

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE BAJA CALIFORNIA

FACULTAD DE CIENCIAS



**Estudio Comparativo de los Diversos Enfoques en la Descripción
del Tunelaje Resonante**

Memorias Del Servicio Social

Que para obtener el Título de:

FÍSICO

Presenta:

JULIO CÉSAR LÓPEZ DOMÍNGUEZ

ENSENADA, B. C.

FEBRERO 1999

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE BAJA CALIFORNIA

FACULTAD DE CIENCIAS

ESTUDIO COMPARATIVO DE LOS DIVERSOS ENFOQUES
EN LA DESCRIPCIÓN DEL TUNELAJE RESONANTE

MEMORIAS DEL SERVICIO SOCIAL

QUE PRESENTA


JULIO CÉSAR LÓPEZ DOMÍNGUEZ

APROBADO POR:

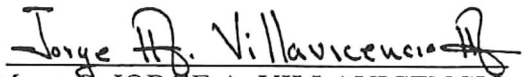


DR. ROBERTO ROMO MARTÍNEZ

Presidente del Jurado



M.en C. ALBERTO HERNÁNDEZ M.
SÉCRETARIO



M. en C. JORGE A. VILLAVICENCIO A.
1er. VOCAL

DEDICATORIA

A MIS PADRES:

*OLGA ESTHER DOMÍNGUEZ FRAIRE
RODOLFO LÓPEZ GARCÍA*

POR TODO EL AMOR Y APOYO QUE SIEMPRE HE RECIBIDO DE
ELLOS

A MI HERMANO

NAPOLEÓN

AGRADECIMIENTOS

Agradezco al Dr. Roberto Romo M. por haber dirigido este trabajo y por la valiosa ayuda brindada en la realización de éste trabajo.

Al M. en C. Jorge Alberto Villavicencio por sus consejos, gran ayuda y coodirección del trabajo.

A Irene, Eri, Dan-el, Veronica, Laura, Joel y Criseida, mis compañeros de salón y amigos que sin ellos no hubiera logrado esto.

A todos mis maestros, por su dedicación y por haber hecho todo lo posible para transmitirme sus conocimientos.

A mi familia, por su apoyo.

A la U. A. B. C., por haberme dado la oportunidad de ser una mejor persona.

A todas las personas que laboran en la Facultad de Ciencias.

A mis grandes amigos: Omar S., Juan M. F., Eri M., Rodrigo L., Sergio A., Juan Carlos M., Angel Z., Pablo, Jesús E., Luis S., Juan M. L., Julio D., Jesús A., Sinuhe P., Sergio S., René, Luis, Carlos D., David F., Juan A., Mauricio C., Paco B., Francisco T., Roberto G., Miguel G., Carlos Y., José de Jesús, Aurora C., Andrea Desiree, Paola G., Idania S., Gabriela L., Ada A., Julia M., Liliana, Paola, Estela P., Araceli, Cecilia O., por su valiosa amistad. El orden no tiene ningún significado para mi, si olvide ponerte te pido disculpas, pero tu sabes que mereces estar en esta lista.

A la familia Sabido López por ser mis amigos y ayudarme desinteresadamente siempre.

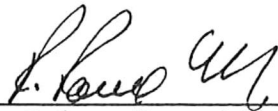
A todas las personas que me han ayudado durante todo este tiempo.

Y muy en especial quisiera agradecer a una maravillosa persona, Virginia Elena Díaz Lerma, por ser parte de mi vida durante todo este tiempo y brindar siempre lo mejor de si hacia mi.

RESUMEN de las Memorias de Servicio Social de Julio César López Domínguez presentada como requisito parcial para la obtención de la Licenciatura en Física. Ensenada, Baja California, México. febrero de 1999.

Estudio Comparativo de los Diversos Enfoques en la Descripción del Tunelaje Resonante

Resumen aprobado por :



Dr. Roberto Romo Martínez
Director del Proyecto

Se realizó un estudio comparativo del método de García-Calderón, Romo y Rubio para la descripción de los fenómenos del tunelaje resonante, con el método de Shao y Porod recientemente propuesto en la literatura de este campo. Este estudio se realizó evaluando numéricamente las fórmulas propuestas por ambos formalismos para el coeficiente de transmisión, lo cual involucró resolver el problema de eigenvalores complejos y el cálculo de ceros de reflexión. Nuestros resultados muestran que algunos de los cálculos publicados por Shao y Porod presentan inconsistencias numéricas, en base a las cuales dichos autores realizaron sus comparaciones con el método de García-Calderón, Romo y Rubio. En algunos de los sistemas simétricos de barrera múltiple ambos métodos reproducen el cálculo exacto con gran precisión. Sin embargo en los casos donde $T < 1$ en resonancia el método de Shao y colaboradores no se aplica (estos casos incluyen las situaciones con traslape fuerte y con campo eléctrico aplicado). El enfoque de García-Calderón, Romo y Rubio es más general ya que se aplica a perfiles de potencial arbitrarios. Entre otras aportaciones relevantes de este trabajo tenemos un estudio sistemático de los polos y picos de transmisión para la estructura de doble barrera y se propone un generador de valores iniciales para el cálculo de polos de transmisión para dicha estructura.

CONTENIDO

	Página
I. INTRODUCCIÓN.	1
II. FUNDAMENTOS TEÓRICOS.	4
II.1. El cálculo exacto.	4
II.2. El método de García-Calderón, Romo y Rubio.	9
II.3. El método de Shao y Porod.	13
III. CÁLCULO DE CEROS DE REFLEXIÓN Y POLOS DE TRANSMISIÓN.	17
III.1. Comportamiento de los ceros de reflexión.	17
III.2. Cálculo de los polos de transmisión.	19
IV. RESULTADOS DEL ESTUDIO COMPARATIVO.	28
IV.1. Cálculos de transmisión mediante el método de García-Calderón , Romo y Rubio.	28
IV.2. Cálculo de transmisión mediante el método de Shao y Porod.	35
V. CONCLUSIONES.	46
APENDICES.	49
A. LAS ANCHURAS PARCIALES DE DECAIMIENTO.	49
B. MATRIZ DE TRANSFERENCIA.	50
LITERATURA CITADA.	53

LISTA DE FIGURAS

Figura		Página
1	Gráfica del coeficiente de transmisión $T(E)$ vs energía (cálculo exacto) para una estructura de doble barrera, cuyas alturas son .5 eV, ancho de las barreras 60\AA y ancho del pozo de 45\AA .	22
2	Gráficas del coeficiente de transmisión para un sistema de doble barrera (línea continua) de altura .5 eV, ancho de las barreras de 60\AA y ancho del pozo para la gráfica (a) de 50\AA y para la gráfica (b) de 60\AA . En ambos casos la línea a trazos corresponde al cálculo exacto para una sola barrera de altura 0.5 eV y anchura de 60\AA .	23
3	Gráficas del coeficiente de transmisión para un sistema de doble barrera (línea continua) de altura .5 eV, ancho de las barreras de 60\AA y ancho del pozo para la gráfica (a) de 70\AA y para la gráfica (b) de 80\AA . En ambos casos la línea a trazos corresponde al cálculo exacto para una sola barrera de altura 0.5 eV y anchura de 60\AA .	24
4	Gráfica de la evolución de los picos de transmisión vs ancho del pozo para los sistemas de doble barrera estudiados en las figuras anteriores. En esta gráfica se muestra claramente como se lleva a cabo el relevo de los picos de transmisión. Se consideran diferentes tipos de líneas para poder identificar cada uno de los picos.	25
5	Gráfica de la evolución de los primeros 20 polos del sistema de doble barrera de $V_0=0.5$ eV, $L=60\text{\AA}$ y una variación de w desde $w=40\text{\AA}$ hasta $w=50\text{\AA}$. En la gráfica se muestran con una flecha la dirección del desplazamiento de estos al incrementar w .	26
6	Gráfica donde se muestra la evolución de la parte real de los primeros 20 polos para el sistema de doble barrera con parámetros de $V_0=0.5$ eV, $L=60\text{\AA}$ y un incremento en el ancho del pozo w desde $w=40\text{\AA}$ hasta $w=50\text{\AA}$.	27

LISTA DE FIGURAS (continuación)

Figura		Página
7	Gráfica del coeficiente de transmisión $T(E)$ vs energía E para una estructura de doble barrera alrededor de una resonancia aislada y delgada cuyos parámetros se especifican en el texto. La línea continua representa al cálculo exacto para el coeficiente de transmisión T^{exa} y la línea a trazos (superpuesta) representa al resultado del cálculo usando el formalismo de estados resonantes, ec (45) con $N=1$. Ambas curvas son casi indistinguibles, lo cual implica que el término de fondo $R_f(E)$ es despreciable en esta situación y entonces $T(E)$ es bien descrita por la fórmula (45).	37
8	Gráfica del coeficiente de transmisión $T(E)$ vs energía para una estructura de doble barrera alrededor de una resonancia traslapante, cuyos parámetros se indican en el texto. La línea continua representa al cálculo exacto para el coeficiente de transmisión T^{exa} y la línea a trazos representa al resultado del cálculo usando la aproximación de dos términos $T=T_1+T_2+T_{12}$. Esto implica que la contribución de $R_f(E)$ a la fórmula (45) no es despreciable en este caso.	37
9	Gráfica del coeficiente de transmisión $T(E)$ vs energía para una estructura de triple barrera alrededor de las dos resonancias traslapantes correspondientes a la primera minibanda, cuyos parámetros se indican en el texto. La línea continua representa al cálculo exacto para el coeficiente de transmisión T^{exa} y la línea a trazos representa el resultado del cálculo usando la aproximación de dos términos $T=T_1+T_2+T_{12}$. Ambas curvas son casi idénticas implicando que el término $R_f(E)$ en la fórmula (45) da una contribución despreciable. La línea punteada representa el cálculo sin el término de interferencia, esto es, a la suma de dos términos puramente Lorencianos $T^{\text{Lor}} = T_1+T_2$, el cual da una muy mala reproducción del coeficiente de transmisión exacto T^{exa} .	38

LISTA DE FIGURAS (continuación)

Figura		Página
10	Gráfica del coeficiente de transmisión $T(E)$ vs energía para una estructura de cinco barreras alrededor de las cuatro resonancias traslapantes correspondientes a la primera minibanda, cuyos parámetros se indican en el texto. La línea continua representa al cálculo exacto para el coeficiente de transmisión T^{exa} y la línea a trazos representa el resultado del del cálculo usando la aproximación de cuatro términos para $T(E)$, E_c , (45) con $N=4$. Ambas curvas son casi idénticas implicando que el término $R_f(E)$ en la fórmula (45) da una contribución despreciable. La línea punteada representa el cálculo sin el término de interferencia, esto es, a la suma de dos términos puramente Lorencianos $T^{\text{Lor}} = T_1 + T_2 + T_3 + T_4$ el cual da una inadecuada reproducción del coeficiente de transmisión exacto T^{exa}	39
11	Gráfica de los términos de interferencia $T_{nm}(E)$ vs E correspondientes a los estados de la primera minibanda del sistema de cinco barreras discutido en el texto. Se indica con flechas a que término corresponde cada curva. Puede apreciarse que $T_{nm}(E) \rightarrow 0$ para energías fuera de la región de la minibanda, mientras que dentro de ésta pueden contribuir de manera importante al coeficiente de transmisión $T(E)$.	39
12	Gráfica de la variación de los picos de resonancia E_{p1} y E_{p2} de la primera minibanda (líneas continuas) obtenidas del cálculo exacto del coeficiente de transmisión vs ancho del pozo de la barrera central b_2 . Nótese que las posiciones de los dos picos se unen en el valor crítico $b_2 = 68.5 \text{ \AA}$. También se muestra la variación de las energías de resonancias ϵ_1 y ϵ_2 vs b_2 (líneas a trazos). Estas últimas permanecen separadas una de la otra, como se explica en el texto	40

LISTA DE FIGURAS (continuación)

Figura		Página
13	Gráficas del coeficiente de transmisión $T(E)$ vs energía para un intervalo centrado en la primera minibanda de la estructura resonante de triple barrera para tres diferentes valores del ancho de la barrera central b_2 y todos los demás parámetros se mantienen fijos como en la figura anterior. Para $b_2=60\text{Å}$ (línea punteada) claramente se observan dos picos unitarios; El caso $b_2=68.5\text{Å}$ (línea a trazos) corresponde el valor de b_2 en el cual la transmisión a sólo uno, ocurre; Para $b_2=80\text{Å}$ (línea continua) existe una situación especial de traslape fuerte entre los dos estados resonantes de la minibanda que se manifiesta como un solo pico transmisión con un valor inferior a la unidad	40
14	Gráfica donde se muestra el coeficiente de transmisión vs energía para una estructura de doble barrera cuyos parámetros se indican en el texto. La línea continua representa el cálculo exacto mientras que la línea a trazos representa el cálculo basado en el método de Shao y colaboradores, con 20 pares de ceros-polos	41
15	Gráfica del coeficiente de transmisión $T(E)$ vs energía para una estructura alrededor de una resonancia traslapante, cuyos parámetros se indican en el texto. La línea continua representa el cálculo exacto mientras que la línea a trazos representa el cálculo basado en el método de Shao y colaboradores, evaluado con 80 pares de ceros-polos	42
16	Gráfica del coeficiente de transmisión vs energía para una estructura de triple barrera alrededor de dos resonancias traslapantes, cuyos parámetros se indican en el texto. La línea continua representa el cálculo exacto mientras que la línea a trazos representa el cálculo basado en el método de Porod y colaboradores, evaluada con 2 pares de ceros-polos	43

I. INTRODUCCIÓN

Desde el trabajo seminal de Esaki y colaboradores (Esaki *et al.* 1970 y 1973) a principios de la década de los 70's se concibe tanto teórica como experimentalmente la posibilidad de diseñar artificialmente superredes semiconductoras. Esto abrió un nuevo campo de investigación que ha provocado un intenso estudio de los aspectos básicos del tunelaje. Este creciente interés ha sido motivado en gran medida por las potenciales aplicaciones tecnológicas en el campo de la microelectrónica, y por otro, a los nuevos e interesantes problemas de física básica que han aparecido en el escenario.

Uno de los mecanismos más importantes en el transporte electrónico en las citadas estructuras es el llamado *tunelaje resonante*. La conveniencia de utilizar expresiones tipo *Breit-Wigner (BW)* en la descripción de dicho proceso ha sido ampliamente reconocida (Stone *et al.*, 1985; Breit *et al.*, 1936; Coon *et al.*, 1989; Weil *et al.*, 1987; Price, 1988; Büttiker, 1988). Estas expresiones proveen descripciones y parametrizaciones del coeficiente de transmisión que han sido de gran utilidad en la investigación de diversos aspectos del tunelaje, por ejemplo en el cálculo de corrientes de electrónicas (Romo, 1991; Romo *et al.* 1994; Coon *et al.* 1989), tiempos de tunelaje (García-Calderón *et al.* 1987), efectos de umbral (Romo *et al.* 1994; Coon *et al.* 1989) y procesos inelásticos (Stone *et al.* 1985 y Weil *et al.* 1987), por mencionar algunos. Sin embargo, la mayoría de las aplicaciones de la fórmula BW que encontramos en la literatura de estructuras de tunelaje resonante se refieren al caso de resonancias aisladas (picos simétricos, no traslapantes). En los casos en que dos o más resonancias interactúan teniendo entre si una interferencia significativa, la fórmula Breit-Wigner

para una sola resonancia deja de ser válida.

Hace algunos años García-Calderón y Rubio introdujeron un formalismo de estados resonantes basado en el teorema del residuo de Cauchy (García-Calderón *et al.*, 1987) el cual se basa en explotar las propiedades analíticas del propagador de Green $G^+(x, x'; E)$. Este formalismo nos provee de fórmulas explícitas para el coeficiente de transmisión que permiten describir resonancias arbitrariamente cercanas entre sí, que se presentan sobre todo en estructuras cuánticas de multibarreras (García-Calderón *et al.*, 1993). Dichas fórmulas proveen una expresión para el coeficiente de transmisión en forma de *suma* de términos BW mas contribuciones de interferencia entre estados resonantes. Se han realizado estudios sistemáticos que muestran que este método proporciona una excelente descripción para diversas estructuras cuánticas de barrera múltiple (García-Calderón *et al.*, 1993, R. Romo, 1995), incluso en sistemas asimétricos con campo eléctrico aplicado.

Recientemente un grupo de investigación de la Universidad de Notre Dame (Indiana) propuso un formalismo alternativo (Shao *et al.*, 1995). Este nuevo enfoque, a diferencia del anterior, está basado en el *Teorema de Weierstrass* y conduce a una expresión para el coeficiente de transmisión en forma de un *producto* de términos tipo BW. Los autores de este formalismo realizaron un estudio comparativo (Shao *et al.*, 1995) de su método con el de García-Calderón, Romo y Rubio haciendo incapié en las ventajas de su enfoque.

Uno de los objetivos principales de este trabajo de **Servicio Social** consistió en someter a pruebas numéricas el formalismo de Shao y Porod , lo cual involucró la realización de programas computacionales para cálculos de polos de transmisión, ceros

de reflexión, evaluación del coeficiente de transmisión y evaluación de las expresiones dadas por la prescripción de Shao y Porod (Shao *et al.* 1995). En base a dichas evaluaciones se realiza un estudio comparativo de ambos enfoques con el fin de investigar las ventajas que ofrece uno sobre el otro. Ambos formalismos se comparan con el cálculo exacto via matriz de transferencia.

La distribución del material contenido en estas Memorias del Servicio Social es la siguiente. En el capítulo II se realiza una descripción de ambos formalismos y del método de la *matriz de transferencia* mediante el cual se realiza el cálculo exacto. En el capítulo III se presenta un estudio sistemático realizado sobre el cálculo de los picos y los polos de transmisión, los cuales son las cantidades más relevantes que se requieren en ambos formalismos como datos de entrada. En el capítulo IV se exponen los resultados numéricos de la comparación de los dos formalismos.

II. FUNDAMENTOS TEÓRICOS

En este capítulo se hará una exposición de la teoría básica de cada uno de los métodos para estudiar las propiedades del tunelaje resonante que pretendemos comparar. En la sección II.1 expondremos el método clásico de la matriz de transferencia el cual proporciona el *cálculo exacto* del coeficiente de transmisión. En la sección II.2 se estudia el formalismo de García-Calderón y Rubio (García-Calderón *et al.* 1987). Mediante este formalismo se obtiene una expresión para el coeficiente de transmisión, en donde se involucran solamente polos de transmisión, válido para potenciales de forma arbitraria. En la sección II.3 se describe el formalismo de Shao y colaboradores (Shao *et al.*, 1995), el cual mediante un *ansatz* expresa el coeficiente de transmisión en función de pares de *ceros – polos* (ceros de reflexión y polos de transmisión). Este formalismo sólo es válido para sistemas simétricos donde la relación entre los polos de transmisión y los ceros de reflexión sea uno a uno.

II.1. El cálculo exacto.

A continuación obtendremos el coeficiente de transmisión mediante el método de la matriz de transferencia para un potencial simétrico de doble barrera.

(i) Barrera en una posición arbitraria.

Consideremos una barrera de potencial de longitud L sin campo externo aplicado situada en una posición arbitraria x_i , esto es,

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & x_i \leq x \leq x_i + L \\ 0, & (\text{otra parte}) \end{cases} \quad (1)$$

las soluciones de la ecuación de Schrödinger

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

para cada una de las diferentes regiones son

$$\Psi_1(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad x < x_i \quad (3)$$

$$\Psi_2(x) = \alpha e^{qx} + \beta e^{-qx} \quad x_i \leq x \leq x_i + L \quad (4)$$

$$\Psi_3(x) = Ce^{ikx} + De^{-ikx} \quad x > x_i + L \quad (5)$$

donde $k = [2mE/\hbar^2]^{1/2}$ y $q = \{2m[V_0 - E]/\hbar^2\}^{1/2}$.

Las condiciones de acoplamiento en x_i y $x_i + L$ son

$$\Psi_1(x_i) = \Psi_2(x_i) \quad (6)$$

$$\Psi_2(x_i + L) = \Psi_3(x_i + L) \quad (7)$$

$$\frac{d\Psi_1(x_i)}{dx} = \frac{d\Psi_2(x_i)}{dx} \quad (8)$$

$$\frac{d\Psi_2(x_i + L)}{dx} = \frac{d\Psi_3(x_i + L)}{dx} \quad (9)$$

aplicando las condiciones (6) y (8) a las ecuaciones de las ecuaciones (3) y (4) obtenemos las siguientes expresiones para los coeficientes α y β en términos de A y B ,

$$\alpha = \frac{1}{2} \left[Ae^{-qx_i} e^{ikx_i} \left(1 + \frac{ik}{q}\right) + Be^{-qx_i} e^{-ikx_i} \left(1 - \frac{ik}{q}\right) \right] \quad (10)$$

$$\beta = \frac{1}{2} \left[Ae^{qx_i} e^{ikx_i} \left(1 - \frac{ik}{q}\right) + Be^{qx_i} e^{-ikx_i} \left(1 + \frac{ik}{q}\right) \right] \quad (11)$$

estas relaciones las podemos escribir en una forma matricial de la siguiente manera

$$\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} e^{-qx_i} e^{ikx_i} \left(1 + \frac{ik}{q}\right) & e^{-qx_i} e^{-ikx_i} \left(1 - \frac{ik}{q}\right) \\ e^{qx_i} e^{ikx_i} \left(1 - \frac{ik}{q}\right) & e^{qx_i} e^{-ikx_i} \left(1 + \frac{ik}{q}\right) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} \quad (12)$$

definimos la matriz Ω_1 de la siguiente manera

$$\Omega_1 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} e^{-qx_i} e^{ikx_i} \left(1 + \frac{ik}{q}\right) & e^{-qx_i} e^{-ikx_i} \left(1 - \frac{ik}{q}\right) \\ e^{qx_i} e^{ikx_i} \left(1 - \frac{ik}{q}\right) & e^{qx_i} e^{-ikx_i} \left(1 + \frac{ik}{q}\right) \end{pmatrix} \quad (13)$$

una propiedad interesante de Ω_1 es que posee la siguiente factorización,

$$= \begin{pmatrix} e^{-qx_i} & 0 \\ 0 & e^{qx_i} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(1 + \frac{ik}{q}) & \frac{1}{2}(1 - \frac{ik}{q}) \\ \frac{1}{2}(1 - \frac{ik}{q}) & \frac{1}{2}(1 + \frac{ik}{q}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ikx_i} & 0 \\ 0 & e^{-ikx_i} \end{pmatrix}. \quad (14)$$

Ahora aplicando las condiciones de frontera (7) y (9) obtenemos las relaciones

$$C = \frac{1}{2} \left[\alpha e^{q(x_i+L)} e^{-ik(x_i+L)} \left(1 + \frac{q}{ik}\right) + \beta e^{-q(x_i+L)} e^{-ik(x_i+L)} \left(1 - \frac{q}{ik}\right) \right] \quad (15)$$

$$D = \frac{1}{2} \left[\alpha e^{q(x_i+L)} e^{ik(x_i+L)} \left(1 - \frac{q}{ik}\right) + \beta e^{-q(x_i+L)} e^{ik(x_i+L)} \left(1 + \frac{q}{ik}\right) \right] \quad (16)$$

o escritas en forma matricial

$$\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} e^{q(x_i+L)} e^{-ik(x_i+L)} \left(1 + \frac{q}{ik}\right) & e^{-q(x_i+L)} e^{-ik(x_i+L)} \left(1 - \frac{q}{ik}\right) \\ e^{q(x_i+L)} e^{ik(x_i+L)} \left(1 - \frac{q}{ik}\right) & e^{-q(x_i+L)} e^{ik(x_i+L)} \left(1 + \frac{q}{ik}\right) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}, \quad (17)$$

definimos la matriz Ω_2

$$\Omega_2 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} e^{q(x_i+L)} e^{-ik(x_i+L)} \left(1 + \frac{q}{ik}\right) & e^{-q(x_i+L)} e^{-ik(x_i+L)} \left(1 - \frac{q}{ik}\right) \\ e^{q(x_i+L)} e^{ik(x_i+L)} \left(1 - \frac{q}{ik}\right) & e^{-q(x_i+L)} e^{ik(x_i+L)} \left(1 + \frac{q}{ik}\right) \end{pmatrix} \quad (18)$$

al igual que Ω_1 , Ω_2 puede expresarse como el producto de tres matrices

$$= \begin{pmatrix} e^{-ik(x_i+L)} & 0 \\ 0 & e^{ik(x_i+L)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(1 + \frac{q}{ik}) & \frac{1}{2}(1 - \frac{q}{ik}) \\ \frac{1}{2}(1 - \frac{q}{ik}) & \frac{1}{2}(1 + \frac{q}{ik}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{q(x_i+L)} & 0 \\ 0 & e^{-q(x_i+L)} \end{pmatrix}. \quad (19)$$

Las ecuaciones matriciales (12) y (17) relacionan los coeficientes de la izquierda de la barrera con los coeficientes de la derecha de la barrera de la siguiente manera

$$\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = \Omega_2 \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \Omega_2 \Omega_1 \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} \quad (20)$$

entonces la matriz

$$M \equiv \Omega_2 \Omega_1 \quad (21)$$

es la matriz de transferencia de una barrera de potencial de longitud L definida de $x_i \leq x \leq x_i + L$. Las matrices Ω_2 y Ω_1 están dadas por las ecuaciones (14) y (19) respectivamente.

(ii) Sistema de doble barrera

Utilizando la matriz de transferencia de una barrera ahora resolveremos el caso de un sistema de doble barrera simétrico definido de la siguiente manera,

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & 0 \leq x \leq L \quad y \quad L + w \leq x \leq 2L + w \\ 0, & \text{(otra parte)} \end{cases}$$

las soluciones para las diferentes regiones vienen dadas por las siguientes ecuaciones

$$\Psi_1(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad x < 0 \quad (22)$$

$$\Psi_2(x) = \alpha e^{qx} + \beta e^{-qx} \quad 0 < x < L \quad (23)$$

$$\Psi_3(x) = Ce^{ikx} + De^{-ikx} \quad L < x < L + w \quad (24)$$

$$\Psi_4(x) = \eta e^{qx} + \zeta e^{-qx} \quad L + w < x < w + 2L \quad (25)$$

$$\Psi_5(x) = Ee^{ikx} + Fe^{-ikx} \quad x > w + 2L \quad (26)$$

las ecuaciones matriciales que conectan los coeficientes de cada una de las regiones son,

$$\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = \Omega_1 \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \Omega_2 \Omega_1 \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} \equiv M_1 \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} \quad (27)$$

$$\begin{pmatrix} E \\ F \end{pmatrix} = \Theta_1 \begin{pmatrix} \eta \\ \zeta \end{pmatrix} = \Theta_2 \Theta_1 \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} \equiv M_2 \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} \quad (28)$$

La matriz M_1 está determinada por las expresiones obtenidas en la sección anterior, haciendo $x_i = 0$ en las expresiones de Ω_1 y Ω_2 (ver ecuaciones (14) y (19))

$$\begin{aligned}
M_1 = & \begin{pmatrix} e^{-ikL} & 0 \\ 0 & e^{ikL} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(1 + \frac{q}{ik}) & \frac{1}{2}(1 - \frac{q}{ik}) \\ \frac{1}{2}(1 - \frac{q}{ik}) & \frac{1}{2}(1 + \frac{q}{ik}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{qL} & 0 \\ 0 & e^{-qL} \end{pmatrix} * \\
& * \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(1 + \frac{ik}{q}) & \frac{1}{2}(1 - \frac{ik}{q}) \\ \frac{1}{2}(1 - \frac{ik}{q}) & \frac{1}{2}(1 + \frac{ik}{q}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (29)
\end{aligned}$$

De manera similar se obtiene M_2 haciendo $x_i = L + w$ en las expresiones de la sección anterior:

$$\begin{aligned}
M_2 = & \begin{pmatrix} e^{-ik(w+2L)} & 0 \\ 0 & e^{ik(w+2L)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(1 + \frac{q}{ik}) & \frac{1}{2}(1 - \frac{q}{ik}) \\ \frac{1}{2}(1 - \frac{q}{ik}) & \frac{1}{2}(1 + \frac{q}{ik}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{q(w+2L)} & 0 \\ 0 & e^{-q(w+2L)} \end{pmatrix} * \\
& * \begin{pmatrix} e^{-q(L+w)} & 0 \\ 0 & e^{q(L+w)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(1 + \frac{ik}{q}) & \frac{1}{2}(1 - \frac{ik}{q}) \\ \frac{1}{2}(1 - \frac{ik}{q}) & \frac{1}{2}(1 + \frac{ik}{q}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ik(L+w)} & 0 \\ 0 & e^{-ik(L+w)} \end{pmatrix} \quad (30)
\end{aligned}$$

que corresponden a las matrices de transmisión para cada una de las barreras. Utilizando las ecuaciones (27) y (28) relacionamos los coeficientes de la izquierda del sistema con los de la derecha de la siguiente manera

$$\begin{pmatrix} E \\ F \end{pmatrix} = M_2 \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = M_2 M_1 \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} \quad (31)$$

lo cual nos permite expresar la matriz de transferencia total del sistema M como,

$$M = M_2 M_1 \quad (32)$$

Si suponemos incidencia de una partícula por la izquierda, y por la derecha sólo flujo transmitido, debemos de imponer condiciones adicionales a las amplitudes, estas son : $B = r$, $A = 1$, $E = t$ y $F = 0$, donde t y r son las amplitudes de transmisión y reflexión respectivamente. Tendremos entonces;

$$\begin{pmatrix} t \\ 0 \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} 1 \\ r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ r \end{pmatrix} \quad (33)$$

o escrito de otra forma

$$0 = m_{21} + m_{22}r \Rightarrow r = -m_{21}/m_{22} \quad (34)$$

$$t = m_{11} + m_{12}r \Rightarrow t = \det M/m_{22} = 1/m_{22} \quad (35)$$

ya que en casos simétricos $\det(M) = 1$ (ver APENDICE B). La ecuación anterior proporciona una expresión para la amplitud de transmisión $t(k)$, en términos de m_{22} .

El coeficiente de transmisión esta dado por

$$T^{exa} = |t|^2 = \left| \frac{1}{m_{22}} \right|^2 \quad (36)$$

donde el elemento m_{22} de la matriz M definida en la ecuacion (32) es explícitamente

$$m_{22} = \left(\frac{k^2 + q^2}{2kq} \right)^2 \text{senh}^2(qL) e^{2ik(L+w)} + \left(\cosh(qL) - i \left(\frac{k^2 - q^2}{2kq} \right) \text{senh}(qL) \right)^2 e^{2ikL}. \quad (37)$$

Es importante aclarar que en el caso general de potenciales asimétricos (*e. g.* con campo eléctrico aplicado) se tiene $\det(M) \neq 1$. por lo tanto la expresión (36) para el coeficiente de transmisión. se debe sustituir por el cociente de las corrientes de probabilidad (Azbel *et al.* 1983).

II.2. El método de García-Calderón, Romo y Rubio.

Consideremos la dispersión de un electrón de energía E y una masa m por un potencial finito de forma arbitraria de longitud L , considerando el caso general en el que el potencial está sometido a un voltaje aplicado V_e . La solución de la ecuación de Schrödinger en la región externa al potencial tiene la forma,

$$\Psi(x) = \begin{cases} \exp(ik^0x) + r(E) \exp(ik^0x), & x < 0 \\ t(E) \exp(ik^Lx), & x > 0 \end{cases} \quad (38)$$

donde $t(E)$ y $r(E)$ son las amplitudes de transmisión y reflexión respectivamente. Aquí $k^0 = [2mE/\hbar^2]^{1/2}$ y $k^L = [2m(E - V(L))/\hbar^2]^{1/2}$.

El cero de la energía es tomado en la orilla de la banda de conducción del emisor por lo que $V(0) = 0$ y $V(L) = -eV_e$, donde V_e es el voltaje aplicado.

Usando el teorema de Green entre la ecuación de Schrödinger para $\Psi(x)$ y la ecuación para el propagador $G^+(x, x'; E)$, con sus respectivas condiciones de frontera se encuentra una importante relación entre ambas (García-Calderón *et al.* 1987),

$$\Psi(x) = 2ik^0 G^+(0, x'; E), \quad 0 \leq x \leq L. \quad (39)$$

Esta ecuación permite utilizar las bien conocidas propiedades analíticas del propagador en la descripción del proceso resonante.

De la ecuación (39) y del valor de $\Psi(x = L)$ obtenemos la relación entre la amplitud de transmisión $t(E)$ y el propagador,

$$t(E) = 2ik^0 G^+(0, L; E) e^{-ik^L L}. \quad (40)$$

La importancia de esta ecuación proviene del hecho de que el propagador puede ser desarrollado en términos de sus polos aplicando el teorema del residuo de Cauchy (García-Calderón, 1976).

En particular tal desarrollo puede escribirse como (García-Calderón *et al.*, 1993),

$$G^+(x, x'; E) = \sum_{n=1}^N \frac{u_n(x)u_n(x')}{k^2 - k_n^2} + B(E), \quad 0 \leq (x, x') \leq L \quad (41)$$

donde $B(E)$ representa a un término de fondo el cual varía lentamente con la energía y resulta despreciable si N incluye el subconjunto relevante de términos del desarrollo anterior para un potencial dado. Cuando tal subconjunto no se escoge

apropiadamente $B(E)$ puede resultar importante y en estas circunstancias no deberá ignorarse.

Las funciones $u_n(x)$ que aparecen como coeficientes de desarrollo son soluciones de la ecuación de Schrödinger con las condiciones de frontera de onda saliente siguientes

$$\left(\frac{du_n(x)}{dx}\right)_{x=0} = -ik_n u_n(0), \quad \left(\frac{du_n(x)}{dx}\right)_{x=L} = +ik_n u_n(L). \quad (42)$$

Los correspondientes eigenvalores de la energía son complejos, y a su vez los polos del propagador de Green $G^+(x, x'; E)$. Estos eigenvalores se pueden escribir de la siguiente forma,

$$E_n = \hbar^2 k_n^2 / 2m = \epsilon_n - i\Gamma_n / 2. \quad (43)$$

donde estas energías describen la n -ésima resonancia, siendo la parte real ϵ_n la posición y la parte imaginaria Γ_n su correspondiente anchura.

La normalización de las funciones $u_n(x)$ viene de el residuo de los polos de energía compleja del propagador de Green y está dada por (García-Calderón *et al.* 1993),

$$\int_0^L u_n^2(x) dx + \frac{i}{2} \left[\frac{u_n^2(0)}{k_n^0} + \frac{u_n^2(L)}{k_n^L} \right] = 1, \quad (44)$$

donde $k_n^0 = [2mE_n/\hbar^2]^{1/2}$ y $k_n^L = [2m(E_n - V(x))/\hbar^2]^{1/2}$.

Como vemos en la ecuación (40), la amplitud de transmisión requiere que el propagador dado por la ecuación (41) sea evaluado en $x = 0$ y $x = L$.

Sustituyendo el desarrollo de la ecuación (41) en la ecuación (40) obtenemos el coeficiente de transmisión válido para multiples resonancias,

$$T(E) = \frac{k^0}{k^L} |t|^2 = \sum_{n=1}^N T_n + \sum_{n < m}^N T_{nm} + R_f(E), \quad (45)$$

donde $T_n(E)$ es una expresión del tipo BW, $T_{nm}(E)$ representa el término de interferencia entre la n -ésima y m -ésima resonancia, y $R(E)$ es un término de fondo asociado con la contribución de los restantes términos de resonancia lejanos y el término de fondo $B(E)$ de la ecuación (41). La expresión para $T_n(E)$ tiene la forma

$$T_n(E) = \frac{k^0 k^L}{a_n^0 a_n^L} I_n^2 \frac{\Gamma_n^0 \Gamma_n^L}{(E - \epsilon_n)^2 + (\Gamma_n/2)^2} \quad (46)$$

donde

$$I_n = \int_0^L |u_n(x)|^2 dx \quad (47)$$

y $a_n^0 = \text{Re}(k_n^0)$ y $a_n^L = \text{Re}(k_n^L)$. La ecuación (45) difiere de la fórmula tipo BW comúnmente usada por la presencia del factor de $k^0 k^L I_n^2 / a_n^0 a_n^L$, que es el factor de umbral. Este factor tiene dos funciones muy importantes: (a) es esencial para preservar *unitariedad*, y (b) garantiza el comportamiento correcto del coeficiente de transmisión en la región cercana al umbral de energía del canal emisor ($E = 0$) que es precisamente donde el pico de corriente y la resistencia diferencial negativa ocurren.

Las cantidades Γ_n^0 y Γ_n^L son los llamados anchuras parciales de decaimiento en $x = 0$ y en $x = L$ respectivamente, y están dadas por las ecuaciones

$$\Gamma_n^0 = \hbar \frac{\hbar a_n^0}{m} \frac{|u_n(0)|^2}{I_n} \quad (48)$$

$$\Gamma_n^L = \hbar \frac{\hbar a_n^L}{m} \frac{|u_n(L)|^2}{I_n}. \quad (49)$$

Estas anchuras parciales de decaimiento aparecen de diversas cantidades de interés para el proceso de tunelaje resonante, como la descripción de los tiempos de tunelaje.

La anchura de decaimiento total es la suma de los anchos parciales, *i.e.* $\Gamma_n = \Gamma_n^0 + \Gamma_n^L$ (García-Calderón *et al.* 1987). Por otro lado, el término de interferencia T_{nm}

de la ecuación (45) puede escribirse como:

$$T_{nm}(E) = 2C_{nm}(\Gamma_n^0 \Gamma_n^L \Gamma_m^0 \Gamma_m^L)^{1/2} \text{Re} \left\{ \frac{\exp[i\phi_{nm}]}{(E - \epsilon_n + i\Gamma_n/2)(E - \epsilon_m - i\Gamma_m/2)} \right\}. \quad (50)$$

Aquí hemos escrito $u = |u| \exp(i\phi)$, C_{nm} es el factor $C_{nm} = k^0 k^L I_n I_m / (a_n^0 a_n^L a_m^0 a_m^L)^{1/2}$, y la fase $\phi_{nm} = [\phi_n(0) + \phi_n(L) - \phi_m(0) - \phi_m(L)]$.

Las expresiones obtenidas mediante este formalismo para el coeficiente de transmisión constituyen una generalización de la fórmula de Bret-Wigner simple (de una sólo resonancia aislada y estrecha) comúnmente utilizada para describir resonancias (Stone *et al.*, 1985; Breit *et al.*, 1936; Coon *et al.*, 1986; Weil *et al.*, 1987; Price, 1988; Büttiker, 1988).

Además las expresiones tipo BW que se han construido permiten describir cualquier cantidad de resonancias, tanto en los casos de resonancias aisladas, como en aquellos en que éstas presenten una interferencia significativa. Dichas expresiones se aplican a un perfil arbitrario de potencial ya que el formalismo no hace suposiciones especiales sobre la forma del potencial.

En particular se ha probado que incluso en los casos con campo eléctrico aplicado y energías cercanas al umbral del canal emisor, la descripción que proporcionan dichas expresiones es excelente (García-Calderón *et al.* 1994; Romo, 1991). Esto ha permitido utilizarlas para el cálculo y análisis de la corriente electrónica en estructuras de doble y triple barrera

II.3. El método de Shao y Porod.

El formalismo de Shao y Porod se basa en un producto de términos tipo BW evaluados en pares de *ceros-polos*, los cuales consisten en parejas de polos de transmisión

y ceros de reflexión (que ellos definen como los valores de E para los que $T = 1$). Para el tunelaje resonante de doble barrera (DBRT), es bien conocido que el fenómeno resonancia está relacionado con los estados cuasi-ligados en la región del pozo (Price, 1988; Büttiker, 1988).

Específicamente un estado cuasi-ligado de energía E_p y tiempo de decaimiento $\tau = \hbar/2\Gamma$, tiene un polo simple en la amplitud de transmisión $t(z)$, dado por la energía compleja $z = E_p - i\Gamma$, esto es,

$$t(z) \sim 1/[z - (E_p - i\Gamma)]. \quad (51)$$

Si este polo está suficientemente cercano al eje real de la energía de tal manera que el efecto de los otros polos puede ser ignorado, la probabilidad de transmisión $T(E) = |t(E)|^2$ para una energía física en el eje real de E esta dada por

$$T(E) = \frac{\Gamma^2}{(E - E_p)^2 + \Gamma^2}. \quad (52)$$

En trabajos previos, sobre guías de onda cuánticas W. Porod y colaboradores (Porod *et al.* 1992 y 1994) argumentan que los aspectos relevantes de las resonancias pueden ser entendidas en términos de una estructura de *ceros-polos* para cada estado cuasi-ligado.

Estos resultados, encontrados en el contexto del estudio de las guías de onda cuánticas, condujo a estos autores a proponer para el caso de estructuras cuánticas de N barreras el siguiente *ansatz*

$$r(E) = \sum_{m=1}^{N-1} \frac{E - E_0^{(m)}}{E - (E_p^{(m)} - i\Gamma^{(m)})} \quad (53)$$

aquí E_0 es la energía del m -ésimo cero de reflexión (transmisión 1), y $E_p^{(m)}$ y $\Gamma^{(m)}$ son la parte real e imaginaria, respectivamente, del m -ésimo polo de transmisión.

Otro de los argumentos de Saho y Porod es que en contraste con las guías de onda cuánticas, los sistemas de multibarreras de tunelaje resonante sólo poseen polos de transmisión, pero no ceros de transmisión. Sin embargo, los sistemas de multibarreras simétricos exhiben transmisión igual a la unidad, esto es $T = 1$ corresponde a ceros de reflexión ya que $T + R = 1$. La amplitud de reflexión entonces posee una estructura cero-polo en el plano complejo.

Entonces es natural para ellos introducir su *ansatz i. e.* la ecuación (53) para la amplitud de reflexión $r(E)$.

Una de las suposiciones fundamentales de su teoría es de que para una estructura de N -multibarreras simétricas, tenemos $(N - 1)$ estados cuasi-ligados en cada minibanda con sus polos de transmisión asociados, se supone además que la estructura analítica de la amplitud de transmisión r está completamente determinada por los correspondientes $(N - 1)$ pares de cero-polos.

Como la probabilidad de reflexión es $R = |r|^2$, el *ansatz* de la ecuación (53) predice la siguiente forma para la probabilidad de transmisión T :

$$T(E) = 1 - \left| \prod_{m=1}^{N-1} \frac{E - E_0^{(m)}}{E - (E_p^{(m)} - i\Gamma^{(m)})} \right|^2. \quad (54)$$

En su artículo, Shao y Porod, no presentan los detalles de la derivación analítica de su expresión para $T(E)$, ec. (54). Simplemente la introducen en calidad de un *ansatz*, argumentando que dicha expresión está justificada por el teorema del producto de Weierstrass (Palka, 1991).

No es propósito de este trabajo reproducir los detalles algebraicos de el artículo en que estos autores introdujeron su formalismo.

Lo que haremos en el capítulo IV es evaluar numéricamente su expresión siguiendo la receta que ellos mismos sugieren: calcular los polos de transmisión, los ceros de reflexión e introducirlos como datos de entrada a la fórmula (54) para obtener curvas de $T(E)$ vs E para diversas estructuras de barrera múltiple.

III. CÁLCULO DE CEROS DE REFLEXIÓN Y POLOS DE TRANSMISIÓN.

En este capítulo presentaremos los resultados y discusión de los cálculos numéricos realizados, los cuales consistieron, por un lado, en el cálculo de los polos y ceros de reflexión así como un estudio sobre su comportamiento ante variaciones sistemáticas en algunos parámetros del perfil del potencial.

III.1 Comportamiento de los ceros de reflexión

Dedicaremos esta sección al análisis del comportamiento de los picos de transmisión para valores grandes de la energía de incidencia sobre una estructura de doble barrera, es decir, para $E \gg V_0$, donde V_0 es la altura de las barreras de la estructura resonante considerada. Este estudio preliminar es necesario debido a que las energías correspondientes a la posición de los picos de transmisión (que Shao y colaboradores llaman ceros de reflexión), son parte de los datos de entrada para la evaluación de la formula de Shao y colaboradores, ecuación (54). Además es una práctica común el utilizar estas cantidades como valores iniciales en el problema de eigenvalores complejos, el cual involucra el cálculo numérico de los polos de la amplitud de transmisión.

Por otro lado, es preciso enfatizar que este estudio es interesante por sí mismo, ya que la mayoría de los estudios en estructuras resonantes consideran intervalos con energías inferiores a la altura de las barreras ($0 < E < V_0$). La región de energías $E \gg V_0$ es, en cambio, una región poco explorada, y se piensa que ahí los picos de transmisión siguen una secuencia diferente a la región ($0 < E < V_0$) (García-Calderón *et al.*, 1997), y que podría haber estados resonantes asociados de manera especial a la altura de las barreras, estados conocidos como "*top barrier resonant states*".

En la **figura 1** se presenta una gráfica del cálculo exacto del coeficiente de transmisión como función de la energía para una estructura resonante de doble barrera simétrica cuyos parámetros son: altura y espesor de la barreras $V_0 = 0.5eV$ y $L = 60\text{Å}$ respectivamente, y ancho del pozo $w = 50\text{Å}$. En la figura notamos los picos poseen una distribución muy irregular, vemos por ejemplo la presencia de picos aislados y muy estrechos (sobre todo para $E < V_0$), así como picos demasiados anchos y traslapantes. Podemos apreciar también que hay ciertos picos agrupados por parejas formando "dobletes". Sin embargo, dentro de esa compleja y variada secuencia de picos es posible encontrar ciertas regularidades y correlaciones con los parámetros del perfil del potencial, así como una explicación física pausable a la distribución no uniforme de picos.

A continuación se presenta el estudio sistemático de los picos de transmisión del sistema anterior, al variar el parámetro w del sistema, que es la anchura del pozo. La variación se realiza desde $w = 40\text{Å}$ hasta $w = 80\text{Å}$, con el fin de encontrar una correlación entre los parámetros del potencial y la secuencia de picos de transmisión. En las **figuras 2 y 3** se muestra una serie de gráficas del coeficiente de transmisión (calculado en forma exacta) T^{exa} como función de la energía. Por simple inspección de las gráficas observamos que al incrementar el parámetro w hay un corrimiento de algunos picos de transmisión hacia la izquierda (hacia valores menores de la energía) y que otros en cambio tienden a mantenerse fijos alrededor de valores de energía muy específicos. Estos valores corresponden a los picos de transmisión de una barrera de potencial de $0.5eV$ de altura y 60Å de ancho. La interpretación física de este fenómeno es la siguiente: los picos que efectúan el movimiento están asociados al tamaño del

pozo del sistema y al variar la dimensión de éste, los picos se desplazan. Los picos que se asocian a las barreras, debido a que los parámetros de estas se mantienen constantes, estos permanecen sin un cambio significativo en su posición, hasta que, debido al movimiento de los picos asociados al pozo se observa un relevo de picos, ya que estos llegan a coincidir en energía con aquellos que permanecen fijos, y es aquí donde se lleva a cabo el proceso de relevo. El pico de transmisión que se desplazó hasta este valor de energía ahora permanece fijo y el que se encontraba ahí ahora se desplaza hacia valores de energía menores. En la **figura 4** se observa que durante el proceso de relevo los picos llegan a coincidir en energía degenerando en un sólo pico. Este resultado es un efecto que sólo se había observado en sistemas de triple barrera (Romo *et al.*, 1994) y demuestra que *la correspondencia entre los picos no es uno a uno* como usualmente se supone. Este es un punto que debilita el formalismo de Shao y Porod, ya que se basa en la hipótesis de que la estructura analítica de la amplitud de reflexión esta completamente determinada por pares *cero-polo*, esto es, supone implícitamente que la correspondencia uno a uno.

III.2 Cálculo de los polos de transmisión

En esta sección se presentará la forma de obtener los polos de transmisión. Esta tarea es difícil de realizar ya que el método para obtenerlos requiere de valores iniciales que sean cercanos a los polos que se buscan para garantizar la convergencia del método numérico. Para valores de la energía entre $0 < E < V_0$, donde los picos de transmisión por lo general son aislados y muy delgados, la posición y su ancho funcionan razonablemente como valores iniciales para la parte real y parte imaginaria respectivamente. Sin embargo para energías $E \gg V_0$, obtener estos datos de las

curvas de $T(E)$ es una tarea complicada, de hecho imposible por el enorme traslape que existe entre ellos. Es por esto que mediante este procedimiento no disponemos de valores iniciales confiables para obtener los polos en estas regiones de energía. En vista de la dificultad antes descrita se recurrió a la búsqueda de métodos alternativos para generar valores iniciales. Por argumentos físicos se conjeturó que para $E \gg V_0$, el sistema de doble barrera se puede ver en buena aproximación como una *barrera efectiva* de ancho $L_{ef} = 2L + w$, donde L y w son la anchura de las barreras y del pozo respectivamente, para la cual ya existía un generador de valores iniciales muy eficiente para una barrera de potencial (Villavicencio, 1999) el cual adaptado a nuestra estructura es

$$k_n = \frac{n\pi}{L_{ef}} - \frac{2i}{L_{ef}} \ln \left(\frac{n\pi}{A} \right) \quad (55)$$

donde $A = \frac{L_{ef}}{2} \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}}$. Este generador de valores iniciales funcionó exitosamente lo cual nos facilitó considerablemente la tarea de obtener los polos. Nótese que este generador proporciona los valores del número de onda k_n (o momentum), para convertirlos a energías $E_n = \epsilon_n - i\Gamma_n/2$ se debe usar la relación, $E_n = \hbar^2 k_n^2 / 2m$.

A continuación presentaremos un estudio sistemático sobre la evolución de los polos a medida que se varía el ancho del pozo w . En la de la **figura 5** podemos observar como evolucionan los polos en función del ancho del pozo w y en la **figura 6** vemos la evolución de la parte real de los mismos como función de w . Es claro que al comparar la evolución de los picos de transmisión con la de la parte real de los polos existe un gran contraste, ya que mientras en la parte real de los polos se observa un

comportamiento casi constante ante el incremento del ancho w , las posiciones de los picos de transmisión son mucho más sensibles como se vió en la **figura 4**.

De todo esto podemos concluir que: (a) no existe siempre una relación uno a uno entre los picos de transmisión y los polos, (b) las energías asociadas a los picos de transmisión no funcionan de valores iniciales para $E \gg V_0$, (c) el generador de valores iniciales de la barrera efectiva funciona muy bien en la región donde fallan los picos de transmisión como fuente de valores iniciales.

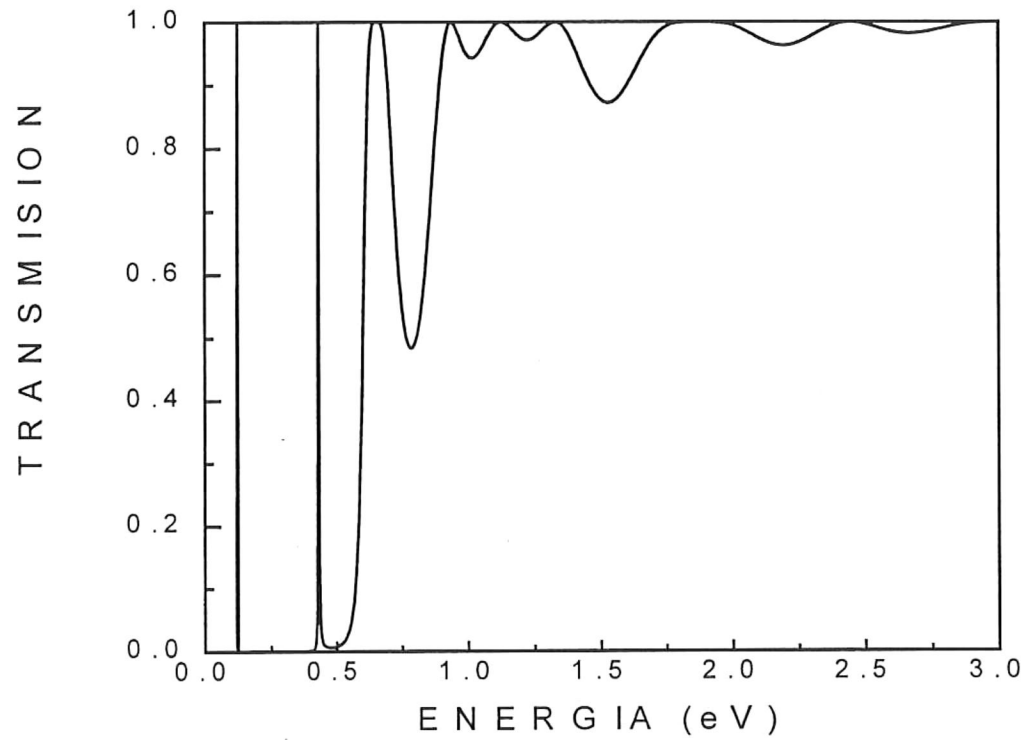


Figura 1. Gráfica del coeficiente de transmisión $T(E)$ vs energía (cálculo exacto) para una estructura de doble barrera, cuyas alturas son .5 eV, ancho de las barreras 60 Å y ancho del pozo de 45 Å.

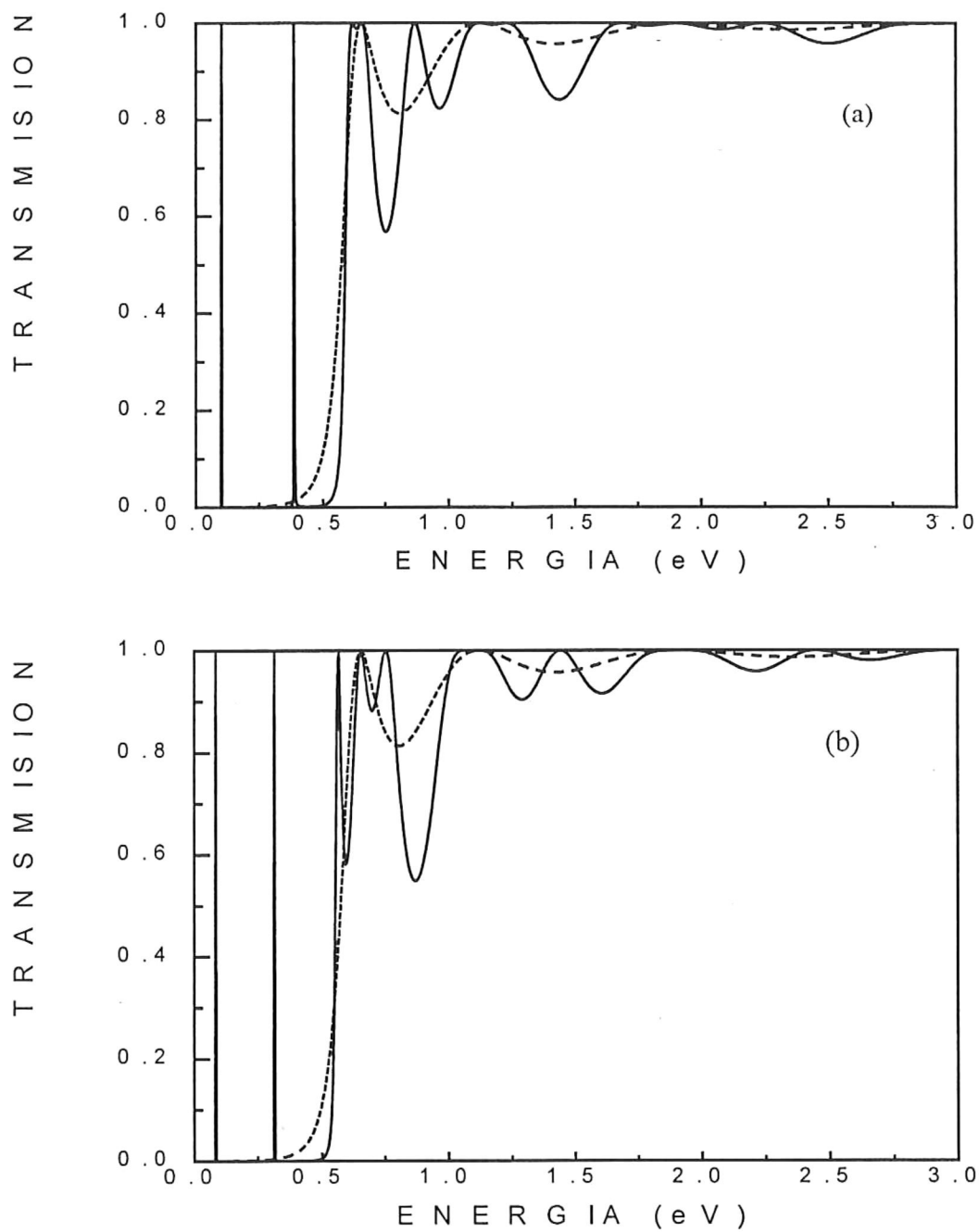


Figura 2. Gráficas del coeficiente de transmisión para un sistema de doble barrera (línea continua) de altura .5 eV, ancho de las barreras de 60Å y ancho del pozo para la gráfica (a) de 50Å y para la gráfica (b) de 60Å. En ambos casos la línea a trazos corresponde al cálculo exacto para una sola barrera de altura 0.5 eV y anchura 60 Å.

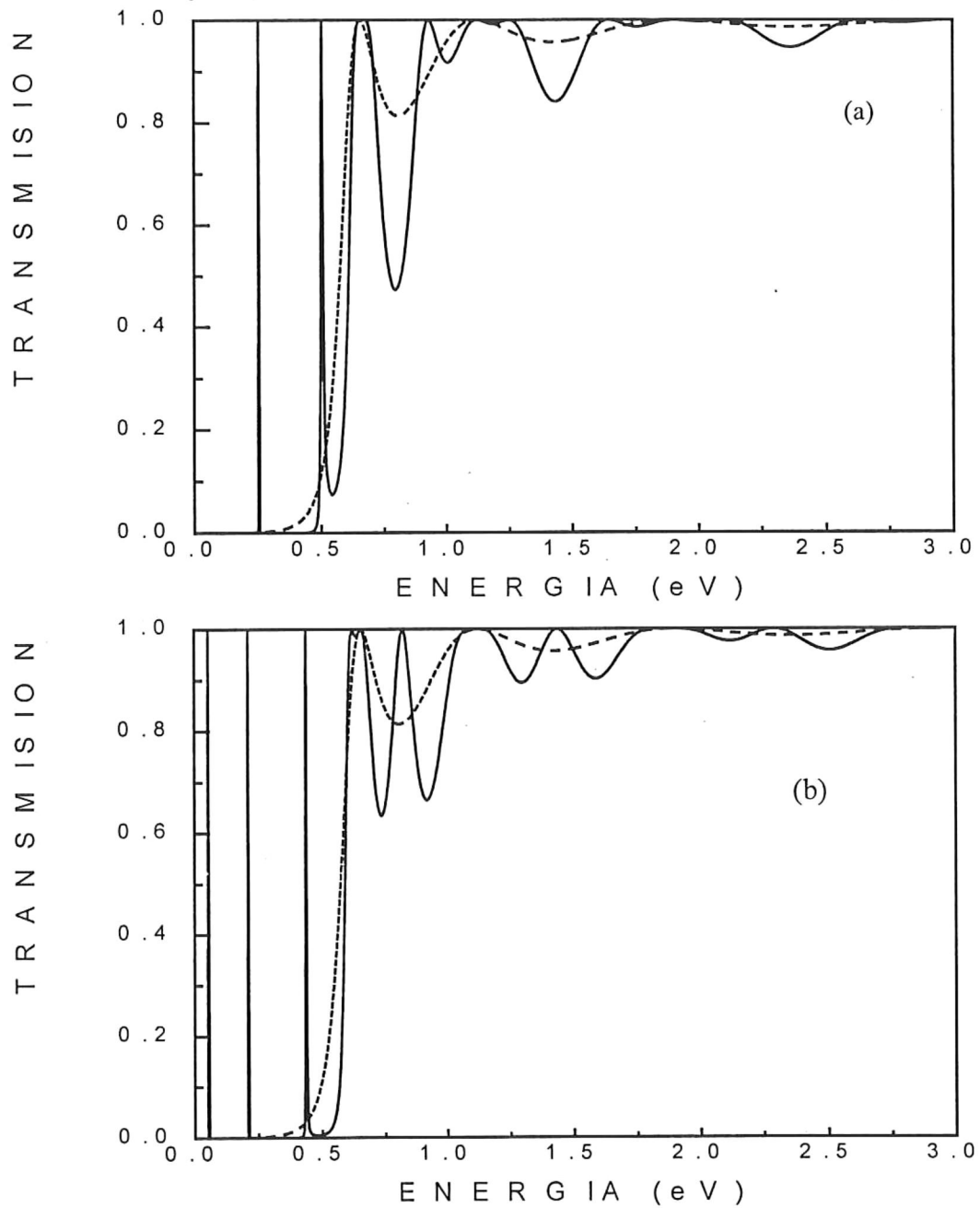


Figura 3. Gráficas del coeficiente de transmisión para un sistema de doble barrera (línea continua) de altura .5 eV, ancho de las barreras de 60Å y ancho del pozo para la gráfica (a) de 70Å y para la gráfica (b) de 80Å. En ambos casos la línea a trazos corresponde al cálculo exacto para una sola barrera de altura 0.5 eV y anchura 60 Å.

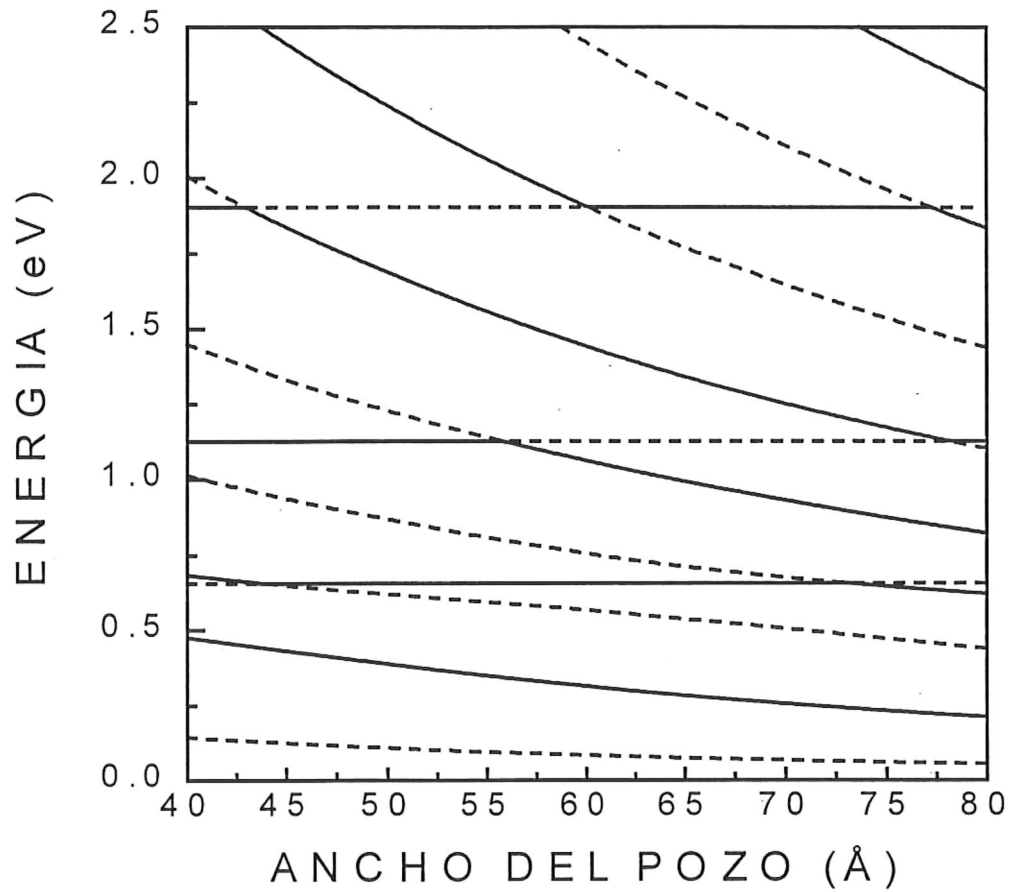


Figura 4. Gráfica de la evolución de los picos de transmisión vs ancho del pozo para los sistemas de doble barrera estudiados en las figuras anteriores. En esta gráfica se muestra claramente como se lleva a cabo el relevo de los picos de transmisión. Se consideran diferentes tipos de líneas para poder identificar los cada uno de los picos.

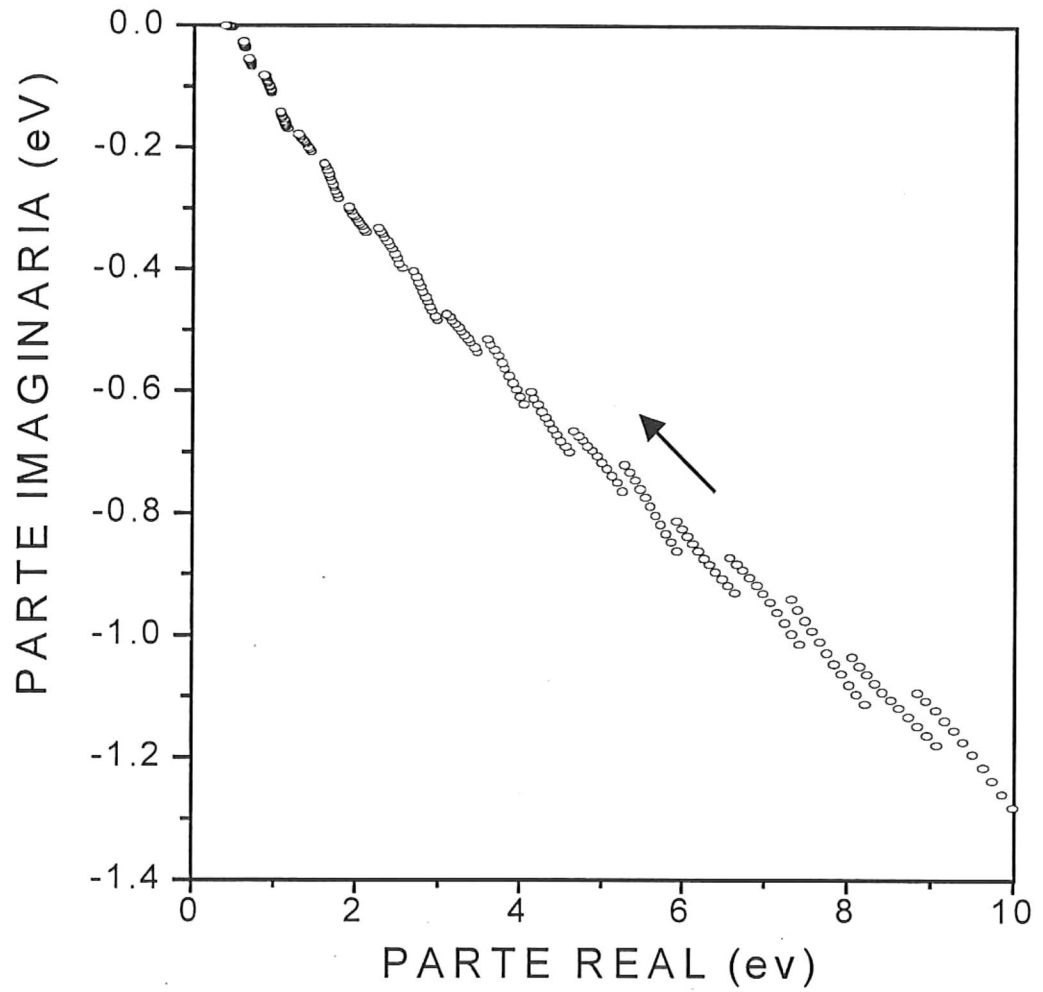


Figura 5. Gráfica de la evolución de los primeros 20 polos del sistema de doble barrera de $V_0=0.5$ eV, $L=60\text{\AA}$ y una variación de w desde $w=40\text{\AA}$ hasta $w=50\text{\AA}$. En la gráfica se muestran con una flecha la dirección del desplazamiento de estos al incrementar w .

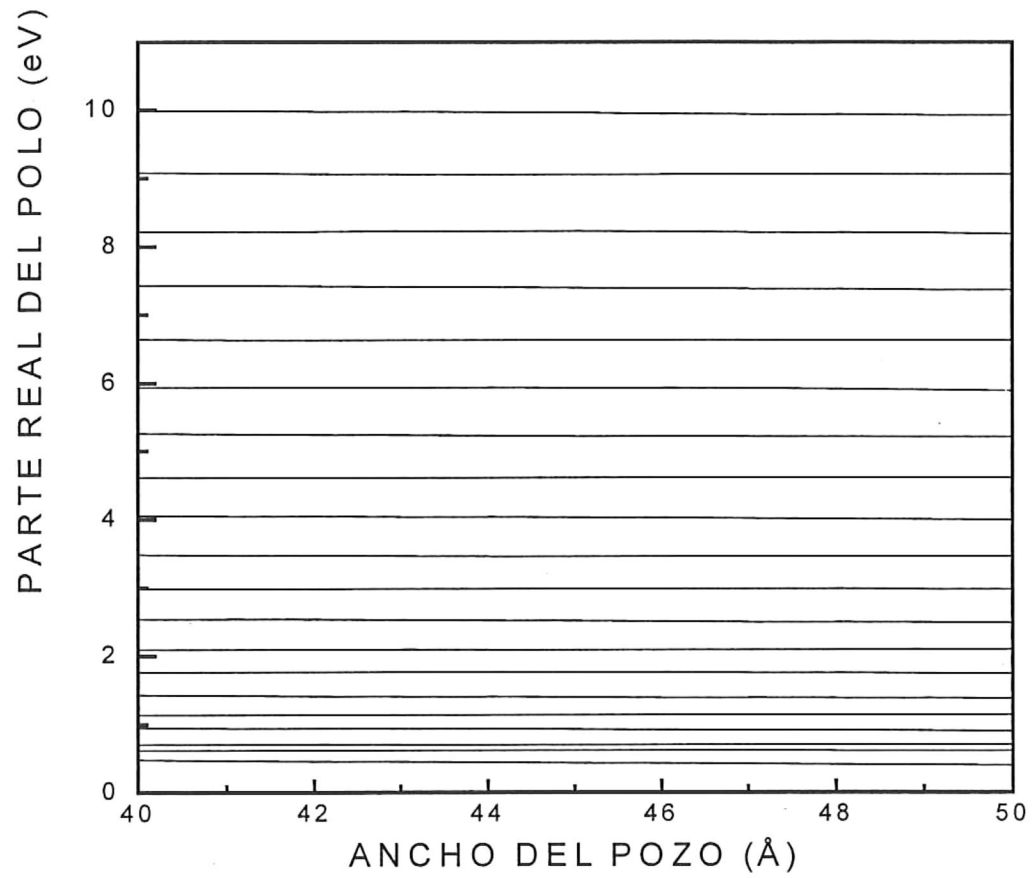


Figura 6. Gráfica donde se muestra la evolución de la parte real de los primeros 20 polos para el sistema de doble barrera con parámetros de $V_0=5.5\text{eV}$, $L=60\text{Å}$ y un incremento en el ancho del pozo w desde $w=40\text{Å}$ hasta $w=50\text{Å}$.

IV RESULTADOS DEL ESTUDIO COMPARATIVO

En este capítulo se presentan los resultados del cálculo numérico del coeficiente de transmisión para estructuras cuánticas de diversas geometrías. Los cálculos se realizan en base a los métodos descritos en el capítulo II. Se comparan los resultados del método de García-Calderón, Romo y Rubio (García-Calderón *et al.*, 1993) con los de Shao y Porod (Shao *et al.*, 1994) a la luz de la solución exacta.

IV.1 Cálculos de transmisión mediante el método de García-Calderón, Romo y Rubio.

En esta sección se presenta la discusión de la aplicación de este formalismo en la descripción del tunelaje resonante para estructuras cuánticas de multibarreras con diversas geometrías. Este estudio sistemático ya fué realizado con anterioridad por García-Calderón, Romo y Rubio (García-Calderón *et al.* 1993 y 1994; Romo, 1994), sin embargo por completez y con el fin de que el presente trabajo sea autocontenido, incluimos en esta sección los resultados y gráficas de dicho estudio sistemático, tal y como fueron presentados en las referencias antes citadas

(i) Consideremos primero el caso de una resonancia aislada en una estructura resonante de doble barrera (ERDB) simétrica. La **figura 7** presenta la gráfica de T vs E para una estructura de parámetros típicos: altura de las barreras, $V_0 = 0.23$ eV; espesores de las barreras, $b_1 = b_2 = 60$ Å; ancho del pozo, $w = 40$ Å. Los parámetros de resonancia, obtenidos resolviendo el problema de eigenvalores complejos, son $\epsilon_1 = 0.101$ eV y $\Gamma_1 = 0.768$ meV. La integral, $I_1 = 1.0032$. El factor de umbral $(k^0 k^L / a_1^0 a_1^L) I_n^2$, ($n = 1$) es del orden de la unidad. Utilizando el desarrollo de la ecuación (45) con la aproximación de un término, esto es $T(E) = T_1(E) + R_f(E)$

(línea a trazos), es casi indistinguible con el cálculo exacto T^{exa} (línea continua) que se obtiene usando la ecuación (36). En este caso de una resonancia estrecha y aislada, como es bien sabido los parámetros de resonancia pueden obtenerse usando la regla de **FWHM** (del inglés: *Full Width at Half Maximum*). Estos serían esencialmente los mismos que los obtenidos al resolver el problema de eigenvalores complejos en la energía.

(ii) Ahora consideremos un caso también de doble barrera pero con traslape entre resonancias, esto se logra con barreras más delgadas. En este caso escogemos: altura de las barreras, $V_0 = 0.20$ eV; espesores de las barreras, $b_1 = b_2 = 20$ Å; ancho del pozo, $w = 45$ Å. Los parámetros de resonancia para el primer estado son $\epsilon_1 = 0.0776$ eV y $\Gamma_1 = 32.67$ meV; y para el segundo, $\epsilon_2 = 0.3173$ eV y $\Gamma_2 = 237.47$ meV. Los valores de I_n son, respectivamente $I_1 = 1.1421$ e $I_2 = 1.6185$. Nótese que los anchos de resonancia, particularmente el segundo, son muy grandes y que las integrales I_1 e I_2 notablemente exceden a la unidad. En este caso la ecuación (45) para $T(E)$ puede escribirse como $T(E) = T_1(E) + T_2(E) + T_{12}(E) + R_f(E)$. Como antes, R_f representa la contribución que surge de los demás términos de resonancia. En la **figura 8** se muestra una comparación del coeficiente de transmisión exacto T^{exa} (línea continua) y el de la aproximación de dos términos $T = T_1 + T_2 + T_{12}$ (línea a trazos). Se ve claramente que la aproximación de dos términos está muy lejos de ser, en este caso, aceptable. Esto significa que el término de la contribución de fondo $R_f(E)$ no resulta despreciable aquí. Para reproducir apropiadamente el resultado exacto es necesario entonces incluir un gran número de términos en el desarrollo para $T(E)$, estos términos corresponderían a resonancias situadas a energías por encima de la

altura de las barreras con anchuras mucho más grandes. En este caso el desarrollo de estados resonantes tal vez ya no resultaría práctico para describir al sistema.

(iii) En la **figura 9** en la cual se gráfica $T(E)$ vs E para un sistema de triple barrera con parámetros: altura de las barreras, $V_0 = 0.23$ eV; espesor de la barrera central, $b_2 = 65$ Å, y barreras externas, $b_1 = b_3 = 35$ Å; ancho de los pozos, $w_1 = w_2 = 50$ Å. Los parámetros de resonancia para el primer estado son $\epsilon_1 = 0.0782$ eV y $\Gamma_1 = 2.268$ meV; y para el segundo, $\epsilon_2 = 0.8147$ eV y $\Gamma_2 = 2.555$ meV. Los valores de I_n son, respectivamente $I_1 = 1.0103$ e $I_2 = 1.0114$. La **figura 9** presenta la comparación del cálculo numérico exacto T^{exa} (línea continua) y el de la aproximación de dos términos $T = T_1 + T_2 + T_{12}$ (línea a trazos) . Se observa que en este caso ambas curvas prácticamente coinciden en todo el rango de energías considerado y resulta difícil distinguir una de la otra. Esto significa que el término de fondo esencialmente se anula, i.e., $R_f(E) \approx 0$ en la ecuación (45) y el cálculo vía la aproximación de dos términos resulta virtualmente exacto. Para propósitos de comparación, la **figura 9** muestra además la curva que resulta de sumar dos términos púramente lorentzianos, $T^{Lor} = T_1 + T_2$, esto es la ecuación (45) pero sin el término de interferencia T_{12} . Es evidente que T^{Lor} no reproduce adecuadamente al valor exacto T^{exa} , esto debido a la ausencia de la contribución de interferencia, $T_{12}(E)$. Por otro lado, ya que las resonancias en consideración se encuentran lejos del umbral de la energía ($E = 0$), el factor de umbral $(k^0 k^L / a_n^0 a_n^L) I_n^2$ es esencialmente unitario en resonancia. Es importante observar las diferencias en los resultados del caso de la ERDB y el de la estructura resonante de triple barrera (ERTB) discutida líneas arriba. En ambos casos hemos utilizado la aproximación de dos términos, $T = T_1 + T_2 + T_{12}$

para describir las dos primeras resonancias. Dicha aproximación resultó muy poco apropiada para el caso de la ERDB, mientras que por el contrario, proporciona una excelente descripción para el caso de la ERTB.

(iv) Consideremos ahora una estructura resonante de 5 barreras, simétrica. Aquí tendremos minibandas con cuatro estados cada una. Los resultados de los ejemplos anteriores parecen sugerir que en este caso debemos de tomar cuatro términos del desarrollo, es decir, el mismo número de estados que posee la minibanda. Esto es razonable debido a que estos cuatro estados están situados entre sí a distancias mucho más cortas que la separación entre minibandas para sistemas con parámetros típicos, de modo que los estados pertenecientes a otras minibandas tendrían una contribución despreciable al desarrollo mencionado debido a su lejanía. Los parámetros de la estructura que aquí consideraremos son: altura de las barreras, $V_0 = 0.20 \text{ eV}$; espesores de las barrera externas, $b_1 = b_5 = 27 \text{ \AA}$, y los de las otras, $b_2 = b_3 = b_4 = 50 \text{ \AA}$; y ancho de los pozos, $w_n = 50 \text{ \AA}$ ($n = 1, \dots, 4$). Las energías y anchos de resonancia son obtenidas como en los casos anteriores, resolviendo el problema de eigenvalores complejos. Estos son, respectivamente: $\epsilon_1 = .0690 \text{ eV}$, y $\Gamma_1 = 1.7156 \text{ meV}$; $\epsilon_2 = .07223 \text{ eV}$, y $\Gamma_2 = 4.8286 \text{ meV}$; $\epsilon_3 = .07689 \text{ eV}$, y $\Gamma_3 = 5.1529 \text{ meV}$; $\epsilon_4 = .0821 \text{ eV}$, y $\Gamma_4 = 2.0829 \text{ meV}$. Los valores de las integrales I_n son, respectivamente, $I_1 = 1.0749$, $I_2 = 1.0750$, $I_3 = 1.0932$, e $I_4 = 1.0599$. El resultado de la comparación del cálculo exacto T^{exa} (línea continua) y el de la aproximación de cuatro términos en la ecuación (45), $T = T_1 + T_2 + T_3 + T_4 + T_{12} + T_{13} + T_{14} + T_{23} + T_{24} + T_{34}$ (línea a trazos), se presenta en la **figura 10**. Ambas curvas son casi idénticas en el rango de energías relevante, lo cual significa que $R_f(E)$ es también despreciable en este caso. En esta

misma figura incluimos, para comparar, la contribución de sumar cuatro términos puramente lorentzianos, $T^{Lor} = T_1 + T_2 + T_3 + T_4$ (curva punteada). Los resultados de este caso son muy similares a los del ejemplo anterior, aquí también se ve que la omisión de los términos de interferencia $T_{nm}(E)$ daría como resultado una reproducción inadecuada de T^{exa} .

Debemos enfatizar dos aspectos en relación a este último par de ejemplos: primero, las contribuciones de interferencia son necesarias para reproducir correctamente el cálculo exacto de la transmisión T ; y segundo, los parámetros de resonancia ϵ_n , Γ_n , ϕ_{nm} , e I_n son generados usando el formalismo de estados resonantes. Aquí recalamos también el hecho de que las ecuaciones para los anchos parciales de decaimiento, ecuaciones (48) y (49), y para la cantidad I_n , que aparecen en nuestras expresiones de $T(E)$ son exactas e independientes de la aproximación involucrada al ignorar la contribución de fondo, $R_f(E)$.

Los resultados de los ejemplos anteriores nos sugieren que el formalismo resulta muy apropiado para la descripción de resonancias traslapantes en superredes finitas. Para describir los estados traslapantes pertenecientes a una minibanda aislada se consideran únicamente los correspondientes términos resonantes de la minibanda en consideración. Así pues, si N denota el número total de barreras de la estructura, entonces

$$T = \sum_{n=1}^{N-1} T_n + \sum_{n < m}^{N-1} T_{nm}, \quad (56)$$

proporcionará la descripción apropiada con $T_n(E)$ y $T_{nm}(E)$ dadas, respectivamente

por las ecuaciones (46) y (50). Esta expresión generaliza a la fórmula usual B-W de una sola resonancia aislada, a una nueva que involucra la suma de resonancias pertenecientes a una minibanda aún cuando éstas presenten una interferencia significativa.

Con el propósito de ilustrar el comportamiento de los términos de interferencia $T_{nm}(E)$ como función de la energía E se incluye la **figura 11**. Resulta interesante observar que a pesar de la complejidad que exhiben los 6 términos en esta gráfica, proporcionan en conjunto la contribución precisa al coeficiente de transmisión para reproducir fielmente a T^{exa} , los 6 deben incluirse, si tan solo uno de ellos no se considerara, la reproducción del coeficiente de transmisión sería de muy mala calidad. Es decir, *todos* los términos T_{nm} son importantes cuando actúan en conjunto.

(v) Este último ejemplo ilustra una situación especial en la que al variar ciertos parámetros de una estructura simétrica ocurre una transición en la que dos picos de transmisión se traslapan a un grado tal que "se funden" en un sólo pico de altura inferior a la unidad ($T < 1$). Consideremos una estructura simétrica de triple barrera con parámetros típicos: altura de las barreras, $V_0 = 0.12 \text{ eV}$; espesores de las barreras, $b = b_1 = b_3 = 30 \text{ \AA}$; ancho de los pozos, $w_1 = w_2 = 160 \text{ \AA}$. La **figura 12** muestra una gráfica de los valores de la energía en los dos picos de transmisión de la primera minibanda (línea continua), E_{p1} y E_{p2} , obtenidas del cálculo exacto del coeficiente de transmisión usando el método de la matriz de transferencia como función del ancho de la barrera central b_2 . Podemos ver que las posiciones de los picos se juntan formando una sola curva, esto ocurre para cierto valor crítico de $b_2 = 68.5 \text{ \AA}$. La figura muestra también el comportamiento de las partes reales de los polos complejos de resonancia,

i.e. ϵ_1 y ϵ_2 , (línea a trazos) como función de b_2 . Estas curvas permanecen separadas una de la otra como es de esperarse por consideraciones de "repulsión de niveles".

Consideremos ahora la gráfica del coeficiente de transmisión $T(E)$ para energías alrededor de la primera minibanda, **figura 13**. Aquí hemos calculado $T = T_1 + T_2 + T_{12}$ usando las ecuaciones (46) y (50). Hemos escogido tres valores para el ancho de la barrera central b_2 , éstos son: 60\AA (línea punteada); 68.5\AA (línea a trazos); y 80\AA (línea continua), los que corresponden, respectivamente, a situaciones, antes, durante y después de que ocurre la transición a un solo pico de transmisión de altura menor que la unidad.

Este efecto fue notado por Yamamoto y colaboradores en 1991, en una estructura simétrica de triple barrera cuando el espesor de la barrera central se incrementaba hasta un valor de aproximadamente el doble del espesor de las dos barreras externas.

Podríamos decir que este hecho resulta un tanto sorprendente, pues en base a la experiencia que se tiene del comportamiento del coeficiente de transmisión en estructuras resonantes se esperaría que por ser simétrico el sistema, la transmisión en resonancia debería ser *total* ($T(\epsilon_n) = 1$), sin embargo, vemos que esto no es una regla que se cumpla en general. Además, nos damos cuenta que no necesariamente el número de picos de transmisión coincide siempre con el número de pozos de potencial, de manera que tampoco es una regla la correspondencia uno-a-uno entre picos y pozos como algunos suponen (Yamamoto *et al.*, 1991).

Resumiendo, hemos ilustrado en esta sección, a través de diversos ejemplos, lo apropiado que resulta este método para describir cualquier cantidad de resonancias traslapantes con las expresiones tipo BW que involucra más las contribuciones de

interferencia. Dichas expresiones son válidas para un perfil de potencial arbitrario.

IV.2 Cálculo de transmisión mediante el método de Shao y Porod.

A continuación se presentan los resultados de los cálculos en base al formalismo de Shao y Porod. Para fines de comparación los ejemplos que se utilizan son los mismos que los considerados en la sección anterior.

En la **figura 14** se muestra una gráfica del coeficiente de transmisión para la estructura utilizada en el ejemplo (ii) de la sección anterior utilizando la ecuación (54) evaluada con 20 pares de ceros-polos (curva a trazos), es evidente que la curva aproximada está muy lejos de reproducir el cálculo exacto (línea continua). Incrementando el número de pares a 80 se obtiene la gráfica de la **figura 15**, aunque notamos una mejora con respecto a la figura anterior, aún no se reproduce el cálculo exacto. Este resultado contrasta con el de la figura 2(b) del artículo de Shao y colaboradores (Shao *et al.*, 1995) en la cual presentan un ajuste perfecto con la curva exacta para 80 pares. *Este resultado pone en evidencia que dichos autores publicaron datos falsos con una curva alterada que no corresponde a la curva real que se obtiene de su formalismo.* En las **figuras 16 y 17** se presentan gráficas del coeficiente de transmisión utilizando el formalismo de Shao y colaboradores (línea a trazos) y se compara con el cálculo exacto (línea continua) para los potenciales de 3 y 5 barreras respectivamente considerados en los ejemplos (iii) y (iv) en la sección anterior. Para estos casos el método de Shao y colaboradores funcionó satisfactoriamente como es evidente al observar las gráficas. Como último ejemplo consideremos el sistema de triple barrera correspondiente al ejemplo (v) con un ancho de barrera central $b_2 = 80\text{Å}$, este es, el caso de triple barrera en donde vimos que correspondencia entre picos y polos no es uno a uno.

Como aquí se tiene $T < 1$, no se tienen ceros de reflexión por lo cual estrictamente no se puede aplicar el formalismo de Shao y colaboradores. Sin embargo evaluamos la fórmula, con los máximos de transmisión y no se reprodujo la curva exacta, tal como se ilustra en la **figura 18**. Este es un ejemplo que nos muestra una de las limitaciones de este formalismo, se trata de una limitación seria debido a que la mayoría de los procesos de transporte electrónico tienen lugar en situaciones donde $T < 1$, tal es el caso de sistemas con campo eléctrico aplicado.

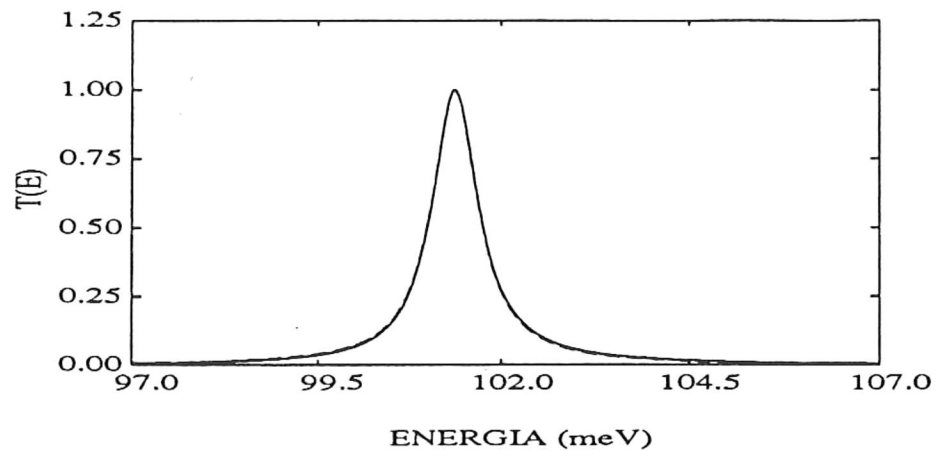


Figura 7. Gráfica del coeficiente de transmisión $T(E)$ vs energía E para una estructura de doble barrera alrededor de una resonancia aislada y delgada cuyos parámetros se especifican en el texto. La línea continua representa al cálculo exacto para el coeficiente de transmisión T^{exa} y la línea a trazos (superpuesta) representa al resultado del cálculo usando el formalismo de estados resonantes, Ec. (45) con $N=1$. Ambas curvas son casi indistinguibles, lo cual implica que el término de fondo $R_f(E)$ es despreciable en esta situación y entonces $T(E)$ es bien descrita por la fórmula (45).

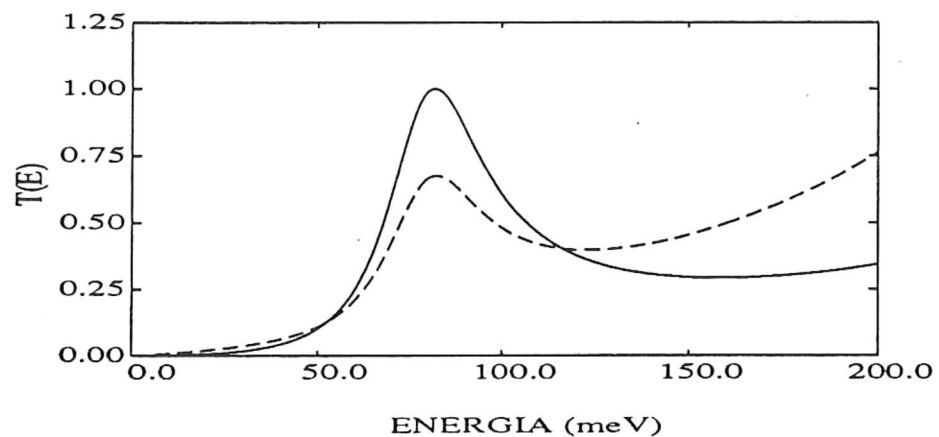


Figura 8. Gráfica del coeficiente de transmisión $T(E)$ vs energía para una estructura de doble barrera alrededor de una resonancia traslapante, cuyos parámetros se indican en el texto. La línea continua representa al cálculo exacto para el coeficiente de transmisión T^{exa} y la línea a trazos representa al resultado del cálculo usando la aproximación de dos términos $T=T_1+T_2+T_{12}$. Esto implica que la contribución de $R_f(E)$ a la fórmula (45) no es despreciable en este caso.

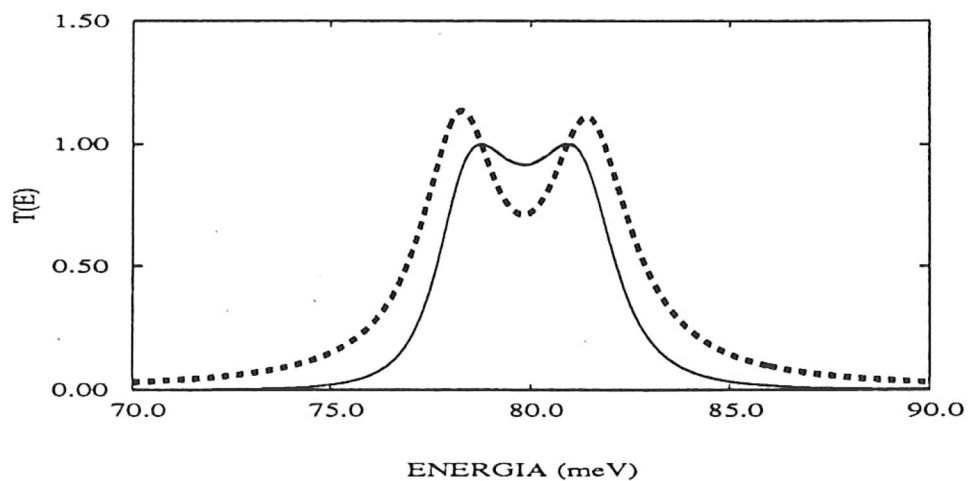


Figura 9. Gráfica del coeficiente de transmisión $T(E)$ vs energía para una estructura de triple barrera alrededor de las dos resonancias traslapantes correspondientes a la primera minibanda, cuyos parámetros se indican en el texto. La línea continua representa al cálculo exacto para el coeficiente de transmisión T^{exa} y la línea a trazos representa al resultado del cálculo usando la aproximación de dos términos $T=T_1+T_2+T_{12}$. Ambas curvas son casi idénticas implicando que el término $R_f(E)$ en la fórmula (45) da una contribución despreciable. La línea punteada representa al cálculo sin el término de interferencia, esto es, a la suma de dos términos puramente Lorentzianos $T^{\text{Lor}}=T_1+T_2$, el cual da una muy mala reproducción del coeficiente de transmisión exacto T^{exa} .

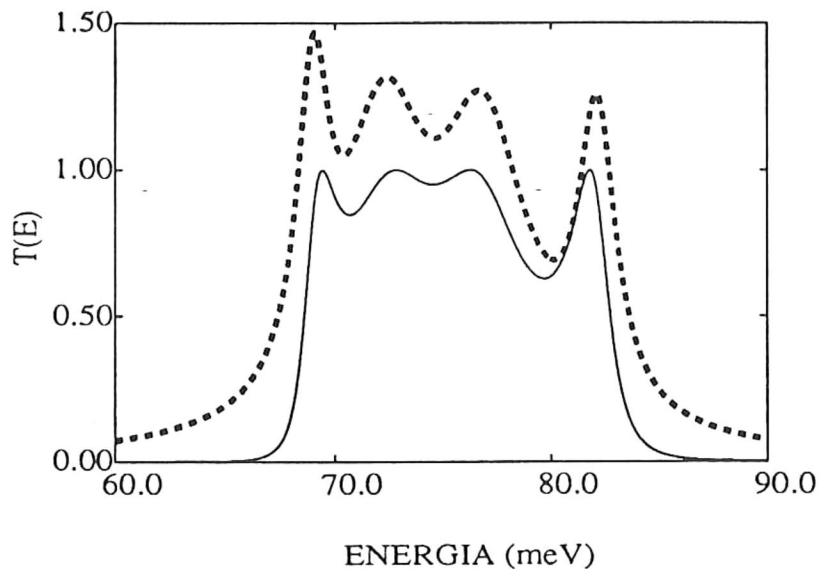


Figura 10. Gráfica del coeficiente de transmisión $T(E)$ vs energía para una estructura de cinco barreras alrededor de las cuatro resonancias traslapantes correspondientes a la primera minibanda, cuyos parámetros se indican en el texto. La línea continua representa al cálculo exacto para el coeficiente de transmisión T^{exa} y la línea a trazos representa al resultado del cálculo usando una aproximación de cuatro términos para $T(E)$, Ec. (8) con $N=4$. Ambas curvas son casi idénticas implicando que el término $R_f(E)$ en la fórmula (45) da una contribución despreciable. La línea punteada representa al cálculo sin los términos de interferencia, esto es, a la suma de cuatro términos puramente Lorentzianos $T^{\text{Lor}}=T_1+T_2+T_3+T_4$, el cual da una inadecuada reproducción del coeficiente de transmisión exacto T^{exa} .

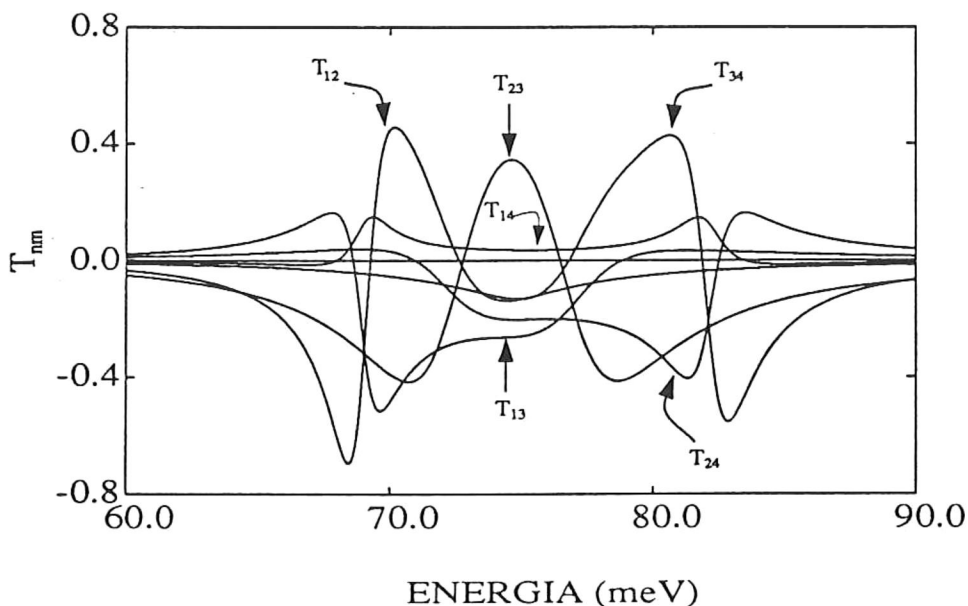


Figura 11, Gráfica de los términos de interferencia $T_{nm}(E)$ vs E correspondientes a los estados de la primera minibanda del sistema de cinco barreras discutido en el texto. Se indica con flechas a qué término corresponde cada curva. Puede apreciarse que $T_{nm} \rightarrow 0$ para energías fuera de la región de la minibanda, mientras que dentro de ésta pueden contribuir de manera importante al coeficiente de transmisión $T(E)$.

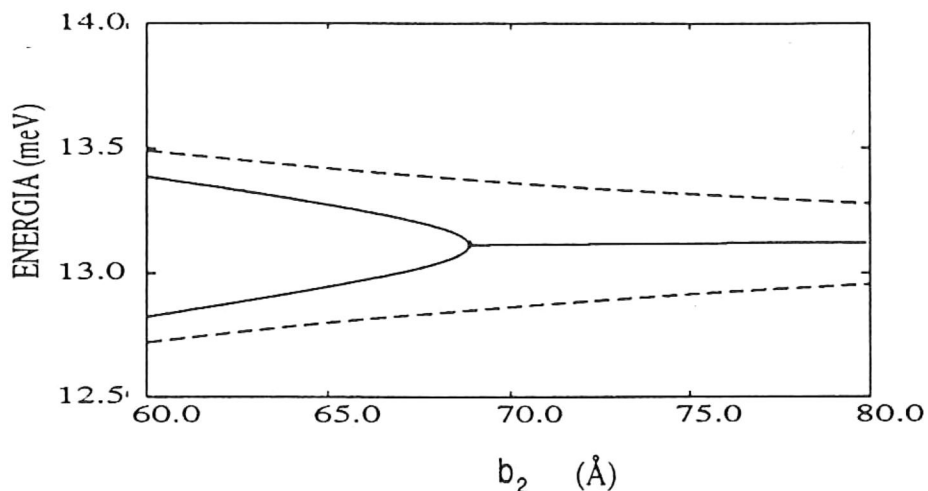


Figura 12. Gráfica de la variación de los picos de resonancia E_{p1} y E_{p2} de la primera minibanda (líneas continuas) obtenidas del cálculo exacto del coeficiente de transmisión vs ancho de la barrera central b_2 . Nótese que las posiciones de los dos picos se unen en el valor crítico $b_2=68.5$ Å. También se muestra la variación de las energías de resonancia ϵ_1 y ϵ_2 vs b_2 (líneas a trazos). Estas últimas permanecen separadas una de la otra, como se explica en el texto.

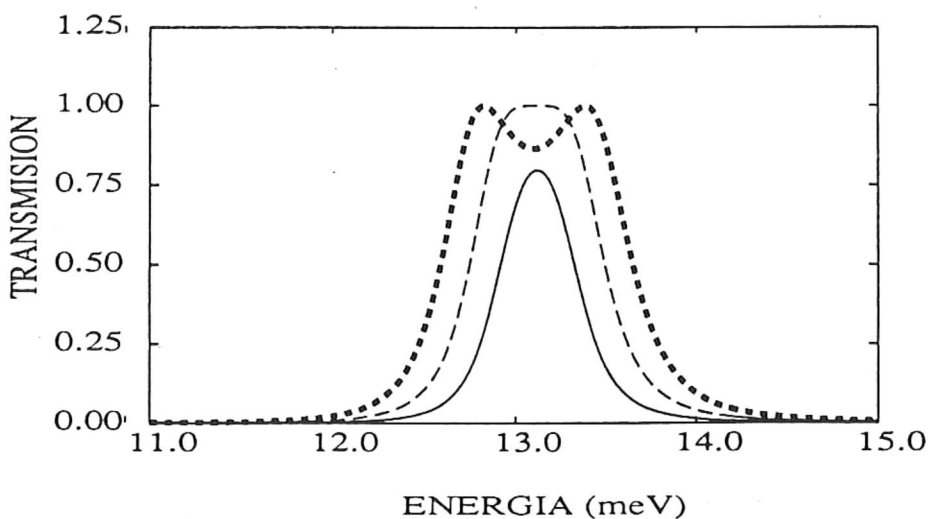


Figura 13. Gráficas del coeficiente de transmisión $T(E)$ vs energía E para un intervalo centrado en la primera minibanda de la estructura resonante de triple barrera para tres diferentes valores del ancho de la barrera central b_2 y todos los demás parámetros se mantienen fijos como en la figura anterior. Para $b_2=60$ Å (línea punteada) claramente se observan dos picos unitarios; El caso $b_2=68.5$ Å (línea a trazos) corresponde al valor de b_2 en el cual la transición de dos picos de transmisión a sólo uno, ocurre; Para $b_2=80$ Å (línea continua) existe una situación especial de traslape fuerte entre los dos estados resonantes de la minibanda que se manifiesta como un solo pico de transmisión con valor inferior a la unidad.

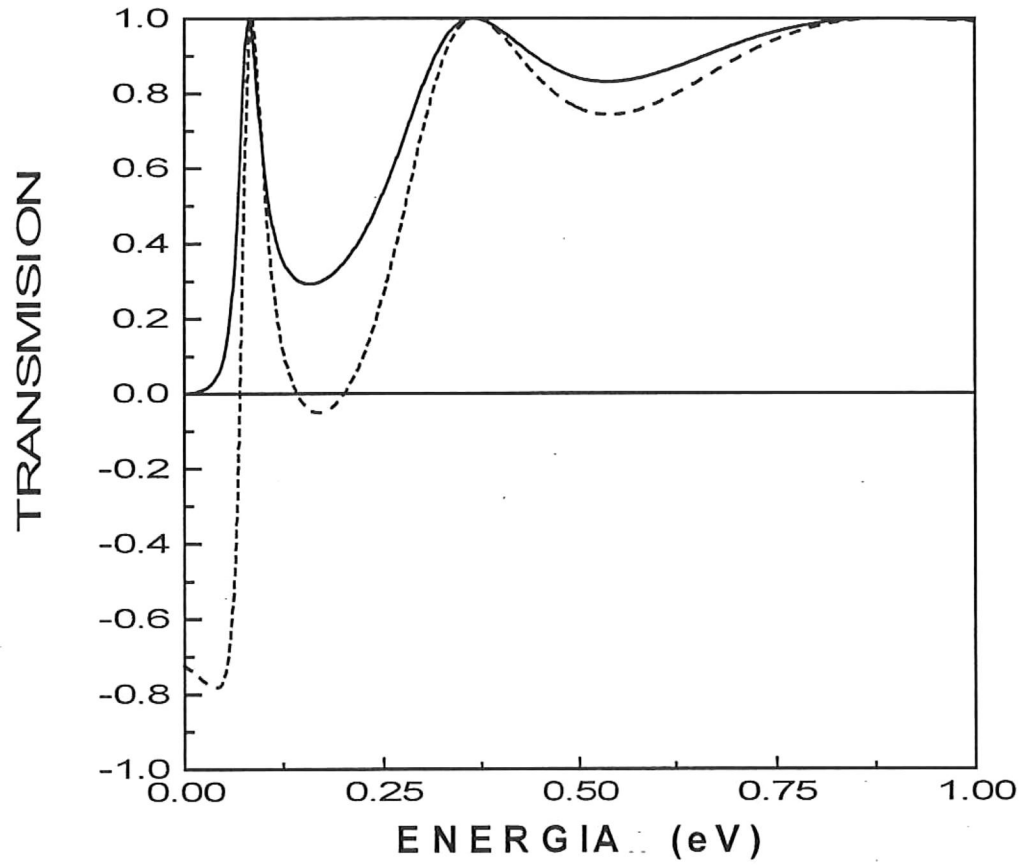


Figura 14. Gráfica donde se muestra el coeficiente de transmisión vs energía para una estructura de doble barrera cuyos parámetros se indican en el texto. La línea continua representa el cálculo exacto mientras que la línea a trazos representa el cálculo basado en el formalismo de Porod *et al* (1995), con 20 pares de ceros-polos.

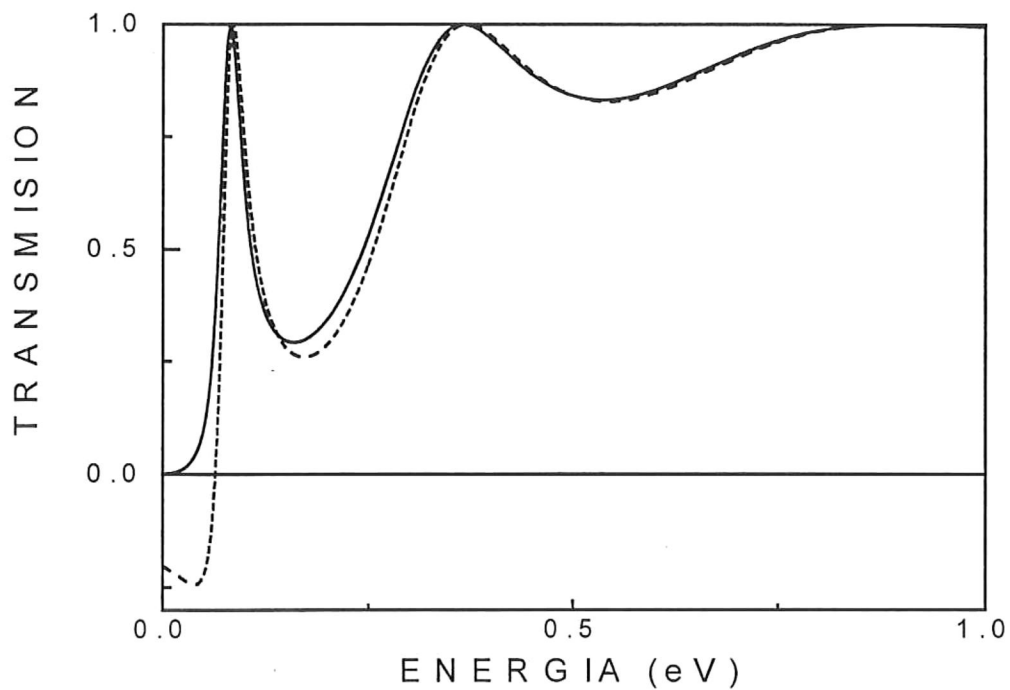


Figura 15. Gráfica del coeficiente de transmisión $T(E)$ vs energía para una estructura de doble barrera alrededor de una resonancia traslapante, cuyos parámetros se indican en el texto. La línea continua representa el cálculo exacto para el coeficiente de transmisión y la línea a trazos representa el cálculo en base al formalismo de Shao *et al* (1995) evaluado para 80 pares de ceros-polos.

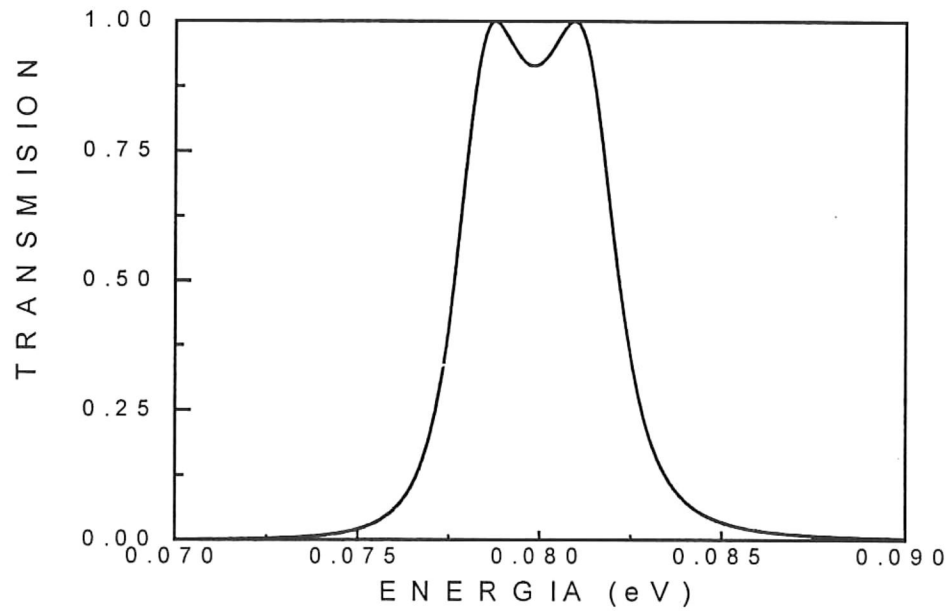


Figura 16. Gráfica del coeficiente de transmisión $T(E)$ vs energía para una estructura de triple barrera alrededor de dos resonancias traslapantes, cuyos parámetros se indican en el texto. La línea continua representa el cálculo exacto para el coeficiente de transmisión y la línea a trazos representa el cálculo en base al formalismo de Shao *et al* evaluada con 2 pares de ceros-polos.

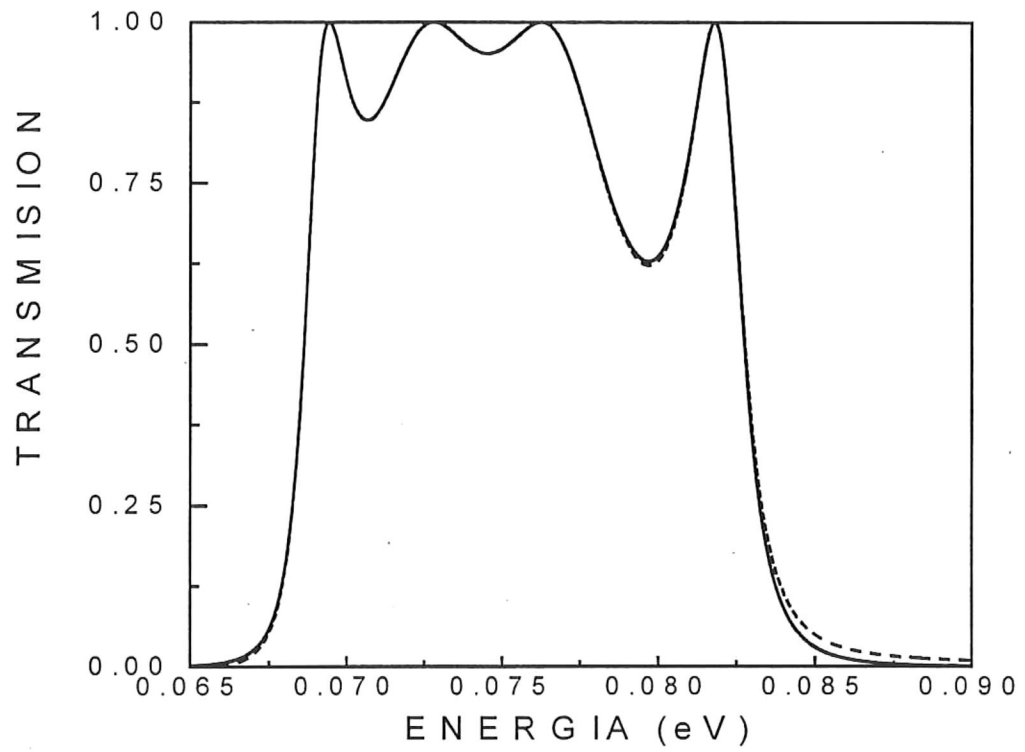


Figura 17. Gráfica del coeficiente de transmisión $T(E)$ vs energía para una estructura de cinco barreras alrededor de un traslape cuádruple fuerte, los parámetros del sistema se especifican en el texto. La línea continua representa el cálculo exacto para el coeficiente de transmisión y la línea a trazos representa el cálculo en base al formalismo de Shao *et al* evaluada con 4 pares de ceros-polos.

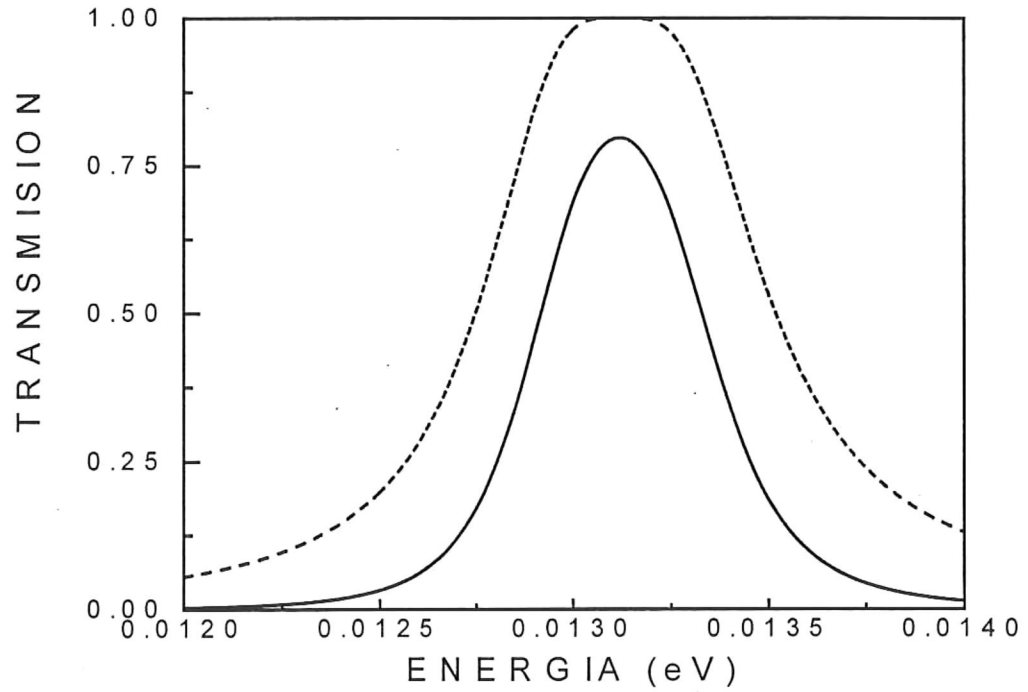


Figura 18. Gráfica del coeficiente de transmisión $T(E)$ vs energía para una estructura de triple barrera alrededor de un traslape fuerte, donde la correspondencia entre picos de transmisión y polos no es uno a uno. Los parámetros del sistema se especifican en el texto. La línea continua representa el cálculo exacto para el coeficiente de transmisión y la línea a trazos representa el cálculo en base al formalismo de Shao *et al* evaluada con 2 pares de ceros-polos.

V. CONCLUSIONES

Del estudio comparativo que se llevó a cabo en este trabajo sobre los enfoques de García-Calderón, Romo y Rubio (GRR) (García-Calderón *et al.*, 1994), con el de Shao y Porod (SP) (Shao *et al.*, 1995), se llegó a las siguientes conclusiones:

- Algunos de los resultados numéricos publicados por SP son falsos. Particularmente en el ejemplo de la figura 2(b) de su artículo, en donde presentan alteraciones en la gráfica de transmisión lo cual proporciona una imagen errónea de la precisión de su método. Este es un punto delicado que debe señalarse enérgicamente, ya que es precisamente este ejemplo en el que fundamentan su crítica al enfoque de GRR.
- En los casos de sistemas con tres o más barreras se verificó en cambio que ambos formalismos proporcionan una excelente descripción del coeficiente de transmisión, reproduciendo fielmente el cálculo exacto. Sin embargo existen ciertas estructuras de barrera múltiple que no poseen la estructura de pares *cero-polo* requeridos por el formalismo de Shao y Porod y por lo tanto su método no es aplicable en estas situaciones, estos son casos en los que dicho formalismo exhibe sus limitaciones. El método de GRR en cambio describe con gran precisión estas situaciones de traslape fuerte (Romo *et al.*, 1994) en las que la correspondencia entre polos de transmisión y ceros de reflexión no es uno a uno.
- El método de SP *no se aplica* a la descripción de potenciales asimétricos, ya que en estos casos, en general, $T < 1$ aún en resonancia, y en consecuencia no hay ceros de reflexión. El método de GRR se aplica a potenciales con perfil

arbitrario, esto incluye por ejemplo situaciones con campo eléctrico aplicado (García-Calderón *et al.*, 1994).

En resumen podemos decir que la única ventaja del método de SP es que presenta una expresión más simple para el coeficiente de transmisión el cual no involucra los términos de interferencia y el término de fondo que aparecen en las expresiones de GRR. Pero carece de la versatilidad de este último para aplicarse a potenciales con perfiles arbitrarios. Es importante enfatizar que la mayoría de las situaciones físicas de interés corresponden a $T < 1$, por lo tanto la utilidad práctica de el formalismo de SP es muy limitada.

Otras aportaciones importantes de la investigación realizada en este trabajo son las siguientes:

- Se realizó un estudio sistemático del coeficiente de transmisión en la región de energías por encima de la barrera *i. e.* $E > V_0$, una región poco explorada. Se discutió la estructura y distribución de los picos de transmisión en función de los parámetros del potencial.
- Se trabajó en el problema del cálculo de polos de transmisión para la doble barrera a energías $E > V_0$ (una región complicada debido a la compleja distribución de los picos de transmisión) y
- Se encontró un generador de valores iniciales muy preciso que permite calcular cualquier cantidad de polos de transmisión para sistemas de doble barrera, a energías $E \gg V_0$.

- Se comparó el comportamiento de los polos y picos de transmisión para $E > V_0$ (una región complicada debido a la compleja distribución de los picos de transmisión), como función de variaciones en la anchura del pozo de una estructura de doble barrera, y se encontró que los primeros exhiben un comportamiento muy regular el cual contrasta con el de los picos de transmisión. Esto ilustra en particular que las posiciones de los picos de transmisión no guardan una correlación simple con la parte real de los polos de transmisión.

La importancia de estos resultados sobre el cálculo y comportamiento de picos y polos de transmisión es relevante en el estudio de otros aspectos del tunelaje, tal es el caso del estudio de *fenómenos transitorios* en una barrera de potencial, en donde, en principio se requiere el cálculo de polos en grandes cantidades (Villavicencio, 1999).

APENDICES

A. LAS ANCHURAS PARCIALES DE DECAIMIENTO

A continuación se presentará en forma breve cómo se definen las anchuras parciales de decaimiento. Las eigenfunciones resonantes dependientes del tiempo son de la forma $u_n(x, t) = u_n(x)e^{-iEt/\hbar}$, para un proceso elástico tenemos que la probabilidad se conserva

$$\frac{dJ(x, t)}{dx} + \frac{d\rho}{dt} = 0 \quad (\text{A.1})$$

esta es la ecuación de continuidad donde,

$$\rho = |u_n(x)| e^{-\Gamma_n t/\hbar} \quad (\text{A.2})$$

$$J(x, t) = J(x) e^{-\Gamma_n t/\hbar} \quad (\text{A.3})$$

integrando la ecuación (A.1) de 0 a L y se obtiene,

$$J_n(L) - J_n(0) = \frac{\Gamma_n I_n}{\hbar}. \quad (\text{A.4})$$

De esta ecuación se definen los anchos parciales de decaimiento

$$\Gamma_n = \frac{J_n(L)\hbar}{I_n} - \frac{J_n(0)\hbar}{I_n} = \Gamma_n^L + \Gamma_n^0 \quad (\text{A.5})$$

donde $I_n = \int_0^L |u_n(x)|^2 dx$, estas anchuras definidas en la ecuación (A.5) corresponden a la probabilidad de decaimiento en la derecha e izquierda respectivamente. Las anchuras parciales de decaimiento en función de las eigenfunciones resonantes u_n

$$\Gamma_n^0 = \frac{\hbar J_n(0)}{I_n} = \frac{\hbar^2 a_n |u_n(0)|^2}{m I_n} \quad (\text{A.6})$$

ya que $J(0) = -\frac{\hbar}{m} |u_n(0)|^2 a_n$, donde $k_n = a_n - ib_n$, análogamente para

$$\Gamma_n^L = \frac{\hbar J_n(L)}{I_n} = \frac{\hbar^2 a_n |u_n(L)|^2}{m I_n}. \quad (\text{A.7})$$

B. MATRIZ DE TRANSFERENCIA

En este apéndice veremos la definición y la obtención de la matriz de transferencia, así como algunas de sus propiedades utilizadas en la sección II.1.

(i) Consideremos un potencial unidimensional, finito, arbitrario, real y univaluado el cual vale

$$V = \begin{cases} V(x), & x < |l/2| \\ 0, & x > |l/2|. \end{cases} \quad (\text{B.1})$$

La función de onda asociada a una partícula con energía E debe ser solución a la ecuación de Schrödinger

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) - E \right] \Psi(x) = 0 \quad (\text{B.2})$$

si definimos $k = [2mE/\hbar^2]^{1/2}$ en la región $x < -l/2$ la función $\Phi_1(x) = e^{ikx}$ satisface la ecuación (B.2). Para la región $x > l/2$ la solución $\Phi_3(x)$ es necesariamente una combinación lineal de las soluciones independientes e^{ikx} y e^{-ikx} . Entonces tendremos las siguientes soluciones para las distintas regiones

$$\begin{aligned} \Phi_1(x) &= e^{ikx} & x < -l/2 \\ \Phi_3(x) &= F(k)e^{ikx} + G(k)e^{-ikx} & x > l/2 \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

de igual manera la función $\Phi_1'(x) = e^{-ikx}$ es solución para la región $x < -l/2$, entonces para la región $x > l/2$ las solución sería $\Phi_3'(x) = F'(k)e^{ikx} + G'(k)e^{-ikx}$.

La solución más general de la ecuación (B.2) para un valor dado de E es una combinación lineal de Φ y Φ' , o sea,

$$\Psi(k, x) = A\Phi(x) + A'\Phi'(x) \quad (\text{B.4})$$

en la región $x < -l/2$ la función de onda es entonces $\Psi_1(k, x) = A_1 e^{ikx} + A'_1 e^{-ikx}$ y en la región $x > l/2$ es

$$\Psi_3(k, x) = A_3 e^{ikx} + A'_3 e^{-ikx} \quad (\text{B.5})$$

donde

$$A_3 = F(k)A + F'(k)A' \quad (\text{B.7})$$

$$A'_3 = G(k)A + G'(k)A'. \quad (\text{B.8})$$

La definición de la matriz $M(k)$ es la matriz de 2×2

$$M(k) = \begin{pmatrix} F(k) & F'(k) \\ G(k) & G'(k) \end{pmatrix} \quad (\text{B.9})$$

mediante la cual podemos escribir las relaciones de A_3 y A'_3 de la siguiente manera

$$\begin{pmatrix} A_3 \\ A'_3 \end{pmatrix} = M(k) \begin{pmatrix} A_1 \\ A'_1 \end{pmatrix}. \quad (\text{B.10})$$

A esta matriz se le conoce como *la matriz de transferencia* del sistema. Sus elementos son en general funciones complejas de k que dependen de la forma del potencial en la región $x < |l/2|$. $M(k)$ nos permite relacionar las amplitudes de la función de estado en la región $x > l/2$ con las amplitudes de la función en la región $x < -l/2$.

(ii). Las propiedades de $M(k)$.

A continuación enunciaremos algunas de las propiedades de la matriz de transferencia (Azbel, *et al.* 1983).

(a) si $V(x)$ es real y si $\Psi(x)$ es solución de la ecuación de Schrödinger entonces $\Psi^*(x)$ también lo es (invarianza ante la inversión temporal), esta propiedad nos lleva

a la siguiente relación entre los elementos de la matriz $M(k)$

$$\begin{aligned} F^*(k) &= G'(k) \\ G^*(k) &= F^*(k) \end{aligned} \tag{B.11}$$

(b) $\det(M(k)) = |F(k)|^2 - |G(k)|^2 = 1$ (conservación de la corriente de probabilidad).

LITERATURA CITADA

- Azbel, M. Y. y M. Rubinstein. 1983. *Phase correlations in one-dimensional disordered systems*. Phys. Rev. Lett. **51**. 836.
- Breit, G. y E. Wigner. 1936. Phys. Rev. **49**. 519.
- Büttiker, M. 1988. IBM J. res. Dev. **32**. 63.
- Coon, D. D., K. M. S. V. Bandara y H. Zhao. 1989. Appl. Phys. Lett. **55**. 2453.
- Esaki, L. y R. Tsu. 1970. IBM J. Res. Dev. **14**. 61.
- Esaki, L. y R. Tsu. 1973. Appl. Phys. Lett. **22**. 562.
- García-Calderón, G. 1976. Nucl. Phys. A **261**. 130.
- García-Calderón, G. y R. E. Peierls. 1976. Nucl. Phys. A **265**. 443.
- García-Calderón, G. 1987. Solid State Commun. **62**. 441.
- 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. 1989. Solid State Commun. **71**. 237.
- García-Calderón, G. y A. Rubio. 1991. J. Appl. Phys. **70**. 4626.
- García-Calderón, G., A. Rubio y R. Romo. 1991. J. Appl. Phys. Lett. **69**. 3612.
- 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. 1993. *Description of resonant tunneling near threshold*. Phys. Rev. B. **50**. 15142.
- García-Calderón, G., R. Romo y J. A. Villavicencio. comunicación personal (UABC).
- Palka, B. P. 1991. *An introduction to Complex Function Theory* Springer-Verlag. Berlin.

- Porod, W., Z. Shao y C. S. Lent . 1993. *Resonance-antiresonance line shape for transmission in quantum waveguides with resonantly coupled cavities*. Phys. Rev. B **48**. 8495-8498.
- Porod, W. y Z. Shao. 1995. *Resonance formalism for the transmission probability of symmetrical multibarrier resonant-tunneling structures*. Phys. Rev. B **51**. 1931-1934.
- Price, P. J. 1988. Phys. Rev. B **48**. 17301.
- Romo, R. 1991. Tesis de Maestría. CICESE.
- Romo, R. y G. García-Caderón. 1994. *Strong overlap and trnasmission in triple barrier resonant structures*. Phys. Rev. B **49**. 14016.
- Romo, R. 1995. Tesis de Doctorado. CICESE.
- Stone, A. D. y P. A. Lee. 1985. Phys. Rev. Lett. **54**. 1196.
- Villavicencio, J. A.. 1994. Tesis de Maestría. CICESE.
- Villavicencio, J. A.. 1999. Tesis de Doctorado. CICESE.
- Weil, T. y B. Vinter. 1987. Appl. Phys. Lett. **50**. 1281.
- Yamamoto, H., Y. Kanie y K. Taniguchi. 1991. Phys. Status Solidi B **167**. 571.