

UNIVERSIDAD AUTONOMA DE BAJA CALIFORNIA

ESCUELA SUPERIOR DE CIENCIAS



"TRANSPORTE ELECTRONICO
EN
MICROESTRUCTURAS CUASIPERIODICAS"

TESIS PROFESIONAL QUE COMO REQUISITO
PARCIAL PARA OBTENER EL TITULO DE:

FISICO

PRESENTA:

ALVARO ALVAREZ PARRILLA

ENSENADA, BAJA CALIFORNIA, MEXICO

DICIEMBRE 1989

"TRANSPORTE ELECTRONICO
EN
MICROESTRUCTURAS CUASIPERIODICAS"

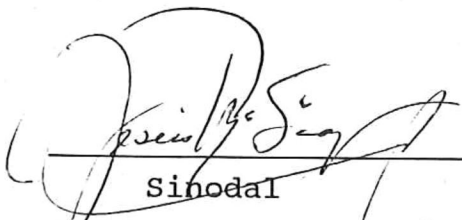
T E S I S
QUE PRESENTA:
ALVARO ALVAREZ PARRILLA

Aprobada por:



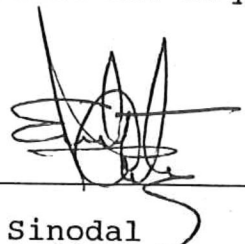
Presidente del Jurado

Dr. Ernesto Cota A.



Sinodal

Dr. Jesus Ma. Siqueiros B.



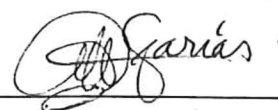
Sinodal

Dr. Leonel S. Cota A.



Sinodal

Dr. Alberto Rubio Méndez



Secretario

Dr. Mario Farías S.

RESUMEN

Se estudian algunas propiedades del transporte electrónico en microestructuras en un sistema unidimensional de barreras de potencial distribuidas cuasiperiódicamente, tanto en ausencia, como en presencia de campo eléctrico. Se consideran 2 tipos de barreras de potencial, a saber: barreras de potencial tipo delta, y barreras de potencial rectangulares. Se usa el formalismo de la matriz de transferencia para calcular: los coeficientes de transmisión y las funciones de onda después de cada potencial. Se reporta una estructura fractal en el espectro de transmisión para el caso de que el campo eléctrico es nulo. Cuando se aplica campo eléctrico, se encuentra que un parámetro importante para describir el comportamiento de los espectros es FL/E , donde F es la magnitud del campo, L la longitud total del sistema, y E la energía del electrón incidente. También, se estudia la localización de las funciones de onda para el caso en que el campo eléctrico es nulo, y se encuentran tres distintos tipos de funciones de onda: extendidas, localizadas e intermedias. Esta última se caracteriza por tener una estructura autosimilar.

A B S T R A C T

We study some of the transport properties on microstructures in a one-dimensional system of potential barriers distributed quasiperiodically, both when there isn't, and when there is an applied electric field. We consider two types of barriers: delta potential barriers and rectangular potential barriers. We use the Transfer Matrix formalism to calculate: the transmission coefficients and the wave functions after each potential. We report a fractal structure for the transmission spectra for the case in which there is no applied electric field. When the electric field is applied, we find that an important parameter for describing the spectra is: FL/E , where F is the magnitude of the field, L the total length of the system, and E is the incident electron energy. Also, we study the localization of the wave functions for the case in which there is no electric field present, and we find three different types of wave functions: extended, localized, and intermediate. This last one can be characterized by having an autosimilar structure.

AGRADECIMIENTOS

A mi familia, por apoyarme en toda mi formación y por tantas otras cosas...

A mis amigos, por aceptarme tal como soy y brindarme su amistad desinteresada.

A mi asesor de tesis Dr. Ernesto Cota A. por su apoyo y dirección brindada a todo lo largo de este trabajo.

A mis maestros, por la formación académica que me han brindado.

Al IFUNAM y al CICESE por su apoyo en el uso de las instalaciones de cómputo y de biblioteca, con las que realicé la mayor parte del trabajo.

En especial a mis padres, que entre otras cosas me ayudaron a revisar la ortografía de este escrito.

Y ¿por qué no?, también al Rock & Roll, al Surf, y a todo lo demás, que me ha mantenido activo durante mi formación.

I N D I C E

Contenido	Página
INTRODUCCION	1
CAPITULO I.- ANTECEDENTES	9
 CAPITULO II.- EL MODELO	 16
II.1.- SECUENCIA DE FIBONACCI	16
II.2.- MODELO DE MERLIN ET AL.	18
 CAPITULO III.- TEORIA	 21
III.1.- POTENCIALES	25
III.1.1.- Potenciales Rectangulares	25
III.1.2.- Potenciales tipo Delta de Dirac	28
III.2.- MATRICES DE TRANSFERENCIA	29
III.2.1.- Matriz del Potencial Rectangular	29
III.2.2.- Matriz del Potencial tipo Delta de Dirac	 32
 CAPITULO IV.- RESULTADOS Y DISCUSIONES	 35
IV.1.- COEFICIENTE DE TRANSMISION	35
IV.1.1.- Potenciales Rectangulares en ausencia de campo eléctrico	 37
IV.1.2.- Potenciales Rectangulares en presencia de campo eléctrico	 41
IV.1.3.- Caso de Potenciales tipo Delta de Dirac	 42
IV.2.- FUNCIONES DE ONDA	44
FIGURAS REFERENTES AL CAPITULO IV	48
 CAPITULO V.- CONCLUSIONES	 65
 APENDICE 1	 68
 BIBLIOGRAFIA	 70

INTRODUCCION

En Física, sólo, hemos tratado hasta ahora con 'cristales periódicos'. Para la mente de un humilde físico, estos últimos son objetos muy complicados e interesantes; constituyen una de las más complejas y fascinantes estructuras materiales de la naturaleza, pero, comparadas con el 'cristal aperiódico', resultan bastante sencillos y aburridos. La diferencia entre ambas estructuras viene a ser como la existente entre un papel pintado en la pared, ... y una obra de Rafael, que no representa una repetición tediosa, sino un diseño elaborado, coherente y lleno de sentido, trazado por el gran maestro.

Erwin Schrödinger en: "¿Que es la Vida?" (1944)⁽³⁵⁾

Las propiedades de transporte y localización en sistemas periódicos y desordenados, han sido extensamente estudiadas con anterioridad^(1,3,6,7,9,25). Sin embargo, no es sino hasta recientemente que se han comenzado a estudiar en sistemas que no son periódicos ni desordenados^(8,10-13,18-21,26). Esto se puede atribuir principalmente a las siguientes razones:

En 1984, Shechtman et al.⁽²²⁾ estudiando granos microscópicos de aleaciones de Magnesio y Aluminio, enfriados muy rápidamente, descubrieron los cuasicristales, materiales que presentan patrones de difracción puntuales de electrones y dispersión de rayos X con simetrías icosaedrales (ver fig. I.1 (a)). Según la cristalografía tradicional, no podían existir materiales con este tipo de patrones, por lo que este descubrimiento fue muy controvertido.

Independientemente, Levine y Steinhardt⁽¹⁷⁾, estudiando mosaicos de Penrose generalizados a tres

dimensiones, encontraron, a partir de un cálculo teórico, un patrón de difracción en uno de estos mosaicos, con la misma simetría icosaedral (ver *fig. I.1 (b)*). La característica principal de estos mosaicos de Penrose es que pueden llenar el espacio de una manera completa sin que haya simetría traslacional, esto es, que no son periódicos. A este tipo de estructura se le dió el nombre de estructura cuasicristalina. En la *fig. I.2*, podemos observar un mosaico de Penrose en dos dimensiones.

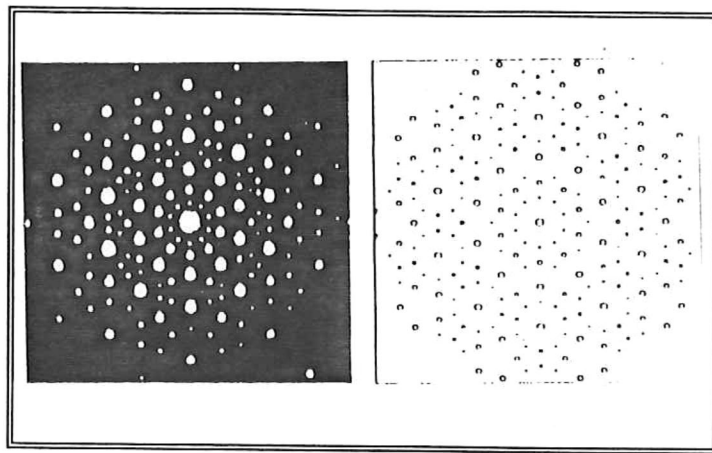


fig. I.1 (a) Patrón de difracción de electrones para una aleación rápidamente enfriada de Mn y Al , y (b) patrón de difracción teórico calculado para un mosaico de Penrose generalizado a tres dimensiones. (Nature, 1984)⁽³³⁾

Este descubrimiento dio lugar a que se propusiera que los granos de MnAl estudiados por Shechtman et al., tenían estructura cuasicristalina, y que precisamente era la que Steinhardt y Levine habían descubierto. Al estudiar con detalle los patrones de difracción de éstas, se podía observar que la separación de los puntos seguía a su vez una secuencia cuasiperiódica y que ésta era la secuencia

de Fibonacci¹. Por otra parte, los mosaicos de Penrose estaban compuestos de dos distancias distintas y el cociente entre éstas distancias era un número irracional llamado la *media de oro* o la *media dorada*.

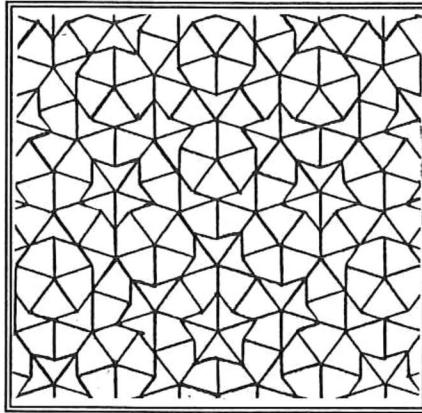


fig. I.2 Mosaico de Penrose en el plano, un esquema donde con dos piezas constitutivas, solamente se puede llenar el plano aperiódicamente. Las reglas prohíben combinar los 2 elementos de manera que formen rombos. El cociente entre los lados es la media de oro. (Nature, 1984)⁽³³⁾.

En realidad, ya se sabía que proyecciones sobre un hiperplano de una hiper-red periódica producían arreglos aperiódicos, que presentaban espectros de difracción (transformada de Fourier) que eran un conjunto denso de funciones delta. Pero no fue sino hasta que se encontraron los espectros teóricos para los mosaicos de Penrose generalizados a tres dimensiones, que se pensó en la relación que podían tener estos arreglos aperiódicos (y su espectro) con los observados en los experimentos, y con este argumento, fue posible explicar la simetría icosaedral puntual "prohibida".

¹ Lo que es una secuencia cuasiperiódica y una secuencia de Fibonacci, se verá más adelante, en esta misma sección.

Por otro lado, en 1985, Merlin et al.^(15,24) reportaron el crecimiento experimental de una Microestructura Multicapa Cuasiperiódica.

Esta estructura fue construida por medio de la técnica conocida como *epitaxia de haces moleculares* (MBE, siglas del ingles para *Molecular Beam Epitaxy*)⁽³¹⁾, que es básicamente una técnica de evaporación al vacío muy refinada, consistente en depositar capas alternantes de distintos espesores de materiales de los grupos III y V de la tabla periódica (Ga, As, In, Sb, $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, etc.), permitiendo controlar con mucho detalle: el espesor de las capas, las interfases con los distintos materiales, la homogeneidad e isotropía, etc. Todo esto junto da lugar a que se puedan fabricar estructuras muy complejas y con mucha precisión (errores de algunos Angstroms en el espesor), permitiendo así fabricar dispositivos a la medida, tales como superredes, pozos cuánticos, y en general heteroestructuras de materiales semiconductores. Esta técnica por lo tanto tiene una gran importancia en el desarrollo e implementación de nueva tecnología, principalmente en el área de la microelectrónica y de la optoelectrónica⁽¹⁴⁾.

En el caso específico de Merlin et al., la microestructura construida por ellos consistía de capas alternantes de GaAs y $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, en donde el espesor de las capas sigue una secuencia cuasiperiódica. En particular, la secuencia cuasiperiódica utilizada por Merlin et al., para la construcción de su microestructura, fue la Secuencia de Fibonacci. En su experimento, reportan mediciones de dispersión de rayos X y dispersión Raman.

Por otro lado, desde el punto de vista de estudios de localización es interesante discutir el problema de sistemas cuasiperiódicos que representan unos sistemas intermedios entre el caso periódico y el caso totalmente desordenado.

En cuanto a las propiedades de transporte de partículas cargadas a través de materiales desordenados y periódicos, podemos empezar por examinar la distribución espacial de la función de onda. Esta, nos da información acerca de la probabilidad de encontrar una partícula en una región específica del material. Para el caso de un cristal, se sabe que la función de onda está extendida, esto es, que la probabilidad de encontrar una partícula en un cristal está repartida a lo largo de la extensión del cristal. En el caso de tener un material desordenado, Anderson (1958)⁽²⁾ propuso que si el desorden del material pasaba un cierto valor umbral, todas las funciones de onda deberían de estar localizadas, esto es, que decaen exponencialmente con la distancia, de manera que va a existir una distancia llamada *longitud de localización* (ℓ), que nos indicará a que distancia la función de onda ya decayó por un factor de "e". Esto se puede expresar matemáticamente como:

$$\Psi(x) \sim e^{-x/\ell} . \quad (I.1)$$

Para el caso unidimensional, existe un teorema que dice que para cualquier valor del desorden, todas las funciones de onda del material se localizan⁽⁴⁾. Es a partir de esto que surge la duda de cual será el comportamiento de las funciones de onda en un material cuasiperiódico unidimensional.

En términos del coeficiente de transmisión, Anderson (1958)⁽²⁾ demostró que este fenómeno de localización

implica un comportamiento del tipo:

$$T \sim e^{-\alpha L}, \quad (I.2)$$

donde α es la longitud inversa de localización ($\alpha \equiv \ell^{-1}$).

A partir de la fórmula de Landauer⁽¹⁶⁾:

$$q \equiv \rho^{-1} \equiv \frac{T}{R} \equiv \frac{T}{1 - T}, \quad (I.3)$$

para el caso de sistemas unidimensionales desordenados, se puede encontrar la resistividad o la conductividad en función del coeficiente de transmisión del sistema. Y haciendo uso de el resultado encontrado por Anderson⁽²⁾ (I.2), acerca de la longitud de localización, es posible hallar una relación entre la resistividad (ρ) del sistema (con longitud L) y la longitud inversa de localización, que viene dada por:

$$\rho = e^{\alpha L} - 1. \quad (I.4)$$

Por lo que se puede pensar en que también debe de existir una relación, entre el coeficiente de transmisión y la extensión de los estados electrónicos dentro del material, en el caso de sistemas cuasiperiódicos.

Con estos antecedentes, es claro que un primer paso lógico a seguir en la investigación de las propiedades electrónicas y de transporte de los cuasicristales, es comenzar con sistemas unidimensionales que no sean periódicos ni desordenados. A estos sistemas se les denomina Sistemas Cuasiperiódicos, y deben de cumplir con las dos siguientes características:

- i).- La estructura se debe poder construir siguiendo unas reglas sencillas.
- ii).- La estructura no tiene simetría de corto alcance, esto es, que la estructura no se repite nunca en su totalidad.

Una estructura o secuencia cuasiperiódica puede ser construida de distintas maneras y cada una recibirá un nombre diferente. Entre las secuencias mas utilizadas para el estudio de las propiedades de transporte y localización, podemos destacar, entre otras, las secuencias construidas por la superposición de dos o más estructuras inconmensurables⁽²¹⁾, y las construidas por medio de relaciones de recurrencia especificas aplicadas a una base de la secuencia⁽²⁰⁾. La llamada Secuencia de Fibonacci, primero propuesta por Fibonacci en la edad media para describir el crecimiento de una población de conejos, pertenece a este último grupo, y la relación de recurrencia de ésta secuencia es:

$$\{\mathcal{F}_m\} = \{\mathcal{F}_{m-1}\} + \{\mathcal{F}_{m-2}\}, \text{ para } m \geq 2, \quad (\text{I.5})$$

con la siguiente base: $\{\mathcal{F}_1\} = A$, y $\{\mathcal{F}_2\} = B$.

Un sistema unidimensional simple que nos permite estudiar las propiedades de transporte y de localización, es el de una cadena unidimensional de potenciales que tengan cuasiperiodicidad. En general, la cuasiperiodicidad se puede manifestar, tanto en las formas de los potenciales (alturas por ejemplo), como en las posiciones de los mismos.

En este trabajo, nos concretaremos a modelar en una dimensión, por medio de potenciales rectangulares, la microestructura construida por Merlin et al. y encontrar algunas propiedades de transporte y de localización de la misma. Esto es, investigaremos el comportamiento de la transmitancia en función de la energía y en función de un campo eléctrico externo aplicado a los extremos de la microestructura. También, estudiaremos el comportamiento del módulo cuadrado de la función de onda $|\Psi|^2$, para

ciertas energías específicas.

El trabajo está dividido como sigue: En el primer capítulo , se encuentran algunos antecedentes acerca del problema en cuestión, en forma de un resumen de los trabajos publicados a la fecha en relación a las estructuras cuasiperiódicas unidimensionales. En el capítulo II se describe el modelo con el que trabajaremos, que es el apropiado para describir la microestructura construida por Merlin et al. En este capítulo también se incluye algo sobre las propiedades de la secuencia de Fibonacci. En el capítulo III, se describe la teoría que se utilizará para resolver numéricamente el modelo. Más específicamente, se presentan las formas de las matrices de transferencia para los dos casos que se estudiarán. En el capítulo IV se presentan y describen los resultados obtenidos en cuanto a las propiedades de transporte, y la manera en que se calcularon. También en este capítulo, están los resultados sobre localización. Finalmente, en el capítulo V se presentan las conclusiones.

Se incluye además, un Apéndice donde se describe con detalle algunos desarrollos algebraicos, que por continuidad en la lectura no se colocaron en el texto principal.

CAPITULO I.- ANTECEDENTES

"The time has come," the Walrus said,
"To talk of many things"...

Lewis Carroll en: "Through the Looking Glass"

La gran mayoría de los autores que han trabajado en el problema de las microestructuras cuasiperiódicas unidimensionales, lo han hecho con el modelo de *Enlace Firme* (Tight Binding)^(10-13,18,19,21,26), en el cual la cuasiperiodicidad se manifiesta en los elementos de la diagonal de la matriz de amplitudes de transición por salto (hopping transition amplitudes), compuestas de dos energías de transferencia distintas, y en los elementos fuera de la diagonal de la misma. Para resolver el modelo, la mayoría de estos autores utilizan un método con matrices de transferencia reales y/o métodos de renormalización relacionados con lo que llaman mapeos de Poincaré, consistentes en escribir la ecuación que caracteriza al sistema por medio de relaciones de recurrencia discretas.

También, se reporta un trabajo en el cual se utiliza un modelo de Ising modificado, en el cual se tienen dos distintos tipos de acoplamientos entre "espines" que siguen una secuencia cuasiperiódica⁽²⁰⁾.

Por último, Das Sarma & Xie (1984)⁽⁸⁾, reportan un trabajo que utiliza el modelo de Kronig-Penney, en el cual la cuasiperiodicidad está manifiesta en la separación de las funciones delta de Dirac. Pero, consideramos que la secuencia cuasiperiódica que construyeron no es la secuencia cuasiperiódica de Fibonacci, por lo que el problema que ellos tratan no es el mismo que nosotros

investigaremos.

En estos trabajos, se reportan principalmente propiedades acústicas (modos normales de vibración, espectro de fonones, etc.) y electrónicas (funciones de onda, espectros de energía, y algunos parámetros de localización), aunque Das Sarma & Xie, reportan en su trabajo algunos resultados referentes a la resistividad y a la conductividad.

Como a nosotros nos interesan solamente las propiedades electrónicas, nos limitaremos a exponer los resultados principales referentes al problema electrónico, aunque cabe hacer notar que lo reportado en referencia al problema acústico, es muy similar.

Entre los resultados reportados, destacan la forma de los espectros de energía, que resultan ser conjuntos de Cantor y se caracterizan por tener: componentes con medida continua, componentes puntuales puras y componentes singularmente continuas. Con esto, nos estamos refiriendo a que en este tipo de sistemas el espectro de energía puede tener una estructura de bandas permitidas (como en el caso periódico), una estructura puntual de energías permitidas (como en el caso desordenado), ó una estructura de "bandas puntuales". Esto indica que a primera vista, la estructura es de bandas, pero que, al observar con detalle a éstas bandas de energía, se ve que a su vez están compuestas de bandas mas pequeñas y éstas a su vez por otras mas pequeñas y así ad. infinitum.

La estructura reportada por Nori & Rodriguez (1986)⁽¹⁹⁾ y por Kohmoto et al. (1986, 1987)⁽¹²⁻¹³⁾, para el espectro de energía consiste en que se encuentran tres

intervalos de energía permitidos y cada una de estos a su vez se divide en otras tres y así sucesivamente (ver *fig. 1.1*), muy parecido a lo que ocurre en el conjunto triádico de Cantor (solo que en el caso del conjunto triádico se divide cada intervalo en dos y no en tres como en este caso). Esta estructura peculiar de los espectros de energía, de tener "bandas puntuales" se le ha asociado precisamente a la cuasiperiodicidad.

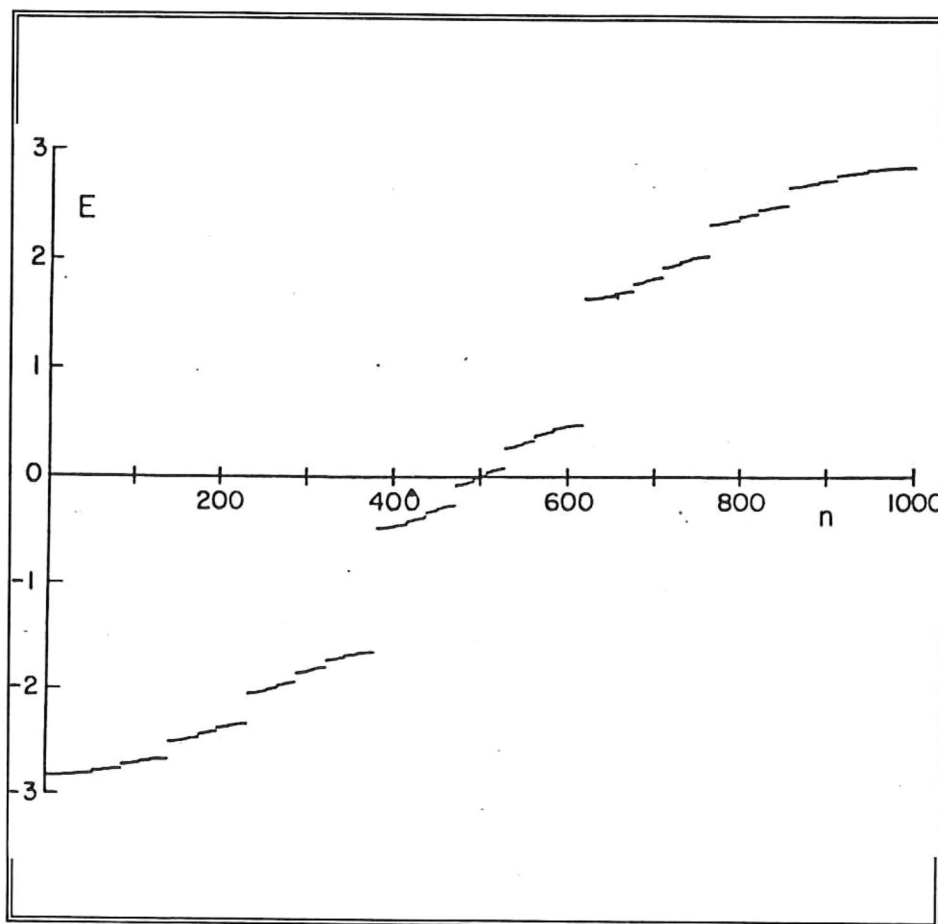


fig. 1.1. Espectro de energía de un electrón para el modelo de enlace firme con una secuencia cuasiperiódica de dos amplitudes de transición por salto $\tau_L=1$ y $\tau_S=2$, para una cadena con 1000 sitios; n indica el estado estacionario con energía E_n . Tomado de Nori & Rodríguez (1986)⁽¹⁹⁾.

Por otra parte, Karmakar et al. (1989)⁽¹¹⁾, reportan para la densidad local de estados (Local density of States, LDOS) una estructura de cuatro bandas, donde cada una de estas cuatro bandas se divide a su vez en tres sub-bandas y estas a su vez en otras tres y así sucesivamente. Ellos asocian la estructura de cuatro bandas al modelo específico utilizado por ellos (on-site model), pero aseguran que la trifurcación sucesiva de cada sub-banda es una característica de la secuencia de Fibonacci. También estos mismos autores observan que "...la posición de las bandas así como sus formas convergen muy rápidamente a valores estables con el incremento en el tamaño del sistema.", por ejemplo ellos reportan que la LDOS para un sistema conteniendo 610 elementos (generación 14) difiere de la LDOS de un sistema con 987 elementos (generación 15) por una parte en 10^3 en promedio.

En cuanto a las funciones de onda, Liu (1986)⁽¹⁸⁾, y Kohmoto et al. (1986, 1987)⁽¹²⁻¹³⁾ reportan que asociadas a las componentes de los espectros de energía, las funciones de onda correspondientes son a su vez: funciones de onda extendidas (como en el caso de un sistema periódico), funciones de onda localizadas (como en el caso de un material desordenado) y también se encuentran funciones de onda asociadas a las componentes singularmente continuas, que se les ha dado el nombre de funciones de onda intermedias (Ver *fig. 1.2*). Estas últimas, tienen características especiales, en cuanto a que no son extendidas ni tampoco localizadas, y algunas de ellas tienen una estructura similar a distintas escalas. A esto se le ha llamado *autosimilaridad*.

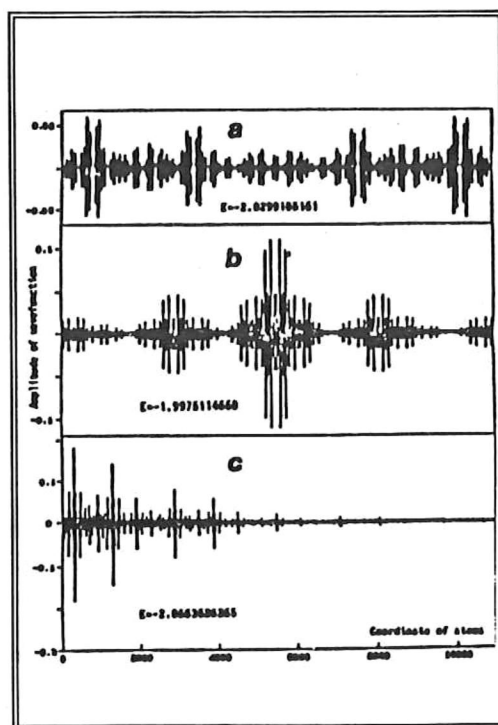


fig. 1.2.- Funciones de onda con distintos tipos de localización para una generación 20 de Fibonacci ($N[20]=10946$). Modelo de enlace firme con energías de sitio $E = -E = 1$, amplitudes de transición de salto $\tau = -1$. a) Función extendida, b) función intermedia, c) función localizada con localización débil. Tomado de Liu (1986) ⁽¹⁸⁾.

En cuanto al trabajo publicado por Das Sarma & Xie, ellos reportan autosimilaridad en los espectros de conductividad y resistividad. Autosimilaridad que no es muy obvia al examinar sus resultados (Ver fig. 1.3).

Un común denominador de todos estos trabajos ha sido que consideran modelos en los cuales los potenciales dispersores son puntuales, lo que no es una buena aproximación al problema real de tener electrones cruzando un material con espesores apreciables. Debido a esto, para aproximarnos un poco más a la realidad, que sería utilizando potenciales "suaves", en el presente trabajo hemos optado por usar un modelo de potenciales dispersores rectangulares.

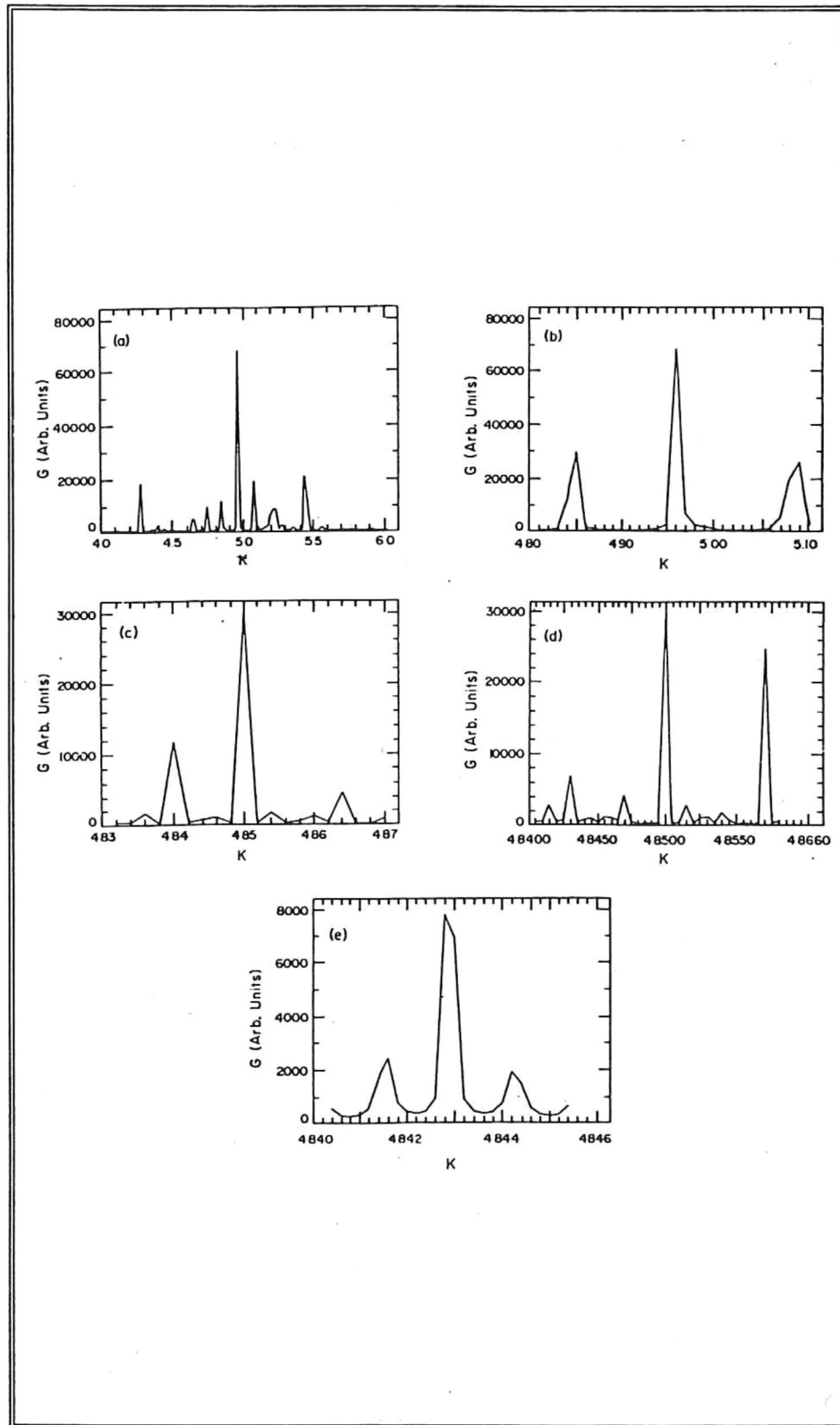


fig. 1.3. - Conductancia ($q \delta G$) calculada para la generación 16 de una secuencia de Fibonacci con a =media dorada, $b=1.0$. Los resultados se muestran con distintas resoluciones $\Delta k=0.02$ (a), 0.002 (c), 0.0005 (d), y 0.0002 (e). Tomado de Das Sarma & Xie (1988) ⁽⁸⁾.

En cuanto a la longitud de los sistemas, la mayoría de los autores han optado por utilizar sistemas con un número finito de elementos, mientras que otros lo han hecho con un número infinito⁽¹¹⁾. Entre los que usan un número finito de elementos, hay modelos con condiciones de frontera periódicas, y aperiódicas. Esta última condición de frontera es la más apropiada para representar el problema real mencionado en el párrafo anterior.

CAPITULO II.- E L M O D E L O

...A model must fulfill certain
 requirements: it must be similar to reality, it
 must be simple enough to be mathematically
 manageable, it must not be too simple in order to
 be at least interesting, it must not be too
 complicated, so that one can with our present
 means and tools, actually do something with it.

Oskar Morgenstern, en: "Theory of Games" (1966) ⁽³²⁾

Como ya se mencionó en la Introducción, en 1984 Merlin et al. construyeron una microestructura cuasiperiódica con $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ y GaAs, utilizando la técnica de *epitaxia de haces moleculares* (MBE). En este capítulo veremos la manera en que se construyó dicha estructura y la forma en que se modelará. Para empezar, veremos la manera de construir la secuencia de Fibonacci y algunas de sus propiedades más importantes.

II.1.- SECUENCIA DE FIBONACCI

La llamada Secuencia de Fibonacci, primero propuesta por Fibonacci en la Edad Media para describir el crecimiento de una población de conejos, pertenece al grupo de secuencias cuasiperiódicas que se pueden construir a partir de una relación de recurrencia, que para ésta secuencia es:

$$\{F_m\} = \{F_{m-1}\} + \{F_{m-2}\}, \text{ para } m \geq 2, \quad (2.1)$$

con la siguiente base: $\{F_1\} = A$, y $\{F_0\} = B$.

Donde se le llama a $\{F_m\}$ la generación m-ésima.

De donde obtenemos que los siguientes elementos van a ser:

$$\begin{aligned} \{F_2\} &= AB & \{F_3\} &= ABA & \{F_4\} &= ABAAB & \{F_5\} &= ABAABABA \\ \{F_6\} &= ABAABABAABAAB & . . . & & \{F_m\} &= \{F_{m-1}\} \{F_{m-2}\} \end{aligned}$$

Entre las propiedades mas importantes que caracterizan a ésta secuencia están:

* Para $m \gg 1$ se cumple que el cociente:

$$\sigma \equiv \frac{N(m)}{N(m-1)} \rightarrow \frac{1 + \sqrt{5}}{2} \quad (\text{Media de Oro}), \quad (2.2)$$

con $N(m) \equiv \{\text{Número de elementos en la generación } m\}.$

Donde este cociente, σ , conocido como la media de oro o la media dorada, es precisamente el cociente que aparecía en los mosaicos de Penrose.

* Para $m \gg 1$, $N(m)$ crecerá como:

$$N(m) \sim \sigma^m, \quad (2.3)$$

esto es, que la longitud de la secuencia crecerá de una manera potencial conforme al número de la generación. En la tabla 2.1, se encuentran las $N(m)$ para las primeras generaciones:

m	N(m)
1	1
2	2
3	3
4	5
5	8
6	13
7	21
8	34
9	55
10	89
11	144
12	233
13	377
14	610
15	987
16	1597
17	2584
18	4181
19	6765
20	10946

Tabla 2.1. Número de elementos de la secuencia de Fibonacci en función de la generación.

II.2.- Modelo de Merlin et al.

La microestructura construida por Merlin et al. tiene la cuasiperiodicidad en las posiciones, y se escogió esta secuencia para construir la microestructura debido a las propiedades de los cuasicristales de presentar la secuencia de Fibonacci inscrita en las posiciones de los picos del patrón de difracción.

En la construcción de la microestructura, se consideraron dos bloques principales: el primero compuesto de un espesor c de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, seguido por un espesor a de GaAs, y el segundo, compuesto del mismo espesor c de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, seguido por un espesor b de GaAs. Estos bloques se colocaron sobre un sustrato de GaAs, siguiendo la secuencia de Fibonacci.

De esta manera se construyó una secuencia de generación 13, o sea de 377 elementos. En este modelo lo que sigue la secuencia de Fibonacci es la separación de los bloques de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, o sea los espesores de los bloques de GaAs. En la fig. 2.1 se muestra de forma esquemática los bloques y la manera en que fueron colocados sobre el sustrato.

Para modelar este sistema se puede considerar que cada material tiene un cierto potencial asociado a él. Si hacemos la suposición de que el potencial se mantiene constante en todo el material y si también suponemos que la interfase entre los materiales es muy abrupta, podremos simular al sistema por medio de potenciales rectangulares unidimensionales. Para esto hay dos casos, uno en el que el potencial asociado al $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ sea mayor que el del asociado al GaAs, en tal caso, se tendrán barreras de

potencial separadas según la secuencia de Fibonacci. Si por el otro lado el potencial del $\text{AlGa}_{1-x}\text{As}$ es menor que el del GaAs, se tendrán pozos rectangulares separados de igual manera. Para estos materiales, resulta que ocurre el primer caso, por lo que se tendrán barreras de potencial de ancho c , separadas por distancias a y b , siguiendo éstas, la secuencia de Fibonacci. (Ver fig.2.1).

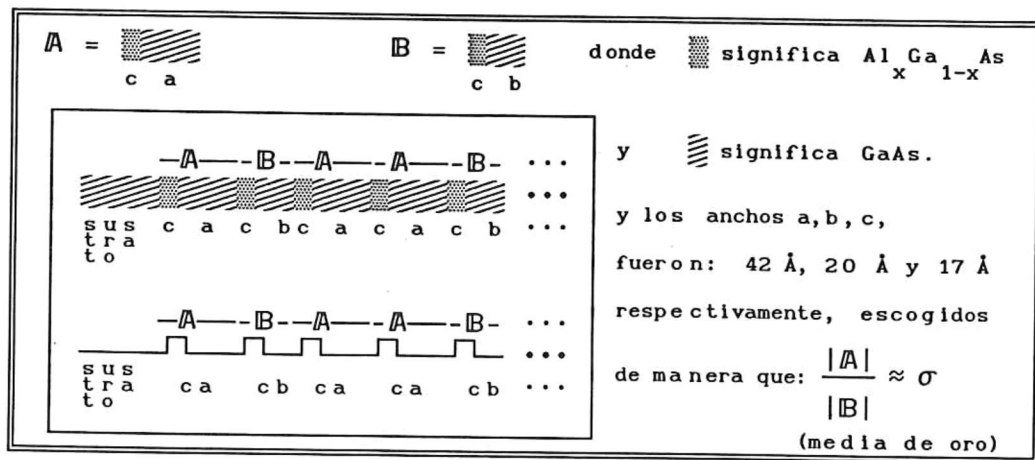


fig.2.1. Representación esquemática del sistema construido por Merlin et al. y su modelación con potenciales rectangulares.

En cuanto al valor de la altura del potencial, se utilizó la siguiente fórmula⁽³¹⁾:

$$V_0 = 65 \% \left[E_{\text{con AlGa}_{1-x}\text{As}} - E_{\text{con GaAs}} \right] \approx 0.45 \text{ eV.}, \quad (2.4)$$

donde E_{con} significa la energía de la banda de conducción del material en cuestión. Los valores de los anchos de cada material se muestran en la fig. 2.1 y fueron escogidos por Merlin et al. de manera que el cociente de los bloques A y B fuera la media de oro. Esto, nuevamente, con el propósito de aproximar lo más posible este sistema unidimensional con el de los cuasicristales tridimensionales y con los mosaicos de Penrose.

Por último, en nuestro modelo hemos considerado la posibilidad de la existencia de un campo eléctrico constante aplicado a los extremos de la muestra. La manera en que esto cambia al modelo se puede apreciar esquemáticamente en la *fig.2.2.*

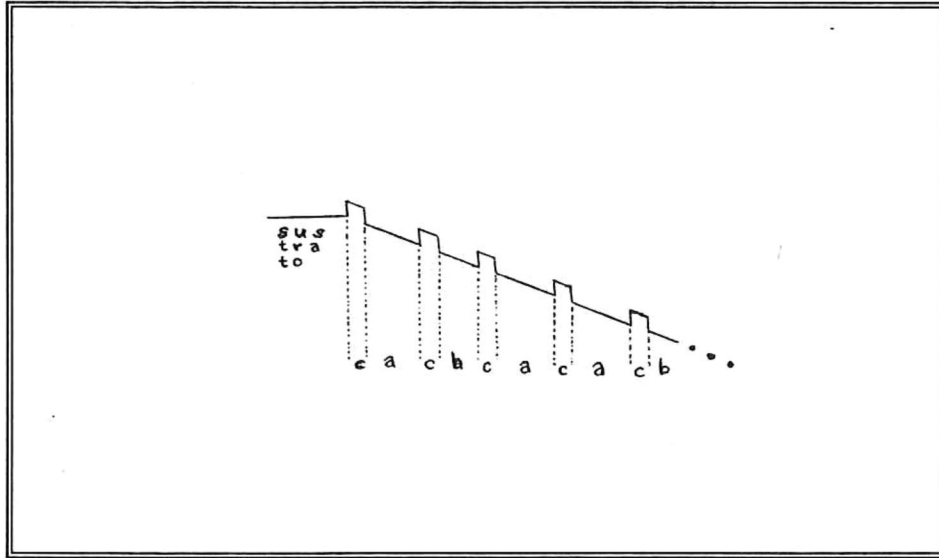


fig.2.2. - Modelo del sistema experimental hecho por Merlin et al. en presencia de un campo eléctrico constante.

CAPITULO III.- T E O R I A

"Let's see if we're talking of the same ones. Erwin Schrödinger, Albert Einstein, Werner Heisenberg-"

"That's the crowd. They were fond of what was called 'thought experiments'...It was a silly business, sir. Shut a cat in a box. Control whether or not he is killed by decay of an isotope with a half life of an hour. At the end of the hour, is the cat alive or dead? Schrödinger contended that, because of the statistical probabilities in what they thought of as science in those days, the cat was neither alive or dead until; somebody opened the box; it existed instead as a cloud of probabilities."

"...Anyhow Pixel got the tag 'Schrödinger's Cat' hung on him because he walks through walls."

Robert Heinlein en: "The cat who walks through walls"⁽²⁹⁾

Cuando se quiere estudiar la transmisión de electrones en un medio se utiliza la ecuación de Schrödinger, que para el caso mas general se escribe como:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{x}, t) \right] \Psi(\vec{x}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{x}, t). \quad (3.1)$$

El potencial que se está investigando no tiene dependencia temporal, con lo cual la ecuación que describiría al sistema sería la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{x}) \right] \Psi(\vec{x}) = E \Psi(\vec{x}). \quad (3.2)$$

Debido a la simetría del sistema, y suponiendo que podemos considerar a las películas delgadas como medios homogéneos, se podrá utilizar la aproximación de masa efectiva para las estructuras sin perturbar, y separar la solución de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo (3.2) en dos: una función de onda transversal Ψ_T , y una función de

onda longitudinal Ψ_L . La parte que nos interesa conocer es la parte longitudinal, que quedaría descrita por:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \Psi_L(x) = E_L \Psi(x), \quad (3.3)$$

donde E_L es la energía longitudinal y m^* es la "masa efectiva" de la partícula, debido a que atraviesa el potencial en el sentido longitudinal. La masa efectiva, está dada por la relación:

$$\frac{1}{m^*} \equiv \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2}, \quad (3.4)$$

donde "k" es el número de onda y

$$E = E_L(V(x)) + \hbar^2 k_T^2 / 2m^*, \quad (3.5)$$

es la energía de la partícula incidente^(28,25).

Por facilidad de escritura, tomaremos la convención, de aquí en adelante de escribir "m" en vez de " m^* ", "E" en vez de " E_L " y " Ψ " en vez de " Ψ_L ".

Para encontrar la solución de la ecuación de Schrödinger que describe la parte longitudinal de la función de onda (3.3), utilizaremos el método de la matriz de transferencia^(9,34) que, brevemente, consiste en representar a un potencial arbitrario por medio de una matriz compleja de (2 X 2), y encontrar cómo cambia la función de onda al pasar por dicho potencial. Así, el problema se traduce en encontrar los elementos de la matriz que caracteriza al potencial.

Para que este potencial arbitrario se pueda representar por medio de una matriz de transferencia, es necesario que tenga las siguientes características:

1.- $V(x) \in \mathbb{R}$. Esto es, que el potencial tenga sólo

valores reales.

2.- $V(x)$ sea univaluado. Esto es, que el potencial, dado un x , sólo tome un valor bien definido.

3.- $V(x)$ sea constante fuera de la región finita donde está definido. Ver fig. 3.1.

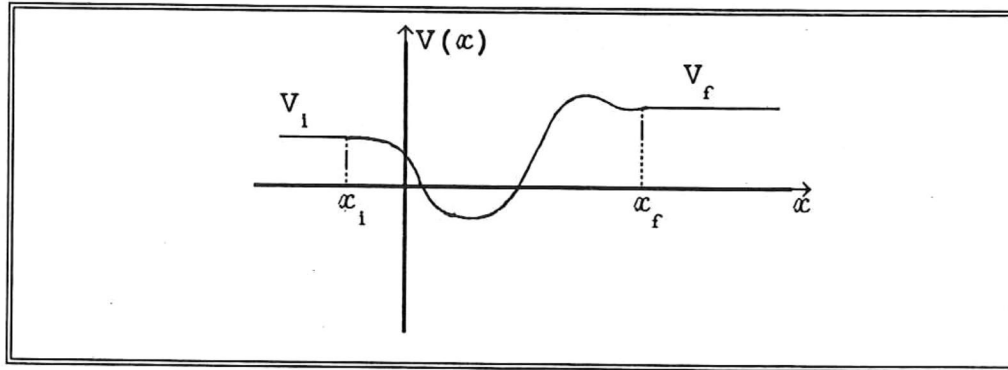


fig. 3.1.- Potencial arbitrario, que puede ser representado por medio de una matriz de transferencia.

Por otro lado, la matriz de transferencia que representará a este potencial tendrá algunas propiedades, que se pueden deducir a partir de algunos principios con los que cumple la ecuación de Schrödinger (Principio de superposición, invarianza ante simetría temporal, y la conservación de la densidad de probabilidad). Entre las propiedades más importantes que cumple la matriz de transferencia destacan:

P1.- La matriz de transferencia S , es una relación lineal entre los coeficientes de la función de onda de las regiones adyacentes al potencial. Con esto se quiere decir que la matriz va a describir al potencial independientemente de que las funciones de onda en los extremos del material cambien.

P2.- Los elementos de la matriz de transferencia S satisfacen las siguientes tres relaciones:

$$\left. \begin{aligned} S_{2,2} &= S_{1,1}^* , \\ S_{2,1} &= S_{1,2}^* , \\ \text{DET}(S) &= \frac{k_i}{k_f} , \end{aligned} \right\} \quad (3.6)$$

donde "DET" significa determinante, "*" Complejo Conjugado y k_i , y k_f están dados por:

$$k_{i,f}^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_{i,f}) , \quad (3.7)$$

donde los subíndices i y f indican inicial y final, respectivamente.

P3.- Si se tiene un sistema de N potenciales colocados uno detrás de otro, cada uno caracterizado por una matriz S_j ($j=1, \dots, N$), podremos encontrar una matriz de transferencia total del sistema S_T , dada por el producto de las matrices de transferencia individuales (fig 3.2), esto es:

$$S_T = \wp \prod_{j=1}^N S_j , \quad (3.8)$$

donde $\wp$ es un operador de ordenamiento de menor a mayor, que actúa en los subíndices de las matrices S_j .

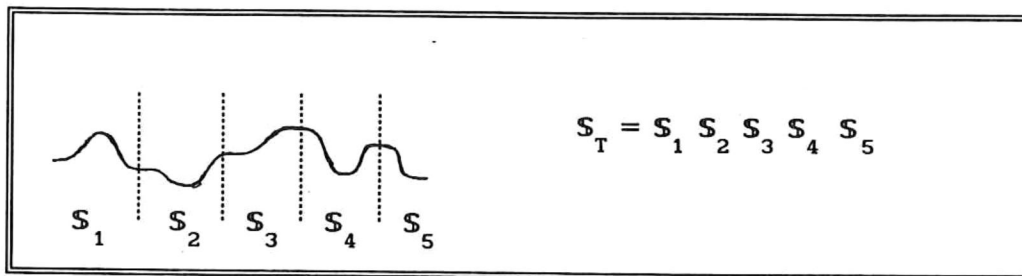


fig 3.2.- Representación esquemática de la propiedad P3 de las matrices de Transferencia mencionadas en el texto.

III.1.- POTENCIALES:

En nuestro caso, hemos utilizado 2 tipos distintos de potenciales: rectangulares, y tipo delta de Dirac. Ambos, en presencia de un campo eléctrico constante, lo que produce un potencial lineal con el valor del campo como pendiente.

De esta manera, el potencial total va a estar dado por:

$$V(x) = U(x) - F \cdot x, \quad (3.9)$$

donde el término $F \cdot x$ indica precisamente el potencial debido al campo eléctrico, con $F = \varepsilon \cdot q$, donde "q" es la carga de la partícula que atraviesa el potencial y "ε" es el valor del campo eléctrico.

III.1.1.- Potenciales Rectangulares:

Los potenciales rectangulares que se utilizaron, están caracterizados por su ancho, dado por "c", y por su altura, dada por " V_0 ". Además, están colocados de manera que cada potencial individual comience en x_k . Así, si tenemos n potenciales, $U(x)$ va a estar dada por:

$$U(x) = \sum_{k=1}^N u_k(x), \quad (3.10)$$

donde $u_k(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x_k + c \leq x < x_{k+1} \\ V_0 & \text{si } x_k \leq x < x_k + c \end{cases}$

La forma esquemática de los potenciales se puede ver en la fig.3.3 (a).

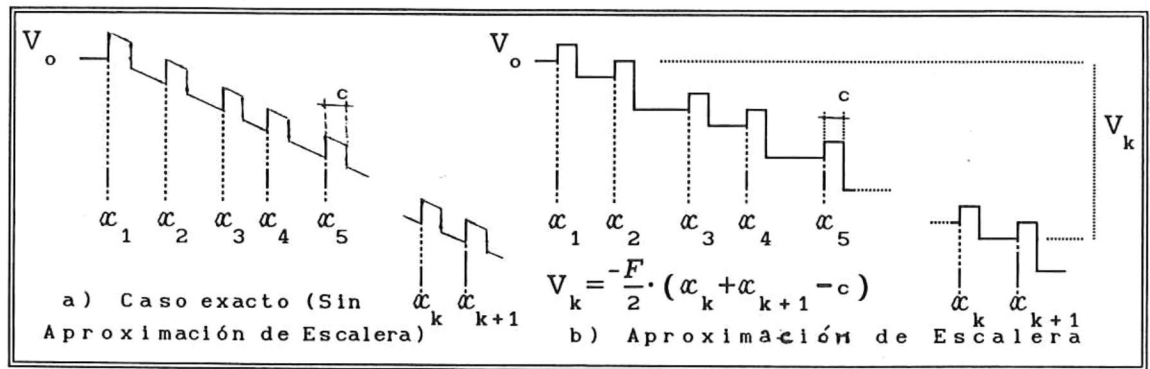


fig. 3.3.- Potenciales rectangulares con campo eléctrico.

Utilizando las formas para los potenciales rectangulares (3.10) y para el potencial total (3.9), y sustituyendo en la ecuación de Schrödinger para la parte longitudinal (3.3), obtenemos:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \sum_{k=1}^N u_k(x) - F \cdot x - E \right] \Psi(x) = 0, \quad (3.11)$$

que a primera vista es una ecuación muy difícil de resolver, pero que utilizando el siguiente cambio de variable:

$$z \equiv -F^{1/3} \cdot \left(x + \frac{E - \sum_{k=1}^N u_k(x)}{F} \right), \quad (3.12)$$

se transforma en la ecuación diferencial de Airy:

$$\left[\frac{d^2}{dz^2} - z \right] \Psi(z) = 0, \quad (3.13)$$

cuyas soluciones son:

$$\Psi(z) = A \cdot A_i(z) + B \cdot B_i(z), \quad (3.14)$$

donde $A_i(z)$ y $B_i(z)$ son las funciones de Airy. Calcular éstas funciones numéricamente involucra mucho tiempo de cómputo, aparte de que el encontrar una expresión para la matriz de transferencia general es mas complicado, por lo que se decidió utilizar la *aproximación de escalera a priori*. Esto nos permitirá encontrar una expresión para la

matriz de transferencia mucho mas sencilla y fácil de calcular numéricamente.

La *aproximación de escalera*, no es otra cosa que suponer que el campo eléctrico se puede aproximar por una serie de escalones en vez de por una pendiente (Ver *fig.3.3 (b)*). Cabe mencionar que ésta aproximación sólo es válida para valores pequeños del campo eléctrico. Al decir valores pequeños del campo eléctrico, nos referimos a que el parámetro " $|FL/E|$ " sea menor o cercano a la unidad, ó equivalentemente que " $|FL|$ " no sea mucho mayor que " E ". Al decir mucho mayor nos estamos refiriendo a por lo menos un orden de magnitud de diferencia entre el valor que tome " $|FL/E|$ " y la unidad, esto a partir de una comparación cuantitativa, hecha en el caso periodico y en el caso desordenado, donde se comparó el caso numéricamente exacto (utilizando (4.14)), con el caso de utilizar la *aproximación de escalera* (4.15)^(3,6).

Tomando en cuenta lo anterior, podemos reescribir (3.9) como:

$$V(x) = \sum_{k=1}^N u'_k(x) , \quad (3.15)$$

$$\text{donde } u'_k(x) = \begin{cases} -F \cdot (x_{k+1} + x_k - c)/2 & \text{si } x_k + c \leq x < x_{k+1} \\ V_0 - F \cdot (x_k + x_{k-1} - c)/2 & \text{si } x_k \leq x < x_k + c \end{cases} ,$$

y de ésta manera, la ecuación que regirá el comportamiento de la función de onda de nuestro sistema (3.3) ó (3.11), quedará como:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \sum_{k=1}^N u'_k(x) - E \right] \Psi(x) = 0 . \quad (3.16)$$

III.1.2.- Potenciales tipo Delta de Dirac:

Los potenciales tipo delta se caracterizan por un parámetro usualmente llamado altura " β ", que en realidad es el producto del ancho, por la altura de un potencial rectangular, cuando la altura tiende a infinito y el ancho tiende a cero, manteniéndose el producto constante. Y si el potencial está colocado en x_k , podremos escribir $U(x)$, para N potenciales, como:

$$U(x) = \sum_{k=1}^N \beta \cdot \delta(x-x_k) , \quad (3.17)$$

y de igual manera que en el caso de potenciales rectangulares, se puede utilizar la aproximación de escalera para aproximar la cadena de potenciales tipo delta con campo eléctrico (Ver fig.3.4 (a)), por una serie de escalones con una delta colocada en la orilla de cada escalón (Ver fig.3.4 (b)).

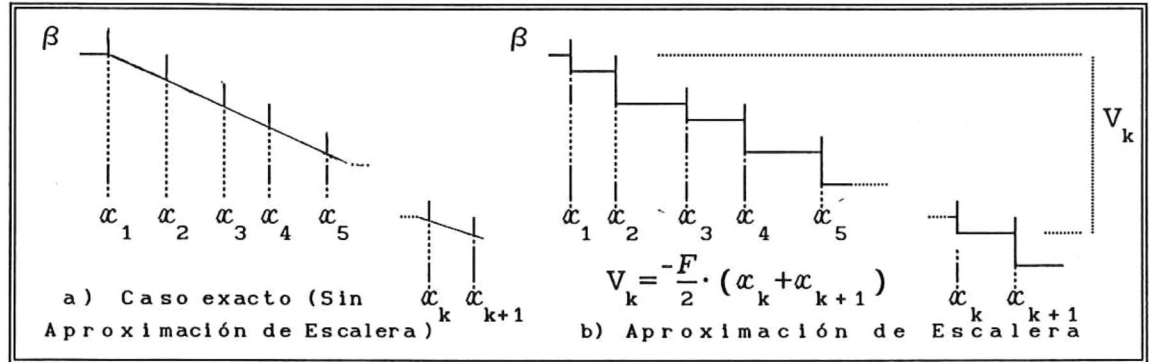


fig.3.4.- Potenciales tipo delta de Dirac con campo eléctrico.

Quedando una expresión para el potencial total de la siguiente manera:

$$V(x) = \sum_{k=1}^N u'_k(x) , \quad (3.18)$$

$$\text{donde } u'_k(x) = \beta \cdot \delta(x-x_k) + \begin{cases} -F \cdot (x_{k+1} + x_k)/2 & \text{si } x_k \leq x < x_{k+1} \\ -F \cdot (x_k + x_{k-1})/2 & \text{si } x_{k-1} \leq x < x_k \end{cases}$$

y que igual que en el caso de los potenciales tipo rectangular, cumple con la ecuación de Schrödinger longitudinal (3.3) y (3.16), y regirá el comportamiento de nuestro sistema de potenciales tipo delta.

III.2.- MATRICES DE TRANSFERENCIA:

Ahora procederemos a encontrar las expresiones para las matrices de transferencia para un potencial, colocado en x_k , cuando se utiliza la *aproximación de escalera*. (Ver fig.3.5).

Comenzaremos con el caso del potencial rectangular y luego procederemos con el potencial tipo delta. En ambos casos, la manera de encontrar la matriz es primero encontrar la solución particular de la ecuación de Schrödinger de nuestro sistema (3.16) para la región dentro del potencial, y luego relacionarla con las soluciones en las regiones adyacentes al mismo.

III.2.1.- Matriz del Potencial Rectangular:

Supongamos que tenemos un potencial como el de la fig.3.5 (a), en donde una partícula incide por la izquierda viniendo de la región j . Lo que nos interesa calcular, es cuales van a ser las funciones de onda en las regiones j , y $(j+2)$, debido a la existencia del potencial en la región $(j+1)$. Para esto, sabemos que en la región ℓ -ésima la función de onda va a ser:

$$\Psi_{\ell} = A_{\ell} e^{ik_{\ell} \cdot x} + B_{\ell} e^{-ik_{\ell} \cdot x}, \quad (3.19)$$

$$\text{en donde } k_{\ell} = \frac{\sqrt{2m(E-V_{\ell})}}{\hbar} \text{ con } x_{k+1} < x \leq x_k \text{ donde } x_k \text{ y}$$

α_{k+1} , son los límites de la región ℓ -ésima.

Ahora, para cada frontera, o sea en cada α_k , se deben de cumplir las siguientes condiciones de frontera:

$$\left. \begin{aligned} \Psi_\ell(\alpha_k) &= \Psi_{\ell+1}(\alpha_k) \\ \Psi'_\ell(\alpha_k) &= \Psi'_{\ell+1}(\alpha_k) \end{aligned} \right\} , \quad (3.20)$$

donde

$$\Psi'_\ell(\alpha_k) = \left[\frac{d}{dx} \Psi_\ell \right]_{\alpha_k} = ik_\ell \cdot \left(A_\ell e^{ik_\ell \cdot \alpha_k} - B_\ell e^{-ik_\ell \cdot \alpha_k} \right) . \quad (3.21)$$

Estas condiciones (3.20) se pueden escribir en forma matricial como:

$$\phi_\ell(\alpha_k) = \phi_{\ell+1}(\alpha_k) , \quad (3.22)$$

$$\text{donde } \phi_\ell(\alpha_k) = \begin{pmatrix} \Psi_\ell(\alpha_k) \\ \Psi'_\ell(\alpha_k) \end{pmatrix} = Q(k_\ell, \alpha_k) B_\ell$$

$$\text{con } Q(k_\ell, \alpha_k) = \begin{pmatrix} e^{ik_\ell \cdot \alpha_k} & e^{-ik_\ell \cdot \alpha_k} \\ ik_\ell e^{ik_\ell \cdot \alpha_k} & -ik_\ell e^{-ik_\ell \cdot \alpha_k} \end{pmatrix} \quad B_\ell = \begin{pmatrix} A_\ell \\ B_\ell \end{pmatrix}$$

así, las condiciones (3.20) ó (3.22) se pueden reescribir como:

$$Q(k_\ell, \alpha_k) B_\ell = Q(k_{\ell+1}, \alpha_k) B_{\ell+1} . \quad (3.23)$$

De manera que en las dos fronteras, o sea en los puntos α_i de la fig.3.5 (a), se cumplirá el siguiente sistema de ecuaciones:

$$\left. \begin{aligned} Q(k_j, \alpha_i) B_j &= Q(k_{j+1}, \alpha_i) B_{j+1} \\ Q(k_{j+1}, \alpha_{i+1}) B_{j+1} &= Q(k_{j+2}, \alpha_{i+1}) B_{j+2} \end{aligned} \right\} . \quad (3.24)$$

Como queremos tener B_{j+2} en función de B_j , despejamos del

sistema de ecuaciones anterior (3.24), y obtenemos:

$$B_{j+2} = S_i(k_j, k_{j+1}, k_{j+2}, \alpha_i, \alpha_{i+1}) B_j, \quad (3.25)$$

donde

$$S_i = \begin{pmatrix} Q^{-1}(k_{j+2}, \alpha_{i+1}) & Q(k_{j+1}, \alpha_{i+1}) & Q^{-1}(k_{j+1}, \alpha_i) & Q(k_j, \alpha_i) \end{pmatrix}$$

es precisamente la matriz de transferencia de un potencial rectangular como el de la fig.3.5 (a).

La forma explícita de S_i , es:

$$\begin{aligned} S_{i,1,1} &= \frac{1}{2} \left[\left(1 + \frac{k_j}{k_{j+2}} \right) \cos[k_{j+1}d] + i \left(\frac{k_j}{k_{j+1}} + \frac{k_{j+1}}{k_{j+2}} \right) \sin[k_{j+1}d] \right] e^{-i(k_{j+2}\alpha_{i+1} - k_j\alpha_i)} \\ S_{i,1,2} &= \frac{1}{2} \left[\left(1 - \frac{k_j}{k_{j+2}} \right) \cos[k_{j+1}d] - i \left(\frac{k_j}{k_{j+1}} - \frac{k_{j+1}}{k_{j+2}} \right) \sin[k_{j+1}d] \right] e^{-i(k_{j+2}\alpha_{i+1} + k_j\alpha_i)} \\ S_{i,2,1} &= \frac{1}{2} \left[\left(1 - \frac{k_j}{k_{j+2}} \right) \cos[k_{j+1}d] + i \left(\frac{k_j}{k_{j+1}} - \frac{k_{j+1}}{k_{j+2}} \right) \sin[k_{j+1}d] \right] e^{i(k_{j+2}\alpha_{i+1} + k_j\alpha_i)} \\ S_{i,2,2} &= \frac{1}{2} \left[\left(1 + \frac{k_j}{k_{j+2}} \right) \cos[k_{j+1}d] - i \left(\frac{k_j}{k_{j+1}} + \frac{k_{j+1}}{k_{j+2}} \right) \sin[k_{j+1}d] \right] e^{i(k_{j+2}\alpha_{i+1} - k_j\alpha_i)} \end{aligned} \quad (3.26)$$

donde "d" está definido como: $d = (\alpha_{i+1} - \alpha_i)$, y $S_{i,1,j}$ son los elementos de la matriz compleja S_i . Cabe hacer notar que ésta matriz de transferencia es exacta para cualquier matriz rectangular que tenga los parámetros indicados en la fig.3.5 (a) y colocada en cualquier posición α_i . Esta matriz, se reduce a la forma usual de la matriz de un potencial rectangular cuyos extremos estén en el nivel cero de potencial (ie. que $k_j = k_{j+2}$)⁽³⁶⁾.

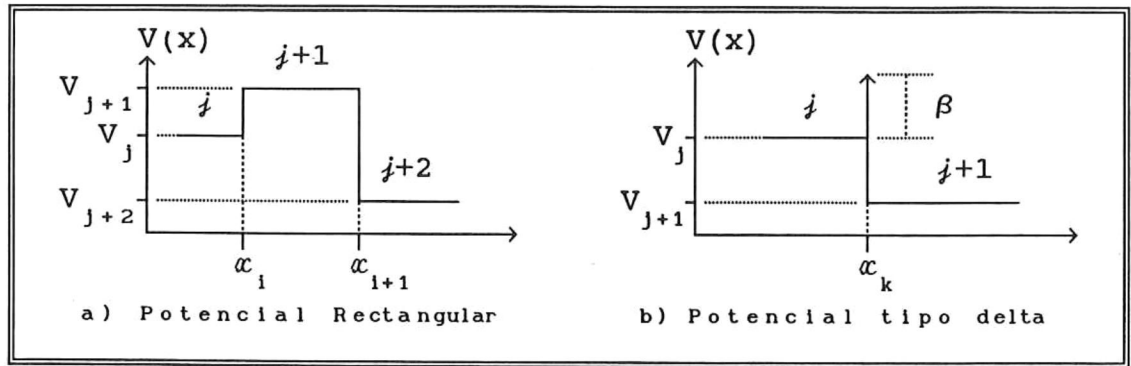


fig.3.5- Representación esquemática de un potencial rectangular y de un potencial tipo delta, como referencia para la notación del texto.

III.2.2.- Matriz del Potencial tipo Delta:

Consideremos un potencial tipo delta como el mostrado en la *fig.3.5 (b)*, en donde de nuevo, una partícula incide por la izquierda. En este caso, nos interesa calcular las funciones de onda en las regiones j y $(j+1)$, debido a la presencia del potencial en el punto α_k . De igual manera que cuando teníamos potenciales rectangulares, en la región j -ésima la función de onda va a estar dada por:

$$\Psi_j = A_j e^{ik_j \cdot x} + B_j e^{-ik_j \cdot x}, \quad (3.27)$$

en donde $k_j = \sqrt{(E - V_j)}$ con $x > \alpha_k$ o $x < \alpha_k$ donde α_k es la posición de el k -ésimo potencial, y va a ser la frontera entre dos regiones j -ésimas.

Las condiciones de frontera que debe cumplir la función de onda (3.27), van a ser las mismas que en el caso del potencial rectangular, pero debido a que el potencial tipo delta tiene una discontinuidad en su primera derivada, la condición de frontera de la derivada va a ser distinta. Tomando esto en consideración, se encuentra que las condiciones a la frontera que se deben cumplir en cada

frontera (o sea en cada x_k) son:

$$\left. \begin{aligned} \Psi_j(x_k) - \Psi_{j+1}(x_k) &= 0 \\ \Psi'_j(x_k) - \Psi'_{j+1}(x_k) &= -\beta \Psi_j(x_k) \end{aligned} \right\}, \quad (3.28)$$

que escrito en forma matricial sería:

$$R(k_j, x_k) B_j = Q(k_{j+1}, x_k) B_{j+1}, \quad (3.29)$$

$$\text{donde } R(k_j, x_k) = \begin{pmatrix} e^{ik_j \cdot x_k} & e^{-ik_j \cdot x_k} \\ (\beta + ik_j)e^{ik_j \cdot x_k} & (\beta - ik_j)e^{-ik_j \cdot x_k} \end{pmatrix},$$

$$Q(k_{j+1}, x_k) = \begin{pmatrix} e^{ik_{j+1} \cdot x_k} & e^{-ik_{j+1} \cdot x_k} \\ ik_{j+1}e^{ik_{j+1} \cdot x_k} & -ik_{j+1}e^{-ik_{j+1} \cdot x_k} \end{pmatrix},$$

$$\text{y por último, } B_j = \begin{pmatrix} A_j \\ B_j \end{pmatrix}.$$

de (3.29), obtenemos que:

$$B_{j+1} = Q^{-1}(k_{j+1}, x_k) R(k_j, x_k) B_j, \quad (3.30)$$

o equivalentemente:

$$B_{j+1} = S_k B_j, \quad (3.31)$$

donde $S_k = Q^{-1}(k_{j+1}, x_k) R(k_j, x_k)$ es precisamente la matriz de transferencia para un potencial tipo delta como el que se muestra en la fig.3.5 (b).

La forma explícita de S_k , es:

$$S_{K=\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} \left[1 + \frac{[k_j - i\beta]}{k_{j+1}} \right] e^{i(k_j - k_{j+1}) \cdot x_K} & \left[1 - \frac{[k_j + i\beta]}{k_{j+1}} \right] e^{-i(k_j + k_{j+1}) \cdot x_K} \\ \left[1 - \frac{[k_j - i\beta]}{k_{j+1}} \right] e^{i(k_j + k_{j+1}) \cdot x_K} & \left[1 + \frac{[k_j + i\beta]}{k_{j+1}} \right] e^{-i(k_j - k_{j+1}) \cdot x_K} \end{pmatrix}$$

(3.32)

Es de hacerse notar que la matriz (3.32), es exacta, para el caso en que se tenga un potencial tipo delta con dos regiones de potencial constante arbitrario, como se muestra en la *fig.3.5 (b)*. También como en el caso del potencial rectangular, esta matriz (3.32) se reduce a la forma usual de una matriz correspondiente a un potencial tipo delta de Dirac colocado en una región plana de potencial (ie. $k_j = k_{j+1}$)⁽³⁴⁾.

CAPITULO IV.- RESULTADOS Y DISCUSIONES

"Don't you know how to grab a cat?"
-and proved at once that he did not...Pixel
hit the deck, running.

And then I saw something that had been known
to me only through inference,...

...Pixel headed straight for a blank wall at
emergency full speed-and just as he seemed about
to crash headlong into it, a round cat door
opened in front of him, he streaked through it,
and it closed instantly behind him.

Robert Heinlein en: "To sail beyond the sunset"⁽³⁰⁾

En este capítulo presentaremos y discutiremos los resultados obtenidos. Comenzaremos por mostrar los resultados correspondientes al coeficiente de transmisión (T) con y sin campo eléctrico, y luego terminaremos con los resultados correspondientes a las funciones de onda sin campo eléctrico. En lo que se refiere al coeficiente de transmisión, presentaremos primero los resultados para el caso de tener potenciales rectangulares y después los resultados correspondientes a los potenciales tipo delta de Dirac.

IV.1.- COEFICIENTE DE TRANSMISION

El coeficiente de transmisión se obtuvo a partir de la matriz de transferencia del sistema completo. Esto es, se multiplicaron las matrices correspondientes a cada potencial, utilizando la propiedad P3 (3.8), y se obtuvo de ésta manera la matriz de transferencia total del sistema (dependiendo del caso que se fuera a tratar, utilizamos la matriz del potencial rectangular (3.26) ó la matriz del potencial tipo delta de Dirac (3.32), para calcular las matrices de los potenciales individuales).

Teniendo la matriz de transferencia total del sistema S_T , se procedió a obtener las amplitudes complejas de transmisión y de reflexión (τ y r), utilizando para esto los elementos de la matriz S_T y los valores de k_i y k_f : (ver Apéndice A1)

$$\tau = \frac{k_i}{k_f} \frac{1}{S_{T,2,2}} \quad \text{y} \quad r = - \frac{S_{T,2,1}}{S_{T,2,2}} . \quad (4.1)$$

A continuación, se procedió a obtener los coeficientes de transmisión y de reflexión dados por:

$$T = \frac{k_f}{k_i} \|\tau\|^2 \quad \text{y} \quad R = \|r\|^2 . \quad (4.2)$$

Para el caso en que no hay campo eléctrico, tanto las amplitudes (4.1), como los coeficientes (4.2) de transmisión y de reflexión se simplifican debido a que en ese caso

$$k_i = k_f = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} . \quad (4.3)$$

Para tener una idea del error numérico en el cálculo, se tomó en consideración que la suma de los coeficientes de transmisión y de reflexión debe ser la unidad por lo que calculamos la diferencia de la suma con la unidad, esto es:

$$\text{Error} = |1 - (R + T)| . \quad (4.4)$$

En ningún caso se obtuvo un error mayor que 10^{-10} . Además, antes de comenzar el tratamiento del problema cuasiperiódico se realizaron pruebas simulando el caso periódico y comparando con los resultados publicados con anterioridad^(5,7,23,25) (tanto con campo eléctrico como sin él). Los resultados de la comparación fueron positivos tanto cualitativa como cuantitativamente.

IV.1.1.- Potenciales Rectangulares en ausencia de campo eléctrico.

El trabajo de Merlin et al, se hizo para una estructura de 13 generaciones, por lo que se tomó esta generación para comenzar a estudiar las propiedades de transporte de este sistema. En la *fig. 4.1* se presenta la gráfica del espectro de T Vs. E , para el caso de nuestro modelo con generaciones 13 y 15 (377 y 987 potenciales, respectivamente). En todas las gráficas referentes al coeficiente de transmisión se ha hecho un barrido en la energía comenzando en 0.0 eV. y terminando en 0.9 eV, escogiéndose estos valores tomando en cuenta que el valor de la altura del potencial es de $V_0 = 0.45$ eV, el número de intervalos en el barrido de la energía era usualmente de 1000 intervalos.

En ésta figura (*fig. 4.1*), observamos que no existe una estructura obvia en el espectro, aunque por otro lado, las energías de resonancia en los dos casos parecen ser las mismas o muy parecidas (en realidad no son las mismas, pero si muy parecidas), algo que no era de esperarse debido a que son sistemas totalmente distintos (tanto en longitud como en estructura).

Esto nos hizo pensar que podría existir una estructura escondida en el espectro, por lo que se procedió entonces a hacer un reescalamiento del coeficiente de transmisión. En vez de graficar T Vs. E , se graficó $\ln|T|$ Vs. E , para los mismos casos. El resultado del reescalamiento se puede observar en la *fig. 4.2*.

Lo primero que podemos observar al examinar la *fig. 4.2* es que aparece una estructura bien definida y que, a no

ser por la escala, tiene la misma forma en los dos casos (generación 13 y 15). Al examinar el mismo espectro para generaciones menores (*fig. 4.3*), se nota que la forma de la estructura se conserva aun en generaciones pequeñas (en la generación 8 [34 potenciales] todavía se puede observar la misma forma), por lo que la forma del espectro de $\ln|T|$ Vs. E , se puede atribuir a la cuasiperiodicidad (en particular a la secuencia de Fibonacci en las posiciones de los potenciales).

Es interesante hacer notar que no es necesario tener una secuencia muy larga para que comience a existir la estructura; con sólo 34 potenciales ya se tiene una estructura bastante rica en detalles. Esto es comparable con lo reportado por Karmakar et al. (1989)⁽¹¹⁾, que ya se mencionó en el capítulo I, referente a la rápida convergencia de la forma del espectro de la LDOS encontrado por ellos.

Otra cosa que se puede observar de las figuras anteriores es que existe autosimilaridad, entendiendo por autosimilaridad la característica de encontrar una estructura muy parecida a distintas escalas. Esto es como hacer un acercamiento a una región del espectro y observar algo muy parecido a lo que se tenía anteriormente.

Al examinar la *fig. 4.2* vemos que existen algo así como tres "bandas" de energía, donde existen energías de resonancia, antes de llegar a la parte donde se observa algo como una "banda continua", donde las energías de resonancia se aglutinan en lo que parecería un espectro continuo. Estas tres "bandas" corresponden a energías aproximadas entre (0.09-0.13), (0.238-0.27), y (0.37-0.55) y el "espectro continuo" comienza desde la energía de 0.72

eV. aproximadamente. Si se observan con detalle éstas "bandas", se podrá ver que cada una tiene a su vez otras tres "sub-bandas" y éstas a su vez están compuestas de otras tres "sub-sub-bandas" cada una. Esto se nota principalmente en la "banda" que abarca las energías entre (0.37-0.55) ya que ésta es mas "ancha" que las demás. En la "banda continua", ocurre algo muy parecido, aunque en otra escala más pequeña.

Estos resultados se pueden comparar con los presentados por Nori & Rodriguez (1986)⁽¹⁹⁾ y por Kohmoto et. al. (1986, 1987)⁽¹²⁻¹³⁾, si tomamos en cuenta que los modelos no son los mismos (ellos utilizan el modelo de *enlace firme*), y tampoco se está midiendo lo mismo. Ellos presentan el espectro de eigen-energías, mientras que nosotros presentamos el espectro de transmisión. Y aunque existe una relación cercana entre las energías de transmisión y las eigenenergías del sistema^(5,25), en este caso particular, los problemas no son exactamente iguales, y por lo tanto lo que observamos tampoco lo es: nosotros presentamos un espectro compuesto de tres "bandas" seguido de una "banda continua", mientras que ellos solo presentan tres "bandas" (por lo menos en el intervalo de energía que ellos tomaron); otra diferencia es que su espectro es simétrico con respecto al cero en la energía y los espectros presentados por nosotros no lo son (Ver fig. 1.1 en el capítulo I).

En la fig. 4.4,, podemos ver una amplificación de las regiones correspondientes a las energías (0.235-0.25) y (0.45-0.48), que corresponden a la primera "sub-banda" de la segunda "banda" y a la segunda "sub-banda" de la tercera "banda" respectivamente. Estos intervalos se encuentran marcados en la fig. 4.2 y corresponden a la generación

$m=15$.

En éstas gráficas podemos notar que por lo menos hay 3 niveles de "sub-bandas" y que también el "ancho" de las mismas sigue cierto orden. Observemos que en la *fig. 4.2*, en la tercera "banda" las "sub-bandas" laterales tienen una "sub-sub-banda" que es mas ancha que las otras, y que éstas "sub-sub-bandas" están orientadas de manera que estén "apuntando" a la "sub-banda" central. Y esto mismo vuelve a ocurrir en la "sub-banda" central de la tercera "banda" como se puede ver en la *fig. 4.4 (b)*.

En la *fig. 4.3* observamos que conforme la generación aumenta, la riqueza de la estructura aumenta (esto es, los niveles de autosimilaridad aumentan), por lo que en la *fig. 4.5* hemos hecho el caso para una generación de $m = 20$ (10,946 potenciales) y observamos que aumenta el número de niveles en los cuales se observa autosimilaridad. Esto nos lleva a pensar que en el caso en que se tenga un número infinito de potenciales ($m \rightarrow \infty$), el espectro de $\ln|T|$ Vs. E , será un espectro fractal.

También podemos notar que conforme aumenta la longitud del sistema, que es proporcional a la generación, la escala del $\ln|T|$ tiene que aumentar para que el espectro se pueda seguir visualizando. O sea, que globalmente el coeficiente de transmisión disminuye conforme la longitud del sistema aumenta. Al decir globalmente nos estamos refiriendo no al comportamiento de energías específicas sino mas bien al comportamiento de todo el rango de energías alrededor de las energías de resonancia. Esto se puede visualizar mejor si se piensa que el ancho de las energías donde existen resonancias se va "adelgazando", por lo que será cada vez más difícil "atinarle" a una de estas energías para que

halla transmisión. Esto trae como consecuencia que el tiempo característico de transmisión de la partícula aumentará, en función de la longitud total del sistema.

Sin embargo, en éste trabajo no se realizó un estudio sistemático de el coeficiente de transmisión como función de la longitud total del sistema para una energía fija, de manera que no podremos argumentar cuantitativamente respecto a este punto.

IV.1.2.- Potenciales Rectangulares en presencia de campo eléctrico.

Cuando se le aplica campo eléctrico al modelo, utilizando, como ya mencionamos en el capítulo III, la *aproximación de escalera a-priori*, obtenemos lo que se observa en las *figs. 4.6, 4.7, 4.8, 4.9, y 4.10*. En todas estas figuras se tiene el mismo intervalo de energías que en el caso sin campo eléctrico: comenzando en 0.0 eV. y terminando en 0.9 eV tomando un barrido que consistía de 1000 particiones.

En éstas figuras se tiene el comportamiento del espectro de $\ln|T|$ vs. E , para distintos valores del campo eléctrico aplicado. El campo eléctrico es $F = 10^{-6}, 10^{-5}, 10^{-4}, 10^{-3},$ y 10^{-2} , respectivamente. Las unidades del campo eléctrico F son: $[F] = \text{eV} \cdot \text{\AA}$. En las figuras, podemos observar que conforme aumenta el campo eléctrico, la estructura autosimilar, que se observaba en el caso en que el campo eléctrico era nulo, desaparece. Pero no desaparece repentinamente, sino que es un cambio que depende tanto de la longitud (generación), esto se observa en el caso de $F=0.0$, como de la intensidad del campo eléctrico.

Por otro lado, en la tabla 4.1, tenemos los valores del producto del campo eléctrico (F) por la longitud total del sistema (L) para distintos valores del campo eléctrico y de la longitud total del sistema (generación). Estos valores de $F \cdot L$ son los que corresponden a las gráficas de las *figs.* 4.6-4.10. Se han colocado en el eje de las energías, una marca correspondiente al valor de $F \cdot L$. Con ésta marca, nos podemos dar cuenta de que la estructura autosimilar comienza a desaparecer cuando el valor de la energía es menor que $F \cdot L$, o equivalentemente, cuando se cumple que:

$$\frac{F \cdot L}{E} > 1 . \quad (4.6)$$

Este parámetro, que en este caso señala la pérdida de la estructura autosimilar, también se presenta en los casos de sistemas periódicos y desordenados, como un parámetro que señala la aparición de las escaleras de Stark (en ambos casos), y en el caso desordenado este parámetro señala también una transición de estados localizados a estados extendidos⁽⁶⁻⁷⁾. Es de hacerse notar que para el caso de las figuras correspondientes a el campo de 10^{-2} en las generaciones 13 y 15, el valor de FL/E ya excedió por más de un orden de magnitud a la unidad, por lo que en estas dos gráficas la aproximación de escalera ya no tiene mucha validez, por lo que con estas gráficas se debe de tener cuidado al interpretarse.

IV.1.3.- Caso de Potenciales tipo Delta de Dirac

En esta sección presentamos los resultados concernientes a los potenciales tipo delta de Dirac. Estos resultados resultan ser muy parecidos cualitativamente con los presentados en las dos secciones anteriores, aunque cabe aclarar que no es pertinente tratar de obtener resultados cuantitativos a partir de los resultados de esta sección. Esto se debe, a que aunque el modelo de funciones

delta de Dirac es mas general que los de diferencias finitas (ie. modelos tipo *enlace firme*), el modelo sigue siendo un tanto no-físico. Se puede mostrar que un arreglo casi periódico de barreras de potencial finito, con regiones de potencial cero entre las mismas, es equivalente a un arreglo casi periódico de barreras de potencial tipo delta de Dirac. Desgraciadamente, se deberá resolver un problema distinto (otro arreglo casi periódico) para cada energía en el espectro, debido a que los parametros en el problema equivalente con funciones delta son dependientes de la energía⁽²¹⁾.

Por otra parte el problema de localización de las funciones de onda se puede resolver de manera satisfactoria resolviendo el problema de *enlace firme*⁽²¹⁾. Otra ventaja que tiene el utilizar funciones tipo delta es que el tratamiento analítico de los problemas se facilita considerablemente.

En la *fig. 4.11* presentamos el espectro de $\ln|T|$ Vs. E para distintos valores de las generaciones, en donde los parámetros que caracterizaron a este sistema fueron: las distancias de separación entre potenciales a y b , que eran 1 y 2, respectivamente, el parámetro β tomó el valor de 1, y por último, el barrido en la energía (que se escogió de manera arbitraria) fue de 0.0 a 5.0. Como se puede observar, el espectro presenta características muy parecidas a las observadas en el espectro de los potenciales rectangulares. Se observan "bandas" de energía que a su vez están compuestas de "sub-bandas" y así sucesivamente.

En la *fig. 4.12*, están las gráficas correspondientes al espectro de $\ln|T|$ Vs. E , en presencia del campo

eléctrico y en la tabla 4.2 se presentan los valores de $F \cdot L$ para las gráficas correspondientes. También aquí se observa la misma dependencia de la estructura autosimilar del espectro con el parámetro FL/E .

IV.2.- FUNCIONES DE ONDA

Usualmente, la función de onda se calcula para potenciales dispersores puntuales, y se obtiene entonces la función de onda en los potenciales dispersores. Nosotros hemos optado por encontrar la función de onda entre los potenciales dispersores. Entendiéndose entonces, que la función de onda va a estar siendo calculada no entre cada átomo del material, sino en una región de varios angstroms de espesor que contendrá varios átomos colocados en forma periódica (periódica en las regiones del material entre los potenciales dispersores).

Las funciones de onda se calcularon suponiendo que por la izquierda del sistema incidía una función de onda de amplitud igual a la unidad, y por el lado derecho del sistema no había función de onda incidente. Ahora, debido a la presencia del sistema, una parte de la onda incidente se reflejará y otra parte de la misma pasará hasta el otro lado del sistema y saldrá en forma de una función de onda transmitida.

Los coeficientes de la función de onda al final del sistema estarán dados por una relación muy parecida a la ecuación que nos permitía pasar los coeficientes de la función de onda por un potencial arbitrario (3.25), sólo que ahora la matriz que nos interesará utilizar va a ser la matriz de transferencia total del sistema. De ésta manera, si B_N es el vector de coeficientes de la función de onda al final del sistema y B_0 el de la función de onda al inicio

del mismo, entonces

$$B_N = S_T B_0, \quad (4.6)$$

donde S_T es la matriz de transferencia total del sistema dada por (3.8), y

$$B_{0_1} = 1 + i0 \quad \text{y} \quad B_{0_2} = r, \quad (4.7)$$

son los elementos del vector de coeficientes al inicio del sistema.

De una manera muy similar, el vector de coeficientes después del potencial ℓ -ésimo va a estar dado por:

$$B_\ell = \left(\prod_{j=1}^{\ell} S_j \right) B_0, \quad (4.8)$$

donde de nuevo, $\mathbb{P}$ es el mismo operador de ordenamiento de subíndices de la ecuación (3.8).

Ya una vez obtenidos los coeficientes de las funciones de onda para los puntos después de cada potencial, procedimos a encontrar la función de onda de la siguiente manera:

$$\Psi_\ell = B_{\ell_1} \cdot e^{ik_\ell \cdot x_\ell} + B_{\ell_2} \cdot e^{-ik_\ell \cdot x_\ell}, \quad (4.9)$$

donde k_ℓ y x_ℓ son el número de onda y la posición, que corresponden a las regiones entre los potenciales ℓ y $\ell+1$ para una cierta energía específica.

En las *figs.* 4.13, 4.14, y 4.15, hemos graficado el módulo cuadrado de la función de onda, calculada por medio de (4.9), en función de la posición que ocupa en la secuencia de Fibonacci para una generación de $m = 15$; o sea que en esta cadena de generación $m = 15$ se graficará el valor del módulo cuadrado de la función de onda en los 986 espacios intermedios entre las barreras de potencial y en los extremos del sistema.

Las energías específicas que se escogieron para las figuras mencionadas fueron: *fig. 4.13*, $E = 0.8$, *fig. 4.14*, $E = 0.243$ y *fig. 4.15*, $E = 0.2429$. Estas energías fueron escogidas como muestras típicas de los tres distintos tipos de funciones de onda que se encontraron.

La energía que le corresponde a la *fig. 4.13*, se encuentra al principio de lo que se llamó "banda continua" en la *fig. 4.2* y está marcada en la misma figura. A ésta energía le corresponde un coeficiente de transmisión de $T \approx 0.9\cdots$. Como se puede ver, esta función de onda está extendida, como en el caso de funciones de onda correspondientes a materiales periódicos.

En el caso de la *fig. 4.14* esta corresponde a una energía que se encuentra en un "valle" de una de las "sub-sub-bandas", específicamente la que aparece en la parte superior de la *fig. 4.4*, donde el "valle" está marcado con una flecha. Su coeficiente de transmisión corresponde a $T \approx 0.00\cdots$. Por su forma, se puede clasificar como una función de onda localizada al principio del sistema, decayendo muy rápidamente en los primeros 100 elementos de la secuencia.

Por último, en la *fig. 4.15*, encontramos una energía muy cercana a la de la *fig. 4.14*, que corresponde a una resonancia a un lado del "valle" mencionado en el párrafo anterior. También esta energía se encuentra marcada en la *fig. 4.4*. El coeficiente de transmisión correspondiente es de $T \approx 0.98\cdots$. A este tipo de funciones de onda es a las que se les ha llamado funciones de onda intermedias, porque aunque presentan indicios de localización, no lo están totalmente, y aparte presenta autosimilaridad que se observa en la amplificación de la función de onda, en la misma figura, entre las posiciones 250-375. Esta

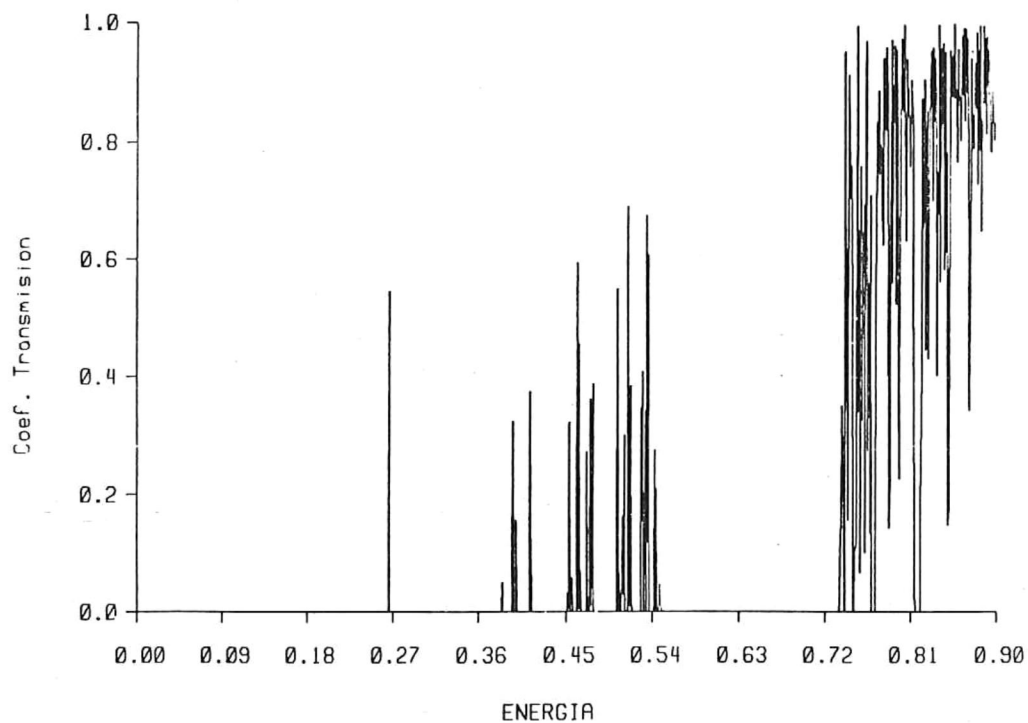
autosimilaridad apenas comienza, debido al número finito de posiciones de la muestra (987 posiciones).

Estas figuras se pueden comparar con los resultados presentados por Liu (1986)⁽¹⁸⁾, y Kohmoto et al. (1986, 1987)⁽¹²⁻¹³⁾, que se encuentran representados en la *fig.1.2* del capítulo I. Podemos ver que existe una gran correspondencia entre sus resultados obtenidos con el modelo de *enlace firme*, y los que nosotros encontramos con el modelo de potenciales rectangulares.

En las tres figuras se observa que las unidades de cada una de las figuras es distinta, esto es debido a que la función de onda no se puede normalizar. Esto ocurre debido a que se está tratando el problema de un solo electrón incidiendo al sistema, y la función de onda de un electrón libre (que es la función de onda incidente) está totalmente extendida. Esto, a su vez, debido a que el electrón tiene una energía (y por lo tanto su momento) bien definida y por el principio de incertidumbre su posición va a estar totalmente indeterminada. Por esto, sólo se puede obtener información cualitativa de los resultados referentes a las funciones de onda.

fig. 4.1. Gráficas del coeficiente de transmisión Vs. Energía para el sistema con potenciales rectangulares con generaciones de $m = 13$ y $m = 15$ (377 y 987 potenciales respectivamente). Caso con campo eléctrico nulo. Las energías están dadas en eV.

GENERACION 13 $F=0.0$



GENERACION 15 $F=0.0$

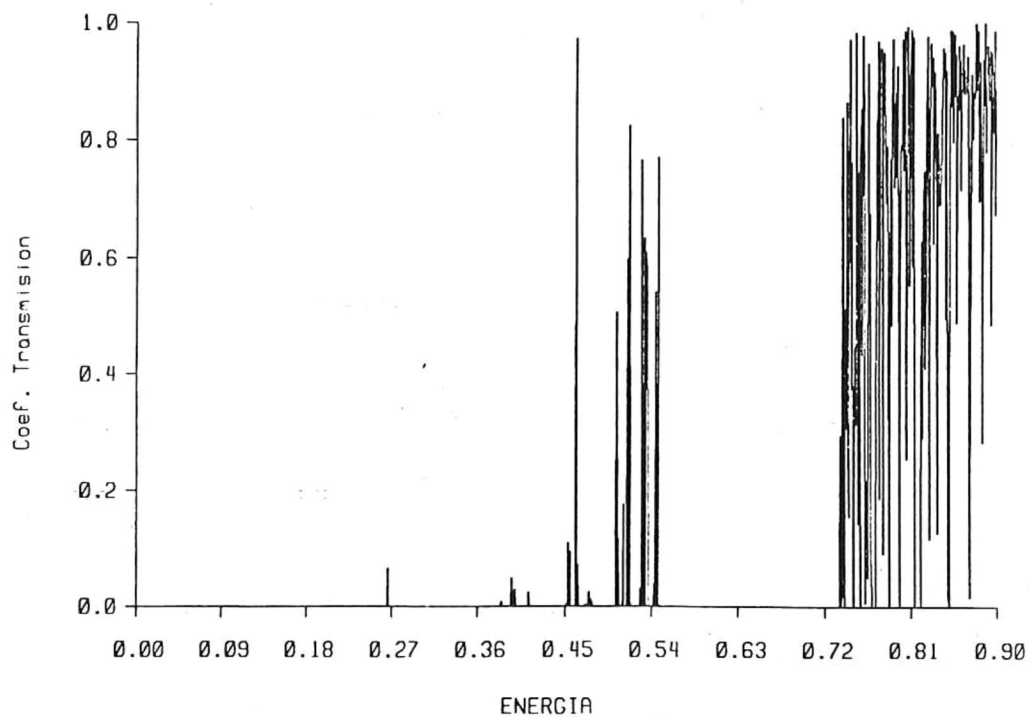


fig. 4.2. Gráficas del logaritmo natural del coeficiente de transmisión ($\ln [T]$) Vs. la energía (E), para los mismos casos que la fig. 4.1. Las marcas se explican con detalle en el texto.

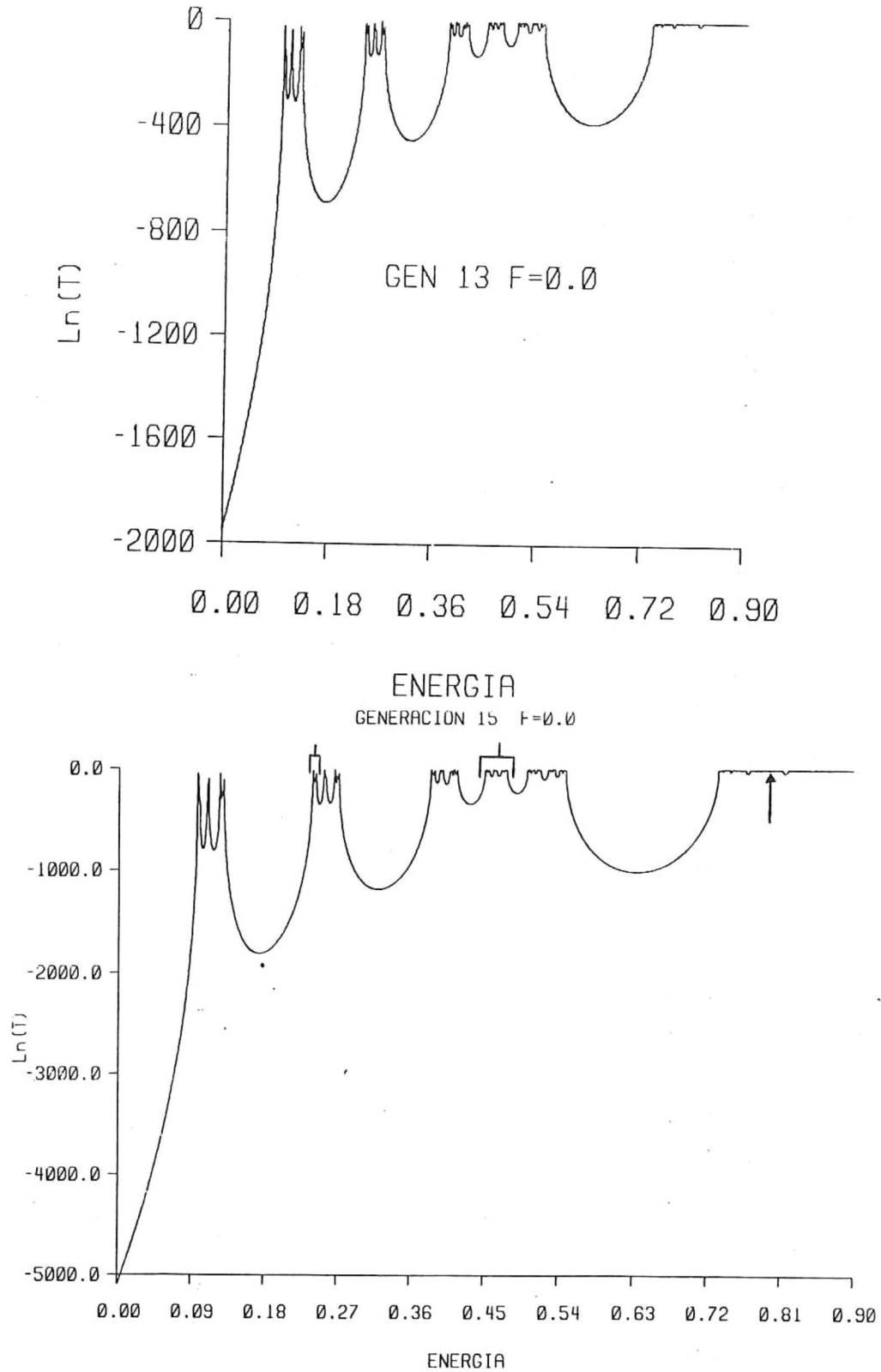


fig. 4.3. Gráficas de $\ln [T]$ Vs. E para las generaciones 13, 11, 10, y 8 (377, 144, 89, y 34 potenciales respectivamente). El campo eléctrico es nulo.

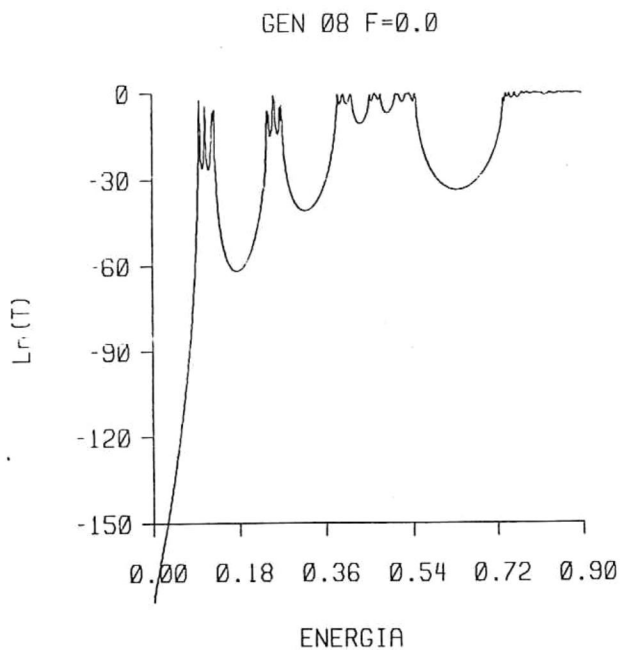
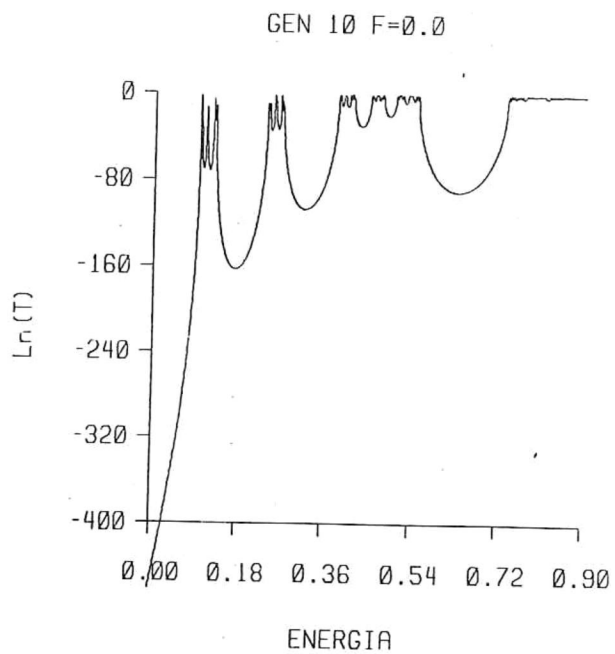
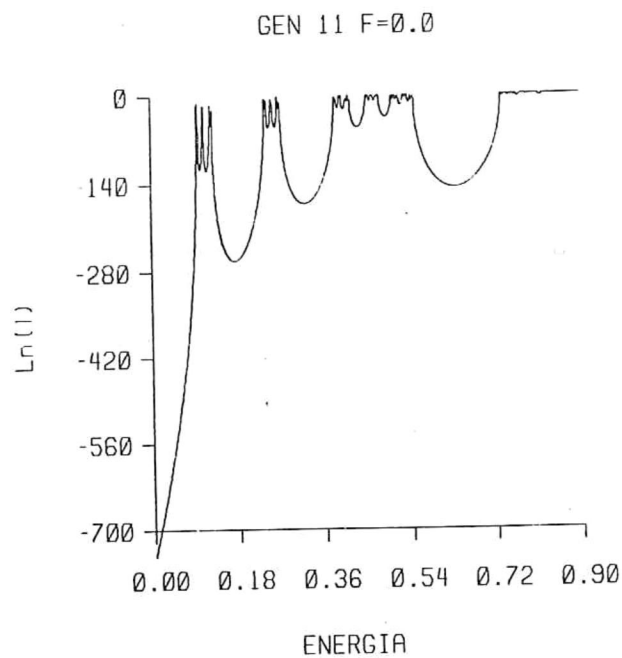
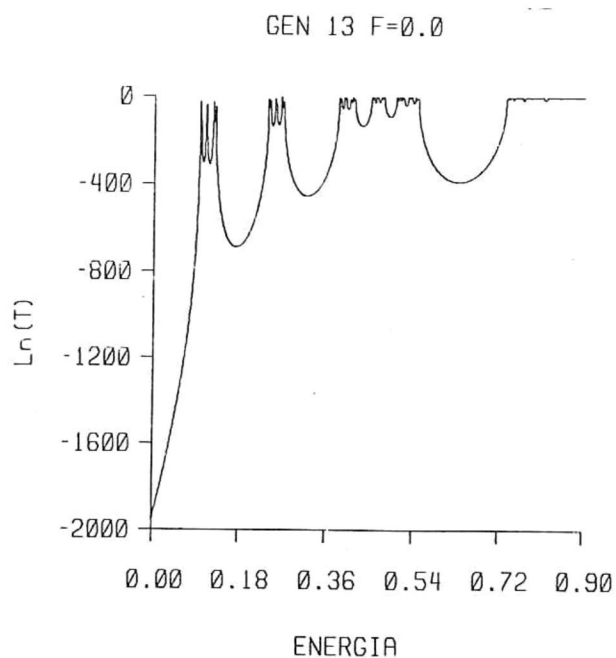


fig. 4.4. En esta figura, se muestran dos regiones amplificadas de la fig. 4.2., donde se puede observar con más detalle la autosimilaridad.

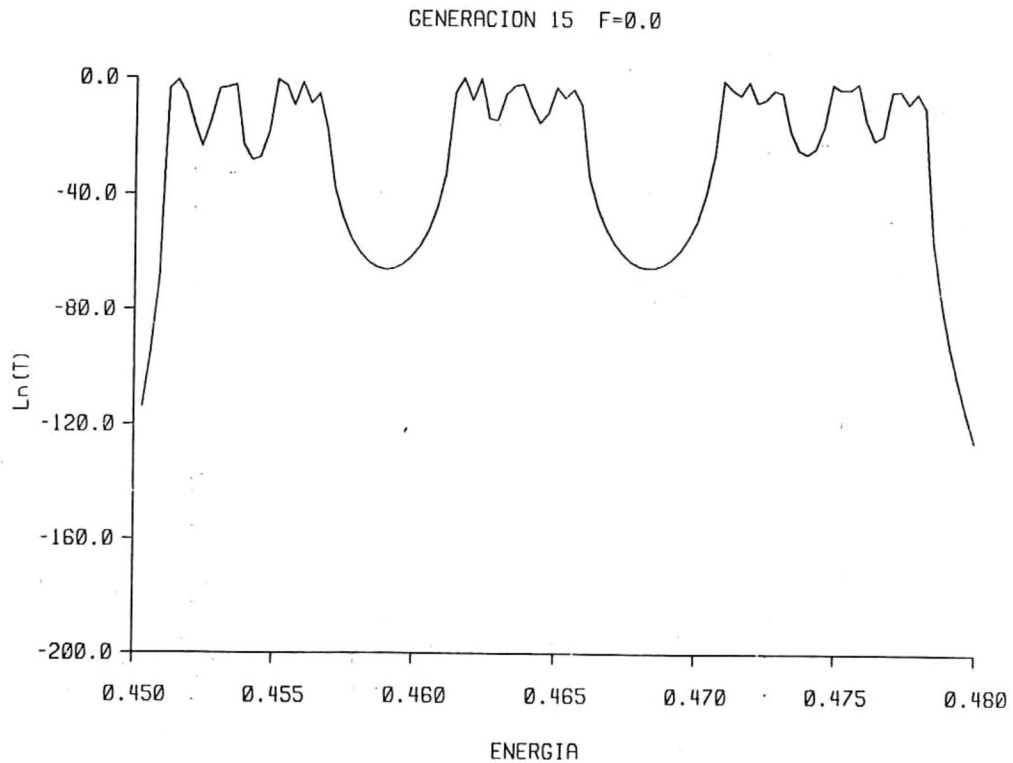
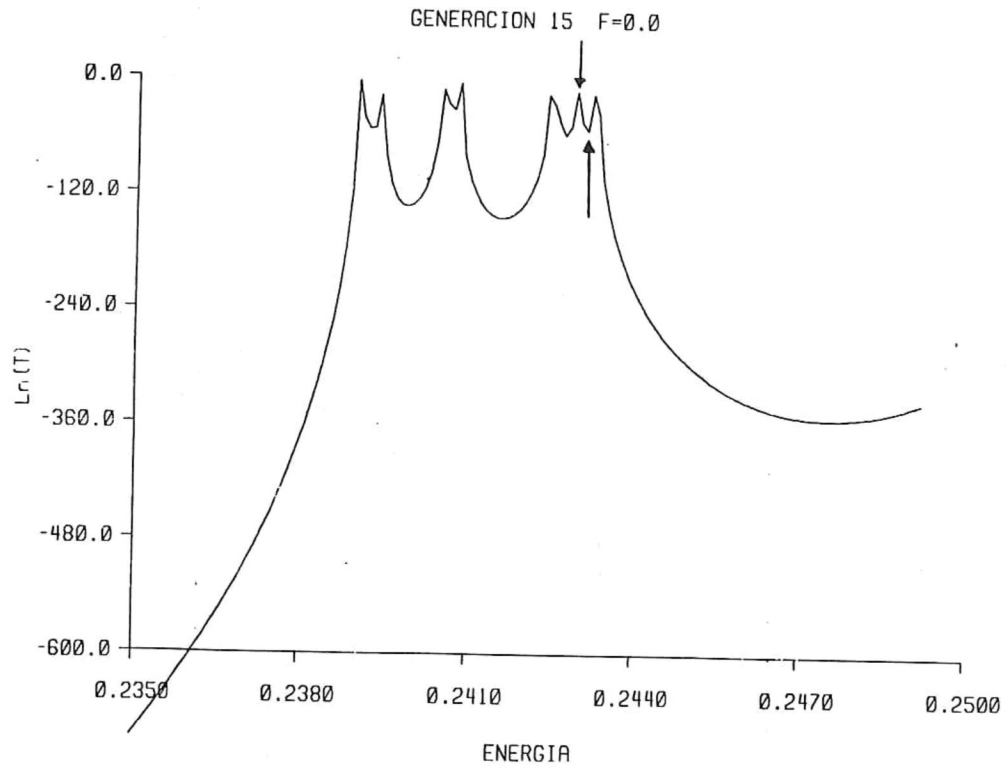


fig. 4.5. Gráfica de $\ln [T]$ Vs. E para la generación $m = 20$
(10,946 potenciales). El campo eléctrico es nulo.

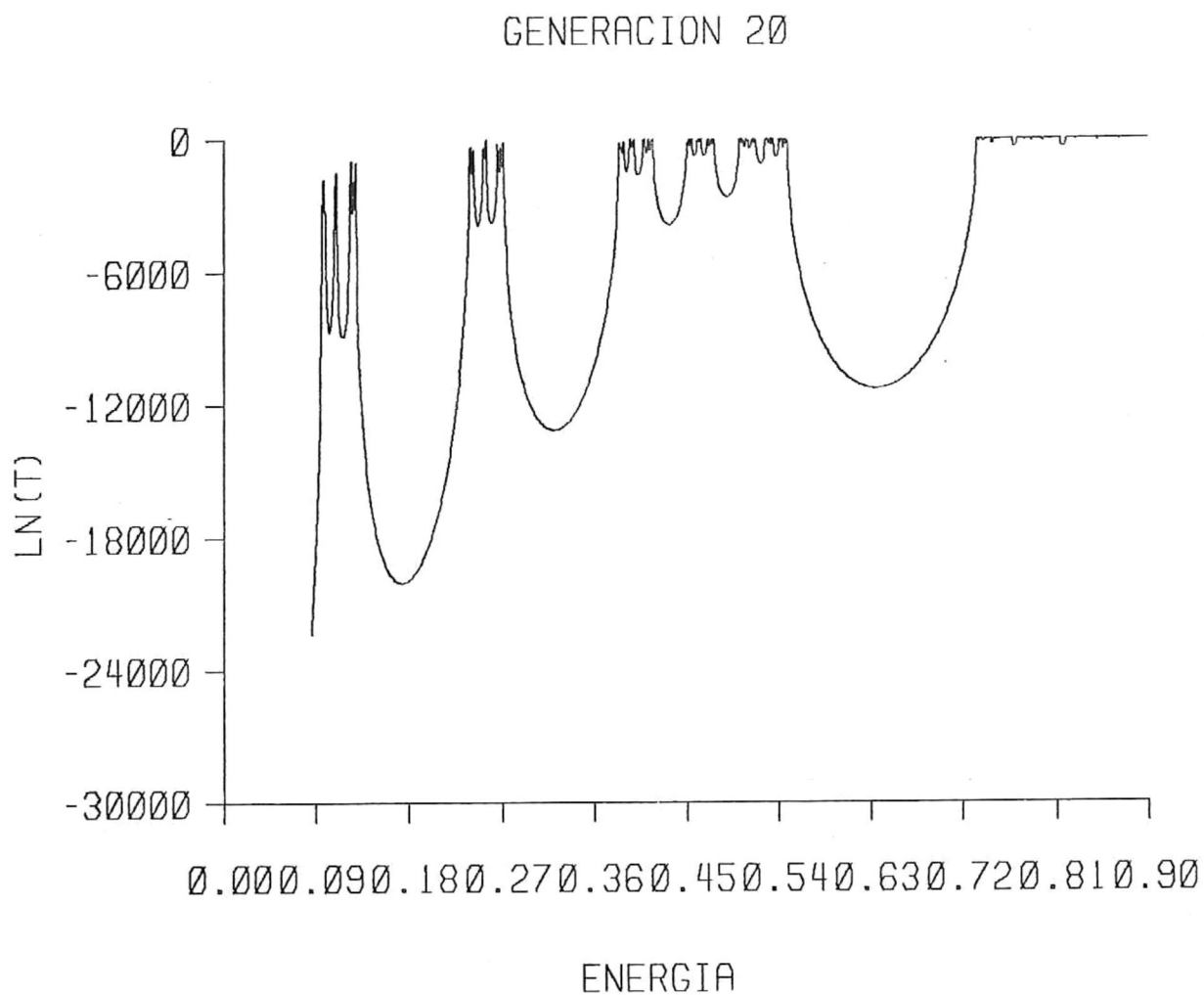


Tabla 4.1.- Muestra los valores que toma el producto FL, para las generaciones y campos eléctricos correspondientes a los espectros de $\ln|T|$ Vs. E que estan en las figuras 4.6, 4.7, 4.8, 4.9, y 4.10. Se trata de potenciales rectangulares.

m \ F	10^{-2}	10^{-3}	10^{-4}	10^{-5}	10^{-6}
1	0.38	0.038	0.0038	0.00038	0.000038
2	0.86	0.086	0.0086	0.00086	0.000086
3	1.34	0.134	0.0134	0.00134	0.000134
4	2.41	0.241	0.0241	0.00241	0.000241
5	3.85	0.385	0.0385	0.00385	0.000385
6	6.47	0.647	0.0647	0.00647	0.000647
7	10.42	1.042	0.1042	0.01042	0.001042
8	17.10	1.710	0.1710	0.01710	0.001710
9	27.62	2.762	0.2762	0.02762	0.002762
10	44.93	4.493	0.4493	0.04493	0.004493
11	72.65	7.265	0.7265	0.07265	0.007265
12	117.8	11.78	1.178	0.1178	0.01178
13	190.5	19.05	1.905	0.1905	0.01905
14	308.5	30.85	3.085	0.3085	0.03085
15	499.2	49.92	4.992	0.4992	0.04992

fig. 4.6. Gráficas de $\ln [T]$ Vs. E para distintas generaciones con un campo eléctrico aplicado de $F = 10^{-6}$. En estas gráficas se encuentra marcado el parámetro FL en el eje de las energías.

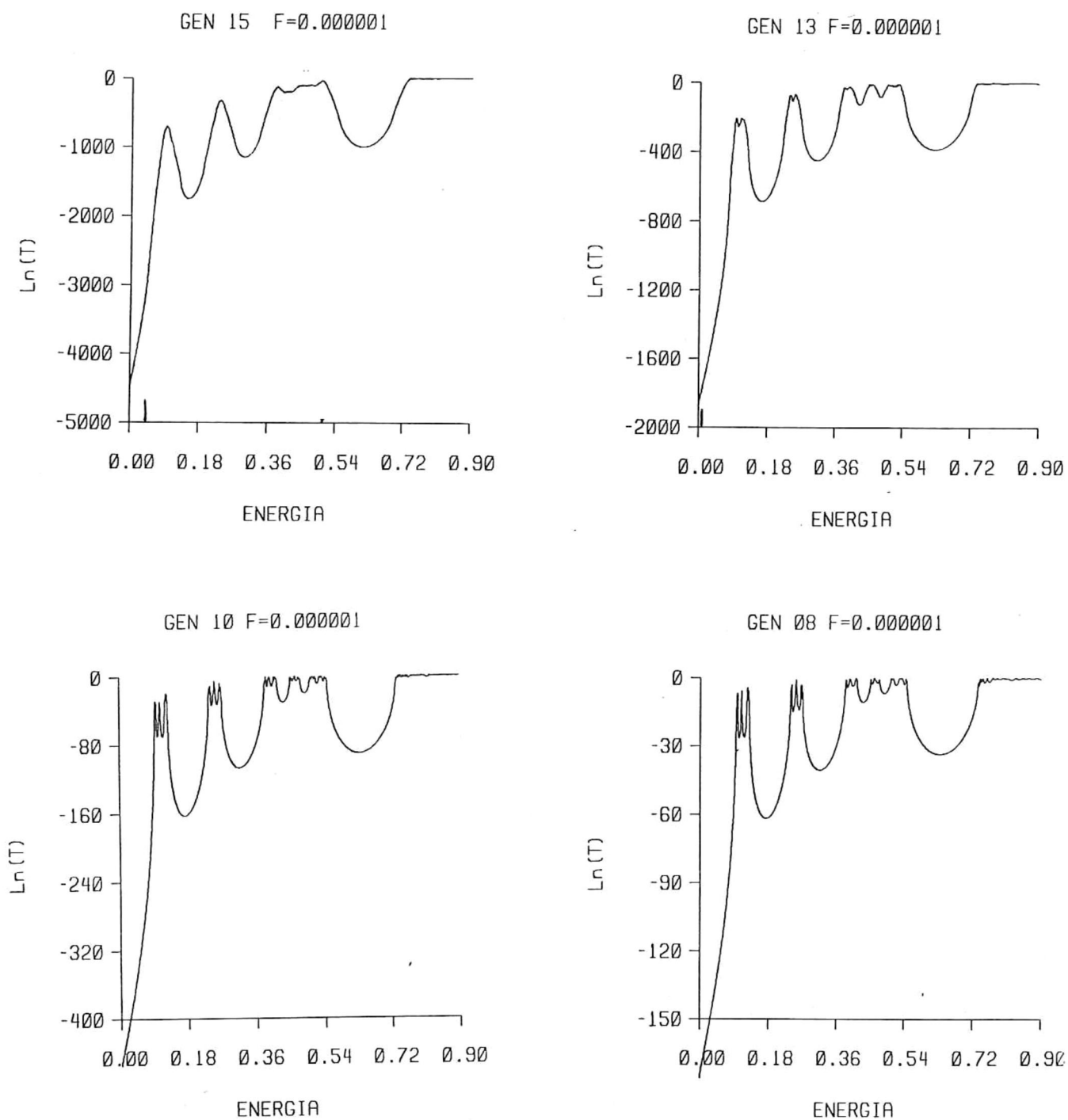


fig. 4.7. Gráficas de $\ln [T]$ Vs. E para distintas generaciones con un campo eléctrico aplicado de $F = 10^{-5}$. En estas gráficas se encuentra marcado el parámetro FL en el eje de las energías.

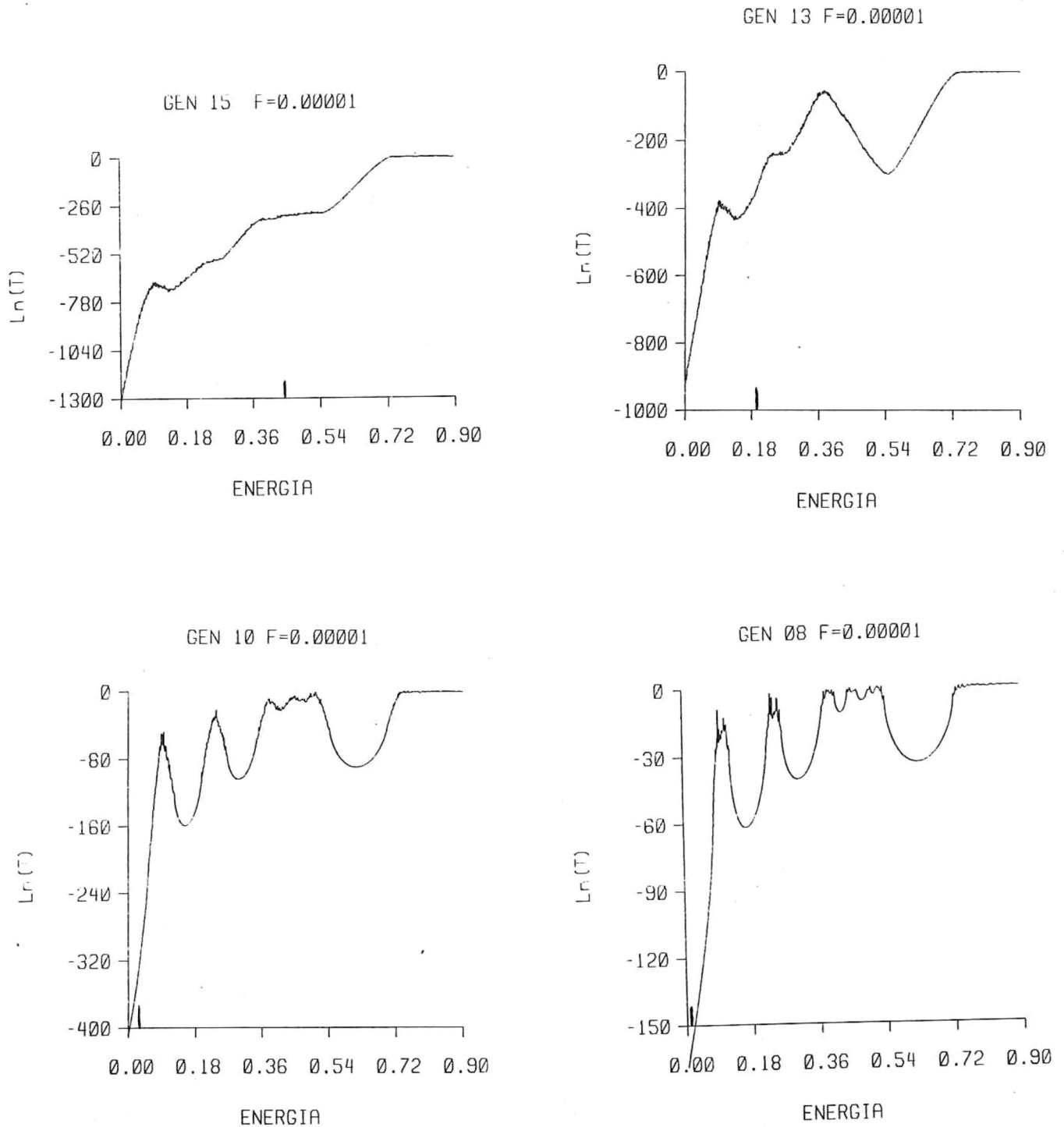


fig. 4.8. Gráficas de $\ln [T]$ Vs. E para distintas generaciones con un campo eléctrico aplicado de $F = 10^{-4}$. En estas gráficas se encuentra marcado el parámetro FL en el eje de las energías.

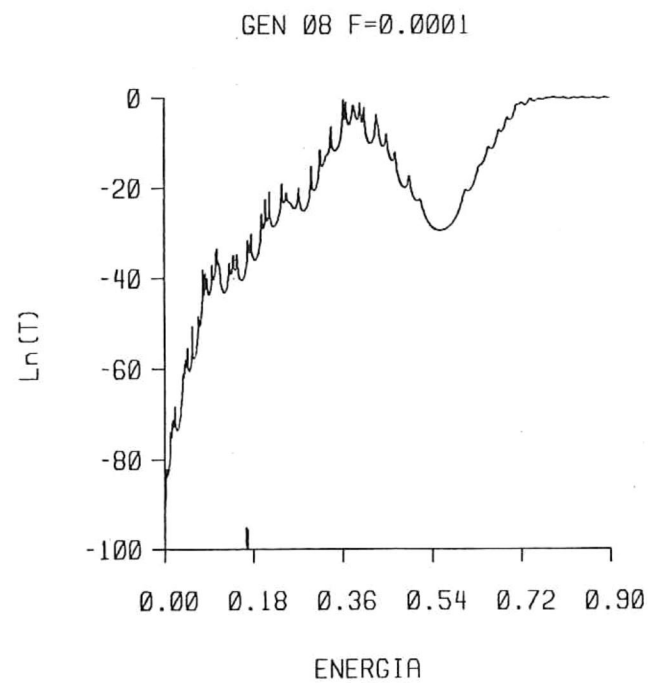
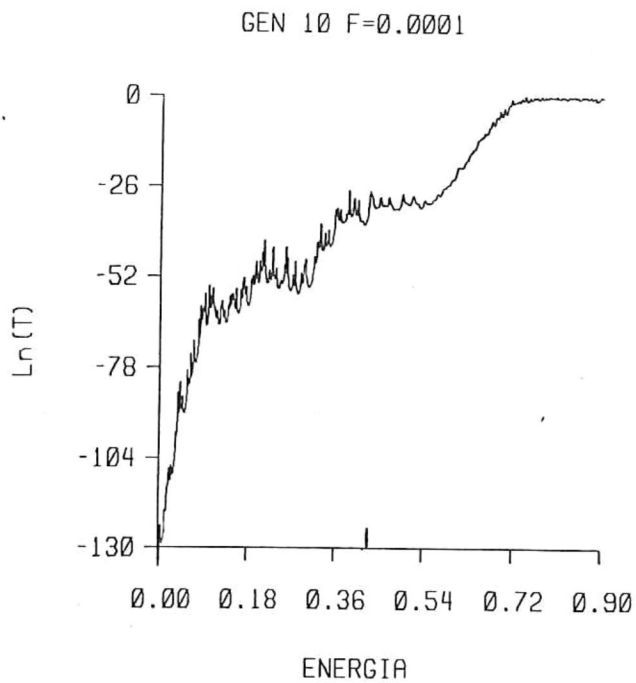
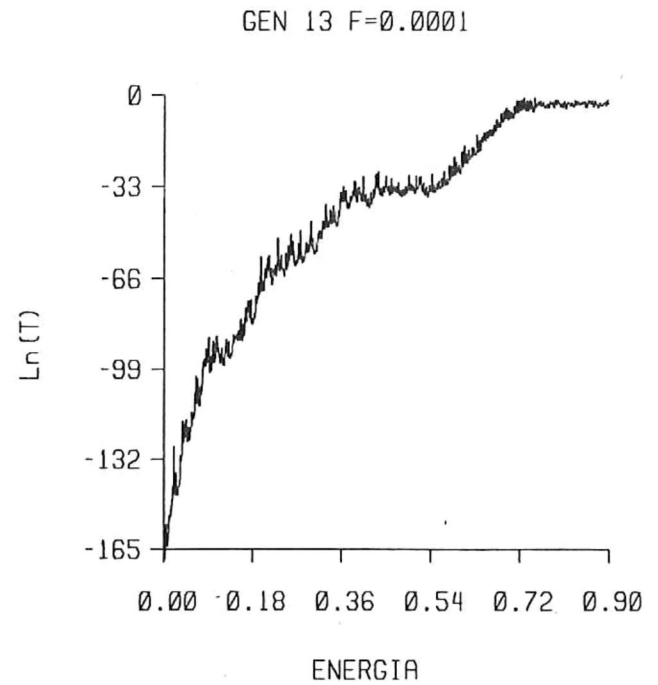
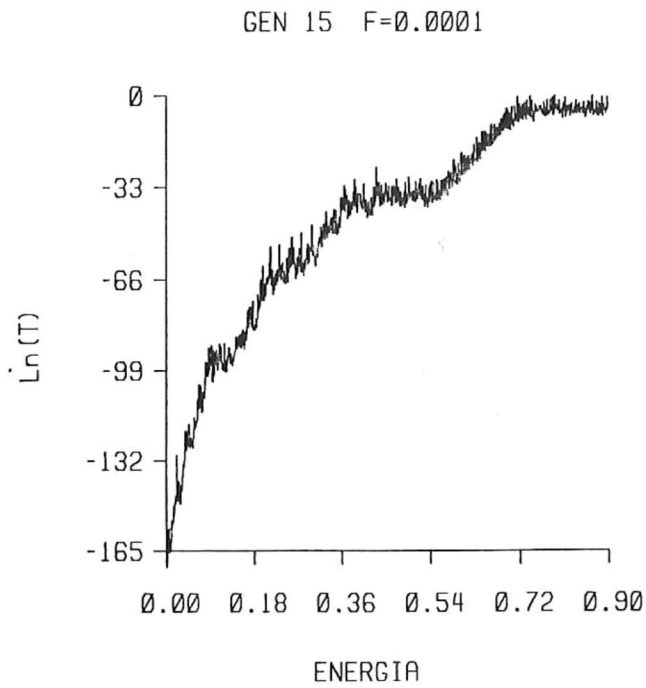


fig. 4.9. Gráficas de $\ln [T]$ Vs. E para distintas generaciones con un campo eléctrico aplicado de $F = 10^{-3}$. En estas gráficas se encuentra marcado el parámetro FL en el eje de las energías.

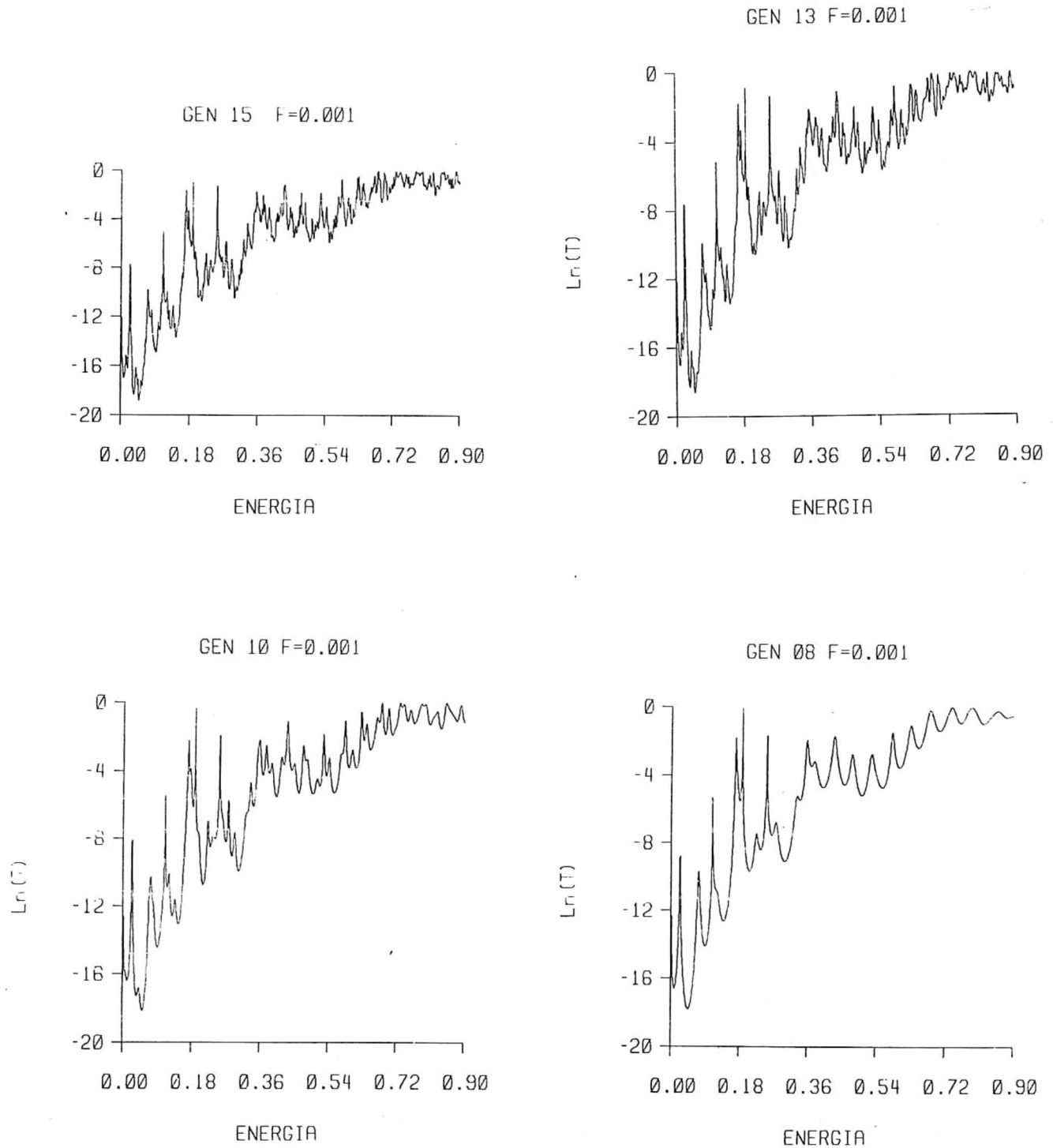


fig. 4.10. Gráficas de [T] Vs. E para distintas generaciones con un campo eléctrico aplicado de $F = 10^{-2}$. En estas gráficas se encuentra marcado el parámetro FL en el eje de las energías.

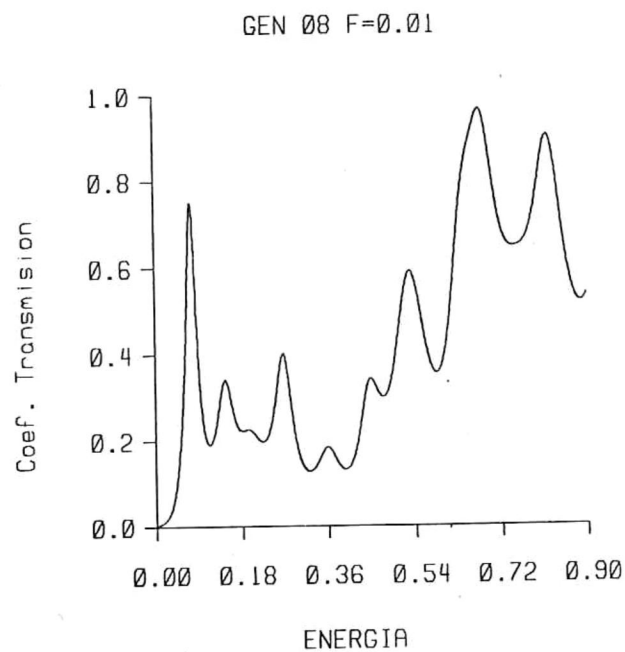
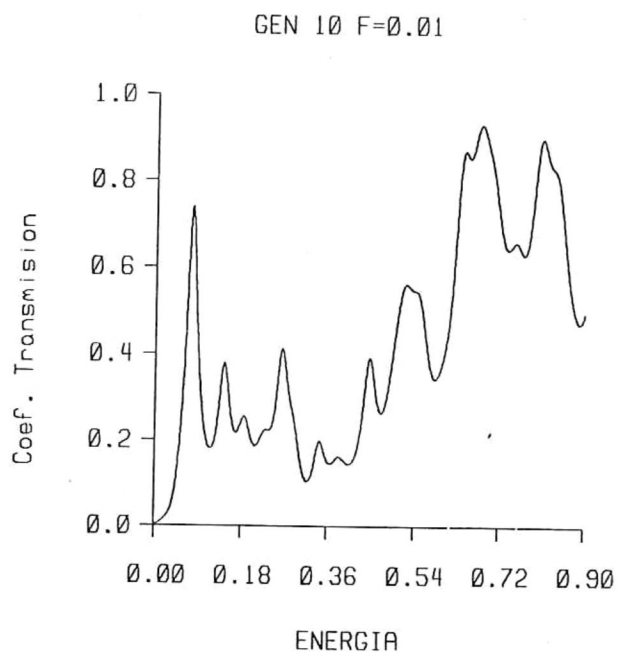
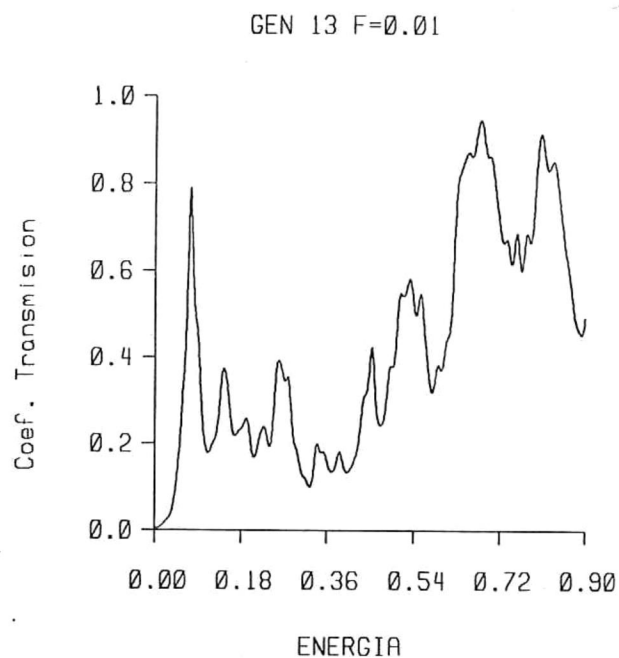
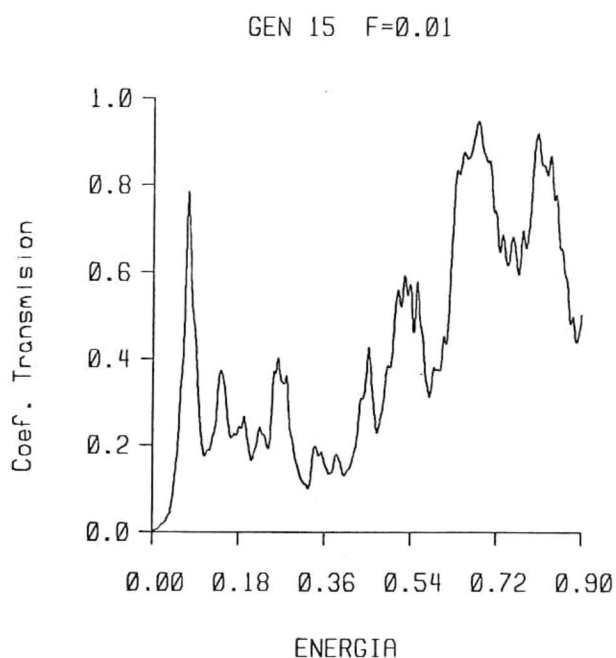


fig. 4.11. Gráficas de $\ln [T]$ Vs. E para distintas generaciones con campo eléctrico nulo. Estas gráficas corresponden al caso de tener potenciales tipo delta de Dirac.

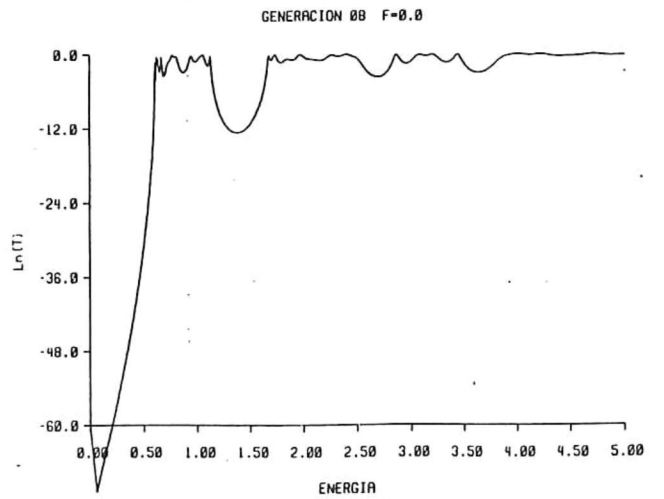
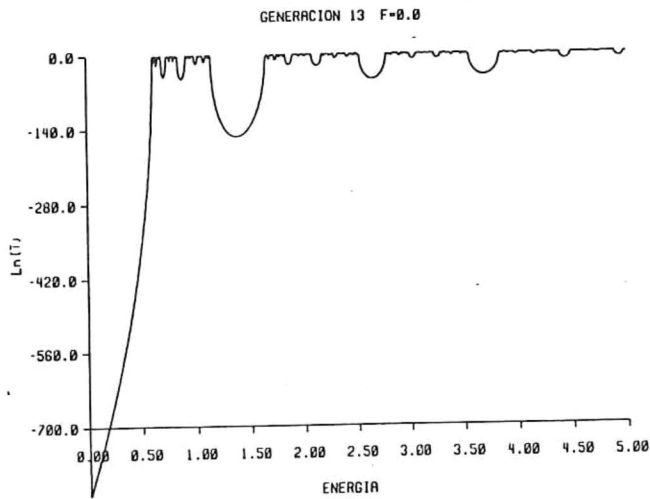
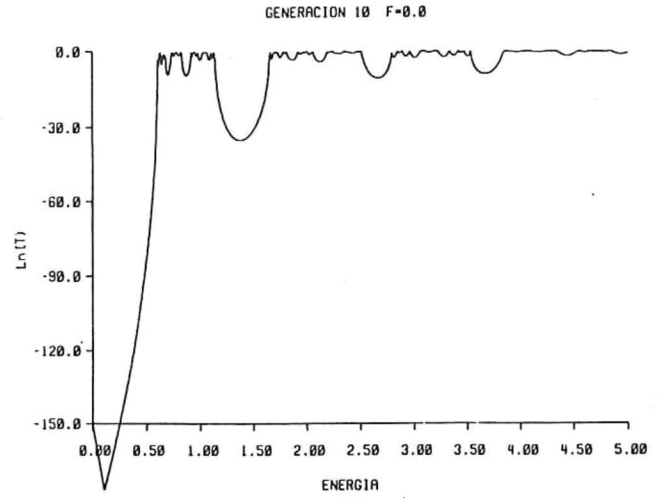
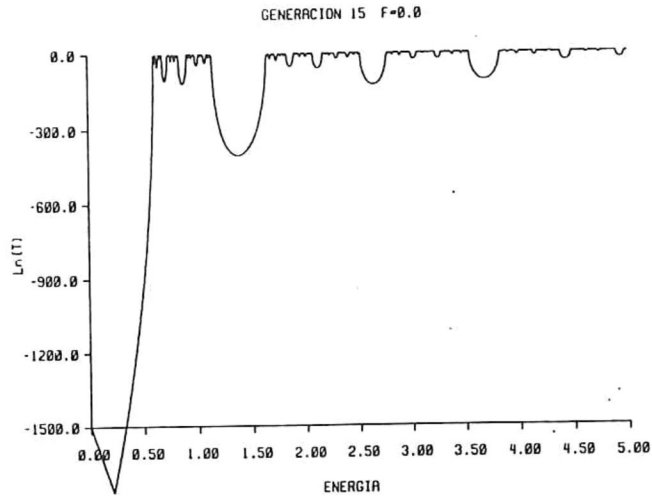


Tabla 4.2.- Muestra los valores que toma el producto FL, para las generaciones y campos eléctricos correspondientes a los espectros de $\ln|T|$ Vs. E que estan en la figura 4.12. Se trata de potenciales tipo delta de Dirac.

m	F	
	10^{-3}	10^{-4}
1	0.0015	0.0001
2	0.003	0.0003
3	0.004	0.0004
4	0.007	0.0007
5	0.011	0.0011
6	0.018	0.0018
7	0.029	0.0029
8	0.047	0.0047
9	0.076	0.0076
10	0.123	0.0123
11	0.199	0.0199
12	0.322	0.0322
13	0.521	0.0521
14	0.843	0.0843
15	1.364	0.1364

fig. 4.12. Gráficas de $\ln [T]$ Vs. E para distintas generaciones y campos eléctricos. Corresponden a tener potenciales tipo delta de Dirac. Como en las figuras 6 a la 10, las marcas en el eje de la energía corresponden al parámetro FL

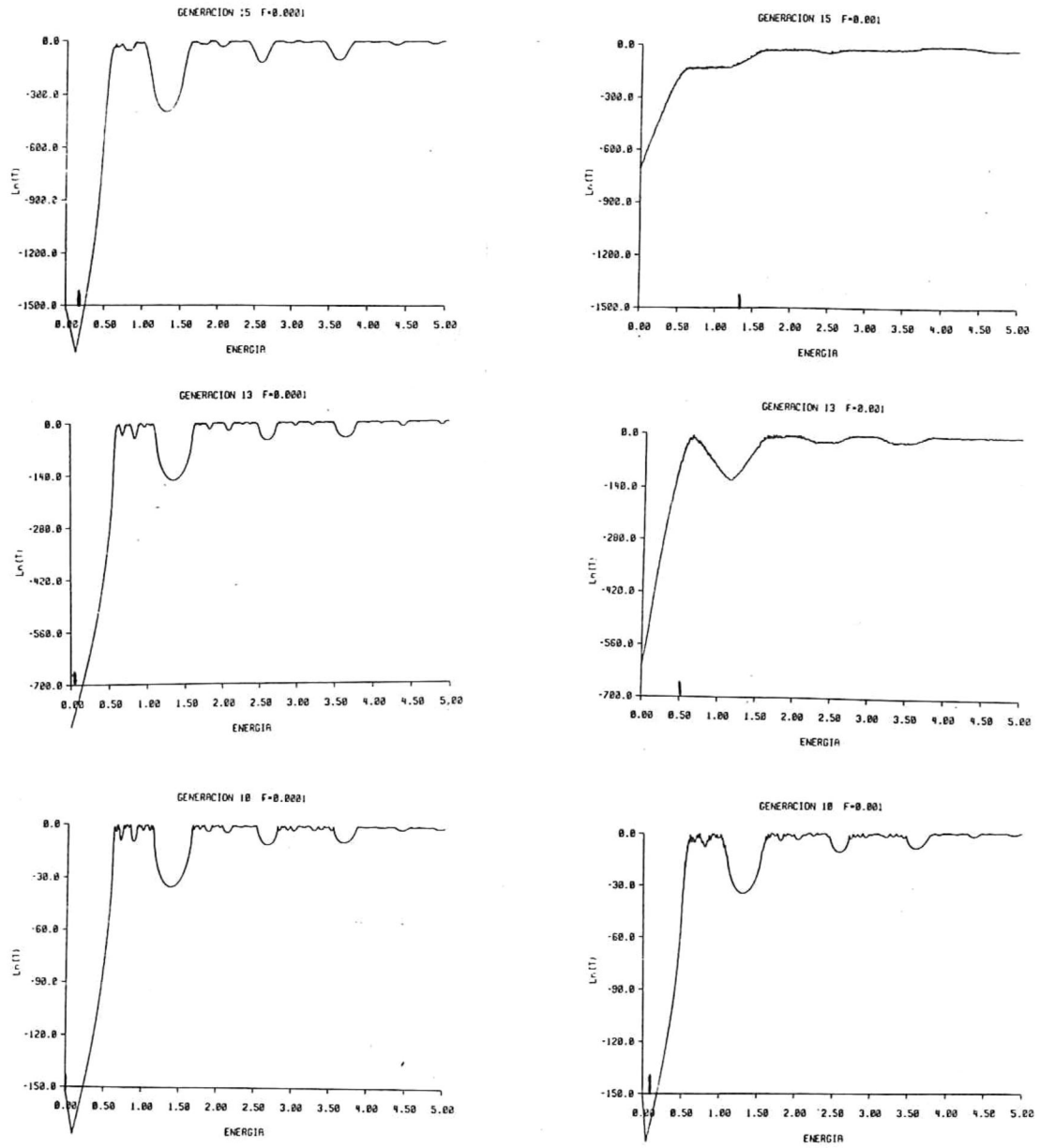


fig. 4.13. Función de onda para la energía $E = 0.8$ para el sistema con generación $m = 15$ (987 potenciales), sin campo eléctrico y utilizando potenciales rectangulares. Es una función de onda extendida.

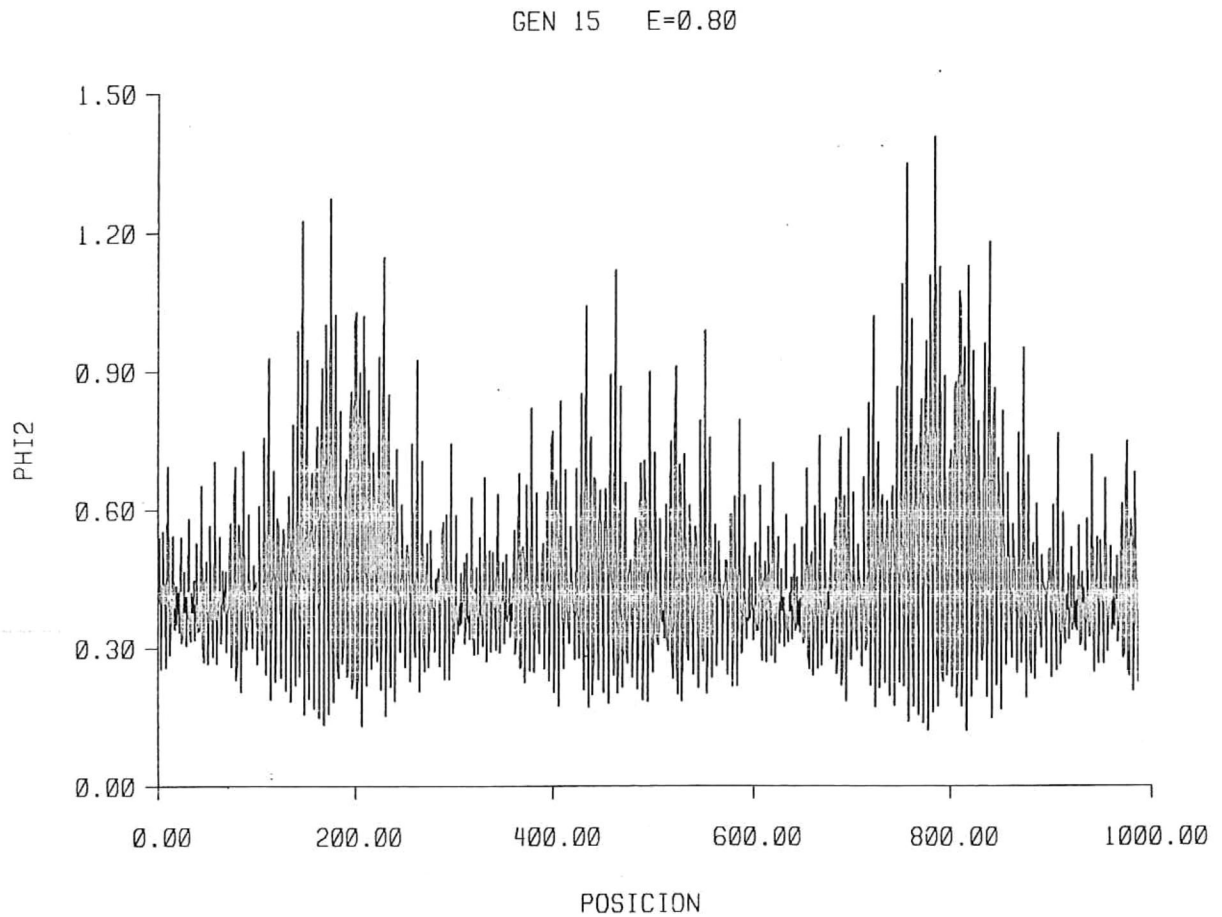


fig. 4.14. Función de onda para la energía $E = 0.243$ para el sistema con generación $m = 15$ (987 potenciales), sin campo eléctrico y utilizando potenciales rectangulares. Es una función de onda localizada.

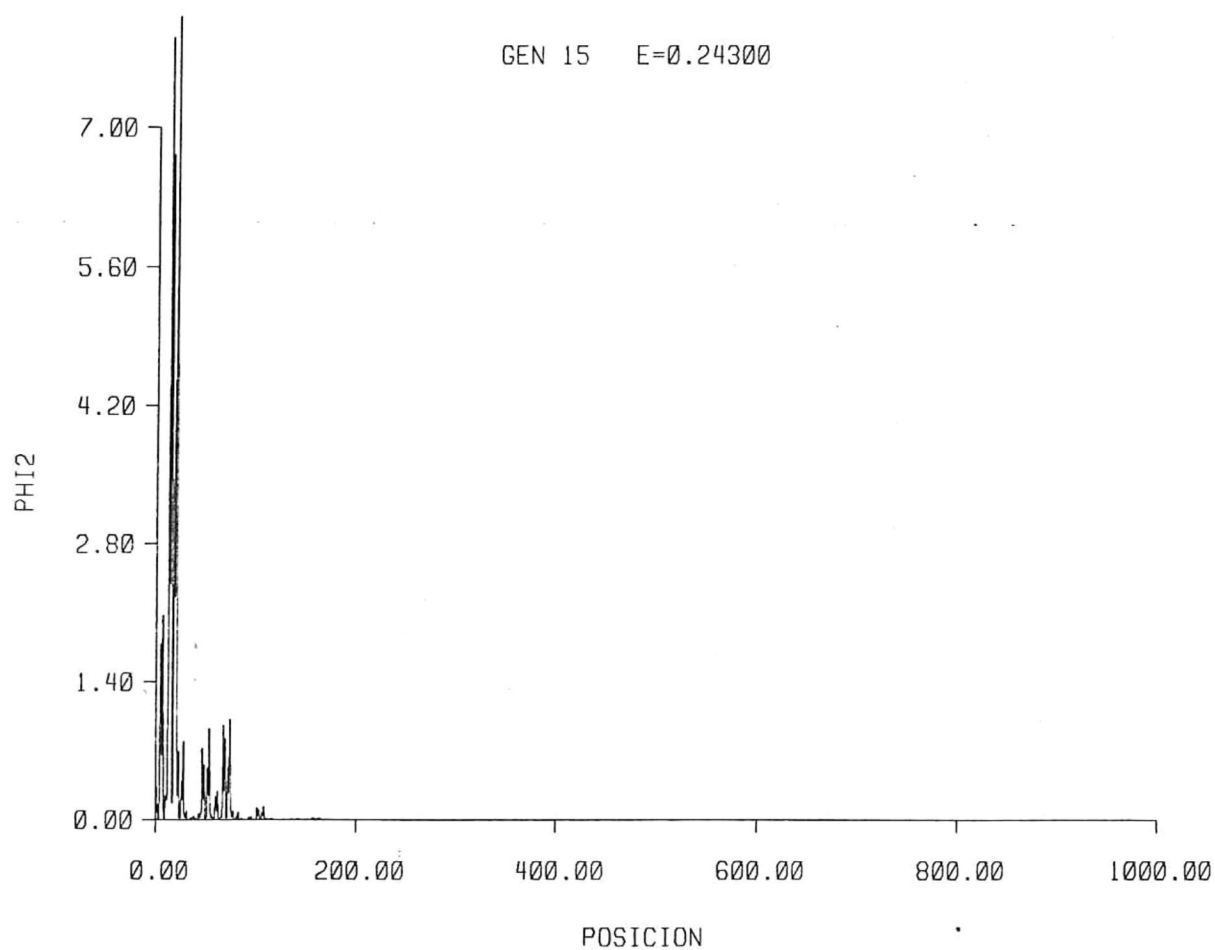
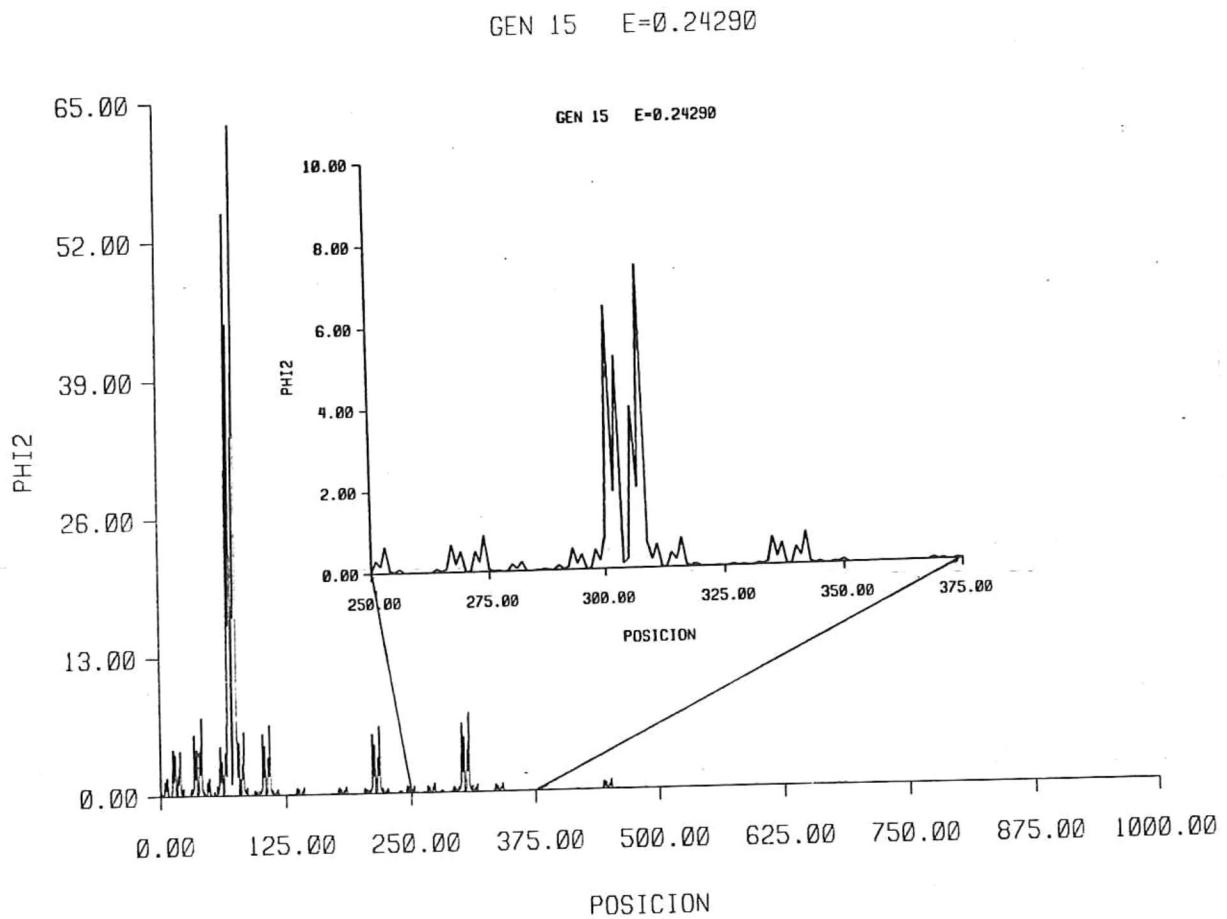


fig. 4.15. Función de onda para la energía $E = 0.2429$ para el sistema con generación $m = 15$ (987 potenciales), sin campo eléctrico y utilizando potenciales rectangulares. Es una función de onda intermedia que muestra estructura autosimilar.



CAPITULO V.- CONCLUSIONES

"Es mejor debatir una cuestión sin llegar a
concluirla, que llegar a una conclusión sin
debatirla."

Joseph Joubert, (1754-1824)

A continuación, presentamos a modo de conclusión, los resultados más importantes ya discutidos en el capítulo anterior. Y para finalizar señalaremos algunos problemas abiertos, que quedan por resolverse.

El espectro de $\ln|T|$ Vs. E tiene una estructura bien definida y autosimilar. Esta estructura se la atribuimos a la secuencia de Fibonacci en las posiciones de los potenciales. La estructura autosimilar consiste de: tres "bandas" que se dividen a su vez en otras tres y así sucesivamente, y de una "banda continua" que también presenta las mismas características. Se observa también que el "ancho" de las "bandas" sigue cierto orden.

La forma de la estructura "converge" muy rápidamente, observándose que en generaciones de $m \geq 8$ se tendrá ya bien definida la autosimilaridad. Este resultado coincide con lo reportado por Karmakar et al. (1989)⁽¹¹⁾, Kohomoto et al. (1986, 1987)⁽¹²⁻¹³⁾, y por Nori & Rodriguez (1986)⁽¹⁹⁾.

Planteamos que en el límite de una secuencia de Fibonacci infinita (ie. la generación $m \rightarrow \infty$), la estructura del espectro $\ln|T|$ Vs. E será fractal.

La estructura autosimilar del espectro $\ln|T|$ Vs. E , depende tanto de la intensidad del campo eléctrico, como de la longitud total del sistema. La pérdida de la estructura

autosimilar se puede caracterizar por medio del parametro $|FL/E|$, de manera que si es menor que la unidad, la estructura autosimilar se observará, mientras que si este parametro es mayor, o cercano a la unidad la estructura tenderá a desaparecer.

Los resultados antes expuestos incluyen tanto a los potenciales rectangulares, como a los potenciales tipo delta de Dirac. Pero los resultados que a continuación se exponen acerca de las funciones de onda solo se refieren al problema con potenciales rectangulares.

En cuanto a las funciones de onda, se encontraron tres distintos tipos característicos: funciones de onda extendidas, funciones de onda localizadas y funciones de onda intermedias, estas últimas mostrando indicios de autosimilaridad. Esto concuerda con lo reportado en la literatura acerca de la forma de las funciones de onda en estos sistemas.

En relación a los problemas abiertos, se pueden mencionar los siguientes:

- * Encontrar las longitudes de localización para los distintos tipos de funciones de onda.

- * El problema de encontrar la relación de disminución del coeficiente de transmisión en función de la longitud del sistema y del campo eléctrico aplicado.

- * Muy relacionado con los puntos anteriores, sería encontrar el comportamiento de las funciones de onda en función del campo eléctrico y de la longitud del sistema, incluyendo su

caracterización por medio de la longitud de localización.

- * Estudiar los tiempos característicos asociados con las resonancias.

- * Encontrar la dimensión fractal del espectro de $\ln|T|$ Vs. E para el caso de $m \rightarrow \infty$.

- * Encontrar un "coeficiente" que nos permita caracterizar la autosimilaridad de una manera más formal (algo así como un coeficiente de reescalamiento).

- * Analizar el problema equivalente en términos de funciones delta, para investigar la posibilidad de pasar a la formulación del modelo de *enlace firme* y comparar directamente con los resultados reportados para éste modelo⁽²¹⁾.

A P E N D I C E 1

En este apéndice, primero encontraremos una forma simbólica de la matriz de transferencia S en función de las amplitudes complejas de transmisión (τ) y de reflexión (r). Luego encontraremos la manera de expresar el coeficiente de reflexión (R) y el de transmisión (T) en función de los elementos de la matriz de transferencia S .

Para comenzar, supongamos que la función de onda que incide al potencial tiene amplitud uno, por otro lado sabemos que la amplitud compleja de transmisión es τ y la de reflexión es r . Si utilizamos la misma notación y las mismas restricciones que en el capítulo III tendremos que los vectores de las amplitudes inicial (B_i) y final (B_f) van a estar dados por:

$$B_i = \begin{pmatrix} 1 \\ r \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad B_f = \begin{pmatrix} \tau \\ 0 \end{pmatrix} \quad . \quad (A.1)$$

Ahora estos vectores cumplirán con la ecuación que nos permitía pasar a través de un potencial arbitrario (3.25) que escrita ahora con estos vectores quedaría como:

$$B_f = S B_i \quad . \quad (A.2)$$

que nos dá el siguiente sistema de ecuaciones:

$$\left. \begin{aligned} \tau &= S_{1,1} + S_{1,2} r \\ 0 &= S_{2,1} + S_{2,2} r \end{aligned} \right\} \quad , \quad (A.3)$$

que se puede resolver de la siguiente manera: despejando r de la ecuación inferior de (A.3) obtenemos:

$$r = - \frac{S_{2,1}}{S_{2,2}} = - \frac{S_{1,2}^*}{S_{1,1}^*} \quad , \quad (A.4)$$

donde hemos hecho uso de la propiedad P2 (3.6) de las matrices de transferencia. Si ahora sustituimos (A.4) en

la ecuación superior de (A.3) obtendremos

$$\tau = S_{1,1} - \frac{S_{1,2} S_{1,2}^*}{S_{1,1}^*} = \frac{S_{1,1} S_{1,1}^* - S_{1,2} S_{1,2}^*}{S_{1,1}^*}, \quad (A.5)$$

en esta ecuación podemos ver que el numerador no es otra cosa que el determinante de la matriz S y si de nuevo hacemos uso de la propiedad P2 (3.6) obtendremos que:

$$\tau = \frac{k_1}{k_f} \frac{1}{S_{1,1}^*} = \frac{k_1}{k_f} \frac{1}{S_{2,2}}. \quad (A.6)$$

Si ahora despejamos $S_{1,1}^*$ de (A.6) y sustituimos este resultado en (A.4) obtendremos:

$$S_{1,2}^* = - \frac{k_1}{k_f} \frac{r}{\tau}. \quad (A.7)$$

De donde obtenemos que la matriz de transferencia S va a estar dada por:

$$S = \begin{pmatrix} \frac{k_1^*}{k_f^*} \frac{1}{\tau^*} & - \frac{k_1^*}{k_f^*} \frac{r^*}{\tau^*} \\ - \frac{k_1}{k_f} \frac{r}{\tau} & \frac{k_1}{k_f} \frac{1}{\tau} \end{pmatrix}. \quad (A.8)$$

Para obtener los coeficientes de transmisión y de reflexión hacemos uso de nuevo de la propiedad P2 (3.6) de la matriz acerca del determinante y obtenemos que:

$$1 - \|r\|^2 = \frac{k_f}{k_1} \|\tau\|^2, \quad (A.9)$$

y como sabemos que por el principio de conservación de la densidad de probabilidad se debe cumplir que $R + T = 1$ donde R y T son los coeficientes de reflexión y transmisión respectivamente, podemos identificarlos con la ecuación (A.9) y obtener finalmente:

$$T = \frac{k_f}{k_1} \|\tau\|^2 \quad \text{y} \quad R = \|r\|^2. \quad (A.10)$$

B I B L I O G R A F I A

- [1] Andereck B.S., y Abrahams E., Numerical studies of inverse localisation length in one dimension. Journal of Physics C: Solid State Physics, 13, L383. 1980.
- [2] Anderson P.W., Physical Review, 109, 1492. 1958. Physical Review B, 23, 4528. 1981.
- [3] Bentosela F., Grecchi V., y Zironi F., Approximate ladder of resonances in a semi-infinite crystal. Journal of Physics C: Solid State Physics, 15, 7119-7131. 1982.
- [4] Borland R.E., y Bird N.F., Proc. Phys. Soc., 83, 23. 1964.
- [5] Chang L.L., Esaki L., y Tsu R., Resonant tunneling in semiconductor double barriers. Applied Physics Letters, 24, 12, 593-595. Junio 1974.
- [6] Cota E., José J.V., y Azbel M.Ya., Delocalization transition in random electrified chains with arbitrary potentials. Physical Review B, 33, 10, 6157-6165. Noviembre 1985.
- [7] Cota E., José J.V., y Monsiváis G., Stark ladder resonances in ordered and disordered electrified chains. Physical Review B, 35, 17, 8929-8944. Junio 1987-I.
- [8] Das Sarma S., y Xie X.C., Conductance fluctuations in one-dimensional quasicrystals. Physical Review B, 37, 3, 10097-1102. Enero 1988-II.
- [9] Erdos P., y Herndon R.C., Theories of electrons in one-dimensional disordered systems. Advances in Physics, 31, 2, 65-163. 1982.
- [10] Fujita M., y Machida K., Electrons in one-dimensional quasi-lattices. Solid State Communications, 59, 2, 61-65. 1986.

- [11] Karmakar S.N., Chakrabarti A., Moitra R.K., The electronic density of states of an infinite one-dimensional Fibonacci chain. Journal of Physics: Condensed Matter, 1, 1423- 1428. 1989.
- [12] Kohmoto M., y Banavar J.R., Quasiperiodic lattice: Electronic properties, phonon properties and diffusion. Physical Review B, 34, 2, 563-566. Julio 1986.
- [13] Kohmoto M., Sutherland B., y Tang C., Critical wave functions and a Cantor-set spectrum of a one-dimensional quasicrystal model. Physical Review B, 35, 3, 1020-1033. Enero 1987-II.
- [14] Mendoza J.G., La microelectrónica óptica. Avance y Perspectiva, 8, 37, 15-29. Enero-marzo 1989.
- [15] Merlin R., Bajema K., Clarke R., Juang F.-Y., y Bhattacharya P.K., Quasiperiodic GaAs-AlAs heterostructures. Physical Review Letters, 55, 7, 1768-1770. Octubre 1985.
- [16] Landauer R., Phil. Mag., 21, 863. 1970.
- [17] Levine D., y Steinhardt P.J., Physical Review Letters, 53, 2477. 1984.
- [18] Liu Y., Localization of one-dimensional quasiperiodic systems. Preprint. Department of Physics and Measurement Technology. University of Linköping. S-581 83 Linköping Sweden.
- [19] Nori F., Rodriguez J.P., Acoustic and electronic properties of one-dimensional quasicrystals. Physical Review B, 34, 4, 2207-2211. Agosto 1986.
- [20] Ping Lu J., Odagaki T., y Birman J.L., Properties of one-dimensional quasilattices. Physical Review B, 33, 7, 4809-4817. Abril 1986.
- [21] Sokoloff J.B., Unusual band structure, wave functions and electrical conductance in crystals with incommensurate periodic potentials. Physics Reports, 126, 4, 189-244. 1985.

- [22] Schetman D., Blech I., Gratias D., y Cahn J.W., Physical Review Letters, 53, 1951. 1984.
- [23] Sollner T.C.L.G., Goodhue W.D., Tannenwald P.E., Parker C.D., y Peck D.D., Resonant tunneling through quantum wells at frequencies up to 25 THz. Applied Physics Letters, 43, 6, 588-590. Septiembre 1983.
- [24] Todd J., Merlin R., Clarke R., Mohanty K.M., y Axe J.D., Synchrotron X-Ray study of a Fibonacci Superlattice. Physical Review Letters, 57, 9. Septiembre 1983.
- [25] Tsu R., y Esaki L., Tunneling in a finite superlattice. Applied Physics Letters, 22, 11. Junio 1973.
- [26] Wang C., Barrio R.A., A new aproach to electrons in large Fibonacci chains. Preprint. Instituto de Investigaciones en Materiales, UNAM. Ap. Postal 70-360, 04510, México D.F. México.
- [27] Zia R.K.P., y Dallas W.J., Journal of Physics A, 18, L341. 1985.
- [28] Eisberg R., y Resnick R., "Física Cuantica". Ed. Limusa. México D.F. 1983.
- [29] Heinlen R., "The cat who walks through walls". Berkley Books, New York. 1986.
- [30] Heinlen R., "To sail beyond the sunset". Berkley Books, New York. 1987.
- [31] Matthews J.W., "Epitaxial growth, Part A and Part B". Academic Press, New York. 1975.
- [32] Morgenstern O., "Theory of Games". Elsevier, New York. 1966.
- [33] Nature, "News Search and Discovery. Forbidden fivefold symetry may indicate quasicrystal phase". 1984.

- [34] Rojas F., "Estudio comparativo de propagación de ondas electromagnéticas en medios y propagación de electrones en barreras de potencial en una dimensión". Tesis de licenciatura UABC. Ensenada B.C. enero 1988.
- [35] Schrödinger E., "¿Que es la vida?". Cambridge University Press. 1944.
- [36] Cohen-Tannoudji C., Diu B., Laloë, "Quantum Mechanics Vol. I". Jhon Wiley & Sons. 1977.