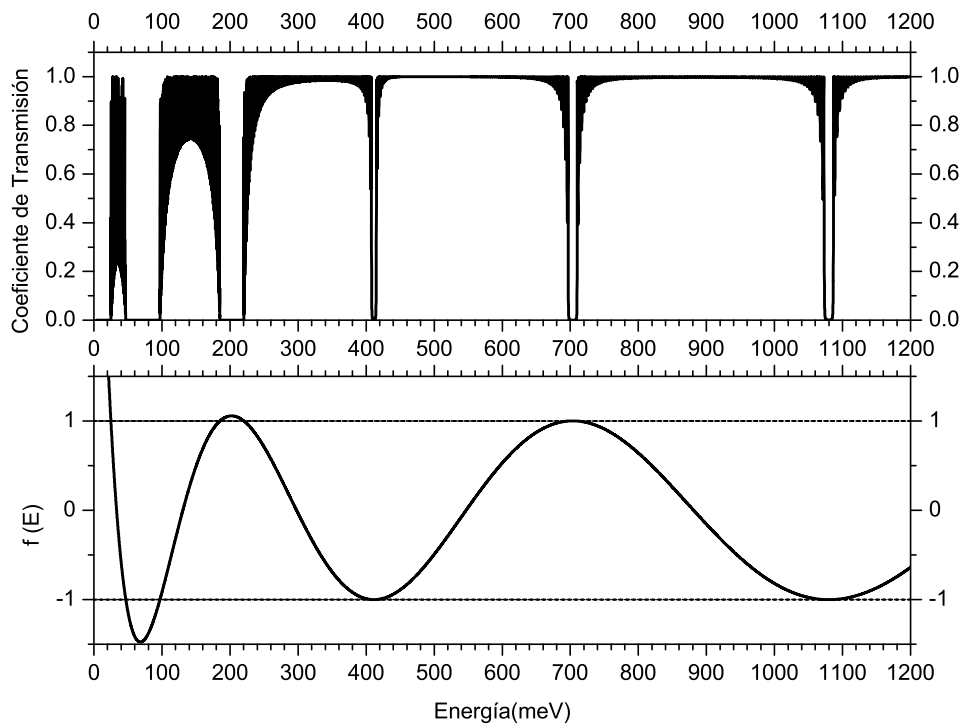


Figura 3.7: Coeficiente de transmisión para una secuencia de 100 barreras de potencial de altura 100meV, un ancho de 10Å y una separación de 20Å, donde se muestran las bandas de energía compatibles con el modelo de Kronig-Penney.

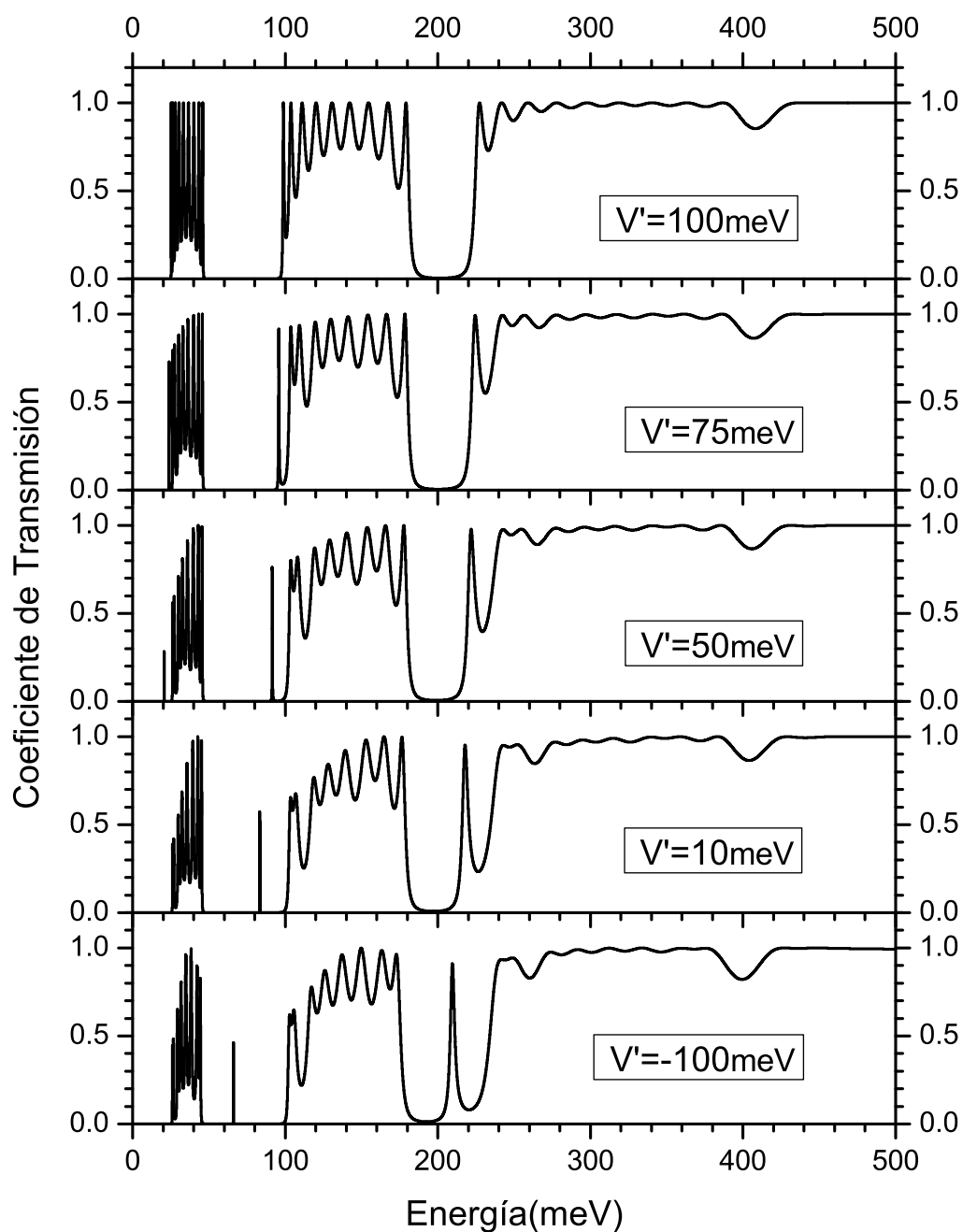


Figura 3.8: Coeficiente de transmisión para una secuencia de 10 barreras de potencial de altura 100meV, de ancho 10Å y separados una distancia de 20Å, en el cual se cambia la altura de una barrera por los valores 75meV, 50meV, 10meV y -100meV (pozo) como impureza.

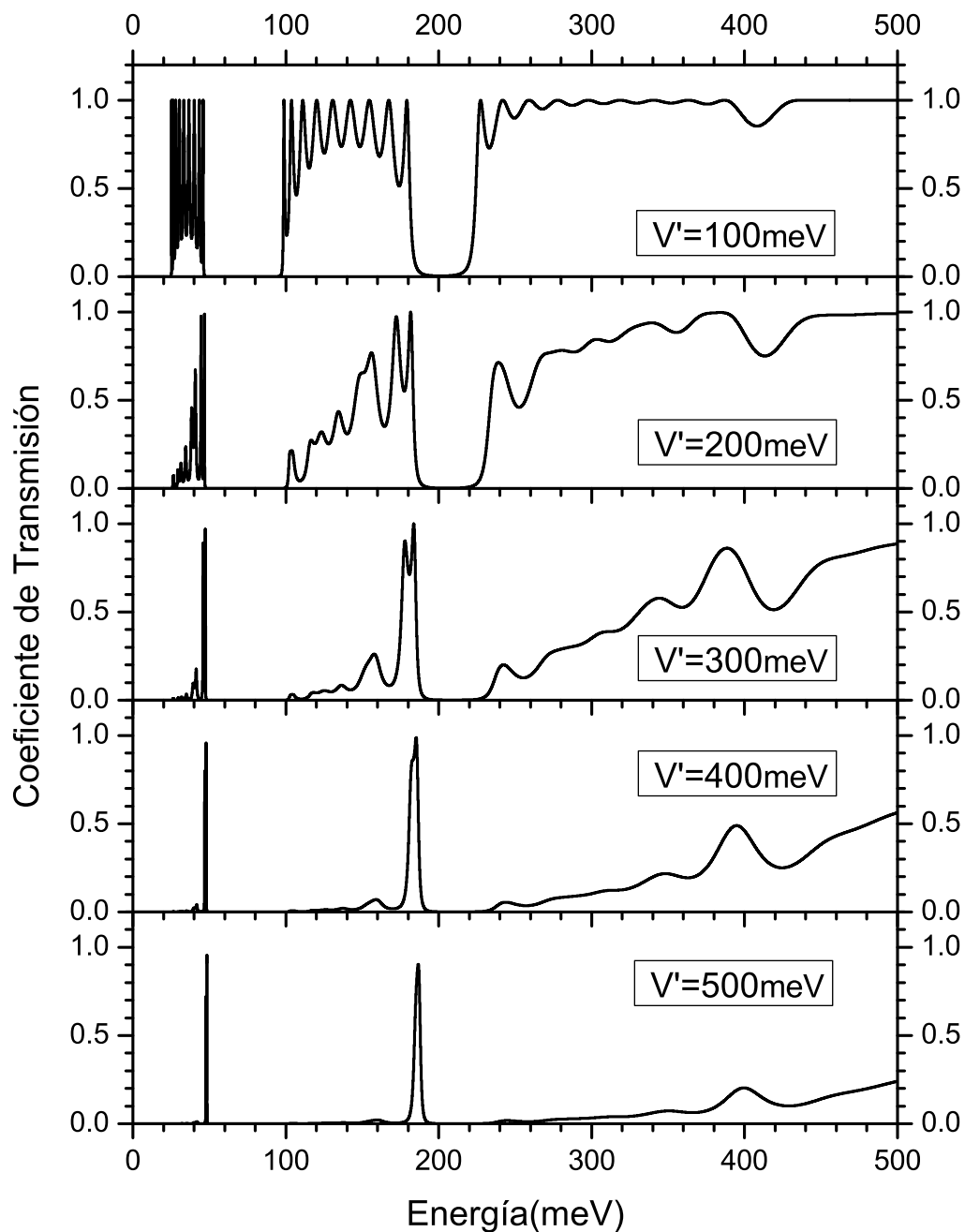


Figura 3.9: Coeficiente de transmisión para una secuencia de 10 barreras de potencial de altura 100meV, de ancho 10\AA y separados una distancia de 20\AA , en el cual se cambia la altura de una barrera por los valores 200meV, 300meV, 400meV y 500meV como impureza.

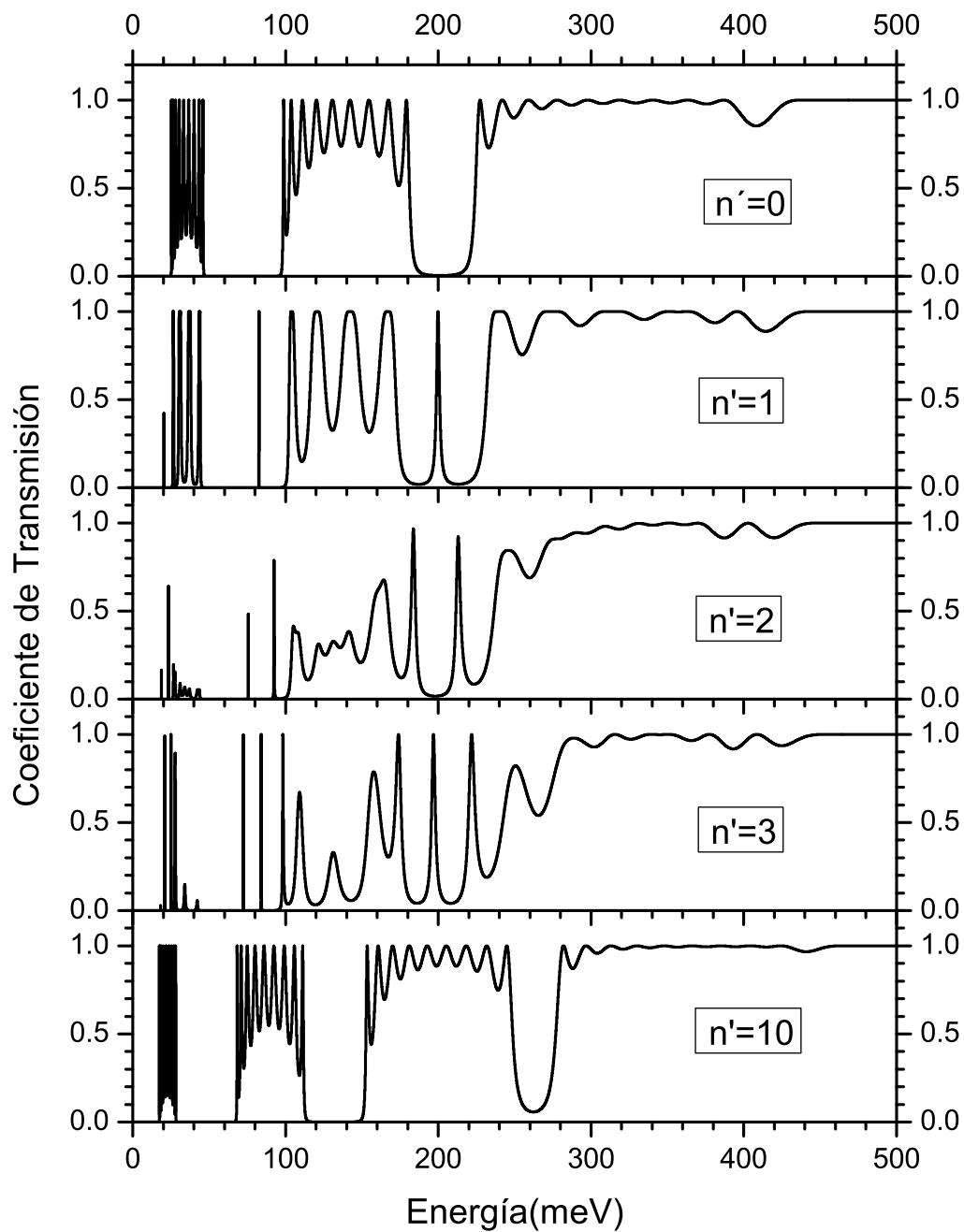


Figura 3.10: Coeficiente de transmisión para una secuencia de 10 barreras de potencial de altura 100meV, con un ancho de 10Å y una distancia de separación de 20Å, en el cual se cambian 1, 2, 3 y 10 distancias de separación de longitud $b'=28\text{Å}$ como impurezas.

Capítulo 4

Potencial tipo delta de Dirac

4.1. Potencial delta

La función delta de Dirac $\delta(x)$ se define como sigue

$$\delta(x) = \begin{cases} \infty & \text{si } x = 0 \\ 0 & \text{si } x \neq 0, \end{cases} \quad (4.1)$$

con

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx = 1. \quad (4.2)$$

En esta sección consideraremos una partícula que incide por la izquierda de un potencial tipo delta de Dirac en dirección hacia donde la x crece, el cual se escribe matemáticamente de la siguiente manera

$$V(x) = \alpha\delta(x - \beta), \quad (4.3)$$

donde α es una constante cualquiera distinta de cero, que en caso de ser positiva representa la altura del potencial tipo delta que se muestra en la Fig. 4.1a o la profundidad si es negativa y se muestra en la Fig. 4.1b. Así, la ecuación de Schrödinger tomará la forma

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \alpha\delta(x - \beta)\psi(x) = E\psi(x). \quad (4.4)$$

En este caso debemos resolver la ecuación de Schrödinger en dos regiones: en la izquierda del potencial ($x < \beta$) y en la derecha del potencial ($x > \beta$), donde las ecuaciones corresponden al caso de la partícula libre (véase ecuación (2.10)) ya que el potencial es

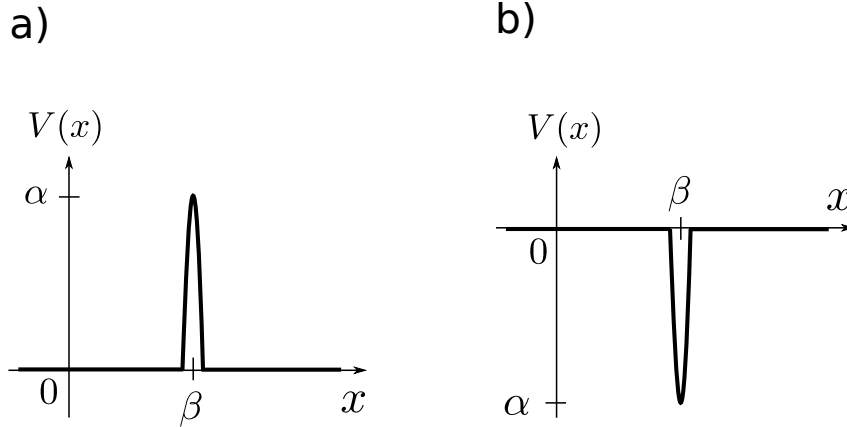


Figura 4.1: Potencial tipo delta de Dirac: a) repulsivo ($\alpha > 0$) y b) atractivo ($\alpha < 0$).

nulo ($V_0 = 0$). Las soluciones generales para cualquier energía $E > 0$ serán:

$$\begin{aligned} \psi(x, E) &= A_0 e^{ikx} + B_0 e^{-ikx} & x < \beta, \\ \psi(x, E) &= A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx} & x > \beta, \end{aligned} \quad (4.5)$$

donde

$$k(E) = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (4.6)$$

y los coeficientes A_0, B_0, A_1, B_1 son constantes. La condición de continuidad de la función de onda (ψ) en $x = \beta$ implica tener

$$A_0 e^{ik\beta} + B_0 e^{-ik\beta} = A_1 e^{ik\beta} + B_1 e^{-ik\beta}. \quad (4.7)$$

Recordemos que en el caso de los potenciales rectangulares también se requirió de la condición de continuidad de la derivada de la función de onda ($\frac{d\psi}{dx}$), lo cual no es válido para el caso del potencial tipo delta, ya que existe una discrepancia entre los límites derecho e izquierdo cuando esta derivada tiende a $x = \beta$, tal discrepancia se calcula integrando la ecuación de Schrödinger

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{\beta-\epsilon}^{\beta+\epsilon} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \alpha \delta(x - \beta) \psi(x) \right\} dx = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{\beta-\epsilon}^{\beta+\epsilon} E \psi(x) dx, \quad (4.8)$$

o bien

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{\beta-\epsilon}^{\beta+\epsilon} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} dx + \alpha \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{\beta-\epsilon}^{\beta+\epsilon} \delta(x - \beta) \psi(x) dx = E \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{\beta-\epsilon}^{\beta+\epsilon} \psi(x) dx.$$

En el miembro izquierdo de esta ecuación la primer integral no es más que la derivada de la función de onda ($\frac{d\psi}{dx}$) evaluada en los límites de integración, la segunda integral se calcula

utilizando las propiedades de la función delta de Dirac y la integral del miembro derecho es cero, ya que es el área de una función finita cuyo ancho disminuye infinitesimalmente, por lo tanto

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left\{ \frac{d\psi}{dx} \Big|_{\beta+\epsilon} - \frac{d\psi}{dx} \Big|_{\beta-\epsilon} \right\} = \frac{2m\alpha}{\hbar^2} \psi(\beta). \quad (4.9)$$

Las derivadas y la función de onda evaluada en $x = \beta$ se calculan utilizando las ecuaciones (4.5) para las regiones izquierda ($x < \beta$) y derecha ($x > \beta$) del potencial. Así llegamos a la siguiente ecuación

$$A_0 e^{ik\beta} \left(\frac{2m\alpha}{\hbar^2} + ik \right) + B_0 e^{-ik\beta} \left(\frac{2m\alpha}{\hbar^2} - ik \right) = ik(A_1 e^{ik\beta} - B_1 e^{-ik\beta}). \quad (4.10)$$

Se hace uso de la técnica de la matriz de transferencia para resolver el sistema de las ecuaciones (4.7) y (4.10) en la forma matricial

$$\begin{pmatrix} e^{ik\beta} & e^{-ik\beta} \\ e^{ik\beta} \left(\frac{2m\alpha}{\hbar^2} + ik \right) & e^{-ik\beta} \left(\frac{2m\alpha}{\hbar^2} - ik \right) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{ik\beta} & e^{-ik\beta} \\ ik e^{ik\beta} & -ik e^{-ik\beta} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix},$$

es decir,

$$M_1(\beta, E) \begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} = M_2(\beta, E) \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix}, \quad (4.11)$$

donde

$$M_1(x, E) = \begin{pmatrix} e^{ikx} & e^{-ikx} \\ e^{ikx} \left(\frac{2m\alpha}{\hbar^2} + ik \right) & e^{-ikx} \left(\frac{2m\alpha}{\hbar^2} - ik \right) \end{pmatrix} \quad (4.12)$$

y

$$M_2(x, E) = \begin{pmatrix} e^{ikx} & e^{-ikx} \\ ik e^{ikx} & -ik e^{-ikx} \end{pmatrix}. \quad (4.13)$$

Dado que la matriz M_1 es invertible podemos escribir las amplitudes de entrada en términos de las de salida

$$\begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} = M_1^{-1}(\beta, E) \cdot M_2(\beta, E) \begin{pmatrix} A_1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4.14)$$

$$= \mathbf{M}(E) \begin{pmatrix} A_1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (4.15)$$

con

$$\mathbf{M}(E) = \begin{pmatrix} 1 + \frac{i m \alpha}{k \hbar^2} & e^{-2ik\beta} \left(\frac{i m \alpha}{k \hbar^2} \right) \\ -e^{2ik\beta} \left(\frac{i m \alpha}{k \hbar^2} \right) & 1 - \frac{i m \alpha}{k \hbar^2} \end{pmatrix}, \quad (4.16)$$

donde la constante B_1 se tomó igual a cero, ya que no hay reflexión en la región derecha ($x > \beta$) del potencial.

Resolviendo el sistema podemos expresar las amplitudes de las ondas reflejada B_0 y transmitida A_1 en términos de la amplitud de la onda de incidencia A_0 como sigue

$$A_1 = \frac{1}{1 + \frac{i m \alpha}{k \hbar^2}} A_0 \quad (4.17)$$

$$B_0 = \frac{-i m \alpha e^{i2k\beta}}{k \hbar^2 + i m \alpha} A_0. \quad (4.18)$$

Recordemos que el coeficiente de transmisión especifica la probabilidad de que la partícula sea transmitida a través del potencial delta desde la región $x < \beta$ a la región $x > \beta$, el cual matemáticamente se escribe

$$T = \frac{|A_1|^2}{|A_0|^2} = \frac{1}{1 + \left(\frac{m \alpha}{k \hbar^2} \right)^2}. \quad (4.19)$$

Por lo tanto, el coeficiente de transmisión como función de la energía es

$$T(E) = \frac{1}{1 + \frac{m \alpha^2}{2 \hbar^2 E}}. \quad (4.20)$$

Es importante notar que el signo de α es irrelevante, por lo que el coeficiente de transmisión es el mismo tanto para un potencial delta repulsivo ($\alpha > 0$) como para uno atractivo ($\alpha < 0$).

4.2. Transmisión en una secuencia de n deltas

Ahora consideraremos una secuencia de n potenciales tipo delta de Dirac mostrado en la Fig. 4.2; y se escribe matemáticamente como

$$V(x) = \sum_{r=1}^n \alpha \delta(x - r\beta), \quad (4.21)$$

donde la constante β representa la separación entre potenciales y α la altura de los potenciales delta, la cual si es positiva representa un potencial repulsivo, y si es negativa un potencial atractivo.

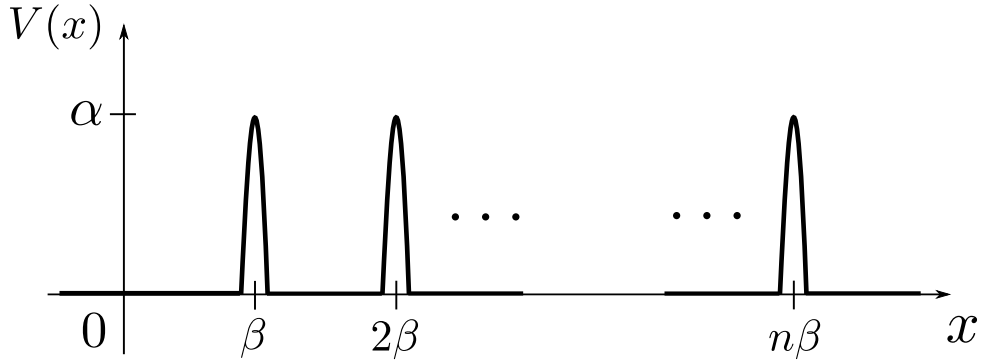


Figura 4.2: Secuencia de n deltas de altura α y una separación de β .

Para las regiones izquierda y derecha de cada delta se resuelve la ecuación de Schrödinger para una partícula libre (véase ecuación (2.10)). Las soluciones generales por cada región son:

$$\begin{aligned}
 \psi_0(x, E) &= A_0 e^{ikx} + B_0 e^{-ikx} & x < \beta \\
 \psi_1(x, E) &= A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx} & \beta < x < 2\beta \\
 \psi_2(x, E) &= A_2 e^{ikx} + B_2 e^{-ikx} & 2\beta < x < 3\beta \\
 \psi_3(x, E) &= A_3 e^{ikx} + B_3 e^{-ikx} & 3\beta < x < 4\beta \\
 & \vdots & \vdots \\
 \psi_{n-1}(x, E) &= A_{n-1} e^{ikx} + B_{n-1} e^{-ikx} & (n-1)\beta < x < n\beta \\
 \psi_n(x, E) &= A_n e^{ikx} + B_n e^{-ikx} & x > n\beta,
 \end{aligned} \tag{4.22}$$

donde

$$k(E) = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

y los coeficientes $A_0, B_0, A_1, B_1, \dots, A_n, B_n$ son constantes.

Igual como se hizo para el caso de un solo potencial delta, aplicamos la condición de continuidad de la función de onda (ψ) en la frontera de cada potencial, obteniendo el siguiente grupo de ecuaciones:

$$A_{j-1} e^{ik(j\beta)} + B_{j-1} e^{-ik(j\beta)} = A_j e^{ik(j\beta)} + B_j e^{-ik(j\beta)}, \tag{4.23}$$

con $j = 1, 2, 3, \dots, n$.

Recordemos que la condición de continuidad de la derivada de la función de onda ($\frac{d\psi}{dx}$) no es válida para los potenciales tipo delta. Existe una discrepancia entre los límites

derecho e izquierdo de esta derivada en cada uno de los potenciales de la secuencia, la cual puede ser calculada integrando la ecuación de Schrödinger

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{j\beta-\epsilon}^{j\beta+\epsilon} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \sum_{r=1}^n \alpha \delta(x-r\beta) \psi(x) \right\} dx = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{j\beta-\epsilon}^{j\beta+\epsilon} E \psi(x) dx ,$$

o bien

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{j\beta-\epsilon}^{j\beta+\epsilon} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} dx + \alpha \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{j\beta-\epsilon}^{j\beta+\epsilon} \delta(x-j\beta) \psi(x) dx = E \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{j\beta-\epsilon}^{j\beta+\epsilon} \psi(x) dx , \quad (4.24)$$

ya que

$$\int_{j\beta-\epsilon}^{j\beta+\epsilon} \sum_{r=1}^n \alpha \delta(x-r\beta) \psi(x) dx = \alpha \int_{j\beta-\epsilon}^{j\beta+\epsilon} \delta(x-j\beta) \psi(x) dx . \quad (4.25)$$

La primer integral del miembro izquierdo de la ecuación (4.24) es la derivada de la función de onda evaluada en los límites de integración, la segunda integral se calcula usando las propiedades de la función delta y la integral del miembro derecho es cero, ya que se trata del área de una función finita cuyo ancho disminuye infinitesimalmente, es decir,

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left\{ \frac{d\psi}{dx} \Big|_{j\beta+\epsilon} - \frac{d\psi}{dx} \Big|_{j\beta-\epsilon} \right\} = \frac{2m\alpha_j}{\hbar^2} \psi|_{j\beta} . \quad (4.26)$$

Estas derivadas se evalúan utilizando las ecuaciones (4.22) para las regiones derecha ($x < j\beta$) e izquierda ($x > j\beta$) de cada uno de los potenciales; además, la función de onda evaluada en $x = j\beta$ también hace uso de una de estas ecuaciones. Así, podemos llegar al siguiente grupo de ecuaciones:

$$A_{j-1} e^{ik(j\beta)} \left(\frac{2m\alpha}{\hbar^2} + ik \right) + B_{j-1} e^{-ik(j\beta)} \left(\frac{2m\alpha}{\hbar^2} - ik \right) = ik(A_j e^{ik(j\beta)} - B_j e^{-ik(j\beta)}) , \quad (4.27)$$

con $j = 1, 2, 3, \dots, n$.

El sistema de las ecuaciones (4.23) y (4.27) se puede resolver de la manera matricial

$$M_1(j\beta, E) \begin{pmatrix} A_{j-1} \\ B_{j-1} \end{pmatrix} = M_2(j\beta, E) \begin{pmatrix} A_j \\ B_j \end{pmatrix} , \quad (4.28)$$

donde M_1 y M_2 son las matrices (4.12) y (4.13) respectivamente. La matriz $M_1(x, E)$ es una matriz invertible (su determinante es distinto de cero), entonces

$$\begin{pmatrix} A_{j-1} \\ B_{j-1} \end{pmatrix} = M_1^{-1}(j\beta, E) \cdot M_2(j\beta, E) \begin{pmatrix} A_j \\ B_j \end{pmatrix} . \quad (4.29)$$

Podemos combinar estas n ecuaciones para expresar las amplitudes de incidencia A_0 y de reflexión B_0 en términos de la amplitud de salida A_n , es decir,

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} &= M_1^{-1}(\beta, E) \cdot M_2(\beta, E) \cdot M_1^{-1}(2\beta, E) \cdot M_2(2\beta, E) \cdots \\ &M_1^{-1}(n\beta, E) \cdot M_2(n\beta, E) \begin{pmatrix} A_n \\ 0 \end{pmatrix} \\ &= \mathbf{M}(E) \begin{pmatrix} A_n \\ 0 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (4.30)$$

donde

$$\begin{aligned} \mathbf{M}(E) &= \prod_{j=1}^n M_1^{-1}(j\beta, E) \cdot M_2(j\beta, E) \\ &= \prod_{j=1}^n \begin{pmatrix} 1 + \frac{i m \alpha}{k \hbar^2} & e^{-2ik(j\beta)} \left(\frac{i m \alpha}{k \hbar^2} \right) \\ -e^{2ik(j\beta)} \left(\frac{i m \alpha}{k \hbar^2} \right) & 1 - \frac{i m \alpha}{k \hbar^2} \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (4.31)$$

a partir de la cual se puede calcular el coeficiente de transmisión T de forma numérica. Sin embargo, es posible calcular el coeficiente analíticamente escribiendo la matriz de transferencia de la siguiente manera

$$\mathbf{M}(E) = \prod_{j=1}^n \begin{pmatrix} e^{-ik(j\beta)} & 0 \\ 0 & e^{ik(j\beta)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 + \frac{i m \alpha}{k \hbar^2} & \left(\frac{i m \alpha}{k \hbar^2} \right) \\ -\left(\frac{i m \alpha}{k \hbar^2} \right) & 1 - \frac{i m \alpha}{k \hbar^2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ik(j\beta)} & 0 \\ 0 & e^{-ik(j\beta)} \end{pmatrix}.$$

Desarrollando el producto obtenemos

$$\mathbf{M}(E) = \begin{pmatrix} e^{-ik\beta} \left(1 + \frac{i m \alpha}{k \hbar^2} \right) & e^{-ik\beta} \left(\frac{i m \alpha}{k \hbar^2} \right) \\ -e^{ik\beta} \left(\frac{i m \alpha}{k \hbar^2} \right) & e^{ik\beta} \left(1 - \frac{i m \alpha}{k \hbar^2} \right) \end{pmatrix}^n \begin{pmatrix} e^{ik(n\beta)} & 0 \\ 0 & e^{-ik(n\beta)} \end{pmatrix}. \quad (4.32)$$

El determinante de la matriz izquierda es igual a uno, lo cual implica poder calcular su potencia n usando la *identidad de Chebyshev* (ver apéndice A), y entonces poder escribir la matriz de transferencia como

$$\mathbf{M}(E) = \begin{pmatrix} \frac{D \sin n\theta - \sin(n-1)\theta}{\sin \theta} & \frac{F \sin n\theta}{\sin \theta} \\ \frac{G \sin n\theta}{\sin \theta} & \frac{H \sin n\theta - \sin(n-1)\theta}{\sin \theta} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ik(n\beta)} & 0 \\ 0 & e^{-ik(n\beta)} \end{pmatrix}, \quad (4.33)$$

donde

$$\begin{aligned}
 D &= e^{-ik\beta} \left(1 + \frac{im\alpha}{k\hbar^2} \right), \\
 F &= e^{-ik\beta} \left(\frac{im\alpha}{k\hbar^2} \right), \\
 G &= -e^{ik\beta} \left(\frac{im\alpha}{k\hbar^2} \right), \\
 H &= e^{ik\beta} \left(1 - \frac{im\alpha}{k\hbar^2} \right)
 \end{aligned} \tag{4.34}$$

y

$$\theta = \cos^{-1} \left[\cos k\beta + \left(\frac{m\alpha}{k\hbar^2} \right) \sin k\beta \right]. \tag{4.35}$$

Calculamos el coeficiente de transmisión a partir de su definición

$$T = \frac{|A_n|^2}{|A_0|^2} = \frac{1}{|\mathbf{M}_{11}|^2}, \tag{4.36}$$

donde \mathbf{M}_{11} es la primer entrada de la matriz de transferencia, que de acuerdo con la ecuación (4.33) resulta ser

$$\mathbf{M}_{11} = \frac{e^{ik(n\beta)} \left[e^{-ik\beta} \left(1 + \frac{im\alpha}{k\hbar^2} \right) \sin n\theta - \sin(n-1)\theta \right]}{\sin \theta}, \tag{4.37}$$

o bien

$$|\mathbf{M}_{11}|^2 = 1 + \left(\frac{m\alpha}{k\hbar^2} \right)^2 \frac{\sin^2 n\theta}{\sin^2 \theta}. \tag{4.38}$$

Por lo tanto, el coeficiente de transmisión en terminos de la energía será

$$T(E) = \frac{1}{1 + \left(\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2 E} \right) \frac{\sin^2 n\theta}{\sin^2 \theta}}, \tag{4.39}$$

donde

$$\theta = \cos^{-1} \left[\cos \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \beta + \left(\frac{m\alpha}{\hbar\sqrt{2mE}} \right) \sin \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \beta \right]. \tag{4.40}$$

Para $n = 1$, es decir, para el caso de una delta, el resultado se reduce al obtenido previamente en la ecuación (4.20).

4.3. Modelo de Kronig-Penney

Consideramos el potencial periódico tipo delta de Dirac que matemáticamente se escribe de la siguiente forma

$$V(x) = \sum_{r=1}^{\infty} \alpha \delta(x - r\beta) , \quad (4.41)$$

los potenciales son repulsivos, por lo que α será positivo.

Nos concentraremos solo en las soluciones a la ecuación de Schrödinger en las regiones anterior y posterior de alguno de los potenciales delta del arreglo periódico. Para el primer delta las soluciones son

$$\psi_0(x, E) = A_0 e^{ikx} + B_0 e^{-ikx} \quad 0 < x < \beta \quad (4.42)$$

$$\psi_1(x, E) = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx} \quad \beta < x < 2\beta , \quad (4.43)$$

donde

$$k(E) = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

y los coeficientes A_0 , B_0 , A_1 , B_1 son constantes.

La condición de continuidad de la función de onda ψ en $x = \beta$ implica que

$$\psi_0(\beta, E) = \psi_1(\beta, E) . \quad (4.44)$$

De acuerdo al teorema de Bloch, las funciones de onda ψ_0 y ψ_1 estan relacionadas por la expresión

$$\begin{aligned} \psi_1(\beta, E) &= \psi_0(\beta - \beta, E) e^{iK\beta} \\ &= \psi_0(0, E) e^{iK\beta} , \end{aligned} \quad (4.45)$$

así la ecuación (4.44) se reescribe como

$$\psi_0(\beta, E) = \psi_0(0, E) e^{iK\beta} . \quad (4.46)$$

La condición de continuidad de la derivada de la función de onda para potenciales tipo delta no es válida, existe una discrepancia entre los límites derecho e izquierdo en la frontera de $x = \beta$, que se calcula integrando la ecuación de Schrödinger, de manera que obtenemos la siguiente expresión

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left\{ \frac{d\psi}{dx} \Big|_{\beta+\epsilon} - \frac{d\psi}{dx} \Big|_{\beta-\epsilon} \right\} = \frac{2m\alpha}{\hbar^2} \psi|_{\beta} , \quad (4.47)$$

es decir,

$$\frac{d\psi_1}{dz}(\beta, E) - \frac{d\psi_0}{dz}(\beta, E) = \frac{2m\alpha}{\hbar^2}\psi(\beta, E) , \quad (4.48)$$

donde la función de onda ψ puede ser calculada usando cualquiera de las funciones ψ_0 o ψ_1 . La ecuación (4.45), obtenida a partir del teorema de Bloch, puede ser usada para reescribir la ecuación (4.48) como

$$\frac{d\psi_0}{dx}(0, E)e^{iK\beta} - \frac{d\psi_0}{dx}(\beta, E) = \frac{2m\alpha}{\hbar^2}\psi_0(\beta, E) . \quad (4.49)$$

De las ecuaciones (4.46) y (4.49), con la ayuda de la ecuación (4.42), obtenemos

$$\begin{aligned} A_0(e^{ik\beta} - e^{iK\beta}) &= B_0(-e^{-ik\beta} + e^{iK\beta}) \\ A_0\left(ike^{ik\beta} + \frac{2m\alpha}{\hbar^2}e^{ik\beta} - ike^{iK\beta}\right) &= B_0\left(ike^{-ik\beta} - \frac{2m\alpha}{\hbar^2}e^{-ik\beta} - ike^{iK\beta}\right) , \end{aligned} \quad (4.50)$$

el cual tiene solución única si el determinante de los coeficientes A_0 y B_0 es igual a cero, es decir, se cumple la condición

$$\cos(K\beta) = \frac{m\alpha}{\hbar^2 k} \sin(k\beta) + \cos(k\beta) . \quad (4.51)$$

Esta condición también es conocida como la relación de dispersión para los elementos que se propagan en un cristal periódico.

4.4. Resultados y discusión

En esta sección se realiza el mismo análisis que se hizo para los potenciales rectangulares en el capítulo anterior, con el fin de estudiar el coeficiente de transmisión como función de la energía variando las dimensiones, el número de potenciales y la presencia de impurezas.

En primer lugar nos damos cuenta que es muy importante elegir el valor de la constante α , ya que esta representa que tan alto es el potencial tipo delta, es decir, que tan fuerte es la repulsión de una partícula que incide sobre este potencial generado por un átomo localizado. En la Fig. 4.3, notamos que cuando la altura del potencial delta es muy pequeña, la partícula se transmite sin problema, mientras que cuando esta altura es cada vez más grande, la probabilidad de que la partícula sea reflejada aumenta. Por lo tanto, en nuestros cálculos posteriores tomaremos a la constante α grande para poder estudiar las propiedades de este tipo de potenciales.

Consideramos una partícula que incide sobre una secuencia de dos potenciales delta idénticos, en los que mantenemos una altura fija ($\alpha=2000\text{meV}$), para analizar el comportamiento del transporte cuando variamos la separación entre ellos. En la Fig. 4.4, se observa que el número de valores de la energía en los que la partícula tiene transmisión perfecta aumenta, conforme la separación crece.

Analizamos ahora el comportamiento de la transmisión cuando aumentamos la cantidad de potenciales delta en la secuencia, manteniendo la altura y la separación fijas. Para este análisis partimos del estudio anterior para una secuencia de dos deltas separadas una distancia de 20\AA , en la cual se observó que existen valores de la energía donde se hace presente un efecto túnel. Como se muestra en la Fig. 4.5, cada uno de ellos se desdobra en más valores muy próximos conforme se aumenta el número de potenciales; además, notamos la aparición de regiones donde será improbable la transmisión de la partícula. Por lo tanto, podemos predecir que en el caso límite de una infinidad de potenciales se formarán bandas continuas de energía permitida (donde la partícula será transmitida) y bandas de energía prohibida (donde la partícula será reflejada).

El modelo de Kronig-Penney, como se mencionó en el capítulo anterior, explica la aparición de estas bandas de energía en un arreglo periódico infinito. En la Fig. 4.6, se grafica el coeficiente de transmisión de un arreglo de 100 potenciales delta separados una distancia de 20\AA junto con

$$f(E) = \frac{m\alpha}{\hbar^2 k} \sin(k\beta) + \cos(k\beta), \quad (4.52)$$

con

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar},$$

como funciones de la energía (en meV). En ella podemos observar que las bandas permitidas de energía coincide con los valores donde la ecuación (4.51) tiene solución, es decir, cuando el valor de la función $f(E)$ se encuentra en el intervalo $[-1, 1]$, por lo que las fronteras entre energía permitida y energía prohibida siempre ocurren cuando

$$f(E) = \cos K\beta = \pm 1, \quad (4.53)$$

es decir, para los valores de K dados por

$$K = \frac{\pi}{\beta}, \frac{2\pi}{\beta}, \frac{3\pi}{\beta}, \dots \quad (4.54)$$

donde β es la periodicidad de la red.

Igual que para el caso de barreras de potencial, esto podría entenderse como consecuencia de una reflexión de Bragg. Las ondas reflejadas por los potenciales sucesivos estarán en fase si la longitud de onda λ (de las ondas incidente y reflejada) está relacionada con el espaciamiento (β) entre potenciales de la condición de Bragg

$$2\beta = \lambda, 2\lambda, 3\lambda, \dots \quad (4.55)$$

En este caso 2β es la distancia extra que viaja la onda por la reflexión de potenciales sucesivos, de modo que si es igual a un número entero de longitudes de onda λ , las ondas reflejadas estarán exactamente en fase y habrá una onda reflejada neta cuya amplitud sea igual a la amplitud de la onda incidente. Ya que λ está dada como

$$\lambda = \frac{\beta\pi}{K}, \quad (4.56)$$

la condición de Bragg nos da la relación entre K y β

$$2\beta = \frac{2\pi}{K}, 2\left(\frac{2\pi}{K}\right), 3\left(\frac{2\pi}{K}\right), \dots \quad (4.57)$$

es decir, los valores de K para una reflexión constructiva.

Finalmente consideramos la presencia de impurezas en las secuencias de potenciales tipo delta. En primer lugar consideramos una partícula que incide sobre una secuencia de 10 potenciales delta de altura 2000meV y separados una distancia de 20Å, donde tomaremos como una impureza a un delta de altura diferente a la del resto. En la Fig. 4.7, se grafica el coeficiente de transmisión para el caso de una sola impureza de altura menor a la del resto de la secuencia (1500meV, 1000meV y 500meV), además del caso donde se incluye un pozo de profundidad 2000meV. En esta gráfica se puede observar la aparición de un valor energético en cada una de las regiones prohibidas con el que la partícula tendrá la posibilidad de ser transmitida. Nótese que este valor se adentra cada vez más en la región prohibida conforme la altura de la impureza disminuye. Es importante hacer mención que la impureza fue colocada a la mitad del arreglo debido a que en esta posición se hace mas evidente el efecto ya descrito. Para el caso de una impureza de mayor altura a la del resto de la secuencia, no se observa la aparición del valor energético, como lo muestra la Fig. 4.8 para los valores de 3000meV, 4000meV, 5000meV y 10000meV. Sin embargo, podemos notar una baja considerable en la transmisión conforme la altura de esta impureza se incrementa.

En segundo lugar consideramos una partícula que incide sobre la misma secuencia de potenciales tipo delta, pero ahora se tomará como impureza una longitud de separación diferente a la del resto. En la Fig. 4.9, se grafica el coeficiente de transmisión para los casos de 1, 2, 3 y 10 impurezas de longitud 25\AA en la secuencia. En esta gráfica se observa que el número de valores de energía que aparecen en cada una de las regiones prohibidas es igual el número de impurezas presentes en la secuencia. Nótese que conforme el número de impurezas aumenta la estructura de bandas desaparece, y a partir de 6 impurezas la estructura se reconstruye. El caso de 10 impurezas corresponde a la transmisión para una secuencia de 10 deltas de con una separación 25\AA sin impurezas, por lo que poseerá una estructura de bandas bien definida.

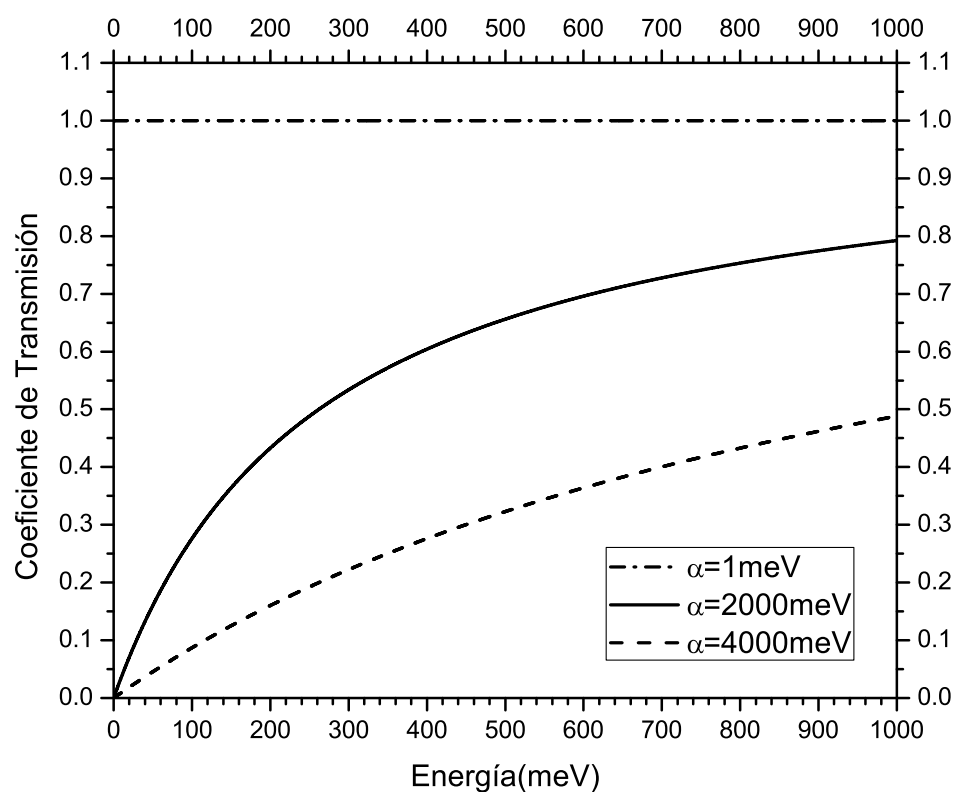


Figura 4.3: Coeficiente de transmisión para un potencial tipo delta de altura 1meV, 2000meV y 4000meV.

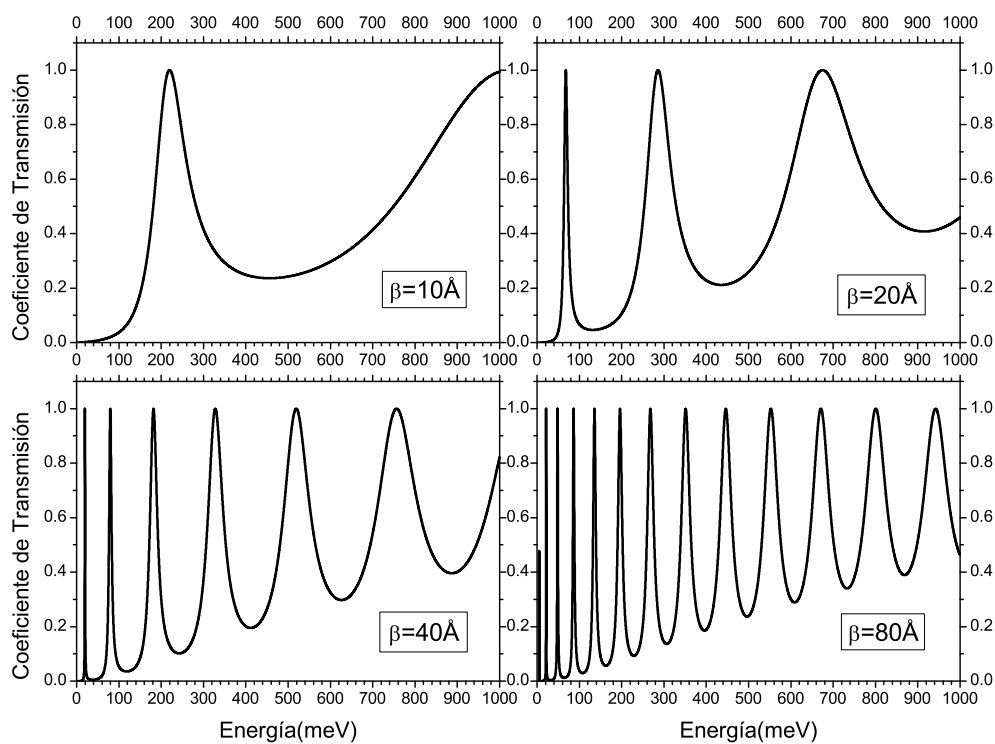


Figura 4.4: Coeficiente de transmisión para un arreglo de dos potenciales tipo delta de altura 2000meV y una separación de 10Å, 20Å, 40Å y 80Å.

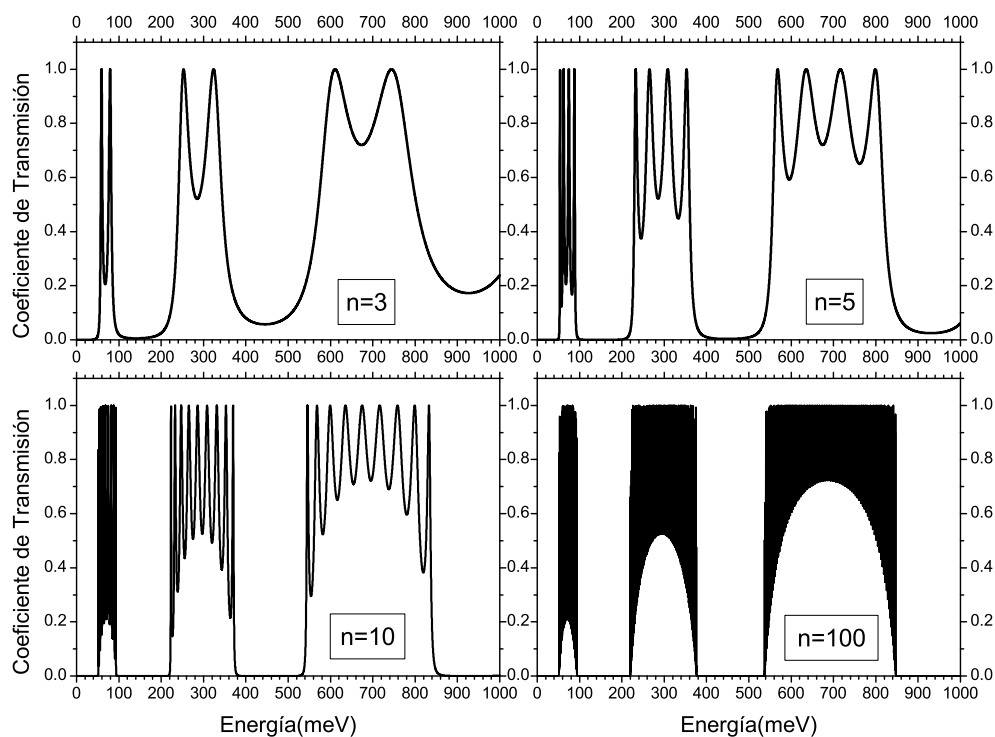


Figura 4.5: Coeficiente de transmisión para una secuencia de 3, 5, 10 y 100 potenciales tipo delta de altura 2000meV y una distancia de separación de 20\AA entre potenciales.

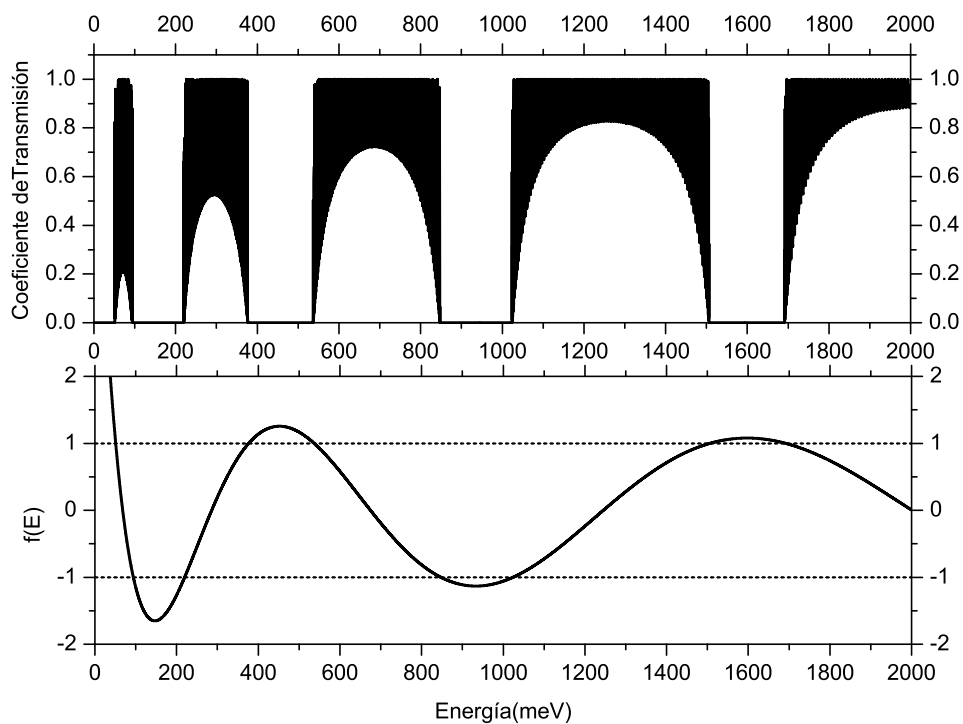


Figura 4.6: Coeficiente de transmisión para una secuencia de 100 potenciales tipo delta de altura 2000meV y con una separación de 20\AA , donde se muestran las bandas de energía compatibles con el modelo de Kronig-Penney.

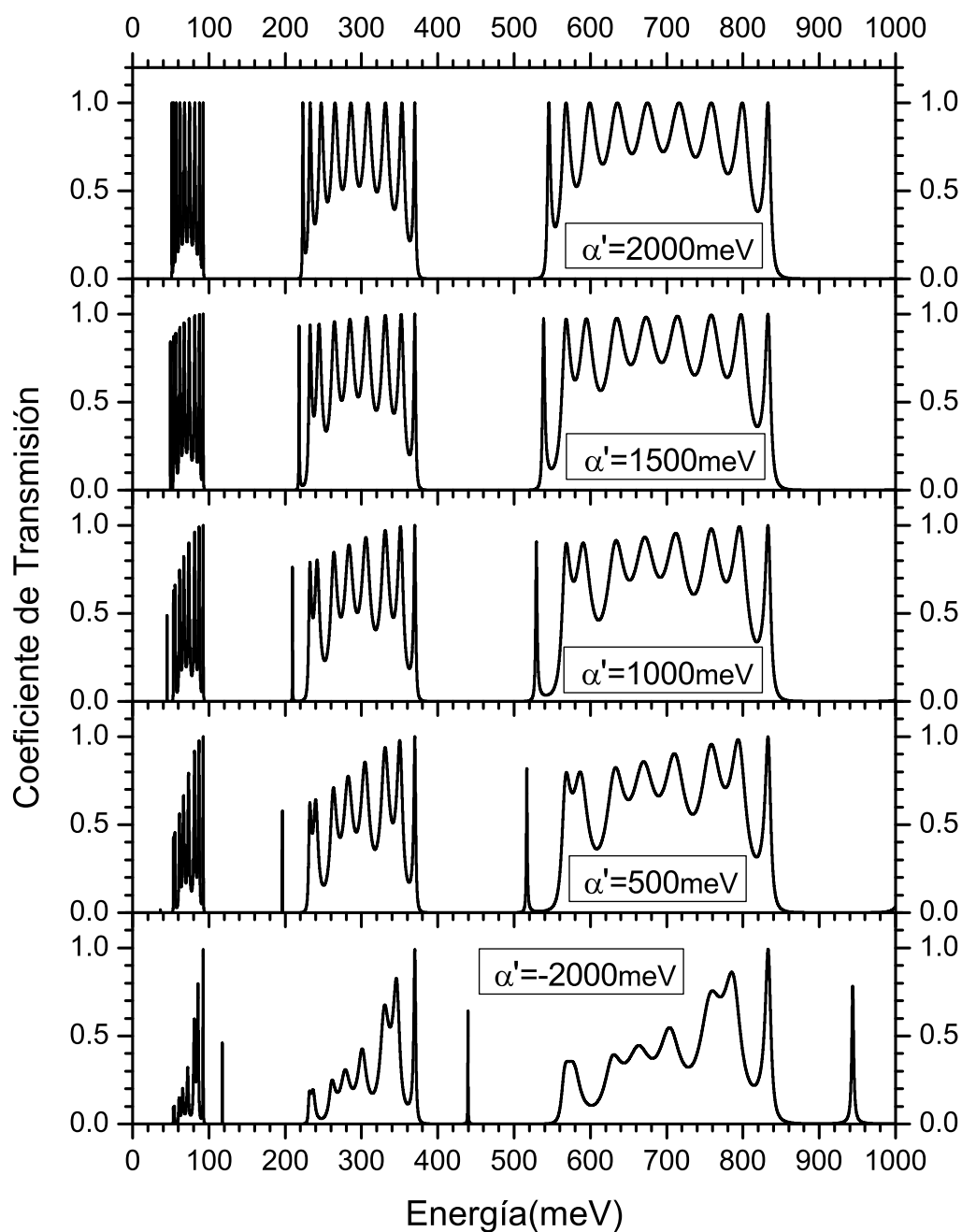


Figura 4.7: Coeficiente de transmisión para una secuencia de 10 potenciales tipo delta repulsivos de altura 2000meV separados una distancia de 20Å, en el cual cambiamos la altura de uno de los delta por los valores 1500meV, 1000meV, 500meV y -2000meV (atractivo) como impureza.

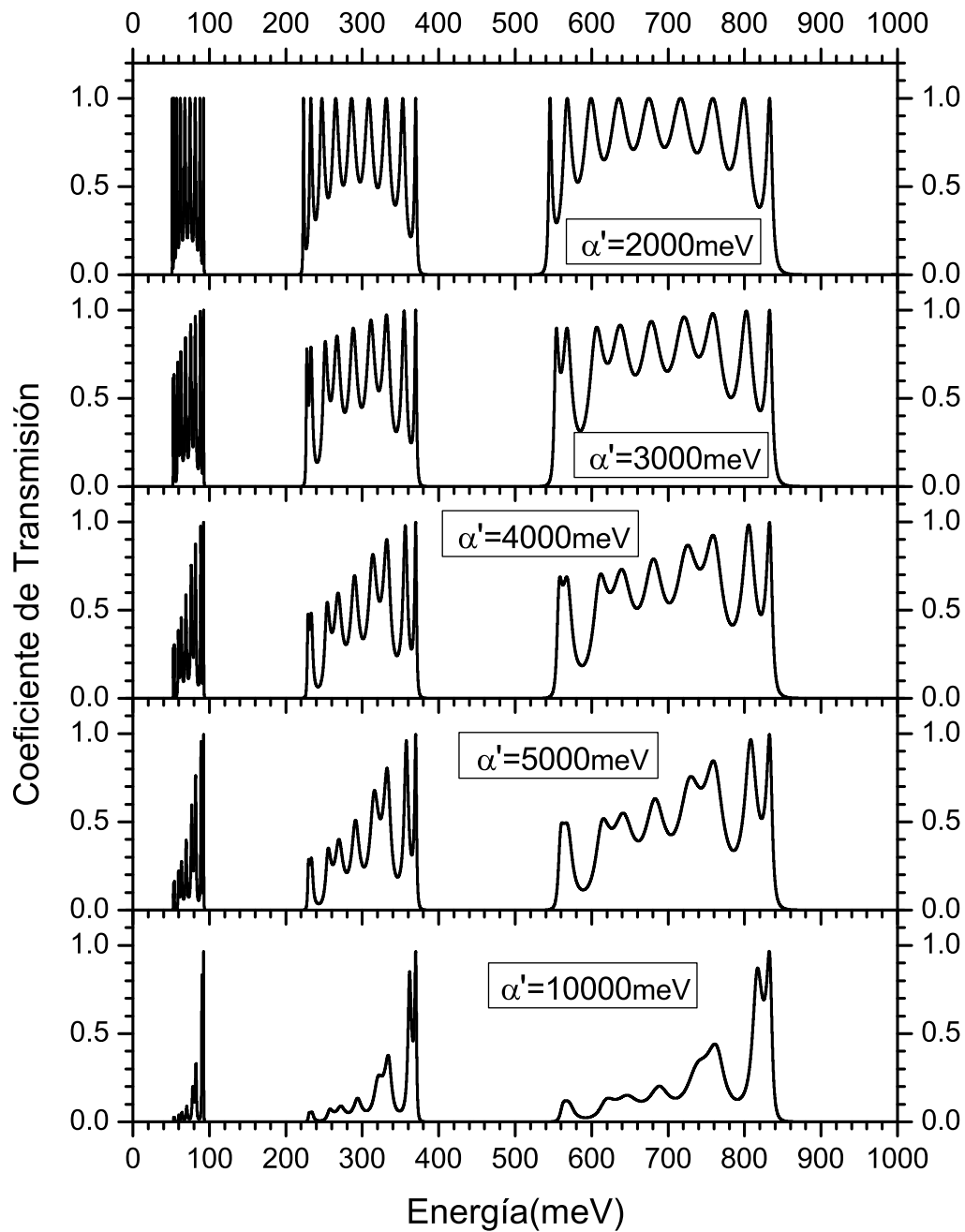


Figura 4.8: Coeficiente de transmisión para una secuencia de 10 potenciales tipo delta repulsivos de altura 2000meV separados una distancia de 20Å, en el cual cambiamos la altura de uno de los delta por los valores 3000meV, 4000meV, 5000meV y 10000meV como impureza.

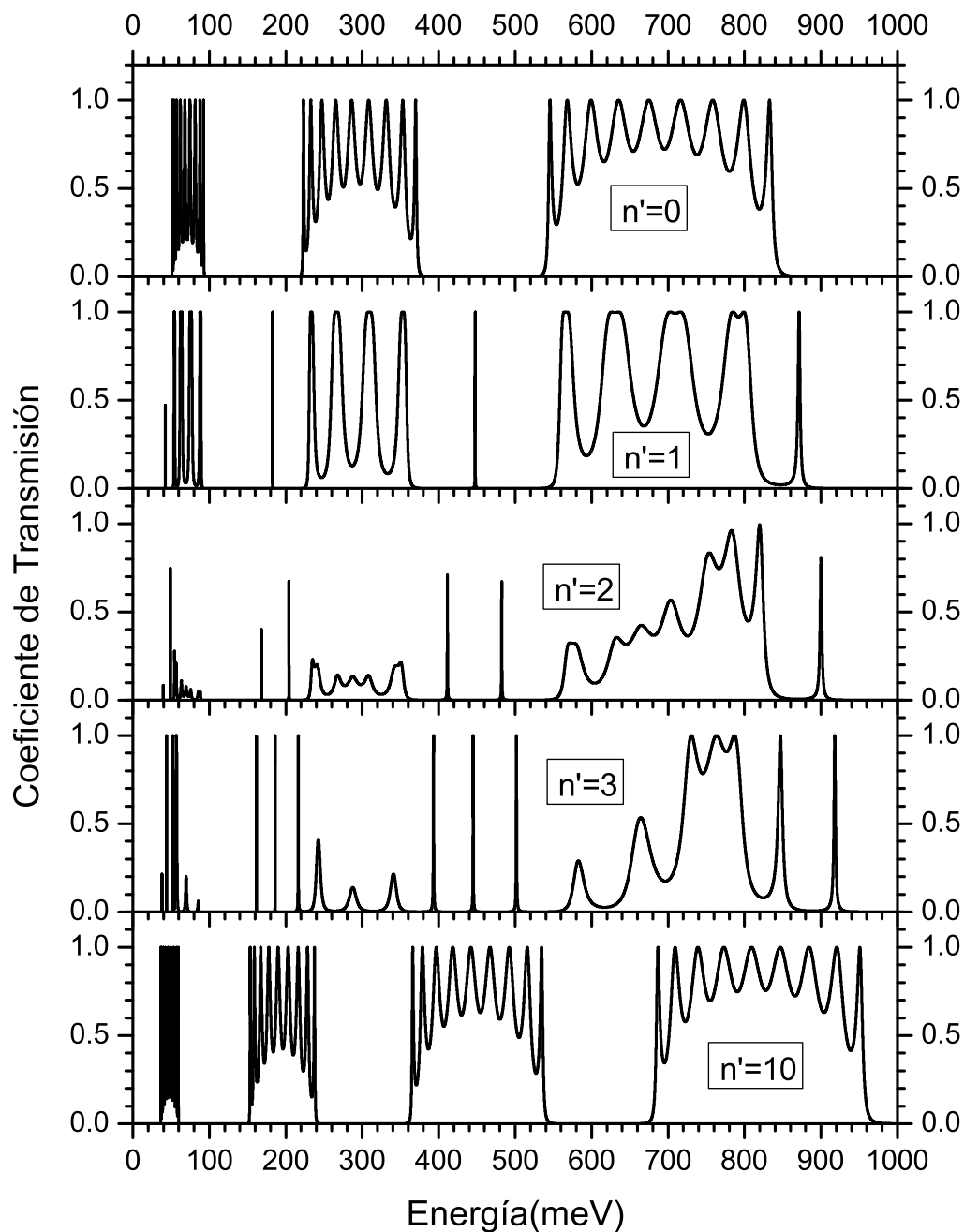


Figura 4.9: Coeficiente de transmision para una secuencia de 10 potenciales tipo delta repulsivos de altura 2000meV separados una distancia de 20\AA , en el cual se cambian 1, 2, 3 y 10 distancias de separación de longitud $\beta'=25\text{\AA}$ como impurezas.

Conclusiones

Se estudia el coeficiente de transmisión para una partícula que incide sobre un secuencia de potenciales rectangulares y tipo delta variando el tamaño y el número de potenciales, además de la inserción de impurezas en alguna posición.

El aumento en el ancho de la barrera de potencial rectangular provoca una considerable baja en la probabilidad de que una partícula la atraviese por efecto túnel. Para energías mayores que la altura del potencial, la probabilidad de que sea transmitida no se verá afectada fuertemente. Además, se observan valores energéticos con los que la partícula se transmite perfectamente, los cuales aumentan en cantidad conforme el ancho del la barrera crece.

El coeficiente de transmisión para una partícula que incide sobre un potencial tipo delta disminuye al aumentar la altura (α) del potencial. Este resultado no depende si se trata de un delta repulsivo ($\alpha > 0$) o un delta atractivo ($\alpha < 0$).

En secuencias de dos o más potenciales (rectangulares y tipos delta) aparecen valores discretos de la energía en los que la partícula se transmite perfectamente por efecto túnel. El número de estos valores crece (desdoblamiento) conforme se aumenta la separación entre potenciales o si se aumenta el número de ellos. De la misma manera, aparecen regiones de baja probabilidad en la transmisión, tendiendo a formar bandas de energía continua, tanto permita (hay transmisión) como prohibida (no hay transmisión), conforme el arreglo tienda a un número infinito de potenciales.

El modelo de Kronig-Penney explica muy bien la aparición de bandas de energía en los arreglos periódicos con un número infinito de potenciales. La relación de dispersión obtenida a partir de este modelo muestra los intervalos exactos de las regiones de energía tanto permitidas como prohibidas. En las fronteras de estos intervalos los valores de K de la relación de dispersión corresponden exactamente con aquellos valores del número de onda para los cuales la longitud de onda (λ) satisface la condición de Bragg.

La introducción de impurezas en las secuencias de potenciales rectangulares y tipo delta provoca la aparición de valores energéticos en el interior de las regiones prohibidas; el número de estos valores será igual al número de impurezas presentes en la secuencia. En el caso de impurezas como potenciales de altura mayor a la del resto, este valor energético no aparece.

Apéndice A

Identidad de Chebyshev

La *identidad de Chebyshev* fue utilizada en los capítulos 3 y 4 para calcular los elementos de la matriz de transferencia; y así poder obtener una expresión analítica del coeficiente de transmisión en una secuencia de potenciales rectangulares y tipo delta. La identidad de Chebyshev se formula como sigue:

Considere la matriz \mathbf{M}

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix}, \quad (\text{A.1})$$

tal que

$$\det(\mathbf{M}) = 1. \quad (\text{A.2})$$

Entonces la n -ésima potencia de \mathbf{M} está dada por

$$\begin{aligned} \mathbf{M}^n &= \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix}^n \\ &= \begin{pmatrix} \frac{A \sin n\theta - \sin(n-1)\theta}{\frac{\sin \theta}{C \sin n\theta}} & \frac{B \sin n\theta}{\frac{\sin \theta}{D \sin n\theta - \sin(n-1)\theta}} \\ \frac{\sin \theta}{\sin \theta} & \frac{\sin \theta}{\sin \theta} \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

donde

$$\theta = \cos^{-1} \left(\frac{1}{2} \text{Tr}(\mathbf{M}) \right) = \cos^{-1} \left(\frac{1}{2} (A + D) \right). \quad (\text{A.4})$$

Para demostrar la identidad, primero definimos la función

$$U_n \equiv \frac{\sin n\theta}{\sin \theta}, \quad (\text{A.5})$$

de manera que ecuación (A.3) se escribe como

$$\mathbf{M}^n = \begin{pmatrix} AU_n - U_{n-1} & BU_n \\ CU_n & DU_n - U_{n-1} \end{pmatrix}^n. \quad (\text{A.6})$$

Luego, asumimos que la identidad es válida para algún valor $n > 1$; por lo que mostraremos que también es válida para $n + 1$. Para esto tendremos

$$\begin{aligned} \mathbf{M}^{n+1} &= \mathbf{M} \cdot \mathbf{M}^n = \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} AU_n - U_{n-1} & BU_n \\ CU_n & DU_n - U_{n-1} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} (A^2 + BC)U_n - AU_{n-1} & B[(A + D)U_n - U_{n-1}] \\ C[(A + D)U_n - U_{n-1}] & (D^2 + BC)U_n - DU_{n-1} \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

ya que

$$BC = AD - 1, \quad (\text{A.8})$$

\Rightarrow

$$\mathbf{M}^{n+1} = \begin{pmatrix} A[(A + D)U_n - U_{n-1}] - U_n & B[(A + D)U_n - U_{n-1}] \\ C[(A + D)U_n - U_{n-1}] & D[(A + D)U_n - U_{n-1}] - U_n \end{pmatrix}. \quad (\text{A.9})$$

Usando identidades trigonométricas, es fácil demostrar la siguiente expresión

$$\begin{aligned} U_{n+1} &= 2 \cos \theta U_n - U_{n-1} \\ &= (A + D)U_n - U_{n-1}, \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

por lo tanto

$$\mathbf{M}^{n+1} = \begin{pmatrix} AU_{n+1} - U_n & BU_{n+1} \\ CU_{n+1} & DU_{n+1} - U_n \end{pmatrix}, \quad (\text{A.11})$$

la cual es nuevamente la identidad de Chebyshev (A.3) para la potencia $n + 1$ de la matriz \mathbf{M} .

Bibliografía

- [1] O. Navarro and R. Baquero, *Ideas fundamentales de la superconductividad*, UNAM, México D. F. (2007).
- [2] Suk Bum Chung, Hai-Jun Zhang, Xiao-Liang Qi, Shou-Cheng Zhang, *Topological superconducting phase and Majorana fermions in half-metal/superconductor heterostructures*, Phys. Rev. B 84, 060510 (2011).
- [3] A. Wilson, *The Theory of Metals*, 2nd ed., Cambridge University Press, New York (1954).
- [4] V.L. Moruzzi, J.F. Janak and A.R. Williams, *Calculated electronic properties of metals*, Pergamon (1978).
- [5] I.M. Lifshitz, M. Ya. Azbel and M.I. Kaganov, *Electronic theory of metals*, Consultants Bureau, (1973).
- [6] A.A. Abrikosov, *Fundamentals of the Theory of Metals*, North-Holland, Amsterdam (1998).
- [7] G.C. Lombardi and G.E. Bianchi, *Spintronics: Materials, Applications and Devices*, Nova Science Publishers Inc., New York (2009).
- [8] Y.B. Xu and S.M. Thomson, *Spintronic Materials and Technology*, Taylor & Francis Group, New York (2007).
- [9] A.B. Pippard, *Magnetoresistance in metals*, Cambridge (1989).
- [10] E.Y. Tsymlal and I. Žutić, *Handbook of Spin Transport and Magnetism*, Taylor & Francis Group, Boca Raton FL (2012).

- [11] M.N. Baibich, J.M. Broto, A. Fert, F. Nguyen Van Dau, F. Petroff, *Giant Magnetoresistance of (001)Fe/(001)Cr Magnetic Superlattices*, Phys. Rev. Lett. 61, 2472-2475 (1988).
- [12] H.D. Chopra, D.X. Yang, P.J. Chen, D.C. Parks and W.F. Egelhoff, *Nature of coupling and origin of coercivity in giant magnetoresistance NiO-Co-Cu-based spin valves*, Phys. Rev. B 61, 9642 (2000).
- [13] S. Schmaus, A. Bagrets, Y. Nahas, T.K. Yamada, A. Bork, M. Bowen, E. Beaurepaire, F. Evers and W. Wulfhekel, *Giant magnetoresistance through a single molecule*, Nature Nanotechnology 6, 185-189 (2011).
- [14] Ying-Tao Zhang, H. Jiang, Qing-feng Sun and X.C. Xie, *Spin polarization and giant magnetoresistance effect induced by magnetization in zigzag graphene nanoribbons*, Physical Review B 81, 165404 (2010).
- [15] J.R. Suárez, F. Estrada, O. Navarro, M. Avignon, *Magnetic properties of the ordered and disordered double perovskite $Sr_2Fe_{1+x}Mo_{1-x}O_6$ ($-1 \leq x \leq 1/3$)*, Eur. Phys. J. B 84, 53-58 (2011).
- [16] B. Aguilar, O. Navarro and M. Avignon, *Effect of cationic disorder on the spin polarization in FeMo double perovskites*, EPL 88, 67003 (2009).
- [17] Jung-Woo Yoo, H.W. Jang, V.N. Prigodin, C. Kao, C.B. Eom and A.J. Epstein, *Tunneling vs. Giant Magnetoresistance in organic spin valve*, Synthetic Metals 160, 216-222 (2010).
- [18] H. Oka, K. Tao, S. Wedekind, G. Rodary, V.S. Stepanyuk, D. Sander and J. Kirschner, *Spatially Modulated Tunnel Magnetoresistance on the Nanoscale*, Phys. Rev. Lett. 107, 187201 (2011).
- [19] P. Markoš and C.M. Soukoulis, *Wave Propagation: From Electrons to Photonic Crystals and Left-Handed Materials*, Princeton University Press, Princeton New Jersey (2008).
- [20] P. Markoš and C.M. Soukoulis, *Absorption losses in periodic arrays of thin metallic wires*, Opt. Lett. 28, 846 (2003).

-
- [21] S. Mishra and S. Satpathy, *One-dimensional photonic crystal: The Kronig-Penney Model*, Phys. Rev. B 68, 045121 (2003).
- [22] G. Liu, K. Guo and Ch. Wang, *Linear and nonlinear intersubband optical absorption in a disk-shaped quantum dot with a parabolic potential plus an inverse squared potential in static magnetic field*, Physica B: Condensed Matter 407, 2334 (2012).
- [23] R. Srivastava and S. Srivastava, *Negative refraction by photonic crystal*, Prog. in Electr. Res. B 2, 15-26 (2008).
- [24] G.A. Luna-Acosta and F.M. Izrailev, *One dimensional Kronig-Penney model with positional disorder: Theory versus experiment*, Phys. Rev. B 80, 115112 (2009).
- [25] F. M. Izrailev and N. M. Makarov, *Anomalous transport in low-dimensional systems with correlated disorder*, J. Phys. A 49, 10613 (2005).
- [26] R. Landauer, *Spatial variation of currents and fields due to localized scatterers in metallic conduction*, IBM J. Res. Dev. 1, 223 (1957), reprinted 44, 253 (2000).
- [27] E. Larose, *Weak localization of seismic waves*, Phys. Rev. Lett. 93, 048501 (2004).
- [28] A. Mirlin, *Statistics of energy levels and eigenfunctions in disordered systems*, Phys. Rep. 326, 259 (2000).
- [29] S. Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*, 6th ed. Cambridge University Press, Cambridge (2005).
- [30] S. Datta, *Quantum Transport: Atom to Transistor*. Cambridge University Press, Cambridge (2005).
- [31] D.K. Ferry and S.M. Goodnick, *Transport in Nanostructures*, Cambridge University Press, Cambridge (2001).
- [32] J.L. Cardoso, P. Pereyra and A. Anzaldo-Meneses, *Transport and spin effects in homogeneous magnetic superlattice*, Phys. Rev. B 63, 153301 (2001).
- [33] Hua Wu, D.W.L. Sprung, J. Martorell, and S. Klarsfeld, *Quantum wire with periodic serial structure*, Phys. Rev. B 44, 6351 (1991).

- [34] A.F.J. Levi, *Applied Quantum Mechanics*, 2nd ed, Cambridge University Press, New York (2006).
- [35] P. Pereyra and E. Castillo, *Theory of finite periodic systems: General expressions and various simple and illustrative examples*, Phys. Rev. B 65, 205120 (2002).
- [36] C. Pacher and E. Gornik, *Adjusting the coherent transport in finite periodic superlattices*, Phys. Rev. B 68, 155319 (2003).
- [37] H.S. Ashour, A.I Ass'ad, M.M. Shabat, and M.S.Hamada, *Electronic conductance in binomially tailored quantum wire*, Microelectronics J. 37, 79 (2006).
- [38] D.W.L. Sprung, J. D. Sigetich, Hua Wu, and J. Martorell, *Bound states of a finite periodic potential*, Am. J. Phys. 68, 715 (2000). Matriz de transferencia
- [39] P. A. Mello and N. Kumar, *Quantum Transport in Mesoscopic Systems: Complexity and Statistical Fluctuations*, Oxford University Press, Oxford (2004).
- [40] W.A. Harrison, *Electronic Structure and the Properties of Solids*, W. H. Freeman and Company, USA (1980).
- [41] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, 8th ed, John Wiley and Sons Inc., New York (2004).
- [42] N. Ashcroft and N. Mermin, *Solid State Physics*, Holt Reiehart and Winston, New York (1976).
- [43] L. Brillouin, *Wave Propagation in Periodic Structures*, Dover, New York (1953).
- [44] H. Jones, *The Theory of Brillouin Zones and Electronic States in Crystals*, North-Holland Publishing Company, Amsterdam (1960).
- [45] R. de L. Kronig and W.G. Penney, *Quantum Mechanics of Electrons in Crystal Lattices*, Proc. R. Soc. London, Ser. A 130, 499-513 (1931).
- [46] P. Harrison, *Quantum wells, Wires and Dots: Theoretical and Computational Physics of Semiconductor Nanostructures*, 2nd ed, John Wiley and Sons Inc., UK (2005).
- [47] J. Singh, *Electronic and Optoelectronic Properties of Semiconductor Structures*, Cambridge University Press, New York (2003).

-
- [48] R.E. Hummel, *Electronic Properties of Materials*, 4th ed, Springer, New York (2011).