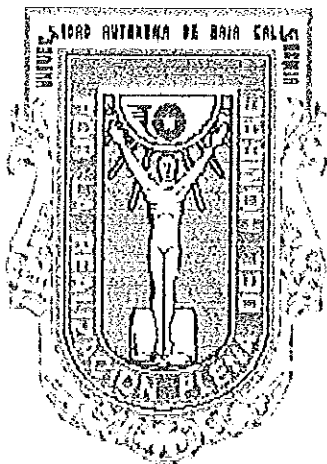


UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE BAJA CALIFORNIA

FACULTAD DE CIENCIAS



**ESTUDIOS DE CONVERGENCIA DE LA FUNCIÓN DE
GREEN Y DESARROLLO DE LA FUNCIÓN DE ONDA
EN UNA DIMENSIÓN**

TESIS

Que para obtener el título de:

Licenciado en Matemáticas Aplicadas

Presenta:

LUIS RAMÓN SIERO GONZÁLEZ

Ensenada, Baja California

Junio de 2000

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE BAJA CALIFORNIA

FACULTAD DE CIENCIAS

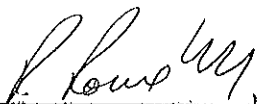
ESTUDIO DE CONVERGENCIA DE LA FUNCIÓN
DE GREEN Y DESARROLLO DE LA FUNCIÓN DE
ONDA EN UNA DIMENSIÓN

TESIS PROFESIONAL

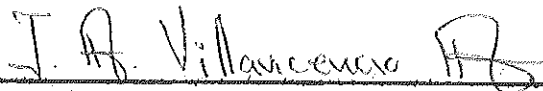
QUE PRESENTA

LUIS RAMÓN SIERO GONZÁLEZ

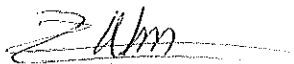
APROBADO POR:



DR. ROBERTO ROMO MARTÍNEZ
Presidente del jurado



DR. JORGE A. VILLAVICENCIO AGUILAR
Secretario



M.C. ALBERTO HERNÁNDEZ MALDONADO
1er. Vocal

DEDICATORIA

A mis padres Carmen Alicia González de Siero, José Ramón Siero Estrada, a mis
hermanos Mónica María, Alicia del Rosario, Cesar Alberto y a mis sobrinas Ana Lucia y
Mónica Patricia León Siero.

AGRADECIMIENTOS

Quiero agradecer primeramente a mi familia por el apoyo que siempre me han brindado.

A el Dr. Roberto Romo Martínez y al Dr. Jorge Alberto Villavicencio Aguilar por haber dirigido esta tesis, y por la paciencia que me tuvieron en este periodo.

A mis amigos, compañeros de clase y profesores de estos últimos 6 años:

Gracias.

RESUMEN de la tesis de **Luis Ramón Siero González** presentada como requisito parcial para la obtención de la Licenciatura en **Matemáticas Aplicadas**. Ensenada, Baja California, México. Junio de 2000.

ESTUDIO DE CONVERGENCIA DE LA FUNCIÓN DE GREEN Y DESARROLLO DE LA FUNCIÓN DE ONDA EN UNA DIMENSIÓN

Resumen aprobado por:



DR. ROBERTO ROMO MARTÍNEZ



DR. JORGE ALBERTO VILLAVICENCIO AGUILAR

Con base en una expresión analítica exacta se demuestra la convergencia del desarrollo de Cauchy de la función de Green en términos de estados resonantes para el caso particular de una barrera de potencial. Se extiende dicho desarrollo a la función de onda en la región interna, utilizando la relación matemática fundamental que existe entre la función de onda y el propagador del sistema.

LISTA DE FIGURAS

Figura		Página
1	Contorno simple cerrado C en el plano complejo k .	6
2	Barrera de potencial unidimensional en donde se indican las regiones discutidas del texto.	14

ÍNDICE

		Página
I	Introducción	1
	I.1 Antecedentes	1
	I.2 Planteamiento del problema	3
II	Desarrollo de Cauchy para la función de Green	5
III	Relación de la función de onda con la función de Green	10
IV	Comportamiento asintótico de la función de Green para una barrera de potencial.	13
	IV.1 Cálculo de la expresión analítica del propagador.	13
	IV.2 Convergencia del desarrollo de Cauchy de la función de Green.	17
	IV.3 Desarrollo de la función de onda en estados resonantes.	21
V	Conclusiones	23
	Literatura citada	24

I. INTRODUCCIÓN

I.1 Antecedentes.

La investigación de las propiedades de transporte electrónico en estructuras cuánticas artificiales tiene su origen en el trabajo pionero de Tsu y Esaki (1970), quienes conciben la posibilidad de diseñar tanto teórica como experimentalmente superredes semiconductoras. Ciertamente, la reducida dimensión de dichas estructuras puso de manifiesto fenómenos nuevos de naturaleza cuántica, los cuales poseen interesantes aplicaciones tecnológicas en el contexto de la llamada electrónica cuántica (Weisbuch, 1991). En particular, los fenómenos relacionados con los mecanismos de transporte, los cuales ocurren mediante tunelaje o tunelaje resonante, han sido objeto de intensos estudios tanto a nivel básico como aplicado (Capasso y Datta, 1990; Capasso *et al.* 1986).

Si bien es cierto que el tunelaje resonante ha sido ampliamente estudiado en la literatura con base en descripciones estacionarias basadas en la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo (Tsu y Esaki, 1973; Ricco y Azbel 1986), las ventajas de utilizar representaciones alternativas de la función de onda han sido ampliamente demostradas (García-Calderón *et al.*, 1993; Romo y García-Calderón, 1994; García-Calderón *et al.*, 1994; Romo, 1995). En particular nos referimos al formalismo desarrollado originalmente por García-Calderón y Rubio (1987), el cual permite describir la solución de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para potenciales arbitrarios de alcance finito, con base en soluciones analíticas las cuales involucran los

polos complejos de la matriz S , y los estados resonantes del sistema. Dicho formalismo ha permitido describir las propiedades de transporte electrónico en potenciales unidimensionales con distintas geometrías (Romo, 1995; García-Calderón *et al.*, 1993; Romo y García-Calderón, 1994). En particular ha permitido obtener parametrizaciones de cantidades físicamente relevantes, tales como el coeficiente de transmisión y la corriente electrónica (García-Calderón *et al.*, 1994) las cuales han resultado herramientas útiles en la investigación de diversos aspectos del tunelaje.

Uno de los aspectos fundamentales en los cuales se basa el formalismo antes mencionado, es la relación existente entre la función de onda $\Psi(x, k)$ y la función de Green del sistema $G^+(x, x'; k)$ obtenida por García-Calderón (1987) *i. e.* $\Psi(x, k) = 2ikG^+(0, x; k)$, donde k corresponde al momento de la partícula incidente. Dicho sea de otra manera, se establece matemáticamente una profunda conexión entre el proceso típico de dispersión caracterizado por la función de onda $\Psi(x, k)$, y el decaimiento cuántico el cual es descrito por el propagador del sistema $G^+(0, x; k)$. Explotando las propiedades analíticas de $G^+(x, x'; k)$ es posible obtener un desarrollo de Cauchy del propagador en función de los eigenestados resonantes $u_n(x)$ y los polos complejos de $G^+(0, x; k)$; en consecuencia se tiene un desarrollo también para la función de onda $\Psi(x, k)$. Los estados resonantes, los cuales son los ingredientes esenciales en estos desarrollos, fueron introducidos originalmente por Gamow (1928) para describir el fenómeno de decaimiento α ; dichos estados corresponden a soluciones de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo con condiciones de frontera de onda saliente, lo cual conduce a considerar necesariamente eigenvalores complejos de la energía.

Es pertinente mencionar que el formalismo desarrollado en una dimensión tiene su

origen en el trabajo realizado en el contexto de la física nuclear por García-Calderón y Peierls (1976). Dichos autores obtuvieron un desarrollo de la función de onda en estados resonantes para el caso tridimensional a partir de un desarrollo de Cauchy del propagador del sistema. Mas aún, demostraron rigurosamente mediante el empleo de las propiedades de la matriz S del sistema, la validez del desarrollo de Cauchy para potenciales tridimensionales arbitrarios de alcance finito. Para el caso de potenciales unidimensionales esto no ha sido demostrado aún y constituye un problema matemático abierto; llevar a cabo la demostración para el caso general de un potencial arbitrario de rango finito es un problema no trivial, el cual involucra un conocimiento profundo de las propiedades analíticas del propagador y de la matriz de dispersión del sistema, así como de la conexión de esta última con la matriz de transferencia. No obstante que estos aspectos formales de la teoría aún no han sido completamente explorados, los desarrollos de la función de onda en estados resonantes a los cuales conduce, se han aplicado con éxito a potenciales unidimensionales particulares con el fin de estudiar las propiedades del tunelaje resonante, donde se han estudiado sistemas de doble barrera, triple barrera, y multibarreras. Los resultados de estos trabajos constituyen verificaciones a posteriori de la validez de los desarrollos de Cauchy en cada caso.

La demostración formal para el caso general, como se mencionó anteriormente, es un problema de complejidad considerable; la demostración para algún potencial particular constituye un primer paso en esta dirección, y marca la pauta para una generalización posterior.

I.2 Planteamiento del problema.

En este trabajo demostraremos formalmente la existencia del desarrollo de Cauchy del propagador en términos de estados resonantes, para el caso particular de una barrera de potencial; ésto nos permite demostrar la convergencia del desarrollo en estados resonantes para la función de onda en dicho sistema.

Con la finalidad de que nuestro trabajo sea autocontenido, en el capítulo II se presentan una serie de conceptos básicos referentes al formalismo de estados resonantes, así como el desarrollo de Cauchy para la función de Green en términos de dichos estados. En el capítulo III se presenta la derivación de una relación matemática fundamental entre la función de onda y la función de Green, obtenida por García-Calderón (1987). Es preciso aclarar que al final de dicho capítulo se discutirán desde un punto de vista matemático una serie de objetivos particulares así como las estrategias que nos permitirán desarrollar las metas originalmente planteadas. En el capítulo IV se obtiene una expresión analítica para el propagador asociado a una barrera de potencial. Asimismo, con base en el comportamiento asintótico del propagador del sistema, se demuestra la existencia del desarrollo de Cauchy para este caso particular y se extiende dicho estudio al caso de la función de onda. Finalmente, en el capítulo V se presentan las conclusiones de nuestro estudio así como las secuelas más importantes.

II. DESARROLLO DE CAUCHY PARA LA FUNCIÓN DE GREEN.

En el contexto de la física nuclear, García-Calderón y Peierls (1976) obtuvieron para el caso de un potencial radial de rango finito, un desarrollo de la función de Green del sistema en términos de sus estados resonantes. La extensión de dicho formalismo al caso de un potencial unidimensional $V(x)$ definido en una región finita, $0 \leq x \leq L$, fue desarrollada por García-Calderón y Rubio (1987) en el contexto del *tunelaje resonante en estructuras cuánticas unidimensionales*.

El propósito de este capítulo es presentar el procedimiento analítico para la obtención de dicho desarrollo, el cual se sigue a lo largo de las mismas líneas que en el caso tridimensional; sin embargo, existe una diferencia fundamental entre ambas situaciones físicas. Esto es, la condición a la frontera en el origen para el potencial radial, consiste en la anulación de la función de onda en dicho punto, mientras que en el caso unidimensional se tiene una condición de onda saliente en $x = 0$: es decir, el caso unidimensional posee dos fronteras abiertas, una en $x = 0$ y otra en $x = L$.

El planteamiento para el caso unidimensional parte de la integral de Cauchy,

$$I = \frac{1}{2\pi i} \int_C \frac{G^+(x, x'; k)}{k' - k} dk', \quad (1)$$

donde C es un contorno simple cerrado en el plano complejo k , y que excluye todas las singularidades en el integrando de la ecuación (1). Es importante mencionar que la función de Green posee un número infinito de polos simples y es analítica en todo el plano complejo k , *i. e.* la función de Green es meromórfica.

Utilizando el teorema de Cauchy obtenemos,

$$I = \frac{1}{2\pi i} \left[\int_C \frac{G^+(x, x'; k)}{k' - k} dk' - \sum_{n=1}^{\infty} \int_{C_n} \frac{G^+(x, x'; k)}{k' - k} dk' - \int_{C_k} \frac{G^+(x, x'; k)}{k' - k} dk' \right] = 0 \quad (2)$$

donde C representa un círculo de radio R centrado en el origen. El contorno C_n encierra a cada uno de los polos simples de la función de Green $G^+(x, x'; k)$ situados dentro del contorno C ; el contorno C_k encierra al polo $k' = k$. El contorno C se toma en sentido contrario al de las manecillas del reloj, mientras que los contornos C_n, C_k se recorren en el sentido de las manecillas del reloj, ver figura 1.

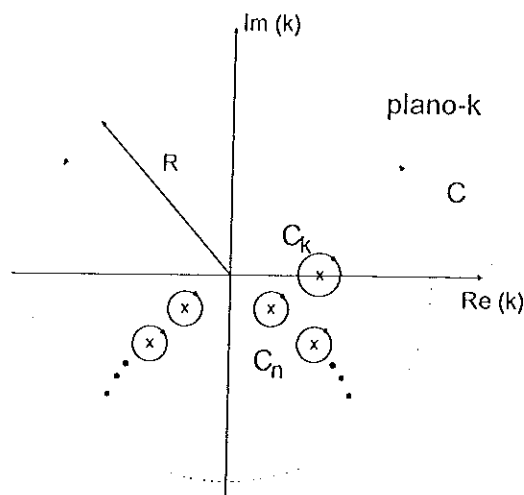


Figura 1: Contorno simple cerrado C en el plano complejo k .

A continuación utilizaremos el teorema del residuo para evaluar las integrales a lo largo de los contornos C_n y C_k . La fórmula para el cálculo del residuo b en un polo complejo $z = z_0$ de una función $F(z)$ es,

$$b = 2\pi i \lim_{z \rightarrow z_0} (z - z_0) F(z). \quad (3)$$

Por lo tanto, los residuos correspondientes a los polos $\{k_n\}$ están dados por la expresión,

$$b = 2\pi i \lim_{k' \rightarrow k_n} (k' - k_n) \frac{G^+(x, x'; k)}{k' - k}, \quad (4)$$

la cual podemos reescribir como,

$$b = 2\pi i \lim_{k' \rightarrow k_n} \frac{1}{k' - k} \lim_{k' \rightarrow k_n} (k' - k_n) G^+(x, x'; k). \quad (5)$$

Una vez evaluados los límites en (5), la expresión para el residuo es,

$$b = 2\pi i \frac{\rho_n}{k_n - k}, \quad (6)$$

donde ρ_n corresponde a los residuos de $G^+(x, x'; k)$ en cada uno de los polos complejos k_n . Como veremos más adelante, dichos residuos son expresados en términos de los estados resonantes del sistema.

Siguiendo un procedimiento similar al discutido líneas arriba, el residuo correspondiente al polo $k' = k$ es,

$$b = 2\pi i G^+(x, x'; k). \quad (7)$$

Finalmente, una vez aplicado el teorema del residuo de Cauchy para evaluar las integrales a lo largo de los contornos $\{C_n\}$ y C_k en la ecuación (2) se obtiene la siguiente expresión analítica para el propagador,

$$G^+(x, x'; k) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\rho_n}{k - k_n} + \frac{1}{2\pi i} \int_C \frac{G^+(x, x'; k)}{k' - k} dk'. \quad (8)$$

Como se mencionó anteriormente, los ρ_n corresponden a los residuos de $G^+(x, x', k)$, en cada uno de los polos complejos k_n . Los residuos ρ_n se expresan en términos de los estados resonantes del sistema (García Calderón, 1973). En el caso unidimensional los residuos están dados explícitamente por

$$\rho_n = \frac{u_n(x) u_n(x')}{2k_n} \left\{ \int_0^L u_n^2(x) dx + \frac{i}{2k_n} [u_n^2(0) + u_n^2(L)] \right\}, \quad (9)$$

como fue demostrado por García-Calderón *et al.* (1991). Aquí las funciones $u_n(x)$ son los estados resonantes del sistema. Dichos estados son las soluciones de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo;

$$\frac{d^2 u_n(x)}{dx^2} + \left[k_n^2 - \frac{2m}{\hbar^2} V \right] u_n(x) = 0, \quad (10)$$

con las condiciones de frontera de onda saliente,

$$\begin{aligned} \frac{du_n(x)}{dx} &= -ik_n u_n(x), \\ \frac{du_n(x)}{dx} &= ik_n u_n(x). \end{aligned} \quad (11)$$

Dichas condiciones de frontera conducen necesariamente a considerar eigenvalores complejos de la energía, como fue demostrado por Gamow (1928).

Estas eigenfunciones $u_n(x)$ tienen una condición de normalización diferente a la usual, esta es,

$$\int_0^L u_n^2(x) dx + \frac{i}{2k_n} [u_n^2(0) + u_n^2(L)] = 1. \quad (12)$$

Sustituyendo (12) en (9), y (9) en (8), nos conduce a la siguiente expresión para la función de Green,

$$G^+(x, x', k) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{u_n(x) u_n(x')}{2k_n(k - k_n)} + \frac{1}{2\pi i} \int_C \frac{G^+(x, x'; k')}{k' - k} dk'. \quad (13)$$

De la expresión anterior, es claro que el desarrollo de la función de Green en términos de los estados resonantes existe siempre y cuando la integral en la ecuación (13) se anule en el límite en que k crece en todas las direcciones del plano complejo; esto no ha sido demostrado formalmente para potenciales unidimensionales, y hacerlo para el caso particular de la barrera rectangular constituye el objetivo principal del presente trabajo de tesis. La anulación de la integral en la ecuación (13) será demostrada para el caso particular de una barrera de potencial; dicho problema se discutirá en el capítulo IV. Con ello habremos demostrado que es posible obtener formalmente un desarrollo para el propagador en términos de los estados resonantes del sistema.

III. RELACIÓN DE LA FUNCIÓN DE ONDA CON LA FUNCIÓN DE GREEN

En esta sección se presenta la derivación de una relación matemática entre la función de onda $\Psi(x, k)$ y la función de Green $G^+(x, x'; k)$, lo cual permite la conexión entre los problemas de dispersión y de decaimiento cuántico para potenciales de alcance finito. Dicha relación fue obtenida por García-Calderón (1987), y surge como un resultado matemático después de manipular adecuadamente la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para un potencial arbitrario $V(x)$ ($0 \leq x \leq L$).

En mecánica cuántica el problema típico de dispersión en una dimensión de una partícula de momento k , involucra la solución de la ecuación de Schrödinger,

$$\frac{d^2\Psi(x, k)}{dx^2} + [k^2 - V] \Psi(x, k) = 0, \quad (14)$$

donde hemos definido $V = [2mV(x)/\hbar^2]$. Las soluciones que describen el problema típico de dispersión están dadas por:

$$\begin{aligned} \Psi(x, k) &= e^{ikx} + re^{-ikx}, & x \leq 0, \\ \Psi(x, k) &= te^{ikx}, & x \geq L, \end{aligned} \quad (15)$$

donde r y t son la amplitud de reflexión y transmisión, respectivamente.

La ecuación correspondiente para la función de Green se escribe como,

$$\frac{d^2 G^+(x, x'; k)}{dx^2} + [k^2 - V] G^+(x, x'; k) = \delta(x - x'). \quad (16)$$

La función $G^+(x, x'; k)$ satisface las siguientes condiciones de frontera de onda saliente en $x = 0$ y $x = L$,

$$\begin{aligned} \frac{dG^+(0, x'; k)}{dx} &= -ikG^+(0, x'; k), \\ \frac{dG^+(L, x'; k)}{dx} &= ikG^+(L, x'; k). \end{aligned} \quad (17)$$

A continuación multiplicamos a la ecuación (14) y la ecuación (16) por $G^+(x, x; k)$ y $\Psi(x, k)$, respectivamente. Esto nos conduce al siguiente par de ecuaciones:

$$\frac{d^2 \Psi(x, k)}{dx^2} G^+(x, x'; k) + [k^2 - V] \Psi(x, k) G^+(x, x'; k) = 0, \quad (18)$$

$$\frac{d^2 G^+(x, x'; k)}{dx^2} \Psi(x) + [k^2 - V] G^+(x, x'; k) \Psi(x, k) = \delta(x - x') \Psi(x, k). \quad (19)$$

Restando las ecuaciones (19) y (18) e integrando la expresión resultante en el intervalo de 0 a L , obtenemos,

$$\int_0^L \frac{d^2 G^+(x, x'; k)}{dx^2} \Psi(x, k) - \int_0^L \frac{d^2 \Psi(x, k)}{dx^2} G^+(x, x'; k) = \int_0^L \delta(x - x') \Psi(x, k). \quad (20)$$

La integración directa nos conduce al siguiente resultado,

$$\begin{aligned} & \frac{dG^+(L, x'; k)}{dx} \Psi(L, k) - \frac{dG^+(0, x'; k)}{dx} \Psi(0, k) \\ & - \frac{d\Psi(L, k)}{dx} G^+(L, x'; k) + \frac{d\Psi(0, k)}{dx} G^+(0, x'; k) = \Psi(x', k) \end{aligned} \quad (21)$$

Para evaluar la expresión anterior es necesario contar con los valores de $\Psi(x)$ y sus correspondientes derivadas en los extremos del sistema. Sustituyendo en (21) las expresiones para la función de onda y su derivadas evaluadas en $x = 0$ y $x = L$, así como las condiciones de frontera de onda saliente para la función $G^+(x, x', k)$, dadas por la ec. (17), obtenemos después de algunas manipulaciones algebraicas la expresión,

$$\Psi(x', k) = 2ikG^+(0, x', k), \quad 0 \leq x \leq L. \quad (22)$$

Esta relación fue derivada por García-Calderón (1987) y su importancia radica en que es posible conectar el problema de dispersión y el de estados resonantes. En particular, es posible obtener la expresión del propagador encontrando primero la fórmula explícita de la función de onda $\Psi(x, k)$ para después utilizar la ecuación (22), lo que nos conduce directamente a la expresión analítica del propagador $G^+(x, x', k)$. Los detalles de este cálculo se reservan para la sección IV.1.

IV. COMPORTAMIENTO ASINTÓTICO DE LA FUNCIÓN DE GREEN PARA UNA BARRERA DE POTENCIAL

En este capítulo encontraremos la expresión analítica del propagador para el caso particular de la barrera de potencial. Dicha expresión se obtiene a partir de la relación fundamental (ec. (22)) entre el propagador G^+ y la función de onda Ψ ; esto necesariamente involucra el cálculo exacto de la solución estacionaria $\Psi(x, k)$ (sección IV.1). Una vez encontrada la expresión analítica para el propagador (sección IV.2), analizaremos su comportamiento asintótico en todas las direcciones del plano complejo. Ésto nos permitirá demostrar la anulación de la integral en la ecuación (13), lo cual es condición suficiente para la existencia del desarrollo de la función de onda $\Psi(x, k)$ en estados resonantes (sección IV.3).

IV.1 Cálculo de la expresión analítica del propagador.

Obtendremos una expresión analítica para la función de Green a partir de la relación de $\Psi(x, k) = 2ikG^+(0, x; k)$ presentada en el capítulo III. Es claro que para obtener la expresión analítica del propagador $G^+(0, x; k)$, se debe calcular explícitamente la función de onda en la región interna del potencial, lo cual se realiza a continuación.

Primero consideremos las soluciones de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para una barrera de potencial V_0 , correspondientes a las tres diferentes regiones indicadas en la figura 2:

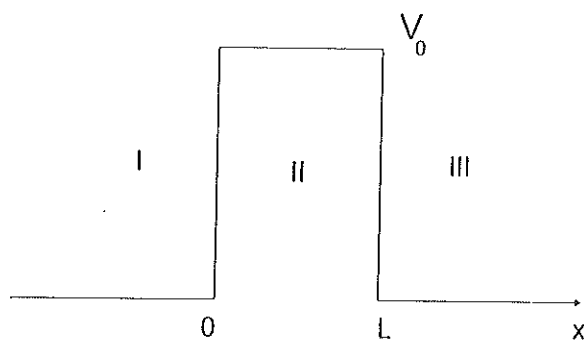


Figura 2: Barrera de potencial unidimensional en donde se indican las regiones discutidas en el texto.

$$\Psi_I(x, k) = e^{ikx} + re^{-ikx}, \quad x < 0, \quad (23)$$

$$\Psi_{II}(x, k) = \alpha e^{qx} + \beta e^{-qx}, \quad 0 \leq x \leq L, \quad (24)$$

$$\Psi_{III}(x, k) = te^{ikx}, \quad x > L; \quad (25)$$

k es el momento de la partícula incidente y $q = (V - k^2)^{1/2}$, donde hemos definido $V = (2mV_0/\hbar^2)$; los coeficientes r y t son la amplitud de reflexión y de transmisión, respectivamente.

A continuación aplicamos las condiciones de acoplamiento para la función de onda y su derivada en los extremos del sistema, dichas condiciones son,

$$\Psi_I(0) = \Psi_{II}(0); \quad \Psi'_I(0) = \Psi'_{II}(0); \quad (26)$$

$$\Psi_{II}(L) = \Psi_{III}(L); \quad \Psi'_{II}(L) = \Psi'_{III}(L). \quad (27)$$

Después de un álgebra simple obtenemos el siguiente sistema de ecuaciones para α y β :

$$1 = \frac{\alpha}{2} \left(1 + \frac{q}{ik}\right) + \frac{\beta}{2} \left(1 - \frac{q}{ik}\right), \quad (28)$$

$$0 = \alpha \left(1 - \frac{q}{ik}\right) e^{qL} + \beta \left(1 + \frac{q}{ik}\right) e^{-qL}. \quad (29)$$

Por lo tanto, las soluciones para α y β son:

$$\beta = \frac{2 - \left(1 - \frac{q}{ik}\right) e^{qL}}{\left(1 + \frac{q}{ik}\right)^2 e^{-qL} - \left(1 - \frac{q}{ik}\right)^2 e^{qL}}, \quad (30)$$

$$\alpha = \frac{2 \left(1 + \frac{q}{ik}\right)}{\left(1 + \frac{q}{ik}\right)^2 e^{-qL} - \left(1 - \frac{q}{ik}\right)^2 e^{qL}}. \quad (31)$$

Entonces, la solución para la región interna del potencial es,

$$\Psi(x, k) = \frac{2 \left(1 + \frac{q}{ik}\right) e^{-q(L-x)} - 2 \left(1 - \frac{q}{ik}\right) e^{q(L-x)}}{\left(1 + \frac{q}{ik}\right)^2 e^{-qL} - \left(1 - \frac{q}{ik}\right)^2 e^{qL}}. \quad (32)$$

Utilizando ahora la conexión existente entre la función de onda $\Psi(x, k)$ y la función de Green G^+ (ec. (22)), obtenemos,

$$G^+(0, x; k) = \frac{1}{ik} \left[\frac{\left(1 + \frac{q}{ik}\right) e^{-q(L-x)} - \left(1 - \frac{q}{ik}\right) e^{q(L-x)}}{\left(1 + \frac{q}{ik}\right)^2 e^{-qL} - \left(1 - \frac{q}{ik}\right)^2 e^{qL}} \right]. \quad (33)$$

IV.2. Convergencia del desarrollo de Cauchy de la función de Green.

En la presente sección demostraremos la convergencia del desarrollo de Cauchy de la función de Green G^+ para el caso particular de una barrera de potencial. Una condición suficiente que garantiza la existencia de dicho desarrollo es la anulación de la integral en la expresión (13). Aquí utilizaremos la expresión analítica del propagador obtenida en la sección anterior y analizaremos su comportamiento asintótico en el plano complejo k . En particular, se demostrará que en el límite cuando $|k| \rightarrow \infty$, la función $G^+(0, x; k) \rightarrow 0$, lo cual garantiza la anulación de la integral antes mencionada. El método que utilizaremos a continuación y que constituye una de las aportaciones originales de este trabajo, consiste en estudiar las propiedades analíticas del propagador asociado a una barrera de potencial, el cual es calculado en forma analítica.

Con la finalidad de simplificar nuestro análisis, estudiaremos el comportamiento asintótico de G^+ en plano complejo k considerando los siguientes casos: Caso I ($Im(k) < 0$); Caso II ($Im(k) > 0$) y Caso III ($Im(k) = 0$). Nuestro punto de partida es la expresión (33),

$$G^+(0, x; k) = \frac{1}{ik} \left[\frac{\sigma_+ e^{-q(L-x)} - \sigma_- e^{q(L-x)}}{\sigma_+^2 e^{-qL} - \sigma_-^2 e^{qL}} \right], \quad (34)$$

la cual hemos simplificado introduciendo los coeficientes $\sigma_{\pm} = (1 \pm q/ik)$, donde $q = (V - k^2)^{1/2}$.

A continuación se discutirán los casos arriba mencionados:

- **Caso I** [$Im(k) < 0$]: en el límite en que el módulo de $k = (\mp k_x - ik_y)$ tiende a infinito, *i. e.* $|k| \rightarrow \infty$, la variable $q \rightarrow ik = (\mp ik_x + k_y)$ donde $k_{x,y} \rightarrow \infty$. Al analizar la función (34) vemos que los términos dominantes corresponden a los factores de la forma $\sigma_- e^{q(L-x)}$ y $\sigma_-^2 e^{qL}$; ésto se fundamenta en el hecho de que las funciones $e^{k_y(L-x)}$ y $e^{k_y L}$ que aparecen en los factores exponenciales, crecen a infinito más rápidamente que cualquier potencia del coeficiente ($1/\sigma_-$). Utilizando argumentos similares es posible demostrar que la contribución de los factores $\sigma_+ e^{-q(L-x)}$ y $\sigma_+^2 e^{-qL}$ es despreciable. Por lo tanto, cuando $|k|$ crece más allá de toda cota, el propagador puede expresarse como,

$$G^+(0, x; k) \simeq \frac{e^{-qx}}{ik\sigma_-}. \quad (35)$$

Sustituyendo el valor de σ_- en la expresión anterior, obtenemos,

$$G^+(0, x; k) \simeq \frac{(ik + q)}{V} e^{-qx}, \quad (36)$$

en el límite $|k| \rightarrow \infty$ ($q \rightarrow ik$), la expresión asintótica para el propagador finalmente se escribe como,

$$G^+(0, x; k) \approx -\frac{2ik}{V} e^{-ikx}. \quad (37)$$

Una vez conocido el comportamiento asintótico de G^+ , procederemos a determinar el límite cuando k tiende a infinito en todas las direcciones del plano complejo. Para realizar esta tarea utilizaremos la representación polar de la variable k *i. e.* $k = \rho e^{i\phi}$,

donde $\rho = |k|$ y $\pi < \phi < 2\pi$. Sustituyendo el valor de k en la ecuación (37) y definiendo $ik = \rho\gamma$, donde $\gamma = e^{i(\phi + \frac{\pi}{2})}$, el límite de $G^+(0, x; k)$ cuando $|k| \rightarrow \infty$ es,

$$\lim_{|k| \rightarrow \infty} G^+(0, x; k) = \lim_{\rho \rightarrow \infty} \frac{-2\rho\gamma}{V e^{\rho\gamma x}} = 0. \quad (38)$$

En la expresión anterior, es claro que $G^+(0, x; k)$ tiende a cero en el límite cuando $\rho \rightarrow \infty$, debido a que el término exponencial en dicha expresión tiende a infinito más rápidamente que ρ .

- Caso II [$Im(k) < 0$]: en el límite en que el módulo de $k = (\mp k_x + ik_y)$ tiende a infinito, *i. e.* $|k| \rightarrow \infty$, la variable $q \rightarrow ik = (\mp ik_x - k_y)$ donde $k_{x,y} \rightarrow \infty$. En este caso, siguiendo un razonamiento similar al discutido en el Caso I, observamos que los términos dominantes están dados por los factores $\sigma_+ e^{-q(L-x)}$ y $\sigma_+^2 e^{-qL}$. Esto nos permite expresar al propagador como sigue:

$$G^+(0, x; k) \simeq \frac{e^{-qx}}{ik\sigma_+}, \quad (39)$$

Sustituyendo el valor de σ_+ en (39),

$$G^+(0, x; k) \simeq \frac{(q - ik)}{V} e^{-qx}, \quad (40)$$

Por lo tanto de la expresión (40) es claro que $G^+(0, x; k)$ tiende a cero en el límite cuando $|k| \rightarrow \infty$, esto es,

$$\lim_{|k| \rightarrow \infty} G^+(0, x; k) = 0. \quad (41)$$

- Caso III [$Im(k) = 0$]: a continuación analizaremos el comportamiento asintótico de G^+ a lo largo del eje real del plano complejo k . Cuando $|k| \rightarrow \infty$ ($q \rightarrow ik$), vemos que $\sigma_+ \rightarrow 2$ y $\sigma_- \rightarrow 0$. Después de algunas manipulaciones algebraicas en la ecuación (34), tenemos que:

$$G^+(0, x; k) \simeq \frac{e^{-ikx}}{2ik}. \quad (42)$$

Finalmente, como en este caso $k = \pm k_x$, observamos que cuando $k_x \rightarrow \infty$, el límite de la expresión anterior tiende a cero:

$$\lim_{|k| \rightarrow \infty} G^+(0, x; k) \simeq \lim_{k_x \rightarrow \infty} \frac{\pm e^{\pm ik_x x}}{2ik_x} = 0; \quad (43)$$

por lo tanto, la función de Green se anula a lo largo del eje real en el límite considerado.

Finalmente, hemos demostrado que el propagador G^+ asociado a una barrera de potencial, se anula en todas las direcciones del plano complejo en el límite cuando $|k| \rightarrow \infty$. Ésta es una condición suficiente que garantiza la anulación de la integral en la ecuación (13) en el límite en que el radio R del contorno C tiende a infinito, ver Fig. 1. Por lo tanto, podemos afirmar que el desarrollo de Cauchy converge para el caso de la barrera. Dicho desarrollo se expresa como,

$$G^+(0, x; k) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{u_n(0) u_n(x)}{2k_n (k - k_n)}. \quad (44)$$

IV.3. Desarrollo de la función de onda $\Psi(x, k)$ en estados resonantes.

Con base en los resultados del capítulo anterior, demostraremos la convergencia del desarrollo en estados resonantes para la función de onda $\Psi(x, k)$ asociada a una barrera de potencial. Para llevar a cabo esta tarea utilizaremos la relación existente entre la función de Green y la función de onda obtenida en el Capítulo III (ec. (22)),

$$\Psi(x, k) = 2ikG^+(0, x, k). \quad (45)$$

Sustituyendo el desarrollo de G^+ (ec. (44)) en la ecuación (45) obtenemos finalmente,

$$\Psi(x, k) = 2ik \left[\sum_{n=1}^{\infty} \frac{u_n(0) u_n(x)}{2k_n(k - k_n)} \right]. \quad (46)$$

Es preciso aclarar que el resultado anterior es la primera demostración formal de la existencia del desarrollo en estados resonantes de la función de onda $\Psi(x, k)$, para el caso de una barrera de potencial unidimensional. Dicho resultado constituye una de las aportaciones más importantes del presente trabajo. La expresión (46) nos provee de una representación alternativa para la función de onda estacionaria $\Psi(x, k)$, la cual es relevante en el desarrollo de un formalismo (García-Calderón *et al.*, 1997) que ha permitido describir con base en expresiones analíticas exactas, la evolución temporal de la función de onda en una barrera de potencial (García-Calderón, *et al.* 1999; Villavicencio, 2000).

Es importante mencionar que las ventajas de contar con este tipo de representaciones para el caso de potenciales con geometrías más complicadas ha sido ampliamente demostrada (García-Calderón y Rubio, 1987; García-Calderón, *et al.* 1991;

Romo, 1995); en éstos trabajos se ha mostrado que con una elección apropiada de un subconjunto finito de N de términos en el desarrollo (46), se puede obtener una excelente descripción para el caso de multibarreras.

V. CONCLUSIONES

Se demuestra para el caso particular de una barrera de potencial la convergencia del desarrollo de la función de Green en estados resonantes, propuesto por García-Calderón y Rubio (1987). Se demostró la anulación del propagador $G^+(0, x; k)$ cuando $|k|$ tiende a infinito en todas las direcciones en el plano complejo k , lo cual es una condición suficiente para la existencia de tal desarrollo. Para ésto fue necesario obtener la expresión analítica de G^+ , a partir de la relación fundamental entre el propagador y la función de onda cuya expresión es bien conocida para potencial considerado. Una vez demostrada la convergencia del desarrollo de Cauchy para la función de Green $G^+(0, x; k)$, dicho resultado se extiende a la función de onda $\Psi(x, k)$ para la región interna del potencial en virtud de la relación antes mencionada, lo cual constituye el objetivo fundamental de este trabajo.

Es importante destacar que hasta ahora sólo se contaba con evidencias numéricas de la convergencia de dicho desarrollo; la primera demostración formal para el caso de una barrera de potencial es la que se presenta en este trabajo. La extensión del presente estudio a potenciales unidimensionales con geometrías más complicadas (e. g. doble barrera y multi barreras) es una de las secuelas más importantes.

LITERATURA CITADA

- Capasso, F., K. Mohammed y A. Y. Cho. (1986). *Resonant tunneling through double barriers, perpendicular quantum transport phenomena in superlattices, and their device applications*. IEEE J. Quantum Electron. QE-22, 1853.
- Capasso, F., y S. Datta. (1990). *Nanoscale and ultrafast devices*. Physics Today, February, p. 22.
- Esaki, L. y R. Tsu. (1970). *Superlattice and negative differential conductivity in semiconductors*. IBM J. Res. Dev. 14, 61.
- Gamow, G. (1928). *Zur Quantentheorie des Atomkernes*. Z. Phys. 51:204-212.
- García-Calderón, G. (1976). *An expansion of continuum wave functions in terms of resonant states*. Nucl. Phys. A 261, 130.
- García-Calderón, G. (1987). *The effect of asymmetry on resonant tunneling*. Solid State Commun. 62, 441.
- García-Calderón, G. y R. Peierls. (1976). *Resonant states and their uses*. Nucl. Phys. A 265, 443.
- García-Calderón, G. y A. Rubio. (1987). *Characteristic times for resonant tunneling in one dimension*. Phys. Rev. B 36, 4462.
- García-Calderón, G. y A. Rubio. (1997). *Transient Effects and Delay Time in the Dynamics of Resonant Tunneling*. Phys. Rev. A 55: 3361-33670.

- García-Calderón G., A. Rubio y R. Romo. (1991). *Decay widths for double barrier resonant tunneling*. J. Appl. Phys. **36**: 3612-3615.
- García-Calderón, G, A. Rubio y J. Villavicencio. (1999). *Low-Energy Relativistic Effects and Nonlocality in Time-Dependent Tunneling*. Phys. Rev. A **59**, 1758-1761.
- García-Calderón, G., R. Romo y A. Rubio. (1993). *Description of overlapping resonances in multibarrier tunneling structures*. Phys. Rev. B **47**, 9572.
- García-Calderón, G., R. Romo y A. Rubio. (1994). *Description of resonant tunneling near threshold*. Phys. Rev. B **50**, 15142.
- Ricco, B. y M. Ya Azbel (1986). *Physics of resonant tunneling. The one-dimensional double-barrier case*. Phys. Rev. B **29**, 1970.
- Romo Martínez, Roberto. (1995). *Estudio de coherencia y localización en superredes finitas*. (Tesis Doctoral). CICESE, Ensenada Baja California, México.
- Romo, R. y G. García-Calderón. (1994). *Strong overlap and transmission in triple-barrier resonant structures*. Phys. Rev. B **49**, 14016.
- Tsu, R. y L. Esaki. (1973). *Tunneling in a finite superlattice*. Appl. Phys. Lett. **22**, 562.
- Villavicencio, Jorge. (2000). *Fenómenos transitorios de la evolución temporal en estructuras cuánticas*. (Tesis Doctoral). CICESE, Ensenada Baja California, México.
- Weisbuch C. y B. Vinter. 1991. *Quantum semiconductor structures: fundamentals and applications*. Academic Press, Inc. San Diego, pp 189-215.