

CAMPO MAGNÉTICO E INTERCAMBIO DE ESPÍN EN TRANSPORTE CUÁNTICO
PARA NANODISPOSITIVOS SEMICONDUCTORES

OBER LIZARDO HERNÁNDEZ ROSERO

UNIVERSIDAD DEL CAUCA
FACULTAD DE CIENCIAS NATURALES, EXACTAS Y DE EDUCACIÓN
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
INGENIERÍA FÍSICA
POPAYÁN
2008

CAMPO MAGNÉTICO E INTERCAMBIO DE ESPÍN EN TRANSPORTE CUÁNTICO
PARA NANODISPOSITIVOS SEMICONDUCTORES

OBER LIZARDO HERNÁNDEZ ROSERO

Trabajo de grado en la modalidad de trabajo de investigación presentado como requisito
parcial para optar al título de Ingeniero Físico

Director,

SERVIO TULIO PÉREZ MERCHANCANO. Ph.D

UNIVERSIDAD DEL CAUCA

FACULTAD DE CIENCIAS NATURALES, EXACTAS Y DE EDUCACIÓN

DEPARTAMENTO DE FÍSICA

INGENIERÍA FÍSICA

POPAYÁN

2008

Nota de aceptación

Firma del Jurado

Firma del Jurado

Popayán 1 de julio 2008

A la memoria de mi hermano

MARIN HERNÁNDEZ ROSERO

*Si empezamos con certezas, terminamos con dudas;
pero si empezamos con dudas
y somos pacientes con ellas,
terminamos con certezas.*

Francis Bacon

(1561-1626)

AGRADECIMIENTOS

A Dios por su guía en el camino.

A mis padres Manuel Antonio Hernández y Rosa Rosero.

*A mis hermanos: Javier, Nancy, Héctor, **Marin**, Margoth, Sonia, Elizabeth, Adys y Roberth.*

En especial y con sincera admiración a mi hermana Nancy, por su apoyo incondicional durante mi formación como profesional.

A mi tío Tarcisio Rosero, por su apoyo incondicional.

A una persona que ha significado una guía y fortaleza en el camino: William Andrés.

A mi orientador y director de trabajo de grado y del grupo de investigación SENUMA, Doctor Servio Tulio Pérez Merchancano.

A la Doctora Luz Elena Bolívar Martínez (jurado), por su apoyo y carisma en el desarrollo y culminación de este trabajo de grado y en el grupo.

A mis amigos: Magdalena, Pablo, Edwin Yulián, Julián, Juan Carlos, Lorena, Piedad, Alejandra, Ingrid, Miguel y Gustavo.

Al todo el grupo de investigación SENUMA.

Al departamento de física y sus profesores, y en especial al profesor Jorge Washington (jurado), Sonia Gaona, Jorge Rodríguez, Luis Fernando Echeverri y Pablo Javier Salazar.

Al Profesor Eduardo Rosero Pantoja, por su apoyo en el transcurso y desarrollo de este trabajo de grado.

Al profesor Gerardo Loaisa del departamento de matemáticas, por su colaboración en el desarrollo de este trabajo de investigación.

A todas las dependencias de la Universidad del Cauca, por su apoyo en las diferentes actividades que tuvieron que ver en mi formación como ingeniero físico y en el desarrollo de este trabajo de grado.

A toda mi familia.

CONTENIDO

	Pág.
CAPITULO 1: INTRODUCCIÓN.....	15
CAPITULO 2: EXACTITUD DE LA MASA EFECTIVA EN EL TUNELAMIENTO DE PORTADORES.....	23
2.1. MASA EFECTIVA DE LOS ELECTRONES EN LOS CRISTALES.....	23
2.2. MODELO DE KANE.....	25
2.3. CONDICIONES DE CONTORNO DE BENDANIEL-DUKE.....	27
2.4. ANÁLISIS DE RESULTADOS.....	32
CAPITULO 3: TUNELAMIENTO CUÁNTICO EN HETEOESTUCTURAS SEMICONDUCTORAS.....	34
3.1. INTRODUCCIÓN.....	34
3.2. TUNELAMIENTO EN UNA BARRERA PARABÓLICO.....	35
3.3. COEFICIENTE DE TRANSMISIÓN PARA UNA BARRERA DE POTENCIAL DE HYLLERAS AFECTADA POR PRESIÓN HIDROSTÁTICA.....	41
3.4. ANÁLISIS DE RESULTADOS.....	52
3.5. EFECTO DE PRESIÓN HIDROSTÁTICA, CAMPOS EXTERNOS E IMPUREZAS.....	53
3.6. ANÁLISIS DE RESULTADOS.....	58
CAPITULO 4: TRANSPORTE CON EFECTOS DE ESPÍN.....	60
4.1. EFECTO ZEEMAN.....	60
4.2. ACOPLAMIENTO ESPÍN ORBITA.....	63
4.3. EFECTO RASHBA.....	65
4.4. ACOPLAMIENTO ESPÍN ORBITA EN UN PUNTO CUÁNTICO.....	69

4.5. ACOPLAMIENTO ESPÍN ORBITA Y EL EFECTO ZEEMAN.....	75
4.6. RESULTADO Y ANALISIS.....	79
4.7. DEPENDENCIA DE ESPÍN EN EL TUNELAMIENTO.....	82
4.8. RESULTADOS Y ANÁLISIS.....	86
CONCLUSION.....	92
PERSPECTIVAS.....	98
BIBLIOGRAFÍA.....	97
ANEXO A.....	100
ANEXO B.....	109
ANEXO C.....	132
PUBLICACIONES.....	154

LISTA DE FIGURAS

	Pág.
Figura 1. Estructura de un material crecido con Arsenuro de Galio (GaAs), Arsenuro de Galio Aluminio (AlGaAs) y Arsenuro de Galio(GaAs).....	16
Figura 2. Celda unitaria de estructura Blenda de Zinc.....	17
Figura 2.1. Coeficiente de transmisión con las condiciones de frontera contorno de BenDaniel-Duke.....	31
Figura 3.1. Modelo de la barrera de potencial de forma parabólica.....	36
Figura 3.2. Modelo de una barrera de potencial de forma parabólica con los parámetros del problema.....	37
Figura 3.3. Esquema de una barrera de potencial tipo Hylleras.....	44
Figura 3.4. Esquema de una barrera de potencial parabólica normalizada.....	45
Figura 3.5. Comparación del coeficiente de transmisión de una barrera rectangular y una barrera tipo Hylleras.....	52
Figura 3.6. Barrera de potencial teniendo en cuenta campo eléctrico, campo magnético, presión hidrostática e impureza.....	53
Figura 3.7. Variación del coeficiente de transmisión cuando varía la presión hidrostática y la concentración del material.....	58
Figura 3.8. Transmisión en función de la presión hidrostática y del campo magnético.....	59
Figura 4.1. Variación del vector de onda a medida que varia la energía del electrón.....	79
Figura 4.2. Variación de la energía del electrón en función de la fuerza de acoplamiento espín orbita.....	80
Figura 4.3a. Orientación del espín.....	81
Figura 4.3b. Posible configuración del espín en la onda incidente.....	81
Figura 4.4. Posible configuración del espín en la onda incidente.....	81

Figura 4.5. Variación del coeficiente de transmisión en función del energía aplicada con polarización de espín hacia arriba (+), con campo magnetico externo de 0.1T.	86
Figura 4.6. Variación del coeficiente de transmisión en función del energía aplicada con polarización de espín hacia arriba (+), con campo magnético externo de 0.2 T	87
Figura 4.7. Variación del coeficiente de transmisión en función del energía aplicada con polarización de espín hacia abajo (-), con campo magnético externo de 0.1 T	88
Figura 4.8. Variación del coeficiente de transmisión en función del energía aplicada con polarización de espín hacia abajo (-), con campo magnético externo de 0.2T	88
Figura 4.9. Comparación del coeficiente de transmisión con las dos polarizaciones de espín en la transmisión con campo magnético externo de 0.1 T	89
Figura 4.10. Comparación del coeficiente de transmisión con las dos polarizaciones de espín en la transmisión con campo magnético externo de 0.2 T	90
Figura 4.11. Variación de la eficiencia de polarización en función de la energía aplicada.	91

LISTA DE ANEXOS

ANEXO A.....	100
MODELO DE KANE	
CONDICIONES DE CONTORNO DE BENDANIEL-DUKE	
MASA EFECTIVA DE LOS ELECTRONES EN UN CRISTAL	
ANEXO B.....	109
TUNELAMIENTO EN UNA BARRERA PARABÓLICA	
COEFICIENTE DE TRANSMISIÓN PARA UNA BARRERA DE POTENCIAL DE HYLLERAS AFECTADA POR PRESIÓN HIDROSTÁTICA.	
ANEXO C.....	132
EFECTO ZEEMAN	
ACOPLAMIENTO ESPÍN ORBITA	
EFECTO RASHBA	
ACOPLAMIENTO ESPÍN ORBITA EN UN PUNTO CUÁNTICO	
ACOPLAMIENTO ESPÍN ORBITA Y EL EFECTO ZEEMAN	
DEPENDENCIA DEL ESPÍN EN EL TUNELAMIENTO	

OBJETIVOS

OBJETIVO GENERAL

Realizar estudios de intercambio de espín en una barrera de potencial rectangular y parabólica, en presencia de campos magnéticos externos, en materiales tipo semiconductor, tales como el Arsenuro de Galio (GaAs) dopado con Aluminio (Al).

OBJETIVOS ESPECÍFICOS.

Caracterizar mediante un estudio teórico y computacional la estructura electrónica de un sistema de barrera rectangular y parabólica simétrica.

Calcular el coeficiente de transmisión en nano dispositivos semiconductores de barrera de potencial.

Considerar la presencia de campos magnéticos externos y espín, con el propósito de describir los cambios observados, a través del coeficiente de transmisión.

Comparar nuestros resultados obtenidos de la barrera rectangular y parabólica con los datos teóricos y experimentales aportados por otros investigadores tanto en el ámbito nacional como internacional.

RESUMEN

El tema central de este proyecto de investigación, es el estudio teórico del tunelamiento resonante en una barrera rectangular y parabólica, bajo ciertas consideraciones en las cuales se involucran diferentes formalismos matemáticos que ayudan a modelar características físicas del nanodispositivo semiconductor, con el propósito de determinar la eficiencia y el desempeño de este mecanismo cuántico. Algunos argumentos físicos que aquí se han considerado son: el acoplamiento espín orbita, la presión hidrostática, campos magnéticos, impurezas y el espín de los electrones. En este último caso, se tiene en cuenta el efecto Rashba aplicable a los nanodispositivos semiconductores.

Se estudia en primera instancia, un sistema convencional, es decir, un sistema de barrera de potencial rectangular simétrica, afectada por campos magnéticos. Aquí, se presenta el comportamiento de la función de onda y la cuantización de la energía con el fin de obtener los coeficientes de reflexión y transmisión. Este estudio se afronta a través del formalismo físico-matemático de funciones especiales, en particular las funciones de Airy, las funciones hipergeométricas y las de Bessel, las cuales permiten incluir de manera apropiada los efectos de campos magnéticos.

Posteriormente, se presenta el comportamiento de los electrones en un pozo de potencial afectado por el espín de los electrones y campos magnéticos uniformes. En esta sección, se usa el formalismo de Dresselhaus, así como el formalismo físico-matemático de las funciones de Bessel de primera y segunda especie, el cual permite obtener el Hamiltoniano efectivo en términos de la masa efectiva y de las matrices de Pauli, facilitando establecer una dependencia funcional del tunelamiento con la orientación del espín. De igual forma, se determinan los coeficientes de transmisión, y los cambios físicos substanciales suscitados por las transformaciones geométricas causadas en la estructura. Los dos modelos y formalismos antes mencionados, facilitan observar el comportamiento de los coeficientes de transmisión en función de los diferentes fenómenos físicos que aquí se tienen en cuenta.

Igualmente en este trabajo de investigación se tiene en cuenta el tunelamiento cuántico de un electrón en una barrera bajo diferentes circunstancias que involucra la geometría de la barrera parabólica, la cual tiene en cuenta diferentes parámetros tales como, el teorema de Bloch para redes cristalinas periódicas, las matrices de Pauli para los efectos de espín, el efecto Rashba presente en el mismo y las condiciones de BenDaniel-Duke que permiten estudiar de manera mas detallada la interfase física entre los materiales que conforman el nanodispositivo semiconductor. Las propiedades electrónicas de estos materiales son significativas a estas escalas, siendo relevantes la variación de la masa dentro del cristal y la introducción de impurezas dentro de la barrera. Así también, la presencia de factores externos como la presión hidrostática y de campos externos que subrayan y destacan aun más la importancia de estos fenómenos en el dispositivo aquí investigado evidenciando la naturaleza discreta del electrón.

El modelo aquí propuesto de acuerdo con la literatura moderna, permite la posibilidad de contribuciones significativas en la electrónica actual y promete un aporte importante en el entendimiento físico y tecnológico de la estructura electrónica de estos nanodispositivos. En este sentido trabajos teórico-experimentales y de implementación, han comenzado a ser tratados ampliamente, prueba de ello son las diversas publicaciones científicas realizadas en los últimos dos años entre las que se pueden numerar las cuatro publicaciones realizadas de este trabajo de investigación.

CAPITULO 1. INTRODUCCION

Al comienzo de la década de los 70, Leo Esaki y Raphael Tsu [1,2], predijeron la existencia de nuevos dispositivos basados en sistemas artificiales de semiconductores, donde propusieron la existencia de estructuras semiconductoras encontradas en la naturaleza, la idea de fabricar un material en que se pusiera de manifiesto el efecto cuántico de tamaño, y su aplicación (a la fabricación de nanodispositivos) fue hecha por Esaki y Tsu, quienes vislumbraron la posibilidad de producir una súper red de materiales semiconductores, mostrando teóricamente la nuevas propiedades de estos recientes materiales.

La mayor parte de los sistemas de láminas de semiconductores estudiados están basados en *GaAs*, y la aleación $Al_xGa_{1-x}As$. Esto se debe, por un lado, a que se conoce mucho la cinética de los materiales tipo *III-V* que la de otros semiconductores compuestos; por otro lado, para las aplicaciones prácticas es necesario que el semiconductor tenga una discontinuidad de banda grande, alta movilidad y que su crecimiento con impurezas tipo *p* y *n* sea fácilmente controlable. La condición de discontinuidad de banda grande elimina muchos semiconductores elementales, salvo el Boro *B*, el Fósforo *P* y el Selenio *Se*; el requisito de la movilidad alta elimina este último y casi todos los semiconductores compuestos; solo el *GaAs* y el *InP* tienen movilidades mayores que el *Si*. El Fósforo es muy reactivo, esto deja el *GaAs* y su aleación $Al_xGa_{1-x}As$ como mejores candidatos para estos propósitos, para los cuales se utilizan emparedados como se muestra en la figura 1.

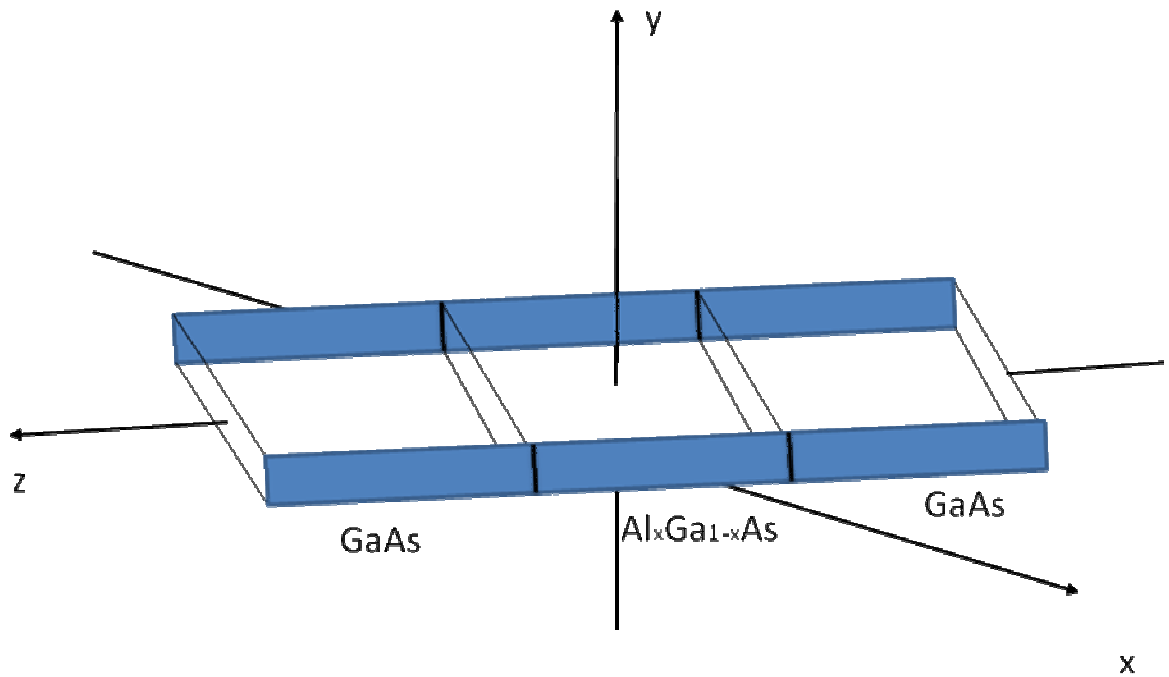


Figura 1. Estructura de un material crecido con Arsenuro de Galio (*GaAs*), Arsenuro de Galio Aluminio (*AlGaAs*) y Arsenuro de Galio (*GaAs*)

Además sus parámetros de red son tan similares que pueden construirse láminas de espesores grandes sin que las tensiones generen defectos en la heteroestructura; lo que conlleva a que el transporte se garantice en la heteroestructura.

Hay dos incidencias que se distinguen en el transporte de nanoestructuras, uno es la naturaleza discreta de la carga del electrón que evidencia la misma característica simple del electrón y la otra es la que involucra la preservación de la fase coherente de la onda del electrón sobre cortas dimensiones.

La estructura cristalina de los semiconductores tipo *III-V* es en general compleja aunque puede visualizarse mediante superposición de estructuras más sencillas. Las estructuras más comunes son, la del diamante y la Zinc-Blenda, que tienen los semiconductores comunes como el Si y Ge.

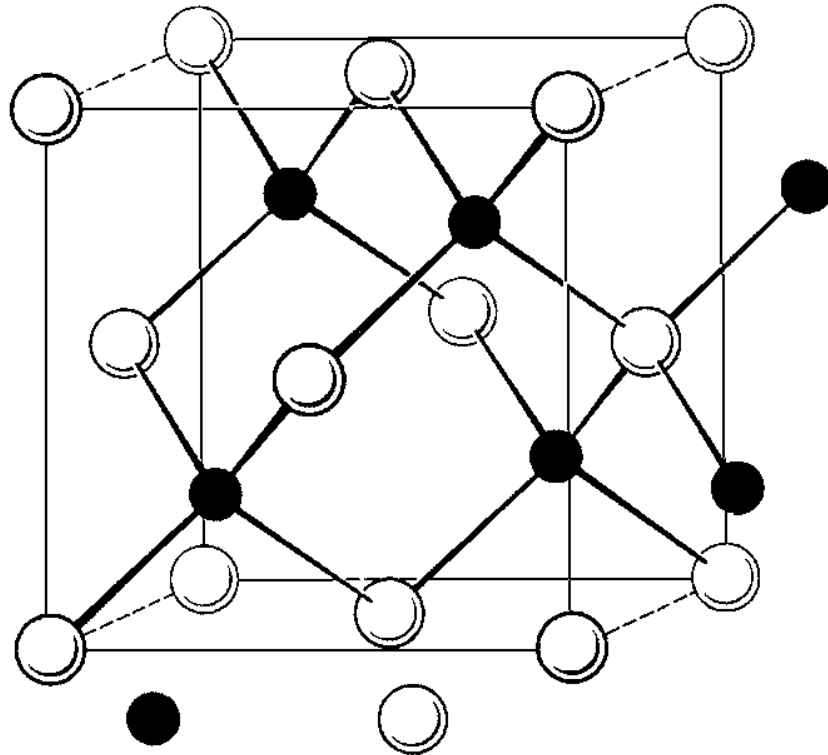


Figura 2. Celda unitaria de una estructura Blenda de zinc

En estas redes cristalinas cada átomo se encuentra unido a otros cuatro mediante enlaces covalentes con simetría tetraédrica. Se requiere que posean unas estructuras cristalinas únicas, es decir, que sea monocristal, siendo imprescindible la forma monocristalina, cuando se requiere la fabricación de circuitos integrados y dispositivos electro-ópticos (láser, leds).

En sistemas nanoestructurados un campo magnético puede tener efectos profundos sobre las propiedades electrónicas y de transporte, mas aun si se considera la interacción del acoplamiento espín orbita en el tunelamiento; para tener en cuenta este efecto, es importante distinguir las dos clases de interacción espín orbita, que es el efecto Dresselhaus [10] y el efecto Rashba [11].

Recientes publicaciones han propuesto la manipulación del termino linear de Rashba y el termino cubico de Dresselhaus [14,15], en la interacción espín orbita. La cancelación del termino lineal lleva a un desvío difuso en el transistor, en contraste al operador balístico del dispositivo, también se ha reportado sobre la evolución de la orientación del espín con un momento transversal 2D y explorado el tunelamiento a través de una barrera con diferentes materiales III-V, el cual es conducido solo por el termino lineal Dresselhaus k_{II} [20].

En las pasadas dos décadas estructuras semiconductoras bidimensionales han sido objeto de estudio de manera continua y detallada en forma teórica y experimental, dando lugar a algunas aplicaciones tecnológicas que han permitido la producción de varios dispositivos como por ejemplo dispositivos fotónicos entre otros. El interés en el efecto de tamaño presente en estructuras de baja dimensionalidad ha sido preliminarmente motivado por el hecho de que propiedades electrónicas y ópticas de estas estructuras, que han sido mejoradas por la reducción de la dimensionalidad, permitiendo que la información y el flujo de transporte sean más rápido. Se espera que algunas propiedades sean fuertemente transformadas por la reducción de la dimensionalidad de sistemas bidimensionales a sistemas cuasi-unidimensionales o hilos cuánticos (Qw's). En este sentido, técnicas como la Molecular-Beam Epitaxy (MBE) y Metal-Organic Chemical Vapor Deposition y diferentes estudios teóricos se han reportado. Igualmente estudios teóricos de propiedades de transporte, ópticas y electrónicas que involucran impurezas y excitones también han sido realizadas. Estos últimos estudios en Qw's muestra que el estudio físico del comportamiento de impurezas en estos sistemas es un estudio importante por varias razones: La reducción de la dimensionalidad puede ser controlada cambiando el radio del

hilo cuántico. Un electrón ligado a una impureza en el centro del QW's nunca consigue la superficie del hilo cuando dicho dispositivo es muy fino. Lo que conlleva a obtener resultados similares a los que se observan en materiales en bloque (o tridimensionales). Para tamaños intermedios de dicha estructura el electrón confinado y ubicado en la barrera de potencial se comporta de una manera fenomenal produciendo propiedades exóticas en dichos mecanismos cuánticos. Esto ha permitido concluir que la reducción de la dimensionalidad incrementa la longitud efectiva de la interacción coulombiana, lo cual da pie al siguiente argumento: un electrón en un sistema de dimensionalidad reducida puede moverse únicamente en un muy pequeño espacio y pasa el mayor tiempo posible ligado a la impureza. Por tanto la energía de enlace del electrón debe ser mucho mayor en la medida que la dimensionalidad disminuye.

Actualmente se ha realizado estudios más detenidos de este fenómeno físico y se ha permitido mostrar que la respuesta del hilo cuántico a voltajes finitos aplicados parece ser una prueba fundamental que proviene de la naturaleza física del líquido de Luttinger de Tomonaga (TLL). Esto es debido a que dentro y fuera del hilo las interacciones coulombianas modifican las propiedades de transporte tales como la densidad de corriente y el ruido. Experimentalmente, algunos trabajos han reportado el comportamiento TLL teniendo en cuenta diferentes longitudes de estos dispositivos y han mostrado cambios peculiares en las propiedades de transporte para hilos simétricos y asimétricos.

Así mismo el creciente interés en la manipulación del espín del electrón en diversos sistemas debido a su gran potencialidad de aplicaciones tecnológicas, algunos modelos teóricos y experimentales se han venido implementando en sistemas de baja dimensionalidad con el propósito de estudiar estas propiedades físicas. En particular en QW's se ha mostrado que la interacción espín-orbita que acopla el momento de la partícula y el espín del electrón, conduce a varios desarrollos interesantes dada la claridad que

proporciona esta interacción al estudio de efecto Rashba y a las propiedades de transporte para electrones no interactuantes. Sin embargo, estudios mas detallados han logrado avances substanciales para efectos combinados de acoplamiento espín orbita e interacción electrón-electrón, permitiendo que estos sistemas sean considerados importantes elementos o esquemas para computación cuántica ya que tales mecanismos permiten explorar y explotar la longitud de coherencia de los electrones que actúan como qubits, propagándose a través de dichos hilos. La rotación simple de dichos qubits puede constituir una ventana entre dos o mas QW's capaz de transferir un paquete de onda de un canal a otro. O sea, que estas estructuras pueden ser usadas como compuertas cuánticas para transferir información sin exceder los limites de la coherencia.

Hace más de veinte años los sistemas de baja dimensionalidad de tamaño nanométrico han definido una nueva área de investigación en física de la materia condensada, que han involucrado técnicas de procesamiento basadas en semiconductores, y a su vez han permitido la creación artificial de confinamiento cuántico únicamente con algunos electrones. Tales sistemas fermiónicos tienen muchas características en común con átomos, aunque ellos sean producto de la fabricación en los laboratorios. Usualmente son llamados puntos cuánticos (qubits), refiriéndose a su confinamiento cuántico de los portadores en las tres dimensiones espaciales. Una forma común de fabricar puntos cuánticos es restringir el gas de electrones bidimensional lateralmente en la heteroestructura semiconductor a través de voltajes electrostáticos o técnicas de "Etching", para diseños verticales. Esto genera un potencial "Bowl-Like" en el cual los electrones de conducción son atrapados.

En resumen, tras la alta potencialidad tecnológica de estos sistemas muchos estudios experimentales se han venido realizando en este sentido, entre los que se puede citar están, Maksym and Chakraborty, 1990; Chakraborty, 1992, 1999; Kastner, 1992, 1993; Reed, 1993; Alivisatos, 1996; Ashoori, 1996; McEuen, 1997; Kouwenhoven and Marcus, 1998;

Gammon, 2000 quienes han hecho fabricaciones análogas a las existentes en la naturaleza y han definido paradigmas de física de muchos cuerpos: átomos, núcleos y mas recientemente clusters metálicos o gas atómicos atrapados (ver Nobel lectures by Cornell, 2001, Ketterle, 2001). Los puntos cuánticos adicionan otro paradigma. Sus propiedades de cambiar en forma controlada los voltajes, cuando cambia su geometría o los campos magnéticos aplicados. Su realización tecnológica genera acceso a efectos cuánticos en sistemas de baja dimensionalidad de dimensiones finitas las cuales están siendo ampliamente exploradas.

Posterior al suceso de la fabricación y control de estructuras semiconductoras mesoscopicas, las cuales son típicamente de orden de unos cientos de nanómetros en tamaño y que pueden confinar cientos de electrones, muchos grupos se enfocaron en una mayor miniaturización de dichos dispositivos. Un corte abrupto se dio a esta secuencia cuando experimentalmente se descubrió que la fabricación de puntos cuánticos verticales permitía el estudio de fluctuaciones de carga a través de los espectros de energía (Tarucha et al., 1996), a su vez, las medidas en átomos artificiales admitieron una mayor agudeza física en problemas de muchos cuerpos como el caso de sistemas fermiónicos finitos Kouwenhoven, Austing, and Tarucha, 2001. En un futuro no muy lejano, se espera más sorpresas a través del análisis de átomos artificiales.

El campo de la física de nanoestructuras ha crecido rápidamente en los años recientes, y muchas teorías han sido implementadas dados los resultados experimentales que se han obtenido. Es por eso, que en este trabajo de grado consideramos relevante realizar una introducción que revisa lo más importante que se ha generado hasta el momento en puntos cuánticos que involucra técnicas de fabricación métodos teóricos para átomos artificiales que pueden contener muchos electrones.

Igualmente, durante varios años de investigación en física de sistemas de baja dimensionalidad se ha venido explorando un nuevo campo de investigación, la espintrónica, campo multidisciplinario cuya temática central es la manipulación activa de los grados de libertad del espín en materiales semiconductores. El control de espín es entonces un control de la población y de la fase del espín en un ensamble de partículas, o una manipulación coherente de uso pocos portadores. De manera general la espintrónica amplía el entendimiento de la interacción entre el espín de las partículas y su entorno y hace que la fabricación de dispositivos pueda manipular este conocimiento. Estudios básicos en espintrónica incluye transporte de espín en materiales electrónicos para suscitar un mejor entendimiento de la dinámica y la relajación de espín. Esto ha conducido a trabajar en una gran variedad de fenómenos espectaculares e interesantes. Debido a que este gran interés ha tocado parte de este trabajo se considera que los resultados aquí generados a través del estudio de espín en un punto cuántico contribuyen al entendimiento de esta temática y puede proporcionar bases para el desarrollo de modelos que se puedan implementar en campo de la computación cuántica, que es hacia adonde apunta la investigación en “spintronics”.

CAPITULO 2: EXACTITUD DE LA MASA EFECTIVA EN EL TUNELAMIENTO DE PORTADORES.

2.1 MASA EFECTIVA DE LOS ELECTRONES EN LOS CRISTALES

La masa efectiva es la masa aparente que una partícula tiene en un cristal según el modelo semiclásico de transporte. Dado que, bajo ciertas condiciones, los electrones y los huecos de un cristal se comportan como si estuvieran libres en el vacío pero con una masa diferente.

La energía de un electrón en un estado próximo al fondo de la banda está dada por.

$$\varepsilon(\delta) = \varepsilon_1(-) + \frac{\hbar^2}{2m^*} \delta^2, \quad (2.1)$$

$\varepsilon(\delta) \rightarrow$ energía de un electrón en un estado próximo al fondo de la banda.

$\delta \rightarrow$ vector de onda medido a partir del límite de la zona

$$m^* = \frac{m}{1 - \left(\frac{2\lambda_1}{U_1} \right)}, \quad (2.2)$$

$U_1 \rightarrow$ se elige de tal forma que $U(x) = 2U_1 \cos(G_1 x)$

$U_1 \rightarrow$ se toma como negativo con el fin de tener un potencial atractivo en $x = 0$

La ecuación (2.1) sugiere que un electrón en un cristal puede comportarse como si tuviera una masa diferente que la de un electrón libre.

Lo importante es que un electrón en un potencial periódico se acelera con respecto a la red bajo la acción de un campo magnético o eléctrico, como si su masa fuera la efectiva que se acaba de definir.

Tomando la velocidad de grupo.

$$V_g = \frac{1}{\hbar} \frac{d\varepsilon}{dk} = \hbar^{-1} \frac{d\varepsilon}{dk} \quad (2.3)$$

Utilizando su derivada y la fuerza F en función del vector de onda k , tenemos que la aceleración del sistema viene dado por:

$$\frac{dV_g}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d^2\varepsilon}{dk^2} \frac{F}{\hbar} \quad (2.4)$$

Entonces podemos ahora expresar la fuerza de la siguiente forma:

$$F = \left(\frac{d^2\varepsilon}{dk^2} \right)^{-1} \hbar^2 \frac{dV_g}{dt} \quad (2.5)$$

Definimos la masa como una función de la variación del vector de onda en el cristal, como se indica en la ecuación (2.5), así:

$$m = \frac{\hbar^2}{d^2\varepsilon/dk^2} \quad (2.6)$$

Y así la masa efectiva se define como:

$$m^* = \left(\frac{d^2\varepsilon}{dk^2} \right)^{-1} \hbar^2 \quad (2.7)$$

Si la energía es función cuadrática de k , entonces.

$$\varepsilon = \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right) k^2 \quad (2.8)$$

2.2 MODELO DE KANE

Consideremos la función de Bloch, para una red cristalina de la siguiente forma:

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_n} \psi_\lambda(\vec{k}, \vec{r}) = \psi_\lambda(\vec{k}, \vec{r} + \vec{R}_n) \quad (2.9)$$

Para satisfacer esta relación tomamos la siguiente relación de prueba.

$$\psi_\lambda(\vec{k}, \vec{r}) = \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_n}}{L^{3/2}} u_\lambda(\vec{k}, \vec{r}) \quad (2.10)$$

Que se conoce como la función de onda de Bloch, donde L^3 representa el volumen del cristal y λ es el auto valor de energía.

\vec{k} → Autovalor de la periodicidad (momentum del cristal)

$u_\lambda(\vec{k}, \vec{r})$ → recibe el nombre de función de Bloch; es periódica en el espacio real

$u_\lambda(\vec{k}, \vec{r}) = u_\lambda(\vec{k}, \vec{r} + \vec{R}_n)$ → es periódica en el espacio real

Entonces la ecuación de Schrödinger se escribe como:

$$H\psi_\lambda(\vec{k}, \vec{r}) = \left[\frac{P^2}{2m} + V_0(\vec{r}) \right] \psi_\lambda(\vec{k}, \vec{r}) = E_\lambda \psi_\lambda(\vec{k}, \vec{r}) \quad (2.11)$$

Haciendo solo el caso unidimensional, que es el que nos compete para nuestro caso, se plantea la ecuación diferencial para él, como:

$$\frac{\partial^2 \psi_\lambda}{\partial x^2} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left[\frac{e^{ikx}}{L^{3/2}} u_\lambda(\vec{k}, \vec{r}) \right] \quad (2.12)$$

Se obtiene

$$\frac{\partial^2 \psi_\lambda}{\partial x^2} = \frac{1}{L^{3/2}} \left[2ike^{ikx} u'_\lambda(\vec{k}, \vec{r}) - k^2 e^{ikx} u_\lambda(\vec{k}, \vec{r}) + e^{ikx} u''_\lambda(\vec{k}, \vec{r}) \right] \quad (2.13)$$

Teniendo en cuenta las respectivas derivadas y que además se toma j para cualquier red en el cristal, así obtenemos

$$\sum_j \frac{\partial^2}{\partial x_j^2} \psi_\lambda = -k^2 \psi_\lambda + 2i \sum_j k_j \frac{e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}}{L^{3/2}} \frac{\partial}{\partial x_j} u_\lambda(\vec{k}, \vec{r}) + \frac{e^{ikx}}{L^{3/2}} \sum_j \frac{\partial^2}{\partial x_j^2} u_\lambda(\vec{k}, \vec{r}) \quad (2.14)$$

Esta ecuación tiene en cuenta los parámetros de la función de onda en los cristales, al igual que la función de Bloch. De la ecuación (2.14) podemos obtener la siguiente expresión.

$$\sum_j \frac{\partial^2}{\partial x_j^2} \psi_\lambda = \frac{e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}}{L^{3/2}} (\nabla + ik) u_\lambda \quad (2.15)$$

Por lo tanto podemos expresar el nuevo Hamiltoniano como:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \frac{\hbar}{2} k \cdot P + V_0 \right) u_\lambda = \left(E_\lambda - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right) u_\lambda \quad (2.16)$$

Esta expresión representa el Hamiltoniano del sistema, que además involucra el momento del electrón dentro del cristal, y la energía también esta relacionada con la energía del material.

2.3 CONDICIONES DE CONTORNO DE BENDANIEL-DUKE

Se usa las condiciones de frontera de BenDaniel-Duke, ya que las propiedades electrónicas de estos materiales a las escalas de 10 \AA a 100 \AA son significativas a estas escalas. Para una barrera de potencial finita la ecuación de Schrödinger esta dada por:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d}{dz} \left(\frac{1}{m^*(z)} \frac{d\psi}{dz} \right) + V\psi = E\psi \quad (2.17)$$

Para este caso se toma la dirección z , como la dirección de crecimiento del material por lo que las otras direcciones se las toma como constantes, es decir que no participan en el proceso de tunelamiento.

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d}{dz} \left(\frac{1}{m^*(z)} \frac{d\psi}{dz} \right) + (E - V)\psi = 0 \quad (2.18)$$

Igualmente tomando el potencial, como un potencial rectangular finito, igual que en los estándares de la mecánica cuántica, tenemos.

$$V = \begin{cases} V_0, & 0 < z < L \\ 0, & \infty < z \leq 0, z \geq L \end{cases} \quad (2.19)$$

Para la región I donde la masa comporta como la masa libre del electrón; de acuerdo a los estándares básicos de la mecánica cuántica tenemos:

$$m^*(z) = m_0 \quad (2.20)$$

$$\frac{d^2\psi}{dz^2} + k_0^2 \psi = 0 \quad (2.21)$$

K_0 es el vector de onda

$$k_0 = \sqrt{\frac{2m_0 E}{\hbar^2}} \quad (2.22)$$

$$\psi_I(z) = Ae^{ik_0 z} + Be^{-ik_0 z} \quad (2.23)$$

Para la región II

$$\frac{d^2\psi}{dz^2} - \alpha_0^2\psi = 0 \quad (2.24)$$

El vector de onda dentro de la barrera esta dado por

$$\alpha_0 = \sqrt{\frac{2m_0(V_0 - E)}{\hbar^2}} \quad (2.25)$$

Entonces como se ha venido trabajando dentro de los estándares de la mecánica cuántica la función de onda esta dado por:

$$\psi_{II}(z) = Ce^{\alpha_0 z} + De^{-\alpha_0 z} \quad (2.26)$$

Para la región III, se procede de la igual manera que para la región I.

$$\psi_I = \psi_{III} \rightarrow \psi_{III} = Fe^{ik_0 z} + Ge^{-ik_0 z} \quad (2.27)$$

Teniendo en cuenta que para la region III, nos interesa solo la función que se transmite y no la que se refleja, hacemos entonces $G = 0$, asi nos queda la función de onda:

$$\psi_{III} = Fe^{ik_0 z} \quad (2.28)$$

Asi, la función de onda que describe el comportamiento de la partícula es:

$$\psi = \begin{cases} Ae^{ik_0 z} + Be^{-ik_0 z} & z < 0 \\ Ce^{\alpha z} + De^{-\alpha z} & 0 < z < L \\ Fe^{ik_0 z} & z > 0 \end{cases} \quad (2.29)$$

Por las condiciones de contorno $\psi_I(0) = \psi_{II}(0)$ tenemos:

$$A + B = C + D \quad (2.30)$$

Al aplicar las condiciones de contorno de BenDaniel-Duke, donde la masa tiene un comportamiento diferente dentro de la barrera, se cumple:

$$\frac{1}{m_0} \frac{d\psi_I}{dz} \Big|_{z=0} = \frac{1}{m_i} \frac{d\psi_{II}}{dz} \Big|_{z=0} \quad (2.31)$$

El procedimiento es similar a los estándares básicos de la mecánica cuántica [32].

$$\frac{ik_0}{m_0} (A - B) = \frac{\alpha}{m_i} (C - D) \quad \rightarrow \quad A - B = \frac{m_0 \alpha}{i m_i k_0} (C - D) \quad (2.32)$$

Evaluando la función en los extremos tenemos:

$$\psi_{II}(L) = \psi_{III}(L) \quad (2.33)$$

$$Ce^{\alpha L} + De^{-\alpha L} = Fe^{ik_0 L} \quad (2.34)$$

También evaluando la continuidad en los extremos de la barrera.

$$\frac{1}{m_i} \frac{d\psi_{II}}{dz} \Big|_{z=L} = \frac{1}{m_0} \frac{d\psi_{III}}{dz} \Big|_{z=L} \quad (2.35)$$

$$Ce^{\alpha L} - De^{-\alpha L} = \frac{ik_0 m_i}{\alpha m_0} Fe^{ik_0 L} \quad (2.36)$$

De la ecuación (2.32) se puede obtener el siguiente arreglo matricial, donde A, B esta en términos de los coeficientes C, D. así se obtiene el siguiente arreglo.

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \frac{\alpha m_0}{i m_i k_0} & 1 - \frac{\alpha m_0}{i m_i k_0} \\ 1 - \frac{\alpha m_0}{i m_i k_0} & 1 + \frac{\alpha m_0}{i m_i k_0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} \quad (2.37)$$

Y de la ecuación (2.36) obtenemos el arreglo matricial de la siguiente manera:

$$\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = \frac{1}{2} F e^{i k_0 L} \begin{bmatrix} \left(1 + \frac{i k_0 m_i}{\alpha m_0}\right) e^{-\alpha L} \\ \left(1 - \frac{i k_0 m_i}{\alpha m_0}\right) e^{\alpha L} \end{bmatrix} \quad (2.38)$$

Reemplazando la ecuación (2.38) en la ecuación (2.37), de acuerdo a los estándares de la mecánica cuántica, se puede expresar los coeficientes A, B en función del coeficiente F. así:

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \frac{1}{4} F e^{i k_0 L} \begin{bmatrix} \left(1 + \frac{\alpha}{i k_0 \beta}\right) \left(1 + \frac{i k_0 \beta}{\alpha}\right) e^{-\alpha L} + \left(1 - \frac{\alpha}{i k_0 \beta}\right) \left(1 - \frac{i k_0 \beta}{\alpha}\right) e^{\alpha L} \\ \left(1 - \frac{\alpha}{i k_0 \beta}\right) \left(1 - \frac{i k_0 \beta}{\alpha}\right) e^{-\alpha L} + \left(1 + \frac{\alpha}{i k_0 \beta}\right) \left(1 - \frac{i k_0 \beta}{\alpha}\right) e^{\alpha L} \end{bmatrix} \quad (2.39)$$

Donde el coeficiente de transmisión se obtiene a partir de esta relación:

$$\frac{A}{F} = \frac{e^{i k_0 L}}{4i k_0 \beta} \left[(\alpha + i k_0 \beta)^2 e^{-\alpha L} - (\alpha - i k_0 \beta)^2 e^{\alpha L} \right] \quad (2.40)$$

Así obtenemos

$$f = \frac{F}{A} = -\frac{4ik_0 \alpha e^{-\alpha L}}{(\alpha - i\beta k_0)^2} e^{ik_0 L} \quad (2.41)$$

El coeficiente transmisión T es

$$T = |f^2| \quad (2.42)$$

Por lo tanto

$$T = \left[\frac{4ik_0 \alpha}{(\alpha - i\beta k_0)^2} \right]^2 e^{-2\alpha L} \quad (2.43)$$

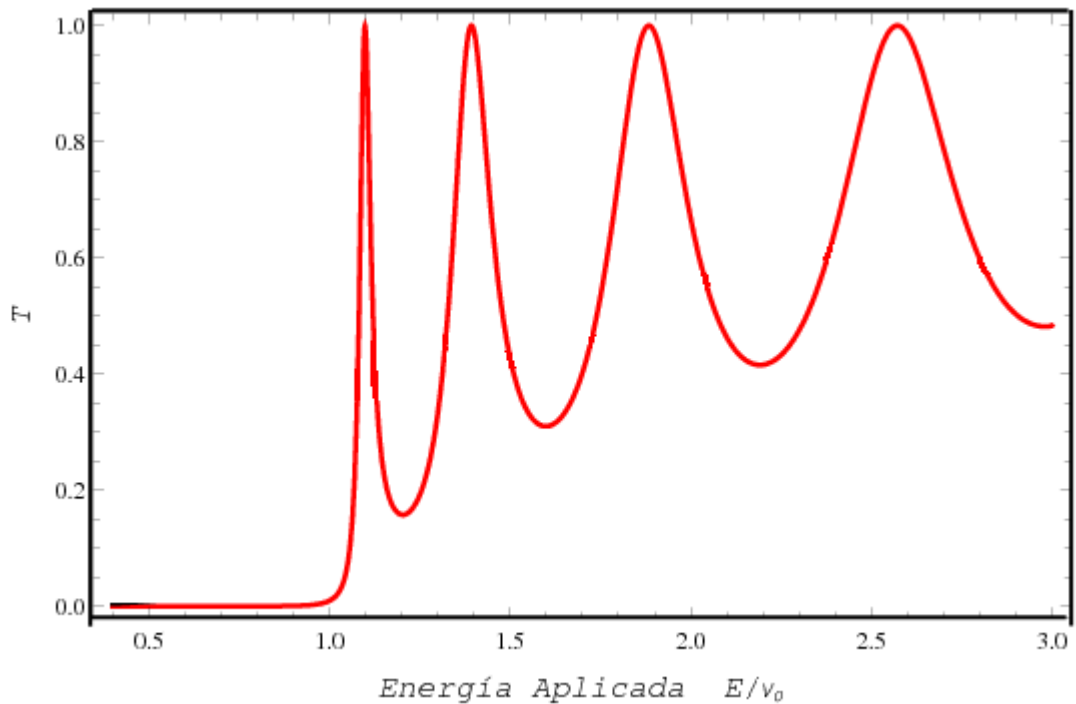


Figura 2.1. Aquí se presenta el coeficiente de transmisión, teniendo en cuenta las condiciones de frontera de BenDaniel-Duke, en función de la energía aplica al sistema.

El factor dominante en la anterior ecuación, es la exponencial quien depende solo de la masa incidente m_i ; la condición para el máximo valor del factor exponencial es que:

$$k_0 \beta = \alpha \quad (2.44)$$

Empleando los valores de

$$(k_0 \beta)^2 = \alpha^2 \quad (2.45)$$

$$\beta^2 = \left(\frac{\alpha}{k_0} \right)^2 = \left[\sqrt{\frac{2m_i(V_0 - E)}{\hbar^2}} \right]^2 \frac{1}{\left(\sqrt{\frac{2m_0 E}{\hbar^2}} \right)^2} \quad (2.46)$$

$$\beta = \frac{V_0 - E}{E} \quad (2.47)$$

Lo que implica que

$$E = \frac{1}{\beta + 1} V_0 \quad (2.48)$$

La transmisión es un máximo cuando la energía de la partícula incidente esta cerca de la barrera así, $\beta \rightarrow 0$ como $E \rightarrow V_0$; lo que indica que la masa de los electrones es igual tanto dentro de la barrera como fuera de ella.

2.4. ANALISIS DE RESULTADOS.

En la grafica 2.1, es necesario especificar que los picos de la grafica son los estados de resonancia de la barrera, y son más pronunciados respecto a la transmisión estándar, dado

que el factor Beta que tiene en cuenta la relación de las masas dentro y fuera de la barrera, y es determinante para este caso, donde este efecto está marcado por la relación de masas en el tunelamiento; es muy importante tener en cuenta que a esta escala nanométrica (10-100 amnstrong) no se pueden despreciar las relaciones de masas que proporciona las condiciones de BenDaniel-Duke.

CAPITULO 3: TUNELAMIENTO CUANTICO EN NANO ESTRUCTURAS SEMICONDUCTOTRAS

3.1. INTRODUCCION

Las aplicaciones tecnológicas de dispositivos semiconductores en la actualidad ofrecen muchas ventajas; entre las que se cuenta la velocidad de los portadores, la movilidad y la manipulación de estos para crear superredes. Optimizando las señales a través de dispositivos de alto desempeño. Estas ventajas revisten especial interés en numerosas aplicaciones relacionadas con los ordenadores, la recepción de señales de televisión y la transmisión optoelectrónica de datos a través de redes de fibras ópticas. Entre los materiales de alto desempeño que son ampliamente utilizados están el Arsenuro de Galio (GaAs), en el cual se puede modificar, la separación entre las bandas electrónicas (gap) o niveles de energía. Dicha separación es mayor en este material (GaAs) que en el silicio, pero su ancho puede aumentarse o reducirse a través de un dopaje de carácter sustitucional, el cual consiste en sustituir los átomos que constituyen éste material por otros diferentes. Por ejemplo, si el Galio (Ga) se sustituye por Aluminio (Al), da lugar al arseniuro de aluminio (AlAs), el ancho del intervalo de energía entre las bandas resulta mucho mayor; además éste semiconductor presenta un perfil parabólico de bandas en el cual el máximo de la banda de valencia coincide con el mínimo de la banda de conducción (semiconductor de gap directo), es decir, puede absorber o emitir luz sin intervención de fonones en el proceso lo que conlleva a que se utilice en la construcción de láseres o detectores ópticos muy eficientes.

En las pasadas décadas las predicciones de Tsu y Esaki, de nuevos dispositivos basados en sistemas artificiales de semiconductores, abrieron un enorme campo de aplicación de la física de los semiconductores y más aun en la posibilidad de manipular y entender el comportamiento de los sistemas de baja dimensionalidad. Este avance significativo, se baso

en lo que hoy entendemos como efecto túnel, fenómeno cuántico de gran importancia en nanotecnología.

En la actualidad técnicas avanzadas como MBE (Molecular Beam Epitaxy) y MOCVD (Organic Chemical Vapor Deposition) entre otras, permiten crecer heteroestructuras de alta calidad y con un dopaje selectivo de los planos que constituyen la estructura, de tal manera que las propiedades ópticas y electrónicas pueden ser monitoreadas durante su construcción. Este control de impurezas, conduce a una variedad de nuevos fenómenos como las excitaciones elementales; y las más estudiadas son los estados electrónicos y de transporte y las oscilaciones ópticas de la red, dependiendo de la naturaleza química de la impureza.

3.2. TUNELAMIENTO EN UNA BARRERA PARABÓLICA

Teórica y experimentalmente, el tunelamiento cuántico es uno de los fenómenos físicos que más se ha estudiado en el comportamiento de dispositivos de última generación, debido a que en esta escala es uno de los efectos más comunes dada la naturaleza discreta del electrón; dado estos antecedentes se cree que es factible extender estos estudios utilizando modelos diferentes a los convencionales, como las barreras de potencial tipo Hylleras [37], y su forma parabólica. Para dicho sistema se encuentra la solución analítica de la barrera de potencial tipo Hylleras, y se encuentra el coeficiente de transmisión en función de la energía aplicada, utilizando el formalismo de la matriz de transferencia. Este estudio se hace siguiendo los lineamientos de Tsu y Esaki aplicables a heteroestructuras tipo GaAs y $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, los resultados se comparan con una barrera de potencial de forma parabólica tradicional.

Así mismo, la presión hidrostática provee importante información que contribuye a un mayor entendimiento de las propiedades electrónicas en este tipo de heteroestructuras semiconductoras. Este aspecto físico es una herramienta poderosa e importante para la

investigación y control de las propiedades ópticas relacionadas a la electrónica de dichos materiales. Los principales efectos de la presión hidrostática sobre los semiconductores III-V es el aumento en la brecha de energía, el incremento de la masa efectiva en el valle G de la zona de Brillouin y la disminución de la constante dieléctrica estática, para la heteroestructura GaAs-Al_xGa_{1-x}As.

Para entender en principio el potencial tipo Hylleras comenzamos modelando el potencial a partir de la definición de la ecuación de la parábola, dad por

$$(x-h)^2 = -4p(y-k) \quad (3.1)$$

Donde h, k son los vértices de la ecuación de la parábola y p es la distancia del vértice al foco, como se muestra en la figura 3.1

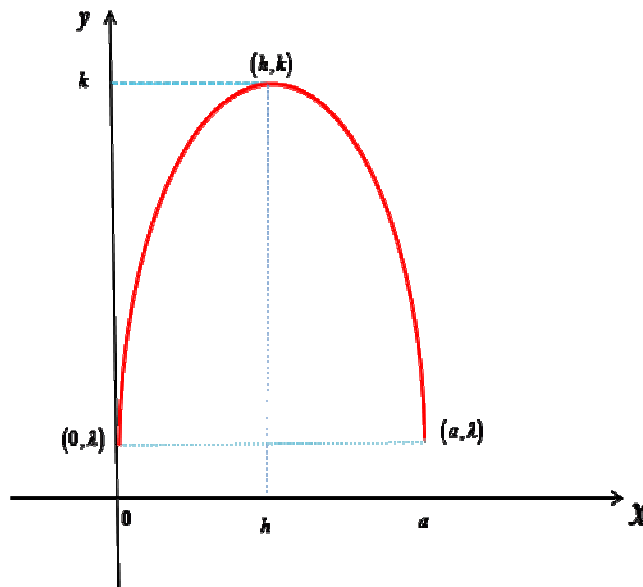


Figura 3.1

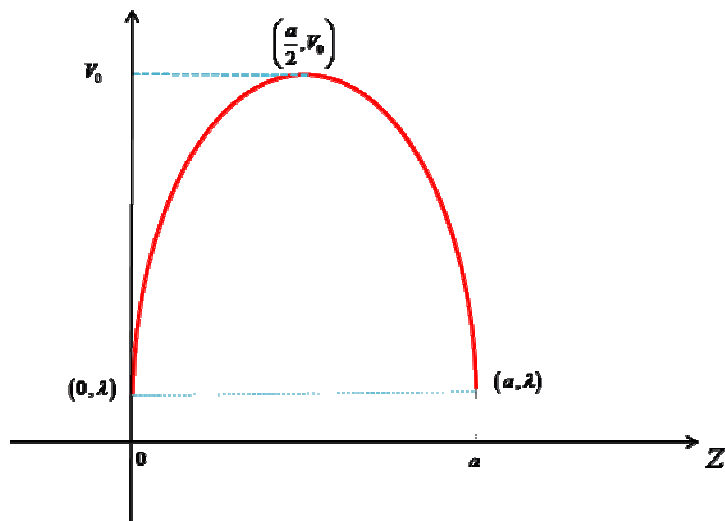
Modelo de una barrera de potencial tipo parabólico

De igual manera esta tiene que satisfacer las igualdades para h y k dado que estas muestran el punto máximo de la parábola. La ecuación (3.1) se transforma en

$$\left(x - \frac{a}{2}\right)^2 = -4p(y - V_0) \quad (3.2)$$

Los valores de h , k son reemplazados por los parámetros $\frac{a}{2}$ y V_0 , que corresponden a los parámetros físicos del modelo de este problema y que a su vez corresponde a la mitad del ancho de la barrera y a la energía potencial de la altura de la misma, a si mismo λ , es un punto de corte.

La ecuación (3.2) se puede observar en la figura 3.2, con sus respectivas modificaciones de los parámetros.



Modelo de una barrera de potencial tipo parabólico

Figura 3.2 Esquema de una barrera de potencial ordinaria de forma parabolica.

En esta grafica se muestra la aproximación de un potencial parabólico, utilizando la definición matemática de parábola, delimitada al problema físico que aquí se requiere.

Aquí, se muestra que en los extremos de la grafica se debe cumplir que: para $x = 0$, y toma el valor de λ , ($y = \lambda$) de esta forma tenemos la ecuación (3.2) en términos de p , como lo muestra el anexo (B).

$$y = -\frac{4(V_0 - \lambda)}{a^2}x^2 + \frac{4(V_0 - \lambda)}{a}x + V_0 + \lambda \quad (3.3)$$

Donde V_0 es el potencial de la altura de la barrera, a es el ancho de la barrera. Dicho potencial se puede expresar de manera más detallada así:

$$V = \begin{cases} 0 & \text{si } \frac{a-b}{2} < z' < 0 \\ V_0 - \frac{4(V_0 - \lambda)}{a^2} \left(z' - \frac{a}{2} \right)^2 & \text{si } 0 < z' < a \\ 0 & \text{si } a < z' < \frac{a+b}{2} \end{cases} \quad (3.4)$$

Donde, para la región $\frac{a-b}{2} < z' < 0$ el potencial se hace cero de la misma forma que para la región $a < z' < \frac{a+b}{2}$, solo para la región comprendida entre $0 < z' < a$, se centra nuestro estudio, debido que aquí se observa el fenómeno cuántico de tunelamiento; b , nos indica el parámetro del ancho de la red.

Con base en este modelo y en términos de la mecánica cuántica, se puede plantear la ecuación de Schrödinger para este sistema de la siguiente forma:

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (3.5)$$

Esta ecuación de Schrödinger, es igualmente independiente del tiempo, es decir que no hay evolución temporal del sistema, es una ecuación de autovalores.

Para la solución de la ecuación (3.5), se tienen en cuenta las condiciones de contorno de acuerdo a la ecuación (3.4), donde en la región I y III, el potencial se hace nulo, por lo que la ecuación (3.5) sufre una transformación; de acuerdo a la ecuación (3.6), para la región I y III, entonces tenemos.

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2 \psi}{dz'^2} = E \psi \quad (3.6)$$

Donde m^* , se toma como la masa efectiva del electrón cuando choca con la barrera; la solución de la ecuación (3.6), es de la forma:

$$\psi = Ae^{ikz'} + Be^{-ikz'} \quad (3.7)$$

Cuando la energía E es menor que V_0 ($E < V_0$), que es la región de interés en el fenómeno de tunelamiento, la función de onda (3.7) contiene la partícula incidente y reflejada, la forma de la solución nos indica el comportamiento ondulatorio que tiene el electrón, las constante A y B son las amplitudes de la función de onda.

Para la región III, solo tenemos la parte de la exponencial positiva, que nos indica la transmisión de la partícula en la barrera, la componente negativa se ha eliminado, puesto que no hay reflexión en la región III, la función: $\psi = Fe^{ikz'}$. Presenta el comportamiento de la función de onda transmitida en el tunelamiento, que tiene una exponencial compleja.

Para la región II donde tenemos el potencial definido entre $0 < z' < a$, teniendo en cuenta el potencial parabólico como se muestra en la ecuación (3.4), la ecuación diferencial para resolver en este intervalo es:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dz'^2} + V\psi = E\psi \quad (3.8)$$

Para resolver la ecuación (3.9), se sustituye por los parámetros antes mencionados.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dz'^2} + \left[V_0 - \frac{4(V_0 - \lambda)}{a^2} \left(z' - \frac{a}{2} \right)^2 \right] \psi = E\psi \quad (3.9)$$

Esta ecuación involucra ya los parámetros establecidos anteriormente en la grafica (3.2). Para su solución es necesario hacer un cambio de variable de tal manera que nos permita resolverla.

Usando cambios de variable apropiados (de acuerdo como se muestran en el anexo C), podemos llegar a una forma reducida de la ecuación diferencial (3.10), en términos de beta, que se transforma en la siguiente ecuación.

$$\frac{d^2\psi}{d\beta^2} + \frac{1}{2\beta} \frac{d\psi}{d\beta} - \left[\frac{\alpha}{4\beta} - \frac{1}{4} \right] \psi(\beta) = 0 \quad (3.10)$$

Haciendo el análisis asintótico de la ecuación (3.10) con el objetivo de determinar la convergencia de la ecuación diferencial involucrada, se tiene la siguiente solución si β tiende a infinito ($\beta \rightarrow \infty$), la función se reduce a la ecuación (3.12).

$$\frac{d^2\psi_\infty}{d\beta^2} + \frac{1}{4}\psi_\infty(\beta) = 0 \quad (3.11)$$

Ecuación diferencial de segundo orden que tiene una solución de la siguiente forma:

$$\psi_\infty(\beta) = A e^{-i\frac{\beta}{2}} + B e^{i\frac{\beta}{2}} \quad (3.12)$$

Donde A y B son las amplitudes de la función de onda. La solución total para la ecuación (3.11) está dada por una función exponencial compleja tipo (3.13) y una función en polinomios, de tal manera que tenemos:

$$\psi(\beta) = e^{-i\frac{\beta}{2}} \Phi(\beta). \quad (3.13)$$

Como el primer término de la ecuación (3.14) es complejo, la solución no satisface los requerimientos de la ecuación diferencial para que sea real, lo que imposibilita su solución analítica; por lo que no es factible usar un potencial parabólico por definición como el de la ecuación (3.1).

3.3. COEFICIENTE DE TRANSMISION PARA UNA BARRERA DE POTENCIAL DE HYLLERAS AFECTADA POR PRESION HIDROSTATICA

En esta sección se trabaja con los parámetros de energía del arseniuro de galio (GaAs) y arseniuro de galio aluminio (AlGaAs), teniendo en cuenta los datos experimentales a partir de los procesos de fotoluminiscencia [3].

La energía del “gap” está dada por

$$E_g^\Gamma(p, T, x) = E_g^0(x) + \alpha(x)p + \beta(x)p^2 + \frac{bT^2}{T+c} \quad (3.14)$$

Donde b , c son constantes del material dados por; $b = 0.5405 \frac{meV}{K}$ y $c = 204K$,

Igualmente x , representa la concentración del material en la heteroestructura.

La expresión $E_g^0(x)$, representa la brecha de energía o “gap” a temperatura cero, $T = 0K$ y presión hidrostática cero, $p = 0 \text{ kbar}$. Los términos $\alpha(x)p$ y $\beta(x)p^2$, son energías en función de la concentración [4].

A continuación también se muestra la ecuación que rige el comportamiento energético de compuestos III-V, teniendo en cuenta la concentración del material que se realiza de

manera sustitucional. Dicha ecuación permite obtener o conocer el “gap” de la heteroestructura semiconductor que se forma. Es decir,

$$\begin{array}{ll}
 Al_xGa_{1-x}As & E_g^0(x) = 1.519 + 1.36x + 0.22x^2 \text{ eV} \\
 GaAs & E_g^0(x) = 1.519 \text{ eV}
 \end{array} \quad (3.15)$$

Aquí la energía esta dada en electrón voltios, para nuestro caso.

De igual manera, teórica y experimentalmente, se sabe que cuando una heteroestructura semiconductor es expuesta a presión hidrostática moderada el comportamiento del “gap” del material cambia apreciablemente. Esto se puede apreciar en la siguiente ecuación:

<i>Material</i>	$\alpha(x) \frac{meV}{kbar}$	$\beta(x) \frac{meV}{kbar^2}$	
$Ga_{1-x}Al_xAs$	$11.5 - 1.3x$	0	(3.16)
$Al_xGa_{1-x}As$	$11.5 - 1.3x$	0	
$GaAs$	10.7	-0.0377	

Tabla 3.1. Tabla de valores del comportamiento del “gap”, para diferentes materiales.

A si mismo estas modificaciones en la brecha de energía, cuando se involucra presión hidrostática suscitan cambios ampliamente relevantes en la masa efectiva del material, lo que implica grandes transformaciones en la estructura electrónica de los dispositivos involucrados.

$$\frac{m_e^*(p, T)}{m_0} = \left\{ 1 + E_p^\Gamma \left[\frac{2}{E_g^\Gamma(p, T, 0)} + \frac{1}{E_g^\Gamma(p, T, 0) + \Delta_0} \right] \right\}^{-1} \quad (3.17)$$

Dadas estas relaciones se puede obtener una expresión más general y adecuada para la altura de la barrera de potencial, la cual involucra importantes y determinantes cambios experimentalmente, en función de la presión hidrostática y la concentración del material. Es

decir, $V_0(z, p) = Q_c E_g^\Gamma(p, o, x)$, donde $Q_c = 0.658$, representa una constante del material [5].

Asi como la altura de la barrera depende de la presión, para el ancho de la barrera se considera una expresión en la cual también involucra la presión hidrostática, así: $A(p) = a_z(0)[1 - (s_{11} + 2s_{12})p]$, [6], que representa el ancho de la barrera en términos de la presión, que a su vez ejerce sobre la diagonal del vector de tensión que se puede ejecutar sobre un sólido. Aquí, $a_z(0)$ es el ancho inicial sin presión hidrostática, s_{11} y s_{12} , son constantes de rigidez elástica de un cristal [7], De esta manera se analiza las componentes del tensor de presión hidrostática para los materiales III-V que serán usados a lo largo del desarrollo de este trabajo.

$$\begin{array}{cc}
 \textit{material} & \textit{constantes} (\times 10^{-3} \textit{kbar}^{-1}) \\
 Ga_{1-x}Al_xAs \begin{cases} s_{11} = 1.17 + 0.03x \\ s_{12} = -(0.37 + 0.02x) \end{cases} & Al_xGa_{1-x}As \begin{cases} s_{11} = 1.17 + 0.03x \\ s_{12} = -(0.37 + 0.02x) \end{cases}
 \end{array} \quad (3.18)$$

Tabla 3.2. Diferentes valores de la constante de rigidez

Como se observa en la ecuación (3.19), las constantes de rigidez para el material $Al_xGa_{1-x}As$ o para $Ga_{1-x}Al_xAs$, son iguales.

Cabe anotar que debido al estudio mas detallado de sistemas de baja dimensionalidad se puede considerar las condiciones de BenDaniel-Duke, en las cuales la masa dentro de la barrera tiene un valor diferente. Lo que permite tomar el potencial de la barrera como se muestra de la siguiente manera:

$$V = \begin{cases} 0 & \text{si } \frac{a-b}{2} < z' < 0 \\ V_0(p, x) \cosh^{-2}\left(\frac{z'}{a} - \frac{1}{2}\right) & \text{si } 0 < z' < a \\ 0 & \text{si } a < z' < \frac{a+b}{2} \end{cases} \quad (3.19)$$

Este potencial no solo tiene en cuenta la concentración y la presión hidrostática, sino que también involucra la geometría parabólica de la barrera.

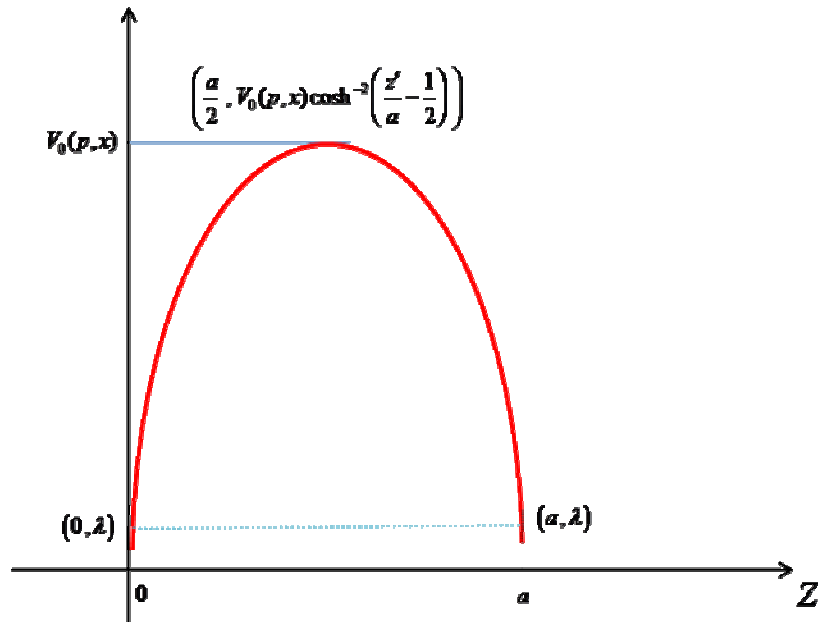


Figura 3.3. Esquema de la barrera parabólica tipo Hylleras

Una forma mas clara de ver el cambio que se suscita matemática y físicamente al proponer un potencial parabólico como el que se muestra en la figura 3.3, de una barrera de potencial, se muestra en la figura 3.4.

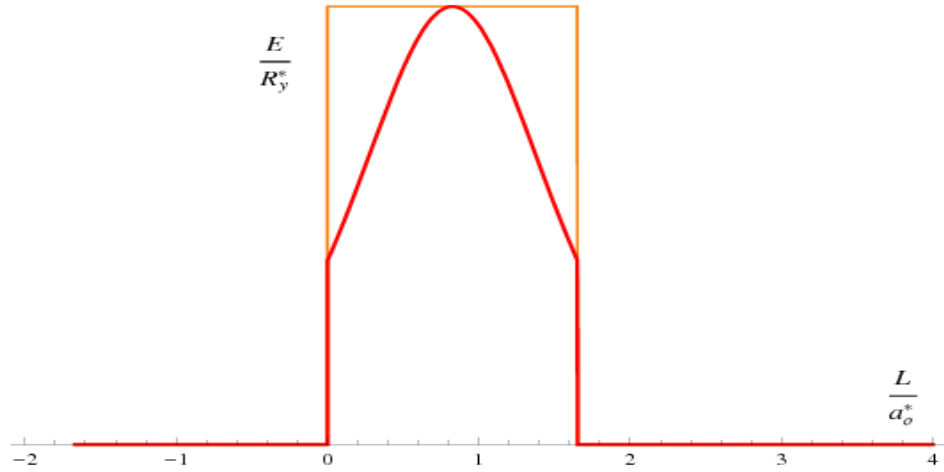


Figura 3.4. Esquema del potencial parabólico normalizado a radios de Bohr efectivo y a Rydber efectivo.

En esta gráfica se muestra el potencial tipo parabólico de acuerdo al potencial de Hylleras [8], que además involucra los parámetros de la concentración, la presión y el ancho de la barrera.

De acuerdo a este potencial y teniendo en cuenta las bases de la mecánica cuántica, podemos plantear el hamiltoniano para este sistema de la siguiente forma.

El hamiltoniano esta dado por:

$$H = \begin{cases} \frac{1}{2m_0^*(p)} P_{z'}^2 & \text{si } \frac{a-b}{2} < z' < 0 \\ \frac{1}{2m_0^*(p)} P_{z'}^2 + V_0(p, x) \cosh^{-2}\left(\frac{z'}{a} - \frac{1}{2}\right) & \text{si } 0 < z' < a \\ \frac{1}{2m_0^*(p)} P_{z'}^2 & \text{si } a < z' < \frac{a+b}{2} \end{cases} \quad (3.20)$$

Donde para las regiones $\frac{a-b}{2} < z' < 0$ y $a < z' < \frac{a+b}{2}$ el potencial se lo considera cero, ya que se encuentra por fuera de la barrera; o sea, de aquí en adelante el problema se centra en la ecuación que involucra el potencial de la barrera.

Con base en la estructura anterior donde se plantea el potencial de la barrera parabólica se describe el comportamiento de una partícula en una barrera de potencial tipo Hylleras, teniendo en cuenta las condiciones de frontera Ben Daniel Duque en la primera región de la heteroestructura

$$\left\{ \begin{array}{ll} \frac{d^2\psi}{dz^2} + k_1^2 a_*^2 \psi = 0 & \text{si } \frac{a-b}{2} < z < 0 \text{ y } a < z < \frac{a+b}{2} \\ \frac{d^2\psi}{dz^2} - \left[\frac{V_0(p,x)}{R_y^*} \cosh^{-2}\left(\frac{z'}{a} - \frac{1}{2}\right) - k_1^2 a_*^2 \right] \psi = 0 & \text{si } 0 < z < a \end{array} \right. \quad (3.21)$$

En la ecuación (3.22) donde se muestra el hamiltoniano del sistema, las variables están normalizadas a radios de Bohr efectivos a_*^2 y a Rygber efectivos R_y^* . (las transformaciones de estas ecuaciones se muestran en el apéndice C).

Para las regiones $\frac{a-b}{2} < z < 0$ y $a < z < \frac{a+b}{2}$, la ecuación que describe el comportamiento es $\frac{d^2\psi}{dz^2} + \kappa_1^2 \psi = 0$ para simplificar los cálculos se toma $\kappa_1^2 = k_1^2 a_*^2$, cuyas soluciones ya conocidas se muestran en la siguiente ecuación.

$$\left\{ \begin{array}{ll} \psi(z) = A e^{i\kappa_1 z} + B e^{-i\kappa_1 z} & \text{si } \frac{a-b}{2} < z < 0 \\ \psi(z) = E e^{i\kappa_1 z} & \text{si } a < z < \frac{a+b}{2} \end{array} \right. \quad (3.22)$$

donde el comportamiento de cada una de las funciones de onda de la ecuación (3.22) son igualmente similares a la de las ecuaciones (3.7) y (3.8).

La solución de la ecuación diferencial para la región $0 < z < a$, implica transformaciones que conduce a una forma conocida de la ecuación diferencial, las transformaciones necesarias que se hacen para llegar a la ecuación (3.23) se muestran en el anexo (C)

$$(1-\nu^2)^2 \frac{d^2 \psi}{d\nu^2} - 2\nu(1-\nu^2) \frac{d\psi}{d\nu} - a^2 [V_0(1-\nu^2) - \kappa_1^2] \psi(\nu) = 0 \quad (3.23)$$

Aquí, en esta ecuación el potencial V_0 se expresa como $V_0 = \frac{V_0(p, x)}{R_y^*}$, es decir esta normalizado a Rygber efectivo y además esta en función de la presión y de la concentración.

La ecuación anterior se puede transformar en una ecuación diferencial más conocida realizando la transformación $\chi = 1 - \nu^2$, de esta manera se reduce a:

$$(1-\chi^2) \frac{d^2 \psi}{d\chi^2} + \left(\frac{1}{\chi} - \frac{3}{2} \right) \frac{d\psi}{d\chi} - \frac{a^2}{4} \left[\frac{V_0}{\chi} - \frac{\kappa_1^2}{\chi^2} \right] \psi(\chi) = 0 \quad (3.24)$$

Haciendo un análisis asintótico de acuerdo con la ecuación (3.10) y (3.11), podemos llegar al siguiente resultado.

$$\psi(\chi) = \chi^{-\frac{\kappa_1 a}{2}} \varphi(\chi) = e^{-\frac{\kappa_1 a}{2} \ln \chi} \varphi(\chi) \quad (3.25)$$

Si tenemos $\chi = 1 - \nu^2$, entonces

$$\psi(v) = (1-v^2)^{-i\frac{\kappa_1 a}{2}} \varphi(v) \quad (3.26)$$

Haciendo la sustitución $1-v^2 = \xi$, se llega a la siguiente relación

$$\xi(1-\xi) \frac{1}{4} \frac{d^2 \varphi}{d\xi^2} + [(1-i\kappa_1 a) - 2(1-i\kappa_1 a)\xi] \frac{d\varphi}{d\xi} + [a^2(\kappa_1^2 - V_0) + i\kappa_1 a] \varphi(\xi) = 0 \quad (3.27)$$

La ecuación anterior es llamada hipergeométrica de Gauss [37], matemáticamente la ecuación de Gauss presenta la siguiente estructura.

$$x(1-x)\phi'' + [\Gamma - (\alpha + \beta + 1)x]\phi' - \alpha\beta\phi = 0 \quad (3.28)$$

Cuya solución es de la forma

$$\phi = C_1 F(\alpha, \beta; \Gamma, x) + C_2 G(\alpha, \beta; \Gamma, x) \quad (3.29)$$

C_1 y C_2 , son constantes de la función hipergeométrica,

La cual se expresa en términos de funciones especiales F y G, que son las funciones hipergeométricas confluentes. Realizando una transformación por los términos de α y β , la ecuación (3.30) es necesario calcular α y β , ya que

$$\Gamma = 1 - i\kappa_1 a \quad (3.30)$$

$$\begin{cases} \alpha + \beta + 1 = 2(1 - i\kappa_1 a) \\ \alpha\beta = -a(\kappa_1^2 - V_0) - i\kappa_1 a \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \alpha + \beta = 1 - 2i\kappa_1 a \\ \alpha\beta = a(V_0 - \kappa_1^2) - i\kappa_1 a \end{cases} \quad (3.31)$$

Ahora al hacer uso del teorema de Vietta [37], α y β son las raíces de la ecuación

$$y^2 - (\alpha + \beta)y + \alpha\beta = 0 \quad (3.32)$$

Por lo tanto al resolver esta ecuación de segundo orden obtenemos sus raíces.

Lo que conduce a:

$$\varphi(\xi) = \text{C F}(\alpha, \beta, 1 - i\kappa_1; \xi) + \text{D G}(\alpha, \beta, 1 - i\kappa_1; \xi) \quad (3.33)$$

En consecuencia la función ψ , se escribe de la siguiente forma:

$$\psi(\nu) = (1 - \nu^2)^{-i\frac{\kappa_1 a}{2}} \left[\text{C F}\left(\alpha, \beta, 1 - i\kappa_1; \frac{1 - \nu}{2}\right) + \text{D G}\left(\alpha, \beta, 1 - i\kappa_1; \frac{1 - \nu}{2}\right) \right] \quad (3.34)$$

Luego

$$\begin{aligned} \psi(z) = & \left[\cosh\left(\frac{z}{a} - \frac{1}{2}\right) \right]^{i\kappa_1 a} \left\{ \text{C F}\left[\alpha, \beta, 1 - i\kappa_1; \frac{1}{2}\left[1 - \tanh\left(\frac{z}{a} - \frac{1}{2}\right)\right]\right] \right\} + \\ & \text{D G}\left\{\alpha, \beta, 1 - i\kappa_1; \frac{1}{2}\left[1 - \tanh\left(\frac{z}{a} - \frac{1}{2}\right)\right]\right\} \end{aligned} \quad (3.35)$$

Ahora con las condiciones de frontera que se deben tener en cuenta en esta parte del problema teórico y considerando la continuidad de la función de onda se tiene que

$$\begin{aligned} \psi'(z) = & \left[\cosh\left(\frac{z}{a} - \frac{1}{2}\right) \right]^{i\kappa_1 a} \left\{ \text{C}\left[i\kappa_1 \tanh\left(\frac{z}{a} - \frac{1}{2}\right) \text{F}(\Theta_z) + \text{F}'(\Theta_z)\right] + \right. \\ & \left. \text{D}\left[i\kappa_1 \tanh\left(\frac{z}{a} - \frac{1}{2}\right) \text{G}(\Theta_z) + \text{D G}'(\Theta_z)\right] \right\} \end{aligned} \quad (3.36)$$

donde

$$\Theta_z = \left\{ \alpha, \beta, 1 - i\kappa_1; \frac{1}{2}\left[1 - \tanh\left(\frac{z}{a} - \frac{1}{2}\right)\right] \right\} \quad (3.37)$$

Así mismo, hay que tener en cuenta las siguientes consideraciones:

dado que $\lambda_1 = \cosh\left(\frac{1}{2}\right) = \cosh\left(-\frac{1}{2}\right)$ es una función par y $\lambda_2 = \tanh\left(\frac{1}{2}\right) = -\tanh\left(-\frac{1}{2}\right)$ es una función impar.

Entonces, teniendo en cuenta la propiedad anterior y aplicando las condiciones de contorno, y además que se trabaja dentro de la barrera, la región que se considera es la que esta comprendida en $\frac{a-b}{2} < z < 0 \quad \wedge \quad 0 < z < a$, se tiene que: $\varphi_1(0) = \varphi_2(0)$ con.

$$A+B = \lambda_1^{i\kappa_1 a} [CF(\Theta_0) + DG(\Theta_0)] \quad (3.38)$$

Usando la condición de contorna de BenDaniel-Duke, donde

$$\frac{1}{m_0^*(p)} \frac{d\varphi_1}{dz} \Big|_{z \rightarrow 0} = \frac{1}{m_1^*(p)} \frac{d\varphi_2}{dz} \Big|_{z \rightarrow 0} \quad (3.39)$$

se obtiene

$$A-B = i \frac{\lambda_1^{i\kappa_1 a}}{\eta\kappa_1} \left\{ C [i\kappa_1\lambda_2 F(\Theta_0) - F'(\Theta_0)] + D [i\kappa_1\lambda_2 G(\Theta_0) - G'(\Theta_0)] \right\} \quad (3.40)$$

De ahí

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} = \frac{\lambda_1^{i\kappa_1 a}}{\eta\kappa_1} \begin{bmatrix} \eta\kappa_1 F(\Theta_0) & \eta\kappa_1 G(\Theta_0) \\ -\kappa_1\lambda_2 F(\Theta_0) - iF'(\Theta_0) & -\kappa_1\lambda_2 G(\Theta_0) - iG'(\Theta_0) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C \\ D \end{bmatrix} \quad (3.41)$$

En este punto se ha llegado a encontrar la matriz de los coeficientes de las respectivas funciones de onda, con el fin de encontrar las constantes A y B en función de los demás términos, es necesario calcular la matriz inversa de la matriz que acompaña a las expresiones A, B, cuyo resultado se muestra en la ecuación (3.45)

$$\begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} = \frac{\lambda_1^{i\kappa_1 a}}{2\eta\kappa_1} \begin{bmatrix} \kappa_1(\eta - \lambda_2)F(\Theta_0) - iF'(\Theta_0) & \kappa_1(\eta - \lambda_2)G(\Theta_0) - iG'(\Theta_0) \\ \kappa_1(\eta + \lambda_2)F(\Theta_0) + iF'(\Theta_0) & \kappa_1(\eta + \lambda_2)G(\Theta_0) + iG'(\Theta_0) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C \\ D \end{bmatrix} \quad (3.42)$$

Para la región I y III, que esta comprendida entre $0 < z < a$ y $a < z < \frac{a+b}{2}$, las condiciones de contorno se cumple

$$\varphi_2(a) = \varphi_3(a) \quad (3.43)$$

Ahora al evaluar la función de onda en el extremo del ancho de la barrera, obtenemos la expresión (3.44), siguiendo los lineamientos normales de la mecánica cuántica.

$$\lambda_1^{i\kappa_1 a} [\text{CF}(\Theta_0) + \text{DG}(\Theta_0)] = E e^{i\kappa_1 a} \quad (3.44)$$

$$[\text{CF}(\Theta_0) + \text{DG}(\Theta_0)] = E \lambda_1^{-i\kappa_1 a} e^{i\kappa_1 a} \quad (3.45)$$

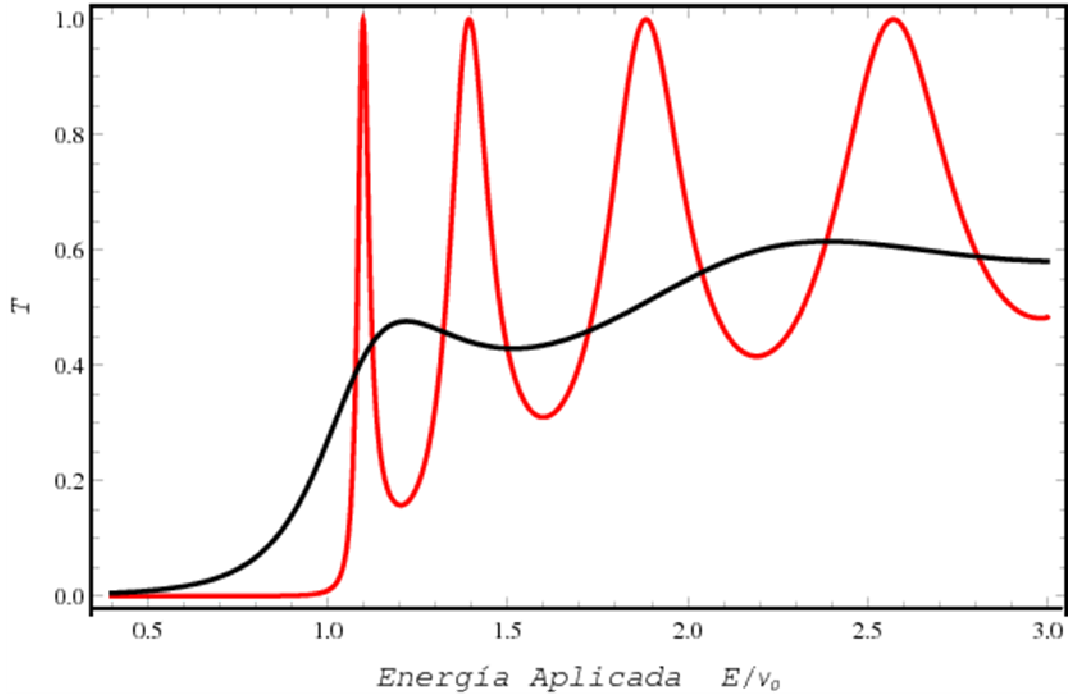
Ahora se tiene en cuenta la condición de continuidad con la primera derivada de la función de onda φ_2 y φ_3 , teniendo en cuenta que al igualar las funciones, la masa es diferente.

$$\frac{1}{m_1^*(p)} \frac{d\varphi_2}{dz} \Big|_{z \rightarrow a} = \frac{1}{m_0^*(p)} \frac{d\varphi_3}{dz} \Big|_{z \rightarrow a} \quad (3.46)$$

Para este caso se ha remplazado la condición usual sobre la continuidad de la derivada por la condición de contorno de BenDaniel-Duke, bajo estos antecedentes y de acuerdo al apéndice (32), la transmisión está dada por:

$$\mathbf{T} = \frac{16\kappa_1}{a\pi} \left[\sinh^2 \pi\kappa_1 a + \cos^2 \pi \left(1 + \sqrt{\frac{1}{4} - V_0 a^2} \right) \right] \left\{ \left[\left(\frac{\lambda_2}{\eta} - 1 \right) (\mathbf{j}_1 + \mathbf{j}_2) \right]^2 + \left[\frac{1}{\kappa_1 \eta} \mathbf{j}_3 + \kappa_1 \eta \left(\frac{\lambda_2}{\eta} - 1 \right)^2 \mathbf{j}_4 \right]^2 \right\}^{-1} \left\{ \sinh \pi\kappa_1 a \right\} \quad (3.47)$$

Para este caso la transmisión esta dada en función de senos hiperbólicos los cuales a su vez están en funciones de parámetros ya establecidos como se muestran en el apéndice (C).



Grafica 3.5. Comparación de la transmisión de una barrera de potencial rectangular con una tipo Hylleras en función de la energía aplicada, la curva en rojo muestra la transmisión en una barrera de potencial rectangular normal con las condiciones de BenDaniel-Duke, y la curva en negro muestra la transmisión de una barrera de potencial tipo Hylleras.

3.4. ANALIS DE RESULTADOS

En la grafica 3.5 se aprecia la gran diferencia del coeficiente de transmisión entre una barrera de potencial rectangular y una barrera de tipo Hylleras, para ambos coeficiente se tiene en cuenta las condiciones de BenDaniel-Duke, se observa claramente que el tunelamiento sucede mas rápido con el potencial parabólico que con el potencial rectangular tradicional, sin embargo los estados resonantes son más evidentes en la barrera rectangular.

Las ventajas de tener una mayor rapidez en la transmisión, es la rapidez que se tiene ante una respuesta del material para la transmisión de la información; así como una respuesta mas sensible ante un estímulo en la fotoluminiscencia.

3.5 EFECTO DE PRESION HIDROSTATICA, CAMPOS EXTERNOS E IMPUREZAS

En este caso se trabaja bajo las siguientes condiciones físicas: en primera instancia se supone que tanto el campo eléctrico como el campo magnético son invariantes en el tiempo; suponemos que el campo eléctrico y magnético son invariantes en el tiempo. De acuerdo a este problema físico, se ha elegido el campo eléctrico en dirección paralela a la dirección de tunelamiento de la partícula en la barrera es decir $\vec{E}(z) = F \hat{z}$ el cual afecta la dinámica de la partícula o sea acelera dicha partícula favoreciendo el efecto túnel. Igualmente el campo magnético se escoge perpendicular al plano x, z , es decir $\vec{B}(z) = B \hat{y}$ el cual va a hacer que la partícula este más tiempo localizada en la barrera. Aquí también se tiene en cuenta las definiciones de la energía en el punto gamma afectada por presión hidrostática (3.48), y la definición de la energía en función de la concentración del material (ver ecuación 3.53)

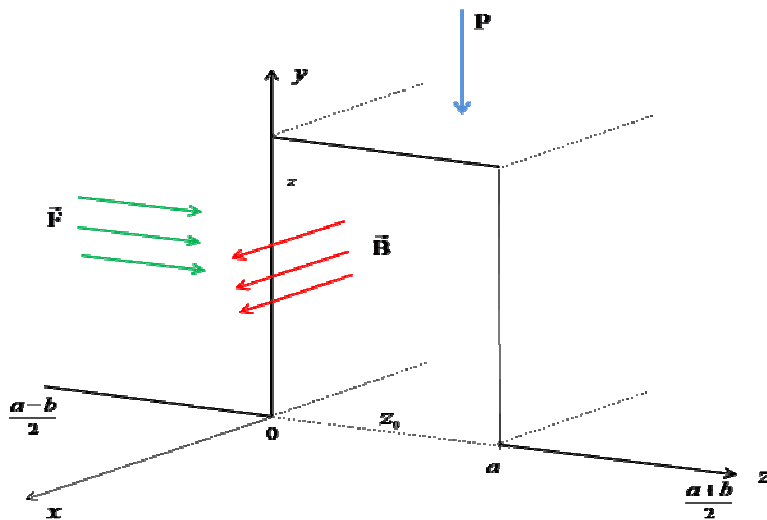


Figura 3.6. Barrera de potencial con campo externo eléctrico y magnético, presión hidrostática e impureza.

La constante dieléctrica depende de la presión, cuya expresión para bajas temperaturas esta dada por

$$\varepsilon(p) = 13.13 - 0.0088p \quad (3.48)$$

Además la masa efectiva del material también se modifica, así:

$$m_1^*(p) = m_1^*(0)e^{0.0078p} \quad (3.49)$$

La ecuación (3.48) y (3.49) están dadas para presiones entre 0 y 30 kbar

El potencial de la barrera en términos de la concentración y de la presión hidrostática esta dados por la ecuación (3.50)

$$V(z, p) = \begin{cases} 0 & \text{si } \frac{a-b}{2} < z < 0 \\ \nu_0(p, \chi) & \text{si } 0 < z < a \\ 0 & \text{si } a < z < \frac{a-b}{2} \end{cases} \quad (3.50)$$

El potencial generado por la impureza dentro de la barrera se muestra como sigue:

$$V_e^{(\xi)} = \frac{e^2}{z_0^2 \varepsilon(p) \xi} \begin{cases} z^2 + z_0 z + z_0^2 & \text{si } 0 < z < z_0 \\ z^2 - 5z_0 z + 7z_0^2 & \text{si } z_0 < z < a \end{cases} ; \quad \xi \geq \frac{k_B^4 k_e}{z_0^3} \quad (3.51)$$

El término ξ , es una aproximación del potencial de la impureza y z_0 hace referencia a la posición de la impureza. El campo eléctrico afecta toda la estructura en la región comprendida por $\frac{a-b}{2} < z^* < \frac{a-b}{2}$; El campo magnético y la impureza se ubican en la barrera es decir entre $0 < z^* < a$.

La ecuación de onda que involucra los parámetros establecidos previamente en el sistema de la heteroestructura esta dado por:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} - \left(\frac{1}{k_B^4} z^2 + \frac{1}{k_F^3} z + k_2^2 \right) \psi + \frac{k_e}{|z - z_0|} \psi + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} - i \frac{2}{k_B^2} z \frac{\partial \psi}{\partial y} = 0 \quad (3.52)$$

donde k_F y k_B son la longitud eléctrica y magnética debido al campo eléctrico \vec{F} y al campo magnético \vec{B} , el hamiltoniano del sistema está dado por

$$H = \begin{cases} \frac{1}{2m_0} P_{z^*}^2 + q u(z^*) & \text{si } \frac{a-b}{2} < z^* < 0 \\ \frac{1}{2m_1(p)} \left[P + q \vec{A}(z^*) \right]^2 + q u(z^*) + V_0 - \frac{\lambda q^2}{\varepsilon(p)|z-z_0|} & \text{si } 0 < z^* < a \\ \frac{1}{2m_0} P_{z^*}^2 + q u(z^*) & \text{si } a < z^* < \frac{a+b}{2} \end{cases} \quad (3.53)$$

Aquí el potencial escalar $u(z^*) = -F z^*$ y $\vec{E}(z) = -\frac{d}{dz} u(z^*) \hat{z} = F \hat{z}$ El vector potencial

magnético $\vec{A}(z^*) = (B^*, 0, 0)$ debido a que $\nabla \times \vec{A} = (0-0)\hat{x} - (0-B)\hat{y} + (0-0)\hat{z} = B\hat{y} = \vec{B}$

$$\text{con } \lambda = \frac{1}{4\pi \varepsilon_0} \quad ; \quad \varepsilon_0 = 8.85 \times 10^{-12} \frac{\text{C}^2}{\text{Nm}^2} \quad \text{y } -e = \frac{q}{\sqrt{4\pi \varepsilon_0}} = \frac{q}{c} \quad \Rightarrow \quad e^2 = \frac{q^2}{c^2} .$$

Por lo tanto:

$$H = \begin{cases} \frac{1}{2m_0^*} P_{z^*}^2 + eFz^* & \text{si } \frac{a-b}{2} < z^* < 0 \\ \frac{1}{2m_1^*(p)} \left[P + e\bar{A}(z^*) \right]^2 + eFz^* + V_0 - \frac{\lambda e^2}{\varepsilon(p)|z-z_0|} & \text{si } 0 < z^* < a \\ \frac{1}{2m_0^*} P_{z^*}^2 + qFz^* & \text{si } a < z^* < \frac{a+b}{2} \end{cases} \quad (3.54)$$

En esta figura 3.6 se muestra claramente la orientación del campo eléctrico, que es la misma dirección de crecimiento de la estructura, además es la misma dirección de tunelamiento, el campo magnético es perpendicular al campo eléctrico y perpendicular a la altura de la barrera, la presión hidrostática es paralela a la altura de la barrera, la impureza

La función de onda solución de este sistema está dada por

$$\psi(y, z) = \begin{cases} A e^{ik_1 z} + B e^{-ik_1 z} & \text{si } \frac{a-b}{2} < z < 0 \\ e^{-\frac{1}{2}\eta + ik_y y} \left[\text{CM} \left(\frac{\lambda+1}{4}; \frac{1}{2}; \eta \right) + \text{DU} \left(\frac{\lambda+1}{4}; \frac{1}{2}; \eta \right) \right] & \text{si } 0 < z < z_0 \\ e^{-\frac{1}{2}\gamma + ik_y y} \left[\text{EM} \left(\frac{\lambda+1}{4}; \frac{1}{2}; \gamma \right) + \text{FU} \left(\frac{\lambda+1}{4}; \frac{1}{2}; \gamma \right) \right] & \text{si } z_0 < z < a \\ G e^{ik_1 z} & \text{si } a < z < \frac{a+b}{2} \end{cases} \quad (3.55)$$

Donde los argumentos de la función hipergeométricas confluentes, involucra los campos externos, la impureza y los efectos de la presión hidrostática. Por tanto el coeficiente de transmisión de la partícula está dado por la expresión:

$$T = \frac{1}{R^2} e^{(\eta_0 + \eta_{z_0} + \gamma_{z_0} + \gamma_a)} \left[(w_1 + w_3)^2 + (w_2 + w_4)^2 \right]^{-1} \quad (3.56)$$

A partir de la ecuación (3.53), obtenemos las siguientes graficas:

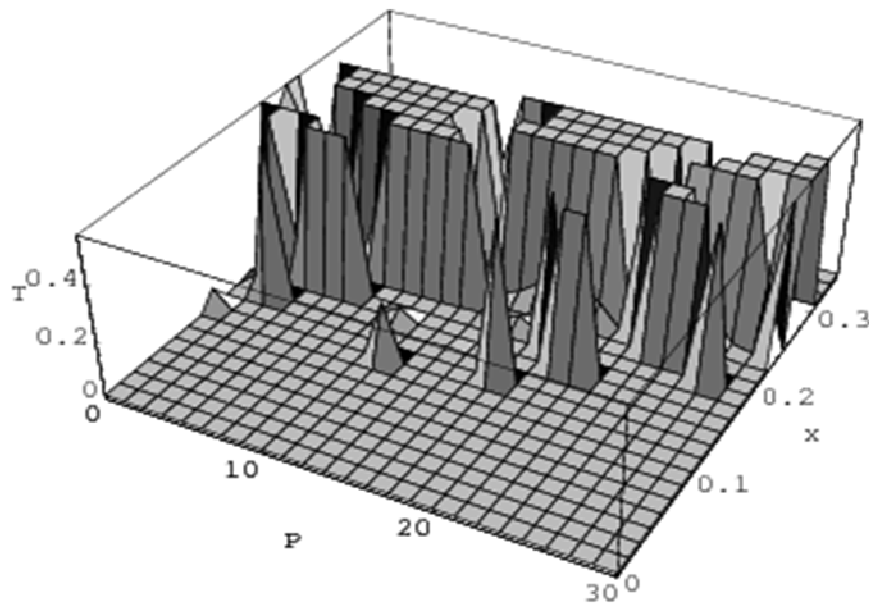


Figura 3.7. Variación del coeficiente de transmisión (T), cuando varía la presión hidrostática (P) y la concentración (x) del material.

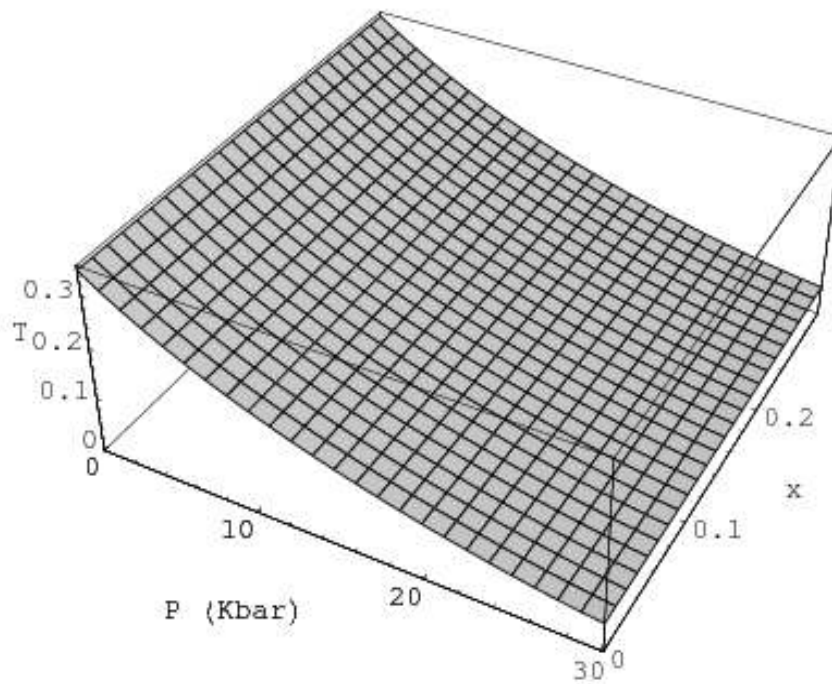


Figura 3.8. Se muestra la dependencia de tunelamiento en función de la presión hidrostática y del campo magnético, los valores de la presión están entre 0 y 30 kpas, y del campo están entre 0 y 0.3 teslas y concentración (x) del material.

3.6. ANALISIS DE RESULTADOS

Dado el desarrollo matemático de la sección 3.1, se demostró que es imposible suponer un potencial parabólico a partir de la definición matemática de parábola, ya que su desarrollo en la ecuación diferencial implica que esta sea de carácter compleja, lo que imposibilita hacer un desarrollo analítico de la ecuación, y solo tendría solución por métodos aproximados, debido a que el objeto de este trabajo es resolver el sistema de manera analítica, se descarta este procedimiento.

Para la grafica 3.6, se observa claramente como la transmisión es afectada de manera por la concentración y la presión hidrostática, los picos muestran una mayor transmisión a medida

que la concentración del material aumenta, por consiguiente el dopaje de este semiconductor se ve favorecida en el tunelamiento cuántico, así también el efecto de presión hidrostática es significativo en el tunelamiento, a medida que la presión aumenta la transmisión comienza a disminuir, esto comienza a visualizarse mejor en la siguiente grafica.

En la grafica 3.7, podemos observar que la transmisión se ve afectada de manera muy importante, para este caso se observa que el tunelamiento solo está siendo influenciado por la presión hidrostática, a medida que la presión hidrostática aumenta la transmisión decae considerablemente, en este caso el campo magnético externo aplicado no tiene gran importancia; ya que al haber presión hidrostática la barrera sufre una deformación lo modifica considerablemente la transmisión, dejando así los efectos de campo a un segundo plano.

CAPITULO 4. TRANSPORTE CON EFECTOS DE ESPÍN

4.1. EFECTO ZEEMAN

Para este capítulo donde se trabaja la interacción espín-orbita, es indispensable el hablar del efecto **Zeeman**, que es el desdoblamiento en dos o tres componentes de ciertas líneas espectrales por acción de un campo magnético. La separación de las componentes es proporcional al campo magnético, lo que facilita su medida.

El estudio de los efectos de la interacción espín-orbita involucrados en este trabajo de grado, da lugar a la estructura fina, que a su vez genera el desdoblamiento de las líneas espectrales, debido al efecto producido por la presencia del campo externo; por lo tanto es pertinente hacer énfasis en este efecto, llamado el efecto **Zeeman**, por lo cual vamos a describir el Hamiltoniano del sistema como está en la siguiente ecuación,

$$H = \frac{1}{2m} \left(\vec{P} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + V - \frac{e}{mc} \vec{H} \cdot \vec{S} \quad (4.1)$$

Donde:

V , es la energía potencial del sistema, \vec{S} , es el operador de espín del electrón y \vec{A} es el potencial vector del campo externo

El Hamiltoniano (4.1), puede ser expresado como se muestra en la ecuación (4.2)

$$H = \frac{1}{2m} \left[\vec{P}^2 - \frac{e}{c} (\vec{P} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \vec{P}) + \left(\frac{e}{c} \right)^2 \vec{A}^2 \right] + V - \frac{e}{mc} \vec{H} \cdot \vec{S} \quad (4.2)$$

\vec{A} , podemos representarlo en la forma

$$\vec{A} = \frac{1}{2} \vec{h} \times \vec{r} \quad (4.3)$$

En efecto se verifica que,

$$\text{rot}\vec{A} = \vec{h} \quad (4.4)$$

Teniendo en cuenta que el momento P, conmuta con el campo vectorial A, así:

$$\vec{P} \cdot \vec{A} - \vec{A} \cdot \vec{P} = 0 \quad (4.5)$$

De esta forma:

$$\vec{P} \cdot \vec{A} - \vec{A} \cdot \vec{P} = -i\hbar \text{div}\vec{A} \quad (4.6)$$

Por lo tanto podemos tomar la divergencia del campo vectorial como:

$$\text{div}\vec{A} = \text{div}\left(\frac{1}{2}\vec{h} \times \vec{r}\right) = 0 \quad (4.7)$$

Entonces podemos escribir el Hamiltoniano (4.2), como un Hamiltoniano total que involucra la presencia del campo magnético y la interacción del espín, así el Hamiltoniano del sistema esta dado por:

$$H = H_0 - \frac{e}{2mc} \vec{h} \cdot (\vec{r} \times \vec{p}) + \frac{e^2}{2mc^2} (\vec{h} \times \vec{r})^2 - \frac{e}{mc} \vec{h} \cdot \vec{S} \quad (4.8)$$

donde

$$H_0 = \frac{1}{2m} \vec{P}^2 + V \quad (4.9)$$

La ecuación (4.9), representa el Hamiltoniano en ausencia del campo magnético \vec{h} , es decir sin tener en cuenta la interacción Zeeman.

Considerando el campo magnético externo débil, podemos reescribir el Hamiltoniano de la siguiente manera

$$H = H_0 - \vec{\mu} \cdot \vec{h} \quad (4.10)$$

Tomando el campo magnético externo \vec{h} , suficientemente débil, el tercer termino en la ecuación (4.8), que es cuadrático en \vec{h} , lo podemos despreciar con respecto al segundo termino que es lineal en \vec{h} , es decir, consideremos la energía correspondiente a este termino mucho menor que las diferencias entre los niveles energéticos del átomo en ausencia del campo magnético.

Entonces podemos escribir el Hamiltoniano de la siguiente forma.

$$H = H_0 - \frac{e}{2mc} \vec{h} \cdot \vec{L} - \frac{e}{mc} \vec{h} \cdot \vec{S} \quad (4.11)$$

Así podemos llegar a esta expresión.

$$H = H_0 - \frac{e}{2mc} \vec{h} \cdot (\vec{L} - 2\vec{S}) \quad (4.12)$$

donde

$$H = H_0 - \vec{\mu} \cdot \vec{h}; \quad \vec{\mu} = \frac{e}{2mc} (\vec{L} - 2\vec{S}) \quad (4.13)$$

que es el operador del momento magnético del átomo, en términos del momento angular total J ,

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} \quad (4.14)$$

Así el momento magnético del electrón toma la forma

$$\vec{\mu} = \frac{e}{2mc} (\vec{J} + \vec{S}) \quad (4.15)$$

Entonces:

$$H = H_o - \vec{\mu} \cdot \vec{h} \quad (4.16)$$

Tomando el campo magnético en la dirección del eje z, la expresión se reduce a:

$$H = H_o - \vec{\mu}_z \cdot \vec{h} \quad (4.17)$$

Si se considera el segundo termino de la ecuación (4.17), como perturbación, es decir, que la energía correspondiente a este término es mucho menor que las diferencias entre los niveles energéticos del átomo en ausencia del campo magnético.

Así se encuentra las correcciones de primer orden de la teoría de perturbaciones a los niveles energéticos no perturbados que son degenerados con respecto al número cuántico M_J .

Los elementos matriciales del operador de perturbación son:

$$\langle n, J, L, S, M_J | -h\mu_z | n, J, L, S, M_J \rangle \quad (4.18)$$

donde

$$| n, J, L, S, M_J \rangle \quad (4.19)$$

Son los vectores propios del Hamiltoniano no perturbado H_o ; donde el término adicional esta dado por:

$$\Delta E_{JLM_J} = -\frac{e\hbar}{2mc} H g M_J \quad (4.20)$$

4.2 ACOPLAMIENTO ESPÍN ORBITA

Como se sabe el espín, es el efecto físico que proporciona información de la medida del momento angular y de la acción, movimiento intrínseco de toda partícula. En contraste con

la mecánica clásica, donde el momento angular se asocia a la rotación de un objeto extenso. El espín es un fenómeno exclusivamente cuántico. Este presenta una serie de cualidades que lo distinguen del momento angular clásico, estas son: su valor está cuantizado, lo que significa que no pueden encontrarse partículas con cualquier valor de espín, sino que es siempre un múltiplo entero de $\frac{\hbar}{2}$, (en donde \hbar es la constante de Planck dividida entre 2π , también llamada constante de Dirac).

Así mismo, cuando se realiza una medición del espín en diferentes direcciones, solo existen dos posibles valores iguales y de signo contrario, que son sus posibles proyecciones sobre una dirección predeterminada z . Por ejemplo la proyección del momento angular de espín de un electrón, si se mide de una dirección particular dada por un campo magnético externo puede resultar únicamente en los valores $\frac{\hbar}{2}$ o bien $-\frac{\hbar}{2}$.

Por otra parte, la magnitud del espín, independiente de la dirección, es única para cada tipo de partícula elemental. Para los electrones, los protones y los neutrones, esta magnitud es en unidades de $\hbar\sqrt{s(s+1)}$, siendo $s=1/2$. Esto contrasta con el caso clásico donde el momento angular de un cuerpo alrededor de su eje puede asumir diferentes valores según su rotación.

Por lo tanto podemos decir que la interacción espín-orbita, es la interacción magnética (cuántica) entre el momento magnético de espín y el momento magnético orbital.

En el transporte dentro de un material semiconductor a escala nanométrica, se presentan fenómenos cuánticos en el transporte que no pueden ser despreciados tal como la

interacción espín orbita. Dentro de este fenómeno se presentan dos casos importantes los cuales hay que tener en cuenta, dependiendo del tipo de estructura, estos casos son el efecto Rashba y el efecto Dresselhaus, para nuestro trabajo solo nos centraremos en el efecto Rashba, aunque no dejaremos de mencionar el otro efecto.

4.3 EFECTO RASHBA

En primera instancia veamos el término adicional a la contribución del Hamiltoniano del sistema con el término Rashba, así:

$$H_0 = \frac{\vec{P}_e^2}{2m} + V_0 \quad (4.21)$$

La ecuación (4.21), nos muestra el Hamiltoniano del sistema sin el término adicional del acoplamiento. Ahora bien, si partimos del hecho de que el electrón orbita alrededor del núcleo (concepción pseudoclasica), este genera un campo magnético en términos del radio de su orbita y la corriente que debido a este movimiento e causa. Dicho campo magnético se expresa de la siguiente manera.

$$\vec{B} = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{\vec{J} \times \vec{r}}{r^3} \quad (4.22)$$

donde

μ = Momento magnético del electrón

\vec{V} = Velocidad del electrón

\vec{J} = Corriente generada por el electrón

Por lo tanto este campo magnético (4.22), se transforma utilizando esta relación $\vec{J} = Ze\vec{V}$. Así:

$$\vec{B} = \frac{\mu_0 Z e}{4\pi r^3} \vec{V} \times \vec{r} \quad (4.23)$$

Teniendo en cuenta el campo eléctrico de la siguiente manera.

$$\vec{E} = \frac{Ze\vec{r}}{4\pi\epsilon_0 r^3} \quad (4.24)$$

Entonces se puede cambiar el campo magnético como sigue:

$$\vec{B} = \mu_0 E_0 \vec{V} \times \vec{E} \quad (4.25)$$

Donde μ_0 y E_0 , son el momento magnético y el campo eléctrico intrínseco; el campo magnético se expresa de la siguiente forma.

$$\vec{B} = \frac{\vec{V} \times \vec{E}}{c^2} \quad (4.26)$$

En la ecuación (4.27) se muestra el Hamiltoniano que contiene el termino del acoplamiento espín orbita, y se adiciona al Hamiltoniano de todo el sistema.

$$H_s = \frac{g_s \mu_B \vec{S}}{\hbar c^2} \cdot (\vec{V} \times \vec{E}) \quad (4.27)$$

Donde g_s y μ_B es factor giro magnético y el magnetón de Bohr respectivamente, \vec{S} es el vector de espín.

Tomando $\vec{V} = -\vec{V}$, ya que estamos en el sistema de los electrones, entonces.

$$\mathcal{G}(r) = -e\varphi \quad (4.28)$$

Expresando el campo eléctrico de la siguiente forma y remplazando en la ecuación (4.30), tenemos.

$$\vec{E} = -\vec{\nabla} \varphi = -\frac{\vec{r}}{r} \frac{d\varphi}{dr} \quad (4.29)$$

Por tanto el hamiltoniano adicional se transforma en:

$$H_s = -\frac{g_s \mu_B}{m_e \hbar c^2} \frac{\vec{S}}{r} \cdot \vec{L} \frac{d\mathcal{G}}{dr} \quad (4.30)$$

Así el Hamiltoniano del efecto e acoplamiento espin orbita esta dadopor:

$$H_{S0}^R = H^R = -\frac{1}{2m_e^2 c^2} \vec{S} \cdot \vec{L} \left(\frac{1}{r} \right) \frac{d\mathcal{G}}{dr} \quad (4.31)$$

Donde $m_e = \frac{g_s \mu_B}{e \hbar}$, Teniendo en cuenta que $\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$, donde $\vec{\sigma}$ representa las matrices de Pauli; entonces:

$$H^R = \frac{\hbar}{2m_e^2 c^2} \vec{\sigma} \cdot \vec{L} \left(\frac{1}{r} \right) \frac{d\mathcal{G}}{dr}; \quad (4.32)$$

Donde se ha tomado $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{P}$.

Mediante transformaciones algebraicas como se muestran en el anexo (C), podemos llevar la ecuación (4.34) a la siguiente expresión.

$$H^R = \frac{\hbar}{4m_e^2 c^2} (\vec{\nabla} \varphi \times \vec{\sigma}) \cdot \vec{P} \quad (4.35)$$

Tomando la dirección solo del eje z, como la dirección predeterminada, tenemos.

$$\vec{\nabla}\varphi \times \vec{\sigma} = \begin{vmatrix} \hat{x} & \hat{y} & \hat{z} \\ 0 & 0 & \frac{\partial\varphi}{\partial z} \\ \sigma_x & \sigma_y & \sigma_z \end{vmatrix} \quad (4.36)$$

El producto cruz para

$$\vec{\nabla}\varphi \times \vec{\sigma} = (\sigma_x F_z) \hat{y} - (\sigma_y F_z) \hat{x} \quad (4.37)$$

Donde llamamos a $F_z = \frac{\partial\varphi}{\partial z}$, por lo tanto

$$(\vec{\nabla}\varphi \times \vec{\sigma}) \cdot \vec{P} = F_z (\sigma_x \hat{y} - \sigma_y \hat{x}) \cdot (P_x \hat{x} + P_y \hat{y} + P_z \hat{z}) \quad (4.38)$$

Por consiguiente tenemos un sistema de dos matrices diagonalizadas en términos de los momentos en los ejes x, y ; tenemos entonces la relación.

$$(\vec{\nabla}\varphi \times \vec{\sigma}) \cdot \vec{P} = F_z \left(\begin{vmatrix} 0 & P_y \\ P_y & 0 \end{vmatrix} - \begin{vmatrix} 0 & -iP_x \\ iP_x & 0 \end{vmatrix} \right) \quad (4.39)$$

Así el Hamiltoniano adicional del término Rashba se puede escribir matricialmente como un sistema de dos niveles degenerados, donde se puede fácilmente apreciar que aunque la dirección de tunelamiento esta dado a lo largo del eje z , o eje de crecimiento del material, la polarización del espín se da en el eje x, y , como lo muestra el termino adicional Rashba.

$$H^R = \alpha \left(\begin{vmatrix} 0 & P_y \\ P_y & 0 \end{vmatrix} - \begin{vmatrix} 0 & -iP_x \\ iP_x & 0 \end{vmatrix} \right) \quad (4.40)$$

Donde α está dado por $\alpha = \frac{\hbar F_z}{4m_e^2 c^2}$, que comúnmente se llama fuerza de acoplamiento espín orbita para el termino Rashba.

4.4 ACOPLAMIENTO ESPÍN ORBITA EN UN PUNTO CUÁNTICO

Dentro de las escalas nanométricas, hay sistemas en los cuales se ha venido trabajando últimamente, uno de ellos es el Hamiltoniano que describe al sistema del punto cuántico es:

$$H = \frac{P^2}{2m_e} + V(x, y) + \alpha_R (P_x \sigma_y - P_y \sigma_x) + \frac{1}{2} g \mu_B B \sigma_z \quad (4.41)$$

Donde los dos primeros términos corresponden a los términos normales de energía cinética y potencial dados en los libros de mecánica cuántica, el segundo término Rashba de acoplamiento espín orbita, y el ultimo término hace referencia la campo magnético intrínseco generado por el electrón al orbitar al núcleo.

Aquí, g , es el radio giro magnético, μ_B es el magnetón de Bohr, α_R es la fuerza de acoplamiento espín-orbita, B es el campo magnético paralelo al eje z y ω_c es la frecuencia ciclotrónica; además se tiene en cuenta que:

$$P = -i\nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A} \quad (4.42)$$

También consideramos las coordenadas cilíndricas, como sigue: $x = \rho \cos \phi$, $y = \rho \sin \phi$, $A_\rho = 0$ y $A_\phi = \frac{B}{2} \rho$, entonces,

$$P^2 = \left(i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 \quad (4.43)$$

Ahora podemos llevar estas transformaciones a nuestro sistema que además involucra el campo magnético, para el cual se hace uso de las relaciones del laplaciano en coordenadas

cilíndricas y de las respectivas derivadas del campo vector, como se muestra en el anexo (C).

Así podemos expresar el laplaciano del sistema como se muestra en la ecuación (3.44).

$$\nabla_{\rho,\phi} = -\frac{1}{2m} \left\{ \hbar^2 \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} \right] - \hbar \frac{e}{c} i \frac{\partial}{\partial \phi} + \left(\frac{e}{c} \right)^2 \frac{B^2}{4} \rho^2 \right\} \quad (4.44)$$

Y por consiguiente el Hamiltoniano que describe el sistema esta dado por:

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} \right] + i \frac{\hbar e B}{2mc} \frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{B^2}{8m} \left(\frac{e}{c} \right)^2 \rho^2 \quad (4.45)$$

Donde ω_c , es la frecuencia ciclotrónica, B , es el campo magnético intrínseco; si tomamos en unidades gaussianas, así $\hbar = 1$; entonces obtenemos la siguiente expresión.

$$h(B) = -\frac{1}{2m} \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} \right] + \frac{i}{2} \omega_c \frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{1}{8} m \omega_c^2 \rho^2 \quad (4.46)$$

De acuerdo al anexo (C), podemos obtener la siguiente expresión simplificada.

$$H = h(B) + \alpha_R (P_x \sigma_y - P_y \sigma_x) + \frac{1}{2} g \mu_B B \sigma_z \quad (4.47)$$

Donde $h(B)$, es el termino que está en función del campo magnético, el segundo termino es el término Rashba en el Hamiltoniano que esta en términos de la matrices de Puli, así con el ultimo termino también en términos de la matriz de Pauli podemos escribir la ecuación anterior así:

$$H = \left\{ \begin{pmatrix} h(B) & 0 \\ 0 & h(B) \end{pmatrix} + \alpha_R \begin{pmatrix} 0 & -(P_x + iP_y) \\ (iP_x - P_y) & 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{2} g \mu_B B \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right\} \quad (4.48)$$

Cuya expresión final es:

$$H = \left\{ \begin{pmatrix} h(B) & 0 \\ 0 & h(B) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & \alpha_R e^{i\phi} \left(-\frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{i}{\rho} \frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{eB}{2c} \rho \right) \\ \alpha_R e^{-i\phi} \left(\frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{i}{\rho} \frac{\partial}{\partial \phi} - \frac{eB}{2c} \rho \right) & 0 \end{pmatrix} + \Omega \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right\} \quad (4.49)$$

con $\Omega = \frac{1}{2} g \mu_B B$.

Por lo que el Hamiltoniano del sistema toma la forma matricial así:

$$H = \left\{ \begin{pmatrix} h(B) + \Omega & \alpha_R e^{i\phi} \left(-\frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{i}{\rho} \frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{eB}{2c} \rho \right) \\ \alpha_R e^{-i\phi} \left(\frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{i}{\rho} \frac{\partial}{\partial \phi} - \frac{eB}{2c} \rho \right) & h(B) - \Omega \end{pmatrix} \right\} \quad (4.50)$$

El Hamiltoniano anterior conmuta con la proyección z , del operador total del momento

$$j_z = l_z + \frac{1}{2} \sigma_z \quad ; \quad l_z = i \partial_\phi \quad (4.51)$$

Las auto funciones del momento angular son de la forma:

$$\psi_i(\rho, \phi) = \begin{bmatrix} e^{i(j-1/2)\phi} f_j(\rho) \\ e^{i(j+1/2)\phi} g_j(\rho) \end{bmatrix} \quad (4.52)$$

Entonces podemos reescribir el Hamiltoniano de la siguiente forma.

$$H\psi = E\psi \quad (4.53)$$

$$\begin{Bmatrix} h(B) + \frac{1}{2} g\mu_B B & \alpha_R e^{i\phi} \left(-\frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{i}{\rho} \frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{eB}{2c} \rho \right) \\ \alpha_R e^{-i\phi} \left(\frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{i}{\rho} \frac{\partial}{\partial \phi} - \frac{eB}{2c} \rho \right) & h(B) - \frac{1}{2} g\mu_B B \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} e^{i(j-1/2)\phi} f_j(\rho) \\ e^{i(j+1/2)\phi} g_j(\rho) \end{Bmatrix} = E \begin{Bmatrix} e^{i(j-1/2)\phi} f_j(\rho) \\ e^{i(j+1/2)\phi} g_j(\rho) \end{Bmatrix} \quad (4.54)$$

Ahora podemos escribir las respectivas funciones para f y g del Hamiltoniano anterior.

$$\begin{aligned} & \left\{ -\frac{1}{2} \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} \right] + \frac{i}{2} \omega_c \frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{1}{8} m\omega_c^2 \rho^2 \right\} e^{i(j-1/2)\phi} f_j(\rho) + \frac{1}{2} g\mu_B B e^{i(j-1/2)\phi} f_j(\rho) + \\ & \alpha_R e^{i\phi} \left(-\frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{i}{\rho} \frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{eB}{2c} \rho \right) e^{i(j+1/2)\phi} g_j(\rho) = E e^{i(j-1/2)\phi} f_j(\rho) \end{aligned} \quad (4.65)$$

$$\begin{aligned} & \left\{ \frac{1}{2} \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} \right] - \frac{i}{2} \omega_c \frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{1}{8} m\omega_c^2 \rho^2 \right\} e^{i(j+1/2)\phi} g_j(\rho) - \frac{1}{2} g\mu_B B e^{i(j+1/2)\phi} g_j(\rho) + \\ & \alpha_R e^{i\phi} \left(-\frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{i}{\rho} \frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{eB}{2c} \rho \right) e^{i(j-1/2)\phi} f_j(\rho) = E e^{i(j+1/2)\phi} g_j(\rho) \end{aligned} \quad (4.56)$$

Para la ecuación (4.68) hacemos las respectivas derivadas $\frac{\partial}{\partial \phi} e^{i(j-1/2)\phi}$, y $\frac{\partial^2}{\partial \phi^2} e^{i(j-1/2)\phi}$ como se muestra en el apéndice (4), con las siguientes relaciones.

$$2m\omega_c = 2m \frac{eB}{mc} = 2 \frac{eB}{c} \quad (4.57)$$

ademas

$$\frac{1}{8} 2m^2 \omega_c^2 = \frac{1}{4} m^2 \frac{e^2 B^2}{m^2 c^2} = \frac{e^2 B^2}{4c^2} \quad (4.58)$$

Podemos llegar a la siguiente expresión.

$$\left[\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \left(\rho \frac{d}{d\rho} \right) - \frac{1}{\rho^2} \left[\left(j - \frac{1}{2} \right)^2 - \frac{e^2 B^2}{4c^2} \right]^2 \right] f_j + 2m \left(E - \frac{1}{2} g \mu_B B \right) f_j - 2m \alpha_r \left(-\frac{d}{d\rho} - \frac{1}{\rho} \left(j - \frac{1}{2} \right) + \frac{eB}{2c} \rho \right) g_j = 0 \quad (4.59)$$

Como se observa en la expresión anterior, la ecuación esta en coordenadas cilíndricas que depende únicamente del radio ρ , además esta expresión esta en función f y g , que son funciones que dependen del espín hacia arriba y hacia abajo.

Tomando los operadores de acoplamiento espín orbita para este sistema, de la siguiente forma,

$$\nabla_{\pm, j}^{(B)} = \pm \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{j}{\rho} + \frac{eB}{2c} \rho \quad (4.60)$$

$$\Delta_j^{(B)} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) - \frac{1}{\rho^2} \left(j - \frac{eB}{2c} \rho^2 \right)^2 \quad (4.61)$$

entonces

$$\nabla_{\pm, j+1/2}^{(B)} = \pm \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{(j-1/2)}{\rho} + \frac{eB}{2c} \rho \quad (4.62)$$

$$\Delta_{j+1/2}^{(B)} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) - \frac{1}{\rho^2} \left((j-1/2) - \frac{eB}{2c} \rho^2 \right)^2 \quad (4.63)$$

Por lo tanto llegamos a la siguiente expresión donde m es la masa del electrón, μ_B es el magnetón de Bohr y α_R es la constante de acoplamiento Rashba.

$$\Delta_{j-1/2}^{(B)} f_j + 2m(E - 1/2 gcB) f_j - 2m\alpha_R \nabla_{-, j+1/2}^{(B)} g_j = 0 \quad (4.64)$$

De igual forma tenemos para la ecuación (4.61), así:

$$\left[\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \left(\rho \frac{d}{d\rho} \right) - \frac{1}{\rho^2} \left[\left(j + \frac{1}{2} \right)^2 - \frac{e^2 B^2}{4c^2} \right]^2 \right] g_j + 2m \left(E + \frac{1}{2} g \mu_B B \right) g_j - 2m\alpha_R \left(\frac{d}{d\rho} - \frac{1}{\rho} \left(j + \frac{1}{2} \right) + \frac{eB}{2c} \rho \right) f_j = 0 \quad (4.65)$$

Por consiguiente:

$$\Delta_{j+1/2}^{(B)} g_j + 2m(E + 1/2 g \mu_B B) g_j - 2m\alpha_R \nabla_{+, j-1/2}^{(B)} f_j = 0 \quad (4.66)$$

Ahora bien, para continuar con nuestro estudio, hacemos énfasis de la utilización del efecto Zeeman debido a que al utilizar campo magnético, los átomos al hacer transiciones de un estado de energía a otro, se puede observar un corrimiento en la frecuencia de las líneas espectrales de los átomos, que depende del valor de dicho campo magnético. Esto se debe a que átomos con

distinto momento angular tienen distinto momento magnético. Por tanto es necesario hablar del acoplamiento espín-orbita y del efecto Zeeman.

4.5. ACOPLAMIENTO ESPIN-ORBITA Y EL EFECTO ZEEMAN

Partiendo del siguiente sistema de ecuaciones para las interacciones espín-orbita y del efecto Zeeman tenemos:

$$\begin{cases} h(B) + \frac{1}{2} g\mu_B B & \alpha_R e^{-i\phi} \left(-\frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{i}{\rho} \frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{eB}{2c} \rho \right) \\ \alpha_R e^{i\phi} \left(\frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{i}{\rho} \frac{\partial}{\partial \phi} - \frac{eB}{2c} \rho \right) & h(B) - \frac{1}{2} g\mu_B B \end{cases} \begin{cases} e^{i(j-1/2)\phi} f_j(\rho) \\ e^{i(j+1/2)\phi} g_j(\rho) \end{cases} = E \begin{cases} e^{i(j-1/2)\phi} f_j(\rho) \\ e^{i(j+1/2)\phi} g_j(\rho) \end{cases} \quad (4.67)$$

Miramos ahora la contribución del efecto Zeeman, por lo tanto tenemos:

$$\begin{aligned} & \left[h(B) + \frac{1}{2} g\mu_B B \right] e^{i(j-1/2)\phi} f_j(\rho) + \alpha_R e^{-i\phi} \left(\frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{i}{\rho} \frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{eB}{2c} \rho \right) e^{i(j+1/2)\phi} g_j(\rho) = \\ & E e^{i(j-1/2)\phi} f_j(\rho) \end{aligned} \quad (4.68)$$

Y la ecuación

$$\begin{aligned} & \left[h(B) - \frac{1}{2} g\mu_B B \right] e^{i(j+1/2)\phi} g_j(\rho) + \alpha_R e^{i\phi} \left(\frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{i}{\rho} \frac{\partial}{\partial \phi} - \frac{eB}{2c} \rho \right) e^{i(j-1/2)\phi} f_j(\rho) = \\ & E e^{i(j+1/2)\phi} g_j(\rho) \end{aligned} \quad (4.69)$$

Donde ahora volvemos al valor inicial de $h(B)$, para hacer los respectivos cambios de variable, para su reducción. En esta parte la ecuación muestra una variación en el ángulo de rotación como de forma radial, pero sin embargo nos permite llevarla a la variación en una sola coordenada, como se muestra en el anexo (C); así, de ésta forma podemos hacer uso de cambio de variables adimensionales, así $x = \frac{\rho}{R}$ donde $\rho = xR$, además tenemos $\lambda = (j-1/2)$, de esta forma cambiamos la función $f(\rho) \rightarrow f(x)$ por consiguiente tenemos la ecuación:

$$\left(\frac{1}{xR} \frac{d}{dx} + R \frac{d^2}{dx^2} - \frac{\lambda}{(xR)^2} + 2mE - mg\mu_B B \right) f_j(x) - 2m\alpha_R \left(-R \frac{d}{dx} - \frac{\left(j - \frac{1}{2} \right)}{xR} \right) g_j(x) = 0. \quad (4.70)$$

Introduciendo los siguientes parámetros, $\beta_R = 2\alpha_R mR$, $h = mg\mu_B R^2 B$, $\zeta_R = 2mER$, la ecuación anterior se transforma en:

$$\left(R^3 \frac{d^2}{dx^2} + \frac{R}{x} \frac{d}{dx} + -\frac{\lambda}{x^2} + \zeta - h \right) f_j(x) - \beta_R \left(-R^2 \frac{d}{dx} - \frac{\left(j - \frac{1}{2} \right)}{x} \right) g_j(x) = 0 \quad (4.71)$$

Tomando $k = \zeta - h$, entonces la ecuación diferencial (4.71), toma la forma:

$$\left(R^3 \frac{d^2}{dx^2} + \frac{R}{x} \frac{d}{dx} + -\frac{\lambda}{x^2} + k \right) f_j(x) - \beta_R \left(-R^2 \frac{d}{dx} - \frac{\left(j - \frac{1}{2} \right)}{x} \right) g_j(x) = 0 \quad (4.72)$$

Se transforma en las funciones de Bessel de segunda especie, donde se puede con de las siguientes funciones

$$f_j(x) \rightarrow J_{j-1/2}(kx) \quad (4.73)$$

$$g_j(x) \rightarrow J_{j+1/2}(kx) \quad (4.74)$$

Con las dos relaciones anteriores podemos escribir la ecuación (4.72), en términos de las funciones de Bessel, así:

$$\left(\frac{d}{dx} - \frac{j-1/2}{x} \right) J_{j-1/2}(kx) = k J_{j+1/2}(kx) \quad (4.75)$$

$$\left(\frac{d}{dx} + \frac{j+1/2}{x} \right) J_{j+1/2}(kx) = k J_{j-1/2}(kx) \quad (4.76)$$

Estas ecuaciones están en términos de las funciones de Bessel, que además contienen las dos polarizaciones de los espines, por lo que se convierte en una ecuación diferencial auto consistente, que busca una solución con una polarización de un espín dado en términos de la otra polarización

Tomando la siguiente relación

$$\begin{bmatrix} f_j(x) \\ g_j(x) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_1 J_{j-1/2}(kx) \\ d_2 J_{j+1/2}(kx) \end{bmatrix} \quad (4.77)$$

Donde $d_{1,2}$, son autovalores de la ecuación, que la podemos representar en forma matricial, para encontrar los vectores de onda en función de la polarización del espín.

$$\begin{pmatrix} k^2 - \zeta + h & -\beta_R k \\ -\beta_R k & k^2 - \zeta - h \end{pmatrix} \begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \end{bmatrix} = 0 \quad (4.78)$$

Por lo que

$$(k^2 - \zeta + h)(k^2 - \zeta - h) - (\beta_R k)^2 = 0 \quad (4.79)$$

Podemos llegar a la expresión para k_+ y k_- , que son los vectores de onda del electrón con las respectivas polarizaciones del espín.

$$k^4 - 2\zeta k^2 + \zeta^2 - h^2 - \beta_R^2 k^2 = 0 \quad (4.80)$$

Donde podemos despejar k , así:

$$k_{\pm}^2 = \frac{(2\zeta + \beta_R^2) \pm \sqrt{(2\zeta + \beta_R^2)^2 - 4\zeta^2 + 4h^2}}{2} \quad (4.81)$$

Donde k_+ , k_- corresponden al espín hacia arriba ($\sigma = 1/2$) y al espín hacia abajo ($\sigma = -1/2$).

4.6. RESULTADOS Y ANALISIS

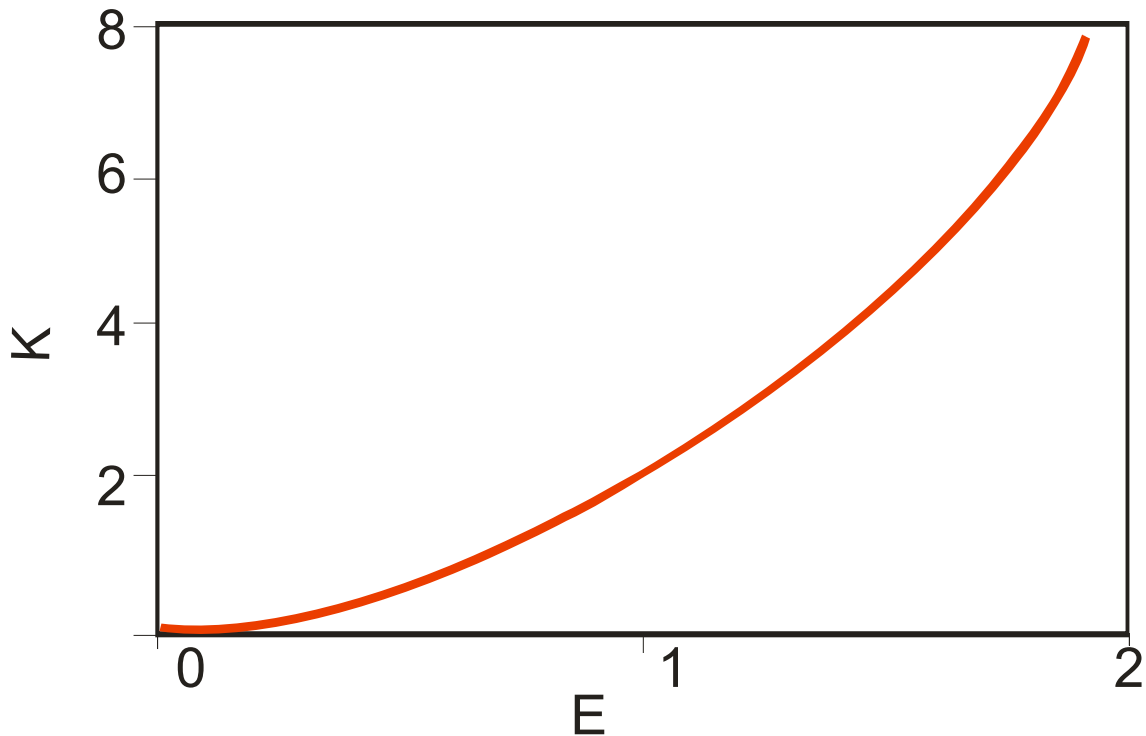


Figura 4.1. Variación del vector de onda a medida que varía la energía del electrón.

De acuerdo a la figura 1, se observa el comportamiento del vector de momento en función de la energía para un pozo de potencial sin las consideraciones del acoplamiento espín orbita, y de campo magnético externo.

Para este caso es claramente apreciable como el vector de onda k , aumenta a medida que la energía del electrón aumenta, esto refleja aun mas el hecho de que el momento del cristal, sea función de la energía y a su vez modifique el comportamiento de la masa del electrón, dando el comportamiento de una masa variable dentro del cristal.

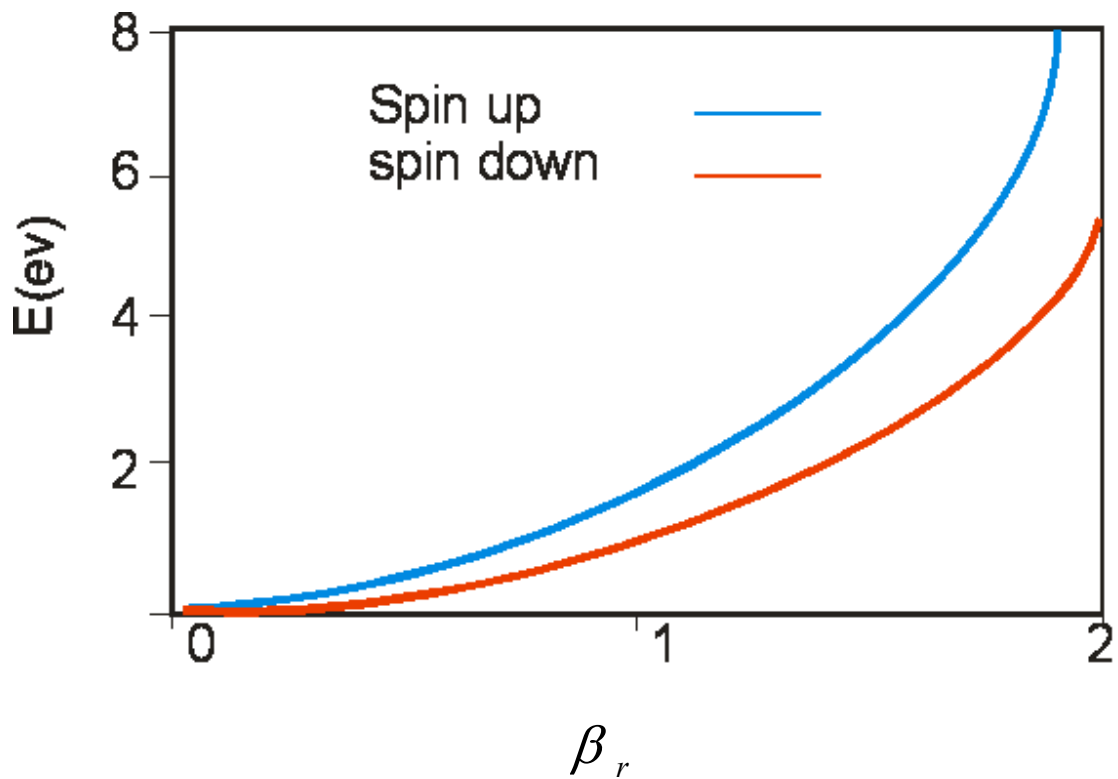


Figura 4.2. Variación de la energía en función de la fuerza de acoplamiento.

En la figura 2, se observa el parámetro del acoplamiento espín orbita en función de la energía, el cual muestra una variación significativa debido a la polarización del espín del electrón (---- espín “up”, ---- espín “down”). Lo que muestra la importancia de la polarización de espín del electrón en sistemas nonométricos, además esta variación de la energía es significativa en los estados energéticos del sistema, puesto que evidencian que de acuerdo a la orientación del espín podemos tener dos valores diferentes de energía para el mismo valor de la fuerza de acoplamiento.

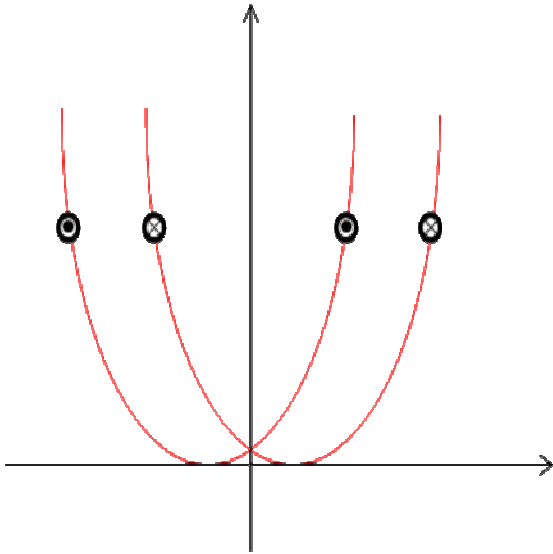


Figura 4.3a.

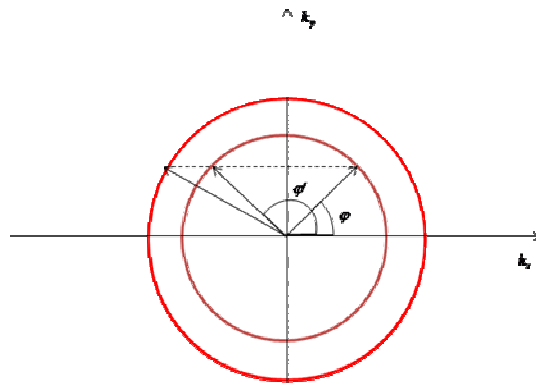


Figura 4.3b.

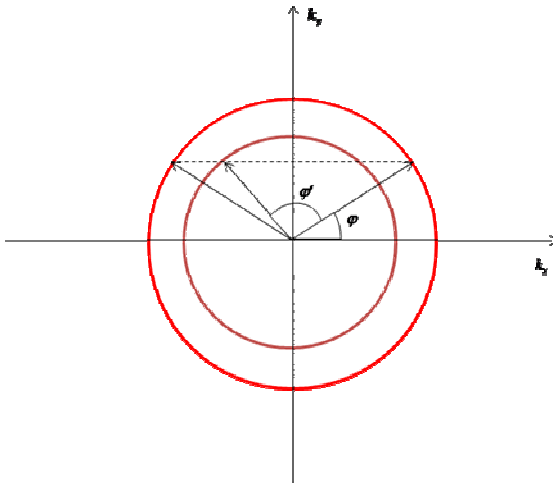


Figura 4.4a.

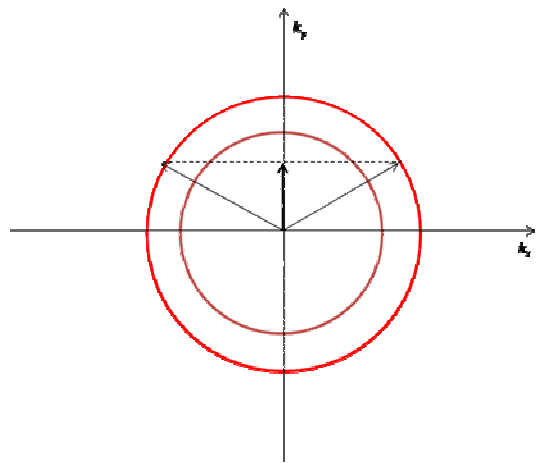


Figura 4.4b.

En la figura 4.3a, los puntos muestran la orientación del espín, las graficas de la figura 4.3b, 4.4a, y 4.4b muestran las posibles configuraciones del espín en la onda plana incidente.

Para el estudio de los efectos de acoplamiento espín orbita en el pozo de potencial, es evidente el cambio de la energía debido al parámetro de acoplamiento y a la orientación del espín, además muestra variaciones significativas de acuerdo a la polarización del espín, donde para igual valor de la fuerza de acoplamiento tenemos diferentes valores de energía en distinta orientación del espín; lo que representa un aporte significativo para la construcción de dispositivos.

4.7. DEPENDENCIA DEL ESPIN EN TUNELAMIENTO

En este caso se estudia el comportamiento de la función de onda en las tres zonas que involucra la descripción del dispositivo mencionado antes, como se ha tratado en capítulos anteriores y en los estándares básicos de la mecánica cuántica; de manera que en la primera región donde la altura de la barrera es cero la función de onda se comporta como la de una partícula libre.

Para este caso y de igual manera que en la forma anterior se considera el tunelamiento en la dirección del eje z, además se considera

Para la región I, y de acuerdo a la ecuación.

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{d^2 \psi}{dz^2} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_1} \psi = E\psi \quad (4.82)$$

Tenemos la energía aplicada al sistema en la dirección z, de la siguiente forma

$$E_z = E - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_1} \quad (4.83)$$

Para la cual podemos expresar el vector de onda dentro del cristal de la siguiente manera:

$$k_0 = \sqrt{\frac{2m_1 E_z}{\hbar^2}} \quad (4.84)$$

Tenemos solución es de la forma

$$\psi_1(z) = A e^{ik_0 z} + B e^{-ik_0 z} \quad (4.85)$$

Para la región II, hacemos la siguiente consideración:

$$H_2 \psi = H_1 \psi \quad (4.86)$$

Por lo tanto

$$-\frac{\hbar^2}{2m_2} \frac{d^2 \psi}{dz^2} + \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_2} \psi + V_0 \psi = -\frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{d^2 \psi}{dz^2} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_1} \psi \quad (4.87)$$

Lo cual se reduce a:

$$\frac{d^2 \psi}{dz^2} - \left(k_{\parallel}^2 + \frac{2m_2 V_0}{\hbar^2} - \frac{m_2}{m_1} k_{\parallel}^2 - \frac{m_2}{m_1} k_z^2 \right) \psi = 0 \quad (4.88)$$

Donde se puede expresar como:

$$\frac{d^2 \psi}{dz^2} - q_0^2 \psi = 0 \quad (4.89)$$

Cuyo vector de onda dentro de la barrera esta expresado como:

$$q_0^2 = \left[\frac{2m_2 V_0}{\hbar^2} - \frac{m_2}{m_1} k_z^2 - \left(\frac{m_2}{m_1} - 1 \right) k_{\parallel}^2 \right]. \quad (4.90)$$

Cuya solución es

$$\psi_2(z) = C e^{q_0 z} + D e^{-q_0 z} \quad (4.91)$$

Para la región III al igual q la región I, y de a

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{d^2 \psi}{dz^2} = E_z \psi \quad (4.92)$$

Cuya solución es

$$\psi_3 = F e^{ik_0 z} \quad (4.93)$$

La solución total del sistema es

$$\psi(z) = \begin{cases} A e^{ik_0 z} + B e^{-ik_0 z} & -\infty < z \leq 0 \\ C e^{q_0 z} + D e^{-q_0 z} & 0 < z < L \\ F e^{ik_0 z} & l > z > \infty \end{cases} \quad (4.94)$$

De acuerdo a las condiciones de contorno de BenDaniel-Duke tenemos

$$t_0 = \frac{-4ik_0 \alpha e^{-\alpha l}}{(\alpha - i\beta k_0)} e^{-ik_0 d} \quad (4.95)$$

Donde tenemos:

$$t_0 = -4i \frac{m_2}{m_1} \frac{k_0 q_0}{\left(q_0 - ik_0 \frac{m_2}{m_1} \right)} e^{-(q_0 + ik_0)d} \quad (4.96)$$

Donde t_0 es el coeficiente de transmisión cuando no se tiene en cuenta la interacción espín orbita, pero se han tenido en cuenta las condiciones de BenDaniel-Duke.

$$T = T_0 \exp\left(\pm \gamma \frac{m_2 k_{\parallel}}{\hbar^2} a q_0 \right) \quad (4.97)$$

El termino adicional en la expresión (4.97) es el debido al termino de acoplamiento espín orbita; γ se define como la fuerza de acoplamiento, a es el ancho de la barrera, y los signos \pm , se relacionan al espín “up” (+) y al espín “down” (-).

4.8. RESULTADOS Y ANALISIS.

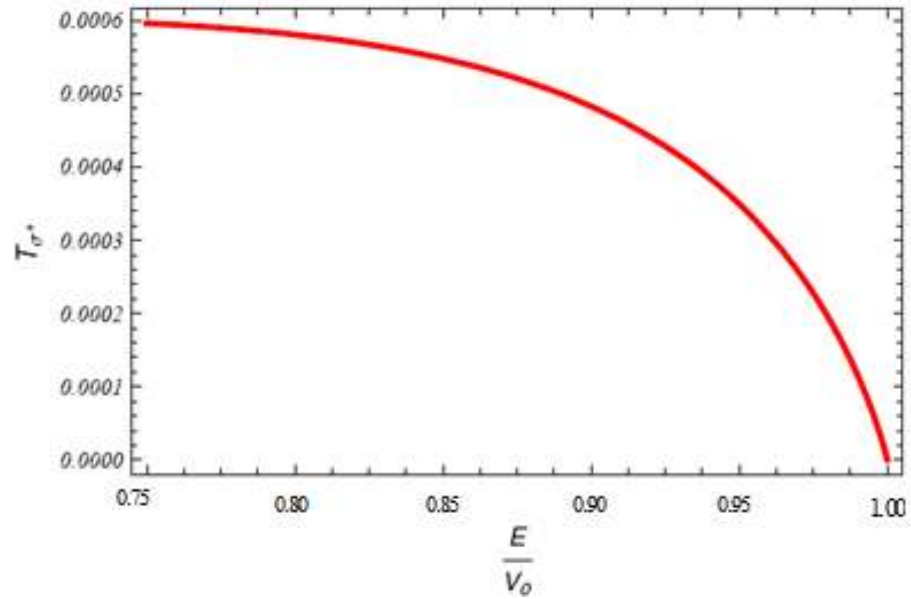


Figura 4.5. Variación del coeficiente de transmisión T_{σ^+} en función de la energía aplicada, con polarización del espín “up” (+), con un campo magnético externo de 0.1 teslas.

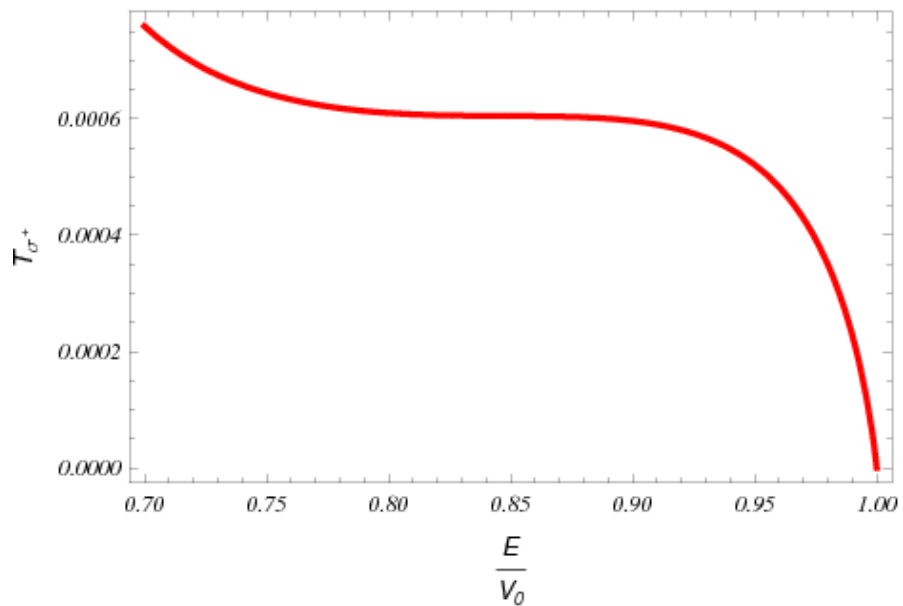


Figura 4.6. Variación del coeficiente de transmisión T_{σ^+} en función de la energía aplicada, con polarización del espín “up” (+), con un campo magnético externo de 0.2 teslas.

En esta gráfica se puede ver que el efecto del acoplamiento espín-orbita, modifica considerablemente la transmisión de la partícula en la barrera de potencial, en este caso tenemos una polarización con espín “up” (+),

Dado el margen de energía tan estrecho en el cual la transmisión decae rápidamente, nos muestra que tan rápidos obedecen ante un estímulo exterior, estos dispositivos; además comparando las dos gráficas anteriores la influencia del campo magnético es muy evidente, dando a que a medida que el campo externo cambia la transmisión también se ve modificada.

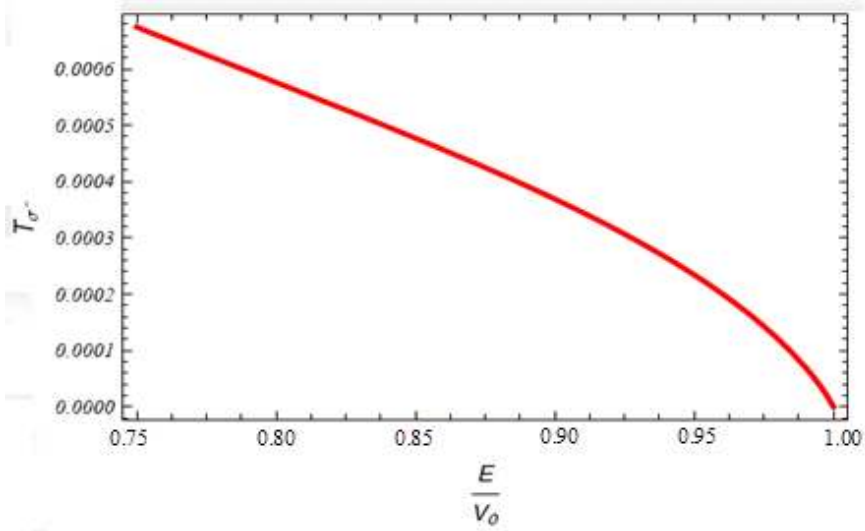


Figura 4.7. Variación del coeficiente de transmisión en función de la energía aplicada, con polarización del espín “down” (-), con un campo externo de 0.1 teslas.

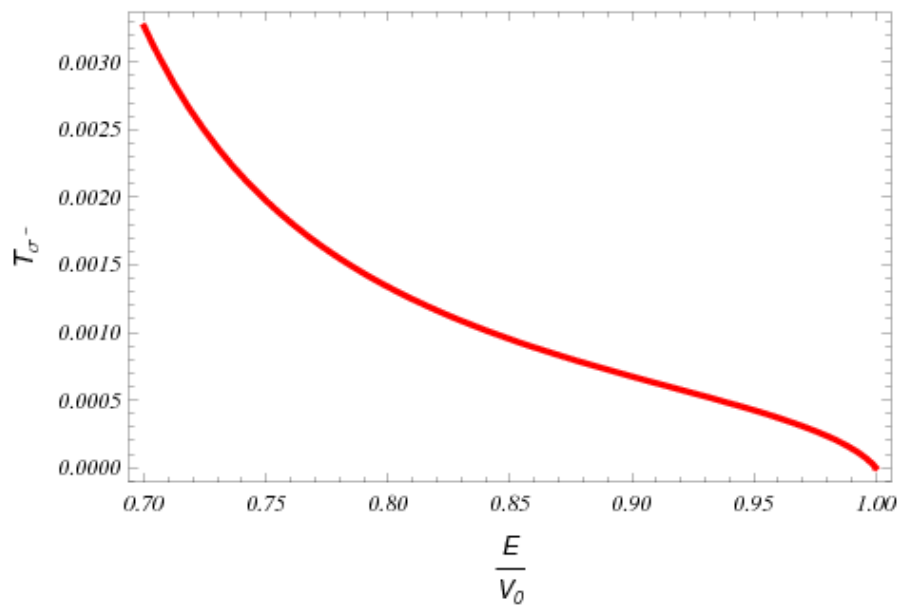


Figura 4.8. Variación del coeficiente de transmisión en función de la energía aplicada, con polarización del espín “down” (-), con un campo externo de 0.2 teslas.

Al igual que en la figura 5, es claro ver que el efecto del acoplamiento espín orbita, modifica considerablemente la transmisión de la partícula en la barrera de potencial, aquí se ha considerado la polarización con espín “down” (-),

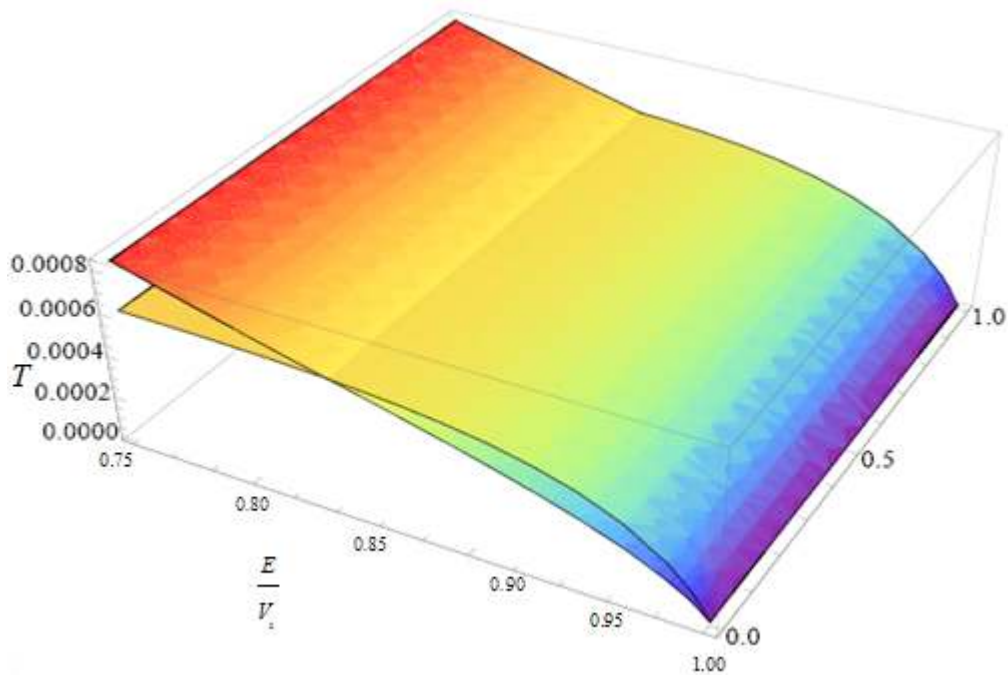


Figura 4.9. Variación del coeficiente de transmisión en función de la energía aplicada, con polarización del espín “up” (+) y “down” (-), con campo magnetico externo de 0.1 teslas..

Ahora bien, si comparamos las graficas de la figura 4.5, y 4.6; podemos observar los cambios considerables en los dos tipos de polarizaciones, “up” (+) y “down” (-), aunque el rango de energía es pequeño para apreciar el efecto de acoplamiento espín orbita, si es claro mirar que con la polarización de spin “down” (-), la transmisión tiende a decaer mas rápidamente que para lo del espín con polarización “up” (+),

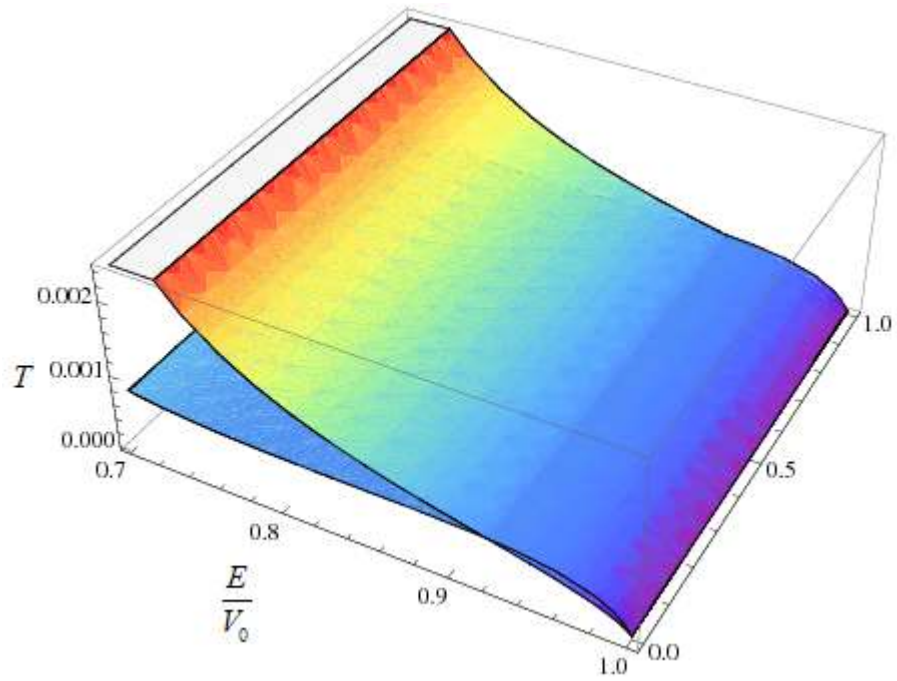


Figura 4.10. Variación del coeficiente de transmisión en función de la energía aplicada, con polarización del espín “up” (+) y “down” (-), con campo magnetico externo de 0.2 teslas..

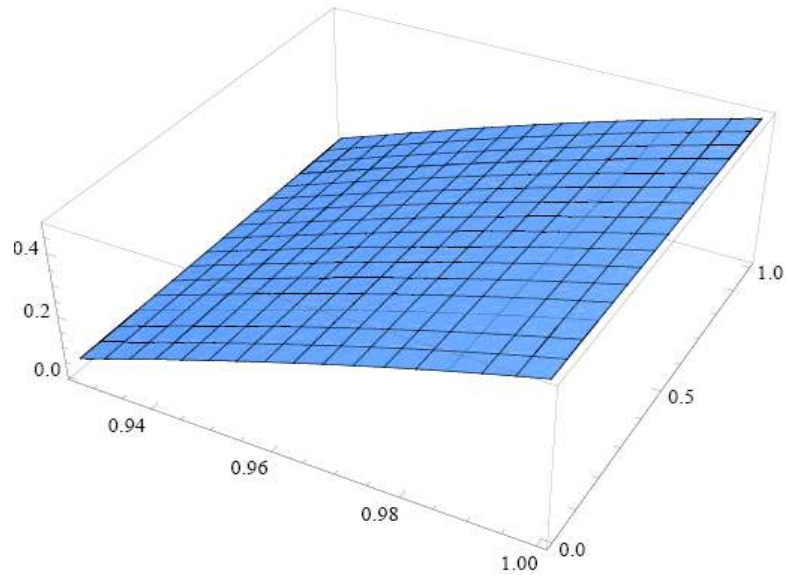


Figura 4.11. Variación de la eficiencia de la polarización en función de la energía aplicada al electrón.

La polarización depende fuertemente del vector de onda del electrón k_{\parallel} , paralelo a la barrera, si observamos la ecuación (4.88), se ve claramente que la energía del electrón está directamente relacionada con este vector de onda, así se puede concluir que a mayor energía aplicada al electrón que este ligado al vector de onda paralelo a la barrera, la eficiencia en la polarización sería mejor; en la figura 4.8, los valores de energía están dados de cero a un electrón voltios.

CONCLUSION

En la actualidad la física de los semiconductores ha generado un aporte importantísimo en el desarrollo de nuevos dispositivos ultrarrápidos, tal es así que sus resultados han llevado a la miniaturización de los dispositivos existentes y a una mayor eficiencia en la conducción de estos mecanismos; pero el aporte que se ha hecho frente a los mecanismos de conducción de los materiales semiconductores como el silicio (Si) y el galio (Ga), no solo han sido en el perfeccionamiento de la construcción de éstos materiales, sino también en la manipulación de diferentes agentes físicos externos como internos; entre esos factores que han jugado un papel importante en el entendimiento del mecanismo de transporte y de la física de los mismos están la manipulación del semiconductor con diferentes sustituyentes como son el aluminio (Al), el germanio (Ge), el fósforo (P) y el indio (In) entre otros. Pero además de eso, ha sido de gran importancia el hecho de usar campos externos, presión hidrostática y la manipulación del espín; así como estudiar el efecto en diferentes geometrías del sistema.

Teniendo estos antecedentes como premisa en la realización de este trabajo de grado en el cual se ha manipulado sistemas de baja dimensionalidad influenciado por la presencia de impurezas en la barrera rectangular y el control de algunas propiedades físicas como la geometría de las mismas, el espín de los portadores en presencia de campos, consideramos que los resultados aquí obtenidos son de gran utilidad a la hora de pretender entender mejor el comportamiento de tunelamiento cuántico de electrones en dispositivos semiconductores de gran desempeño. Las conclusiones generales que dejan ver la relevancia de este trabajo investigación se mencionan a continuación:

En la transmisión de la figura 2.1 se muestra que al considerar las condiciones de frontera de BenDaniel-Duke, el coeficiente de transmisión presenta mayor agudeza en los puntos de resonancia del electrón al tunelar, con una característica muy interesante, a medida que la

energía aplicada del electrón aumenta, los picos resonantes se ensanchan, permitiendo que mas partículas puedan tunelar y como se observa, estos se ensanchan mas, en la medida en que la energía del sistema alcanza valores múltiplos de la altura de la barrera de potencial.

Una comparación importante del efecto de tunelamiento con las condiciones de BenDaniel-Duke entre una barrera de potencial rectangular simétrica y una barrera de potencial de geometría parabólica se hace en la grafica 3.4, cabe anotar que ambas barreas están bajo las condiciones de BenDaniel-Duke, mas sin embargo es claramente apreciable que para la barrera parabólica la transmisión es más rápida, debido a que la geometría parabólica tipo Hylleras, se acerca aún más al modelo real. Aquí se puede apreciar la no existencia de picos resonantes, constituyéndose esto en una gran ventaja ya que se puede concluir que los electrones tunelan mas fácilmente cuando en nuestro modelo teórico asumimos nuestra barrera de potencial tipo parabólico. Este resultado constituye una muestra relevante de la importancia de este trabajo teórico y de simulación, que facilita el tomar condiciones para construir modelos experimentales que permitan obtener resultados mejores en cuanto a la eficiencia de estos dispositivos.

Igualmente los resultados previos muestran que las ventajas de tener una mayor rapidez en la transmisión, con lleva a obtener una mayor rapidez en la absorción de portadores entre bandas y sub bandas en el dispositivo nano electrónico semiconductor y así mismo permite que se genere una respuesta mayor al momento de transmitir información, la cual puede ser producida por procesos de fotoluminiscencia a impurezas o a estados de valencia en el dispositivo, que se tiene ante una respuesta del material para la transmisión de la información; así como una respuesta mas sensible ante un estímulo en la fotoluminiscencia.

El análisis de la barrera e potencial para el estudio de transporte cuántico en nano dispositivos semiconductores, se inicio a través de la definición sencilla de la parábola, sin embargo esta definición no apporto grandes contribuciones a nuestro estudio ya que la inclusión de esta en el estudio de tunelamiento genera una ecuación diferencial cuya solución es compleja, por lo cual se torno inviable dicho estudio. Esto motivo un análisis

mas profundo a través de métodos de aproximación de manera que para poderlo implementar en nuestro estudio mecánico cuántico asumimos un potencial tipo Hylleras, el cual facilita la solución de este problema y permite obtener resultados importantes.

Siguiendo con nuestro análisis y haciendo un cambio en nuestro estudio, no con la geometría sino con otros tópicos físicos como considerar la barrera rectangular simétrica en presencia de campos externo y presión hidrostática; es así como se observa en la grafica 3.7, claramente como la transmisión es afectada de manera importante por la concentración y la presión hidrostática, los picos muestran una mayor transmisión a medida que la concentración del material aumenta, por consiguiente el dopaje de este semiconductor se ve favorecida en el tunelamiento cuántico, así también el efecto de presión hidrostática es significativo en el tunelamiento, a medida que la presión aumenta la transmisión comienza a disminuir, esto se visualiza mejor en la grafica 3.8, donde se puede observar que la transmisión se ve afectada de manera muy importante, para este caso se ve que el tunelamiento solo está siendo influenciado por la presión hidrostática, a medida que la presión hidrostática aumenta la transmisión decae considerablemente, en este caso el campo magnético externo aplicado no tiene gran importancia; ya que al haber presión hidrostática la barrera sufre una deformación que modifica considerablemente la transmisión, dejando así los efectos de campo a un segundo plano.

Para la barrera de potencial se considera el estudio de tunelamiento del electrón, teniendo en cuenta la polarización del espín, ya que esta característica intrínseca de la partícula genera una contribución significativa en la transmisión; tal es así que en la gráfica 4.5 se observa como la transmisión decae a medida que aumenta la energía aplicada al electrón. Además cuando la energía aplicada al electrón tiene una relación de uno, la transmisión con este efecto es nulo, es decir, cuando la energía aplicada alcanza el valor de altura máximo de la barrera, el efecto de la polarización por campo intrínseco no es evidente.

Para una transmisión con espín hacia abajo el efecto es similar como se observa en la grafica 4.6, sin embargo en la grafica 3.7 es posible apreciar la diferencia entre espín hacia

arriba y hacia abajo, donde la transmisión comienza mas rápido con espín hacia abajo pero decae mas lentamente que el espín hacia arriba, donde estos parámetros son de gran importancia para la aplicación en la construcción de dispositivos.

La polarización depende fuertemente del vector de onda del electrón k_{\parallel} , paralelo a la barrera, si observamos la ecuación (4.88), se ve claramente que la energía del electrón está directamente relacionada con este vector de onda, así se puede concluir que a mayor energía aplicada al electrón que este ligado al vector de onda paralelo a la barrera, la eficiencia en la polarización seria mejor; en la figura 4.8, los valores de energía están dados de cero a un electrón voltios.

Por ultimo en la figura 4.2, se observa el parámetro del acoplamiento espín orbita en función de la energía, el cual muestra una variación significativa debido a la polarización del espín del electrón (espín hacia arriba y espín hacia abajo). Lo que muestra la importancia de la polarización de espín del electrón en sistemas nanométricos, además esta variación de la energía es significativa en los estados energéticos del sistema, puesto que evidencian que de acuerdo a la orientación del espín podemos tener dos valores diferentes de energía para el mismo valor de la fuerza de acoplamiento.

Para el estudio de los efectos de acoplamiento espín orbita en el pozo de potencial, es evidente el cambio de la energía debido al parámetro de acoplamiento y a la orientación del espín, además muestra variaciones significativas de acuerdo a la polarización del espín, donde para igual valor de la fuerza de acoplamiento tenemos diferentes valores de energía en distinta orientación del espín; lo que representa un aporte significativo para la construcción de dispositivos.

PERSPECTIVAS

Con base en este trabajo de investigación que hace referencia al tunelamiento cuántico en un nano dispositivo semiconductor, en el cual se muestran estudios y resultados con impurezas, presión hidrostática y efectos de campos externos, consideramos que es apropiado un tratamiento mas profundo del efecto Rashba y el efecto Dressellhaus, debido a que permite entender mas los efectos de espín en procesos de información en estos dispositivos semiconductores y a condicionarlos a potenciales mecanismos para transmitir información cuántica.

Por otra parte este trabajo sirve como punto de partida para el estudio de cadenas magnéticas y redes ópticas que almacenan y transmiten información vía espín considerando su estudio cuántico en el formalismo de funciones de Green ya que se deben analizar problemas en equilibrio y fuera del equilibrio, en el cual los procesos termodinámicos son relevantes para estos sistemas.

Así mismo este trabajo de investigación abre un campo dentro del estudio de cavidades ópticas que involucren puntos cuánticos, la cuantización del campo magnético y el efecto de espín en estos nano-dispositivos, cuando son estimulados con campos electromagnéticos. Tal esquema permitirá manejar el tiempo de información en las cavidades cuánticas y poder determinar la coherencia y decoherencia del sistema.

Así como es de gran importancia anotar que el estudio hecho en este trabajo de investigación, es posible implementarlo en nuevos dispositivos semiconductores como lo es el grafeno, donde por su baja dimensionalidad es de gran relevancia, ya que al trabajar en una decima de nanómetro no se puede despreciar los efectos de espín, el tunelamiento cuántico, así como los puntos cuánticos para el transporte, por lo cual el estudio realizado en este trabajo, hace un aporte en la investigación de estos semiconductores.

BIBLIOGRAFÍA

- [1] L. Esaki, R. Tsu. IBM J. Res. Devel. 14, 61 1970.
- [2] R. Tsu, L. Esaki. Appl. Phys. Lett. 22, 562. 1973.
- [3] I. Vurgaftman and J. R. Meyer. Journal of Applied Physics. Vol. 89. No. 11. 2001.
- [4] H. O. Oyoco, C. A. Duque y N. Porrás –Montenegro. Journal of Applied Physics. Vol. 90. No. 2. 2001.
- [5] S. T. Perez-Merchancan, Bolívar Marinez. L. E. and J. Silva-Valencia. Journal of Applied Physics. Vol. 90. No. 2. 2001.
- [6] A. John Peter. Physica E. Elsevier. No. 28. 2005.
- [7] A. M. Elabsy. J. Phys. Condens. Matter. No 6. 1994.
- [8] C. Luis tralleros, M. De Dios., “Problemas de mecánica cuántica”. Edit: Pueblo y Educación. 1989.
- [9] Charles Kittel. Introducción a la Física del Estado Solido. Segunda Edición. Editorial Reverte, S. A. 1984.
- [10] V. I. Perel, S. A. Tarasenko, and I. N. Yassievich. Cond-Mat. 0301098. V2. 2003.
- [11] G. Dresselhaus, Phys. Rev. Lett, 100, 580, 1955.
- [12] E. I. Rashba. Phys. Rev. B, 2003.
- [13] M. Pletyukhov, Ch. Aman, M. Mehta and M. Brack, Phys. Rev. Lett, 89, 116601, 2002.
- [14] V. I. Perel, S. A. Tarasenko, I. N. Yassievich, S. D. Ganichev, V. V. Belkov and W. Pretil, N. Phys W. 67, 2003.
- [15] G. Usag and C. A. Balseiro, Europhys, 72, 2005.
- [16] E. N. Bulgakov and A. F. Sadreev, Cond-mat. 31, 2002.
- [17] E. Tsitsishvili, G. S. Lozano and A. O. Gogolin, Phys. Rev. B, 115316, 2004.
- [18] Vijay A. Sing, Luv Kumar. Am. J. Phys., Vol. 74, No. 5, May 2006.

- [19] N. Raigoza, A. L. Morales and C. A. Duque. Brazilian Journal of Physics, Vol. 36.No. 2A, June, 2006.
- [20] S. T. Pérez-Merchancano, H. Paredes-Gutiérrez and J. Silva-Valencia. J. Phys. Condens. Matter 19 (2007).
- [21] G. E. Marques, A. C. R. Bittencourt, C. F. Destefani, and Sergio E. Ulloa. Phys. Rev. B 71, (2005).
- [22] Tabón Ramiro. Introducción a la Mecánica Cuántica. Cali, Univalle. 1995.
- [23] Eisberg R. y Resnick. R. Física Cuántica Átomos, Moléculas, Sólidos, Núcleos y Partículas México, Limusa. S. A, 1982.
- [24] French E. y Taylor F. Introducción a la Física Cuántica. Barcelona, Reverte S. A, 1982.
- [25] Eisberg. R. Fundamentos de Física Moderna. Séptima edición. México, Noriega. 1999.
- [26] Davies. J. H. The Physics of low Dimensional Semiconductors. New York, Cambridge University Press, 1998.
- [27] Gasiorowicz. S. Quantum Physics. Second Edition. New York, John Wiley& Son. Inc, 1996.
- [28] Pavlov. P. V. y Jojlov. A. F. Física del estado Solido. Moscú, Mir, 1987.
- [29] Acosta. V. Cowan Clyde. L. y Graham. B. J. Curso de Física Moderna, México, Harla. 1975.
- [30] Rosu. H. C. Mecánica Cuántica. Los Álamos electronic Archives, Physics/9808031. 1999.
- [31] Lomas. D. y Lovelock. D. Ecuaciones Diferenciales a través de gráficas, modelos y datos, México, Cecs, 2000.
- [32] French. A. P. Vibraciones y Ondas. Barcelona, Reverte. 2000.
- [33] Choen-Tannaoudji C. Diu B. y Laloë. F. Quantum Mechanics. Paris, John Wiley & Sons.1990.
- [34] Borowitz. S. Fundamentos de Mecánica Cuántica. España, Reverte. S. A. 1973.

- [35] Andrew. L. C. Special Functions of mathematics for Engineers. New York, Mc Graw-Hill. 1992.
- [36] Shalimova. K. V. Física de los Semiconductores. Moscú, Mir, 1975.
- [37] Yavorski. B. M. y Detlap. A Manual de Física Para ingenieros y Estudiantes. Moscú. Mir. 1971.
- [38] Abramowitz. M. y Stegun I. A. Handbook of mathematical Functions. New York. Dover Publications, 1972.

ANEXO A

MODELO DE KANE

Consideremos la función de Bloch

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_n} \psi_\lambda(\vec{k}, \vec{r}) = \psi_\lambda(\vec{k}, \vec{r} + \vec{R}_n), \quad (\text{A-1})$$

Para satisfacer esta relación tomamos la siguiente relación de prueba.

$$\psi_\lambda(\vec{k}, \vec{r}) = \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_n}}{L^{3/2}} u_\lambda(\vec{k}, \vec{r}), \quad (\text{A-2})$$

Función de onda de Bloch, la cual tiene en cuenta el volumen del cristal L^3 , el auto valor de energía λ , el momento del cristal o también llamado autovalor de la periodicidad, que a su vez dependen del momentum y de la posición del electrón en el espacio y que indica la periodicidad dada la traslación en el cristal; además es periódica en el espacio real.

$$u_\lambda(\vec{k}, \vec{r}) = u_\lambda(\vec{k}, \vec{r} + \vec{R}_n) \rightarrow \text{es una función periódica en el espacio real}$$

Entonces, teniendo en cuenta esta función de onda plana, la ecuación de Schrödinger se expresa como:

$$H\psi_\lambda(\vec{k}, \vec{r}) = \left[\frac{P^2}{2m} + V_0(\vec{r}) \right] \psi_\lambda(\vec{k}, \vec{r}) = E_\lambda \psi_\lambda(\vec{k}, \vec{r}), \quad (\text{A-3})$$

Haciendo solo el caso unidimensional

$$\frac{\partial^2 \psi_\lambda}{\partial x^2} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left[\frac{e^{ikx}}{L^{3/2}} u_\lambda(\vec{k}, \vec{r}) \right], \quad (\text{A-4})$$

$$\frac{\partial^2 \psi_\lambda}{\partial x^2} = \frac{1}{L^{3/2}} \left[2ike^{ikx} u'_\lambda(\vec{k}, \vec{r}) - k^2 e^{ikx} u_\lambda(\vec{k}, \vec{r}) + e^{ikx} u''_\lambda(\vec{k}, \vec{r}) \right], \quad (\text{A-5})$$

Teniendo en cuenta que el cambio en la posición respecto al desplazamiento en el material

$$\text{donde } u'_\lambda(\vec{k}, \vec{r}) = \frac{\partial u_\lambda(\vec{k}, \vec{r})}{\partial x} \text{ y que } u''_\lambda(\vec{k}, \vec{r}) = \frac{\partial^2 u_\lambda(\vec{k}, \vec{r})}{\partial x^2}$$

Además considerando igualmente la función de onda plana de Bloch como ψ_λ , se tiene que:

$$\psi_\lambda(\vec{k}, \vec{r}) = \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}}{L^{3/2}} u_\lambda(\vec{k}, \vec{r}) = \psi_\lambda, \quad (\text{A-6})$$

Donde tenemos

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi_\lambda = -k^2 \psi_\lambda + 2ik \frac{e^{ikx}}{L^{3/2}} \frac{\partial}{\partial x} u_\lambda(k, x) + \frac{e^{ikx}}{L^{3/2}} \frac{\partial^2}{\partial x^2} u_\lambda(k, x), \quad (\text{A-7})$$

Ahora suponiendo que estamos considerando el punto j-ésimo para cualquier red del cristal, tenemos:

$$\sum_j \frac{\partial^2}{\partial x_j^2} \psi_\lambda = -k^2 \psi_\lambda + 2i \sum_j k_j \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}}{L^{3/2}} \frac{\partial}{\partial x_j} u_\lambda(\vec{k}, \vec{r}) + \frac{e^{ikx}}{L^{3/2}} \sum_j \frac{\partial^2}{\partial x_j^2} u_\lambda(\vec{k}, \vec{r}), \quad (\text{A-8})$$

De la ecuación 8 podemos tener

$$\sum_j \frac{\partial^2}{\partial x_j^2} \psi_\lambda = \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}}{L^{3/2}} (\nabla + i\mathbf{k}) u_\lambda, \quad (\text{A-9})$$

Entonces

$$\left[\frac{P^2}{2m} + V_0(\vec{r}) \right] \psi_\lambda(\vec{k}, \vec{r}) = E_\lambda \psi_\lambda(\vec{k}, \vec{r}), \quad (\text{A-10})$$

Por lo tanto

$$\frac{P^2}{2m} \psi_\lambda + u_\lambda = E_\lambda \psi_\lambda \quad \rightarrow \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi_\lambda + V_0 \psi_\lambda = E_\lambda \psi_\lambda, \quad (\text{A-11})$$

Así podemos la expresión para el Hamiltoniano para el cristal.

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \frac{\hbar}{2} k \cdot P + V_0 \right) u_\lambda = \left(E_\lambda - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right) u_\lambda, \quad (\text{A-13})$$

CONDICIONES DE CONTORNO DE BENDANIEL-DUKE

Para una barrera de potencial finita, donde solo se considera la dirección de tunelamiento el eje z , la ecuación de Schrödinger esta dada por:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d}{dz} \left(\frac{1}{m^*(z)} \frac{d\psi}{dz} \right) + V\psi = E\psi \quad (\text{A-14})$$

Donde $m^*(z)$ es la masa efectiva del material y su valor cambia a medida que tunela la barrera. Para este caso el potencial esta dado por:

$$V = \begin{cases} V_0, & 0 < z < L \\ 0, & \infty < z \leq 0, z \geq L \end{cases} \quad (\text{A-15})$$

Aquí se toma a L , como el ancho de la barrera

Para la región I, tomamos

$$m^*(z) = m_0 \quad (\text{A-16})$$

Y la ecuación de Schrödinger (1) se transforma en:

$$\frac{d\psi}{dz^2} + k_0^2 \psi = 0 \quad (\text{A-17})$$

Donde el vector de onda esta dado por:

$$k_0 = \sqrt{\frac{2m_0 E}{\hbar^2}} \quad (\text{A-18})$$

Cuya solución es de la forma.

$$\psi_I(z) = Ae^{ik_0 z} + Be^{-ik_0 z} \quad (\text{A-19})$$

Para la región II, se calcula al igual que en los estándares de la mecánica cuántica

$$\alpha_0 = \sqrt{\frac{2m_0 (V_0 - E)}{\hbar^2}} \quad (\text{A-20})$$

Y su solución esta dada por:

$$\psi_{II}(z) = Ce^{\alpha z} + De^{-\alpha z} \quad (\text{A-21})$$

Para la región III, seguimos los mismos procedimientos tradicionales.

$$\psi_I = \psi_{III} \rightarrow \psi_{III} = Fe^{ik_0 z} + Ge^{-ik_0 z} \quad (\text{A-22})$$

Tomando $G = 0$, debido a que $z > 0$ se impone al igual que en los estándares de la mecánica cuántica que.

$$\psi_{III} = Fe^{ik_0 z} \quad (\text{A-23})$$

Así el conjunto de soluciones esta dado por:

$$\psi = \begin{cases} Ae^{ik_0 z} + Be^{-ik_0 z} & z < 0 \\ Ce^{\alpha z} + De^{-\alpha z} & 0 < z < L \\ Fe^{ik_0 z} & z > 0 \end{cases} \quad (\text{A-24})$$

Teniendo en cuenta las condiciones de contorno tenemos:

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0) \rightarrow A + B = C + D \quad (\text{A-25})$$

Así también aplicando las condiciones donde la masa del electrón al entrar en la barrera es diferente, de acuerdo con la aproximación de BenDaniel-Duke, tenemos

$$\frac{1}{m_0} \frac{d\psi_I}{dz} \Big|_{z=0} = \frac{1}{m_i} \frac{d\psi_{II}}{dz} \Big|_{z=0} \rightarrow A - B = \frac{m_0 \alpha}{i m_i k_0} (C - D) \quad (\text{A-26})$$

Al igual evaluando en la frontera de la zona II y III, tenemos en claridad la dependencia de la masa del electrón libre y la masa efectiva dentro de la red cristalina:

$$\psi_{II}(L) = \psi_{III}(L) \rightarrow Ce^{\alpha L} + De^{-\alpha L} = Fe^{ik_0 L} \quad (\text{A-27})$$

Y también,

$$\frac{1}{m_i} \frac{d\psi_{II}}{dz} \Big|_{z=L} = \frac{1}{m_0} \frac{d\psi_{III}}{dz} \Big|_{z=L} \rightarrow Ce^{\alpha L} - De^{-\alpha L} = \frac{ik_0 m_i}{\alpha m_0} Fe^{ik_0 L} \quad (\text{A-28})$$

De donde se puede obtener el siguiente arreglo.

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \frac{\alpha m_0}{i m_i k_0} & 1 - \frac{\alpha m_0}{i m_i k_0} \\ 1 - \frac{\alpha m_0}{i m_i k_0} & 1 + \frac{\alpha m_0}{i m_i k_0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} \quad (\text{A-29})$$

También podemos obtener el sistema

$$\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = \frac{1}{2} Fe^{ik_0 L} \begin{bmatrix} \left(1 + \frac{ik_0 m_i}{\alpha m_0}\right) e^{-\alpha L} \\ \left(1 - \frac{ik_0 m_i}{\alpha m_0}\right) e^{\alpha L} \end{bmatrix} \quad (\text{A-30})$$

Reemplazando (A-30) en (A-29) tenemos

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \frac{1}{4} F e^{i k_0 L} \begin{bmatrix} \left(1 + \frac{\alpha}{i k_0 \beta}\right) \left(1 + \frac{i k_0 \beta}{\alpha}\right) e^{-\alpha L} + \left(1 - \frac{\alpha}{i k_0 \beta}\right) \left(1 - \frac{i k_0 \beta}{\alpha}\right) e^{\alpha L} \\ \left(1 - \frac{\alpha}{i k_0 \beta}\right) \left(1 - \frac{i k_0 \beta}{\alpha}\right) e^{-\alpha L} + \left(1 + \frac{\alpha}{i k_0 \beta}\right) \left(1 + \frac{i k_0 \beta}{\alpha}\right) e^{\alpha L} \end{bmatrix} \quad (\text{A-31})$$

Así podemos llegar a una expresión de la transmisión, siguiendo los procedimientos normales de la mecánica cuántica para el coeficiente de transmisión. Donde se puede mostrar cada uno de los anteriores terminos del coeficiente F, en el cual muestra que:

$$\frac{A}{F} = \frac{e^{i k_0 L}}{4 i k_0 \beta} \left[(\alpha + i k_0 \beta)^2 e^{-\alpha L} - (\alpha - i k_0 \beta)^2 e^{\alpha L} \right] \quad (\text{A-32})$$

Con esto podemos expresar la transmisión así:

$$f = \frac{F}{A} = - \frac{4 i k_0 \alpha e^{-\alpha L}}{(\alpha - i \beta k_0)^2} e^{i k_0 L} \quad (\text{A-33})$$

El coeficiente de transmisión T, esta dado por f^2 , que se expresa como:

$$|f^2| \quad (\text{A-34})$$

O sea la expresión normal y su complejo conjugado, por lo tanto para nuestro caso la función es real:

$$T = \left[\frac{4 i k_0 \alpha}{(\alpha - i \beta k_0)^2} \right]^2 e^{-2\alpha L} \quad (\text{A-35})$$

Haciendo un análisis más detallado del factor beta que es la relación de masas y la exponencial, nos damos cuenta que el factor dominante en la anterior ecuación, es la exponencial quien depende solo de la masa incidente m_i ; la condición para el máximo valor del factor exponencial es que:

$$k_0 \beta = \alpha \quad (\text{A-36})$$

Empleando los valores de de los vectores de onda, tenemos

$$\beta^2 = \left(\frac{\alpha}{k_0} \right)^2 = \left[\sqrt{\frac{2m_i(V_0 - E)}{\hbar^2}} \right]^2 \frac{1}{\left(\sqrt{\frac{2m_0}{\hbar^2}} \right)} \quad (\text{A-37})$$

Así

$$\beta = \frac{V_0 - E}{E} \quad (\text{A-38})$$

Lo que implica que

$$E = \frac{1}{\beta + 1} V_0 \quad (\text{A-39})$$

La transmisión es un máximo cuando la energía de la partícula incidente esta cerca de la barrera así,

$$\beta \rightarrow 0 \quad (\text{A-40})$$

Por lo tanto la energía tiende a ser igual a la energía de la altura de la barrera, por lo que la partícula estaría casi por encima de la altura de la barrera o muy próxima a ella.

$$E \rightarrow V_0 \quad (\text{A-41})$$

Además si la relación de masas “beta”, tiende a uno, la energía aplicada del electrón tiende a ser la mitad del valor de la energía de la altura de la barrera.

MASA EFECTIVA DE LOS ELECTRONES EN LOS CRISTALES

$$\varepsilon(\delta) = \varepsilon_1(-) + \frac{\hbar^2}{2m^*} \delta^2 \quad (\text{A-42})$$

Es la energía de un electrón en un estado próximo al fondo de la banda, donde δ es el vector de onda medido a partir del límite de la zona.

$$m^* = \frac{m}{1 - \left(\frac{2\lambda_1}{U_1} \right)} \quad (\text{A-43})$$

Donde λ_1 , esta dado por:

$$\lambda_1 = \frac{\hbar^2 \left(\frac{1}{2} G_1 \right)^2}{2m} \quad (\text{A-44})$$

$U_1 \rightarrow$ se elige de tal forma que $U(x) = 2U_1 \cos(G_1 x)$

$U_1 \rightarrow$ se toma como negativo con el fin de tener un potencial atractivo en $x = 0$

La formula (A-43) sugiere que un electrón en un cristal puede comportarse como si tuviere una masa diferente que la de un electrón libre.

De acuerdo con lo anterior es importante destacar que un electrón en un potencial periódico se acelera bajo la acción de un campo magnético o eléctrico, como si su masa fuera la efectiva que se acaba de definir.

Tomando la velocidad de grupo.

$$V_g = \frac{1}{\hbar} \frac{d\varepsilon}{dk} = \hbar^{-1} \frac{d\varepsilon}{dk} \quad (\text{A-45})$$

Y su derivada esta dada por:

$$\frac{dV_g}{dt} = \hbar^{-1} \left(\frac{d^2\varepsilon}{dk^2} \frac{dk}{dt} \right) \quad (\text{A-46})$$

Donde $\frac{d^2 \varepsilon}{dk^2}$ es la variación de la energía respecto al vector de onda en el material y $\frac{dk}{dt}$ es la variación del vector de onda respecto al tiempo, así, tomamos:

$$F = \hbar \frac{dk}{dt} \rightarrow \frac{F}{\hbar} = \frac{dk}{dt} \quad (\text{A-47})$$

$$\frac{dV_g}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d^2 \varepsilon}{dk^2} \frac{F}{\hbar} \quad (\text{A-48})$$

Entonces

$$F = \hbar^2 \left(\frac{d^2 \varepsilon}{dk^2} \right)^{-1} \frac{dV_g}{dt} \quad (\text{A-49})$$

Definimos la masa como: $m = \hbar^2 \left(\frac{d^2 \varepsilon}{dk^2} \right)^{-1}$

Entonces la masa efectiva se define como:

$$m^* = \hbar^2 \left(\frac{d^2 \varepsilon}{dk^2} \right)^{-1} \quad (\text{A-50})$$

Es como la rapidez de cambio de la energía en el momentum, teniendo en cuenta en este caso la primer zona de Brillouin, adema se considera la energía como unja función

cuadrática de k , entonces $\varepsilon = \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right) k^2$.

ANEXO B

TUNELAMIENTO EN UNA BARRERA PARABÓLICA

Partiendo de la definición de parábola, tenemos:

$$(x-h)^2 = -4p(y-k) \quad (\text{B-1})$$

Sea,

$$\left(x - \frac{a}{2}\right)^2 = -4p(y - V_0) \quad (\text{B-2})$$

Si tenemos a x , en el origen, es decir para $x = 0$, entonces y toma un valor arbitrario cualquiera, para este caso $y = \lambda$, así tenemos:

$$\left(-\frac{a}{2}\right)^2 = -4p(\lambda - V_0) \quad (\text{B-2})$$

Donde p , esta dado por:

$$p = \frac{a^2}{16(\lambda - V_0)} \quad (\text{B-2})$$

Por lo tanto la ecuación nos queda:

$$y = -\frac{1}{4p}x^2 + \frac{a}{4p}x + V_0 - \frac{a^2}{16p} \quad (\text{B-5})$$

En términos de P

$$y = -\frac{1}{4\frac{a^2}{16(V_0 - \lambda)}}x^2 + \frac{a}{4\frac{a^2}{16(V_0 - \lambda)}}x + V_0 - \frac{a^2}{16\frac{a^2}{16(V_0 - \lambda)}} \quad (\text{B-6})$$

Por tanto considerando que esta en terminaos del ancho de la barrera y de la altura de la misma la ecuación (B-6) se transforma en:

$$y = V_0 - \frac{4(V_0 - \lambda)}{a^2} \left(x - \frac{a}{2} \right)^2 \quad (\text{B-7})$$

Ahora bien con esta relación, del potencial parabólico podemos plantear la ecuación de Schördinguer para este sistema, donde iniciamos de acuerdo a los modelos clásicos de la mecánica a cuántica, así.

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (\text{B-8})$$

Donde para la región I y III tenemos

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \quad (\text{B-9})$$

Cuya soluciones son

$$\psi = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad (\text{B-10})$$

Dado el fundamento del sistema y considerando que la función de onda debe ser convergente se tiene que:

$$\psi = Fe^{ikx} \quad (\text{B-11})$$

Ahora bien, para la región II, consideramos el potencial que habíamos desarrollado al inicio de este anexo, por lo que la ecuación de Schrödinger

$$\frac{d\psi}{dx^2} - \frac{2mV_0}{\hbar^2}\psi = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi \quad (\text{B-12})$$

Ahora considerando el potencial parabólico (B-7), entonces la ecuación de Schrödinger se transforma en:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dz_1^2} + \left[V_0 - \frac{4(V_0 - \lambda)}{a^2} \left(x - \frac{a}{2} \right)^2 \right] \psi = E\psi \quad (\text{B-13})$$

Normalizando las coordenadas de posición en términos de a_0^* , que es el radio de Bohr efectivo, se tiene que:

$$z = \frac{z_1}{a_0^*} \Rightarrow \frac{d^2\psi}{dz^2} = \frac{1}{(a_0^*)^2} \frac{d^2\psi}{dz_1^2} \quad (\text{B-14})$$

Igualmente normalizando nuestro sistema energético teniendo en cuenta el Rydberg efectivo, se tiene que:

$$-R_y^* \frac{d^2\psi}{dz^2} + \left[V_0 - \frac{4(V_0 - \lambda)}{a^2} \left(x - \frac{a}{2} \right)^2 \right] \psi = E\psi \quad (\text{B-15})$$

Por consiguiente la ecuación (B-13) se transforma en:

$$\frac{d^2\psi}{dz^2} - \left[\frac{V_0 - E}{R_y^*} - \frac{4(V_0 - \lambda)}{a^2 R_y^*} \left(x - \frac{a}{2} \right)^2 \right] \psi = 0 \quad (\text{B-16})$$

Llamando

$$k_2^2 = \frac{V_0 - E}{R_y^*} \quad (\text{B-17})$$

asi

$$\frac{d^2\psi}{dz^2} - \left[k_2^2 - \Omega \left(x - \frac{a}{2} \right)^2 \right] \psi = 0 \quad (\text{B-18})$$

Haciendo uso de cambio de variable así

$$\beta = \sqrt{\Omega} \left(z - \frac{a}{2} \right)^2 \quad (\text{B-19})$$

$$\frac{d\psi}{dz} = \frac{d\psi}{d\beta} \frac{d\beta}{dz} \quad \Rightarrow \quad \frac{d^2\psi}{dz^2} = \frac{d^2\psi}{d\beta^2} \left(\frac{d\beta}{dz} \right)^2 + \frac{d\psi}{d\beta} \frac{d^2\beta}{dz^2} \quad (\text{B-20})$$

$$\frac{d^2\psi}{dz^2} = 4\sqrt{\Omega} \beta \frac{d^2\psi}{d\beta^2} + 2\sqrt{\Omega} \frac{d\psi}{d\beta} \quad (\text{B-21})$$

Aplicando la relación anterior, nos queda

$$4\sqrt{\Omega} \beta \frac{d^2\psi}{d\beta^2} + 2\sqrt{\Omega} \frac{d\psi}{d\beta} - \left[k_2^2 - \Omega \left(x - \frac{a}{2} \right)^2 \right] \psi(\beta) = 0 \quad (\text{B-22})$$

$$\frac{d^2\psi}{d\beta^2} + \frac{1}{2\beta} \frac{d\psi}{d\beta} - \left[\frac{\alpha}{4\beta} - \frac{1}{4} \right] \psi(\beta) = 0 \quad (\text{B-23})$$

Con $\alpha = \frac{k_2^2}{\sqrt{\Omega}}$, haciendo el análisis asintótico para cuando β tiende a infinito ∞ , por lo que

nuestra ecuación se transforma en:

$$\frac{d^2\psi_\infty}{d\beta^2} + \frac{1}{4}\psi_\infty(\beta) = 0 \quad (\text{B-24})$$

Cuya solución es de la forma $\psi_\infty(\beta) = Ae^{-i\frac{\beta}{2}} + Be^{i\frac{\beta}{2}}$, La solución completa estaría dada por

$$\psi_\infty(\beta) = e^{-i\frac{\beta}{2}} \Phi(\beta) \quad (\text{B-25})$$

Esta solución compleja no satisface los requerimientos de la ecuación diferencial para que sea real, lo que imposibilita la solución analítica de esta ecuación; por lo que no es factible usar un potencial tipo parabólico como el que se uso, que es por definición corresponde a la ecuación general de la parábola.

COEFICIENTE DE TRANSMISION PARA UNA BARRERA DE POTENCIAL DE HYLLERAS AFECTADA POR PRESION HIDROSTATICA

La energía del “gap” expresada en términos de la presión hidrostática se expresa en polinomios de segundo orden debido a la simetría del cristal en el punto gama.

$$E_g^\Gamma(p, T, x) = E_g^0(x) + \alpha(x)p + \beta(x)p^2 + \frac{bT^2}{T+c} \quad (\text{B-26})$$

Teniendo en cuenta la temperatura T y la concentración del material donde

$b = 0.5405 \frac{meV}{K}$ y $c = 204K$ además $E_g^0(x)$ esta dado para $T = 0K$ y $p = 0kbar$

$$\begin{array}{ll} Al_xGa_{1-x}As & E_g^0(x) = 1.519 + 1.36x + 0.22x^2 eV \\ GaAs & E_g^0(x) = 1.519 eV \end{array} \quad (\text{B-27})$$

Coefficientes de presión

<i>material</i>	$\alpha(x) \frac{meV}{kbar}$	$\beta(x) \frac{meV}{kbar^2}$	
$Ga_{1-x}Al_xAs$	$11.5 - 1.3x$	0	(B-28)
$Al_xGa_{1-x}As$	$11.5 - 1.3x$	0	
$GaAs$	10.7	-0.0377	

De forma semejante se obtiene una expresión para la masa efectiva que tiene en cuenta la energía en el punto de simetría gama y la temperatura y de la presión hidrostática.

$$\frac{m_e^*(p, T)}{m_0} = \left\{ 1 + E_p^\Gamma \left[\frac{2}{E_g^\Gamma(p, T, 0)} + \frac{1}{E_g^\Gamma(p, T, 0) + \Delta_0} \right] \right\}^{-1} \quad (B-29)$$

La altura de la barrera de potencial $V_0(z, p) = Q_c E_g^\Gamma(p, o, x)$, donde $Q_c = 0.658$, indica la altura de esta cuando se considera la banda de conducción.

$$A(p) = a_z(0) [1 - (s_{11} + 2s_{12})p] \quad (B-30)$$

Donde $a_z(0)$ es el ancho inicial

<i>material</i>	<i>constantes</i> ($\times 10^{-3} kbar^{-1}$)	
$Ga_{1-x}Al_xAs$	$\begin{cases} s_{11} = 1.17 + 0.03x \\ s_{12} = -(0.37 + 0.02x) \end{cases}$	(B-31)
$Al_xGa_{1-x}As$	$\begin{cases} s_{11} = 1.17 + 0.03x \\ s_{12} = -(0.37 + 0.02x) \end{cases}$	

Además se utilizan las constantes elásticas de red para los materiales $Ga_{1-x}Al_xAs$ y $Al_xGa_{1-x}As$, a parte de estas constantes, se utilizaran las condiciones de BenDaniel-Duke

Potencial de la barrera

$$V = \begin{cases} 0 & \text{si } \frac{a-b}{2} < z' < 0 \\ V_0(p, x) \cosh^{-2}\left(\frac{z'}{a} - \frac{1}{2}\right) & \text{si } 0 < z' < a \\ 0 & \text{si } a < z' < \frac{a+b}{2} \end{cases} \quad (\text{B-32})$$

Hamiltoniano del sistema

$$H = \begin{cases} \frac{1}{2m_0^*(p)} P_{z'}^2 & \text{si } \frac{a-b}{2} < z' < 0 \\ \frac{1}{2m_0^*(p)} P_{z'}^2 + V_0(p, x) \cosh^{-2}\left(\frac{z'}{a} - \frac{1}{2}\right) & \text{si } 0 < z' < a \\ \frac{1}{2m_0^*(p)} P_{z'}^2 & \text{si } a < z' < \frac{a+b}{2} \end{cases} \quad (\text{B-33})$$

Las ecuaciones de Schrödinger a resolver son $\frac{-\hbar^2}{2m_0^*(p)} \frac{d^2\psi}{dz'^2} = E\psi$, si

$$\frac{a-b}{2} < z' < 0 \quad \text{y} \quad a < z' < \frac{a+b}{2}$$

Normalizando en radios de Bohr efectivos, tenemos. $z = \frac{z'}{a_*} \Rightarrow \frac{d^2\psi}{dz'^2} = \frac{1}{a_*^2} \frac{d^2\psi}{dz^2}$.

$$\frac{-\hbar^2}{2m_0^*(p)a_*^2} \frac{d^2\psi}{dz^2} - E\psi = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{d^2\psi}{dz^2} + \frac{E}{R_y^*} \psi = 0 \quad (\text{B-34})$$

Para la otra región tenemos $\frac{-\hbar^2}{2m_0^*(p)} \frac{d^2\psi}{dz'^2} + V_0(p, x) \cosh^{-2}\left(\frac{z'}{a} - \frac{1}{2}\right) \psi = E\psi$, si $0 < z' < a$

Utilizando la normalización

$$\frac{d^2\psi}{dz^2} - \left[\frac{V_0(p, x)}{R_y^*} \cosh^{-2}\left(\frac{z'}{a} - \frac{1}{2}\right) - \frac{E}{R_y^*} \right] \psi = 0 \quad (\text{B-35})$$

En resumen tenemos la ecuación diferencial

$$\begin{cases} \frac{d^2\psi}{dz^2} + \kappa_1^2 a_*^2 \psi = 0 & \text{si } \frac{a-b}{2} < z < 0; a < z < \frac{a+b}{2} \\ \frac{d^2\psi}{dz^2} - \left[\frac{V_0(p, x)}{R_y^*} \cosh^{-2}\left(\frac{z'}{a} - \frac{1}{2}\right) - \kappa_1^2 a_*^2 \right] \psi = 0 & \text{si } 0 < z < a \end{cases} \quad (\text{B-36})$$

Solución de la ecuación diferencial para la región $\frac{a-b}{2} < z' < 0$ y $a < z' < \frac{a+b}{2}$,

tenemos: $\frac{d^2\psi}{dz^2} + \kappa_1^2 \psi = 0$ donde $\kappa_1^2 = \kappa_1^2 a_*^2$, entonces las soluciones están dadas por:

$$\begin{aligned} \psi(z) &= A e^{i\kappa_1 z} + B e^{-i\kappa_1 z} & \text{si } \frac{a-b}{2} < z < 0 \\ \psi(z) &= E e^{i\kappa_1 z} & \text{si } a < z < \frac{a+b}{2} \end{aligned} \quad (\text{B-37})$$

La solución de la ecuación diferencial para la región $0 < z < a$, se necesita hacer algunas transformaciones, así: sea $v = \tanh\left(\frac{z}{a} - \frac{1}{2}\right)$ entonces

$$\frac{d\psi}{dz} = \frac{d\psi}{dv} \frac{dv}{dz} \quad \Rightarrow \quad \frac{d^2\psi}{dz^2} = \frac{d^2\psi}{dv^2} \left(\frac{dv}{dz}\right)^2 + \frac{d\psi}{dv} \frac{d^2v}{dz^2} \quad (\text{B-38})$$

Pero

$$\frac{dv}{dz} = \frac{1}{a} \operatorname{sech}^2\left(\frac{z}{a} - \frac{1}{2}\right) \quad \Rightarrow \quad \frac{d^2v}{dz^2} = \frac{-2}{a^2} \operatorname{sech}^2\left(\frac{z}{a} - \frac{1}{2}\right) \tanh\left(\frac{z}{a} - \frac{1}{2}\right) \frac{d\psi}{dv} \quad (\text{B-39})$$

$$\frac{d^2 \psi}{dz^2} = \frac{1}{a^2} \operatorname{sech}^4 \left(\frac{z}{a} - \frac{1}{2} \right) \frac{d^2 \psi}{dv^2} - \frac{2}{a^2} \operatorname{sech}^2 \left(\frac{z}{a} - \frac{1}{2} \right) \tanh \left(\frac{z}{a} - \frac{1}{2} \right) \frac{d\psi}{dv} \quad (\text{B-40})$$

Reemplazando tenemos

$$(1-v^2)^2 \frac{d^2 \psi}{dv^2} - 2v(1-v^2) \frac{d\psi}{dv} - a^2 [V_0(1-v^2) - \kappa_1^2] \psi(v) = 0 \quad (\text{B-41})$$

Haciendo una observación, es que el potencial $V_0 = \frac{V_0(p, x)}{R_y^*}$ esta en función de la presión y

la concentración, y además esta normalizado.

Sea $\chi = 1 - v^2$

$$\frac{d\psi}{dv} = \frac{d\psi}{d\chi} \frac{d\chi}{dz} \quad \Rightarrow \quad \frac{d\psi}{dv} = -2 \frac{d\psi}{d\chi} \quad (\text{B-42})$$

$$\frac{d^2 \psi}{dv^2} = \frac{d^2 \psi}{d\chi^2} \left(\frac{d\chi}{dv} \right)^2 + \frac{d\psi}{d\chi} \frac{d^2 \chi}{dv^2} = 4v^2 \frac{d^2 \psi}{d\chi^2} - 2 \frac{d\psi}{d\chi} \quad (\text{B-43})$$

$$\chi^2 (1 - \chi^2) \frac{d^2 \psi}{d\chi^2} + \chi \left(1 - \frac{3}{2} \chi \right) \frac{d\psi}{d\chi} - \frac{a^2}{4} [V_0 \chi - \kappa_1^2] \psi(\chi) = 0 \quad (\text{B-44})$$

$$(1 - \chi^2) \frac{d^2 \psi}{d\chi^2} + \left(\frac{1}{\chi} - \frac{3}{2} \right) \frac{d\psi}{d\chi} - \frac{a^2}{4} \left[\frac{V_0}{\chi} - \frac{\kappa_1^2}{\chi^2} \right] \psi(\chi) = 0 \quad (\text{B-45})$$

Haciendo un análisis asintótico, si $\chi \rightarrow 0$ entonces la ecuación diferencial anterior se reduce a:

$$\frac{d^2 \psi}{d\chi^2} + \frac{1}{\chi} \frac{d\psi}{d\chi} - \frac{a^2 \kappa_1^2}{4\chi^2} \psi(\chi) = 0 \quad (\text{B-46})$$

Cuya solución acotada tiene la forma $\psi = \chi^\zeta$ donde

$$\zeta + \left(\frac{\kappa_1 a}{2}\right)^2 = 0 \quad \text{de esta forma} \quad |\zeta| = i \frac{\kappa_1 a}{2} \quad (\text{B-47})$$

Por lo tanto $\zeta = -i \frac{\kappa_1 a}{2}$, entonces se puede proponer como solución

$$\psi(\chi) = \chi^{-i \frac{\kappa_1 a}{2}} \varphi(\chi) = e^{-i \frac{\kappa_1 a}{2} \ln \chi} \varphi(\chi) \quad (\text{B-48})$$

Para ζ se toma el signo negativo, ya que se necesita ψ tiende a 0 si χ tiende a ∞

Retomando $\chi = 1 - v^2$, entonces

$$\psi'(v) = i\kappa_1 a v (1 - v^2)^{-(1+i\kappa_1 a/2)} \varphi(v) + (1 - v^2)^{-i\kappa_1 a/2} \varphi'(v) \quad (\text{B-49})$$

Y su segunda derivada

$$\begin{aligned} \psi''(v) = (1 - v^2)^{-i\kappa_1 a/2} \left[-i\kappa_1^2 a^2 v^2 (1 - v^2)^{-2} \varphi(v) + i\kappa_1 a v (1 - v^2)^{-1} \varphi'(v) + \right. \\ \left. i\kappa_1 a (1 + v^2) (1 - v^2)^{-2} \varphi(v) + i\kappa_1 a v (1 - v^2)^{-1} \varphi'(v) + \varphi''(v) \right] \end{aligned} \quad (\text{B-50})$$

Reemplazando en (3) tenemos

$$\begin{aligned}
& (1-\nu^2)^2 \frac{d^2 \varphi}{d\nu^2} + 2i\kappa_1 a \nu \frac{d\varphi}{d\nu} + \left[i\kappa_1 a \frac{(1+\nu^2)}{(1-\nu^2)} - \kappa_1^2 a^2 \frac{\nu^2}{1-\nu^2} \right] \varphi(\nu) \\
& 2\nu \left[i\kappa_1 a (1-\nu^2)^{-1} \varphi(\nu) + \frac{d\varphi}{d\nu} \right] - a^2 \left(V_0 - \frac{\kappa_1^2}{1-\nu^2} \right) \varphi(\nu) = 0
\end{aligned} \tag{B-51}$$

$$(1-\nu^2)^2 \frac{d^2 \varphi}{d\nu^2} - 2\nu(1-i\kappa_1 a) \frac{d\varphi}{d\nu} + [\kappa_1^2 a^2 + i\kappa_1 a - V_0 a^2] \varphi(\nu) = 0 \tag{B-52}$$

$$(1-\nu^2)^2 \frac{d^2 \varphi}{d\nu^2} - 2\nu(1-i\kappa_1 a) \frac{d\varphi}{d\nu} + [\kappa_1^2 a^2 + i\kappa_1 a - V_0 a^2] \varphi(\nu) = 0 \tag{B-53}$$

Haciendo el siguiente cambio de variable $1-\nu^2 = \xi$,

$$\frac{d\varphi}{d\nu} = \frac{d\varphi}{d\xi} \frac{d\xi}{d\nu} \quad \Rightarrow \quad \frac{d\varphi}{d\nu} = -\frac{1}{2} \frac{d\varphi}{d\xi} \tag{B-54}$$

$$\frac{d^2 \varphi}{d\nu^2} = \frac{d^2 \varphi}{d\xi^2} \left(\frac{d\xi}{d\nu} \right)^2 + \frac{d\varphi}{d\xi} \frac{d\xi}{d\nu} \quad \Rightarrow \quad \frac{d^2 \varphi}{d\nu^2} = \frac{1}{4} \frac{d^2 \varphi}{d\xi^2} \tag{B-55}$$

Teniendo en cuenta que $1+\nu = 2(1-\xi) \Rightarrow 1-\nu^2 = 4\xi(1-\xi)$, entonces;

$$4\xi(1-\xi) \frac{1}{4} \frac{d^2 \varphi}{d\xi^2} + (1-2\xi)(1-i\kappa_1 a) \frac{d\varphi}{d\xi} + [\kappa_1^2 a^2 + i\kappa_1 a - V_0 a^2] \varphi(\xi) = 0 \tag{B-56}$$

$$\xi(1-\xi)\frac{1}{4}\frac{d^2\varphi}{d\xi^2} + [(1-i\kappa_1 a) - 2(1-i\kappa_1 a)\xi]\frac{d\varphi}{d\xi} + [a^2(\kappa_1^2 - V_0) + i\kappa_1 a]\varphi(\xi) = 0 \quad (\text{B-57})$$

La ecuación anterior es llamada hipergeométrica de Gauss.

Observación: la ecuación $x(1-x)\phi'' + [\Gamma - (\alpha + \beta + 1)x]\phi' - \alpha\beta\phi = 0$ es la ecuación de Gauss cuya solución es de la forma $\phi = C_1 F(\alpha, \beta; \Gamma, x) + C_2 G(\alpha, \beta; \Gamma, x)$, donde F y G, son las funciones hipergeométricas, para esta ecuación diferencial es necesario calcular α y β , ya que $\Gamma = 1 - i\kappa_1 a$ entonces:

$$\begin{cases} \alpha + \beta + 1 = 2(1 - i\kappa_1 a) \\ \alpha\beta = -a(\kappa_1^2 - V_0) - i\kappa_1 a \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \alpha + \beta = 1 - 2i\kappa_1 a \\ \alpha\beta = a^2(V_0 - \kappa_1^2) - i\kappa_1 a \end{cases} \quad (\text{B-58})$$

Ahora al hacer uso del teorema de Vietta, α y β son las raíces de la ecuación

$$y^2 - (\alpha + \beta)y + \alpha\beta = 0 \quad (\text{B-59})$$

Por lo tanto al resolver esta ecuación de segundo orden obtenemos sus raíces:

$$y = \frac{(1 - 2i\kappa_1 a)}{2} \pm \frac{\sqrt{(1 - 2i\kappa_1 a)^2 - 4[a^2(V_0 - \kappa_1^2) - i\kappa_1 a]}}{2} \quad (\text{B-60})$$

Donde κ_1 , a y V_0 es el vector de onda, el ancho de la barrera y la altura de la misma respectivamente. Así.

$$\alpha = \frac{1 - 2i\kappa_1 a}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} - V_0 a^2} \quad (\text{B-61})$$

$$\beta = \frac{1-2i\kappa_1 a}{2} - \sqrt{\frac{1}{4} - V_0 a^2} \quad (\text{B-62})$$

Por lo tanto

$$\varphi(\xi) = \text{CF}(\alpha, \beta, 1-i\kappa_1; \xi) + \text{DG}(\alpha, \beta, 1-i\kappa_1; \xi) \quad (\text{B-63})$$

Y en consecuencia

$$\psi(\nu) = (1-\nu^2)^{-i\frac{\kappa_1 a}{2}} \left[\text{CF}\left(\alpha, \beta, 1-i\kappa_1; \frac{1-\nu}{2}\right) + \text{DG}\left(\alpha, \beta, 1-i\kappa_1; \frac{1-\nu}{2}\right) \right] \quad (\text{B-64})$$

así

$$\begin{aligned} \psi(z) = & \left[\cosh\left(\frac{z}{a} - \frac{1}{2}\right) \right]^{i\kappa_1 a} \left\{ \text{CF}\left\{ \alpha, \beta, 1-i\kappa_1; \frac{1}{2} \left[1 - \tanh\left(\frac{z}{a} - \frac{1}{2}\right) \right] \right\} \right\} + \\ & \text{DG}\left\{ \alpha, \beta, 1-i\kappa_1; \frac{1}{2} \left[1 - \tanh\left(\frac{z}{a} - \frac{1}{2}\right) \right] \right\} \end{aligned} \quad (\text{B-65})$$

$$y^2 - (\alpha + \beta)y + \alpha\beta = 0 \quad (\text{B-66})$$

$$y^2 - (\alpha + \beta)y + \alpha\beta = 0 \quad (\text{B-67})$$

$$y^2 - (\alpha + \beta)y + \alpha\beta = 0 \quad (\text{B-68})$$

Luego

Analizamos las condiciones de frontera en $z = 0$ y $z = a$, Que es el ancho de la barrera para este trabajo

Pero antes calculemos las derivadas de las funciones hipergeométricas de primera y segunda especie.

$$y = F(a, b; c; x) \Rightarrow \frac{dy}{dx} = \frac{ab}{c} F(a+1, b+1; c+1; x) \quad (\text{B-69})$$

$$y = G(a, b; c; x) \Rightarrow \frac{dy}{dx} = -ab G(a+1, b+1; c+1; x) \quad (\text{B-70})$$

La afirmación (B-69) se debe demostrar

$$G(a, b; c; x) = \alpha_1 F(a, b; c; x) + \alpha_2 x^{1-c} F(1+a-c, 1+b-c; 2-c; x) \quad (\text{B-71})$$

$$\alpha_1 = \frac{\Gamma(1-c)}{\Gamma(a-c+1)\Gamma(b-c+1)} \quad (\text{B-72})$$

Que considera la función especial gama con parámetros a, b y c.

$$\alpha_1 = \frac{\Gamma(c-1)}{\Gamma(a)\Gamma(b)} \quad (\text{B-73})$$

Teniendo en cuenta lo anterior, la derivada de la función y se expresa como:

$$y' = \alpha_1 \frac{ab}{c} F(a+1, b+1; c+1; x) + \alpha_2 \left[(1-c)x^{(1-c)-1} F(1+a-c, 1+b-c; 2-c; x) + x^{1-c} \frac{(1+a-c)(1b-c)}{(2-c)} F(1+a-c+1, 1+b-c+1; 2-c+1; x) \right] \quad (\text{B-74})$$

Por lo cual tenemos:

$$y' = -ab \left\{ \frac{\alpha_1}{c} F(a+1, b+1; c+1; x) - \frac{\alpha_2(1-c)}{ab} x^{(1-c)-1} \left[F(1+a-c, 1+b-c; 2-c; x) \right. \right. \\ \left. \left. + (1+a-c)(1b-c) \frac{x^{1-c}}{(2-c)} F(1+a-c+1, 1+b-c+1; 2-c+1; x) \right] \right\} \quad (\text{B-75})$$

Propiedades que aquí se utilizan son $\Gamma(x) = \frac{\Gamma(x+1)}{x}$ cuando $x > -1$

$$F(a, b; c-1; x) = F(a, b; c-1; x) + \frac{ab}{c(c-1)} x F(a+1, b+1; c+1; x) \quad (\text{B-76})$$

$$\alpha_1^\bullet = -\frac{\alpha_1}{c} = \frac{\Gamma(1-c)}{-c\Gamma(a-c+1)\Gamma(b-c+1)} = \frac{\Gamma(1-(1-c))}{\Gamma((a+1)-(c+1)+1)\Gamma((b+1)-(c+1)+1)} \quad (\text{B-77})$$

$$\alpha_2^\bullet = -\frac{\alpha_1(1-c)}{ab} = \frac{(c-1)\Gamma(c-1)}{a\Gamma(a)b\Gamma(b)} = \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a+1)\Gamma(b+1)} = \frac{\Gamma((c+1)-1)}{\Gamma(a+1)\Gamma(b+1)} \quad (\text{B-78})$$

Por otro lado

$$-ab G(a+1, b+1; c+1; x) = -ab \left[\alpha_1^\bullet F(a+1, b+1; c+1; x) + \alpha_2^\bullet x^{1-(c+1)} \times \right. \\ \left. F(1+(a+1)-(c+1), 1+(b+1)-(c+1); 2-(c+1); x) \right] \quad (\text{B-79})$$

$$F[1+(a+1)-(c+1), 1+(b+1)-(c+1); 2-(c+1); x] = F(1+a-c, 1+b-c; 2-c; x) + \\ \frac{(1+a-c)(1+b-c)x}{(1-c)(2-c)} F(1+a-c+1, 1+b-c+1; 2-c+1; x) \quad (\text{B-80})$$

Por lo tanto, de acuerdo a la propiedad dos,

$$F(1+a-c, 1+b-c; (2-c)-1; x) = F(1+a-c, 1+b-c; 2-c; x) + \frac{(1+a-c)(1+b-c)x}{(2-c)((2-c)-1)} \times F(1+a-c+1, 1+b-c+1; (2-c)+1; x) \quad (\text{B-81})$$

En resumen

$$y = G(a, b; c; x) \quad \Rightarrow \quad y' = -abG(a+1, b+1; c+1; x) \quad (\text{B-82})$$

Ahora se puede calcular la derivada de ψ ,

$$\begin{aligned} \psi'(z) = i\kappa_1 \left[\cosh\left(\frac{z}{a} - \frac{1}{2}\right) \right]^{-1+i\kappa_1 a} \sinh\left(\frac{z}{a} - \frac{1}{2}\right) \{CF(\Theta_z) + DG(\Theta_z)\} \\ + \left[\cosh\left(\frac{z}{a} - \frac{1}{2}\right) \right]^{i\kappa_1 a} \{CF'(\Theta_z) + DG'(\Theta_z)\} \end{aligned} \quad (\text{B-83})$$

$$\begin{aligned} \psi'(z) = \left[\cosh\left(\frac{z}{a} - \frac{1}{2}\right) \right]^{i\kappa_1 a} \left\{ i\kappa_1 \tanh\left(\frac{z}{a} - \frac{1}{2}\right) [CF(\Theta_z) + DG(\Theta_z)] + \right. \\ \left. [CF'(\Theta_z) + DG'(\Theta_z)] \right\} \end{aligned} \quad (\text{B-84})$$

$$\begin{aligned} \psi'(z) = \left[\cosh\left(\frac{z}{a} - \frac{1}{2}\right) \right]^{i\kappa_1 a} \left\{ C \left[i\kappa_1 \tanh\left(\frac{z}{a} - \frac{1}{2}\right) F(\Theta_z) + F'(\Theta_z) \right] + \right. \\ \left. D \left[i\kappa_1 \tanh\left(\frac{z}{a} - \frac{1}{2}\right) G(\Theta_z) + DG'(\Theta_z) \right] \right\} \end{aligned} \quad (\text{B-85})$$

$$\alpha_1 = \frac{\Gamma(c-1)}{\Gamma(a)\Gamma(b)} \quad (\text{B-86})$$

donde

$$\Theta_z = \left\{ \alpha, \beta, 1 - i\kappa_1; \frac{1}{2} \left[1 - \tanh\left(\frac{z}{a} - \frac{1}{2}\right) \right] \right\} \quad (\text{B-87})$$

Además Consideramos que $\lambda_1 = \cosh\left(\frac{1}{2}\right) = \cosh\left(-\frac{1}{2}\right)$, es una función de cosenos hiperbólicos como par y $\lambda_2 = \tanh\left(\frac{1}{2}\right) = -\tanh\left(-\frac{1}{2}\right)$, como una función impar

Condiciones de contorno; en las regiones $\frac{a-b}{2} < z < 0 \quad \wedge \quad 0 < z < a$.

$$\varphi_1(0) = \varphi_2(0) \quad (\text{B-88})$$

$$A + B = \lambda_1^{i\kappa_1 a} [CF(\Theta_0) + DG(\Theta_0)] \quad (\text{B-89})$$

$$\frac{1}{m_0^*(p)} \frac{d\varphi_1}{dz} \Big|_{z \rightarrow 0} = \frac{1}{m_1^*(p)} \frac{d\varphi_2}{dz} \Big|_{z \rightarrow 0} \quad (\text{B-90})$$

$$i\kappa_1(A - B) = \frac{\lambda_1^{i\kappa_1 a}}{\eta} \left\{ C[-i\kappa_1\lambda_2 F(\Theta_0) + F'(\Theta_0)] + D[-i\kappa_1\lambda_2 G(\Theta_0) + G'(\Theta_0)] \right\} \quad (\text{B-91})$$

$$A-B = i \frac{\lambda_1^{i \kappa_1 a}}{\eta \kappa_1} \left\{ C \left[i \kappa_1 \lambda_2 F(\Theta_0) - F'(\Theta_0) \right] + D \left[i \kappa_1 \lambda_2 G(\Theta_0) - G'(\Theta_0) \right] \right\} \quad (\text{B-92})$$

De ahí

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} = \frac{\lambda_1^{i \kappa_1 a}}{\eta \kappa_1} \begin{bmatrix} \eta \kappa_1 F(\Theta_0) & \eta \kappa_1 G(\Theta_0) \\ -\kappa_1 \lambda_2 F(\Theta_0) - i F'(\Theta_0) & -\kappa_1 \lambda_2 G(\Theta_0) - i G'(\Theta_0) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C \\ D \end{bmatrix} \quad (\text{B-93})$$

$$\begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} = \frac{\lambda_1^{i \kappa_1 a}}{2\eta \kappa_1} \begin{bmatrix} \kappa_1(\eta - \lambda_2)F(\Theta_0) - i F'(\Theta_0) & \kappa_1(\eta - \lambda_2)G(\Theta_0) - i G'(\Theta_0) \\ \kappa_1(\eta + \lambda_2)F(\Theta_0) + i F'(\Theta_0) & \kappa_1(\eta + \lambda_2)G(\Theta_0) + i G'(\Theta_0) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C \\ D \end{bmatrix} \quad (\text{B-94})$$

En la región $0 < z < a \quad \wedge \quad a < z < \frac{a+b}{2}$

$$\lambda_1^{i \kappa_1 a} [CF(\Theta_0) + DG(\Theta_0)] = E e^{i \kappa_1 a} \quad (\text{B-95})$$

$$[CF(\Theta_0) + DG(\Theta_0)] = E \lambda_1^{-i \kappa_1 a} e^{i \kappa_1 a} \quad (\text{B-96})$$

$$\frac{1}{m_1^*(p)} \frac{d\varphi_2}{dz} \Big|_{z \rightarrow a} = \frac{1}{m_0^*(p)} \frac{d\varphi_3}{dz} \Big|_{z \rightarrow a} \quad (\text{B-97})$$

Por lo tanto

$$\begin{bmatrix} F(\Theta_a) & G(\Theta_a) \\ i \kappa_1 \lambda_2 F(\Theta_a) + F'(\Theta_a) & i \kappa_1 \lambda_2 G(\Theta_a) + G'(\Theta_a) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C \\ D \end{bmatrix} = \kappa_1 \eta \left(\frac{e}{\lambda_1} \right)^{i \kappa_1 a} \begin{bmatrix} 1 \\ \kappa_1 \eta \\ i \end{bmatrix} E \quad (\text{B-98})$$

sea

$$M = \begin{bmatrix} F(\Theta_a) & G(\Theta_a) \\ i \kappa_1 \lambda_2 F(\Theta_a) + F'(\Theta_a) & i \kappa_1 \lambda_2 G(\Theta_a) + G'(\Theta_a) \end{bmatrix} \quad (\text{B-99})$$

$$\det(M) = F(\Theta_a)[i \kappa_1 \lambda_2 G(\Theta_a) + G'(\Theta_a)] - G(\Theta_a)[i \kappa_1 \lambda_2 F(\Theta_a) + F'(\Theta_a)] \quad (\text{B-100})$$

$$\det(M) = F(\Theta_a)G'(\Theta_a) - F'(\Theta_a)G(\Theta_a) = w(F, G)_{(a)} \quad (\text{B-101})$$

pero

$$w(F, G)_{(x)} = -\frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)\Gamma(b)} x^{-c} (1-x)^{c-a-b-1} \frac{dx}{dy} \quad (\text{B-102})$$

$$w(F, G)_{(\xi)} = -\frac{\Gamma(1-i\kappa_1 a)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)} \xi^{-(1-i\kappa_1 a)} (1-\xi)^{-1+i\kappa_1 a} \frac{d\xi}{dz} \quad (\text{B-103})$$

$$\xi = \frac{1}{2} \left[1 - \tanh \left(\frac{z}{a} - \frac{1}{2} \right) \right] \quad (\text{B-104})$$

$$\frac{d\xi}{dz} = \frac{1}{2a} \operatorname{sech}^2 \left(\frac{z}{a} - \frac{1}{2} \right) = \frac{1}{2a} \operatorname{cosh}^{-2} \left(\frac{z}{a} - \frac{1}{2} \right) \quad (\text{B-105})$$

$$w(\mathbf{F}, \mathbf{G})_{(\xi)} = -\frac{\Gamma(1-i\kappa_1 a)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)} \left\{ \frac{1}{2} \left[1 - \tanh\left(\frac{z}{a} - \frac{1}{2}\right) \right] \right\}^{-(1-i\kappa_1 a)} \left\{ \frac{1}{2} \left[1 + \tanh\left(\frac{z}{a} - \frac{1}{2}\right) \right] \right\}^{-(1-i\kappa_1 a)} \times \frac{1}{2a} \cosh^{-2}\left(\frac{z}{a} - \frac{1}{2}\right) \quad (\text{B-106})$$

$$w(\mathbf{F}, \mathbf{G})_{(\xi)} = -\frac{1}{2a} \frac{\Gamma(1-i\kappa_1 a)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)} \left(\frac{1}{4}\right)^{-(1-i\kappa_1 a)} \left[\cosh^2\left(\frac{z}{a} - \frac{1}{2}\right) \right]^{1-i\kappa_1 a} \cosh^{-2}\left(\frac{z}{a} - \frac{1}{2}\right) \quad (\text{B-107})$$

En consecuencia

$$w(\mathbf{F}, \mathbf{G})_{(z)} = -\frac{4^{1-i\kappa_1 a}}{2a} \frac{\Gamma(1-i\kappa_1 a)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)} \left[\cosh^2\left(\frac{z}{a} - \frac{1}{2}\right) \right]^{-2i\kappa_1 a} \quad (\text{B-108})$$

$$w(\mathbf{F}, \mathbf{G})_{(a)} = -\frac{4^{1-i\kappa_1 a}}{2a} \frac{\Gamma(1-i\kappa_1 a)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)} \lambda_1^{-2i\kappa_1 a} \quad (\text{B-109})$$

$$\mathbf{M}^{-1} = \frac{1}{w(\mathbf{F}, \mathbf{G})_{(a)}} \begin{bmatrix} i\kappa_1 \lambda_2 \mathbf{G}(\Theta_a) + \mathbf{G}'(\Theta_a) & -\mathbf{G}(\Theta_a) \\ -[i\kappa_1 \lambda_2 \mathbf{F}(\Theta_a) + \mathbf{F}'(\Theta_a)] & \mathbf{F}(\Theta_a) \end{bmatrix} \quad (\text{B-110})$$

$$\begin{bmatrix} \mathbf{C} \\ \mathbf{D} \end{bmatrix} = \frac{2a}{4^{1-i\kappa_1 a}} \kappa_1 \eta (\lambda_1 e)^{i\kappa_1 a} \frac{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)}{\Gamma(1-i\kappa_1 a)} \begin{bmatrix} \frac{-1}{\kappa_1 \eta} [i\kappa_1 \lambda_2 \mathbf{G}(\Theta_a) + \mathbf{G}'(\Theta_a)] + i\mathbf{G}(\Theta_a) \\ \frac{1}{\kappa_1 \eta} [i\kappa_1 \lambda_2 \mathbf{F}(\Theta_a) + \mathbf{F}'(\Theta_a)] - i\mathbf{F}(\Theta_a) \end{bmatrix} \mathbf{E} \quad (\text{B-111})$$

$$\begin{bmatrix} \mathbf{C} \\ \mathbf{D} \end{bmatrix} = \frac{a}{2} \kappa_1 \eta (4\lambda_1 e)^{i\kappa_1 a} \frac{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)}{\Gamma(1-i\kappa_1 a)} \begin{bmatrix} -(\kappa_1 \eta)^{-1} G'(\Theta_a) + i(1-\eta^{-1}\lambda_2)G(\Theta_a) + iG(\Theta_a) \\ (\kappa_1 \eta)^{-1} F'(\Theta_a) - i(1-\eta^{-1}\lambda_2)F(\Theta_a) - iF(\Theta_a) \end{bmatrix} \mathbf{E} \quad (\text{B-112})$$

Teniendo en cuenta

$$\mathbf{M} = \frac{a}{4} (4e)^{i\kappa_1 a} \lambda_1^{2i\kappa_1 a} \frac{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)}{\Gamma(1-i\kappa_1 a)} \quad (\text{B-113})$$

Haciendo las sustituciones correspondientes

$$\begin{bmatrix} \mathbf{A} \\ \mathbf{B} \end{bmatrix} = \mathbf{M} \left\{ \begin{array}{l} \left[\kappa_1(\eta - \lambda_2)F(\Theta_0) - iF'(\Theta_0) \right] \left[-(\kappa_1 \eta)^{-1} G'(\Theta_a) + i(1-\eta^{-1}\lambda_2)G(\Theta_a) \right] + \\ \left[\kappa_1(\eta + \lambda_2)F(\Theta_0) + iF'(\Theta_0) \right] \left[-(\kappa_1 \eta)^{-1} G'(\Theta_a) + i(1-\eta^{-1}\lambda_2)G(\Theta_a) \right] + \\ \left[\kappa_1(\eta - \lambda_2)G(\Theta_0) - iG'(\Theta_0) \right] \left[(\kappa_1 \eta)^{-1} F'(\Theta_a) - i(1-\eta^{-1}\lambda_2)F(\Theta_a) \right] \\ \left[\kappa_1(\eta - \lambda_2)G(\Theta_0) + iG'(\Theta_0) \right] \left[(\kappa_1 \eta)^{-1} F'(\Theta_a) - i(1-\eta^{-1}\lambda_2)F(\Theta_a) \right] \end{array} \right\} \mathbf{E} \quad (\text{B-114})$$

De ahí

$$\begin{aligned} \mathbf{A} = \mathbf{M} \left\{ \left[\left(\frac{\lambda_2}{\eta} - 1 \right) F(\Theta_0) G'(\Theta_a) - \left(\frac{\lambda_2}{\eta} - 1 \right) F'(\Theta_0) G(\Theta_a) \right] + \left[\frac{1}{\kappa_1 \eta} F'(\Theta_0) G'(\Theta_a) + \right. \right. \\ \left. \left. \kappa_1 \eta \left(1 - \frac{\lambda_2}{\eta} \right)^2 F(\Theta_0) G(\Theta_a) \right] i + \left[\left(1 - \frac{\lambda_2}{\eta} \right) F'(\Theta_a) G(\Theta_0) - \left(1 - \frac{\lambda_2}{\eta} \right) F(\Theta_a) G'(\Theta_0) \right] \right. \\ \left. \left[-\frac{1}{\kappa_1 \eta} F'(\Theta_a) G'(\Theta_0) - \kappa_1 \eta \left(1 - \frac{\lambda_2}{\eta} \right)^2 F(\Theta_a) G(\Theta_0) \right] i \right\} \mathbf{E} \quad (\text{B-115}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{A} = \mathbf{M} \left\{ \left(\frac{\lambda_2}{\eta} - 1 \right) \left\{ \left[F(\Theta_0) G'(\Theta_a) - F'(\Theta_a) G(\Theta_0) \right] + \left[F'(\Theta_a) G'(\Theta_0) - F(\Theta_0) G(\Theta_a) \right] \right\} + \right. \\ \left. i \left\{ \frac{1}{\kappa_1 \eta} \left[F'(\Theta_0) G'(\Theta_a) - F(\Theta_a) G'(\Theta_0) \right] + \kappa_1 \eta \left(\frac{\lambda_2}{\eta} - 1 \right)^2 \left[F(\Theta_0) G(\Theta_a) - F(\Theta_a) G(\Theta_0) \right] \right\} \right\} \mathbf{E} \quad (\text{B-116}) \end{aligned}$$

Sea

$$\mathbf{j}_1 = F(\Theta_0)G'(\Theta_a) - F'(\Theta_a)G(\Theta_0) \quad (\text{B-117})$$

$$\mathbf{j}_2 = F(\Theta_a)G'(\Theta_0) - F'(\Theta_0)G(\Theta_a) \quad (\text{B-118})$$

$$\mathbf{j}_3 = F'(\Theta_0)G'(\Theta_a) - F'(\Theta_a)G'(\Theta_0) \quad (\text{B-119})$$

$$\mathbf{j}_4 = F(\Theta_0)G(\Theta_a) - F(\Theta_a)G(\Theta_0) \quad (\text{B-120})$$

$$\mathbf{A} = \mathbf{M} \left\{ \left[\left(\frac{\lambda_2}{\eta} - 1 \right) \mathbf{j}_1 + \mathbf{j}_2 \right] + \left[\frac{1}{\kappa_1 \eta} \mathbf{j}_3 + \kappa_1 \eta \left(\frac{\lambda_2}{\eta} - 1 \right)^2 \mathbf{j}_4 \right] i \right\} \mathbf{E} \quad (\text{B-121})$$

Coefficiente de transmisión

$$\mathbf{A}^* = \mathbf{M}^* \left\{ \left[\left(\frac{\lambda_2}{\eta} - 1 \right) \mathbf{j}_1 + \mathbf{j}_2 \right] - \left[\frac{1}{\kappa_1 \eta} \mathbf{j}_3 + \kappa_1 \eta \left(\frac{\lambda_2}{\eta} - 1 \right)^2 \mathbf{j}_4 \right] i \right\} \mathbf{E}^* \quad (\text{B-122})$$

Analícemos

$$\mathbf{M}\mathbf{M}^* = \left[\frac{a}{4} (4e)^{i\kappa_1 a} \lambda_1^{2i\kappa_1 a} \frac{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)}{\Gamma(1-i\kappa_1 a)} \right] \left[\frac{a}{4} (4e)^{-i\kappa_1 a} \lambda_1^{-2i\kappa_1 a} \frac{\Gamma^*(\alpha)\Gamma^*(\beta)}{\Gamma^*(1-i\kappa_1 a)} \right] \quad (\text{B-123})$$

$$\mathbf{M}\mathbf{M}^* = \frac{a^2}{164} \left(\frac{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)}{\Gamma(1-i\kappa_1 a)} \right) \left(\frac{\Gamma^*(\alpha)\Gamma^*(\beta)}{\Gamma^*(1-i\kappa_1 a)} \right) \quad (\text{B-124})$$

Aplicando las siguientes propiedades,

$$\Gamma^*(z) = \Gamma(z^*) \quad (\text{B-125})$$

$$\Gamma(1+iy)\Gamma(1-iy) = |\Gamma(1+iy)|^2 = \frac{\pi y}{\sinh(\pi y)} \quad (\text{B-126})$$

$$\Gamma(z)\Gamma(1-z) = \frac{\pi}{\sin(\pi z)} \quad (\text{B-127})$$

$$\mathbf{j}_3 = F'(\Theta_0)G'(\Theta_a) - F'(\Theta_a)G'(\Theta_0) \quad (\text{B-128})$$

Se tiene

$$\Gamma(1-i\kappa_1 a)\Gamma^*(1-i\kappa_1 a) = |\Gamma(1-i\kappa_1 a)|^2 = \frac{\pi \kappa_1 a}{\sinh(\pi \kappa_1 a)} \quad (\text{B-129})$$

Por otro lado

$$1 - \alpha^* = 1 - \left(\frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} - V_0 a^2 + i\kappa_1 a} \right) = \frac{1}{2} - \sqrt{\frac{1}{4} - V_0 a^2 - i\kappa_1 a} = \beta \quad (\text{B-130})$$

Entonces

$$\beta = 1 - \alpha^* \quad (\text{B-131})$$

$$\Gamma(\beta)\Gamma^*(\alpha)\cdot\Gamma(\alpha)\Gamma^*(\beta)=\Gamma(1-\alpha^*)\Gamma(\alpha^*)\cdot\Gamma(\alpha)\Gamma(1-\alpha) \quad (\text{B-132})$$

Por otro lado

$$\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)\Gamma^*(\alpha)\Gamma^*(\beta)=\frac{\pi}{\sin(\pi\alpha^*)}\frac{\pi}{\sin(\pi\alpha)} \quad (\text{B-133})$$

$$\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)\Gamma^*(\alpha)\Gamma^*(\beta)=\pi^2\left[\sin^2\pi\left(1+\sqrt{\frac{1}{4}-V_0a^2}\right)+\sinh^2\pi\kappa_1a\right]^{-1} \quad (\text{B-134})$$

Donde se aplico la propiedad

$$|\sin(x+iy)|^2=\sin(x+iy)\cdot\sin(x-iy)=\sin^2x+\sinh^2y \quad (\text{B-135})$$

En consecuencia

$$\mathbf{M}\mathbf{M}^*=\frac{a\pi}{16\kappa_1}\frac{\sinh\pi\kappa_1a}{\sinh^2\pi\kappa_1a+\sin^2\pi\left(1+\sqrt{\frac{1}{4}-V_0a^2}\right)} \quad (\text{B-136})$$

Lugo la transmisión esta dada por

$$\mathbf{T}=\frac{16\kappa_1}{a\pi}\left[\sinh^2\pi\kappa_1a+\cos^2\pi\left(1+\sqrt{\frac{1}{4}-V_0a^2}\right)\right]\left\{\left[\left(\frac{\lambda_2}{\eta}-1\right)(\mathbf{j}_1+\mathbf{j}_2)\right]^2+\left[\frac{1}{\kappa_1\eta}\mathbf{j}_3+\kappa_1\eta\left(\frac{\lambda_2}{\eta}-1\right)^2\mathbf{j}_4\right]^2\right\}^{-1}\sinh\pi\kappa_1a \quad (\text{B-137})$$

ANEXO C

EFEECTO ZEEMAN

Hamiltoniano del sistema con el termino zeeman,

$$H = \frac{1}{2m} \left(\vec{P} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + V - \frac{e}{mc} \vec{H} \cdot \vec{S} \quad (\text{C-1})$$

El Hamiltoniano (C-1), puede ser expresado como se muestra en la ecuación (4.2)

$$H = \frac{1}{2m} \left[\vec{P}^2 - \frac{e}{c} (\vec{P} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \vec{P}) + \left(\frac{e}{c} \right)^2 \vec{A}^2 \right] + V - \frac{e}{mc} \vec{H} \cdot \vec{S} \quad (\text{C-2})$$

\vec{A} , podemos representarlo en la forma $\vec{A} = \frac{1}{2} \vec{h} \times \vec{r}$.

En efecto se verifica que, el $\text{rot} \vec{A} = \vec{h}$, por lo que el $\vec{P} \cdot \vec{A} - \vec{A} \cdot \vec{P}$; así, de igual manera $\vec{P} \cdot \vec{A} - \vec{A} \cdot \vec{P} = -i\hbar \text{div} \vec{A}$.

Por lo tanto podemos

$$\text{div} \vec{A} = \text{div} \left(\frac{1}{2} \vec{h} \times \vec{r} \right) = 0 \quad (\text{C-3})$$

Entonces podemos escribir el Hamiltoniano (2) como un Hamiltoniano total que involucra la presencia del campo magnético y la interacción del espín, así el Hamiltoniano del sistema esta dado por:

$$H = H_0 - \frac{e}{2mc} \vec{h} \cdot (\vec{r} \times \vec{p}) + \frac{e^2}{2mc^2} (\vec{h} \times \vec{r})^2 - \frac{e}{mc} \vec{h} \cdot \vec{S} \quad (\text{C-4})$$

Donde

$$H_0 = \frac{1}{2m} \vec{P}^2 + V \quad (\text{C-5})$$

La ecuación (C-5), representa el Hamiltoniano en ausencia del campo magnético \vec{h} , es decir sin tener en cuenta la interacción Zeeman.

Considerando el campo magnético externo débil, podemos reescribir el Hamiltoniano de la siguiente manera

$$H = H_0 - \vec{\mu} \cdot \vec{h} \quad (\text{C-6})$$

Tomando el campo magnético externo \vec{h} , suficientemente débil, el tercer termino en la ecuación (C-4), que es cuadrático en \vec{h} , lo podemos despreciar con respecto al segundo termino que es lineal en \vec{h} , es decir, consideremos la energía correspondiente a este termino mucho menor que las diferencias entre los niveles energéticos del átomo en ausencia del campo magnético.

Entonces podemos escribir el Hamiltoniano de la siguiente forma.

$$H = H_0 - \frac{e}{2mc} \vec{h} \cdot \vec{L} - \frac{e}{mc} \vec{h} \cdot \vec{S} \quad (\text{C-7})$$

$$H = H_0 - \frac{e}{2mc} (\vec{h} \cdot \vec{L} - 2\vec{h} \cdot \vec{S}) \quad (\text{C-8})$$

$$H = H_0 - \frac{e}{2mc} \vec{h} \cdot (\vec{L} - 2\vec{S}) \quad (\text{C-9})$$

Donde

$$H = H_0 - \vec{\mu} \cdot \vec{h}; \quad \vec{\mu} = \frac{e}{2mc} (\vec{L} - 2\vec{S}) \quad (\text{C-10})$$

Que es el operador del momento magnético del átomo, en términos del momento angular total, donde

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} \quad (\text{C-11})$$

Toma la forma

$$\vec{\mu} = \frac{e}{2mc} (\vec{J} + \vec{S}) \quad (\text{C-12})$$

Entonces

$$H = H_0 - \vec{\mu} \cdot \vec{h} \quad (\text{C-13})$$

Tomando el campo magnético en la dirección del eje z, la expresión se reduce a:

$$H = H_0 - \vec{\mu}_z \cdot \vec{h} \quad (\text{C-14})$$

Los elementos matriciales del operador de perturbación son:

$$\langle n, J, L, S, M_J | -h\mu_z | n, J, L, S, M_J \rangle \quad (\text{C-15})$$

Donde

$$| n, J, L, S, M_J \rangle \quad (\text{C-16})$$

Son los vectores propios del Hamiltoniano no perturbado H_0 ; donde el término adicional esta dado por:

$$\Delta E_{JLM_J} = -\frac{e\hbar}{2mc} H g M_J \quad (C-17)$$

ACOPLAMIENTO ESPIN ORBITA -EFECTO RASHBA

En primera instancia veamos el término adicional a la contribución del Hamiltoniano del sistema con el término Rashba, así:

$$H_0 = \frac{\vec{P}_e^2}{2m} + V_0 \quad (C-18)$$

La ecuación (22), es el Hamiltoniano del sistema sin el término adicional del acoplamiento.

Partimos del hecho de que el electrón al orbitar alrededor del núcleo, este genera un campo magnético dado como se muestra en la ecuación (23)

$$\vec{B} = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{\vec{J} \times \vec{r}}{r^3} \quad (C-19)$$

Donde

μ = Momento magnético del electrón

\vec{V} = Velocidad del electrón

\vec{J} = Corriente generada por el electrón

$$\vec{B} = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{\vec{J} \times \vec{r}}{r^3} \quad (\text{C-20})$$

Tomando \vec{J} de la siguiente forma.

$$\vec{J} = Ze\vec{V} \quad (\text{C-21})$$

$$\vec{B} = \frac{\mu_0 Ze}{4\pi r^3} \vec{V} \times \vec{r} \quad (\text{C-22})$$

Teniendo en cuenta el campo magnético de la siguiente manera.

$$\vec{E} = \frac{Ze\vec{r}}{4\pi\epsilon_0 r^3} \quad (\text{C-23})$$

$$\vec{B} = \mu_0 E_0 \vec{V} \times \vec{E} \quad (\text{C-24})$$

Podemos expresar el campo magnético de la siguiente forma.

$$\vec{B} = \frac{\vec{V} \times \vec{E}}{c^2} \quad (\text{C-25})$$

Entonces,

$$H_s = -\vec{\mu}_s \cdot \vec{B} = \vec{\mu}_s \cdot \frac{1}{c^2} (\vec{V} \times \vec{E}) \quad (\text{C-26})$$

$$H_s = \frac{g_s \mu_B \vec{S}}{\hbar c^2} \cdot (\vec{V} \times \vec{E}) \quad (\text{C-27})$$

Tomando $\vec{V} = -\vec{V}$ en el sistema de los electrones, entonces.

$$\mathcal{G}(r) = -e\varphi \quad (\text{C-28})$$

Expresando el campo eléctrico de la siguiente forma y remplazando en la ecuación (32), tenemos.

$$\vec{E} = -\vec{\nabla} \varphi = -\frac{\vec{r}}{r} \frac{d\varphi}{dr} \quad (\text{C-29})$$

$$H_s = -\frac{g_s \mu_B \vec{S}}{m_e \hbar c^2} \cdot \left(\vec{V} \times \vec{r} \right) \frac{d\mathcal{G}}{dr} \quad (\text{C-30})$$

$$L = \vec{r} \times m\vec{V} = -m\vec{V} \times \vec{r} \quad (\text{C-31})$$

$$H_s = -\frac{g_s \mu_B \vec{S}}{m_e \hbar c^2} \cdot \frac{\vec{L}}{r} \frac{d\mathcal{G}}{dr} \quad (\text{C-32})$$

Así el Hamiltoniano del termino contributivo debido al acoplamiento espín orbita es el que se muestra en la ecuación (C-33).

$$H_{S0}^R = H^R = -\frac{1}{2m_e^2 c^2} \vec{S} \cdot \vec{L} \left(\frac{1}{r} \right) \frac{d\mathcal{G}}{dr} \quad (\text{C-33})$$

Donde $m_e = \frac{g_s \mu_B}{e\hbar}$, Teniendo en cuenta que $\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$, entonces:

$$H^R = \frac{\hbar}{2m_e^2 c^2} \vec{\sigma} \cdot \vec{L} \left(\frac{1}{r} \right) \frac{d\mathcal{G}}{dr}; \quad \vec{L} = \vec{r} \times \vec{P} \quad (\text{C-34})$$

Así podemos llevar la ecuación (C-34) a la siguiente expresión.

$$H^R = \frac{\hbar}{4m_e^2 c^2} (\vec{\nabla} \varphi \times \vec{\sigma}) \cdot \vec{P} \quad (\text{C-35})$$

Tomando la dirección solo del eje z, como la dirección predeterminada, tenemos.

$$\vec{\nabla} \varphi \times \vec{\sigma} = \begin{vmatrix} \hat{x} & \hat{y} & \hat{z} \\ 0 & 0 & \frac{\partial \varphi}{\partial z} \\ \sigma_x & \sigma_y & \sigma_z \end{vmatrix} \quad (\text{C-36})$$

$$\vec{\nabla} \varphi \times \vec{\sigma} = \left(\sigma_x \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right) \hat{y} - \left(\sigma_y \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right) \hat{x} \quad (\text{C-37})$$

$$\vec{\nabla} \varphi \times \vec{\sigma} = (\sigma_x F_z) \hat{y} - (\sigma_y F_z) \hat{x} \quad (\text{C-38})$$

Donde llamamos $F_z = \frac{\partial \varphi}{\partial z}$

$$(\vec{\nabla}\varphi \times \vec{\sigma}) \cdot \vec{P} = F_z (\sigma_x \hat{y} - \sigma_y \hat{x}) \cdot (P_x \hat{x} + P_y \hat{y} + P_z \hat{z}) \quad (\text{C-39})$$

Por consiguiente tenemos la relación

$$(\vec{\nabla}\varphi \times \vec{\sigma}) \cdot \vec{P} = F_z \left(\begin{array}{c|c} 0 & P_y \\ \hline P_y & 0 \end{array} - \begin{array}{c|c} 0 & -iP_x \\ \hline iP_x & 0 \end{array} \right) \quad (\text{C-40})$$

Así el Hamiltoniano adicional del término de Rashba es

$$H^R = \frac{\hbar F_z}{4m_e^2 c^2} \left(\begin{array}{c|c} 0 & P_y \\ \hline P_y & 0 \end{array} - \begin{array}{c|c} 0 & -iP_x \\ \hline iP_x & 0 \end{array} \right) \quad (\text{C-41})$$

Donde

$$H^R = \alpha \left(\begin{array}{c|c} 0 & P_y \\ \hline P_y & 0 \end{array} - \begin{array}{c|c} 0 & -iP_x \\ \hline iP_x & 0 \end{array} \right) \quad (\text{C-42})$$

Aquí $\alpha = \frac{\hbar F_z}{4m_e^2 c^2}$, entonces,

$$H^R = \alpha \left| \begin{array}{cc} 0 & (P_y + iP_x) \\ (P_y - iP_x) & 0 \end{array} \right| \quad (\text{C-43})$$

Donde α es llamado comúnmente la fuerza del acoplamiento espín orbita para el termino Rashba.

ACOPLAMIENTO ESPÍN ORBITA EN UN PUNTO CUÁNTICO

El Hamiltoniano que describe al sistema del puto cuántico es:

$$H = \frac{P^2}{2m} + V(x, y) + \alpha_R (P_x \sigma_y - P_y \sigma_x) + \frac{1}{2} g \mu_B B \sigma_z \quad (\text{C-44})$$

Aquí tenemos en cuenta que

$$P = -i\nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A} \quad (\text{C-45})$$

También consideramos: $x = \rho \cos \phi$, $y = \rho \sin \phi$, $A_\rho = 0$ y $A_\phi = \frac{B}{2} \rho$, entonces:

$$P^2 = \left(i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 \quad (\text{C-46})$$

$$P^2 = -\hbar^2 \nabla^2 + \left(\frac{e}{c} \right)^2 A^2 - i\hbar \nabla \cdot \frac{e}{c} \mathbf{A} \quad (\text{C-47})$$

Teniendo en cuenta que:

$$\nabla A_\phi = \frac{\partial}{\partial \phi} \quad (\text{C-48})$$

Tomando el sistema en coordenadas cilíndricas,

$$\nabla_{\rho, \phi}^2 = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \quad (\text{C-49})$$

$$A^2 = A_\phi^2 = \frac{B^2}{4} \rho^2 \quad (\text{C-50})$$

Entonces la ecuación (C-49), toma la siguiente forma:

$$\nabla A_\phi = -\frac{1}{2m} \left\{ \hbar^2 \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} \right] - \hbar \frac{e}{c} i \frac{\partial}{\partial \phi} + \left(\frac{e}{c} \right)^2 \frac{B^2}{4} \rho^2 \right\} \quad (\text{C-51})$$

Y el Hamiltoniano que describe el sistema es:

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} \right] + i \frac{\hbar e B}{2mc} \frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{B^2}{8m} \left(\frac{e}{c} \right)^2 \rho^2 \quad (\text{C-52})$$

Donde la frecuencia ciclotrónica esta dada así.

$$\omega_c = -\frac{eB}{mc} \quad (\text{C-53})$$

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} \right] + \frac{i\hbar}{2} \omega_c \frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{1}{8} m \omega_c^2 \rho^2 \quad (\text{C-54})$$

Tomando unidades gaussianas, así $\hbar = 1$; entonces tenemos:

$$h(B) = -\frac{1}{2m} \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} \right] + \frac{i}{2} \omega_c \frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{1}{8} m \omega_c^2 \rho^2 \quad (\text{C-55})$$

Entonces

$$H = h(B) + \alpha_R (P_x \sigma_y - P_y \sigma_x) + \frac{1}{2} g \mu_B B \sigma_z \quad (\text{C-56})$$

Utilizando las matrices de Pauli en la ecuación (c-56) tenemos.

$$H = \left\{ \begin{pmatrix} h(B) & 0 \\ 0 & h(B) \end{pmatrix} + \alpha_R \begin{pmatrix} 0 & -(P_x + iP_y) \\ (iP_x - P_y) & 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{2} g \mu_B B \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right\} \quad (\text{C-57})$$

Podemos llegar a la siguiente relación.

$$H = \left\{ \begin{pmatrix} h(B) & 0 \\ 0 & h(B) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & \alpha_R e^{i\phi} \left(-\frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{i}{\rho} \frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{eB}{2c} \rho \right) \\ \alpha_R e^{-i\phi} \left(\frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{i}{\rho} \frac{\partial}{\partial \phi} - \frac{eB}{2c} \rho \right) & 0 \end{pmatrix} + \Omega \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right\} \quad (C-58)$$

Donde llamamos a $\Omega = \frac{1}{2} g \mu_B B$.

Por lo que el Hamiltoniano del sistema toma la forma:

$$H = \left\{ \begin{pmatrix} h(B) + \Omega & \alpha_R e^{i\phi} \left(-\frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{i}{\rho} \frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{eB}{2c} \rho \right) \\ \alpha_R e^{-i\phi} \left(\frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{i}{\rho} \frac{\partial}{\partial \phi} - \frac{eB}{2c} \rho \right) & h(B) - \Omega \end{pmatrix} \right\} \quad (C-59)$$

El Hamiltoniano anterior conmuta con la proyección z , del operador total del momento

$$j_z = l_z + \frac{1}{2} \sigma_z \quad ; \quad l_z = i \partial_\phi \quad (C-60)$$

Las auto funciones del momento angular son de la forma:

$$\psi_i(\rho, \phi) = \begin{bmatrix} e^{i(j-1/2)\phi} f_j(\rho) \\ e^{i(j+1/2)\phi} g_j(\rho) \end{bmatrix} \quad (C-61)$$

Entonces podemos reescribir el Hamiltoniano de la siguiente forma.

$$H\psi = E\psi \quad (C-62)$$

$$\begin{aligned}
& \left\{ \begin{array}{cc} h(B) + \frac{1}{2} g \mu_B B & \alpha_R e^{i\phi} \left(-\frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{i}{\rho} \frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{eB}{2c} \rho \right) \\ \alpha_R e^{-i\phi} \left(\frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{i}{\rho} \frac{\partial}{\partial \phi} - \frac{eB}{2c} \rho \right) & h(B) - \frac{1}{2} g \mu_B B \end{array} \right\} \begin{bmatrix} e^{i(j-1/2)\phi} f_j(\rho) \\ e^{i(j+1/2)\phi} g_j(\rho) \end{bmatrix} = \\
& E \begin{bmatrix} e^{i(j-1/2)\phi} f_j(\rho) \\ e^{i(j+1/2)\phi} g_j(\rho) \end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{C-63}$$

Podemos ahora podemos escribir las respectivas funciones para f y g del Hamiltoniano anterior.

$$\begin{aligned}
& \left\{ -\frac{1}{2} \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} \right] + \frac{i}{2} \omega_c \frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{1}{8} m \omega_c^2 \rho^2 \right\} e^{i(j-1/2)\phi} f_j(\rho) + \frac{1}{2} g \mu_B B e^{i(j-1/2)\phi} f_j(\rho) + \\
& \alpha_R e^{i\phi} \left(-\frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{i}{\rho} \frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{eB}{2c} \rho \right) e^{i(j+1/2)\phi} g_j(\rho) = E e^{i(j-1/2)\phi} f_j(\rho)
\end{aligned} \tag{C-64}$$

$$\begin{aligned}
& \left\{ \frac{1}{2} \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} \right] - \frac{i}{2} \omega_c \frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{1}{8} m \omega_c^2 \rho^2 \right\} e^{i(j+1/2)\phi} g_j(\rho) - \frac{1}{2} g \mu_B B e^{i(j+1/2)\phi} g_j(\rho) + \\
& \alpha_R e^{i\phi} \left(-\frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{i}{\rho} \frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{eB}{2c} \rho \right) e^{i(j-1/2)\phi} f_j(\rho) = E e^{i(j+1/2)\phi} g_j(\rho)
\end{aligned} \tag{C-65}$$

Para la ecuación (c-65) hacemos las respectivas derivadas $\frac{\partial}{\partial \phi} e^{i(j-1/2)\phi}$, y $\frac{\partial^2}{\partial \phi^2} e^{i(j-1/2)\phi}$, con las siguientes relaciones.

$$2m\omega_c = 2m \frac{eB}{mc} = 2 \frac{eB}{c} \tag{C-66}$$

$$\frac{1}{8} 2m^2 \omega_c^2 = \frac{1}{4} m^2 \frac{e^2 B^2}{m^2 c^2} = \frac{e^2 B^2}{4c^2} \tag{C-67}$$

Podemos llegar a la siguiente expresión.

$$\left[\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \left(\rho \frac{d}{d\rho} \right) - \frac{1}{\rho^2} \left[\left(j - \frac{1}{2} \right)^2 - \frac{e^2 B^2}{4c^2} \right] \right] f_j + 2m \left(E - \frac{1}{2} g \mu_B B \right) f_j - 2m \alpha_R \left(-\frac{d}{d\rho} - \frac{1}{\rho} \left(j - \frac{1}{2} \right) + \frac{eB}{2c} \rho \right) g_j = 0 \quad (\text{C-68})$$

Tomando los operadores de acoplamiento espín orbita para este sistema, de la siguiente forma, entonces.

$$\nabla_{\pm, j}^{(B)} = \pm \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{j}{\rho} + \frac{eB}{2c} \rho \quad (\text{C-69})$$

$$\Delta_j^{(B)} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) - \frac{1}{\rho^2} \left(j - \frac{eB}{2c} \rho^2 \right)^2 \quad (\text{C-70})$$

Entonces

$$\nabla_{\pm, j+1/2}^{(B)} = \pm \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{(j-1/2)}{\rho} + \frac{eB}{2c} \rho \quad (\text{C-71})$$

$$\Delta_{j+1/2}^{(B)} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) - \frac{1}{\rho^2} \left((j-1/2) - \frac{eB}{2c} \rho^2 \right)^2 \quad (\text{C-72})$$

Por lo tanto llegamos a la siguiente expresión.

$$\Delta_{j-1/2}^{(B)} f_j + 2m \left(E - 1/2 g \mu_B B \right) f_j - 2m \alpha_R \nabla_{-, j+1/2}^{(B)} g_j = 0 \quad (\text{C-73})$$

De igual forma tenemos para la ecuación (c-65), así:

$$\left[\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \left(\rho \frac{d}{d\rho} \right) - \frac{1}{\rho^2} \left[\left(j + \frac{1}{2} \right)^2 - \frac{e^2 B^2}{4c^2} \right]^2 \right] g_j + 2m \left(E + \frac{1}{2} g \mu_B B \right) g_j - 2m \alpha_R \left(\frac{d}{d\rho} - \frac{1}{\rho} \left(j + \frac{1}{2} \right) + \frac{eB}{2c} \rho \right) f_j = 0 \quad (C-74)$$

Por consiguiente:

$$\Delta_{j+1/2}^{(B)} g_j + 2m \left(E + 1/2 g \mu_B B \right) g_j - 2m \alpha_R \nabla_{+,j-1/2}^{(B)} f_j = 0 \quad (C-75)$$

4.2 ACOPLAMIENTO ESPIN-ORBITA Y EL EFECTO ZEEMAN

Partiendo de del siguiente sistema de ecuaciones

$$\begin{cases} h(B) + \frac{1}{2} g \mu_B B & \alpha_R e^{-i\phi} \left(-\frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{i}{\rho} \frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{eB}{2c} \rho \right) \\ \alpha_R e^{i\phi} \left(\frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{i}{\rho} \frac{\partial}{\partial \phi} - \frac{eB}{2c} \rho \right) & h(B) - \frac{1}{2} g \mu_B B \end{cases} \begin{cases} \left[e^{i(j-1/2)\phi} f_j(\rho) \right] \\ \left[e^{i(j+1/2)\phi} g_j(\rho) \right] \end{cases} = E \begin{cases} \left[e^{i(j-1/2)\phi} f_j(\rho) \right] \\ \left[e^{i(j+1/2)\phi} g_j(\rho) \right] \end{cases} \quad (C-76)$$

Miramos ahora la contribución del efecto Zeeman, por lo tanto tenemos:

$$\begin{aligned} & \left[h(B) + \frac{1}{2} g \mu_B B \right] e^{i(j-1/2)\phi} f_j(\rho) + \alpha_R e^{-i\phi} \left(-\frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{i}{\rho} \frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{eB}{2c} \rho \right) e^{i(j+1/2)\phi} g_j(\rho) = \\ & E e^{i(j-1/2)\phi} f_j(\rho) \end{aligned} \quad (C-77)$$

Y la ecuación

$$\begin{aligned} & \left[h(B) - \frac{1}{2} g \mu_B B \right] e^{i(j+1/2)\phi} g_j(\rho) + \alpha_R e^{i\phi} \left(\frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{i}{\rho} \frac{\partial}{\partial \phi} - \frac{eB}{2c} \rho \right) e^{i(j-1/2)\phi} f_j(\rho) = \\ & E e^{i(j+1/2)\phi} g_j(\rho) \end{aligned} \quad (C-78)$$

Donde ahora volvemos al valor inicial de $h(B)$, para hacer los respectivos cambios de variable, para su reducción. Por lo tanto tenemos las ecuaciones (C-79) y (C-80).

$$\left[\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \left(\rho \frac{d}{d\rho} \right) - \frac{1}{\rho^2} \left[\left(j - \frac{1}{2} \right)^2 - \frac{e^2 B^2}{4c^2} \right]^2 \right] f_j + 2m \left(E - \frac{1}{2} g \mu_B B \right) f_j - 2m\alpha_R \left(-\frac{d}{d\rho} - \frac{1}{\rho} \left(j - \frac{1}{2} \right) \right) g_j = 0 \quad (\text{C-79})$$

$$\left[\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \left(\rho \frac{d}{d\rho} \right) - \frac{1}{\rho^2} \left[\left(j - \frac{1}{2} \right)^2 - \frac{e^2 B^2}{4c^2} \right]^2 + 2mE - mg\mu_B B \right] f_j - 2m\alpha_R \left(-\frac{d}{d\rho} - \frac{1}{\rho} \left(j - \frac{1}{2} \right) \right) g_j = 0 \quad (\text{C-80})$$

Haciendo un cambio de variables y trabajando con las variables adimensionales $x = \frac{\rho}{R} \rightarrow \rho = xR$, además de $\lambda = (j-1/2)$, tenemos:

$$\left[\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \left(\rho \frac{d}{d\rho} \right) - \frac{\lambda}{\rho^2} + 2mE - mg\mu_B B \right] f_j - 2m\alpha_R \left(-\frac{d}{d\rho} - \frac{1}{\rho} \left(j - \frac{1}{2} \right) \right) g_j = 0 \quad (\text{C-81})$$

Con el cambio de variable $f(\rho) \rightarrow f(x)$ llegamos a la siguiente relación.

$$\left(\frac{1}{xR} \frac{d}{dx} + R \frac{d^2}{dx^2} - \frac{\lambda}{(xR)^2} + 2mE - mg\mu_B B \right) f_j(x) - 2m\alpha_R \left(-R \frac{d}{dx} - \frac{\left(j - \frac{1}{2} \right)}{xR} \right) g_j(x) = 0 \quad (\text{C-82})$$

Donde se transforma en:

$$\left(R^3 \frac{d^2}{dx^2} + \frac{R}{x} \frac{d}{dx} + -\frac{\lambda}{x^2} + 2mE - mg\mu_B B \right) f_j(x) - 2m\alpha_R \left(-R^2 \frac{d}{dx} - \frac{\left(j - \frac{1}{2} \right)}{x} \right) g_j(x) = 0 \quad (\text{C-83})$$

Introduciendo los siguientes parámetros, $\beta_R = 2\alpha_R mR$, $h = mg\mu_B R^2 B$, $\zeta_R = 2mER$, la ecuación anterior se transforma en:

$$\left(R^3 \frac{d^2}{dx^2} + \frac{R}{x} \frac{d}{dx} + -\frac{\lambda}{x^2} + \zeta - h \right) f_j(x) - \beta_R \left(-R^2 \frac{d}{dx} - \frac{\left(j - \frac{1}{2} \right)}{x} \right) g_j(x) = 0 \quad (\text{C-84})$$

Tomando $k = \zeta - h$, entonces la ecuación diferencial (C-84), toma la forma:

$$\left(R^3 \frac{d^2}{dx^2} + \frac{R}{x} \frac{d}{dx} + -\frac{\lambda}{x^2} + k \right) f_j(x) - \beta_R \left(-R^2 \frac{d}{dx} - \frac{\left(j - \frac{1}{2} \right)}{x} \right) g_j(x) = 0 \quad (\text{C-85})$$

Se transforma en las funciones de Bessel, con

$$f_j(x) \rightarrow J_{j-1/2}(kx) \quad (\text{C-86})$$

$$g_j(x) \rightarrow J_{j+1/2}(kx) \quad (\text{C-87})$$

Con las dos relaciones anteriores podemos escribir la ecuación (C-85), en términos de las funciones de Bessel, así:

$$\left(\frac{d}{dx} - \frac{j-1/2}{x} \right) J_{j-1/2}(kx) = k J_{j+1/2}(kx) \quad (\text{C-88})$$

$$\left(\frac{d}{dx} + \frac{j+1/2}{x}\right)J_{j+1/2}(kx) = kJ_{j-1/2}(kx) \quad (\text{C-89})$$

Tomando la siguiente relación

$$\begin{bmatrix} f_j(x) \\ g_j(x) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_1 J_{j-1/2}(kx) \\ d_2 J_{j+1/2}(kx) \end{bmatrix} \quad (\text{C-90})$$

Donde $d_{1,2}$, son autovalores de la ecuación

$$\begin{pmatrix} k^2 - \zeta + h & -\beta_R k \\ -\beta_R k & k^2 - \zeta - h \end{pmatrix} \begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \end{bmatrix} = 0 \quad (\text{C-91})$$

$$(k^2 - \zeta + h)(k^2 - \zeta - h) - (\beta_R k)^2 = 0 \quad (\text{C-92})$$

Podemos llegar a la expresión para k_+ y k_-

$$k^4 - 2\zeta k^2 + \zeta^2 - h^2 - \beta_R^2 k^2 = 0 \quad (\text{C-93})$$

$$k_{\pm}^2 = \frac{(2\zeta + \beta_R^2) \pm \sqrt{(2\zeta + \beta_R^2)^2 - 4\zeta^2 + 4h^2}}{2} \quad (\text{C-94})$$

Donde k_+ , k_- corresponden al espín up ($\sigma = 1/2$) y al espín “down” ($\sigma = -1/2$).

TUNELAMIENTO EN FUNCION DEL ESPIN

Para este caso y de igual manera que en la forma anterior se considera el tunelamiento en la dirección del eje z, además se considera

Para la región I

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{d^2 \psi}{dz^2} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_1} \psi = E\psi \quad (\text{C-95})$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{d^2 \psi}{dz^2} = \left(E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_1} \right) \psi \quad (\text{C-96})$$

$$E_z = E - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_1} \quad (\text{C-97})$$

$$\frac{d^2 \psi}{dz^2} + k_0 \psi = 0 \quad (\text{C-98})$$

$$k_0 = \sqrt{\frac{2m_1 E_z}{\hbar^2}} \quad (\text{C-99})$$

Cuya solución es de la forma

$$\psi_1(z) = A e^{ik_0 z} + B e^{-ik_0 z} \quad (\text{C-100})$$

Para la región II

$$H_2 \psi = H_1 \psi \quad (\text{C-101})$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_2} \frac{d^2 \psi}{dz^2} + \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_2} \psi + V_0 \psi = -\frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{d^2 \psi}{dz^2} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_1} \psi \quad (\text{C-102})$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_2} \frac{d^2 \psi}{dz^2} + \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_2} \psi + V_0 \psi = (k_{\parallel}^2 + k_z^2) \frac{\hbar^2}{2m_1} \psi \quad (\text{C-103})$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_2} \frac{d^2 \psi}{dz^2} + \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_2} \psi + V_0 \psi = (k_{\parallel}^2 + k_z^2) \frac{\hbar^2}{2m_1} \psi \quad (\text{C-104})$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_2} \frac{d^2 \psi}{dz^2} + \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_2} \psi + V_0 \psi = \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_1} \psi + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_1} \psi \quad (\text{C-105})$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_2} \frac{d^2 \psi}{dz^2} + \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_2} \psi + V_0 \psi - \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_1} \psi - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_1} \psi = 0 \quad (\text{C-106})$$

$$\frac{d^2 \psi}{dz^2} - k_{\parallel}^2 \psi + \frac{2m_2 V_0}{\hbar^2} \psi + \frac{m_2 k_{\parallel}^2}{m_1} \psi + \frac{m_2 k_z^2}{m_1} \psi = 0 \quad (\text{C-107})$$

$$\frac{d^2 \psi}{dz^2} - \left(k_{\parallel}^2 + \frac{2m_2 V_0}{\hbar^2} - \frac{m_2}{m_1} k_{\parallel}^2 - \frac{m_2}{m_1} k_z^2 \right) \psi = 0 \quad (\text{C-108})$$

$$\frac{d^2 \psi}{d z^2} - q_0^2 \psi = 0 \quad (\text{C-109})$$

Vector de onda dentro de la barrera.

$$q_0^2 = \left[\frac{2m_2 V_0}{\hbar^2} - \frac{m_2}{m_1} k_z^2 - \left(\frac{m_2}{m_1} - 1 \right) k_{\parallel}^2 \right] \quad (\text{C-110})$$

Cuya solución es

$$\psi_2(z) = C e^{q_0 z} + D e^{-q_0 z} \quad (\text{C-111})$$

Para la región 3

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{d^2 \psi}{d z^2} = E_z \psi \quad (\text{C-112})$$

Cuya solución es

$$\psi_3 = F e^{i k_0 z} \quad (\text{C-113})$$

La solución total del sistema es

$$\psi(z) = \begin{cases} A e^{i k_0 z} + B e^{-i k_0 z} & -\infty < z \leq 0 \\ C e^{q_0 z} + D e^{-q_0 z} & 0 < z < L \\ F e^{i k_0 z} & l > z > \infty \end{cases} \quad (\text{C-114})$$

De acuerdo a las condiciones de contorno de BenDaniel-Duke tenemos

$$t_0 = \frac{-4i k_0 \alpha e^{-\alpha l}}{(\alpha - i\beta k_0)} e^{-i k_0 d} \quad (\text{C-115})$$

$$t_0 = -4i \frac{m_2}{m_1} \frac{k_0 q_0}{\left(q_0 - ik_0 \frac{m_2}{m_1} \right)} e^{-(q_0 + ik_0)d} \quad (\text{C-116})$$

Donde t_0 es el coeficiente de transmisión cuando no se tiene en cuenta la interacción espín orbita, pero se han tenido en cuenta las condiciones de BenDaniel-Duke.

$$T = T_0 \exp\left(\pm \gamma \frac{m_2 k_{\parallel}}{\hbar^2} a q_0 \right) \quad (\text{C-117})$$