



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA

DIVISIÓN DE CIENCIAS BÁSICAS E INGENIERÍA
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

**ENTROPIAS Y TRANSPORTE ELECTRÓNICO
CUÁNTICO EN SISTEMAS MESOSCÓPICOS**

TESIS QUE PRESENTA.

FÍS. JANETH ALEXANDRA GARCÍA MONGE

PARA OBTENER EL GRADO DE
MAESTRA EN CIENCIAS (FÍSICA)

ASESOR:

DR. ELEUTERIO CASTAÑO TOSTADO

SINODALES:

PRESIDENTE: DR. EUGENIO LEY-KOO

SECRETARIO: DR. ELEUTERIO CASTAÑO TOSTADO

VOCAL: DR. MOISÉS MARTÍNEZ MARES

CIUDAD DE MÉXICO, JUNIO 2016



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA

DIVISIÓN DE CIENCIAS BÁSICAS E INGENIERÍA
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

**ENTROPÍAS Y TRANSPORTE ELECTRÓNICO
CUÁNTICO EN SISTEMAS MESOSCÓPICOS**

TESIS QUE PRESENTA

FÍS. JANETH ALEXANDRA GARCÍA MONGE

PARA OBTENER EL GRADO DE
MAESTRA EN CIENCIAS (FÍSICA)

ASESOR:

DR. ELEUTERIO CASTAÑO TOSTADO

SINODALES:

PRESIDENTE: DR. EUGENIO LEY-KOO

SECRETARIO: DR. ELEUTERIO CASTAÑO TOSTADO

VOCAL: DR. MOISÉS MARTÍNEZ MARES

CIUDAD DE MÉXICO, JUNIO 2016

Agradecimientos

Primeramente quiero agradecer a las personas más importantes de mi vida, mi familia. A mis padres, Ana Licia Monge Acedo y Gilberto García Navarrete, por sus enseñanzas y jalones de oreja. Porque en las buenas y en las malas siempre son los primeros que están a mi lado apoyándome (o regañándome). Por enseñarme que soy capaz de conseguir lo que me proponga y que no hay mayor satisfacción que lograr mis objetivos por mis propios méritos. Gracias por ser los mejores y por ayudarme a sacar lo mejor de mi, los amo.

A mis hermanas Gaby, Iovana e Itzel porque son únicas, y lo digo muy en serio. Aunque tenemos grandes diferencias, como todas las hermanas, ustedes son mi complemento perfecto; gracias por ser tan especiales, por el apoyo incondicional y por la brutal sinceridad que tienen para decir las cosas.

Agradezco a mi asesor, el Dr. Eleuterio Castaño Tostado, por su tiempo y dedicación. En especial, le agradezco por todo el conocimiento que ha compartido conmigo y por contagiarme un poco de su pasión por la Física.

Un agradecimiento especial para Alex Vargas, quien me ha brindado su apoyo desde el inicio de este proyecto.

También quiero agradecer a mis amigos y compañeros, tanto de licenciatura como de maestría, por sus consejos y motivación.

Por último, agradezco al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACyT) y a la Universidad Metropolitana Unidad Iztapalapa (UAM-I) por el apoyo brindado para la realización de este proyecto.

Índice general

Resumen	1
1. Introducción	2
2. Conceptos básicos de la teoría de transporte electrónico cuántico	5
2.1. El transporte electrónico y su relación con problemas de dispersión	5
2.2. Los coeficientes de transporte y la conservación de corriente	6
2.3. Matriz de dispersión S	8
2.4. Matriz de transferencia M	11
2.5. Coeficientes de transmisión y reflexión	14
2.6. Tiempos de transporte	15
2.6.1. Tiempo de retardo de Wigner	16
2.6.2. Densidad de estados	17
2.6.3. Tiempo de transmisión, reflexión y estadía	17
2.7. Entropías y longitudes de dispersión	19
3. Transporte electrónico cuántico: Una dimensión	23
3.1. Barrera delta	23

ÍNDICE GENERAL

3.2. Doble barrera delta en una dimensión	28
3.3. Entropía en una dimensión	34
4. Transporte electrónico en sistemas mesoscópicos confinados sobre superficies cilíndricas circulares	38
4.1. Barrera delta sobre la superficie del cilindro	38
4.2. Modulación con una flor de Dirac	46
4.3. Modulación con dos flores de Dirac	52
4.3.1. Dos flores de Dirac en fase	55
4.3.2. Dos flores de Dirac con desfase	68
4.3.3. Entropías	75
5. Conclusiones y perspectivas	83

Resumen

En este trabajo estudiamos las propiedades de transporte electrónico en sistemas mesoscópicos cuánticos de tipo balístico. Consideramos la propagación de electrones en modelos unidimensionales y bidimensionales, 1D y 2D, respectivamente. En ambos casos los potenciales considerados son del tipo de delta de Dirac. En el modelo 1D estudiamos la propagación de electrones a lo largo de una recta, mientras que en 2D la propagación se realiza sobre la superficie de un cilindro circular. En este último caso los potenciales están centrados en posiciones fijas en la dirección del eje del cilindro, pero con opacidades que son funciones de la posición angular; en particular, estudiamos potenciales cuya forma nos ha llevado a llamarlos *flores de Dirac*. En 1D encontramos la función de onda y los coeficientes de reflexión y transmisión, además de calcular diferentes tiempos de transporte: tiempo de retardo de Wigner, tiempo de transmisión, tiempo de reflexión y tiempo de estadía. En 2D también calculamos los coeficientes de transmisión y reflexión, ahora de una manera numérica que asegura la conservación de corriente de probabilidad con gran exactitud. En ambos modelos estudiamos la entropía binaria de Shannon, a la cual logramos interpretar como una *longitud recíproca media de dispersión*.

Capítulo 1

Introducción

En 1959, Richard Feynman ofreció una plática titulada *There's Plenty of Room at the Bottom* (hay mucho espacio en el fondo), donde especuló sobre la manipulación de la materia a escalas tan pequeñas que los fenómenos cuánticos serían dominantes. Esta plática es ahora legendaria pues detonó la búsqueda de procesos de miniaturización.

Desde ese entonces, el progreso de la electrónica ha ido de lo grande a lo muy pequeño. A partir de la introducción del circuito integrado a finales de los 50, el número de transistores que se pueden colocar en un dispositivo electrónico ha sido aproximadamente cuadruplicado cada tres años, al igual que la velocidad de cálculo [1, 2].

Esto nos lleva a uno de los inventos más importantes de nuestro tiempo, la computadora, basada en dispositivos electrónicos cuya funcionalidad depende de fenómenos cuánticos, lo cual ha permitido incrementar de manera espectacular nuestra capacidad para obtener, almacenar, transmitir y procesar información.

Hoy en día, la capacidad para manejar grandes cantidades de datos, así como la tremenda velocidad con la que trabaja una computadora de última generación, la hace muy superior a cualquiera de las primeras computadoras de escritorio que aparecieron en 1974; este notable progreso no hubiera sido posible sin el avance en la fabricación de alambres muy pequeños así como la comprensión de los fenómenos clásicos y cuánticos que suceden en la materia condensada, en particular en materiales semiconductores. De hecho, vivimos rodeados por todo tipo de materiales finamente estructurados, diseñados con propiedades eléctricas y magnéticas que literalmente

se pueden fabricar para realizar algún tipo de función específica.

Con esta continua reducción de escala, los efectos cuánticos se han vuelto dominantes, trayendo consigo grandes desafíos a nivel de investigación básica, así como oportunidades para desarrollar nuevos instrumentos. Cuando los procesos electrónicos se llevan a cabo en estructuras macroscópicas uno puede describir qué está pasando utilizando física clásica; sin embargo, cuando el tamaño del sistema se vuelve muy pequeño, de dimensiones nanométricas, los efectos cuánticos juegan un papel muy importante [2, 3].

En general, un conductor describe un comportamiento clásico cuando sus dimensiones son mucho más grandes que las siguientes longitudes características: i) la longitud de onda de De Broglie; ii) el camino libre medio, y iii) el camino libre medio inelástico a lo largo del cual se destruye la coherencia de fase.

Estas longitudes dependen en general de la composición del material que se estudia, su temperatura, y los campos eléctricos y magnéticos aplicados. Sin embargo, gracias a las muy avanzadas técnicas de microfabricación, hoy en día es posible construir sistemas con dimensiones mucho más pequeñas que estas longitudes características y por lo tanto, surgen fenómenos que son necesariamente cuánticos que, sin duda, determinan el transporte electrónico en estos sistemas [1, 4–6].

Aunque esta reducción de escala ha sido impulsada por el desarrollo tecnológico, también ha tenido implicaciones en problemas fundamentales de la física de materia condensada en general, ya que abre la posibilidad de probar conceptos y métodos de la teoría cuántica en física, biología, química, medicina y otras ciencias e ingenierías que, en su conjunto, hoy denominamos *Nanociencia*, en particular cuando estos sistemas son coherentes.

La nanociencia es un campo multidisciplinario que abarca todas aquellas actividades de investigación centrada en objetos cuyas dimensiones características son del orden de 10^{-9} m, llamadas nanométricas. Actualmente, la importancia de la nanociencia proviene de la unión de tres nuevos desarrollos científicos y tecnológicos: novedosas herramientas de caracterización, técnicas avanzadas de fabricación y un mejor entendimiento de las ciencias básicas a esas escalas [3].

CAPÍTULO 1.

Para entender mejor las *nanoestructuras*, conviene verlas como sistemas espacialmente confinados en una o más direcciones. El movimiento de los electrones en estas direcciones está cuantizado, resultando en efectos observables incluso a nivel macroscópico que son llamados efectos de cuantización por tamaño.

A este tipo sistemas se les conoce como *sistemas mesoscópicos*, en los cuales los efectos cuánticos son dominantes pues existe coherencia de fase, son grandes desde el punto de vista microscópico ($\sim 10 \text{ \AA}$) pero muy pequeños respecto a sistemas macroscópicos. En general, los sistemas mesoscópicos son ideales para estudiar el transporte electrónico cuántico [2]. Estos sistemas se construyen a partir de modelos simples de alambres y puntos cuánticos.

En el capítulo 2 presentamos la descripción del transporte en términos de propiedades de dispersión del sistema bajo estudio y los conceptos y métodos más generales para estudiar el transporte electrónico cuántico. En el capítulo 3 analizamos los conceptos definidos en el segundo capítulo para el caso de sistemas unidimensionales con potenciales tipo delta de Dirac, mientras que en el capítulo 4 vemos estos mismos conceptos pero ahora aplicados al transporte de electrones a un sistema bidimensional, en el cual los electrones se mueven sobre la superficie de un cilindro. Finalmente se establecen las conclusiones y perspectivas de este trabajo.

Capítulo 2

Conceptos básicos de la teoría de transporte electrónico cuántico

En este capítulo presentamos la descripción del transporte electrónico cuántico por medio de las propiedades de dispersión del sistema. Por tanto, mostramos los conceptos y métodos más relevantes del estudio de estas propiedades a través de una discusión de sistemas unidimensionales, los cuales incluyen la matriz de dispersión S , la matriz de transferencia M , el coeficiente de transmisión T , el coeficiente de reflexión R y diversos tiempos de transporte.

2.1. El transporte electrónico y su relación con problemas de dispersión

En la década de los ochentas, Rolf Landauer propuso que la conductancia de un alambre electrónico diminuto podía estudiarse a través de la transmitancia de los electrones por el sistema. En la configuración usual donde se usan dos sondas para medir el voltaje entre dos puntos de un alambre (ver la figura 2.1), la conductancia G resulta ser la razón de los coeficientes de transmisión T y el coeficiente de reflexión R del sistema; esto es [7, 8],

$$G = \frac{2e^2}{h} \frac{T}{R}, \quad (2.1)$$

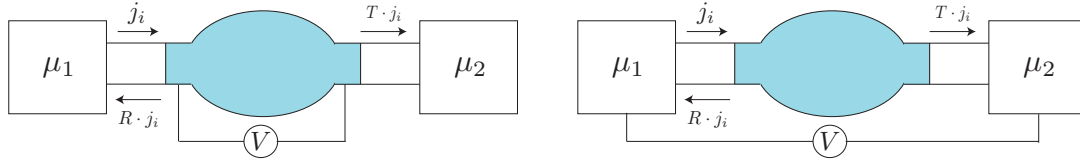


Figura 2.1: Medición de la resistencia en las configuraciones de cuatro puntos (izquierda) y de dos puntos (derecha).

donde e^2/h se conoce como *cuanto de conductancia* y el factor 2 que aparece enfrente se debe a las dos polarizaciones del espín. En cambio en la configuración de dos puntos, donde la medición se hace entre los reservorios electrónicos, la conductancia es proporcional a T solamente,

$$G = \frac{2e^2}{h} T. \quad (2.2)$$

Por lo tanto, es de interés analizar los coeficientes de transmisión y de reflexión, a los que nos referiremos como coeficientes de transporte.

2.2. Los coeficientes de transporte y la conservación de corriente

Como es bien conocido, la dinámica cuántica de una partícula está dada por la ecuación de Schrödinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\vec{x}, t) + V(\vec{x}) \Psi(\vec{x}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{x}, t). \quad (2.3)$$

Si el potencial $V(\vec{x})$ es real, el hamiltoniano es hermitiano y la corriente de probabilidad se conserva. La conservación local de probabilidad se expresa a través de la ecuación de continuidad [9, 10],

$$\nabla \cdot \vec{j}(\vec{x}, t) + \frac{\partial \rho(\vec{x}, t)}{\partial t} = 0, \quad (2.4)$$

2.2. LOS COEFICIENTES DE TRANSPORTE Y LA CONSERVACIÓN DE CORRIENTE

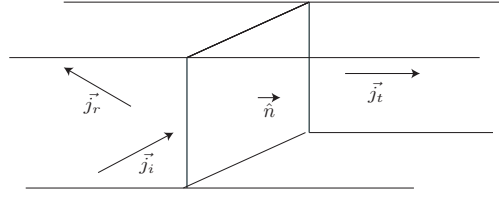


Figura 2.2: Esquema que ilustra los coeficientes de trasmisión y reflexión debido a la superficie de separación de dos medios distintos.

donde $\rho(\vec{x}, t)$ y $\vec{j}(\vec{x}, t)$ son la densidad de probabilidad y la densidad de corriente de probabilidad, respectivamente, dadas por

$$\rho(\vec{x}, t) = \Psi^*(\vec{x}, t)\Psi(\vec{x}, t), \quad (2.5)$$

$$\vec{j}(x, t) = -\frac{i\hbar}{2m} [\Psi^*(\vec{x}, t)\nabla\Psi(\vec{x}, t) - \Psi(\vec{x}, t)\nabla\Psi^*(\vec{x}, t)]. \quad (2.6)$$

En el caso estacionario la solución a la ecuación de Schrödinger es de la forma

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

donde $\psi(\vec{x})$ es solución de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{x}) + V(\vec{x})\psi(\vec{x}) = E\psi(\vec{x}), \quad (2.8)$$

de manera que las densidades ρ y \vec{j} se vuelven independientes del tiempo; es decir,

$$\rho(\vec{x}) = \psi^*(\vec{x})\psi(\vec{x}), \quad (2.9)$$

$$\vec{j}(x) = -\frac{i\hbar}{2m} [\psi^*(\vec{x})\nabla\psi(\vec{x}) - \psi(\vec{x})\nabla\psi^*(\vec{x})]. \quad (2.10)$$

Por tanto, en el caso estacionario la ecuación de continuidad se reduce a

$$\nabla \cdot \vec{j}(\vec{x}) = 0, \quad (2.11)$$

que expresa la conservación de flujo o de corriente de probabilidad.

Consideremos dos regiones separadas por una superficie en la cual incide una corriente representada por $\vec{j}_i(\vec{x})$, como se muestra en la figura 2.2. Para este proceso

CAPÍTULO 2.

de dispersión, definimos los coeficientes de transmisión y de reflexión en dirección de la normal a la superficie, respectivamente, como

$$T = \frac{\vec{j}_t(\vec{x}) \cdot \hat{n}}{\vec{j}_i(\vec{x}) \cdot \hat{n}} \quad \text{y} \quad R = \frac{\vec{j}_r(\vec{x}) \cdot \hat{n}}{\vec{j}_i(\vec{x}) \cdot \hat{n}}, \quad (2.12)$$

donde $\vec{j}_t(\vec{x})$ y $\vec{j}_r(\vec{x})$ son los flujos de probabilidad transmitido y reflejado, respectivamente.

2.3. Matriz de dispersión S

Ahora consideremos que tenemos una región finita de potencial en una dimensión $V(x)$, como el que se muestra en la figura 2.3. En la región (I), ($x < x_1$), y en la región (II), ($x > x_2$), las funciones de onda $\psi(x)$ son ondas planas puesto que $V(x) = 0$. Clásicamente, un electrón es incapaz de atravesar una barrera de potencial, si su energía es menor que la altura de la barrera; sin embargo, en mecánica cuántica el electrón puede atravesar la barrera de un lado a otro, este fenómeno se conoce como *efecto túnel*.

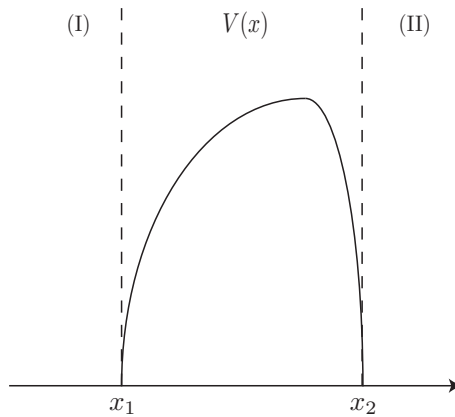


Figura 2.3: Potencial $V(x)$ de alcance finito en una dimensión.

La matriz de dispersión S es un concepto de gran importancia pues nos permite obtener las amplitudes de las ondas salientes o dispersadas, en base a como son modificadas las amplitudes de las ondas entrantes al dispersor [10].

Consideremos el caso más general, el cual se muestra en la figura 2.4. La solución a

la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo (2.8) en las regiones (I) y (II) es

$$\psi(x) = \begin{cases} a_1^+ e^{ikx} + a_1^- e^{-ikx} & (x < x_1), \\ a_2^+ e^{ikx} + a_2^- e^{-ikx} & (x > x_2), \end{cases} \quad (2.13)$$

donde a_1^+ y a_2^- son las amplitudes de las ondas entrantes, mientras que a_1^- y a_2^+ son las salientes, con $k^2 = 2mE/\hbar^2$. Estas amplitudes están relacionadas por la matriz de dispersión S de la siguiente manera

$$\begin{pmatrix} a_1^- \\ a_2^+ \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} a_1^+ \\ a_2^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1^+ \\ a_2^- \end{pmatrix}. \quad (2.14)$$

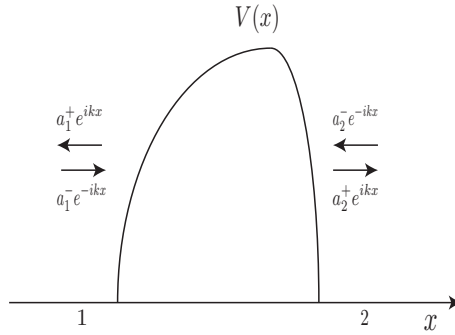


Figura 2.4: Dispersión en una dimensión. Caso general.

Ahora consideremos las dos posibles situaciones físicas que se muestran en la figura 2.5. Por un lado, en (a) tenemos una onda incidiendo por la izquierda, dando lugar a una onda transmitida hacia la derecha y otra reflejada hacia la izquierda, cuyas amplitudes llamamos t y r , respectivamente. Por otro lado, en (b) ahora la onda incidente lo hace por la derecha, dando lugar a una onda transmitida hacia la izquierda y la onda reflejada por la derecha, siendo t' y r' las amplitudes de transmisión y reflexión correspondientes [10].

En resumen, las soluciones en las regiones donde el potencial es cero, son

Caso (a):

$$\psi_+(x) = \begin{cases} e^{ikx} + r e^{-ikx} & (x < x_1) \\ t e^{ikx} & (x > x_2) \end{cases} \quad (2.15)$$

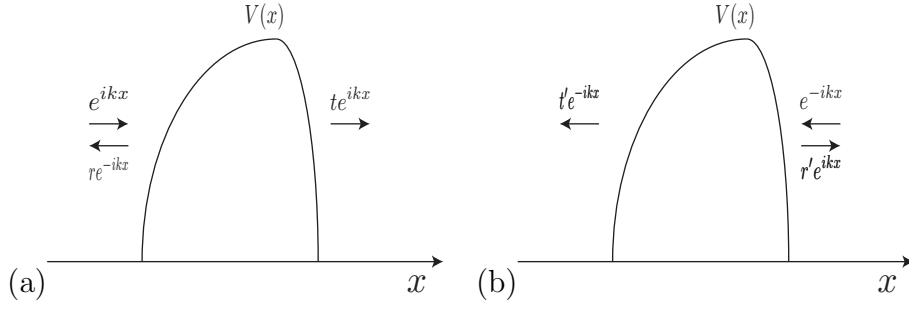


Figura 2.5: Dispersión en una dimensión. Con una onda plana a) incidiendo por la izquierda con amplitudes $a_1^+ = 1$, $a_1^- = r$, $a_2^+ = t$ y $a_2^- = 0$, y b) incidiendo por la derecha con amplitudes $a_1^+ = t'$, $a_1^- = 0$, $a_2^+ = 1$ y $a_2^- = r$.

Caso (b):

$$\psi_-(x) = \begin{cases} t' e^{-ikx} & (x < x_1) \\ e^{-ikx} + r' e^{ikx} & (x > x_2) \end{cases} \quad (2.16)$$

donde $\psi_+(x)$ y $\psi_-(x)$ representan las soluciones cuando la onda incidente viene por la izquierda o la derecha, respectivamente. Las amplitudes de las onda dispersadas son cantidades complejas en general y, por lo tanto se pueden escribir como

$$\begin{aligned} t &= |t| e^{i\phi_t}, & r &= |r| e^{-i\phi_r} \\ t' &= |t'| e^{-i\phi_{t'}}, & r' &= |r'| e^{i\phi_{r'}} \end{aligned} \quad (2.17)$$

Debido a que la ecuación de Schrödinger es lineal, cualquier combinación de soluciones es también una solución, por lo que la solución más general está dada por

$$\psi(x) = a_1^+ \psi_+(x) + \psi(x) = a_1^- \psi_-(x), \quad (2.18)$$

Al comparar (2.18) con (2.13), vemos que

$$\psi(x) = \begin{cases} a_1^+ e^{ikx} + (a_1^+ r + a_1^- t') e^{-ikx} = a_1^+ e^{ikx} + a_1^- e^{-ikx} & (x < x_1) \\ (a_1^+ t + a_1^- r') e^{ikx} + a_1^- e^{-ikx} = a_1^+ e^{ikx} + a_1^- e^{-ikx} & (x > x_1) \end{cases}, \quad (2.19)$$

por lo tanto

$$\begin{pmatrix} a_1^- \\ a_2^+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r & t' \\ t & r' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1^+ \\ a_2^- \end{pmatrix}, \quad (2.20)$$

es decir, la matriz S está dada por

$$S = \begin{pmatrix} r & t' \\ t & r' \end{pmatrix}, \quad (2.21)$$

que al ser unitaria [2]

$$S^\dagger S = I, \quad (2.22)$$

nos indica que

$$\begin{aligned} |t|^2 + |r|^2 &= |t'|^2 + |r'|^2 = 1, \\ rt'^* + t^*r' &= 0, \end{aligned} \quad (2.23)$$

con lo que se asegura la conservación de corriente. Además, si existe invarianza de reversibilidad temporal (TRI, por sus siglas en inglés), se cumple que

$$SS^* = I; \quad (2.24)$$

con esta condición, y la de unitariedad se tienen que S es una matriz simétrica [2,10].

2.4. Matriz de transferencia M

Otra manera muy utilizada para relacionar las amplitudes de las ondas en un problema de dispersión es a través de la matriz de transferencia M , la cual relaciona las amplitudes de las ondas de un lado de la región de dispersión con las del otro lado. Por lo que, de la figura 2.4, tenemos que

$$\begin{pmatrix} a_2^+ \\ a_2^- \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} a_1^+ \\ a_1^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1^+ \\ a_1^- \end{pmatrix}. \quad (2.25)$$

Una manera de determinar los coeficientes de M es considerando que existe TRI; por lo que, si $\psi(x)$ es solución a la ecuación de Schrödinger en la región, también lo es $\psi^*(x)$, por lo que

$$\begin{pmatrix} a_2^{-*} \\ a_2^{+*} \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} a_1^{-*} \\ a_1^{+*} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1^{-*} \\ a_1^{+*} \end{pmatrix}. \quad (2.26)$$

Dado que el dispersor no se altera con esta operación, el sistema físico no cambia y, por lo tanto, la matriz M es la misma. Al reordenar la ecuación (2.26) y tomando el complejo conjugado se obtiene también que

$$\begin{pmatrix} a_2^+ \\ a_2^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{22}^* & M_{21}^* \\ M_{12}^* & M_{11}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1^+ \\ a_1^- \end{pmatrix}. \quad (2.27)$$

Ecuación que al compararse con (2.27) da que

$$M_{22} = M_{11}^*, \quad M_{21} = M_{12}^*, \quad . \quad (2.28)$$

por lo que M tiene la siguiente forma general

$$M = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{12}^* & M_{11}^* \end{pmatrix}. \quad (2.29)$$

Al considerar el caso (a) de la Figura 2.5, tenemos ahora que

$$\begin{pmatrix} t \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ r \end{pmatrix}, \quad (2.30)$$

y, entonces

$$r = -\frac{M_{21}}{M_{22}}, \quad t = \frac{1}{M_{22}}. \quad (2.31)$$

Con estas relaciones obtenemos la forma final y más útil de la matriz de transferencia:

$$M = \begin{pmatrix} \frac{1}{t^*} & -\frac{r^*}{t^*} \\ -\frac{r}{t} & \frac{1}{t} \end{pmatrix}. \quad (2.32)$$

Si ahora escribimos las funciones de la región 1 en términos de las de la región 2 y realizamos el mismo análisis, tenemos que

$$\begin{pmatrix} a_2^+ \\ a_2^- \end{pmatrix} = M' \begin{pmatrix} a_1^+ \\ a_1^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{t'^*} & -\frac{r'^*}{t'^*} \\ -\frac{r'}{t'} & \frac{1}{t'} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1^+ \\ a_1^- \end{pmatrix}. \quad (2.33)$$

Nótese que en la matriz M' las amplitudes de transmisión y reflexión son las del caso de incidencia por la derecha, ver Figura 2.5 (b). Esta matriz es la inversa de M ; al comparar las ecuaciones (2.26) y (2.33), llegamos a que la matriz M' está relacionada con M de la siguiente manera

$$M' = \begin{pmatrix} M'_{11} & M'_{12} \\ M'_{12}^* & M'_{11}^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{t'^*} & -\frac{r'^*}{t'^*} \\ -\frac{r'}{t'} & \frac{1}{t'} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & -M_{12}^* \\ -M_{12} & M_{11}^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{t^*} & \frac{r}{t} \\ \frac{r^*}{t^*} & \frac{1}{t} \end{pmatrix}, \quad (2.34)$$

es decir $M'_{11} = M_{11}$ y $M'_{12} = -M_{12}^*$, por lo que

$$t' = t, \quad r' = -\frac{t}{t^*}r. \quad (2.35)$$

Vemos así que las amplitudes de transmisión incidiendo por la izquierda o por la derecha son iguales entre sí; mientras que las de reflexión difieren por una fase, pero la conservación de corriente sigue siendo válida como era de esperarse. Por lo que

$$MM' = I, \quad (2.36)$$

y además se cumple que [2]

$$\det M = 1. \quad (2.37)$$

El hecho de que las amplitudes de reflexión r y r' difieran por un factor de fase está relacionado directamente con la forma del potencial; analicemos la Figura 2.5 la partícula incidente por la izquierda no siente el mismo efecto del potencial que la que incide por la derecha, en otras palabras hay una diferencia en el camino óptico que recorren ambas partículas antes de ser reflejadas por completo. En el caso de

un potencial simétrico las amplitudes de reflexión son idénticas entre sí: $r = r'$ [11].

2.5. Coeficientes de transmisión y reflexión

Hasta ahora hemos hablado de las amplitudes de transmisión y reflexión y la conservación de corriente pero no hemos mencionado de dónde sale esta consideración. A partir de la definición de densidad de corriente, ecuación (2.6), es posible definir tres densidades de corriente: j_i , j_t y j_r relacionados con las ondas incidente, transmitida y reflejada, respectivamente. Con las que se obtienen los *coeficientes de transmisión* (T) y *reflexión* (R):

$$T = \frac{j_t}{j_i} \quad y \quad R = \frac{j_r}{j_i}. \quad (2.38)$$

Estos coeficientes cumplen con $T + R = 1$, la cual equivale a la conservación de corriente, o en general de unitariedad; esto quiere decir que cada partícula incidente será transmitida o reflejada con una probabilidad T o R respectivamente. Continuando con el caso de la Figura a 2.5, se obtiene que los coeficientes de transmisión y reflexión son:

$$T = \frac{(\hbar k/m)|t|^2}{\hbar k/m} = |t|^2, \quad (2.39)$$

$$R = \frac{(\hbar k/m)|r|^2}{\hbar k/m} = |r|^2. \quad (2.40)$$

Este caso es muy sencillo, ya que consideramos que el potencial a la izquierda y a la derecha del dispersor es el mismo. Sin embargo, esto no siempre es así; el caso más general considera una onda que viaja por una región donde el potencial es V_1 , y se transmite a otra región donde el potencial es V_2 , en este caso las ondas dispersadas de transmisión y reflexión tienen diferentes vectores de onda, como se muestra en la Figura 2.6. Una situación análoga ocurre en óptica, cuando una haz de luz viaja de un material con un índice de refracción n_1 a otro con n_2 .

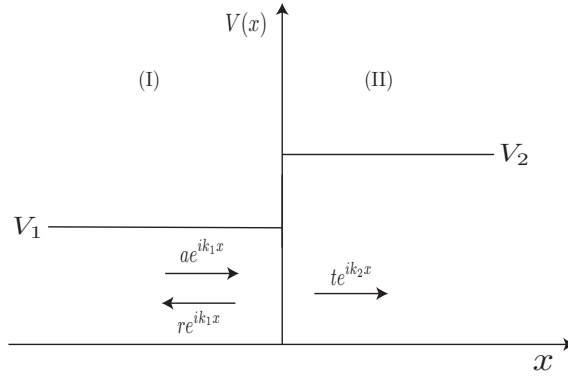


Figura 2.6: Transmisión y reflexión: Caso general.

Entonces, al aplicar las definiciones (2.38) se obtiene la forma más general para los coeficientes de transmisión y reflexión es decir:

$$T = \frac{(\hbar k_2/m)|t|^2}{\hbar k_1/m} = \frac{k_2}{k_1}|t|^2, \quad (2.41)$$

$$R = \frac{(\hbar k_1/m)|r|^2}{\hbar k_1/m} = |r|^2. \quad (2.42)$$

2.6. Tiempos de transporte

Otro concepto importante para el transporte electrónico cuántico está relacionado con el tiempo que un electrón puede estar en diferentes regiones del espacio. La pregunta: ¿Cuánto tiempo tarda una partícula dentro de la barrera antes de ser transmitida o reflejada? no es nueva y ha sido ampliamente discutida en la literatura pues ha sido difícil alcanzar consensos sobre que significan los muy diferentes tiempos que han sido identificados como relevantes (Eisbnd,1948; Bohm,1951;Wigner,1955) [12–14].

Diferentes propuestas han sido estudiadas; recordemos que tanto en mecánica cuántica como en mecánica clásica el tiempo es un parámetro y no una variable canónica, lo que lleva a grandes dificultades. Al no existir un operador para el tiempo el cálculo de tiempos para diversos procesos ha llevado a introducir diversos *tiempos* cuya

interpretación está sujeta a debate. En este trabajo sólo mencionamos algunos de estos tiempos y no discutimos las dificultades que cada uno implica.

2.6.1. Tiempo de retardo de Wigner

Uno de los tiempos más estudiados es el llamado tiempo de retardo de Wigner, el cual fue propuesto en 1955 para un canal de dispersión [14] y que fue extendido para múltiples canales en 1960 por Smith [15]. En general, el tiempo de retardo de Wigner mide el corrimiento de fase de la onda incidente inducido por el dispersor, respecto al caso libre; es decir, se comparan las fases de la onda dispersada y la onda incidente [12, 14–16]. Se define el *tiempo de retardo de Wigner*, τ_W , como la derivada de la fase de la onda dispersada respecto a la energía

$$\tau_W = \hbar \frac{\partial \phi}{\partial E}, \quad (2.43)$$

o bien, en términos del vector de onda k como

$$\tau_W = \frac{m}{\hbar k} \frac{\partial \phi}{\partial k}, \quad (2.44)$$

Así pues, podemos definir los tiempos de retardo de Wigner tanto en transmisión como en reflexión, de la manera siguiente

$$\tau_{W_T} = \frac{m}{\hbar k} \frac{\partial \phi_t}{\partial k}, \quad (2.45)$$

para transmisión, y

$$\tau_{W_R} = -\frac{m}{\hbar k} \frac{\partial \phi_r}{\partial k} \quad (2.46)$$

para reflexión, donde $(\hbar k/m)$ está relacionado con una velocidad de fase [12].

2.6.2. Densidad de estados

En nuestro trabajo es muy importante tener presente las relaciones que existen entre las amplitudes de transmisión y reflexión que se cuantifican a través de la matriz de dispersión S que ya hemos estudiado en secciones anteriores. Además, las fases de dispersión, sea de transmisión o reflexión, nos dan información cuantitativa sobre la *densidad de estados*, $N(E)$, también llamada densidad total, de una manera que ha sido muy claramente estudiada, en particular, por Avishai y Band [17], en donde se demuestra que

$$\pi[N(E) - N_0(E)] = \frac{d\phi_t}{dE}, \quad (2.47)$$

donde $N_0(E)$ es la densidad de estados en una dimensión para el caso de partícula libre.

De tal manera, que es posible relacionar la ecuación anterior con la ecuación (2.45)

$$\pi[N(E) - N_0(E)] = \frac{\hbar k}{m} \tau_{WT}. \quad (2.48)$$

Con esto vemos que el tiempo de retardo de Wigner nos proporciona información acerca de la diferencia de densidad de estados.

2.6.3. Tiempo de transmisión, reflexión y estadía

En esta sección presentamos los tiempos de transmisión, reflexión y estadía introducidos por Goto, Iwamoto, M de Aguino, Aguilera-Navarro y Kobe [18]; a partir de definir la velocidad que relaciona las densidades de probabilidad y de corriente de probabilidad a través de la expresión siguiente

$$v(x, t) \equiv \frac{j(x, t)}{\rho(x, t)}, \quad (2.49)$$

de manera análoga a la velocidad para un fluido.

CAPÍTULO 2.

Llamaremos tiempo de transmisión al tiempo que tarda una partícula en atravesar la barrera. El cual, en este caso se define como el recíproco de la velocidad de campo de la partícula, ecuación (2.49), integrado sobre el ancho de la barrera. Además, como se mencionó anteriormente, para estados estacionarios la densidad de probabilidad es independiente del tiempo y por lo tanto la densidad de corriente es constante. Con esto la expresión para el tiempo de transmisión está dado por

$$\tau_T = \int_B \frac{dx}{v(x)} = \frac{1}{j_t} \int_B \rho(x) dx, \quad (2.50)$$

donde la integral es la probabilidad de encontrar a la partícula dentro de la barrera.

$$P = \int_B \rho(x) dx \quad (2.51)$$

Además de las ecuaciones (2.38) tenemos que $j_t = \hbar k T / m$; con esto la ecuación (2.50) queda

$$\tau_T = \frac{m}{\hbar k T} P. \quad (2.52)$$

De aquí, vemos que si partícula tiene una probabilidad muy pequeña de ser transmitida le tomará más tiempo atravesar la barrera [18].

De manera similar, definiremos el tiempo de reflexión

$$\tau_R = \frac{m}{\hbar k R} P. \quad (2.53)$$

El cual nos dice el tiempo que tarda la partícula en ser reflejada por completo. Es importante aclarar que estos tiempo no son puramente cuánticos, ya que se utilizó un argumento semiclásico para definir la velocidad.

Otro tiempo muy estudiado en la literatura es el tiempo de estadía (dwell time) [13, 15]; y está relacionado con el tiempo que permanece la partícula dentro de la barrera sin importar como escapa. En este caso utilizamos el mismo argumento para determinar los tiempos de transmisión y reflexión [18]; de tal manera que el tiempo

2.7. ENTROPÍAS Y LONGITUDES DE DISPERSIÓN

de estadía se define como la probabilidad de encontrar a la partícula en la barrera entre la corriente incidente, es decir

$$\tau_D = \frac{m}{\hbar k} \int_B \rho(x) dx = \frac{m}{\hbar k} P. \quad (2.54)$$

Vemos que cuando el coeficiente de transmisión es 1 las ecuaciones (2.52) y (2.54) son las mismas, es decir los tiempos de transmisión y de estadía son iguales; en este caso el coeficiente de reflexión es cero, es decir la partícula está en un estado resonante o cuasi-ligado, entonces el tiempo de reflexión es infinito. En cambio, si el coeficiente de reflexión es 1, (2.53) y (2.54) son iguales. Los tiempos de transmisión, reflexión y estadía están directamente relacionados con la conservación de corriente y debido a eso se cumple que:

$$\frac{1}{\tau_D} = \frac{1}{\tau_T} + \frac{1}{\tau_R} \quad (2.55)$$

2.7. Entropías y longitudes de dispersión

En esta sección estudiamos la entropía binaria de Shannon en términos de los coeficientes de transmisión y dispersión. Primeramente, la entropía de transmisión está dada por

$$S_T = -T \log_2 T, \quad (2.56)$$

mientras que la entropía de reflexión es

$$S_R = -R \log_2 R, \quad (2.57)$$

por lo que la entropía binaria de Shannon es entonces igual

$$S_{\text{TOTAL}} = S_T + S_R. \quad (2.58)$$

CAPÍTULO 2.

En general, esta entropía [19] se interpreta como una medida de localización espacial; entre mayor sea S_{TOTAL} el sistema está menos localizado y viceversa, lo cual ha sido estudiado en diferentes sistemas entre los que cabe mencionar [20]

Nosotros intentaremos dar una interpretación en este sentido, en la cual la entropía binaria de Shannon es una *longitud inversa media en dispersión*. Para llegar a esta interpretación seguimos una serie de conceptos básicos que nos llevaron a definir la *longitud en transmisión* y la *longitud en reflexión*, de una manera que se detalla a continuación.

Primeramente notemos que los coeficientes de transmisión y reflexión dependen de la energía de los electrones incidentes, y de la forma y extensión del dispersor. En general, cuando la energía de una partícula es muy grande el efecto del dispersor es mínimo y, por lo tanto, la probabilidad de transmisión tiende a uno; en contraste, si la energía es muy baja tenderá a cero. Cuando la transmisión es cero, el electrón no puede cruzar el dispersor y queda confinada al lado por donde se incide; por otra parte, cuando la transmisión es uno la función de onda está extendida a lo largo de todo el espacio.

Existe además la muy interesante situación de resonancia que se da cuando el coeficiente de transmisión tiende a uno para algunas energías bien definidas del sistema, las cuales son llamadas *energías resonantes*. Para estas energías el dispersor es transparente de manera efectiva. Los correspondientes estados son llamados *resonantes* o *cuasi ligados*, los cuales se deben a la interferencia constructiva de reflexiones múltiples dentro del dispersor. Además sabemos que estos estados corresponden con los estados ligados del sistema cuando éste está perfectamente confinado; cuando se estudia el transporte dependiente del tiempo, se observa que en estos estados el electrón pasa un tiempo muy grande dentro del dispersor [21]

Consideremos ahora sistemas 1D con un gran número de dispersores dispuestos a lo largo del sistema; existen dos situaciones extremas: sistemas ordenados y sistemas desordenados.

En el primer caso, sistemas ordenados, los dispersores son del mismo tipo entre sí, es decir, tenemos un cristal ideal, para los cuales es conocido que el espectro energético se compone de bandas de conducción bien diferenciadas entre sí; los estados en

2.7. ENTROPÍAS Y LONGITUDES DE DISPERSIÓN

estas bandas están extendidos por todo el sistema por igual y, naturalmente, la transmisión a través del sistema es perfecta [22]

En contraste, los sistemas desordenados presentan el fenómeno de *localización de Anderson* [23], cuya esencia es que, a pesar de que la densidad de estados sea diferente de cero, sin importar la energía, los electrones están espacialmente confinados dentro de una región finita cuya extensión se llama *longitud* o *rango* de localización. En este caso, si la longitud del sistema es mayor que el rango de localización, el coeficiente de transmisión tiende a cero. En resumen, para un sistema desordenado con N dispersores se tiene que [23]

$$\langle T_N \rangle = \exp -2N/\xi, \quad (2.59)$$

donde ξ es el la longitud de localización adimensional, ya que se utiliza alguna longitud a típica del sistema como unidad de longitud. El principal resultado obtenido es que ξ es siempre diferente de cero para sistemas 1D para cualquier grado de desorden. Al considerar todo esto, definimos ahora dos *longitudes en dispersión* para sistemas con un sólo dispersor; la *longitud en transmisión*, ξ_T , y la *longitud en reflexión*, ξ_R , respectivamente son:

$$\xi_T = -\frac{2}{\log_2 T}, \quad (2.60)$$

y

$$\xi_R = -\frac{2}{\log_2 R}. \quad (2.61)$$

por lo que la entropía binaria también la podemos definir en términos de estas longitudes de dispersión

$$S_T = \frac{2T}{\xi_T}, \quad (2.62)$$

$$S_R = \frac{2R}{\xi_T}. \quad (2.63)$$

$$S = S_T + S_R. \quad (2.64)$$

CAPÍTULO 2.

En transmisión vemos que si $T = 1$, y por lo tanto $R = 0$ entonces $S_T = 0$ y tenemos también que ξ_T diverge, es decir, la longitud efectiva de transmisión es infinita, la partícula siempre es transmitida y por lo tanto el dispersión. Sin embargo, si $T = 0$, $\xi_T = 0$ por lo tanto no hay transmisión.

Capítulo 3

Transporte electrónico cuántico: Una dimensión

En este capítulo analizamos dos casos particulares unidimensionales que son de interés básico pues proporcionan información de propiedades importantes que son la base para entender las situaciones más complejas que se presentan en sistemas de dos o más dimensiones; además, permiten cálculos analíticos en la mayoría de los casos [9, 12].

En el primer caso que consideramos en este capítulo estudiamos una partícula en presencia de una barrera delta de Dirac; mientras que en el segundo, hay dos barreras delta de igual opacidad, que están separadas por una distancia L entre sí.

En ambos casos, resolvemos la ecuación de Schrödinger para obtener los coeficientes de transmisión y reflexión, así como los diferentes tiempos de transporte que discutimos en el capítulo anterior. Además, en el caso de la doble barrera delta presentamos también las entropías de dispersión.

3.1. Barrera delta

Consideremos una partícula moviéndose sobre el eje x con un potencial dado por $V(x) = \beta\delta(x)$, donde definimos a β como la opacidad de la barrera. La ecuación

CAPÍTULO 3.

(2.8) queda

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) + \beta \delta(x) \psi(x) = E \psi(x). \quad (3.1)$$

En este caso el sistema no cuenta con una unidad de longitud natural, es por ello que proponemos el cambio de variable $z = x/a_0$, donde a_0 es un radio de Bohr, por lo que de la ecuación (3.1) obtenemos

$$-\frac{\hbar^2}{2ma_0^2} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \psi(z) + \frac{\beta}{a_0} \delta(z) \psi(z) = E \psi(z), \quad (3.2)$$

la cual es adimensional.

Por la naturaleza de la función delta, sabemos que $\delta(z) = 0$ para $z \neq 0$, en cuyo caso tenemos una partícula libre y, por lo tanto, las funciones de onda a la izquierda y a la derecha del potencial delta están dadas por

$$\begin{aligned} \psi^I(z < 0) &= A^+ e^{ikz} + A^- e^{-ikz}, \\ \psi^D(z > 0) &= B^+ e^{ikz} + B^- e^{-ikz}, \end{aligned} \quad (3.3)$$

donde $k = \sqrt{2ma_0^2 E/\hbar^2}$.

Estas soluciones deben ser continuas en $z = 0$,

$$\psi^I(z = 0^-) = \psi^D(z = 0^+), \quad (3.4)$$

y además, la derivada cumple con una condición de continuidad que obtenemos a continuación. Integrando la ecuación (3.2) desde un punto $x = 0^-$ a $x = 0^+$, se obtiene que

$$-\left. \frac{\partial \psi^D(z)}{\partial z} \right|_{z=0^+} + \left. \frac{\partial \psi^I(z)}{\partial z} \right|_{z=0^-} + \alpha \psi^D(0) = 0 \quad (3.5)$$

donde $\alpha \equiv 2ma_0\beta/\hbar^2$; es un factor de opacidad y también es adimensional.

Consideremos el caso mostrado en la figura 3.1, en donde se tienen dos regiones para

3.1. BARRERA DELTA

describir un estado estacionario; en la región a la izquierda de la barrera se tiene la superposición de una onda incidente de amplitud 1 con una onda reflejada, mientras que en la región a la derecha, sólo se tiene una onda transmitida, de tal manera que las funciones de onda para cada región son

$$\begin{aligned}\psi^I(z) &= e^{ikz} + re^{-ikz}, \\ \psi^D(z) &= te^{ikz}.\end{aligned}\tag{3.6}$$

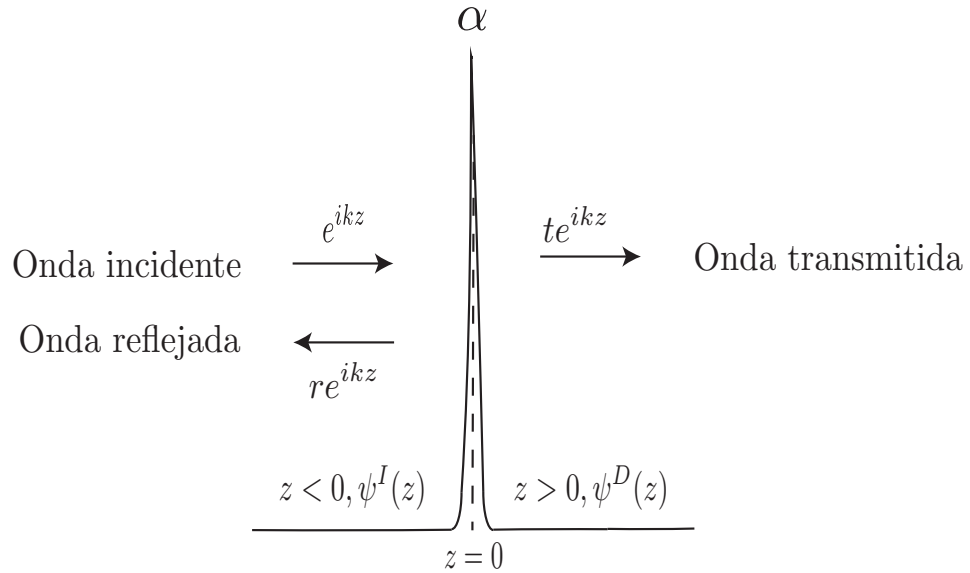


Figura 3.1: Barrera delta. La función de onda por la izquierda de la barrera tiene amplitudes $A^+ = 1$ y $A^- = r$; mientras que por la derecha $B^+ = t$ y $B^- = 0$.

Al aplicar las condiciones de frontera (3.4) y (3.5), obtenemos dos ecuaciones lineales para t y r ,

$$\begin{aligned}1 + r &= t, \\ -ikt + ik(1 - r) + \alpha t &= 0,\end{aligned}\tag{3.7}$$

cuya solución es

$$t = \frac{2k}{2k + i\alpha} = \frac{1}{1 + (i\alpha/2k)},\tag{3.8}$$

$$r = \frac{-i\alpha}{2k + i\alpha} = \frac{-(i\alpha/2k)}{1 + (i\alpha/2k)}. \quad (3.9)$$

De donde se sigue que los coeficientes de transmisión y reflexión son

$$T = |t|^2 = \frac{1}{1 + (\alpha/2k)^2} = \frac{(2k/\alpha)^2}{1 + (2k/\alpha)^2}, \quad (3.10)$$

$$R = |r|^2 = \frac{(\alpha/2k)^2}{1 + (\alpha/2k)^2} = \frac{1}{1 + (2k/\alpha)^2}, \quad (3.11)$$

que claramente satisfacen la condición de conservación de corriente,

$$T + R = 1. \quad (3.12)$$

En la figura 3.2 se presentan las gráficas para las expresiones (3.10) y (3.11) respecto a k , con $\alpha = 1$.

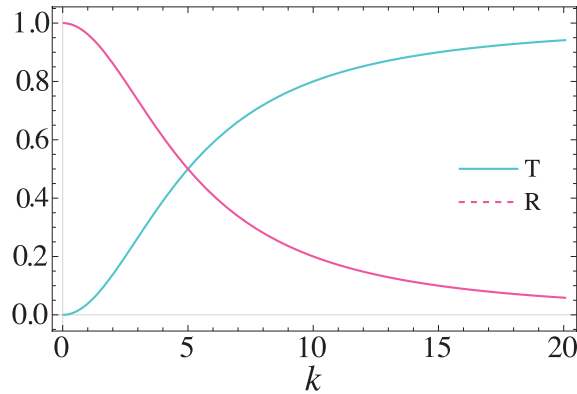


Figura 3.2: Coeficientes de transmisión y reflexión para una barrera tipo delta de Dirac.

Vemos que el coeficiente de transmisión $T \rightarrow 1$ conforme vamos aumentando la energía, mientras que $R \rightarrow 0$, pues en este caso el efecto de la barrera se vuelve despreciable.

Recordemos que t y r también pueden escribirse en términos de sus fases y amplitudes; basta con escribirlas como $z = a + ib$, por lo que la amplitud es $|z| = \sqrt{a^2 + b^2}$, mientras que la fase es $\phi = \arctan(\text{Im}(z)/\text{Re}(z))$, y entonces las fases de transmisión y reflexión respectivas son:

$$\phi_t = \tan^{-1} \left(-\frac{\alpha}{2k} \right), \quad (3.13)$$

$$\phi_r = \tan^{-1} \left(-\frac{2k}{\alpha} \right). \quad (3.14)$$

Estas fases cumplen con la condición $\tan \phi_t \tan \phi_r = -1$. Con estas expresiones analíticas podemos calcular los tiempos de retardo de Wigner, tanto para transmisión, como para reflexión de acuerdo a lo definido en el capítulo 2.6; ecuaciones (2.45) y (2.46). Los tiempos de retardo de Wigner para un barrera delta son entonces

$$\tau_{W_T} = \frac{ma_0^2}{\hbar k} \frac{\alpha/2k^2}{1 + (\alpha/2k)^2},$$

$$\tau_{W_R} = \frac{ma_0^2}{\hbar k} \frac{2/\alpha}{1 + (2k/\alpha)^2}.$$

Definimos la cantidad $\tau_0 = ma_0^2/\hbar$, para escribir las ecuaciones anteriores como

$$\tau_{W_T} = \tau_{W_R} = \tau_0 \frac{1}{k} \frac{2/\alpha}{1 + (2k/\alpha)^2}, \quad (3.15)$$

de donde se sigue que τ_0 es la unidad de tiempo de nuestro sistema.

Como nuestro análisis es más general en la figura 3.3 graficamos la razón entre τ_{W_T}/τ_0 y τ_{W_R}/τ_0 respecto a la energía.

Para el caso de una barrera delta tenemos que los tiempos de retardo de Wigner para transmisión y reflexión son iguales entre sí. Esto quiere decir que la acción de la barrera delta en las fases es la misma sin importar si la partícula es transmitida o reflejada en correspondencia a un dispersor de ancho nulo. Además, para energías muy pequeñas estos tiempos se vuelven más largos.

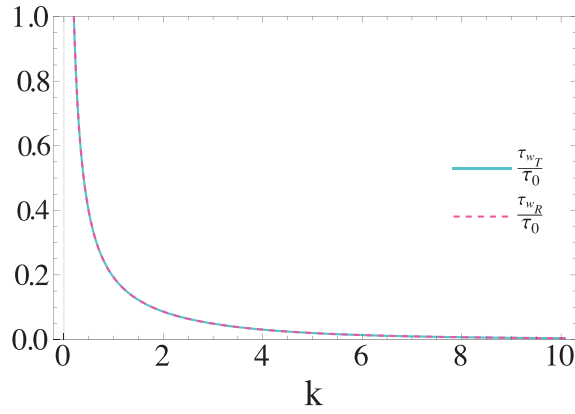


Figura 3.3: Tiempos de retardo para transmisión y para reflexión para el caso de una barrera delta.

3.2. Doble barrera delta en una dimensión

Ahora analizamos cuando el dispersor consiste de dos deltas de Dirac separadas una distancia L entre sí. Sea el potencial

$$V(x) = \beta_1\delta(x) + \beta_2\delta(x - L), \quad (3.16)$$

donde β_1 y β_2 son las respectivas opacidades de las deltas. Entonces, la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo es

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) + (\beta_1\delta(x) + \beta_2\delta(x - L))\psi(x) = E\psi(x). \quad (3.17)$$

A diferencia del caso anterior, ahora podemos tomar L como unidad de longitud con el fin de adimensionalizar la ecuación anterior. Entonces con $z = x/L$ tenemos que

$$-\frac{\partial^2}{\partial z^2} \psi(z) + \frac{2mL}{\hbar^2} (\beta_1\delta(z) + \beta_2\delta(z - 1))\psi(z) = \frac{2mL^2E}{\hbar^2} \psi(z). \quad (3.18)$$

Nótese que esta ecuación es completamente similar a (3.1), por lo tanto, la forma de las soluciones serán parecidas entre sí.

En este caso tenemos tres regiones que describen un mismo estado estacionario de interés, a través de la superposición de estados correspondientes a ondas viajeras

3.2. DOBLE BARRERA DELTA EN UNA DIMENSIÓN

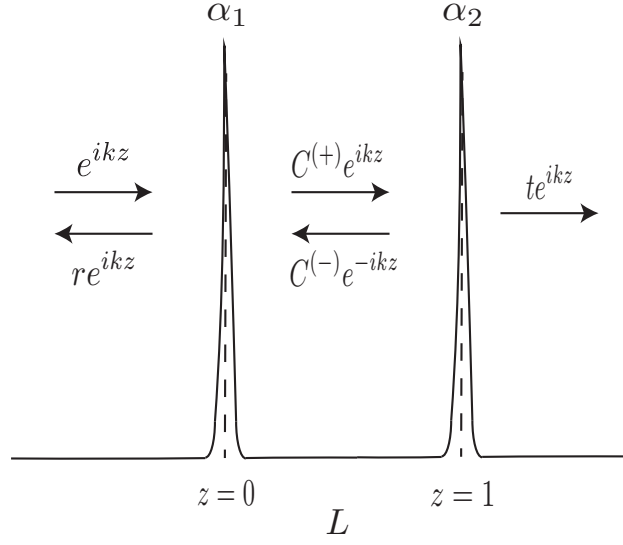


Figura 3.4: Doble barrera delta.

que se propagan de izquierda a derecha y de derecha a izquierda. En la región I se tiene una onda incidente de amplitud 1 con una onda reflejada; en la región II tenemos una onda que viaja de izquierda a derecha, e^{ikz} , y otra que viaja de derecha a izquierda, e^{-ikz} , cuyas correspondientes amplitudes denotamos por C^+ y $C^{(-)}$; por último, en la región III se tiene la onda transmitida, figura 3.4. Entonces para cada región la función de onda está dada por

$$\begin{aligned}
 \Psi(z < 0) &= e^{ikz} + re^{-ikz}, \\
 \Psi(0 < z < L) &= e^{ikz}C^{(+)} + e^{-ikz}C^{(-)}, \\
 \Psi(z > L) &= e^{ikz}t,
 \end{aligned} \tag{3.19}$$

en este caso $k = \sqrt{2mL^2E/\hbar^2}$.

Estas ecuaciones deben cumplir las condiciones de frontera, (3.4) y (3.5), en $z = 0$ y $z = 1$, por lo que

$$\begin{aligned}
 1 + r - (C^{(+)} + C^{(-)}) &= 0, \\
 -ik(C^{(+)} - C^{(-)}) + ikr + \alpha_1(C^{(+)} + C^{(-)}) &= 0 \\
 C^{(+)}e^{ik} + C^{(-)}e^{-ik} - te^{ik} &= 0, \\
 -ikte^{ik} + ik(C^{(+)}e^{ik} - C^{(-)}e^{-ik}) + \alpha_2te^{ik} &= 0,
 \end{aligned} \tag{3.20}$$

donde $\alpha_1 = 2mL\beta_1/\hbar^2$ y $\alpha_2 = 2mL\beta_2/\hbar^2$; de donde se obtiene que

$$\begin{aligned}
 r &= \frac{2ik(\alpha_1 + \alpha_2 e^{2ikL} - \alpha_1\alpha_2 + \alpha_1\alpha_2 e^{2ikL})}{4k^2 + 2ik(\alpha_1 + \alpha_2) - \alpha_1\alpha_2 + \alpha_1\alpha_2 e^{2ikL}} \\
 t &= \frac{4k^2}{4k^2 + 2ik(\alpha_1 + \alpha_2) - \alpha_1\alpha_2 + \alpha_1\alpha_2 e^{2ikL}} \\
 C^{(+)} &= -\frac{2k^2 + ik\alpha_2}{\alpha_1(2ik - \alpha_2 + \alpha_2 e^{2ikL})} \\
 C^{(-)} &= \frac{ik\alpha_2 e^{2ikL}}{\alpha_1(2ik - \alpha_2 + \alpha_2 e^{2ikL})}
 \end{aligned} \tag{3.21}$$

Las amplitudes de transmisión y reflexión son t y r , respectivamente, y por lo tanto los coeficientes de transmisión y reflexión son

$$T = |t|^2, \tag{3.22}$$

$$R = |r|^2, \tag{3.23}$$

tomando $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha$, estos coeficientes quedan expresados como

$$T = \frac{16k^4}{(4k^2 + \alpha^2)^4 + 4\alpha^2(4k^2 - \alpha^2) \cos 2k + 16k\alpha^3 \sin 2k}, \tag{3.24}$$

$$R = \frac{4\alpha^2(2k \cos k + \alpha \sin k)^2}{(4k^2 + V^2)^4 + 4\alpha^2(4k^2 - \alpha^2) \cos 2k + 16k\alpha^3 \sin 2k}. \tag{3.25}$$

En la figura 3.5 se presentan los coeficientes T y R para diferentes valores de α , en las gráficas (a) y (b) tenemos el casos de $\alpha = 1$, en este caso observemos como la doble barrera es casi transparente para la partícula conforme aumentamos la energía; sin embargo, si aumentamos α el efecto de cuasi-confinamiento entre las dos barreras se vuelve más evidente, y se aprecian mucho mejor los estados cuasi-ligados, como se muestra en el resto de las gráficas de esta misma figura, para los casos de $\alpha = 5$ y $\alpha = 10$.

Los máximos en las gráficas del coeficiente de transmisión T representan las resonancias del sistema, estados cuasi-ligados para las energías correspondientes; para estas energías la partícula permanece un tiempo muy largo dentro del pozo antes

3.2. DOBLE BARRERA DELTA EN UNA DIMENSIÓN

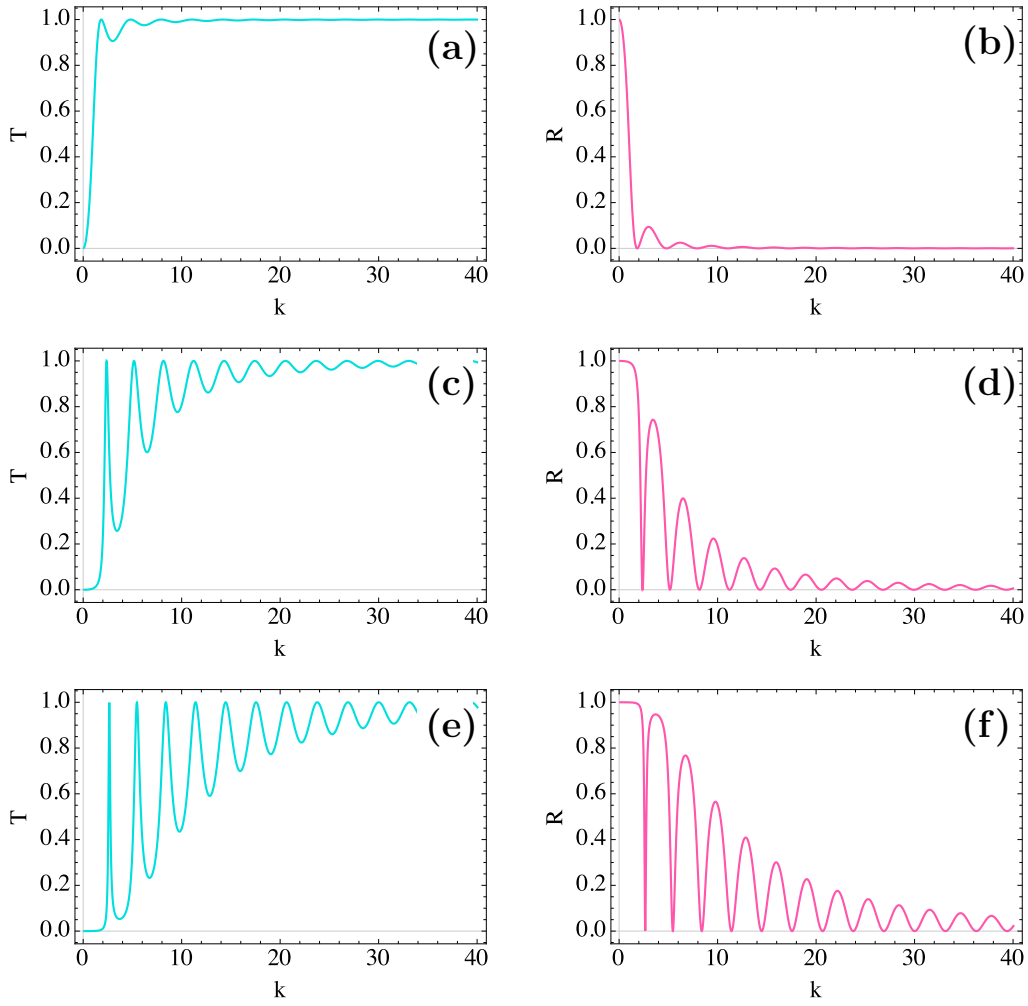


Figura 3.5: (a) Coeficiente de transmisión T y (b) Coeficiente de reflexión R para $\alpha = 1$, (c) Coeficiente de transmisión T y (d) Coeficiente de reflexión R para $\alpha = 5$, (e) Coeficiente de transmisión T y (f) Coeficiente de reflexión R para $\alpha = 10$.

de ser transmitida y este tiempo está relacionado con el recíproco del ancho de la resonancia [11, 21].

Es importante notar que en la región entre las dos barreras el espectro de energías está relacionado con el de un pozo infinito de potencial

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2}, \quad (3.26)$$

siendo la diferencia que en la doble barrera delta, las paredes permiten que la partícula sea transmitida y reflejada; entonces existen estados llamados *cuasi-ligados* o *resonantes*, los cuales ocurren cuando la energía es cercana a la de algún eigenestado del pozo infinito de potencial. Este fenómeno es análogo al de un interferómetro

CAPÍTULO 3.

de Fabry-Pérot estudiado en óptica física. Los estados resonantes tienen una firma muy especial: $T \approx 1$. La ventaja de tratar problemas en una dimensión es que por lo general se pueden obtener expresiones analíticas de los coeficientes de transmisión y reflexión; ya encontramos las amplitudes de la función de onda en cada región, así como los coeficientes de transmisión y reflexión. Además, los tiempos de retardo de Wigner como función de los parámetros del sistema están dados por las siguientes expresiones

$$\tau_{WT} = \tau_0 \frac{\alpha^3(8k^2 - (\alpha - 2)\alpha^2 + \alpha(-4k^2 + (\alpha - 2)\alpha) \cos 2k - 4k(\alpha - 1)\alpha \sin 2k}{k(8k^4 + 4k^2\alpha^2 + \alpha^4 - \alpha^2(\alpha^2 - 4k^2) \cos 2k + 4k\alpha^3 \sin 2k)}, \quad (3.27)$$

$$\tau_{WR} = \tau_0 \frac{\alpha^2(4k^4 + \alpha^3 + 2k^2\alpha(\alpha + 2) - \alpha^3 \cos 2k + 2k\alpha^2 \sin 2k)}{4k(4k^2(k^2 + \alpha^2) \cos^2 k + 4k\alpha^3 \cos k \sin k + (4k^4 + \alpha^4) \sin^2 k)}, \quad (3.28)$$

donde τ_0 es nuestra unidad de tiempo, como lo vimos la sección anterior, sin embargo es importante tener en cuenta que en este caso nuestro sistema si cuenta con una longitud natural, la distancia L entre las deltas, y por tanto la forma de este τ_0 para este caso tiene la forma

$$\tau_0 = mL^2/\hbar \quad (3.29)$$

Como ya mencionamos el tiempo de retardo de Wigner refleja el cambio de la fase al cruzar la barrera con respecto a la fase de la onda cuando no hay dispersor. En la figura 3.6 se presentan tres casos: $\alpha = 1$, $\alpha = 5$ y $\alpha = 10$, como se hizo en la sección anterior para los coeficientes de transmisión y reflexión. Lo primero que podemos observar en estas gráficas es que estos tiempos tienen un máximo en las energías resonantes, lo que nos indica que en estos estados cuasi-ligados la fase de la función de onda tiene un mayor corrimiento. La línea punteada de las gráficas es la densidad de estados en una dimensión para partícula, $1/k$, así que también podemos concluir que los tiempos de retardo de Wigner son proporcionales a la densidad de estados; por lo tanto, en las resonancias se acumulan un mayor número de estados y el tiempo de retardo se ve incrementado.

Uno de los problemas en mecánica cuántica es que no hay un operador que defina el tiempo, y por ello se pueden definir tiempos de transporte de diferentes maneras; así que ahora veamos el comportamiento de los tiempos de estadía, transmisión y

3.2. DOBLE BARRERA DELTA EN UNA DIMENSIÓN

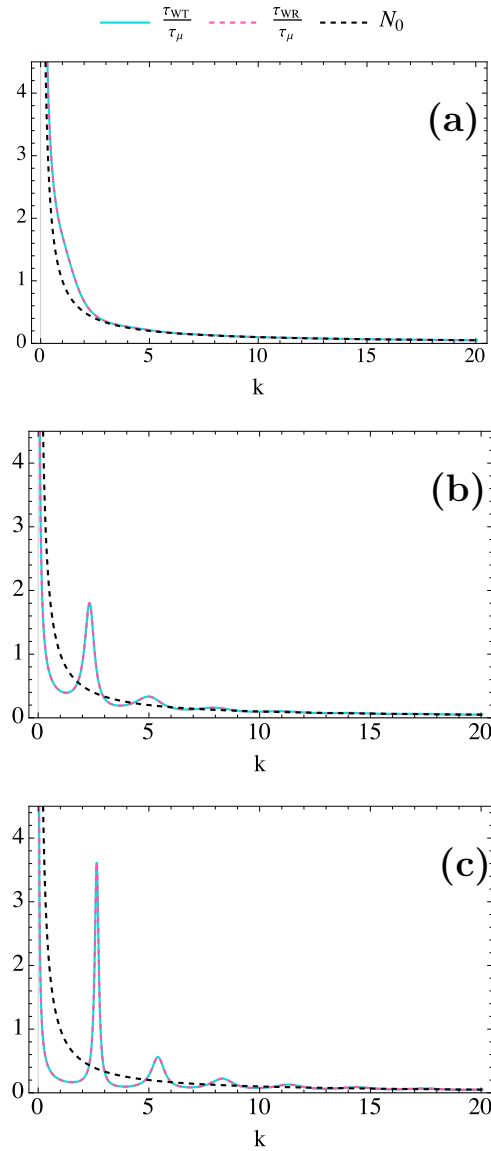


Figura 3.6: Tiempos de retardo de Wigner para la doble barrera con (a) $\alpha = 1$, (b) $\alpha = 5$ y (c) $\alpha = 10$. N_0 representa la densidad de estados en una dimensión cuando no hay potencial.

reflexión definidos en el capítulo anterior, ecuaciones (2.54), (2.52) y (2.53).

En la figura 3.7 se muestran las gráficas para estas ecuaciones, en las cuales es fácil apreciar que cuando el coeficiente de reflexión es igual a 0, es decir, en los estados *cuasi-ligados*, el tiempo de reflexión se vuelve infinito y por tanto los tiempos de transmisión y estadía son iguales, ecuación (2.55). Si el coeficiente de reflexión es 1, el tiempo de transmisión se vuelve infinito y en este caso los tiempos de reflexión y de estadía son iguales.

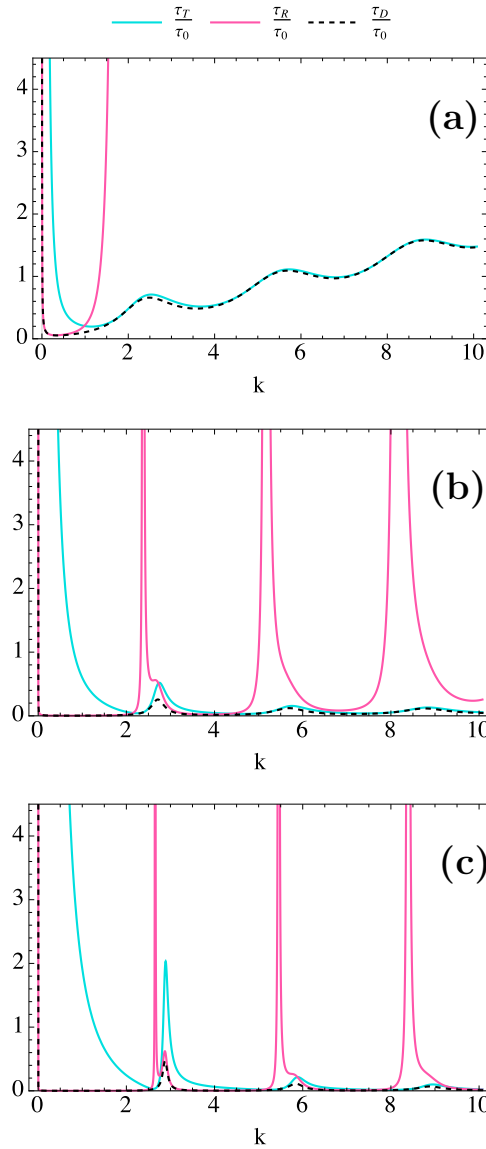


Figura 3.7: Tiempos de transmisión, reflexión y estadía para la doble barrera delta de Dirac con (a) $\alpha = 1$, (b) $\alpha = 5$ y (c) $\alpha = 10$

3.3. Entropía en una dimensión

En esta sección presentamos un conjunto de resultados para las entropías de dispersión introducidas en el capítulo 2, en donde vemos que la interpretación en términos de localización del sistema resulta ser de utilidad.

En la figura 3.8 graficamos las entropías S_T , S_R y S_{TOTAL} para diferentes valores de α , así como las respectivas longitudes de dispersión. En ella es posible observar que cuando se tiene un mínimo en las entropías la longitud en transmisión ξ_T se va a

3.3. ENTROPÍA EN UNA DIMENSIÓN

infinito, mientras que la longitud en reflexión ξ_R es cero.

Además en la figura 3.9, observamos que los máximos de T coincidan con los mínimos de S_{TOTAL} , o bien, estos máximos corresponden a una longitud en transmisión infinita. De tal manera que la partícula está menos localizada en los estados *cuasi-ligados* en los cuales sabemos que la partícula emplea un tiempo largo, tiempo de resonancia, en la zona dispersión.

Además, podemos observar que la entropía S_{TOTAL} es máxima cuando $T = R = 1/2$.

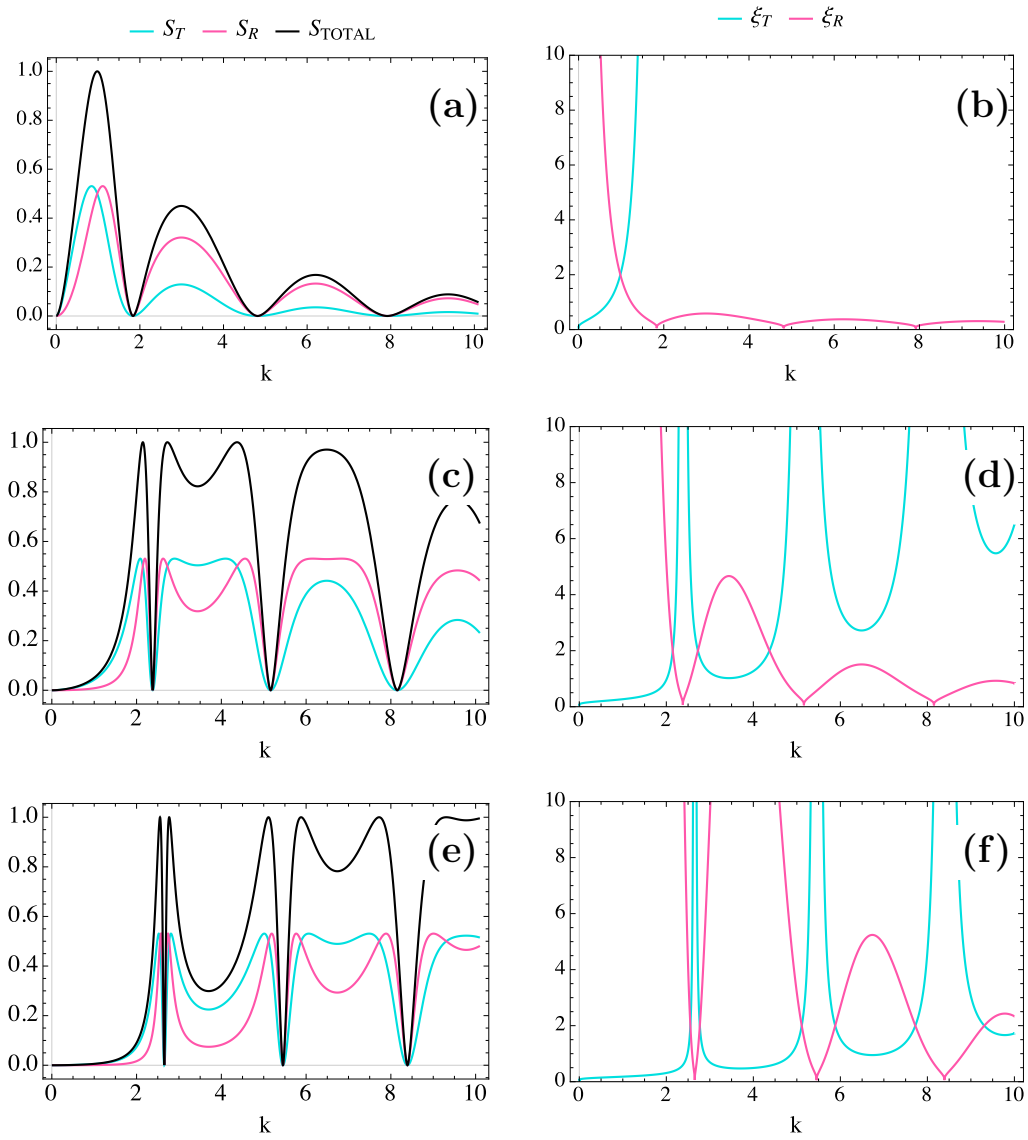


Figura 3.8: Entropías y longitudes de dispersión para la doble barrera delta con (a)-(b) $\alpha = 1$, (c)-(d) $\alpha = 5$ y (e)-(f) $\alpha = 10$.

3.3. ENTROPÍA EN UNA DIMENSIÓN

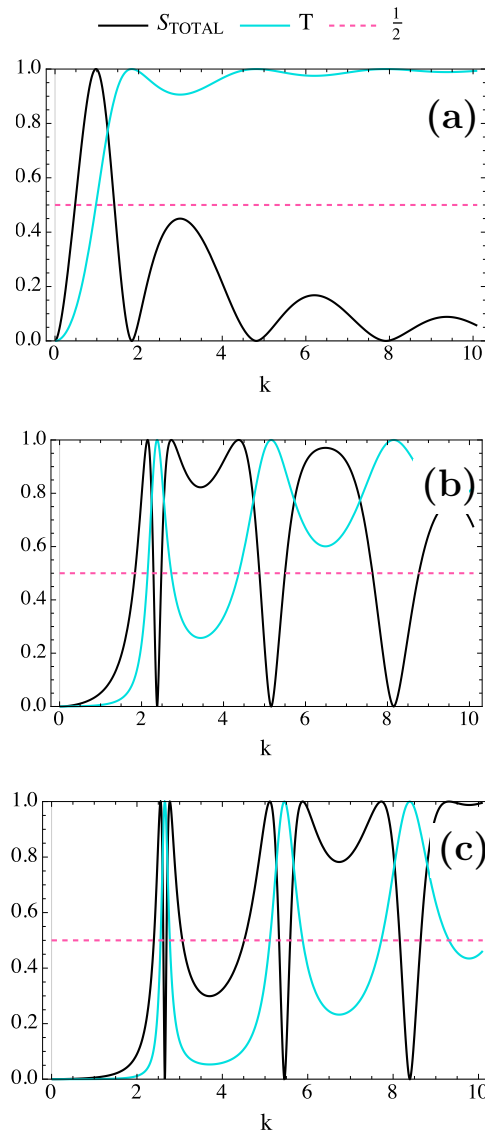


Figura 3.9: Entropía S_{TOTAL} y coeficiente de transmisión T con (a) $\alpha = 1$, (b) $\alpha = 5$ y (c) $\alpha = 10$.

Capítulo 4

Transporte electrónico en sistemas mesoscópicos confinados sobre superficies cilíndricas circulares

En este capítulo estudiamos un sistema mesoscópico de electrones que se mueven libremente sobre la superficie de un cilindro de radio ρ_0 , en presencia de potenciales tipo delta de Dirac en la dirección axial, y con amplitudes moduladas en la variable angular en general, específicamente analizamos potenciales tipo flores de Dirac.

4.1. Barrera delta sobre la superficie del cilindro

Consideramos primero el caso más general sobre la superficie de un cilindro de radio ρ_0 , en presencia de un potencial $V(\varphi, z')$ cuya forma es

$$V(\varphi, z') = \delta(z' - z_0)v(\varphi), \quad (4.1)$$

donde en este caso $v(\varphi)$ es arbitrario.

La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, ahora en dos dimensiones, y

4.1. BARRERA DELTA SOBRE LA SUPERFICIE DEL CILINDRO

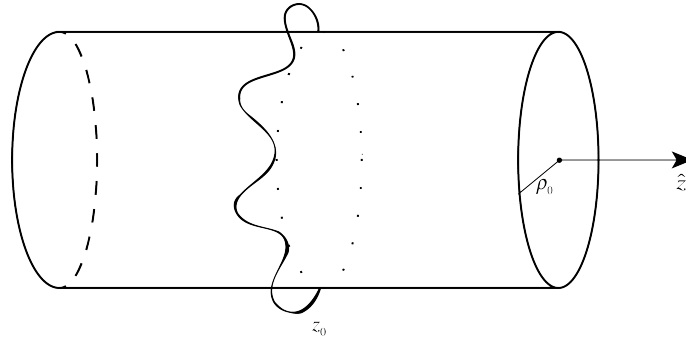


Figura 4.1: Una barrera tipo delta de Dirac en la dirección z

en coordenadas cilíndricas circulares, se escribe como

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(\varphi, z') + V(\varphi, z')\Psi(\varphi, z') = E\Psi(\varphi, z'), \quad (4.2)$$

donde $\nabla^2 \equiv [\frac{\partial^2}{\partial z'^2} + \frac{1}{\rho_0^2}\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}]$; cuyas eigenfunciones y energías cuando $V(\varphi, z) = 0$ son

$$\Psi_l(\varphi, z') = \frac{e^{ik_z z'} e^{il\varphi}}{\sqrt{2\pi}} = \langle \varphi | \lambda \rangle e^{ik_z z'} \quad y \quad E = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} + \frac{\hbar^2 l^2}{2m\rho_0^2}. \quad (4.3)$$

Al graficar E respecto a k_z con una l dada, se obtienen las curvas de energía, figura 4.2; es decir, $E = E_l(k_z)$. De tal manera que, cada nivel energético está asociado a un canal o modo transversal determinado por $\Psi_l(\varphi, z')$.

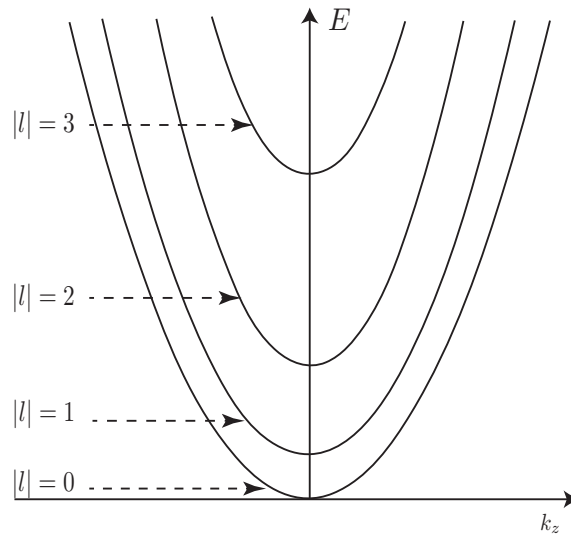


Figura 4.2: Curvas de energía $E = E_l(k_z)$ para una partícula moviéndose sobre la superficie de un cilindro.

CAPÍTULO 4.

Clásicamente, si el momento angular l_z de $\Psi_l(\varphi, z')$ es cero, la partícula sigue una trayectoria en línea recta paralela al eje z , (ver figura 4.3); en este caso la dirección esta determinada sólo por el signo del momento lineal p_z , es decir, cuando $p_z > 0$ la partícula viaja en dirección paralela al eje positivo de z , mientras que cuando $p_z < 0$ lo hará en sentido opuesto.

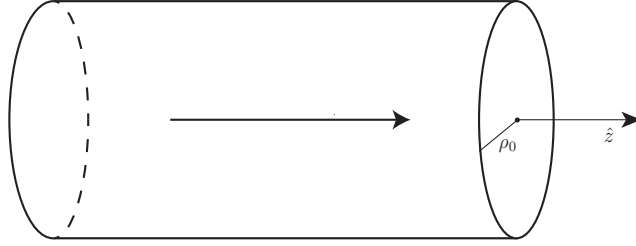
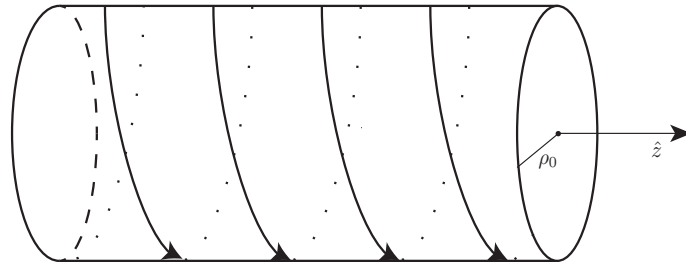
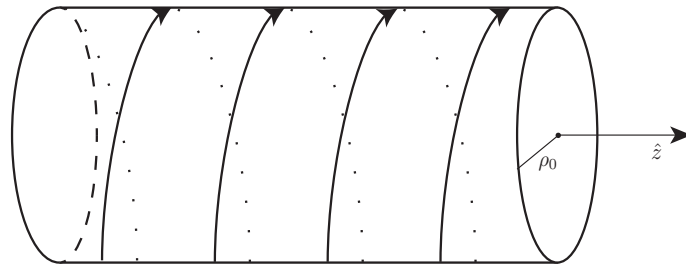


Figura 4.3: Trayectoria clásica de una partícula moviéndose sobre la superficie del cilindro con $p_z > 0$ y $l_z = 0$.

Cuando $l_z \neq 0$, $\Psi_l(\varphi, z')$ describe una trayectoria en forma de hélice que se enreda a la derecha o a la izquierda dependiendo del signo de los momentos p_z y l_z , figura 4.4b. Si consideramos $p_z > 0$, cuando $l_z > 0$ la trayectoria gira en sentido contrario a las manecillas del reloj, es decir se enreda hacia la izquierda, mientras que cuando $l_z < 0$ la trayectoria gira en sentido a las manecillas del reloj, por lo tanto en este caso la hélice se enreda hacia la derecha.



(a) $l_z > 0$



(b) $l_z < 0$

Figura 4.4: Trayectorias clásicas de una partícula moviéndose sobre la superficie del cilindro con $p_z > 0$ y $l_z \neq 0$.

4.1. BARRERA DELTA SOBRE LA SUPERFICIE DEL CILINDRO

En el análisis cuántico obtienen estas trayectorias cuando se considera la evolución temporal de $\Psi_l(\varphi, z')$, es decir $\Psi_l(\varphi, z'; t) = \Psi_l(\varphi, z')e^{-iEt/\hbar}$, lo cual no es el propósito de este trabajo pero resulta muy útil tenerlas presente.

Cuando el potencial $V(\varphi, z')$, (4.1), está presente y considerando el cambio de variable $z = z'/\rho_0$ en la ecuación (4.2) se tiene

$$-\left[\frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}\right]\Psi(\varphi, z) + w(\varphi)\delta(z - z_0)\Psi(\varphi, z) = \epsilon\Psi(\varphi, z), \quad (4.4)$$

donde

$$\epsilon = \frac{2m\rho_0^2}{\hbar^2}E, \quad w(\varphi) = \frac{2m\rho_0^2}{\hbar^2} \frac{v(\varphi)}{\rho_0}, \quad (4.5)$$

además, de la ecuación (4.3) se observa que si el momento angular y la energía están dados es posible determinar k_z , de la siguiente manera

$$k_z = \sqrt{\epsilon - l^2} = k_l. \quad (4.6)$$

Entonces, como vimos para el caso en una dimensión, lejos de la delta la solución coincide con la partícula libre, por lo tanto para un momento angular y una energía dados se tiene

$$\Psi_l^\epsilon(\varphi, z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{il\varphi}(e^{ik_l z}A_l^{(+)} + e^{-ik_l z}A_l^{(-)}). \quad (4.7)$$

Esta solución debe cumplir las siguientes condiciones de frontera en la posición longitudinal del potencial, es decir en $z = z_0$

$$\Psi(\varphi, z_0^-) = \Psi(\varphi, z_0^+) \quad (4.8)$$

$$-\frac{\partial\Psi}{\partial z}\Big|_{z_0^+} + \frac{\partial\Psi}{\partial z}\Big|_{z_0^-} + w(\varphi)\Psi(z_0) = 0. \quad (4.9)$$

CAPÍTULO 4.

Identificamos así dos regiones importantes, figura 4.5. En la región I se tiene la superposición de la onda que incidente con momento angular λ y la onda reflejada, mientras que en la región II se tiene la onda transmitida. Es importante tener presente que las ondas de dispersión pueden transmitirse o reflejarse a través de cualquier otro estado, no necesariamente lo harán por el canal $|\lambda\rangle$.

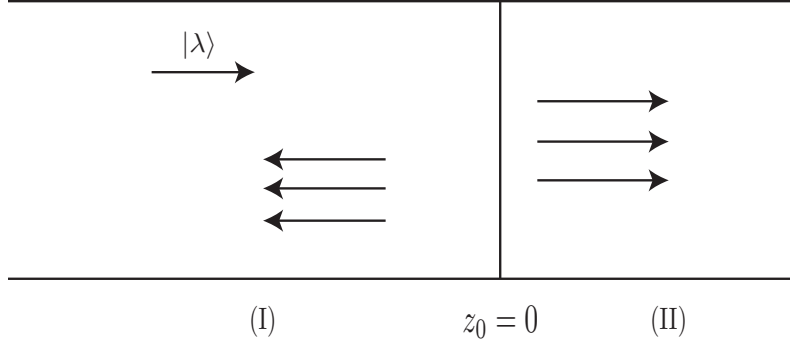


Figura 4.5: Regiones de dispersión sobre la superficie del cilindro.

Onda Incidente:

$$\Psi_\lambda(\varphi, z) = \langle \varphi | \lambda \rangle e^{ik_\lambda z} \quad (4.10)$$

Onda Reflejada:

$$\Psi_\lambda(\varphi, z) = \sum_{l=-\infty}^{\infty} \langle \varphi | l \rangle e^{-ik_l z} A_{l,\lambda}^{(-)} \quad (4.11)$$

Onda Transmitida:

$$\Psi_\lambda(\varphi, z) = \sum_{l=-\infty}^{\infty} \langle \varphi | l \rangle e^{ik_l z} B_{l,\lambda}^{(+)} \quad (4.12)$$

Entonces la función de onda total para cada una de las regiones para $z \neq 0$ son

$$\Psi_\lambda^\epsilon(\varphi, z < 0) = \langle \varphi | \lambda \rangle e^{ik_\lambda z} + \sum_{l=-\infty}^{\infty} \langle \varphi | l \rangle e^{-ik_l z} A_{l,\lambda}^{(-)}, \quad (4.13)$$

$$\Psi_\lambda^\epsilon(\varphi, z > 0) = \sum_{l=-\infty}^{\infty} \langle \varphi | l \rangle e^{ik_l z} B_{l,\lambda}^{(+)}. \quad (4.14)$$

Como ya sabemos la función de onda y su derivada deben ser continuas en la frontera, para ello aplicamos las ecuaciones (4.8) y (4.9) en $z_0 = 0$

4.1. BARRERA DELTA SOBRE LA SUPERFICIE DEL CILINDRO

$$\langle \varphi | \lambda \rangle + \sum_{l=-\infty}^{\infty} \langle \varphi | l \rangle A_{l,\lambda}^{(-)} = \sum_{l=-\infty}^{\infty} \langle \varphi | l \rangle B_{l,\lambda}^{(+)}, \quad (4.15)$$

$$ik_l \sum_{l=-\infty}^{\infty} \langle \varphi | l \rangle B_{l,\lambda}^{(+)} - ik_\lambda \langle \varphi | \lambda \rangle + ik_l \sum_{l=-\infty}^{\infty} \langle \varphi | l \rangle A_{l,\lambda}^{(-)} - \sum_{l=-\infty}^{\infty} w(\varphi) \langle \varphi | l \rangle B_{l,\lambda}^{(+)} = 0. \quad (4.16)$$

Para resolver este sistema de ecuaciones utilizamos el método de acoplamiento de modos (Mode Matching Method, MMM), el cual consiste en multiplicar las ecuaciones (4.15) y (4.16) por $\langle \varphi | m \rangle^*$ e integrar sobre φ , después de lo cual obtenemos que

$$\delta_{m,\lambda} + \delta_{m,l} A_{m,\lambda}^{(-)} = \delta_{m,l} B_{m,\lambda}^{(+)} \quad (4.17)$$

$$ik_m \delta_{m,l} B_{m,\lambda}^{(+)} - ik_m \delta_{m,\lambda} + ik_m A_{m,\lambda}^{(-)} - \sum_{l=-\infty}^{\infty} w_{m,l} B_{l,\lambda}^{(+)} = 0 \quad (4.18)$$

donde

$$w_{m,l} = \langle m | w(\varphi) | l \rangle, \quad (4.19)$$

representan la amplitud de probabilidad de transición entre los estados angulares m y l , lo cual nos indica que existe un proceso de acoplamiento de modos.

Despejando $A_{m,\lambda}^{(-)}$ de (4.17) y sustituyendo en (4.18), se obtiene

$$\sum_{l=-\infty}^{\infty} (2ik_m \delta_{m,l} - w_{m,l}) B_{l,\lambda}^{(+)} = 2ik_m \delta_{m,\lambda} \quad (4.20)$$

o bien,

$$\mathbb{M} |B_\lambda\rangle = 2ik_\lambda |V_\lambda\rangle, \quad (4.21)$$

con

$$M_{m,l} = 2ik_m \delta_{m,l} - w_{m,l}. \quad (4.22)$$

La ecuación (4.21) representa un sistema infinito de ecuaciones lineales algebraicas.

Nuestro propósito es determinar las amplitudes $A_{m,\lambda}^{(-)}$ y $B_{m,\lambda}^{(+)}$, para esto es necesario truncar el sistema y resolverlo numéricamente, asegurando una buena convergencia. Una vez que se obtienen estas amplitudes estudiamos las propiedades de transporte electrónico de este sistema.

CAPÍTULO 4.

Ahora, con la solución (4.7) y la relación (4.6) es posible identificar dos casos:

- 1) Si $l^2 < \epsilon$ entonces k_l es real y por lo tanto la solución $\Psi_l^\epsilon(\varphi, z)$ oscila, es decir las funciones de onda son ondas planas, lo que permite que el canal $|l\rangle$, puede transmitirse a través de la barrera; entonces se dice que el canal es conductor.

- 2) Si $l^2 > \epsilon$ entonces k_l es compleja dando lugar a exponenciales reales en la $\Psi_l^\epsilon(\varphi, z)$ que decrecen, a este tipo de soluciones se les conoce como ondas evanescentes. En este caso el canal $|l\rangle$ no conduce.

Regresando al caso de la figura 4.5, tenemos una partícula incidiendo por un canal $|\lambda\rangle$, el cual es conductor ($\lambda^2 < \epsilon$); pero que al ser dispersado por la barrera la partícula se transmite o refleja por cualquier canal debido al acoplamiento entre los canales generado por $w_{m,\lambda}$. Es decir, $w_{m,\lambda}$ representa una amplitud de probabilidad de que una partícula incidiendo en la región de dispersión por el canal $|\lambda\rangle$ se transmite o se refleje por el canal $|m\rangle$. Esta es la principal diferencia entre los casos de potenciales tipo delta en una dimensión y en dos dimensiones. Recordemos que en nuestro modelo la partícula incidente puede ser elásticamente dispersada hacia cualquier de los canales o modos, sean conductores o evanescentes, ya que esta conserva su energía inicial en todo momento.

De aquí la importancia de los casos 1) y 2) mencionados arriba, ya que si la onda se acopla a un estado con menor energía que la inicial, el canal seguirá siendo conductor; mientras que si lo hace a un estado con mayor energía que la inicial el estado será evanescente, la onda experimenta un proceso de tunelaje.

Todo lo anterior afecta la posible trayectoria de la partícula al atravesar la región de dispersión, se dice el potencia cambia la quiralidad del sistema.

Los coeficientes de transmisión y reflexión para cada posible canal conductor incidente están dados por las siguientes expresiones

$$T_\lambda = \sum_{l=-\lambda_{max}}^{\lambda_{max}} \frac{k_l |B_{l,\lambda}|^2}{k_\lambda}, \quad (4.23)$$

4.1. BARRERA DELTA SOBRE LA SUPERFICIE DEL CILINDRO

$$R_\lambda = \sum_{l=-\lambda_{max}}^{\lambda_{max}} \frac{k_l |A_{l,\lambda}|^2}{k_\lambda}, \quad (4.24)$$

mientras que el coeficiente de transmisión y reflexión totales, son iguales a la suma de las expresiones anteriores

$$T = \sum_{l=-\lambda_{max}}^{\lambda_{max}} T_\lambda, \quad (4.25)$$

$$R = \sum_{l=-\lambda_{max}}^{\lambda_{max}} R_\lambda, \quad (4.26)$$

con $|\lambda_{max}| = [\sqrt{\epsilon}]$.

Los coeficientes de transmisión y reflexión para cada canal conductor deben cumplir que $T_\lambda + R_\lambda = 1$ y por tanto los coeficientes totales con $T + R = N$, lo cual asegura la condición de unitariedad y la conservación de corriente.

Identificamos con λ a un estado conductor, estos estados están acotados por la energía total del sistema. Para que un estado sea conductor se tiene que cumplir que $\lambda^2 < \epsilon$, entonces $|\lambda_{max}| = [\sqrt{\epsilon}]$; es decir, $|\lambda_{max}|$ está determinada por la parte entera de $\sqrt{\epsilon}$ y los estados o canales conductores del sistema son $-\lambda_{max} \leq \lambda \leq \lambda_{max}$.

El número total de canales conductores para cierto valor de ϵ está determinado por

$$N_{cond} = 2|\lambda_{max}| + 1. \quad (4.27)$$

Como se mencionó anteriormente, la ecuación (4.21) representa un número infinito ecuaciones lineales acopladas, es decir la matriz \mathbb{M} contiene un número infinito de elementos.

Para poder resolver aproximadamente el sistema realizamos un proceso de truncamiento en el cual el tamaño de la matriz \mathbb{M} es de $N_{max} \times N_{max}$, donde

$$N_{max} = 2N_{cond} + 1. \quad (4.28)$$

Esta condición se escoge con el fin de asegurar una buena convergencia.

4.2. Modulación con una flor de Dirac

A continuación analizamos el mismo caso de tener un potencial tipo delta de Dirac en la dirección axial, ecuación (4.1), pero ahora con un potencial $w(\varphi)$ específico, (4.29); al cual identificamos a partir de aquí como *flores de Dirac* de la siguiente forma:

$$w(\varphi) = \alpha \sum_{l=-\infty}^{\infty} \frac{e^{iql\varphi - il\gamma}}{l^{2p} + 1}, \quad (4.29)$$

donde α es la amplitud, q determina el número de pétalos, γ es el ángulo de desfase y p es un número entero.

Si graficamos este potencial, en coordenadas polares, dejando fijos todos los parámetros excepto q , ver figura 4.6, es posible notar que el potencial tiene una forma sugestiva de los pétalos de una flor.

En este caso, para resolver aproximadamente la ecuación (4.21) los coeficientes $w_{m,l}$ son

$$w_{m,n} = \alpha \frac{e^{i\frac{m-n}{q}\gamma}}{\left(\frac{m-n}{q}\right)^{2p} + 1}, \quad (4.30)$$

En la figura 4.7 se muestran las gráficas de los coeficientes de transmisión y reflexión para los primeros 5 posibles canales incidentes, en este caso en el que el potencial $w(\varphi)$ es una *flor de Dirac* con dos pétalos.

Al observar la figura 4.8 vemos que la condición anterior para el tamaño de la matriz \mathbb{M} nos da una buena convergencia, ya que se cumple exactamente la condición $T + R = N_{cond}$. Si se aumenta el número de pétalos de la flor, figura 4.9 y figura 4.10, ahora con cinco pétalos vemos que el comportamiento de los coeficientes de transmisión y reflexión T_λ y R_λ , es similar.

4.2. MODULACIÓN CON UNA FLOR DE DIRAC

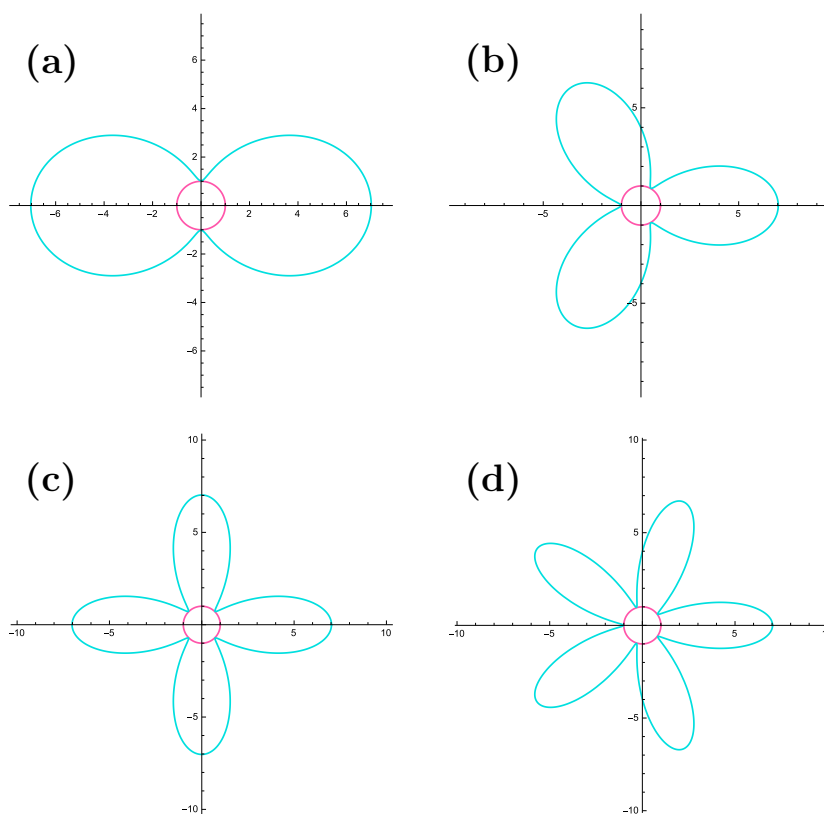


Figura 4.6: Flores de Dirac variando el parámetro q . (a) $q = 2$, (b) $q = 3$, (c) $q = 4$ y (d) $q = 5$. En todos los casos $a = 3$, $p = 4$ y $\gamma = 0$.

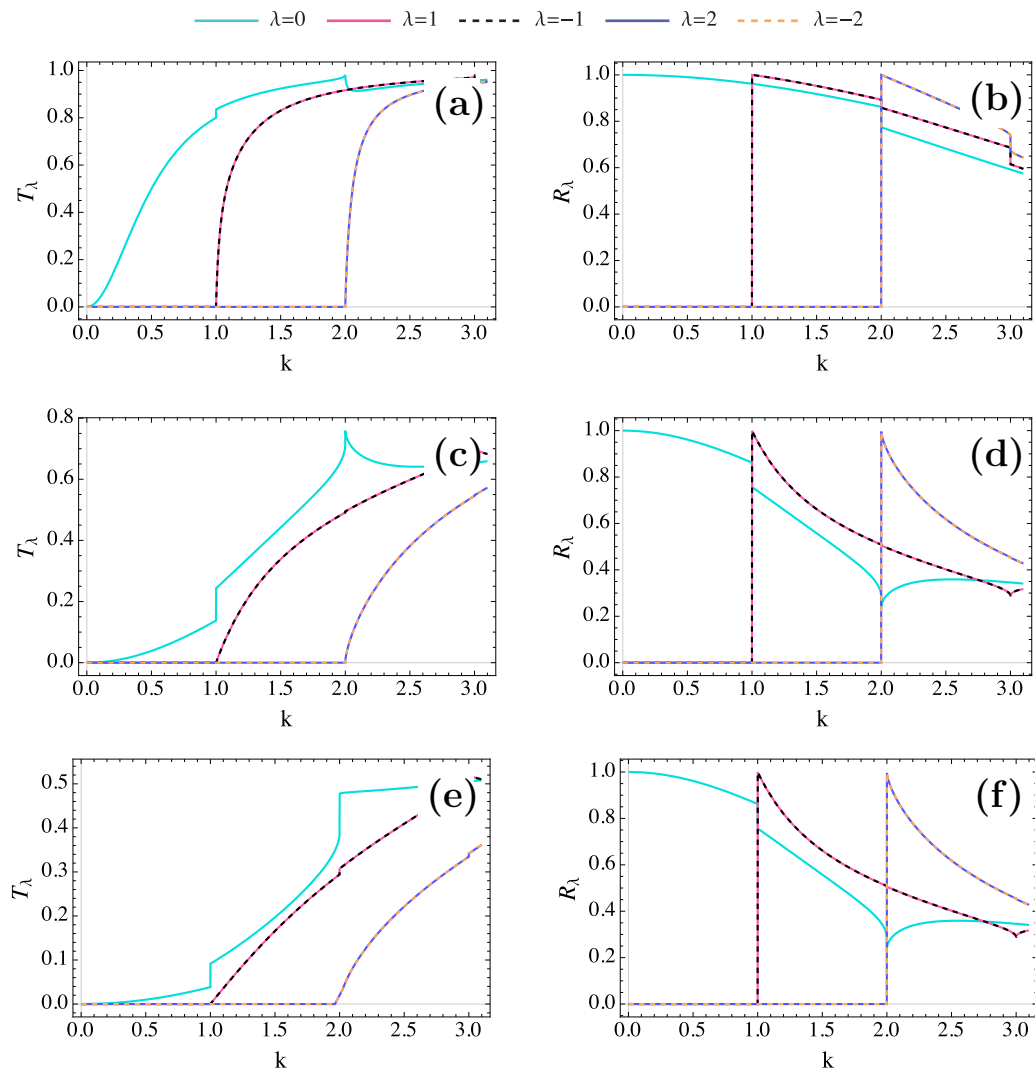


Figura 4.7: (a) Coeficiente de transmisión T_λ y (b) Coeficiente de reflexión R_λ para $\alpha = 1$, (c) Coeficiente de transmisión T_λ y (d) Coeficiente de reflexión R_λ para $\alpha = 5$, (e) Coeficiente de transmisión T_λ y (f) Coeficiente de reflexión R_λ para $\alpha = 10$ para los primeros 5 posibles canales incidentes, con una *flor de Dirac* con dos pétalos donde $p = 4$, $\gamma = 0$.

4.2. MODULACIÓN CON UNA FLOR DE DIRAC

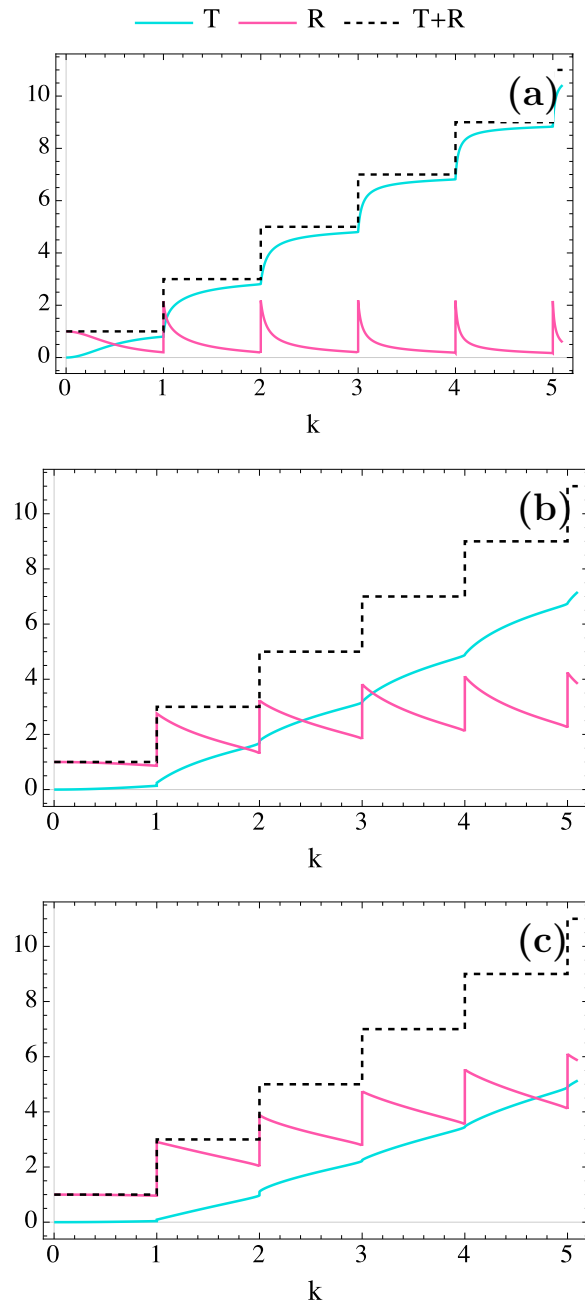


Figura 4.8: Coeficientes de transmisión y reflexión totales con (a) $\alpha = 1$, (b) $\alpha = 5$ y (c) $\alpha = 10$ para una *flor de Dirac* con dos pétalos $p = 4$, $\gamma = 0$.

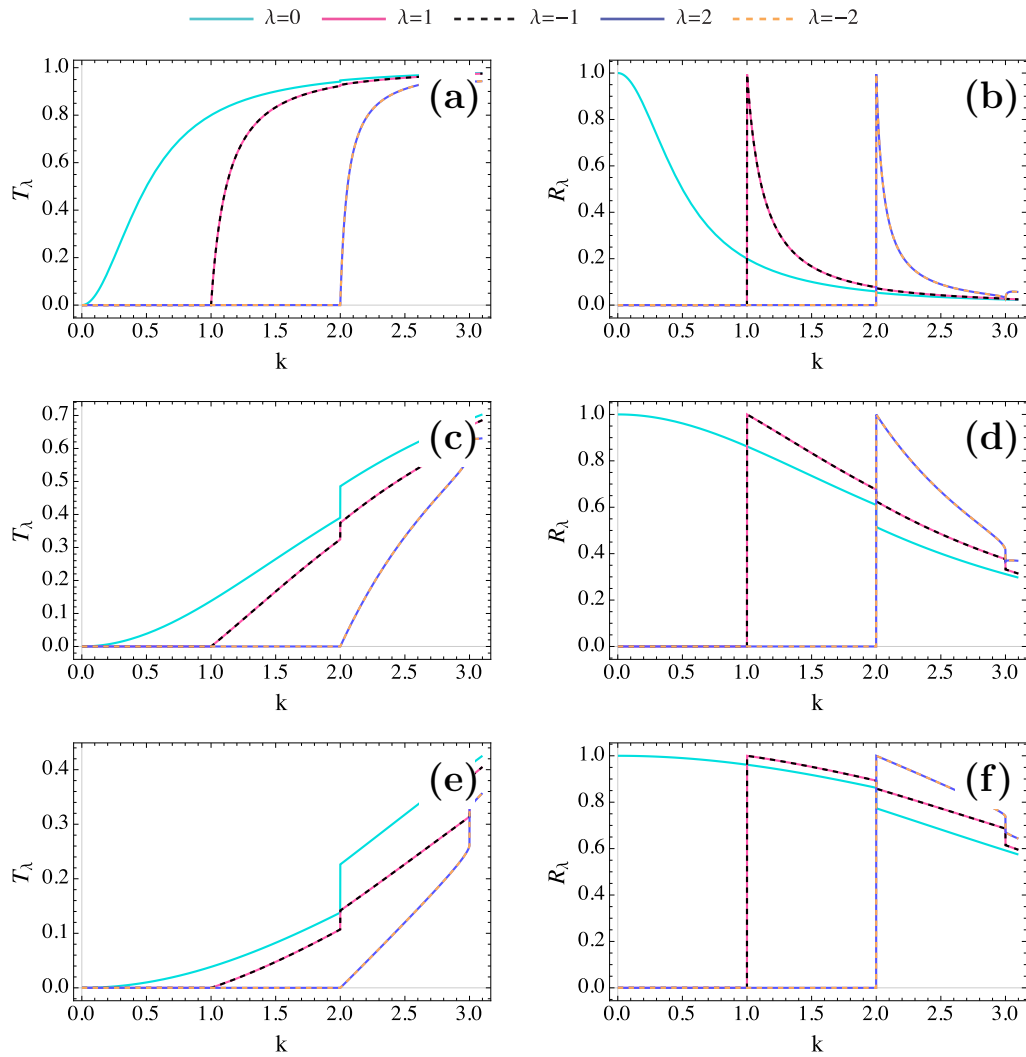


Figura 4.9: (a) Coeficiente de transmisión T_λ y (b) Coeficiente de reflexión R_λ para $\alpha = 1$, (c) Coeficiente de transmisión T_λ y (d) Coeficiente de reflexión R_λ para $\alpha = 5$, (e) Coeficiente de transmisión T_λ y (f) Coeficiente de reflexión R_λ para $\alpha = 10$ para los primeros 5 posibles canales conductores incidentes, con una *flor de Dirac* con cinco pétalos donde $p = 4$, $\gamma = 0$ y diferentes α .

4.2. MODULACIÓN CON UNA FLOR DE DIRAC

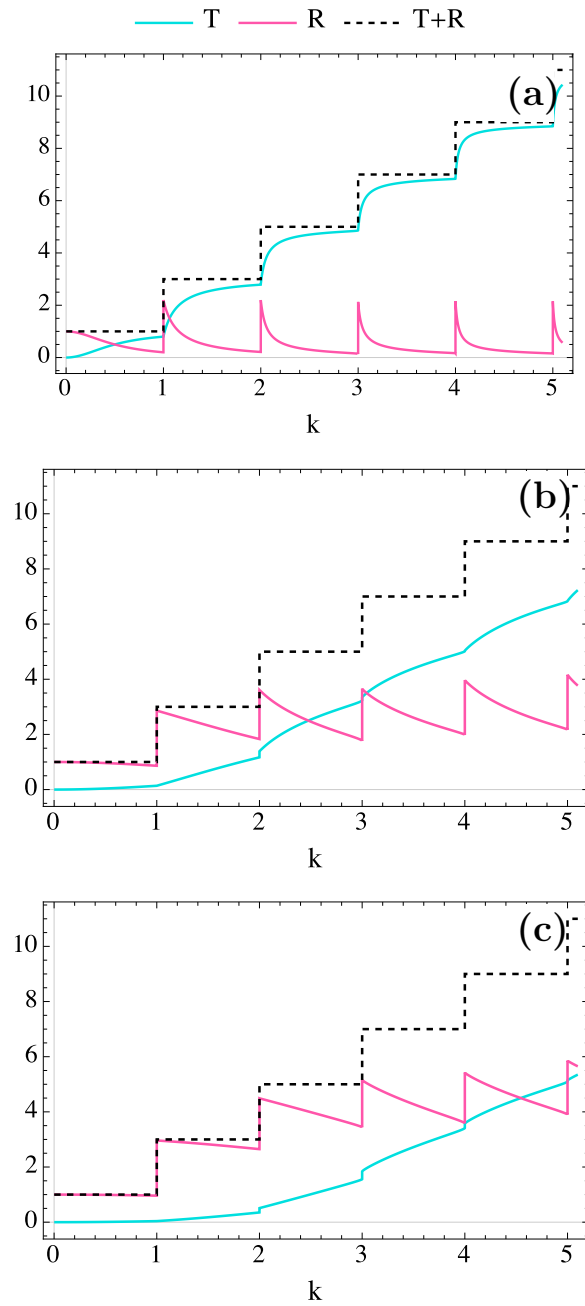


Figura 4.10: Coeficientes de transmisión y reflexión totales con (a) $\alpha = 1$, (b) $\alpha = 5$ y (c) $\alpha = 10$ para una *flor de Dirac* con cinco pétalos donde $p = 4$ y $\gamma = 0$.

4.3. Modulación con dos flores de Dirac

Ahora analicemos el caso donde el potencial tiene la forma

$$V(\varphi, z) = \begin{cases} \delta(z)w_1(\varphi) & z_0 = 0, \\ \delta(z - L)w_2(\varphi) & z_1 = L, \end{cases} \quad (4.31)$$

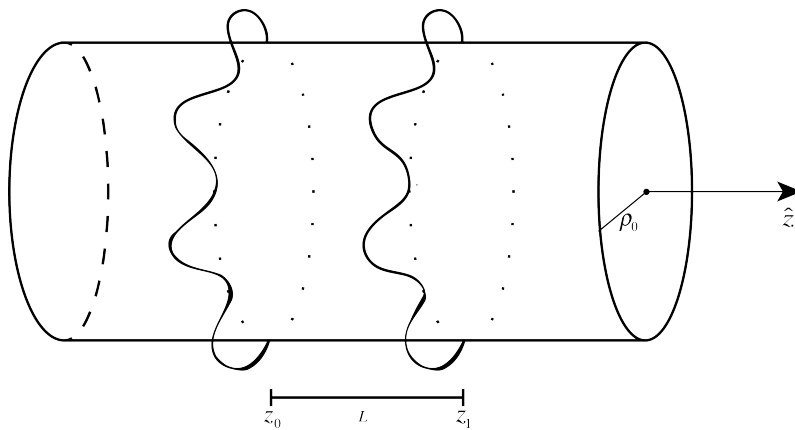


Figura 4.11: Dos barreras tipo flor de Dirac.

Siguiendo el mismo desarrollo que en la sección 4.1, podemos identificar tres regiones sobre la superficie del cilindro, figura 4.12; en la región I se tiene la onda incidente con momento angular λ y las ondas reflejadas por la primera barrera, en la región II las ondas que atravesaron la primera barrera y las ondas reflejadas por la segunda barrera, finalmente en la región III sólo se tienen las ondas que atravesaron la segunda barrera. De tal manera que las funciones de onda para cada región son

4.3. MODULACIÓN CON DOS FLORES DE DIRAC

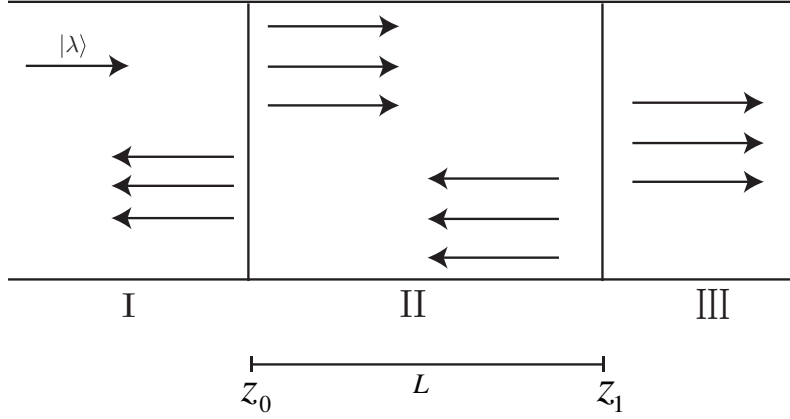


Figura 4.12: Regiones de dispersión sobre la superficie del cilindro en presencia de dos flores de Dirac.

Región I

$$\Psi_\lambda(\varphi, z < 0) = \langle \varphi | l \rangle e^{ik_\lambda z} + \sum_{l=-\infty}^{\infty} \langle \varphi | l \rangle e^{-ik_\lambda z} A_{l,\lambda}^{(-)} \quad (4.32)$$

Región II

$$\Psi_\lambda(\varphi, 0 < z < L) = \sum_{l=-\infty}^{\infty} \langle \varphi | l \rangle e^{ik_\lambda z} C_{l,\lambda}^{(+)} + \sum_{l=-\infty}^{\infty} \langle \varphi | l \rangle e^{-ik_\lambda z} C_{l,\lambda}^{(-)} \quad (4.33)$$

Región III

$$\Psi_\lambda(\varphi, z) = \sum_{l=-\infty}^{\infty} \langle \varphi | l \rangle e^{ik_\lambda z} B_{l,\lambda}^{(+)} \quad (4.34)$$

Al aplicar las condiciones de frontera (4.8) y (4.9) se tiene un sistema de 4 ecuaciones con 4 incógnitas, $A_{l,\lambda}^{(-)}$, $B_{l,\lambda}^{(+)}$, $C_{l,\lambda}^{(+)}$ y $C_{l,\lambda}^{(-)}$; y siguiendo el procedimiento completamente análogo al caso de una flor de Dirac, es decir, utilizamos el método de acoplamiento de modos (MMM) para reducir el sistema. Entonces, obtenemos que

$$- \sum_{l=-\infty}^{\infty} w_{m,l}^{(1)} A_{l,\lambda}^{(-)} + \sum_{l=-\infty}^{\infty} (2ik_m \delta_{m,l} - w_{m,l}^{(2)} e^{ik_l L}) e^{-ik_m L} B_{l,\lambda}^{(+)} = 2ik_m \delta_{m,\lambda} + w_{m,\lambda}^{(1)} \quad (4.35)$$

$$- \sum_{l=-\infty}^{\infty} (2ik_m \delta_{m,l} - w_{m,l}^{(1)}) A_{l,\lambda}^{(-)} + e^{ik_m L} \sum_{l=-\infty}^{\infty} w_{m,l}^{(2)} e^{ik_l L} B_{l,\lambda}^{(+)} = -w_{m,\lambda}^{(1)} \quad (4.36)$$

donde

$$\begin{aligned} w_{m,n}^{(1)} &= \alpha \frac{e^{i \frac{m-n}{q_1} \gamma_1}}{\left(\frac{m-n}{q_1}\right)^{2p} + 1}, \\ w_{m,n}^{(2)} &= \alpha \frac{e^{i \frac{m-n}{q_2} \gamma_2}}{\left(\frac{m-n}{q_2}\right)^{2p} + 1}, \end{aligned} \quad (4.37)$$

Las ecuaciones (4.35) y (4.36) se escribe en forma matricial como

$$\mathbb{M}_g |A_\lambda, B_\lambda\rangle = |V_\lambda\rangle, \quad (4.38)$$

donde \mathbb{M}_g es una matriz compuesta por 4 matrices diferentes

$$\mathbb{M}_g = \begin{pmatrix} -\mathbb{W}^{(1)} & \mathbb{M}_2 e^{-ik_m L} \\ -\mathbb{M}_1 & \mathbb{W}^{(2)} e^{ik_m L} \end{pmatrix}, \quad (4.39)$$

con

$$\begin{aligned} M_{1m,l} &= 2ik_m \delta_{m,l} - w_{m,l}^{(1)}, \\ M_{2m,l} &= 2ik_m \delta_{m,l} - w_{m,l}^{(2)}, \\ W_{m,l}^{(1)} &= w_{m,l}^{(1)}, \\ W^{(2)m,l} &= w_{m,l}^{(2)}. \end{aligned} \quad (4.40)$$

Estas ecuaciones representan un sistema infinito de ecuaciones lineales acopladas; el cual resolveremos numéricamente mediante un proceso de truncamiento similar al caso de un barrera, sección 4.1.

En este caso la matriz es un poco más compleja que la \mathbb{M} , compuesta por 4 matrices diferentes cuyos tamaños están determinados como en el caso anterior por la condición de

$$N_{max} = 2N_{cond} + 1. \quad (4.41)$$

4.3.1. Dos flores de Dirac en fase

En esta sección se presentan diferentes gráficas para el caso de tener las dos *Flores de Dirac* en fase, con $\gamma = 0$.

En las figuras 4.13, 4.15, 4.17 y 4.19, se observan las gráficas del coeficiente de transmisión T_λ para los primero cinco canales incidentes posibles considerando en cada caso que ambas flores tienen 2, 3, 4 y 5 pétalos, respectivamente; en todas las gráficas se observa que si se incide en alguno de los canales $\lambda = \pm 1$, $\lambda = \pm 2$, se tiene la misma probabilidad de transmisión y también el mismo momento angular, es decir, la quiralidad no se ve afectada en estos casos. Si observamos los coeficientes $w_{m,l}$ tenemos que para el caso de dos pétalos todos los canales están acoplados; conforme vamos aumentando el número de pétalos estos se van desacoplando. Por ejemplo, para energías pequeñas con tres pétalos se desacoplan los canales $\lambda = \pm 1$; con 4 pétalos están desacoplados $\lambda = \pm 1$ y $\lambda = \pm 2$; con 5 pétalos se tienen $\lambda = \pm 1$, $\lambda = \pm 2$ y $\lambda = \pm 3$ desacoplado y así sucesivamente. Al considerar las dos flores sobre la superficie del cilindro tenemos un acoplamiento efectivo, que está mayormente determinado por el acoplamiento de la primera flor. Esto último lo podemos observar a detalle en los casos de la figura 4.21, con 2 y 3 pétalos, y figura 4.23, con 5 y 2 pétalos. En la figura 4.21 todos los canales están acoplados, mientras que en la figura 4.23 se desacoplan los canales $\lambda = \pm 1$, $\lambda = \pm 2$ y $\lambda = \pm 3$. Además vemos que la probabilidad de transmitirse, si se incide en alguno de los canales $\lambda = \pm 1$, $\lambda = \pm 2$, sigue siendo la misma entre $|\lambda|$, así como la conservación de quiralidad para cada canal. En todos los casos vemos que cumplen con conservación de corriente, figuras 4.14, 4.16, 4.18, 4.20, 4.22 y 4.24.

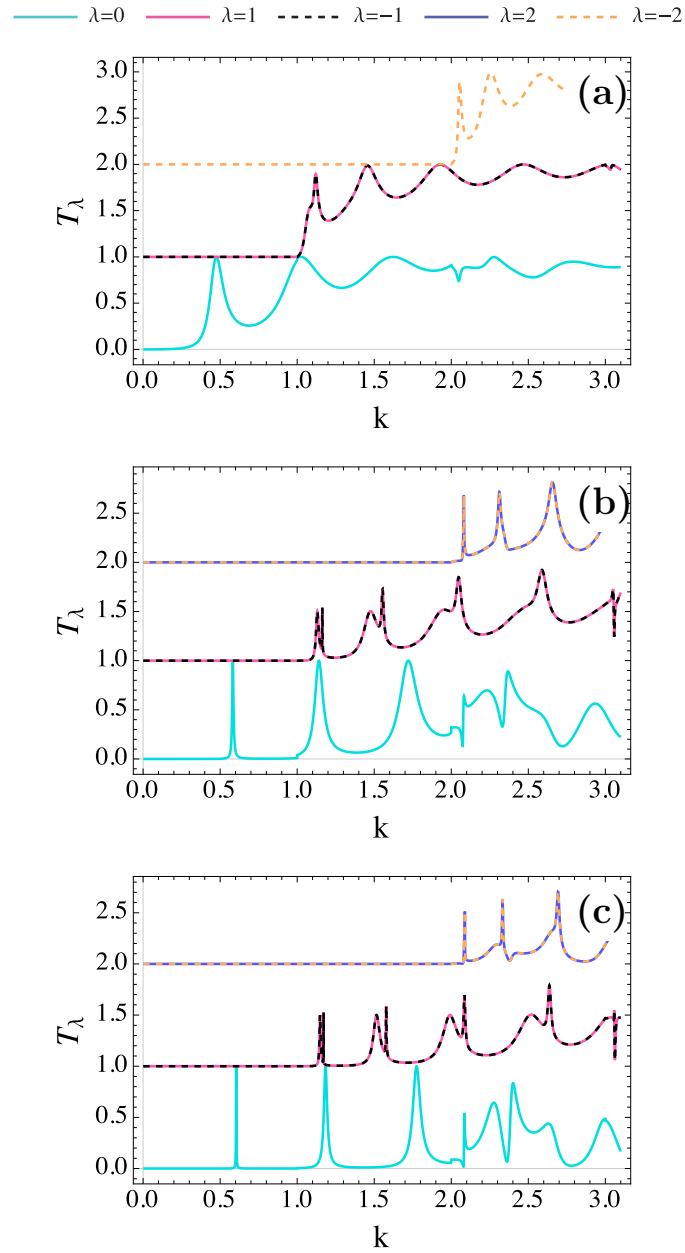


Figura 4.13: Coeficiente de transmisión T_λ con (a) $\alpha = 1$, (b) $\alpha = 5$ y (c) $\alpha = 10$ para los primeros 5 posibles canales conductores incidentes, con dos *flores de Dirac* con dos y dos pétalos respectivamente donde $p = 4$, $\gamma_1 = 0$, $\gamma_2 = 0$.

4.3. MODULACIÓN CON DOS FLORES DE DIRAC

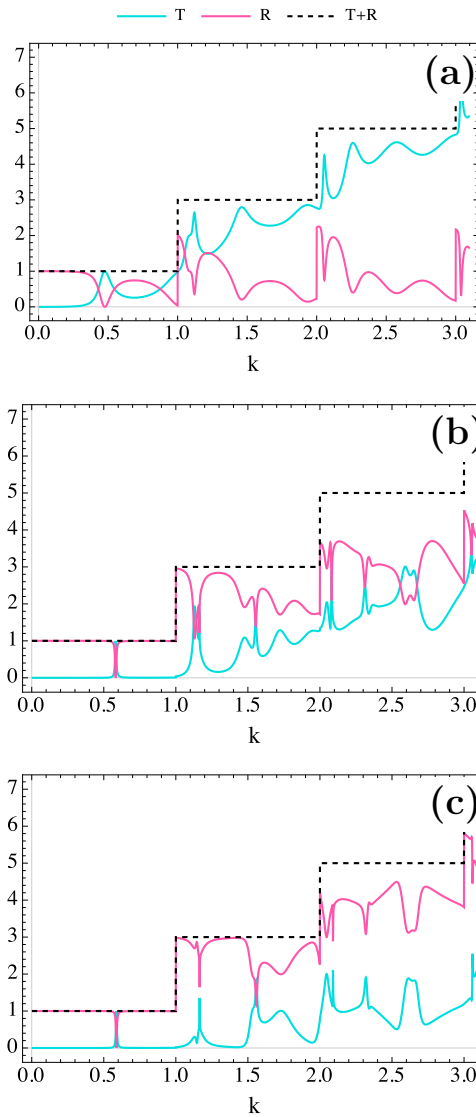


Figura 4.14: Coeficientes de transmisión y reflexión totales con (a) $\alpha = 1$, (b) $\alpha = 5$ y (c) $\alpha = 10$ para dos *flores de Dirac* con dos y dos pétalos respectivamente donde $p = 4$ y $\gamma_1 = 0$, $\gamma_2 = 0$.

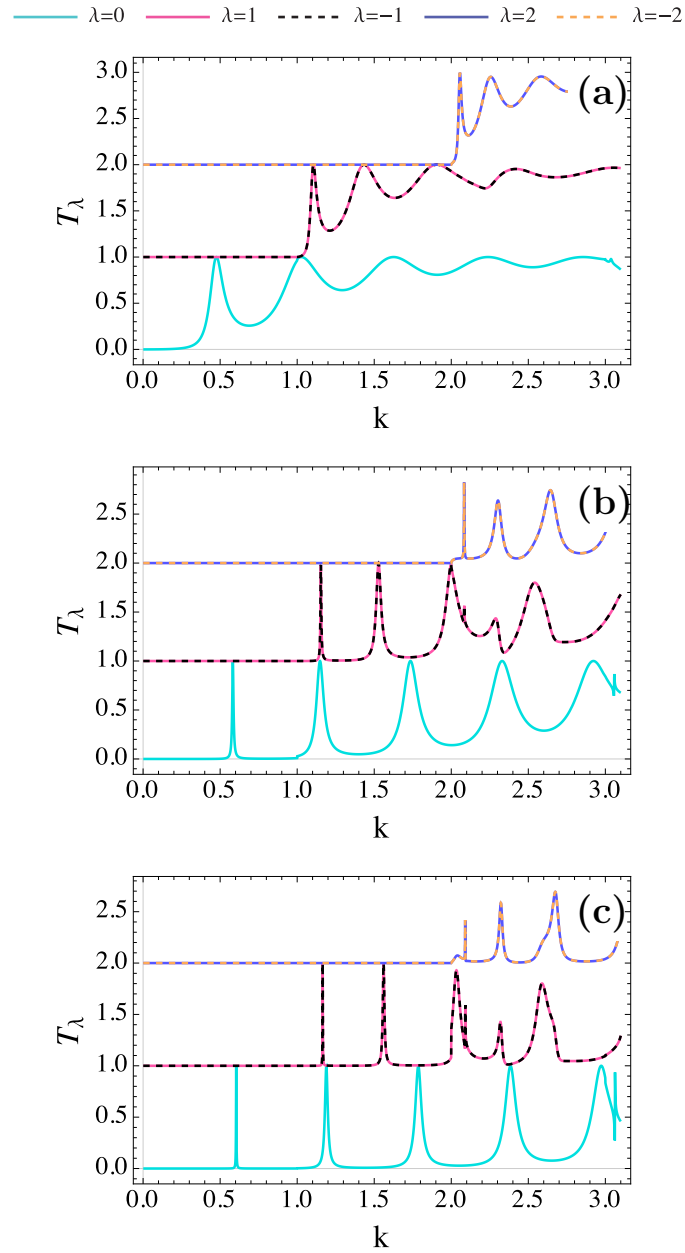


Figura 4.15: Coeficientes de transmisión T_λ con (a) $\alpha = 1$, (b) $\alpha = 5$ y (c) $\alpha = 10$ para los primeros 5 posibles canales conductores incidentes, con dos *flores de Dirac* con tres y tres pétalos respectivamente donde $p = 4$, $\gamma_1 = 0$, $\gamma_2 = 0$.

4.3. MODULACIÓN CON DOS FLORES DE DIRAC

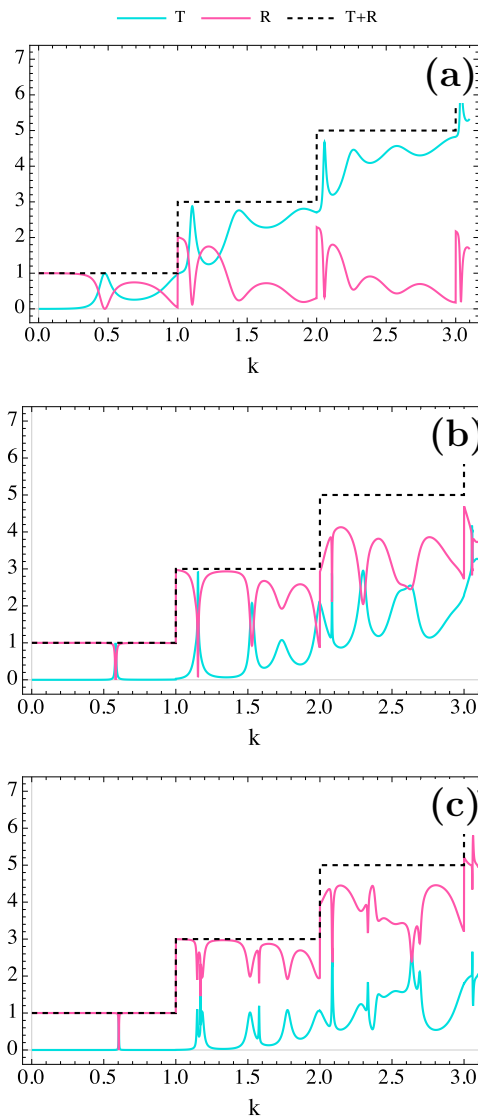


Figura 4.16: Coeficientes de transmisión y reflexión totales con (a) $\alpha = 1$, (b) $\alpha = 5$ y (c) $\alpha = 10$ para dos *flores de Dirac* con tres pétalos cada flor donde $p = 4$ y $\gamma_1 = 0$, $\gamma_2 = 0$.

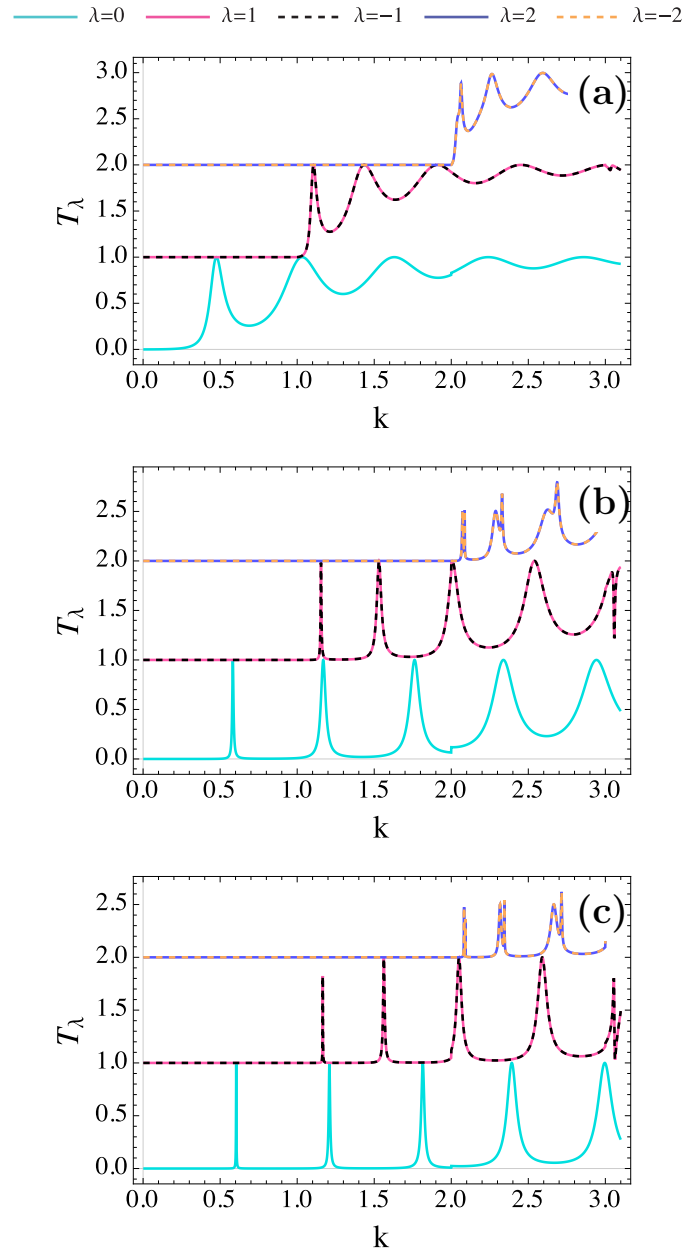


Figura 4.17: Coeficientes de transmisión T_λ con (a) $\alpha = 1$, (b) $\alpha = 5$ y (c) $\alpha = 10$ para los primeros 5 posibles canales conductores incidentes, con dos *flores de Dirac* con cuatro pétalos cada una, donde $p = 4$, $\gamma_1 = 0$, $\gamma_2 = 0$.

4.3. MODULACIÓN CON DOS FLORES DE DIRAC

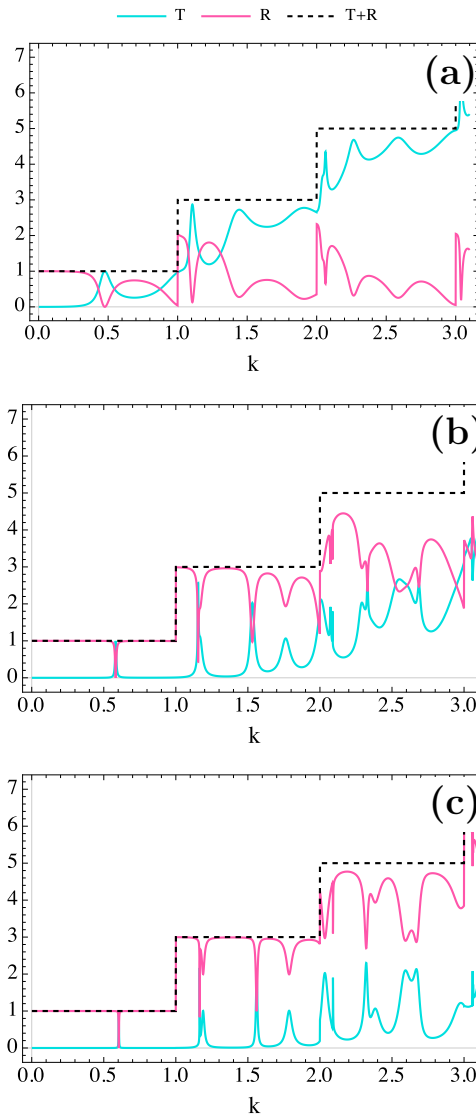


Figura 4.18: Coeficientes de transmisión y reflexión totales con (a) $\alpha = 1$, (b) $\alpha = 5$ y (c) $\alpha = 10$ para dos *flores de Dirac* con cuatro pétalos cada una, donde $p = 4$ y $\gamma_1 = 0$, $\gamma_2 = 0$.

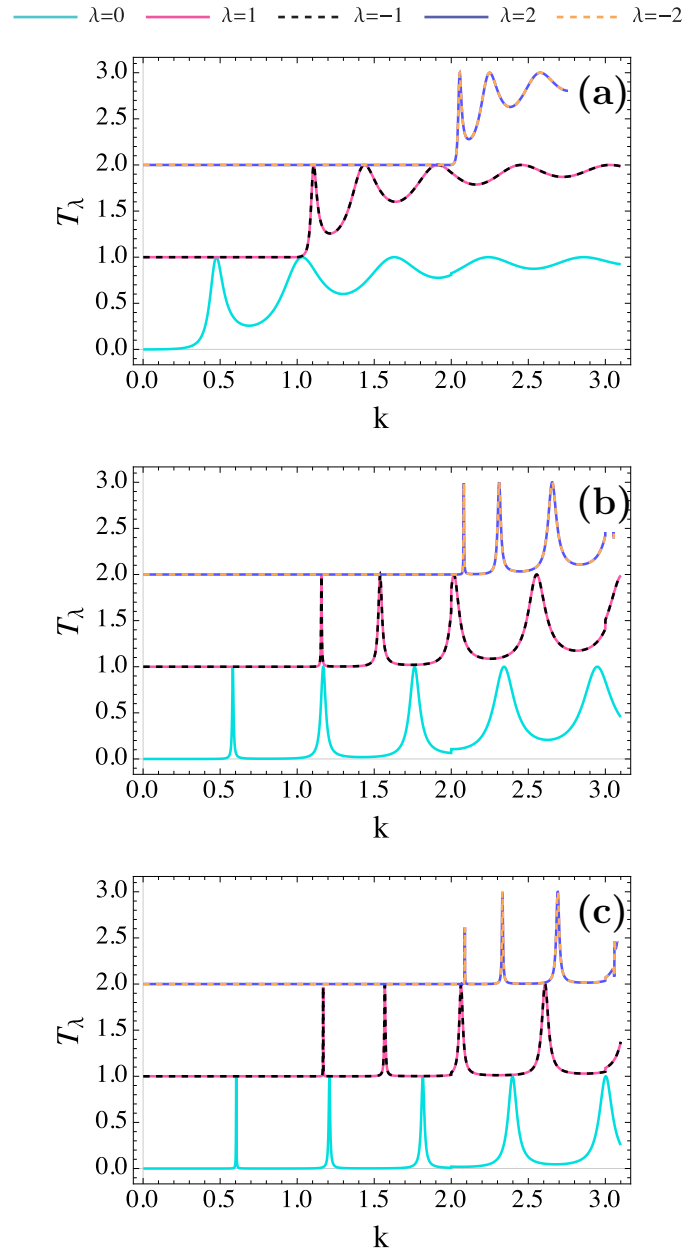


Figura 4.19: Coeficientes de transmisión T_λ con (a) $\alpha = 1$, (b) $\alpha = 5$ y (c) $\alpha = 10$ para los primeros 5 posibles canales conductores incidentes, con dos *flores de Dirac* con cinco cada una donde $p = 4$.

4.3. MODULACIÓN CON DOS FLORES DE DIRAC

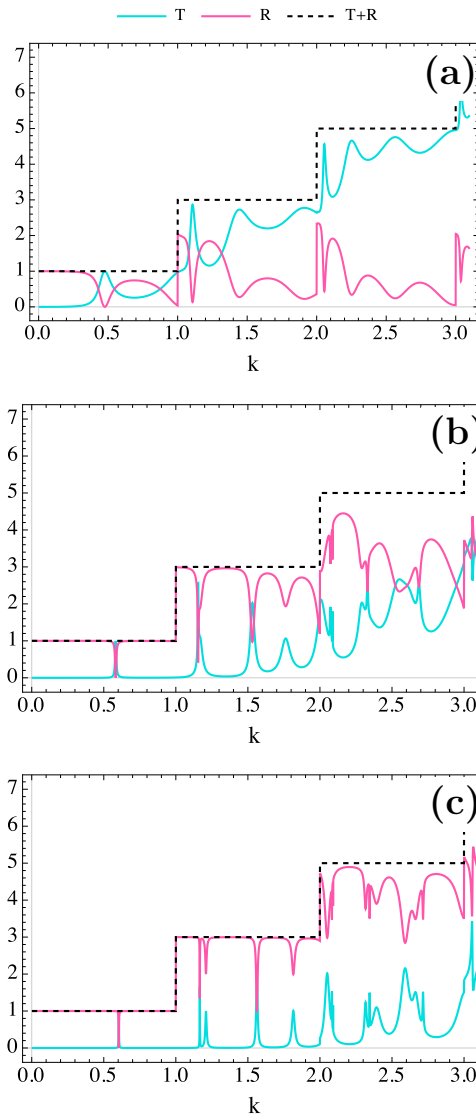


Figura 4.20: Coeficientes de transmisión y reflexión totales con (a) $\alpha = 1$, (b) $\alpha = 5$ y (c) $\alpha = 10$ para dos *flores de Dirac* cinco pétalos cada una, donde $p = 4$ y $\gamma_1 = 0$, $\gamma_2 = 0$.

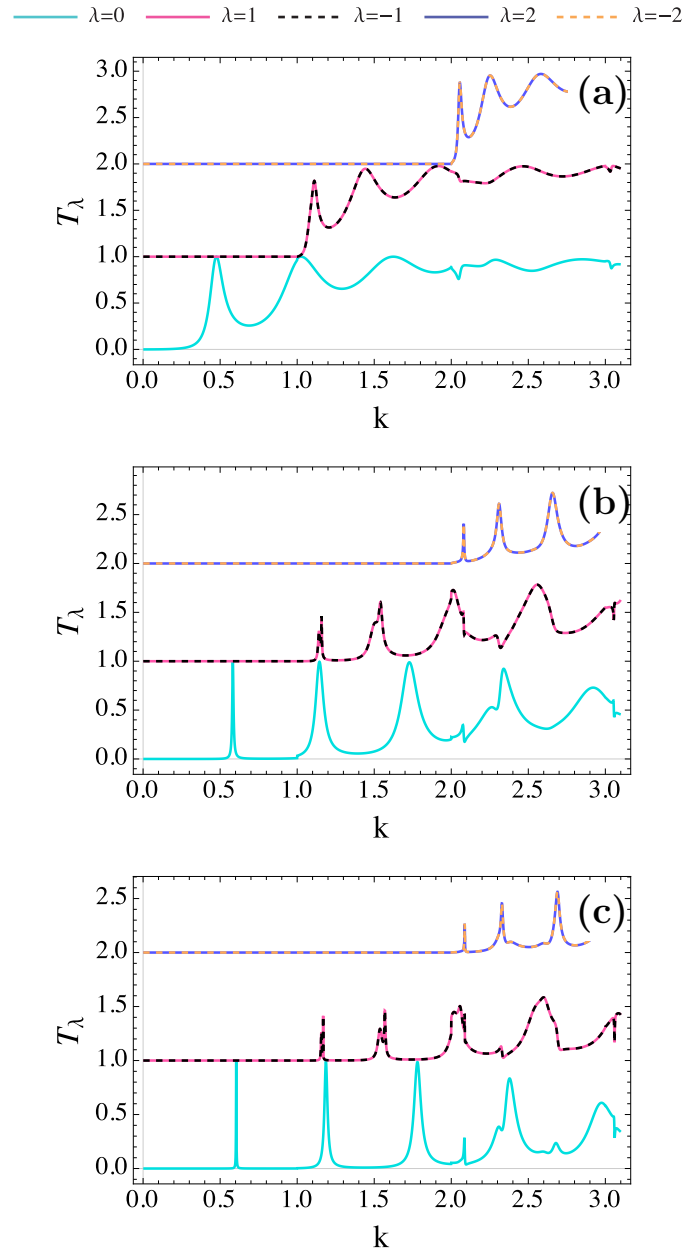


Figura 4.21: Coeficientes de transmisión T_λ con (a) $\alpha = 1$, (b) $\alpha = 5$ y (c) $\alpha = 10$ para los primeros 5 posibles canales conductores incidentes, con dos *flores de Dirac* con dos y tres pétalos respectivamente donde $p = 4$, $\gamma_1 = 0$, $\gamma_2 = 0$.

4.3. MODULACIÓN CON DOS FLORES DE DIRAC

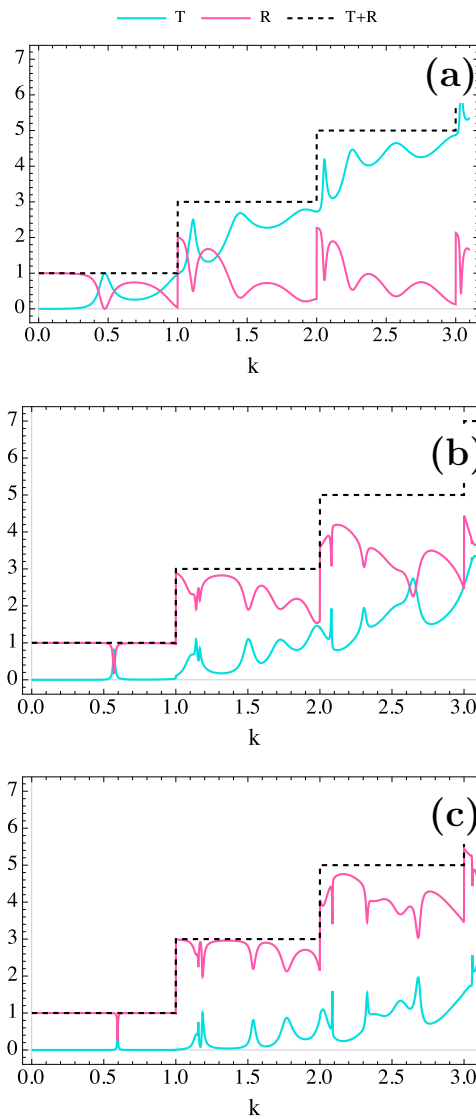


Figura 4.22: Coeficientes de transmisión y reflexión totales con (a) $\alpha = 1$, (b) $\alpha = 5$ y (c) $\alpha = 10$ para dos *flores de Dirac* con dos y tres pétalos respectivamente donde $p = 4$ y $\gamma_1 = 0$, $\gamma_2 = 0$.

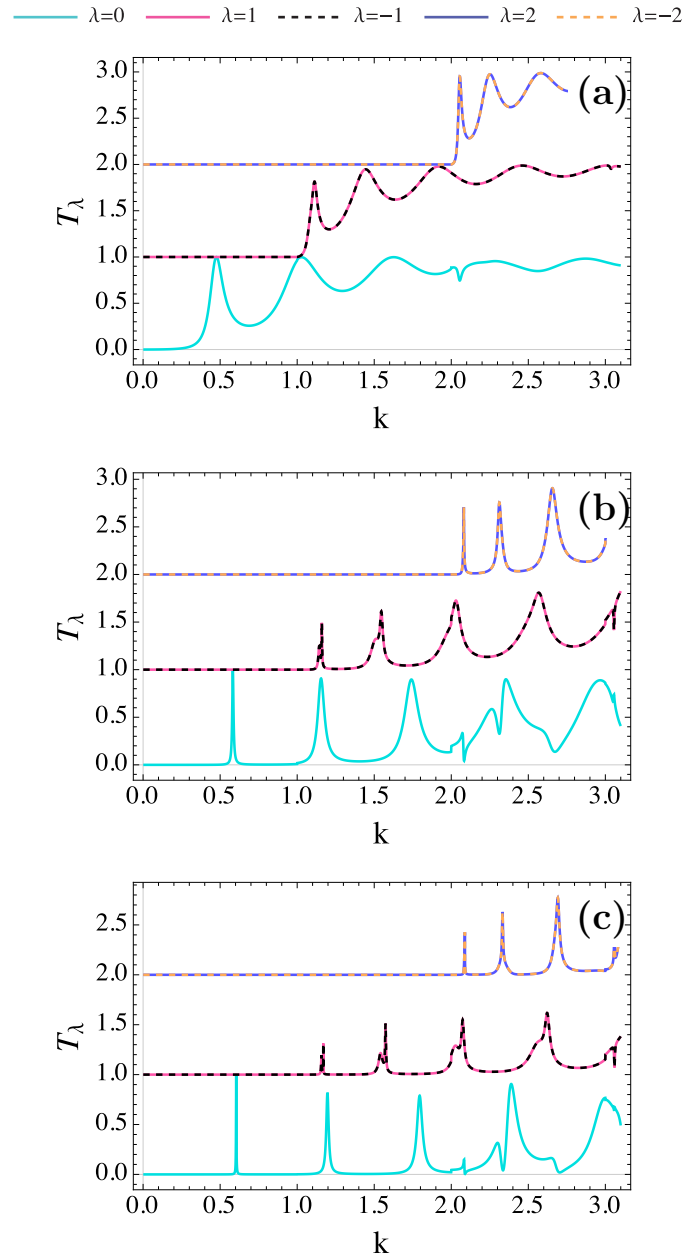


Figura 4.23: Coeficientes de transmisión T_λ con (a) $\alpha = 1$, (b) $\alpha = 5$ y (c) $\alpha = 10$ para los primeros 5 posibles canales conductores incidentes, con dos *flores de Dirac* con cinco y dos pétalos respectivamente donde $p = 4$, $\gamma_1 = 0$, $\gamma_2 = 0$ y diferentes α .

4.3. MODULACIÓN CON DOS FLORES DE DIRAC

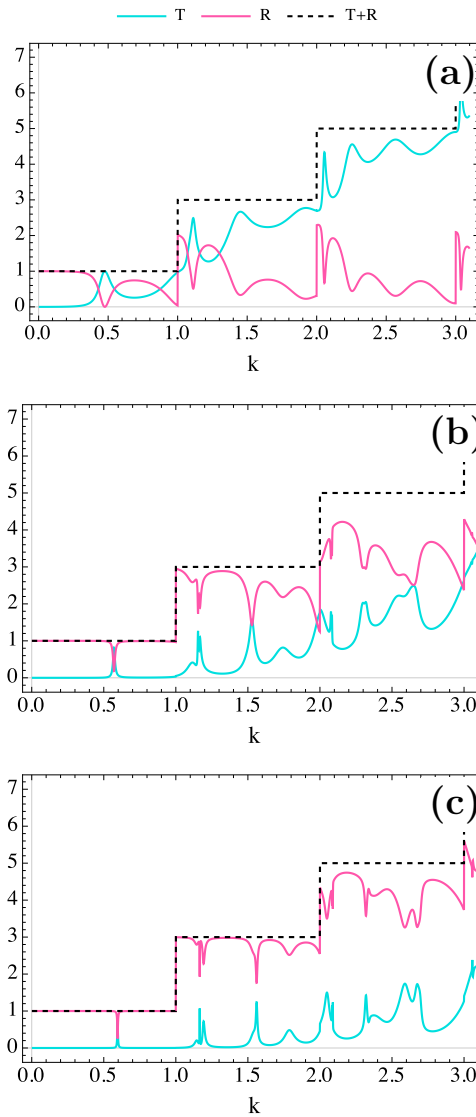


Figura 4.24: Coeficientes de transmisión y reflexión totales con (a) $\alpha = 1$, (b) $\alpha = 5$ y (c) $\alpha = 10$ para dos *flores de Dirac* con cinco y dos pétalos respectivamente donde $p = 4$ y $\gamma_1 = 0$, $\gamma_2 = 0$.

4.3.2. Dos flores de Dirac con desfase

En esta sección analizamos lo que ocurre entre los canales cuando agregamos un desfase entre las dos flores. Para ello, utilizamos los casos de la sección anterior, en todos la primera flor tiene $\gamma_1 = 0$; y para la segunda $\gamma_2 \neq 0$.

En las figuras 4.25 y 4.26 se consideran dos y tres pétalos en cada flor respectivamente, mientras que en la figura 4.29 la primera flor tiene 2 pétalos y la segunda 3 pétalos. En estos casos vemos que la probabilidad de transmitirse ya no es la misma entre los canales $\lambda = \pm 1$ y $\lambda = \pm 2$ cuando la segunda flor está desfasada. Este cambio en el coeficiente de transmisión también está relacionado con la quiralidad de cada canal, ya que el desfase de la segunda flor no cambia el acoplamiento entre los canales, pero si induce un cambio en el camino óptico de la partícula y por ende en las interferencias dadas entre las dos flores por las múltiples reflexiones. En este caso, tenemos nuevamente una situación similar a la de un interferómetro de Fabry-Pérot.

Conforme aumentamos el número de pétalos con sus respectivos desfases, vemos que el coeficiente de transmisión no cambia tanto, como en los casos anteriores, entre los canales $\lambda = \pm 1$ y $\lambda = \pm 2$. Esto se debe a que, como ya vimos entre mayor sea el número de pétalos del potencial, hay menos canales acoplados, debido a que el cambio inducido por el desfase de la segunda flor es menor. Especialmente en la figura 4.27 con 4 pétalos para cada flor, 4.28 con 5 pétalos para cada cada flor y 4.30 con 5 y 2 pétalos respectivamente, tenemos que los canales $\lambda = \pm 1$ y $\lambda = \pm 2$ están desacoplados completamente y por ello el desfase es despreciable dando lugar a un cambio mínimo en la quiralidad de cada par de canales.

4.3. MODULACIÓN CON DOS FLORES DE DIRAC

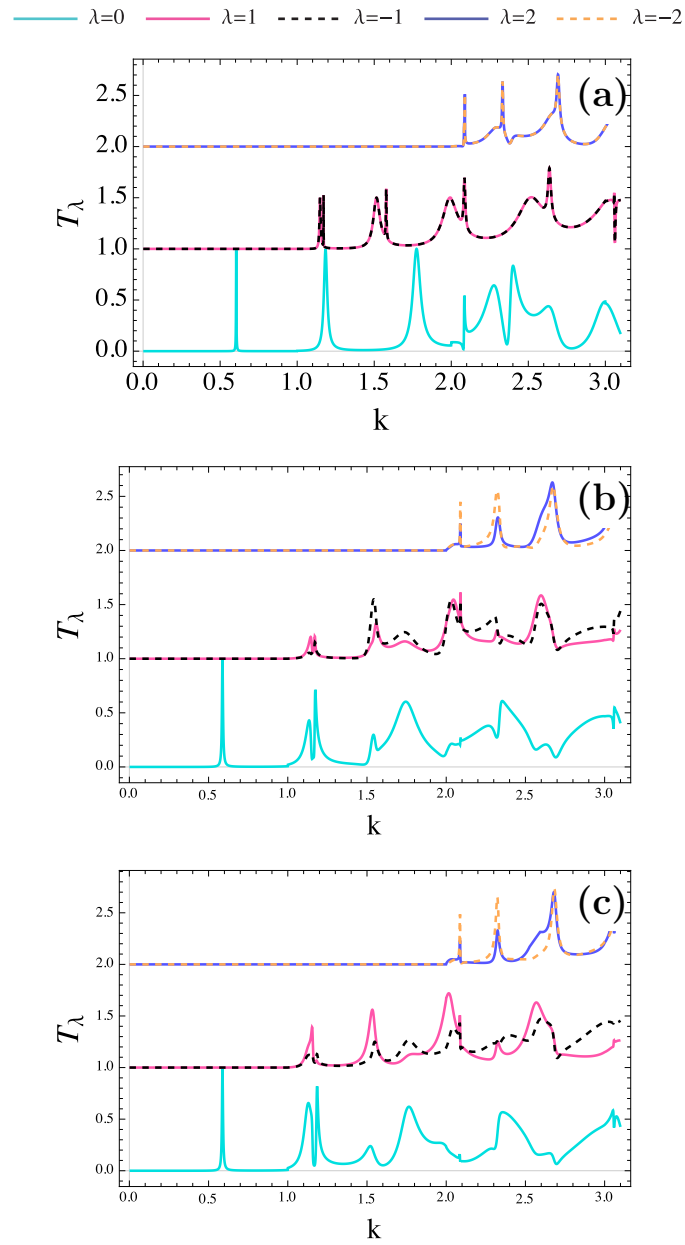


Figura 4.25: Coeficientes de transmisión T_λ con (a) $\gamma_2 = 0$, (b) $\gamma_2 = \pi/4$ y (c) $\gamma_2 = \pi/2$ para los primeros 5 posibles canales conductores incidentes, con dos *flores de Dirac* dos pétalos cada una donde $p = 4$, $\gamma_1 = 0$ y $\alpha = 10$.

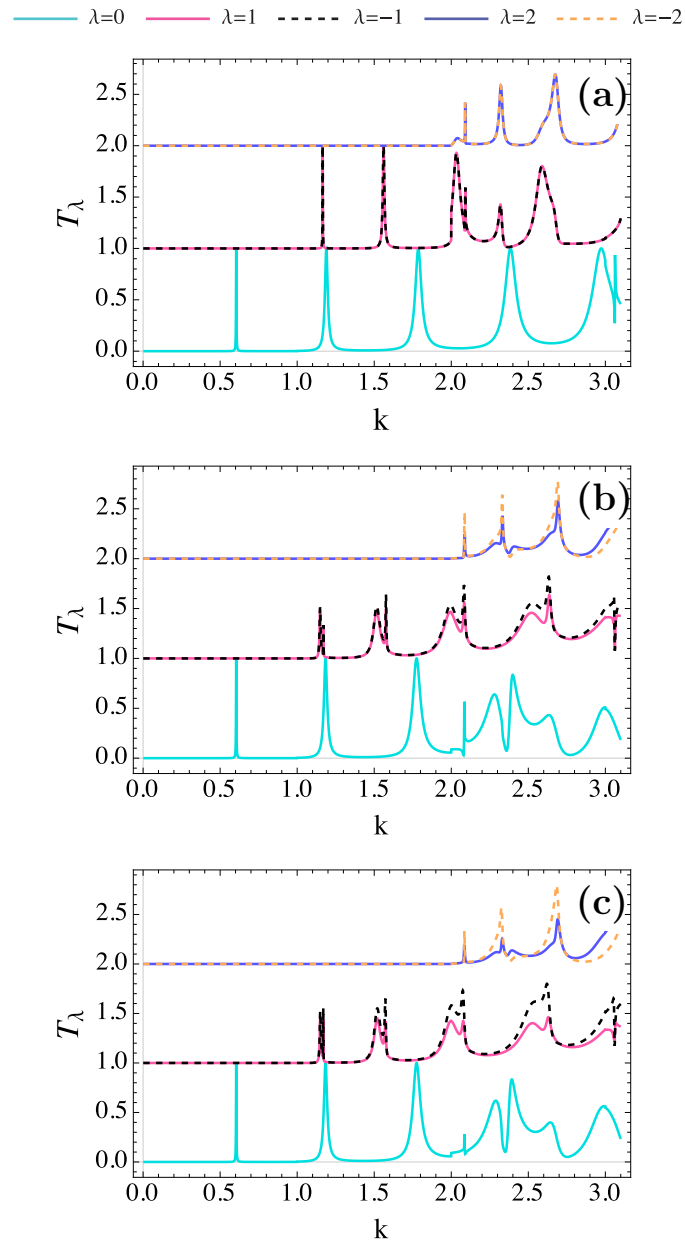


Figura 4.26: Coeficientes de transmisión T_λ (a) $\gamma_2 = 0$, (b) $\gamma_2 = \pi/3$ y (c) $\gamma_2 = \pi/6$ para los primeros 5 posibles canales conductores incidentes, con dos *flores de Dirac* con tres pétalos cada una, donde $p = 4$, $\gamma_1 = 0$ y $\alpha = 10$.

4.3. MODULACIÓN CON DOS FLORES DE DIRAC

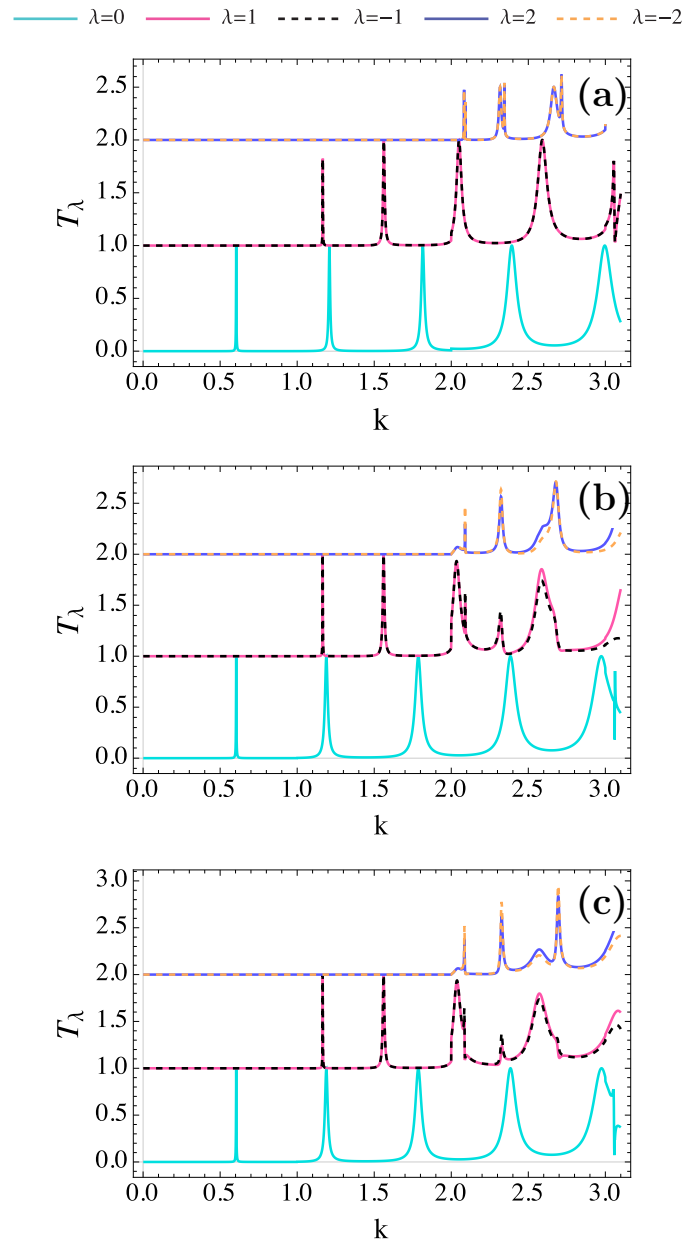


Figura 4.27: Coeficientes de transmisión T_λ (a) $\gamma_2 = 0$, (b) $\gamma_2 = \pi/4$ y (c) $\gamma_2 = 3\pi/4$ para los primeros 5 posibles canales conductores incidentes, con dos *flores de Dirac* con cuatro pétalos cada una, donde $p = 4$, $\gamma_1 = 0$ y $\alpha = 10$.

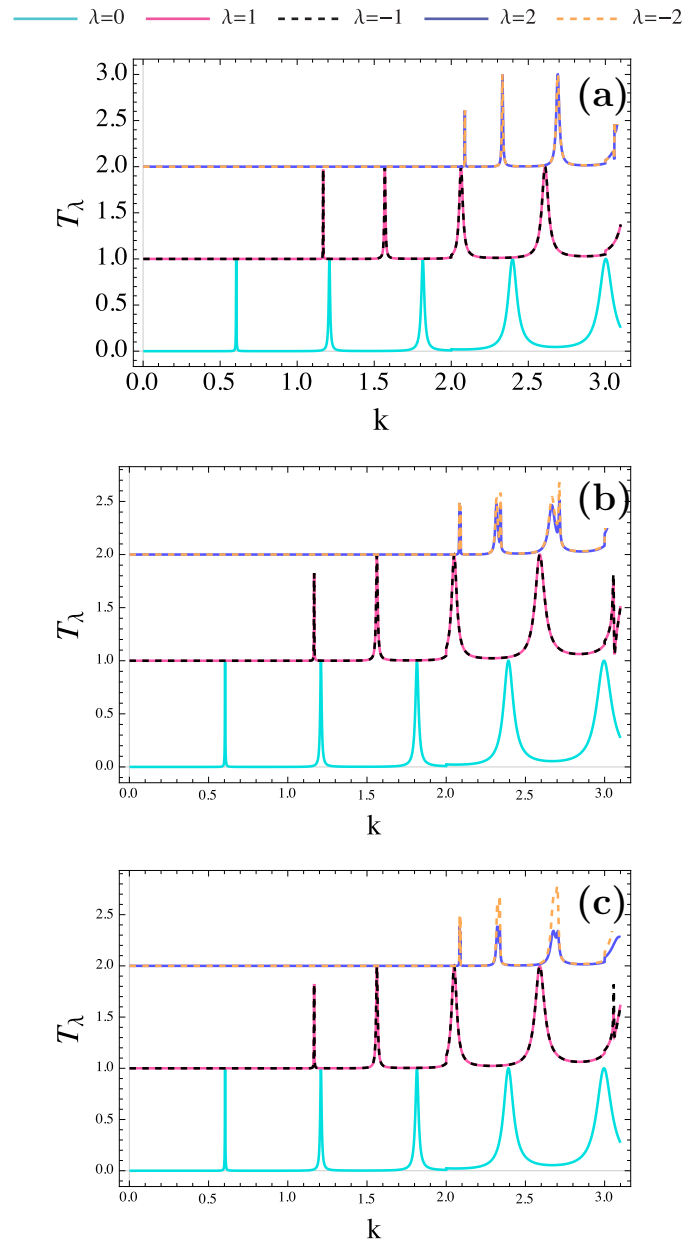


Figura 4.28: Coeficientes de transmisión T_λ (a) $\gamma_2 = 0$, (b) $\gamma_2 = 2\pi/10$ y (c) $\gamma_2 = 6\pi/10$ para los primeros 5 posibles canales conductores incidentes, con dos *flores de Dirac* cinco pétalos cada una, donde $p = 4$, $\gamma_1 = 0$ y $\alpha = 10$.

4.3. MODULACIÓN CON DOS FLORES DE DIRAC

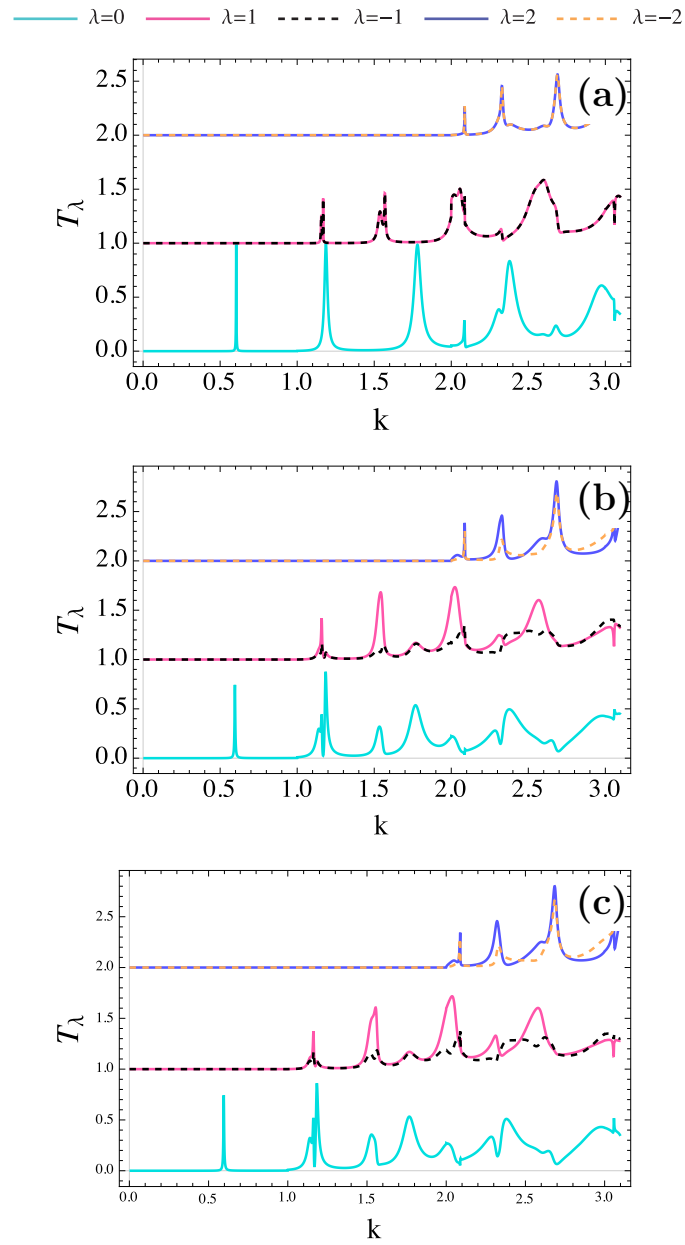


Figura 4.29: Coeficientes de transmisión T_λ (a) $\gamma_2 = 0$, (b) $\gamma_2 = \pi/3$ y (c) $\gamma_2 = \pi/2$ para los primeros 5 posibles canales conductores incidentes, con dos *flores de Dirac* con dos y tres pétalos respectivamente, donde $p = 4$, $\gamma_1 = 0$ y $\alpha = 10$.

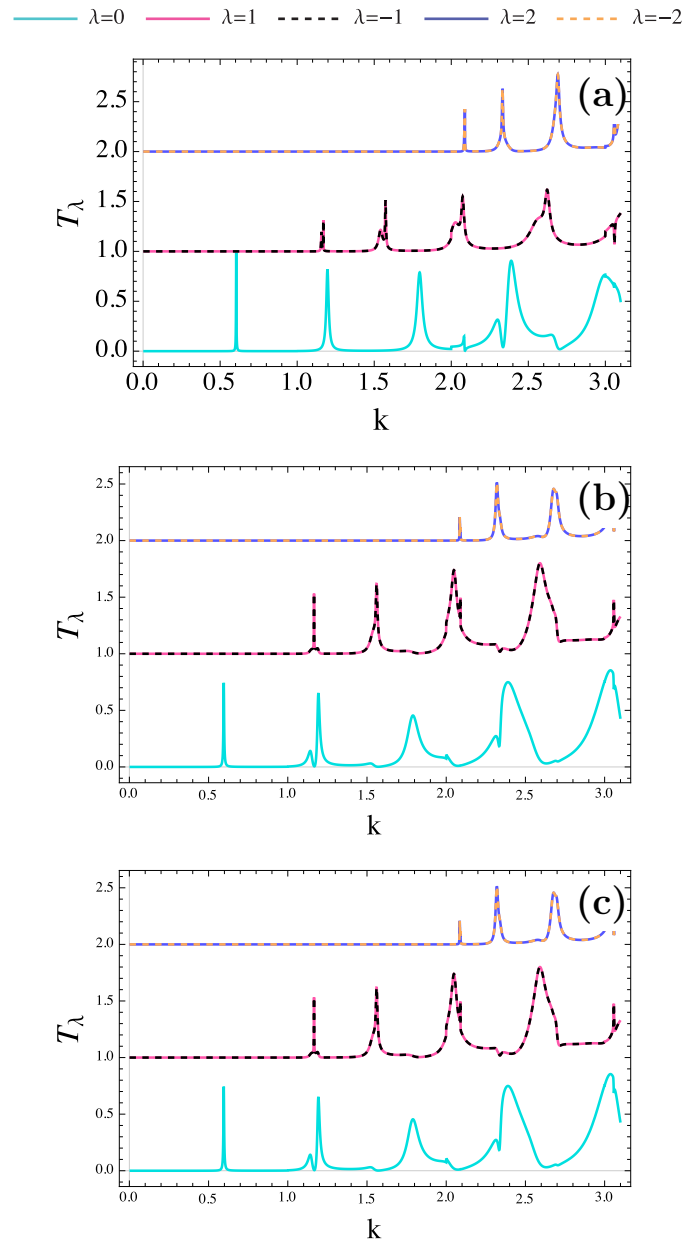


Figura 4.30: Coeficientes de transmisión T_λ (a) $\gamma_2 = 0$, (b) $\gamma_2 = \pi/4$ y (c) $\gamma_2 = \pi/2$ para los primeros 5 posibles canales conductores incidentes, con dos *flores de Dirac* con cinco y dos pétalos respectivamente donde $p = 4$, $\gamma_1 = 0$ y $\alpha = 10$.

4.3.3. Entropías

De manera similar al caso de la doble barrera delta de Dirac visto en capítulo 2, tenemos las entropías de reflexión, transmisión y la total. Las cuales en este caso están dadas como

$$S_{T_\lambda} = -T_\lambda \log_2 T_\lambda, \quad (4.42)$$

$$S_{R_\lambda} = -R_\lambda \log_2 R_\lambda, \quad (4.43)$$

y por lo tanto la entropía total

$$S_\lambda = S_{T_\lambda} + S_{R_\lambda}. \quad (4.44)$$

Vemos que ahora las entropías corresponden al posible canal incidente, considerando que puede ser dispersada a cualquier otro canal, figuras 4.31, 4.32, 4.33, 4.34, 4.35 y 4.36.

Es posible hacer un análisis similar al caso de la doble barrera Delta en una dimensión, comparando la entropía y el coeficiente de transmisión; sólo que en este caso se comparan S_λ y T_λ . En la figuras 4.37 y 4.38 se observan estas gráficas para el caso $\lambda = 0$, para dos flores de Dirac con dos pétalos cada una y $p = 4$, $\gamma_1 = \gamma_2 = 0$, $\alpha = 1$; se puede apreciar que el comportamiento es similar al caso en una dimensión. Cuando S_λ tiene un mínimo, T_λ tiene un máximo; además, los máximos en la entropía ocurren cuando $T_\lambda = 1/2$

Si aumentamos la opacidad de la delta, ahora consideramos $\alpha = 10$, figura 4.38; en este caso si la transmisión se encuentra por debajo de $1/2$ ya no se cumple que los mínimos S_λ corresponden a máximos de T_λ .

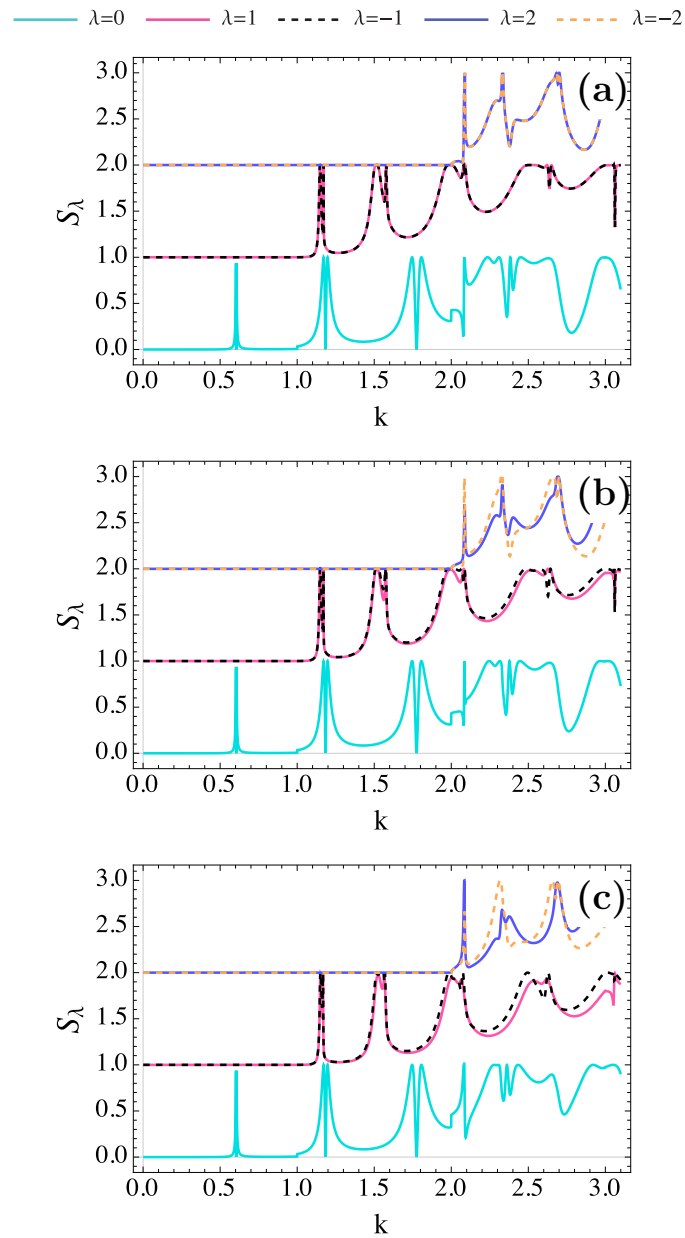


Figura 4.31: Entropías S_λ con (a) $\gamma_2 = 0$, (b) $\gamma_2 = \pi/4$ y (c) $\gamma_2 = \pi/2$ para los primeros 5 posibles canales conductores incidentes, con dos *flores de Dirac* con dos pétalos cada una, donde $p = 4$, $\gamma_1 = 0$, $\alpha = 10$.

4.3. MODULACIÓN CON DOS FLORES DE DIRAC

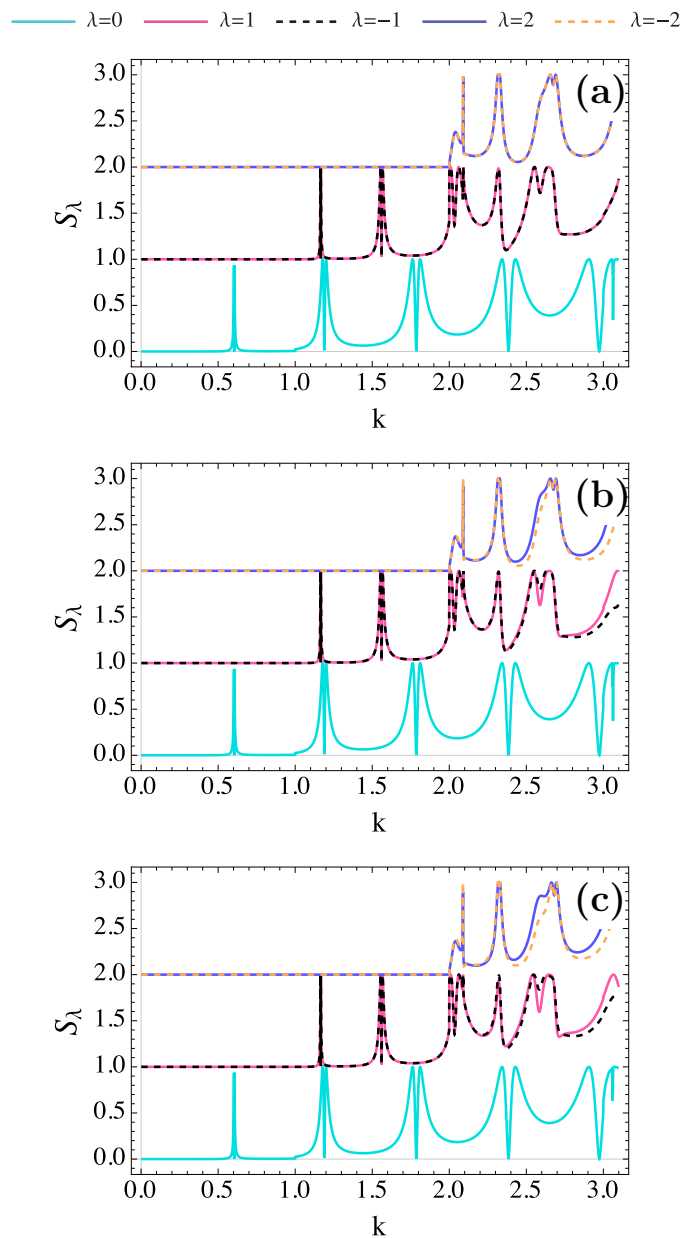


Figura 4.32: Entropías S_λ con (a) $\gamma_2 = 0$, (b) $\gamma_2 = \pi/6$ y (c) $\gamma_2 = \pi/3$ para los primeros 5 posibles canales conductores incidentes, con dos *flores de Dirac* con tres pétalos cada una, donde $p = 4$, $\gamma_1 = 0$, $\alpha = 10$.

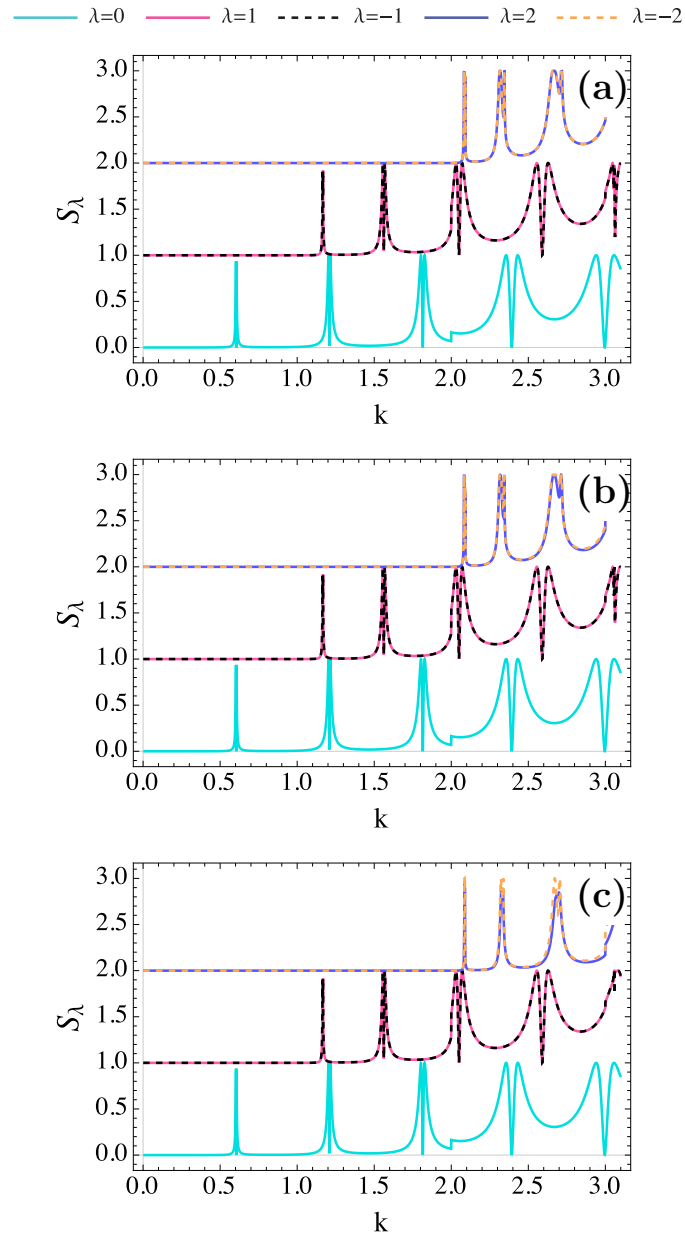


Figura 4.33: Entropías S_λ con (a) $\gamma_2 = 0$, (b) $\gamma_2 = \pi/4$ y (c) $\gamma_2 = 3\pi/4$ para los primeros 5 posibles canales conductores incidentes, con dos *flores de Dirac* con cuatro pétalos cada una, donde $p = 4$, $\gamma_1 = 0$, $\alpha = 10$.

4.3. MODULACIÓN CON DOS FLORES DE DIRAC

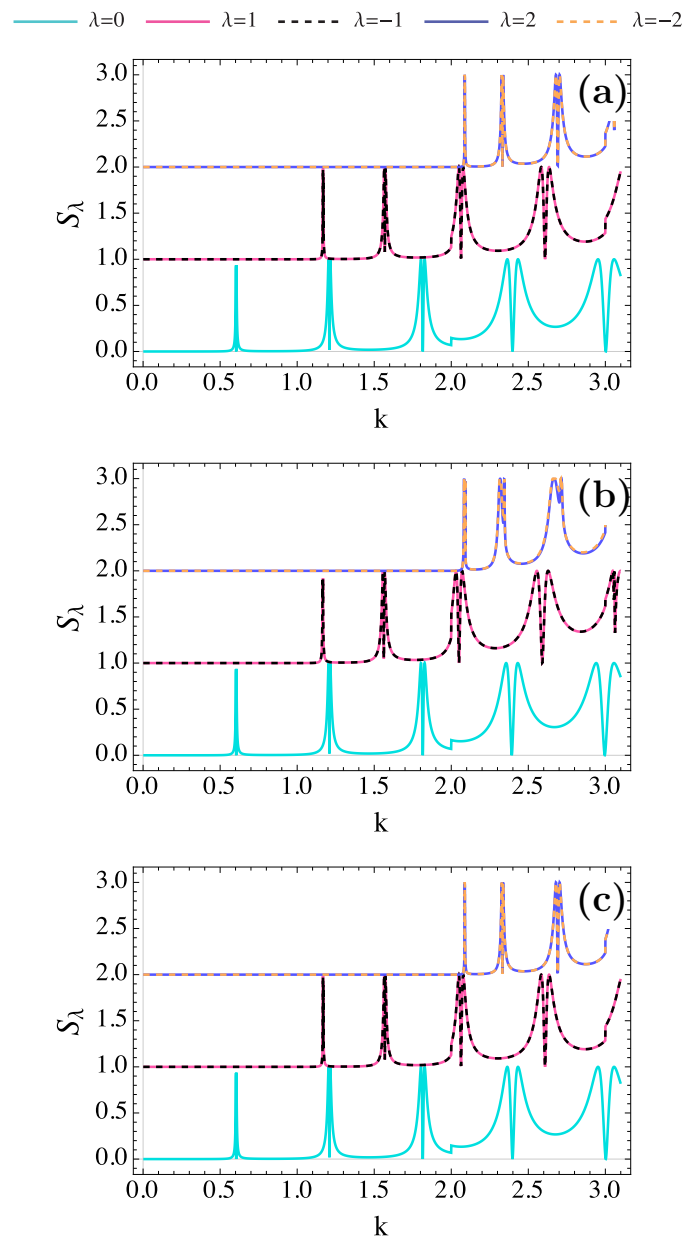


Figura 4.34: Entropías S_λ con (a) $\gamma_2 = 0$, (b) $\gamma_2 = 2\pi/10$ y (c) $\gamma_2 = 6\pi/10$ para los primeros 5 posibles canales conductores incidentes, con dos *flores de Dirac* con dos pétalos cada una, donde $p = 4$, $\gamma_1 = 0$, $\alpha = 10$.

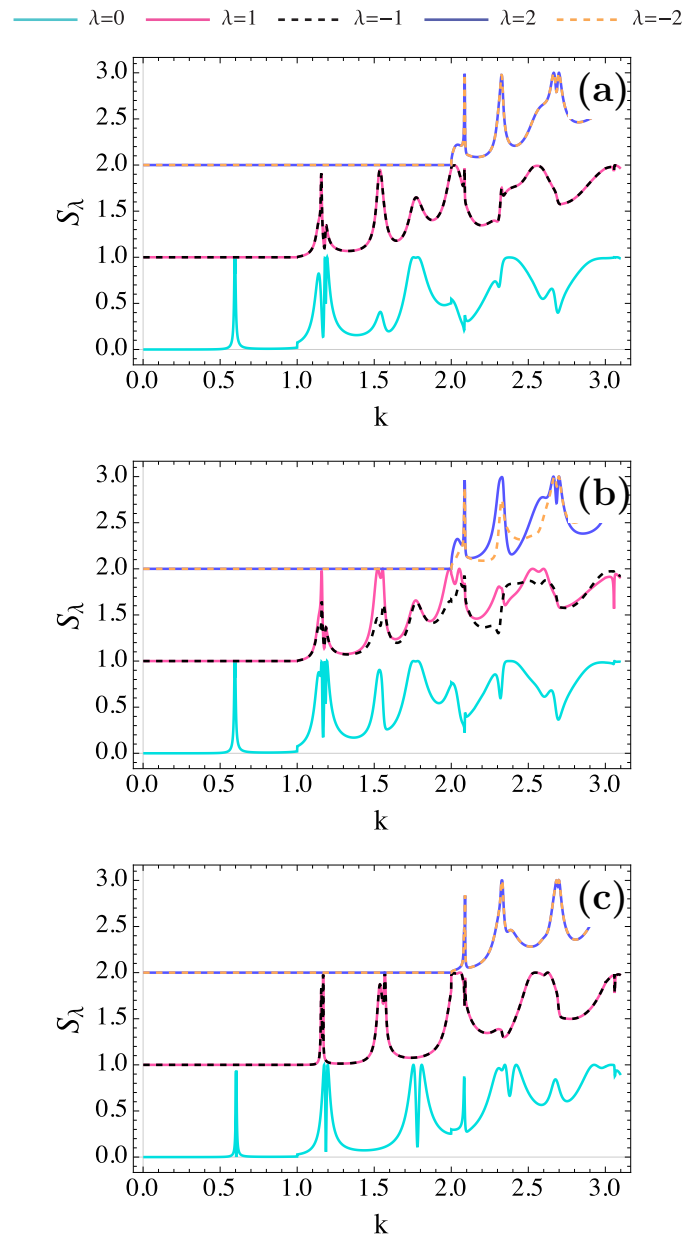


Figura 4.35: Entropías S_λ con (a) $\gamma_2 = 0$, (b) $\gamma_2 = \pi/3$ y (c) $\gamma_2 = \pi/2$ para los primeros 5 posibles canales conductores incidentes, con dos *flores de Dirac* con dos y tres pétalos respectivamente, donde $p = 4$, $\gamma_1 = 0$, $\alpha = 10$.

4.3. MODULACIÓN CON DOS FLORES DE DIRAC

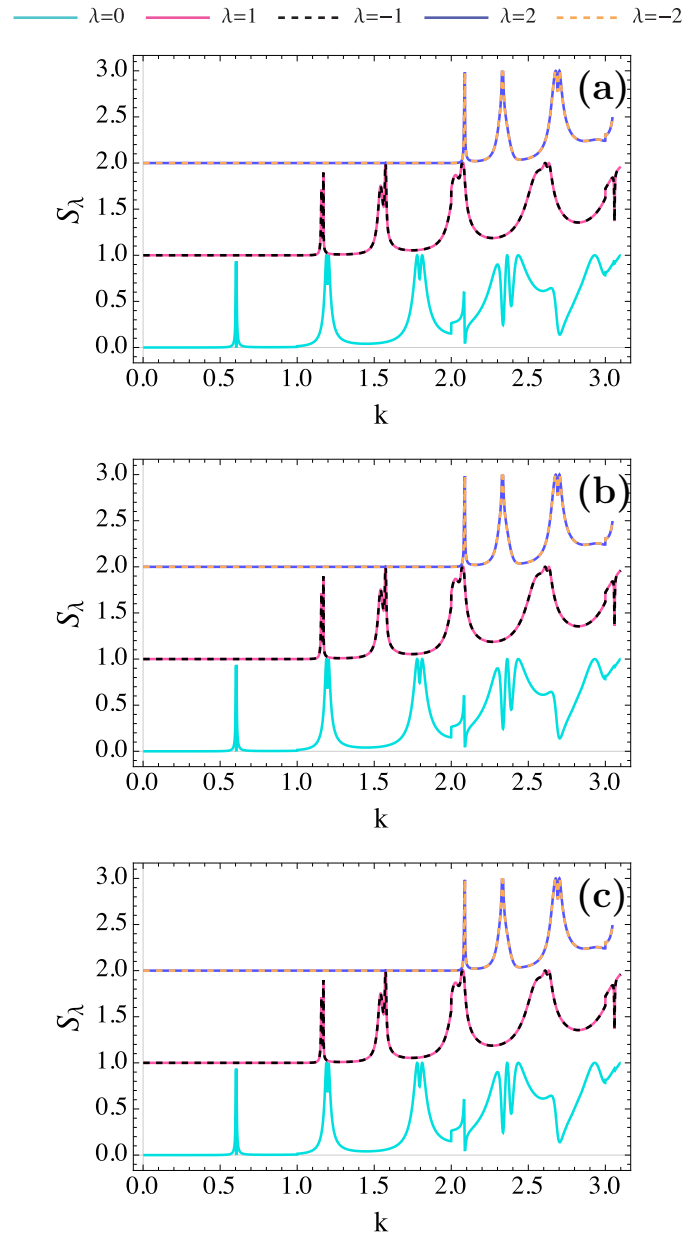


Figura 4.36: Entropías S_λ con (a) $\gamma_2 = 0$, (b) $\gamma_2 = \pi/4$ y (c) $\gamma_2 = \pi/2$ para los primeros 5 posibles canales conductores incidentes, con dos *flores de Dirac* con cinco y dos pétalos respectivamente, donde $p = 4$, $\gamma_1 = 0$, $\alpha = 10$.

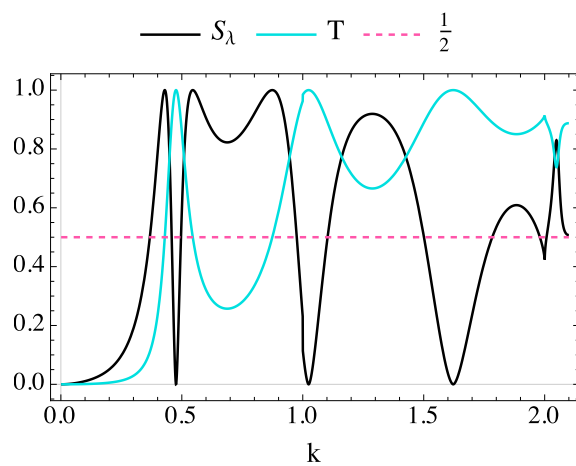


Figura 4.37: Comparación de S_λ y T_λ para la $\lambda = 0$ con dos *flores de Dirac* con dos pétalos cada una, donde $p = 4$, $\gamma_1 = 0$, $\alpha = 1$.

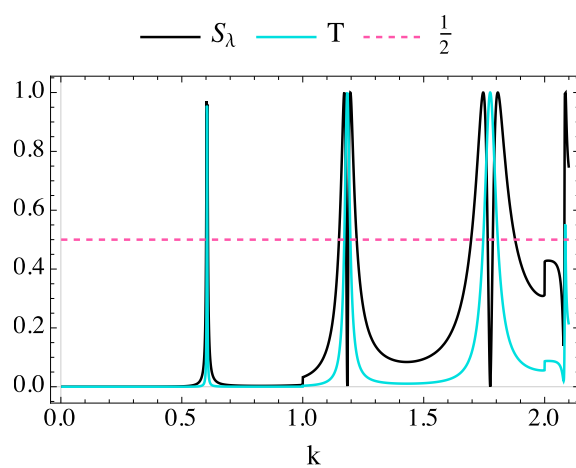


Figura 4.38: Comparación de S_λ y T_λ para la $\lambda = 0$ con dos *flores de Dirac* con dos pétalos cada una, donde $p = 4$, $\gamma_1 = 0$, $\alpha = 10$.

Capítulo 5

Conclusiones y perspectivas

Los sistemas mesoscópicos son ideales para estudiar el transporte electrónico cuántico, su estudio ha permitido importantes avances científicos y tecnológicos que en general reflejan los llamados efectos de cuantización por tamaño. En este trabajo hemos estudiado el transporte cuántico en modelos particulares de sistemas mesoscópicos de una y dos dimensiones.

En el caso unidimensional, estudiamos la propagación cuántica de un electrón a lo largo de una línea recta para dos modelos particulares, en los cuales el potencial de dispersión es una o dos barreras, tipo delta de Dirac, respectivamente. La gran ventaja de estos modelos es que todos los cálculos son analíticos. Se obtuvo la función de onda, los coeficientes de transmisión y reflexión, así como también el tiempo de retardo de Wigner y los tiempos de reflexión, transmisión y estadía. Además, se calculó la entropía binaria de Shannon y se introdujo el concepto generalizado de longitudes de dispersión.

El caso con dos deltas convino interpretarlo como un pozo de potencial opaco que, al no ser infinito, permite transmisión y reflexión de tal forma que da origen a estados *cuasi-ligados*, también llamados *resonantes*, los cuales ocurren para ciertas energías. La firma particular de estos estados es que cerca de las energías resonantes el coeficiente de transmisión $T \rightarrow 1$. En este caso, el tiempo de retardo de Wigner tiene máximos que se relacionan con los de la densidad de estados; es decir, en resonancia la partícula tiene un mayor retardo pues explora un mayor número de estados.

CAPÍTULO 3.

También calculamos los tiempos de transmisión, reflexión y estadía. Observamos que cuando el coeficiente de reflexión $R = 0$, el tiempo de reflexión tiende a infinito y por lo tanto los tiempos de transmisión y estadía son iguales entre sí, tendiendo a su valor mínimo; cuando el coeficiente de reflexión $R = 1$, el tiempo de transmisión tiende a infinito y por lo tanto los tiempos de reflexión y estadía son iguales entre sí que, además tienden también a su valor mínimo.

También estudiamos la entropía binaria de Shannon para los modelos unidimensionales; la calculamos usando los coeficientes de transmisión y reflexión. Observamos que los mínimos de esta entropía coinciden con los máximos del coeficiente de transmisión. En base a nuestros resultados, se dio una nueva interpretación de esta entropía, para lo cual se introdujo el concepto de longitudes de dispersión; dado esto, se interpreta ahora a la entropía como una *longitud recíproca media de dispersión*, la cual está en correspondencia con la interpretación de la entropía como una medida de localización.

Para el modelo bidimensional, consideramos que el electrón se propaga como una onda cuántica sobre la superficie de un cilindro circular recto; calculamos los coeficientes de transmisión y reflexión y la entropía. Los potenciales son ahora del tipo delta de Dirac que, en particular, adoptan una forma que llamamos flores de Dirac. En estos potenciales la opacidad asume una forma con regiones de mayor o menor intensidad que dan origen a fenómenos de difracción marcados por la quiralidad inducida por el acoplamiento entre los diferentes estados transversales de propagación. En este caso, la región entre las deltas es equivalente a un pozo bidimensional opaco en cuyas paredes se mezclan los modos transversales, tal como se cuantifica a través de las amplitudes de probabilidad de transición entre los estados de propagación libre en la dirección transversal al eje del cilindro. La solución para la función de onda se obtuvo numéricamente pues el electrón puede propagarse a través de un número infinito de canales. El cálculo que realizamos conserva la corriente de probabilidad con gran precisión.

La propagación bidimensional está dominada por las amplitudes de probabilidad de transición entre los estados transversales, con lo cual se tienen que estos, al estar o no acoplados, influyen dando un efecto de quiralidad en la propagación cuántica. También se calcularon coeficientes de reflexión y transmisión para diferentes estados

CONCLUSIONES Y PERSPECTIVAS

incidentes, así como la entropía de Shannon, con resultados cuya interpretación corresponde a lo observado en el caso unidimensional.

El estudio de estos sistemas se puede extender, sin duda alguna, tanto para sistemas en una y dos dimensiones, para incluir diferentes efectos de potenciales eléctricos y magnéticos. Además, de manera tal vez más importante, se deben analizar las *longitudes de dispersión* definidas en este trabajo, así como la interpretación de la entropía de Shannon como una *longitud recíproca media de dispersión*, utilizando otros sistemas que nos permitan desarrollar una intuición más profunda sobre el significado de todos estos conceptos, así como su relación con la entropía de Shannon vista como una medida de localización espacial.

Bibliografía

- [1] David Ferry and Stephen Marshall Goodnick. *Transport in nanostructures*. Number 6. Cambridge university press, 1997.
- [2] Keith Barnham and Dimitri Vvedensky. *Low-dimensional semiconductor structures: fundamentals and device applications*. Cambridge University Press, 2008.
- [3] Quang Ho-Kim, Narendra Kumar, and Chi-Sing Lam. *Invitation to contemporary physics*. World Scientific, 2004.
- [4] Yoseph Imry. *Introduction to mesoscopic physics*. Oxford University Press, 1997.
- [5] Supriyo Datta. *Electronic transport in mesoscopic systems*. Cambridge university press, 1997.
- [6] Eckehard Schöll. *Theory of transport properties of semiconductor nanostructures*, volume 4. Springer Science and Business Media, first edition edition, 1998.
- [7] Rolf Landauer. Conductance determined by transmission: probes and quantised constriction resistance. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 1:8099–8110, 1989.
- [8] Markus Büttiker. Symmetry of electrical conduction. *IBM Journal Research Development*, 32:317–334, 1948.
- [9] Albert Messiah. Quantum mechanics. vol. i., 1958.

-
- [10] Pier A. Mello and Narendra Kumar. *Quantum transport in mesoscopic systems: complexity and statistical fluctuations, a maximum-entropy viewpoint*. Number 4. Oxford University Press on Demand, 2004.
- [11] John H Davies. *The physics of low-dimensional semiconductors: an introduction*. Cambridge university press, 1997.
- [12] W van Dijk and KA Kiers. Time delay in simple one-dimensional systems. *American journal of physics*, 60(6):520–527, 1992.
- [13] EH Hauge and JA Støvneng. Tunneling times: a critical review. *Reviews of Modern Physics*, 61(4):917, 1989.
- [14] Eugene P Wigner. Lower limit for the energy derivative of the scattering phase shift. *Physical Review*, 98(1):145, 1955.
- [15] Felix T Smith. Lifetime matrix in collision theory. *Physical Review*, 118(1):349, 1960.
- [16] Christophe Texier. Wigner time delay and related concepts application to transport in coherent conductors. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 2015.
- [17] Y Avishai and YB Band. One-dimensional density of states and the phase of the transmission amplitude. *Physical Review B*, 32(4):2674, 1985.
- [18] Mario Goto, Hiromi Iwamoto, Valdir C Aguilera-Navarro, Donald H Kobe, et al. Relationship between dwell, transmission and reflection tunnelling times. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 37(11):3599, 2004.
- [19] Claude E Shannon. A mathematical theory of communication. *Bell System Technical Journal*, 27:379–423, 623–656, 1948.
- [20] H. H. Corso, E. Castaño, H. G. Laguna, R. P. Sagar, et al. Measuring localization-delocalization phenomena in a quantum corral. *Journal of Mathematical Chemistry Journal of Mathematical Chemistry*, 51(1):179–193, 2013.
- [21] Gordon A Baym. *Lectures on quantum mechanics*. Benjamin, 1969.

BIBLIOGRAFÍA

- [22] Neil W. y N. David Mermin Ashcroft. *Solid state physics*. Harcourt Collage Publishers, 1976.
- [23] A. MacKinnon, S. E. Ulloa, E. Castaño, and G. Kirczenow. From ballistic conductance to localization. In P.T. Landsberg, editor, *Handbook of Semiconductors*, volume 1. North Holland, 1992.
- [24] Eleuterio Castaño and George Kirczenow. Theory of the conductance of parallel ballistic constrictions. *Physical Review B*, 41(8):5055, 1990.
- [25] Eleuterio Castaño and George Kirczenow. Theory of nonlinear transport in narrow ballistic constrictions. *Physical Review B*, 41(6):3874, 1990.
- [26] Eleuterio Castaño and George Kirczenow. Case for nonadiabatic quantized conductance in smooth ballistic constrictions. *Physical Review B*, 45(3):1514, 1992.
- [27] DF Holcomb. Quantum electrical transport in samples of limited dimensions. *American Journal of Physics*, 67(4):278–297, 1999.
- [28] Chang Sub Kim, Arkady M Satanin, Yong S Joe, and Ronald M Cosby. Resonant tunneling in a quantum waveguide: Effect of a finite-size attractive impurity. *Physical Review B*, 60(15):10962, 1999.
- [29] A Mosk, Th M Nieuwenhuizen, and C Barnes. Theory of semiballistic wave propagation. *Physical Review B*, 53(23):15914, 1996.
- [30] Dietmar Weinmann. The physics of mesoscopic systems. *lectures held during the seventh petra school of physics, Institut de Physique et Chimie des Matériaux de Strasbourg*, 2005.