

**CENTRO DE INVESTIGACION CIENTIFICA Y  
DE EDUCACION SUPERIOR DE ENSENADA**

**PROPIEDADES DEL TUNELAJE  
RESONANTE EN HETEROESTRUCTURAS**

**T E S I S  
MAESTRIA EN CIENCIAS**

*Roberto Romo Martinez*

**ENSENADA, BAJA CALIFORNIA, JUNIO DE 1991.**

RESUMEN de la Tesis de Roberto Romo Martínez presentada como requisito parcial para la obtención del grado de MAESTRO EN CIENCIAS en FISICA DE MATERIALES. Ensenada, Baja California, México. Junio de 1991.

PROPIEDADES DEL TUNELAJE RESONANTE  
EN HETEROESTRUCTURAS.

Resumen aprobado por:

  
Dr. Alberto Rubio Méndez  
Director de Tesis

Recientemente ha sido desarrollado un formalismo para estudiar procesos de tunelaje resonante en una dimensión. El fenómeno del tunelaje resonante cobra importancia actual ya que es el mecanismo dominante de transporte electrónico en heteroestructuras semiconductoras de escalas nanométricas. Este formalismo resulta de explotar las propiedades analíticas del propagador del sistema o función de Green y queda expresado en términos de estados resonantes que son soluciones de la ecuación de Schrödinger cuyos eigenvalores son los polos del propagador. Esta teoría proporciona un método para calcular en forma exacta las anchuras parciales de decaimiento, que son cantidades relevantes en relación al transporte. Asimismo del formalismo se extrae un desarrollo en estados resonantes para la función de Green que permite obtener fórmulas aproximadas para el coeficiente de transmisión explícitamente en función de los anchos parciales de decaimiento. Esto se logra seleccionando los términos del desarrollo que permitan describir satisfactoriamente las resonancias del sistema. En este trabajo se obtienen expresiones para el coeficiente de transmisión y la corriente de tunelaje para los perfiles de potencial de doble y de triple barrera. Se analizan sistemas cuyas resonancias pueden ser delgadas y aisladas así como situaciones donde éstas presentan una interferencia significativa (traslape). Aplicamos el formalismo a el estudio sistemático de los potenciales mencionados. Se calculan transmisión y curvas teóricas de corriente sobre un amplio rango de parámetros de interés experimental. Hacemos énfasis en la discusión de las situaciones de traslape.

TESIS DEFENDIDA POR: **ROBERTO ROMO MARTINEZ**

Y APROBADA POR EL SIGUIENTE COMITE:



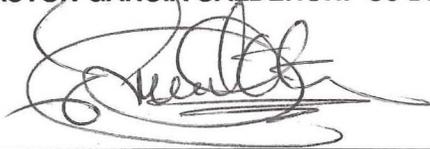
---

**DR. ALBERTO RUBIO MENDEZ.-** Director del Comité



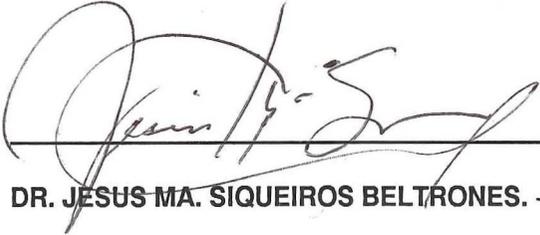
---

**DR. GASTON GARCIA CALDERON.-** Co-Director del Comité



---

**DR. ERNESTO COTA ARAIZA.-** Miembro del Comité



---

**DR. JESUS MA. SIQUEIROS BELTRONES. -** Miembro del Comité



---

**M.C. RAYMUNDO VEGA AGUILAR.-** Miembro del Comité



---

**M.C. JOSUE ALVAREZ BORREGO.-** Jefe Depto. Optica



---

**DR. HECTOR ECHAVARRIA HERAS.-** Director Académico

3 DE JULIO DE 1991

**CENTRO DE INVESTIGACION CIENTIFICA Y DE  
EDUCACION SUPERIOR DE ENSENADA.**

**DIVISION DE FISICA APLICADA  
DEPARTAMENTO DE OPTICA**

**PROPIEDADES DEL TUNELAJE RESONANTE  
EN HETEROESTRUCTURAS**

**TESIS**

que para cubrir parcialmente los requisitos necesarios para  
obtener el grado de MAESTRO EN CIENCIAS presenta:

**ROBERTO ROMO MARTINEZ**

Ensenada, Baja California. Junio de 1991

## AGRADECIMIENTOS

Al Dr. Alberto Rubio M. por haber dirigido esta Tesis.

Al Dr. Gastón García-Calderón por haber sido corresponsable de la elaboración de este trabajo.

Al Dr. Ernesto Cota A., al Dr. Jesús Siqueiros B. y al M. C. Raymundo Vega, por haber colaborado como sinodales en la evaluación del mismo.

Al Instituto de Física (IFUNAM) por facilitarme las herramientas de cómputo.

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT) por la beca de colegiatura y sustento que me concedió para llevar a cabo mi proyecto de postgrado.

## DEDICATORIA

A mis padres, que siempre me han apoyado:

*Elpidio Romo Z. y Maria Martinez R.*

*A Luz Maria Garibay R.*

A todos mis hermanos (entre ellos al *Macho Cabrio*).

# CONTENIDO

	<u>Pagina</u>
<b>I INTRODUCCION</b>	1
<b>II FORMALISMO</b>	6
<b>II.1 Introduccion</b>	6
<b>II.2 Desarrollo de Cauchy para la funcion         de Green en la region interna</b>	7
<b>II.3 Normalizacion de las eigenfunciones         <math>u_n(x)</math> considerando el efecto del campo</b>	10
<b>II.4 Anchuras de decaimiento en presencia         de campo</b>	16
<b>III APLICACION DE LA TEORIA A POTENCIALES PARTICULARES</b>	18
<b>III.1 Introduccion</b>	18
<b>III.2 El potencial de dos barreras         rectangulares</b>	18
<b>III.3 El potencial de tres barreras         rectangulares</b>	21

## CONTENIDO (Continuación)

<b>IV</b>	<b>DISCUSION DE LOS RESULTADOS</b>	<b>24</b>
IV.1	Introduccion	24
IV.2	El potencial de doble barrera	25
IV.2.1	Calculo de los anchos de resonancia	25
IV.2.2	Calculo de la corriente	34
IV.3	El potencial de triple barrera	36
IV.3.1	El caso simetrico	36
IV.3.2	El caso asimetrico	56
<b>V</b>	<b>CONCLUSIONES</b>	<b>68</b>
	<b>BIBLIOGRAFIA</b>	<b>70</b>



## LISTA DE FIGURAS

<u>Figura</u>		<u>Página</u>
1	Plano complejo de la energía. En (a) se muestra una región múltiplemente conexa limitada por el contorno $C$ , el contorno $C_E$ y los pequeños contornos $C_n$ que encierran a cada polo $E_n$ de la función de Green. En (b) la región encerrada por $\Gamma$ es simplemente conexa no contiene polos en su interior.	9
2	Perfil de potencial para una estructura de tunelaje resonante de doble barrera.	26
3	Anchuras parciales y totales de decaimiento como función del espesor de la segunda barrera en una estructura de doble barrera rectangular.	28
4	Gráficas del coeficiente de transmisión como función de la energía del electrón incidente para un potencial de doble barrera, calculado en base a la aproximación de dos términos y comparado con el correspondiente al cálculo exacto. Se presenta un caso sin campo eléctrico en (a) y uno con campo en (b).	30
5	Esquema de la aproximación de escalón utilizada para considerar al campo eléctrico.	31
6	Gráficas de los anchos parciales de resonancia $\Gamma_n^O$ , $\Gamma_n^L$ y del ancho total $\Gamma_n$ en función del voltaje aplicado para el potencia de doble barrera. En (a) se presentan los anchos para $n=1$ y en (b) para $n=2$	33
7	Curvas características de corriente-voltaje (I-V) para el sistema de doble barrera. Consideramos en (a) un caso con traslape significativo en sus dos primeras resonancias, y en (b) a un caso con sus resonancias aisladas y estrechas.	35

## LISTA DE FIGURAS (Continuación)

8	Perfil de potencial de una estructura de tunelaje resonante de tres barreras	37
9	Gráficas del coeficiente de transmisión vs. energía del electrón incidente para distintos valores del espesor de la barrera central en un sistema de tres barreras	38
10	Gráficas del coeficiente de transmisión vs. energía del electrón incidente para valores distintos del espesor de las barreras laterales en un sistema de tres barreras	42
11	Gráficas del coeficiente de transmisión vs. energía del electrón incidente para el potencial de tres barreras para un caso en el que la aproximación de dos términos es virtualmente exacta.	
12	Gráficas del coeficiente de transmisión vs. energía del electrón incidente en el potencial de tres barreras variando el ancho de los pozos	45
13	Gráficas del módulo de la función de onda $ u_n(x) ^2$ vs. $X$ donde $X$ varía en la región interna del potencial para los dos casos de la figura anterior	46
14	Gráficas del coeficiente de transmisión vs. energía del electrón incidente para valores distintos de la altura de la barrera central en el potencial de tres barreras	48
15	Gráficas del coeficiente de transmisión vs. energía del electrón incidente para diferentes alturas de las tres barreras del potencial	49
16	Gráficas del coeficiente de transmisión vs. energía del electrón incidente para tres diferentes alturas, como en la anterior figura pero con $I_n = 1$ .	50

## LISTA DE FIGURAS (Continuación)

- 17 Gráficas del coeficiente de transmisión vs. energía del electrón incidente para diferentes alturas y anchuras de las barreras manteniendo el área fija de cada una de las tres barreras 53
- 18 Región de validez de la aproximación de dos términos términos para  $G^+(x, x'; E)$  para calcular coef. de transmisión. 54
- 19 Gráficas del coeficiente de transmisión vs. energía para el potencial de tres barreras a diferentes voltajes aplicados. 57
- 20 Gráficas del módulo de la función de onda  $|u_n(x)|^2$  vs.  $X$  donde  $X$  varía en la región interna de un potencial de tres barreras para diferentes valores del voltaje aplicado. 58
- 21 Gráficas del módulo de la función de onda  $|u_n(x)|^2$  vs.  $X$  donde  $X$  varía en la región interna del potencial mostrando el efecto de la diferencia en el ancho de los pozos 60
- 22 Gráficas del módulo de la función de onda  $|u_n(x)|^2$  vs.  $X$  donde  $X$  varía en la región interna de un potencial de tres barreras. Aquí se muestra el efecto combinado del campo eléctrico sobre la localización de los estados en los pozos. 62
23. Anchos de resonancia  $\Gamma_n^0$ ,  $\Gamma_n^L$  y  $\Gamma_n$  como función del voltaje aplicado para el potencial de tres barreras para  $n=1$  (a); y  $n=2$  (b). 63
24. Anchos de resonancia  $\Gamma_n^0$ ,  $\Gamma_n^L$  y  $\Gamma_n$  mostrando el efecto del campo eléctrico aplicado combinado con diferencias en el ancho de los pozos para el potencial de tres barreras 65
- 25 Gráficos de corriente-voltaje para el potencial de tres barreras para los casos considerados en la figura 24. 67

## I INTRODUCCION

El estudio del tunelaje resonante en heteroestructuras semiconductoras es un campo de investigación iniciado por Chang Esaki y Tsu (1970) (1974), quienes realizaron la primera observación experimental de este fenómeno. El interés en el área creció rápidamente desde los experimentos posteriores de Sollner *et al.* (1983) (1984).

Este campo se ha caracterizado por la interacción de tres grandes áreas de investigación. (1) El entendimiento físico de los fenómenos de transporte electrónico en estas estructuras. (2) El desarrollo de las nuevas técnicas de la ciencia de materiales, particularmente las de crecimiento epitaxial de películas semiconductoras, entre las cuales la llamada *Molecular Beam Epitaxy* ha destacado de manera importante [Ploog, 1988]. (3) Las diversas tecnologías de fabricación de dispositivos electrónicos, como por ejemplo la *Nanolitografía* [Smith, 1990].

La creciente atención por parte de los físicos e ingenieros hacia este campo se debe, por un lado, a los interesantes problemas físicos que plantean estos sistemas, como: el fenómeno de la conductancia diferencial negativa, la definición de los tiempos de tunelaje, los efectos de acumulación de carga, etc. Y por otro lado, a las potenciales aplicaciones en el campo de la microelectrónica que son muy variadas [Cappasso y Datta, 1990].

Los sistemas cuánticos unidimensionales son de gran interés en este contexto ya que describen en forma satisfactoria a muchos sistemas reales. En particular para el potencial de doble barrera rectangular hay una gran cantidad de trabajos publicados que estudian sus diversas propiedades, el énfasis puesto en la investigación de este sistema es debido en parte a que es el más sencillo de estas estructuras, y además a que es el ejemplo típico del transistor cuántico.

En términos generales un transistor de tunelaje resonante es un dispositivo en el cual se utiliza un voltaje aplicado para modular la diferencia de sus niveles de resonancia respecto a la energía de los electrones incidentes, de aquí que las curvas de corriente-voltaje (I-V) pueden presentar picos en uno o más valores del voltaje, correspondientes a los diferentes niveles de resonancia. Esta situación de picos múltiples la presentan sobre todo los sistemas de más de dos barreras, ya que en cada minibanda hay tantos estados resonantes como pozos de potencial tenga la estructura. Un transistor con estas características en la corriente tiene múltiples estados de "sí" y "no" correspondientes respectivamente a picos y valles en la curva I-V. Aunque actualmente en el campo de la microelectrónica el énfasis está puesto en los sistemas convencionales de sólo dos estados lógicos, se espera, como lo afirman Capasso y Datta (1990) que en un futuro la "lógica multivaluada" reducirá la complejidad de

interconexiones de los circuitos integrados. La naturaleza de estos dispositivos promete para el futuro una nueva electrónica de enormes potencialidades

En este trabajo estudiamos algunas propiedades de las estructuras de dos y tres barreras, presentando en ambos casos curvas teóricas I-V. Ambas estructuras pueden simular un dispositivo de varios estados lógicos como los mencionados en el párrafo anterior.

Recientemente realizamos un estudio de las anchuras parciales y totales de decaimiento [García-Calderón, *et al.* 1991] para el sistema de doble barrera rectangular usando un formalismo de resonancias del cual se obtiene un desarrollo de la función o propagador de Green  $G^+(x,x';E)$  en términos de sus polos complejos. Utilizando una forma aproximada de tal desarrollo se describieron resonancias estrechas y aisladas (sin traslape). Estas cantidades (los anchos parciales) son las más relevantes en el estudio de los tiempos de tunelaje en resonancia [García-Calderón y Rubio, 1987, 1989]. En el presente trabajo extenderemos el formalismo para describir resonancias traslapantes (caso típico del potencial de tres barreras). Por simplicidad no consideramos efectos producidos por acumulación de carga ó procesos inelásticos.

El formalismo citado permite realizar un cálculo exacto de los anchos parciales de decaimiento. Los cálculos existentes en cambio están basados en aproximaciones semiclásicas [Büttiker,

1988. Méndez, 1987. Guéret, *et al.*, 1989. Liu y Aers, 1989).

Obtenemos además fórmulas explícitas en términos de los anchos parciales  $\Gamma_n^0$  y  $\Gamma_n^L$  para la corriente de tunelaje en estos sistemas. Enfatizamos que esta es una de las partes más importantes del trabajo ya que estamos estableciendo una conexión entre cantidades de importancia teórica (los anchos parciales) con una cantidad relacionada directamente con el experimento (la corriente). El disponer entonces de una parametrización para la corriente de tunelaje permite en particular mediante ajustes a datos experimentales medir los anchos parciales. Una medición de esta naturaleza se realizó recientemente para el ancho total  $\Gamma_n$  por Liu *et al.* (1991) utilizando una parametrización para la corriente obtenida a partir de una fórmula aproximada para el coeficiente de transmisión.

Analizaremos también en términos de los anchos parciales algunos efectos que tiene el fenómeno de la *localización* sobre las curvas características de corriente-voltaje. En base a esto presentaremos un mecanismo para tener control sobre la localización y por lo tanto sobre la corriente.

La distribución del material contenido en este trabajo es la siguiente.

En el capítulo II presentamos la teoría de estados resonantes en base a la cual haremos el estudio de los sistemas particulares de dos y tres barreras rectangulares. En la

sección II.2 se obtiene un desarrollo para la función de Green en términos de los residuos en sus polos del plano complejo de la energía. Posteriormente en la sección II.3 se da una normalización de las eigenfunciones de la ecuación de Schrödinger con eigenvalores complejos  $u_n(x)$  (asociadas estas con los llamados *estados resonantes del sistema*). Considerando el efecto del campo eléctrico, se establece también la relación de estas funciones con los residuos de  $G^+(x,x';E)$  y entonces se expresa el desarrollo obtenido en II.2 en términos de las eigenfunciones  $u_n(x)$ . En la sección II.4 se calculan de manera exacta expresiones para los anchos parciales de decaimiento (en términos de las funciones  $u_n(x)$ ) tomando en cuenta al campo eléctrico.

En el capítulo III se utilizan las expresiones de los anchos parciales y el desarrollo de  $G^+(x,x';E)$  del capítulo II para obtener fórmulas explícitas para el coeficiente de transmisión y la corriente tomando de tal desarrollo solo los términos relevantes.

En el capítulo IV se discuten los resultados de aplicar la teoría a casos particulares del potencial doble barrera (sección IV.2) y triple barrera (sección IV.3).

Finalmente en el capítulo V presentemos las conclusiones de este trabajo.

## II FORMALISMO

### II.1 Introduccion.

En este capítulo se hace una exposición de la parte más general de la teoría en la cual se basa este trabajo, dejando para el siguiente la aplicación a casos particulares en los cuales el perfil de los potenciales considerados es de forma rectangular.

Se considera en esta parte un potencial unidimensional  $V(x)$  con las siguientes características:

(i)  $V(x)$  es real y univaluado.

(ii)  $V(x)$  es de forma arbitraria en la región finita  $0 \leq x \leq L$ .

Para un potencial de este tipo los polos y los residuos de la función de Green  $G^+(x, x'; E)$ , con condiciones de frontera de onda saliente, son utilizados para obtener un desarrollo de  $G^+(x, x'; E)$  en términos de las eigenfunciones  $u_n(x)$  de la ecuación de Schrödinger con eigenvalores complejos.

En la sección II.2 se obtiene tal desarrollo para la función  $G^+(x, x'; E)$  utilizando el teorema del residuo en el plano complejo de la energía. Aquí  $G^+(x, x'; E)$  queda expresada como una suma discreta de términos, cada uno de los cuales representa la contribución de cada resonancia  $E_n$  al valor de  $G^+(x, x'; E)$ .

En la sección II.3 se establece una relación fundamental entre los términos de este desarrollo y las eigenfunciones  $u_n(x)$ , asociadas estas últimas con los estados resonantes del

sistema. Se proporciona además una normalización para estas funciones que toma en cuenta el efecto del campo eléctrico sobre el perfil del potencial.

Finalmente se calculan las anchuras parciales de decaimiento, que son las cantidades más relevantes para el estudio sistemático que se presenta en el capítulo IV.

## II.2 Desarrollo de Cauchy para la función de Green en la región interna.

El desarrollo para la función de Green  $G^+(x, x'; E)$  en  $0 \leq x \leq L$ , surge de manera natural al hacer una simple aplicación del teorema del residuo. Consideremos a la integral de contorno

$$\oint_C \frac{G^+(x, x'; E')}{E' - E} dE'$$

siendo  $C$  el contorno cerrado en el plano de la energía con orientación positiva (contraria a las agujas del reloj) como se ilustra en la figura 1 (a). Supongamos que en su interior se encuentran  $N$  polos de  $G^+(x, x'; E)$  y también el valor  $E' = E$ , que es una singularidad del integrando ( $E$  es real). Si ahora encerramos a cada polo  $E_n$  por un pequeño contorno circular  $C_n$  y al punto  $E' = E$  por otro contorno  $C_E$ , todos con la misma orientación (positiva), entonces a la región múltiplemente conexa encerrada por  $C$  la podemos "convertir" a una región simplemente conexa si su frontera es el contorno  $\Gamma$  que consta de todas estas pequeñas circunferencias tomadas en sentido positivo, del contorno  $C$  tomado en sentido negativo y de los

segmentos de recta  $L_i$  que unen entre sí a todos estos contornos de la manera que se ilustra en la figura 1 (b).

Ahora bien, por aditividad de las integrales de contorno tenemos que:

$$\oint_{\Gamma} \frac{G^+(x, x'; E')}{E' - E} dE' = - \oint_C \frac{G^+(x, x'; E')}{E' - E} dE' + \oint_{C_E} \frac{G^+(x, x'; E')}{E' - E} dE' + \sum_{n=1}^N \oint_{C_n} \frac{G^+(x, x'; E')}{E' - E} dE' \quad (1)$$

pero como la region  $\Gamma$  no encierra ningún punto singular, la integral sobre este contorno vale cero y por lo tanto el miembro derecho de la anterior ecuación también se anula. Por el teorema anteriormente mencionado el valor de la segunda integral es simplemente  $2\pi i G^+(x, x'; E)$ , cada una de las integrales indicadas en la sumatoria vale  $2\pi i R_n$  siendo  $R_n$  el residuo del integrando, el cual puede ser expresado como  $\rho_n(x, x') / (E_n - E)$  donde  $\rho_n(x, x')$  es el residuo de la función de Green  $G^+(x, x'; E)$  en el polo  $E_n$ . De manera que resulta la relación:

$$G^+(x, x'; E) = \sum_{n=1}^N \frac{\rho_n(x, x')}{E - E_n} + \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{G^+(x, x'; E')}{E' - E} dE' \quad (2)$$

Hemos encontrado una expresión para  $G^+(x, x'; E)$  que contiene una suma finita de términos discretos y una contribución integral. Es posible demostrar que al hacer tender a infinito el radio de la parte circular de  $C$  sólo sobrevive la

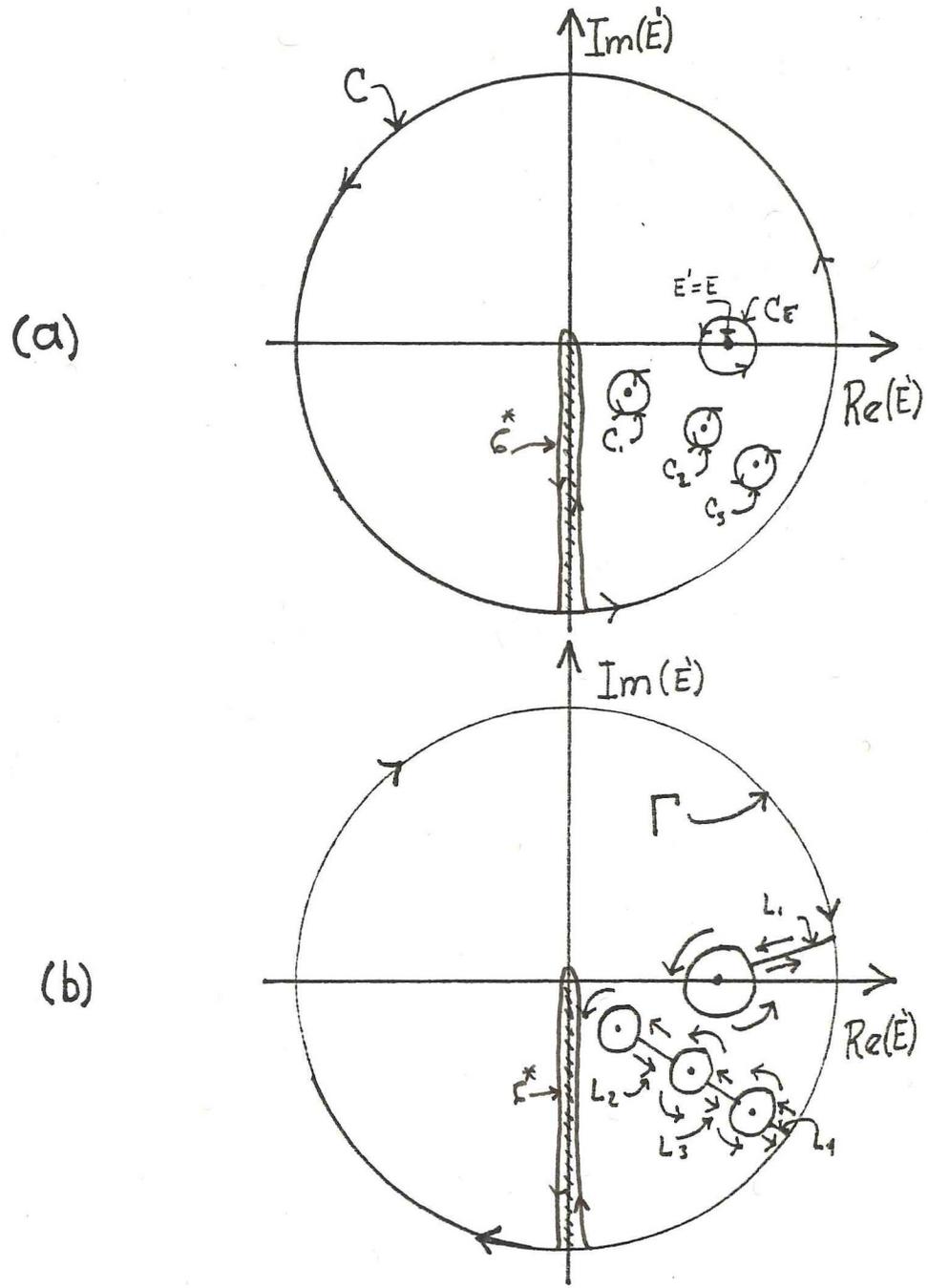


Figura 1. Plano complejo de la energía. En (a) se presenta una región múltiplemente conexa limitada por el contorno  $C$ , el contorno  $C_E$ , y los pequeños contornos  $C_n$  que encierran a cada polo  $E_n$  de la función de Green. En (b) la región encerrada por  $\Gamma$  es simplemente conexa, no contiene polos en su interior.

contribución a lo largo del corte ramal [García-Calderón, 1976], y por otro lado la suma se vuelve una suma infinita ya que el contorno de radio infinito encierra a todos los polos del sistema, que como sabemos, es infinito para potenciales de rango finito [Newton, 1966]. La expresión final para  $G$  será:

$$G^+(x, x'; E) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\rho_n(x, x')}{E - E_n} + \oint_{C^*} \frac{G^+(x, x'; E')}{E' - E} dE' \quad (3)$$

Todos los razonamientos seguidos hasta aquí se han realizado bajo el supuesto de que los polos considerados son polos simples y que la función  $G^+(x, x'; E)$  es meromórfica. Para una gran clase de potenciales la función de Green es meromórfica (esto es, analítica excepto en el conjunto formado por sus polos). Ciertamente lo es para el caso de los potenciales que en este trabajo se estudiarán.

### II.3 Normalización de las eigenfunciones $u_n(x)$ considerando el efecto del campo.

Los estados de decaimiento representan una situación física en la cual no hay incidencia de partículas sobre el sistema, esto significa que las condiciones sobre la función de onda asociada deben corresponder a ondas salientes. Esto se expresa de la siguiente forma: La función de onda  $u(x)$ , solución de la ecuación de Schrödinger

$$u''(x) + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(x)] u(x) = 0 \quad (4)$$

(las primas en  $u''(x)$  denotan la segunda derivada con respecto a

$x$ ), debe satisfacer las condiciones

$$u'(0) = -ik_0 u(0) \quad u'(L) = ik_L u(L) \quad (5)$$

llamadas *condiciones de frontera de onda saliente*, en donde  $k_0$  y  $k_L$  son, respectivamente, los números de onda en los extremos del sistema:  $x=0$  y  $x=L$ , o sea:

$$k_0 = \left[ \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(0)] \right]^{1/2} \quad \text{y} \quad k_L = \left[ \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(L)] \right]^{1/2} \quad (6)$$

Denotaremos por  $E_n$  a los eigenvalores de (4) que satisfagan las condiciones (5) y por  $u_n(x)$  a las correspondientes eigenfunciones. Estos eigenvalores deben ser complejos para que puedan satisfacer tales condiciones de frontera. Por otro lado, los procedimientos usuales de normalización no son aplicables a las funciones  $u_n(x)$ . García-Calderón y Peierls (1976), discuten una normalización para estas funciones en el caso de un potencial tridimensional, la cual surge de investigar la relación de  $u_n(x)$  con la función  $G^+(x, x'; E)$  en la vecindad de sus polos  $E_n$ .

Nosotros presentaremos aquí un procedimiento análogo para el caso del potencial unidimensional con las características descritas en la introducción del capítulo, y con el nuevo ingrediente de un campo eléctrico aplicado. Como sabemos, la presencia del campo implica que  $k_0$  y  $k_L$  serán diferentes.

La función de Green, por otro lado, satisface la ecuación diferencial:

$$G''(x, x'; E) + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(x)] G^+(x, x'; E) = \delta(x - x') \quad (7)$$

y las condiciones de frontera para  $G^+(x, x'; E)$  son:

$$G^+(0, x'; E) = -ik_0 G^+(0, x'; E) \quad G^+(L, x'; E) = ik_L G^+(L, x'; E) \quad (8)$$

En la vecindad de un polo simple,  $E = E_n$ , la función de Green puede escribirse como:

$$G^+(x, x'; E) = \frac{\rho_n(x, x')}{(E - E_n)} + \xi(x, x'; E) \quad (9)$$

donde  $\xi(x, x'; E)$  es una función regular en  $E_n$  y  $\rho_n(x, x'; E)$  es el residuo de  $G^+(x, x'; E)$  en  $E_n$ . Sustituyendo la ecuación (9) en

la (7) y reagrupando obtenemos lo siguiente:

$$\frac{1}{E - E_n} \left[ \rho_n''(x, x') + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(x)] \rho_n(x, x') \right] + \left[ \xi''(x, x'; E) + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(x)] \xi(x, x'; E) \right] = \delta(x - x') \quad (10)$$

sumamos y restamos el término  $\frac{1}{E - E_n} \left[ \frac{2m}{\hbar^2} E_n \rho_n(x, x') \right]$  a la ec. anterior para obtener:

$$\frac{1}{E - E_n} \left[ \rho_n''(x, x') + \frac{2m}{\hbar^2} [E_n - V(x)] \rho_n(x, x') \right] + \left[ \xi''(x, x'; E) + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(x)] \xi(x, x'; E) + \frac{2m}{\hbar^2} \rho_n(x, x') - \delta(x - x') \right] = 0 \quad (11)$$

en el límite cuando  $E \rightarrow E_n$  las expresiones entre los parén-

tesis cuadrados grandes deberán anularse separadamente, y dar lugar entonces al siguiente par de ecuaciones diferenciales, una para  $\rho_n(x, x')$  y otra para  $\xi(x, x'; E)$ .

$$\rho_n''(x, x') + \frac{2m}{\hbar^2} [E_n - V(x)] \rho_n(x, x') = 0 \quad (12)$$

$$\xi''(x, x'; E_n) + \frac{2m}{\hbar^2} [E_n - V(x)] \xi(x, x'; E_n) + \frac{2m}{\hbar^2} \rho_n(x, x') - \delta(x - x') = 0 \quad (13)$$

Para determinar las correspondientes condiciones de frontera vamos a aplicarle a  $G^+(x, x'; E)$ , dada por la ecuación (9), sus condiciones de frontera representadas en (8).

$$\frac{1}{E - E_n} \rho_n'(0, x') + \xi'(0, x'; E) = -ik_0 \left[ \frac{1}{E - E_n} \rho_n(0, x') + \xi(0, x'; E) \right]$$

reagrupando términos tendremos

$$\frac{1}{E - E_n} \left[ \rho_n'(0, x') + ik_0 \rho_n(0, x') \right] + \left[ \xi'(0, x'; E) + ik_0 \xi(0, x'; E) \right] = 0$$

sumamos y restamos el término  $\frac{1}{E - E_n} \left[ ik_{no} \rho_n(0, x') \right]$  en donde

$$k_{no} = \left[ \frac{2m}{\hbar^2} [E_n - V(0)] \right]^{1/2} \text{ y al hacer tender } E \text{ a } E_n \text{ se obtiene el}$$

par de ecuaciones:

$$\rho_n'(0, x') = -ik_{no} \rho_n(0, x') \quad (14)$$

$$\xi'(0, x'; E_n) = -ik_{no} \xi(0, x'; E_n) - \frac{2m}{\hbar^2} (i/2k_{no}) \rho_n(0, x') \quad (15)$$

que son las condiciones de frontera para  $\rho$  y  $\xi$  en  $x=0$ .

Análogamente para  $x=L$  se obtienen las ecuaciones:

$$\rho'_n(L, x') = ik_{nL} \rho_n(L, x') \quad (16)$$

$$\xi'(L, x'; E_n) = ik_{nL} \xi(L, x'; E_n) + \frac{2m}{\hbar^2} (i/2k_{nL}) \rho_n(L, x') \quad (17)$$

en donde  $k_{nL} = \left[ \frac{2m}{\hbar^2} [E_n - V(L)] \right]^{1/2}$ .

Vemos que  $\rho_n(x, x')$  satisface la misma ecuación diferencial que  $u_n(x)$  así como también las mismas condiciones de frontera, se sigue de esto que  $\rho_n(x, x')$  y  $u_n(x)$  deben ser proporcionales, es decir:

$$\rho_n(x, x') = X(x') u_n(x) \quad (18)$$

Para determinar el factor de proporcionalidad  $X(x')$  multiplicamos (13) por  $u_n(x)$  y (4) por  $\xi(x, x'; k_n)$ , y al restar las ecuaciones nos queda, después de aplicar el teorema de Green,

$$\left( \frac{2m}{\hbar^2} \right) \left[ (i/2k_{n0}) u_n(0) \rho_n(0, x') + (i/2k_{nL}) u_n(L) \rho_n(L, x') \right] + \quad (19)$$

$$\left( \frac{2m}{\hbar^2} \right) \int_0^L u_n(x) \rho_n(x, x') dx = u_n(x')$$

de esta expresión podemos factorizar y entonces despejar  $X(x')$ , haciendo esto resulta:

$$X(x') = \frac{u_n(x')}{\frac{2m}{\hbar^2} \left[ \int_0^L u_n^2(x) dx + \frac{i}{2} \left( \frac{u_n^2(0)}{k_{n0}} + \frac{u_n^2(L)}{k_{nL}} \right) \right]} \quad (20)$$

Entonces la expresión para el residuo de la función de Green nos quedará de la forma:

$$\rho_n(x, x') = \frac{u_n(x) u_n(x')}{\frac{2m}{\hbar^2} \left[ \int_0^L u_n^2(x) dx + \frac{i}{2} \left( \frac{u_n^2(0)}{k_{n0}} + \frac{u_n^2(L)}{k_{nL}} \right) \right]} \quad (21)$$

Este resultado nos sugiere como normalización para las  $u_n(x)$  la condición

$$\int_0^L u_n^2(x) dx + \frac{i}{2} \left[ \frac{u_n^2(0)}{k_{n0}} + \frac{u_n^2(L)}{k_{nL}} \right] = 1 \quad (22)$$

Volvemos ahora al desarrollo de Cauchy que habíamos obtenido para  $G^+(x, x'; E)$  en términos de sus residuos, ec. (3). Expresando éste en función de las  $u_n(x)$  conduce al resultado:

$$G^+(x, x'; E) = \left( \frac{\hbar^2}{2m} \right) \sum_{n=1}^N \frac{u_n(x) u_n(x')}{E - E_n} + B(E) \quad (23)$$

donde  $B(E)$  representa a la contribución de cierto "fondo", la cual incluye la suma desde  $N+1$  en adelante y segunda integral del lado derecho de la ec.(3)

Esta fórmula permite extraer gran cantidad de información acerca de las propiedades de transporte en sistemas de tunelaje resonante. En este trabajo trataremos de estudiar estructuras

de doble y de triple barrera considerando de la anterior ecuación el subconjunto adecuado de términos del desarrollo.

#### II.4 Anchuras de decaimiento en presencia de campo.

Partimos de la ecuación de Schrödinger para  $u_n(x)$ ,

$$u_n''(x) + \frac{2m}{\hbar^2} [E_n - V(x)] u_n(x) = 0 \quad (24)$$

y de su compleja conjugada

$$u_n^{*''}(x) + \frac{2m}{\hbar^2} [E_n^* - V(x)] u_n^*(x) = 0 \quad (25)$$

las multiplicamos, respectivamente por  $u_n^*(x)$  y  $u_n(x)$  para después restar las ecuaciones, de lo cual se obtiene

$$u_n^*(x)u_n''(x) - u_n(x)u_n^{*''}(x) + \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)[E_n - E_n^*]|u_n(x)|^2 = 0 \quad (26)$$

integramos ahora de 0 a L a la ecuación anterior y aplicamos el teorema de Green para obtener

$$\left[ u_n^*(x)u_n'(x) - u_n(x)u_n^{*'}(x) \right]_0^L = \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)[E_n - E_n^*] \int_0^L |u_n(x)|^2 dx \quad (27)$$

llamemos  $I_n$  a la integral del segundo miembro y apliquemos las condiciones de frontera de onda saliente, que para  $u_n(x)$  son las ecuaciones

$$u'_n(0) = -ik_{n0} u_n(0) \quad u'_n(L) = ik_{nL} u_n(L) \quad (28)$$

y para su compleja conjugada

$$u_n^*(0) = ik_{n0}^* u_n^*(0) \quad u_n^*(L) = -ik_{nL}^* u_n^*(L) \quad (29)$$

donde  $k_{n0}$  y  $k_{nL}$  se definieron en la sección anterior. Tendremos entonces lo siguiente

$$i[k_{n0} + k_{n0}^*] |u_n(0)|^2 + i[k_{nL} + k_{nL}^*] |u_n(L)|^2 = \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right) [E_n^* - E_n] I_n \quad (30)$$

pero  $E_n^* - E_n = i\Gamma_n$ , de manera que lo anterior puede escribirse como

$$\left[ \frac{\hbar^2 \operatorname{Re}(k_{n0})}{m I_n} \right] |u_n(0)|^2 + \left[ \frac{\hbar^2 \operatorname{Re}(k_{nL})}{m I_n} \right] |u_n(L)|^2 = \Gamma_n \quad (31)$$

si definimos las cantidades  $\Gamma_n^0$  y  $\Gamma_n^L$  de la siguiente manera

$$\Gamma_n^0 = \left[ \frac{\hbar^2 \operatorname{Re}(k_{n0})}{m I_n} \right] |u_n(0)|^2 \quad \text{y} \quad \Gamma_n^L = \left[ \frac{\hbar^2 \operatorname{Re}(k_{nL})}{m I_n} \right] |u_n(L)|^2 \quad (32)$$

se cumple entonces la relación

$$\Gamma_n = \Gamma_n^0 + \Gamma_n^L \quad (33)$$

Las cantidades  $\Gamma_n^0$  y  $\Gamma_n^L$  reciben el nombre de anchos parciales de decaimiento, y se relaciona con los tiempos característicos [García-Calderón y Rubio, 1987].

### III APLICACION DE LA TEORIA A POTENCIALES PARTICULARES

#### III.1 Introduccion.

El resultado principal del capítulo anterior es el desarrollo de Cauchy para  $G^+(x, x'; E)$  en la región interna

$$G^+(x, x'; E) = \left( \frac{\hbar^2}{2m} \right) \sum_{n=1}^N \frac{u_n(x) u_n(x')}{E - E_n} + B(E) \quad (34)$$

En este capítulo, al tratar con potenciales particulares como el de dos barreras rectangulares y el de tres, consideraremos el subconjunto apropiado de términos del anterior desarrollo para, en cada caso, describir el sistema satisfactoriamente. Es decir, haremos aproximaciones en las cuales sólo tomemos los términos que consideremos relevantes para el valor de  $G^+(x, x'; E)$  y en base a éstas calcularemos cantidades importantes como el coeficiente de transmisión y la corriente electrónica a través de la estructura.

#### III.2 El potencial de dos barreras rectangulares.

Recientemente realizamos un estudio sistemático de las anchuras de resonancia para el potencial de doble barrera [García-Calderón et al, 1991] considerando un solo término del desarrollo (3). Es decir, se trabajó en base a la aproximación

$$G^+(x, x'; E) \cong \left( \frac{\hbar^2}{2m} \right) \frac{u_1(x) u_1(x')}{E - E_1} \quad (35)$$

la cual describió en forma satisfactoria al sistema cuando el valor de la energía de la primera resonancia  $E_1$  se mantuvo lo suficientemente alejado del correspondiente a la segunda  $E_2$ , y

sus anchos  $\Gamma_1$  y  $\Gamma_2$  suficientemente estrechos, condiciones que garantizan que el traslape entre los picos de resonancia en una gráfica de coeficiente de transmisión vs energía, sea despreciable.

Utilizando la relación existente entre la función de Green evaluada en los extremos 0 y L, y la amplitud de transmisión  $t(k)$  [García-Calderón, 1986]:

$$t(E) = 2ik_0 G^+(0, L; E) \exp(-ik_1 L) \quad (36)$$

se llega a la siguiente expresión para el coeficiente de transmisión  $T(E)$

$$T(E) = \left( \frac{k_0 k_L I_1^2}{a_{10} a_{1L}} \right) \frac{\Gamma_1^0 \Gamma_1^L}{(E - \varepsilon_1)^2 + \frac{1}{4} \Gamma_1^2} \quad (37)$$

donde  $a_{10} = \text{Re}(k_{10})$  y  $a_{1L} = \text{Re}(k_{1L})$ , y los anchos, definidos como en el capítulo anterior, o sea

$$\Gamma_1^0 = \left[ \frac{\hbar^2 a_{10}}{m I_1} \right] |u_1(0)|^2, \quad \Gamma_1^L = \left[ \frac{\hbar^2 a_{1L}}{m I_1} \right] |u_1(L)|^2 \quad (38)$$

y

$$\Gamma_1 = \Gamma_1^0 + \Gamma_1^L \quad (39)$$

Por otro lado, la corriente de tunelaje está dada por la fórmula [Duke, 1969. Tsu y Esaki, 1973]

$$J = \frac{em^* kT}{2\pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty T(E) \ln \left[ \frac{1 + \exp[(E_f - E)/kT]}{1 + \exp[(E_f - E - eV)/kT]} \right] dE \quad (40)$$

en donde  $e$ ,  $m^*$ ,  $k$ ,  $T$  y  $T(E)$  son, respectivamente, la carga del

electrón, la masa efectiva, la constante de Boltzmann, la temperatura y el coeficiente de transmisión.

En el límite de bajas temperaturas ( $T \rightarrow 0$ ) la anterior ecuación se reduce a:

$$J = \frac{e m^*}{2\pi^2 \hbar^3} \int_0^{E_f} (E_f - E) T(E) dE \quad \text{para } eV \geq E_f \quad (41)$$

$$J = \frac{e m^*}{2\pi^2 \hbar^3} \left[ eV \int_0^{E_f - eV} T(E) dE + \int_{E_f - eV}^{E_f} (E_f - E) T(E) dE \right] \quad \text{para } eV < E_f \quad (42)$$

Sustituyendo la expresión para  $T(E)$ , ec. (37), en cada una de estas fórmulas e integrando, se obtienen las siguientes expresiones para la corriente

(i) Caso  $eV \geq E_f$ :

$$J = A \left[ -E_f + \left( \frac{E_f - 2\varepsilon_1}{2} \right) \ln \left( \frac{4(E_f - \varepsilon_1)^2 + \Gamma_1^2}{4\varepsilon_1^2 + \Gamma_1^2} \right) + \frac{2(E_f \varepsilon_1 - \varepsilon_1^2 + \frac{1}{4}\Gamma_1^2)}{\Gamma_1} \right. \\ \left. \text{Arctan} \left( \frac{-2E_f \Gamma_1}{4(E_f - \varepsilon_1)\varepsilon_1 - \Gamma_1^2} \right) \right] \quad (43)$$

(ii) Caso  $eV < E_f$ :

$$J = A \left\{ eV \left[ \frac{1}{2} \ln \left( \frac{4(E_f - \varepsilon_1 - eV)^2 + \Gamma_1^2}{4\varepsilon_1^2 + \Gamma_1^2} \right) + \frac{2\varepsilon_1}{\Gamma_1} \text{Arctan} \left( \frac{-2(E_f - eV)\Gamma_1}{4(E_f - \varepsilon_1 - eV)\varepsilon_1 - \Gamma_1^2} \right) \right] + \right.$$

$$\left. \begin{aligned}
& eV + \left[ \frac{E_f - 2\varepsilon_1}{2} \right] \ln \left[ \frac{4(E_f - \varepsilon_1)^2 + \Gamma_1^2}{4(E_f - \varepsilon_1 - eV)^2 + \Gamma_1^2} \right] + \frac{2(E_f \varepsilon_1 - \varepsilon_1^2 + \frac{1}{4}\Gamma_1^2)}{\Gamma_1} + \\
& \text{Arctan} \left[ \frac{2 eV \Gamma_1}{4(E_f - \varepsilon_1)(E_f - \varepsilon_1 - eV) - \Gamma_1^2} \right] \Bigg\} \quad (44)
\end{aligned}$$

$$\text{donde } A = \left[ \frac{e m^* I_1^2 \Gamma_1^0 \Gamma_1^L}{\pi^2 \hbar^5 a_{10} a_{1L}} \right]$$

### III.3 El potencial de tres barreras rectangulares.

Sabemos que cuando tenemos una superred de  $N$  barreras de potencial las energías permitidas para el sistema se presentan en un esquema de minibandas con  $N-1$  estados en cada minibanda, y que el número de minibandas admisible por el potencial depende principalmente de la altura de las barreras.

La situación ahora es diferente a la del sistema considerado en la sección anterior en el sentido de que dejan de ser válidas las condiciones que garantizan la validez de la aproximación de un término, y esto se debe principalmente a la cercanía entre los estados de cada minibanda que da lugar a fuertes traslapes entre los picos de resonancia en una curva del coeficiente de transmisión vs energía. De manera que surge la necesidad de considerar más términos del desarrollo de  $G^+(x, x'; E)$ . En particular para el potencial de tres barreras tendremos minibandas de 2 estados.

Para describir al sistema en la vecindad de la primera minibanda consideraremos una aproximación que involucre los dos primeros términos del desarrollo (ya que la segunda minibanda se encuentra relativamente alejada). Esto es, nos basaremos en la aproximación

$$G^+(x, x'; E) \cong \left( \frac{\hbar^2}{2m} \right) \left[ \frac{u_1(x) u_1(x')}{E - E_1} + \frac{u_2(x) u_2(x')}{E - E_2} \right] \quad (45)$$

Utilizando la relación (36) y repitiendo pasos análogos a los de la sección anterior obtenemos la expresión para el coeficiente de transmisión

$$T(E) = T_1(E) + T_2(E) + T_{12}(E) \quad (46)$$

$$\text{donde } T_n(E) = \left[ \frac{k^2 I_n^2}{\alpha_{n0} \alpha_{nL}} \right] \frac{\Gamma_n^0 \Gamma_n^L}{(E - \varepsilon_n)^2 + \frac{1}{4} \Gamma_n^2} \quad (n=1,2) \quad (47)$$

y  $T_{12}(E)$  es un término de interferencia debido a las fases de las  $u_n$ 's. Su forma explícita es

$$T_{12}(E) = \frac{8 \left( \frac{\hbar^2}{2m} \right) E \operatorname{Re} \left[ u_1(0) u_1(L) u_2^*(0) u_2^*(L) (E - \varepsilon_1 - i\Gamma_1/2) (E - \varepsilon_2 + i\Gamma_2/2) \right]}{\left[ (E - \varepsilon_1)^2 + \frac{1}{4} \Gamma_1^2 \right] \left[ (E - \varepsilon_2)^2 + \frac{1}{4} \Gamma_2^2 \right]} \quad (48)$$

La expresión para la corriente en este caso consta de tres partes

$$J = J_1 + J_2 + J_{12} \quad (49)$$

las partes  $J_1$  y  $J_2$  provienen de sustituir, respectivamente,  $T_1(E)$  y  $T_2(E)$  en la fórmulas dadas en (41) y (42), por lo tanto son análogas a la obtenida en la sección III.2. Para obtener  $J_{12}$  se sustituye  $T_{12}(E)$  en (41) y (42) y después de llevar a cabo la integración se obtiene una expresión que es demasiado complicada para incluirse aquí, de manera que la omitimos por ahorro de espacio.

## IV DISCUSION DE LOS RESULTADOS

### IV.1 Introduccion.

En este capítulo se presentan los resultados obtenidos al hacer un estudio sistemático de los potenciales de doble y triple barrera en base a la teoría desarrollada en los capítulos anteriores.

Los objetivos generales del presente estudio son:

(1) Calcular los anchos parciales de resonancia  $\Gamma_n^0$  y  $\Gamma_n^L$  dados por las ecuaciones (32). Enfatizamos que éstos son exactos, pues no involucran aproximaciones semiclásicas o de algún otro tipo. En cambio los otros cálculos que existen para estas cantidades son aproximados. (2) Mostrar que la teoría desarrollada en base a las aproximaciones de la función de Green  $G^+(x, x'; E)$ , representadas por las ecuaciones (35) y (45) describen satisfactoriamente a potenciales de doble y de triple barrera respectivamente, sobre un amplio rango de parámetros que incluye a los típicos de las estructuras de interés experimental. En particular haremos énfasis en el efecto del término de corrección  $T_{12}(E)$  de la ecuación (46) en la descripción de las situaciones que presentan traslape entre resonancias vecinas (caso típico de los potenciales de tres barreras). (3) Calcular curvas características de corriente vs voltaje en términos de los valores de los anchos parciales de decaimiento.

## IV.2 El potencial de doble barrera.

### IV.2.1 Calculo de los anchos de resonancia.

Esta sección está dedicada a complementar un estudio sistemático que realizamos recientemente sobre el potencial de doble barrera [G.García-Calderón, et al. 1991] que se ilustra en la figura 2. En el referido trabajo utilizamos también la aproximación de un término para  $G^+(x, x'; E)$ , ecuación (35), y realizamos cálculos de las anchuras de decaimiento  $\Gamma_n^0$  y  $\Gamma_n^L$  mediante las fórmulas:

$$\Gamma_n^0 = (\Gamma_n / 2) [1 \pm R(\varepsilon_n)]^{1/2} \quad (50)$$

$$\Gamma_n^L = (\Gamma_n / 2) [1 \mp R(\varepsilon_n)]^{1/2} \quad (51)$$

que se obtienen de resolver el par de ecuaciones simultáneas (37) y (39), considerando al factor  $\left[ k_o k_L I_n^2 / a_{no} a_{nL} \right]$  igual a uno para el caso sin voltaje aplicado. En las anteriores ecuaciones  $R(\varepsilon_n)$  es el coeficiente de reflexión evaluado en resonancia obtenido exactamente por el método de la *matriz de transferencia*. Conviene recalcar que las fórmulas (50) y (51) para  $\Gamma_n^0$  y  $\Gamma_n^L$  requieren un conocimiento *a priori* del coeficiente de transmisión exacto y del valor del polo complejo  $E_n = \varepsilon_n - i\Gamma_n/2$  de la amplitud de transmisión  $t(E)$ . Además involucra la aproximación de un término para  $G^+(x, x'; E)$ .

En la figura 3 se reproducen las gráficas de  $\Gamma_n^0$ ,  $\Gamma_n^L$  y  $\Gamma_n$  aproximadas presentadas en nuestro anterior trabajo y comparamos con el nuevo cálculo exacto. Estas gráficas corresponden al potencial de la figura 2 con  $V_1 = V_2 = 0.2$  eV,  $W_o =$

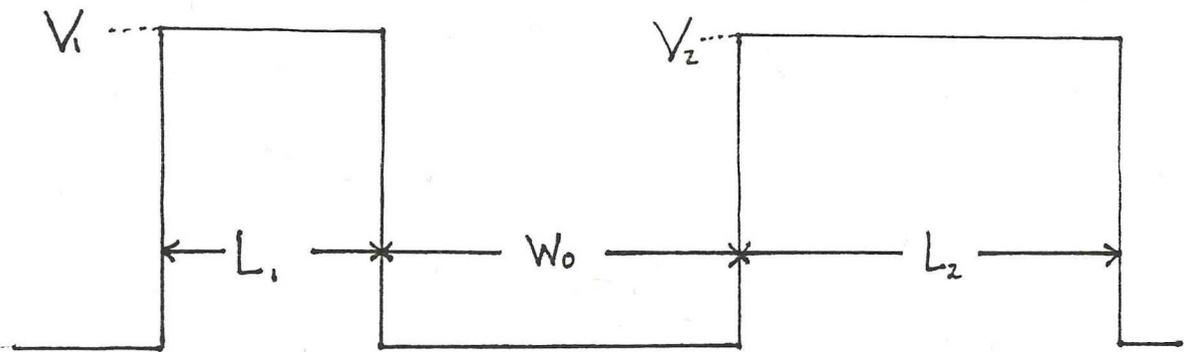


Figura 2. Perfil de potencial de una estructura de tunelaje resonante de doble barrera.  $L_1$  y  $L_2$  denotan los espesores de las barreras,  $V_1$  y  $V_2$  representan a las alturas y  $W_0$  al ancho del pozo.

50 Å, masa efectiva  $m^* = 0.079m_e$ ,  $L_1 = 30$  Å, y el ancho de la segunda barrera  $L_2$  variando en el intervalo de 20 a 152 Å. Como se puede ver las curvas son virtualmente idénticas para todos los valores de  $L_2$ , evidenciando que las expresiones (50) y (51) son muy buenas aproximaciones. Como era de esperarse las discontinuidades en las gráficas de  $\Gamma_n^O$  y  $\Gamma_n^L$ , que son inherentes a la aproximación, no aparecen en el cálculo exacto.

Para fines de comparación se presentan también en la figura 3 las correspondientes curvas obtenidas mediante aproximaciones semiclásicas WKB. Una de estas últimas no es totalmente WKB (a la que nos referiremos como S-WKB, abreviación de "semi-WKB") ya que el coeficiente de transmisión para las barreras individuales fué calculado en forma exacta [Büttiker, (1988)]. Observamos en la parte (c) de esta misma figura que con respecto a nuestro cálculo WKB subestima el ancho total de resonancia  $\Gamma_n$  y por lo tanto sobreestima el tiempo de vida,  $\tau = \hbar/\Gamma_n$ , lo cual es consistente con lo afirmado por Sollner et al., (1987). Por otro lado el cálculo realizado mediante S-WKB sobreestima  $\Gamma_n$  y en consecuencia subestima el tiempo  $\tau$ . La razón  $\Gamma_n/\Gamma_n^{WKB}$  es del orden de 2 de acuerdo a lo afirmado recientemente por Price, (1988), mientras que  $\Gamma_n^{S-WKB}/\Gamma_n$  es del orden de 1/2. Consecuentemente ambas aproximaciones difieren entre sí por un factor de 4.

A pesar de las diferencias encontradas en los valores de  $\Gamma_n$ ,  $\Gamma_n^{WKB}$  y  $\Gamma_n^{S-WKB}$ , el coeficiente de transmisión en la energía

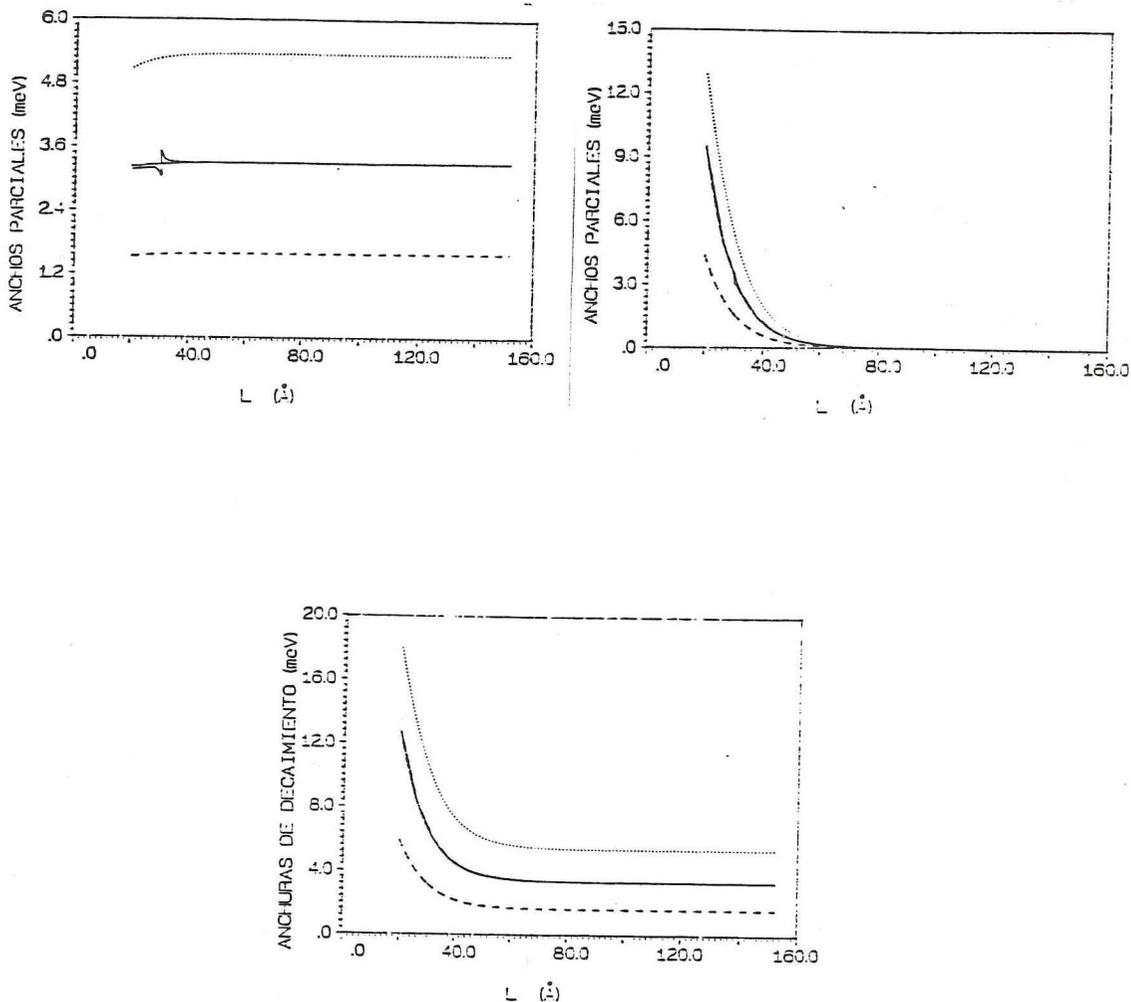


Figura 3. Anchuras parciales y totales de decaimiento como función del espesor de la segunda barrera en una estructura como la representada en la anterior figura, cuyos parámetros son:  $V_1 = V_2 = 0.2$  eV,  $W = 50$  Å,  $L_1 = L_2 = 30$  Å y  $m^* = 0.079 m_e$ ; (a) corresponde a  $\Gamma_n^0$ ; (b) a  $\Gamma_n^L$ ; y (c) a  $\Gamma_n$  ( $n=1$ ). La línea sólida (—) corresponde al cálculo basado en las ecuaciones (50) y (51), la línea a trazos (---) al basado en WKB, la punteada (.....) al obtenido en S-WKB y la de raya y punto (— · — · —) al cálculo exacto.

de resonancia  $T(\varepsilon_n) = 4\Gamma_n^0 \Gamma_n^L / \Gamma_n^2$  resulta ser esencialmente el mismo para los tres diferentes cálculos del ancho de resonancia. Esto se debe a que los valores de WKB y S-WKB son prácticamente un factor constante veces el valor de nuestro cálculo que se cancela al sustituir en la expresión de  $T(\varepsilon_n)$ .

En el análisis anterior las dimensiones del potencial fueron tales que las resonancias resultaran estrechas y aisladas, condiciones que, como ya lo dijimos, son suficientes para que la aproximación de un solo término del desarrollo (34) describa satisfactoriamente al sistema. Ahora consideraremos la situación con traslape entre resonancias y para su descripción utilizaremos la aproximación de dos términos, ecuación (45). Un ejemplo de un potencial con estas características es el de  $V_1 = V_2 = 0.5$  eV,  $W_0 = 50$  Å,  $L_1 = L_2 = 10$  Å cuyas gráficas de  $T(E)$  se muestran en la figura 4 para el caso sin campo eléctrico (a); y para un caso con campo (b). Podemos apreciar en estas curvas que la aproximación de dos términos describe muy bien a la región de traslape (en la fórmula (47) tomamos  $I_n = 1$  con el fin de mejorar la descripción), notamos que la descripción es mejor en la vecindad de la primera resonancia que en la segunda, la razón de esto es que la primera es mucho más estrecha que la segunda, pertenece a un estado más ligado.

Sabemos que la manera más apropiada de tratar el problema con campo eléctrico es mediante funciones de Airy. Para simplificar nuestros cálculos utilizamos la aproximación de

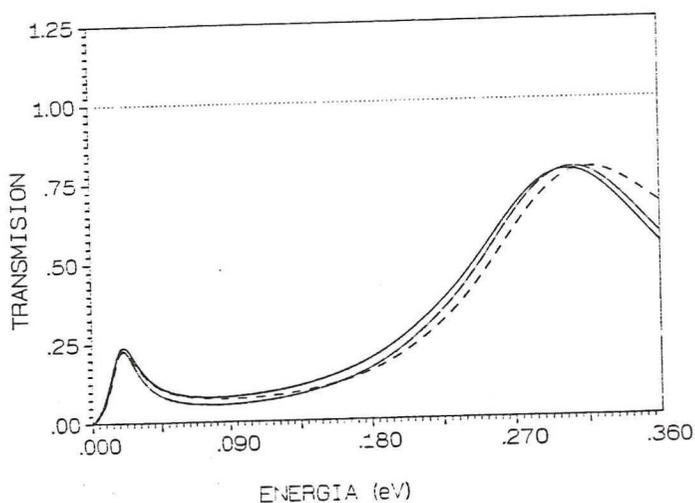
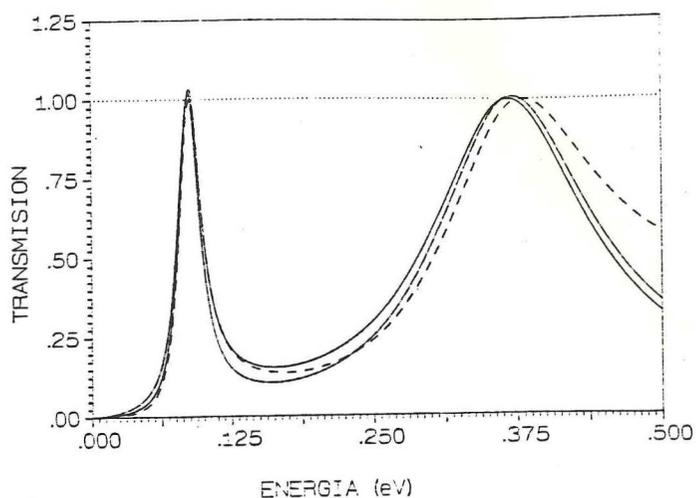


Figura 4. Gráficas del coeficiente de transmisión vs. energía para el potencial:  $V_1 = V_2 = 0.5$  eV,  $W_0 = 50$  Å,  $L_1 = L_2 = 10$  Å y  $m^* = 0.079 m_e$ . (a) Caso sin campo eléctrico; (b) Caso con campo. La línea sólida (—) corresponde a los valores obtenidos mediante  $T_1 + T_2 + T_{12}$  y la línea a trazos (----) al cálculo exacto.

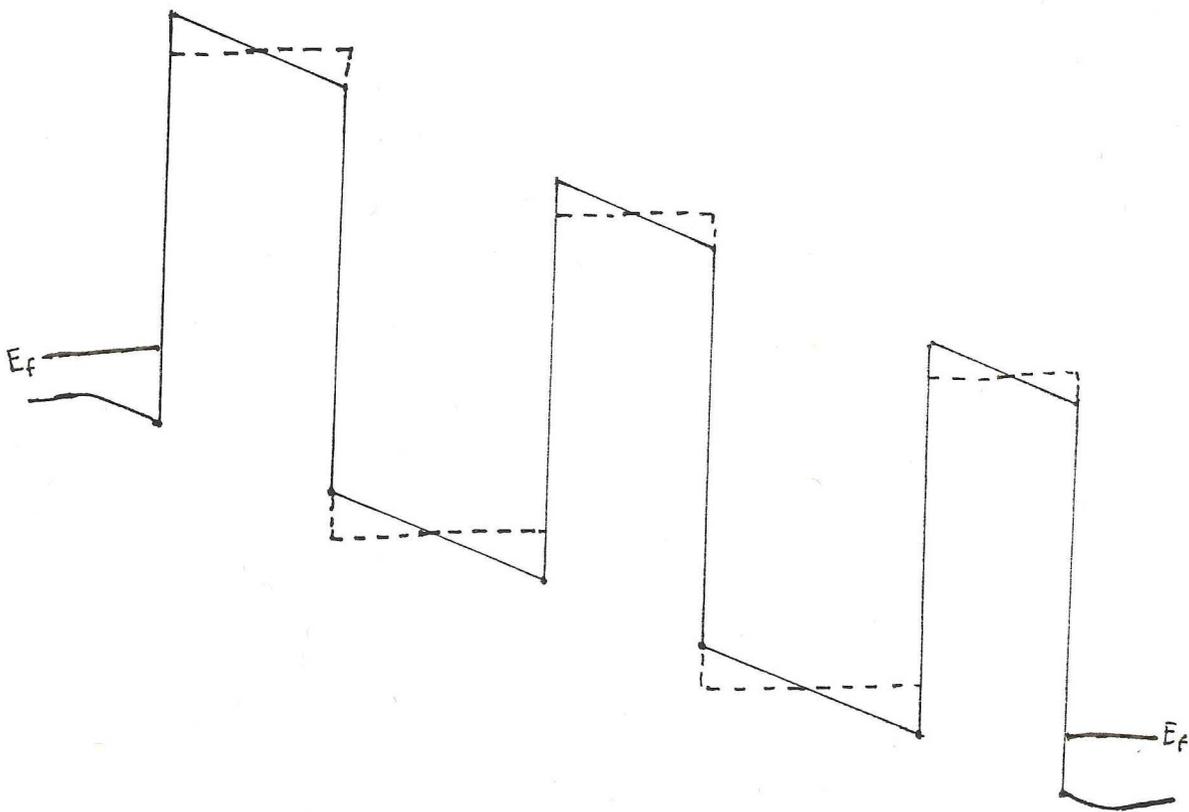


Figura 5. Esquema de la aproximación de escalón utilizada para considerar al campo eléctrico. El trazo continuo corresponde al potencial bajo el efecto del campo y el discontinuo a la aproximación.

escalón que se ilustra en la figura 5 la cual nos permite continuar utilizando soluciones de onda plana. El error que introduce esta aproximación es muy leve [Méndez, 1987] y no afecta de manera importante los aspectos cualitativos que pretendemos discutir.

Con el propósito de estudiar ahora el efecto del campo eléctrico sobre los anchos parciales exactos se presentan en la figura 6 gráficas de estas cantidades como función del campo eléctrico (o equivalentemente para diferentes valores del voltaje). En la parte (a) se presentan los anchos parciales y totales para la primera resonancia, se observa un drástico cambio en la curvatura de  $\Gamma_1^0$  (y por lo tanto del ancho total  $\Gamma_1$ ) para cierto valor del voltaje, al que llamaremos  $\mathcal{V}_1$ . Como sabemos, los niveles de resonancia decrecen conforme se incrementa el voltaje y en el caso en que el nivel de la primera resonancia ha bajado hasta cero es cuando ocurre ese cambio en la curvatura. Para valores mayores que  $\mathcal{V}_1$ ,  $\Gamma_1^0$  prácticamente se mantiene constante ya que en estos valores casi no varía la probabilidad de que la partícula a esas energías decaiga hacia la izquierda, en cambio el ancho parcial  $\Gamma_n^L$  crece en todo el intervalo de variación del voltaje debido a que una partícula en el pozo encuentra a su derecha una barrera cada vez más débil. Una situación similar se presenta en la parte (b) de esta figura para el caso de la segunda resonancia, aunque aquí los efectos no son tan drásticos, es decir, la

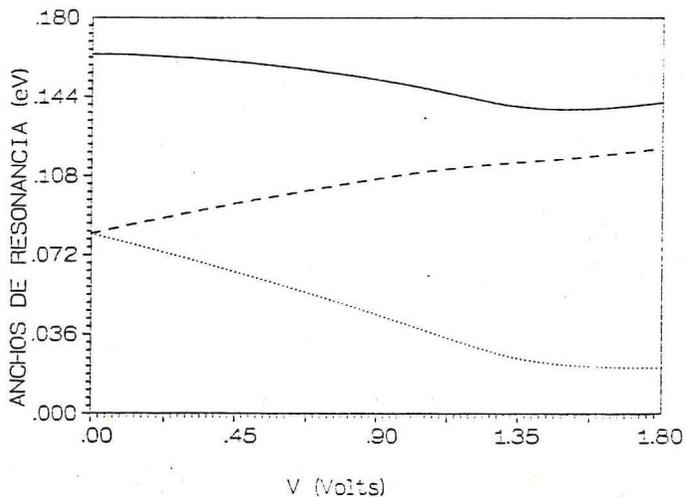
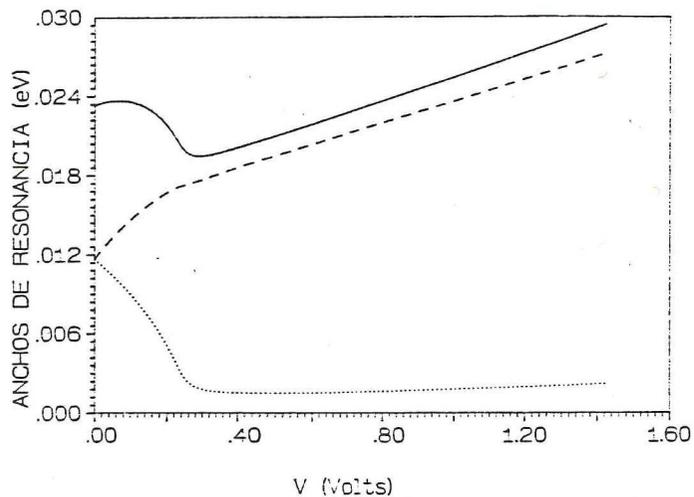


Figura 6. Gráficas de los anchos parciales de resonancia  $\Gamma_n^0$ ,  $\Gamma_n^L$  y del ancho total  $\Gamma_n$  en función del voltaje aplicado. En (a) se presentan los anchos para  $n=1$  y en (b) para  $n=2$ . La curva continua corresponde a  $\Gamma_n$ , la curva a trazos a  $\Gamma_n^L$  y la punteada a  $\Gamma_n^0$ . Los parámetros del potencial son los mismos que los correspondientes correspondientes al de la figura 4.

curvatura de  $\Gamma_2^0$  cambia en cierto valor  $\varphi_2$  del voltaje pero más suavemente.

#### IV.2.2 Cálculo de la corriente.

En el capítulo anterior obtuvimos una fórmula para el cálculo de la corriente electrónica en función de los anchos parciales para el potencial de doble barrera, ecuaciones (43) y (44). En la figura 7 presentamos un par de ejemplos para los cuales calculamos la corriente de tunelaje mediante dicha fórmula y comparamos con la curva de corriente que involucra al coeficiente de transmisión exacto  $T(E)$  obtenida por integración numérica (regla trapezoidal en este caso) de las ecuaciones (41) y (42). El caso de la parte (a) de la figura corresponde al potencial con parámetros:  $V_1=V_2=0.2$  eV,  $L_1=L_2=50$  Å,  $W_0=50$  Å y  $m^*=0.079 m_e$ , el cual es un ejemplo con poco traslape en sus resonancias. Notamos que coinciden prácticamente ambas curvas como era de esperarse. El pico corresponde a la contribución de la primera resonancia a la corriente, esto es, al intervalo en el voltaje para el cual el primer nivel de resonancia "cruza el mar de Fermi" del electrodo izquierdo (el emisor). El caso presentado en la parte (b) es el mismo que el correspondiente a la figura 4, el cual (como vimos), presenta traslape en sus resonancias, no obstante la curva de corriente para este caso también resulta bastante buena como lo evidencia el hecho de que casi coincide también con la curva exacta. Esta última curva I-V muestra un segundo pico que corresponde al

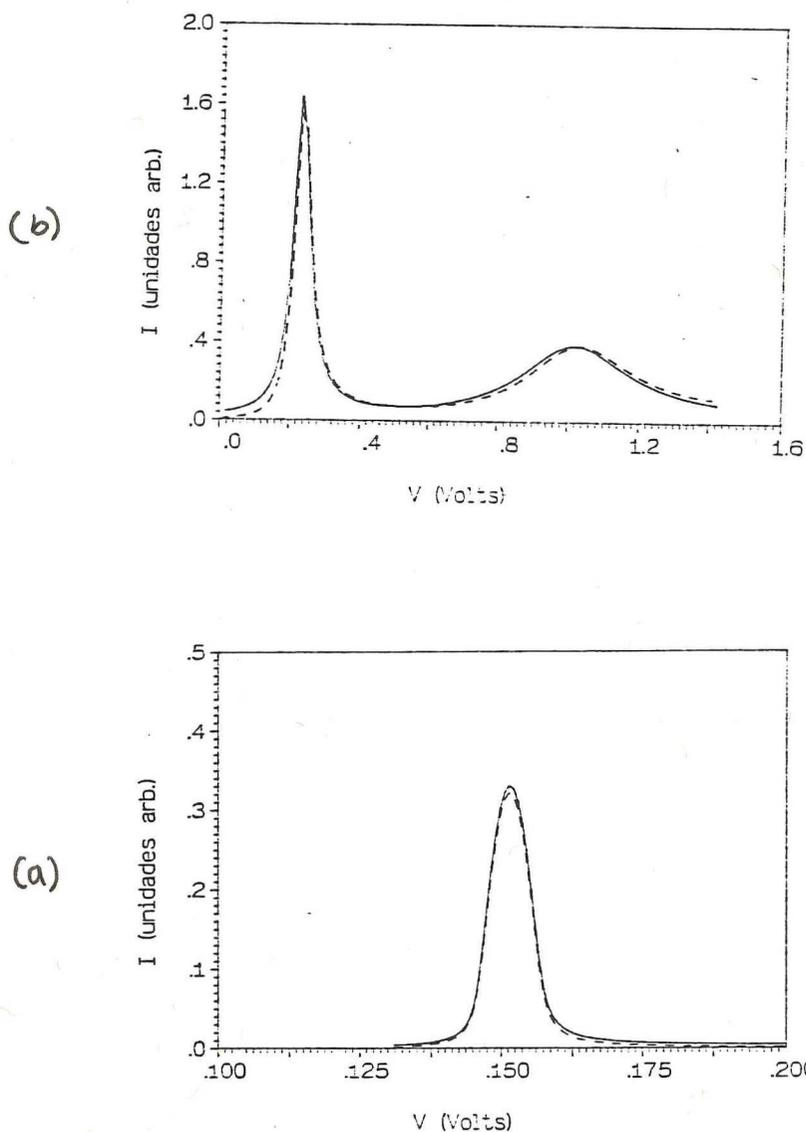


Figura 7. Curvas características de corriente vs. voltaje para los potenciales:  $V_1 = V_2 = 0.2$  eV,  $W_0 = 50$  Å,  $L_1 = L_2 = 50$  Å (a); y  $V_1 = V_2 = 0.5$  eV,  $W_0 = 50$  Å,  $L_1 = L_2 = 10$  Å (b). La curva continua proviene de la aproximación  $T \cong T_1 + T_2 + T_{12}$  y la discontinua al cálculo exacto.

segundo nivel de resonancia.

Estos resultados se obtuvieron sin considerar el término de traslape  $T_{12}(E)$  en la corriente y sin embargo fueron bastante buenos, lo cual prueba la efectividad de la aproximación  $T(E) \cong T_1(E) + T_2(E)$ , ecuación (35), para calcular corrientes. La cual presumiblemente se mantendrá al incorporar otros efectos.

### IV.3 El potencial de triple barrera.

El estudio del potencial de tres barreras como el que se ilustra en la figura 8 lo haremos en dos partes. Por un lado consideraremos primero múltiples variaciones en sus parámetros manteniendo la simetría del potencial y después analizaremos los efectos de la asimetría, en especial la introducida por el campo eléctrico. Incluiremos también cálculos de curvas características de corriente.

#### IV.3.1 El caso simétrico.

Con el propósito de investigar primero la sensibilidad de los valores de las resonancias, de los anchos parciales y del coeficiente de transmisión a los cambios en los distintos parámetros del potencial, presentamos enseguida diversas situaciones para el potencial de tres barreras.

##### A.-Variación de $L_2$ .

Partiendo de la configuración cuyos parámetros son  $L_1 = L_2 = L_3 = 20 \text{ \AA}$ ,  $W_1 = W_2 = 50 \text{ \AA}$ ,  $V_1 = V_2 = V_3 = 0.5 \text{ eV}$ , cuya gráfica de coeficiente de transmisión se muestra en la figura 9 (a), se

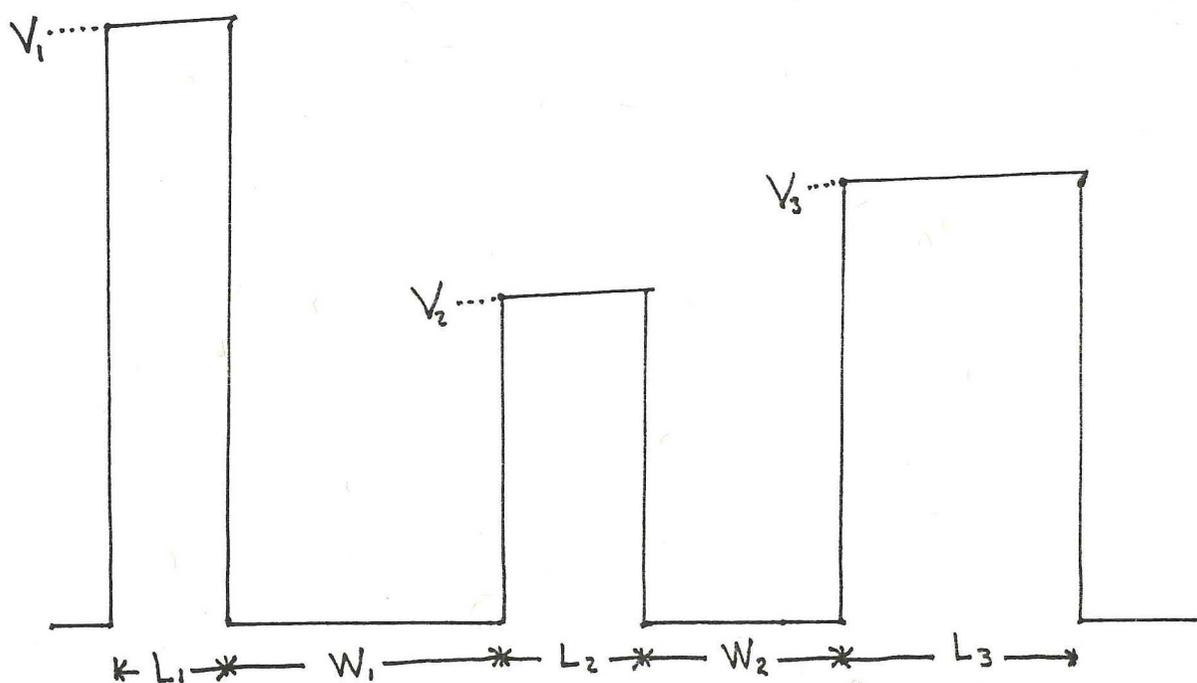
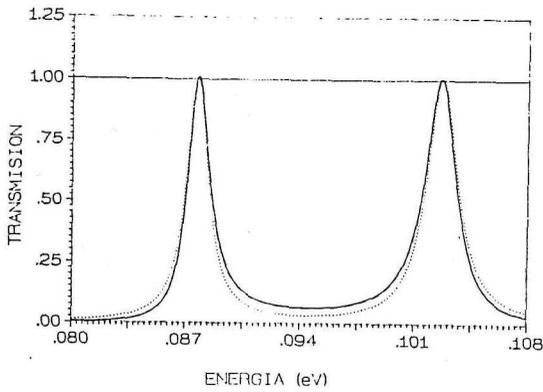
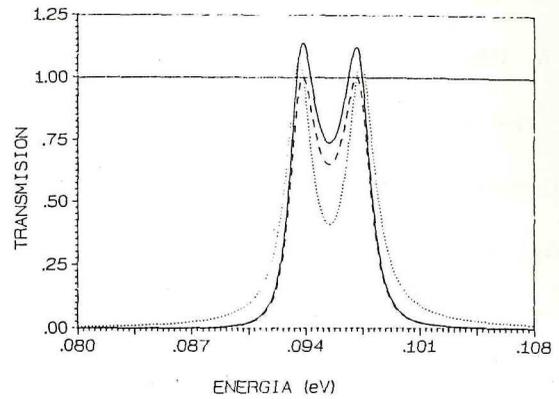


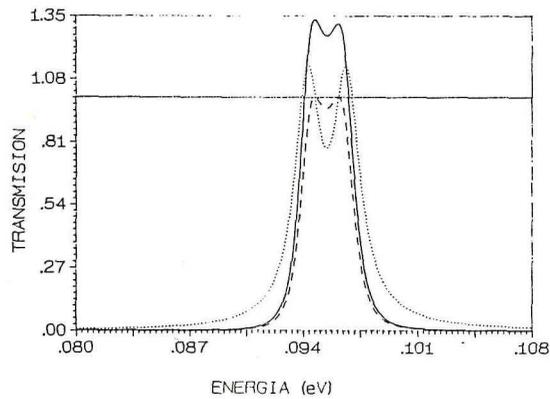
Figura 8. Perfil de potencial de una estructura de tunelaje resonante de tres barreras.  $L_1$ ,  $L_2$  y  $L_3$  denotan los espesores de las barreras,  $V_1$ ,  $V_2$  y  $V_3$  representan a las alturas,  $W_1$  y  $W_2$  a los anchos de los pozos.



(a)



(b)



(c)

Figura 9. Gráficas del coeficiente de transmisión vs. energía del electrón incidente para valores distintos de  $L_2$ . En (a)  $L_2 = 20 \text{ \AA}$ ; en (b)  $L_2 = 35 \text{ \AA}$ ; y en (c)  $L_2 = 40 \text{ \AA}$ ; los restantes parámetros adquieren los valores fijos:  $L_1 = L_3 = 20 \text{ \AA}$ ,  $W_1 = W_2 = 50 \text{ \AA}$ ,  $V_1 = V_2 = V_3 = 0.5 \text{ eV}$ . La curva continua (—) corresponde al cálculo por  $T_1 + T_2 + T_{12}$ , la curva a trazos (-----) al cálculo exacto, y la punteada (.....) al cálculo mediante  $T_1 + T_2$ .

confunde la curva de  $T_1 + T_2 + T_{12}$  con la exacta evidenciando la importancia del término de interferencia  $T_{12}$ . Incrementamos el espesor de la barrera central  $L_2$  a los valores de 35 y 40 Å, y el efecto sobre el coeficiente de transmisión se observa en las partes (b) y (c) respectivamente, de esta misma figura. Aumenta notablemente el traslape debido al acercamiento entre los picos de resonancia. Este acercamiento es de esperarse ya que al crecer la barrera central los pozos se separan y se vuelven más independientes, es decir, a medida que se separan se parecen más cada uno de ellos a un solo pozo aislado. Notamos que al aumentar  $L_2$  el coeficiente de transmisión descrito por  $T_1 + T_2 + T_{12}$  excede a la unidad para ciertas energías. Esto se debe a que la condición de *unitariedad* se rompe desde el momento que se está utilizando una forma incompleta de la función de Green, es decir, del desarrollo de  $G^+(x, x'; E)$  en un número infinito de términos dado por la ecuación (3), solo se consideran los dos primeros, ver ecuación (45). En el caso de la gráfica de  $T_1 + T_2$  es más grave, pues se está ignorando además el término de interferencia  $T_{12}$ .

En (b) y en (c) el término  $T_{12}$  no es suficiente para contrarrestar el fuerte traslape, evidentemente faltan más términos del desarrollo de  $G^+(x, x'; E)$  para lograrlo. No obstante se nota una visible mejoría en la forma de la gráfica con la ayuda de este término, notamos por ejemplo que mejoran las posiciones de los picos de resonancia, pues tienden a

coincidir con los de la curva de  $T$  exacta y los anchos también. Por ejemplo para el caso (c) de la figura 9 las posiciones del primer pico de las gráficas de  $T_1+T_2$ ,  $T_1+T_2+T_{12}$ , y  $T$  exacta son respectivamente, .09431, .09452, y .09473; y las del segundo, .09662, .09641, y .09617.

Este intervalo de variación para  $L_2$  se eligió a propósito para hacer notar una de las circunstancias bajo las cuales la *no-unitariedad* empieza a ser importante, y en consecuencia la aproximación de dos términos hecha sobre  $G^+(x,x';E)$  empieza a perder validez. Tal circunstancia es, como ya se dijo, el mutuo acercamiento de los picos de resonancia. Posteriormente veremos que otra limitante a dicha aproximación la impone el valor de la integral  $I_n = \int_0^L |u_n(x)|^2 dx$ , a través del cual se manifiesta la no unitariedad en la medida que éste difiere del valor uno.

Sin embargo estas limitaciones sobre nuestra aproximación se manifiestan en situaciones de barreras demasiado débiles que no representan a las dimensiones típicas de las heteroestructuras de interés. Como después veremos, la aproximación es buena en un amplio rango de parámetros, dentro del cual caen las dimensiones típicas de las estructuras de actual investigación [Sollner et al., 1983, 1984, 1987. Littleton y Camley, 1986. Méndez, 1987].

#### B.-Variación simultánea de $L_1$ y $L_2$ .

De los casos presentados en la figura 9 el peor de todos es el (c), correspondiente al valor de  $L_2=40$  Å. Ahora veremos

como mejora rápidamente la situación para este último caso con pequeños incrementos en los espesores de las barreras laterales. La figura 10 presenta en (a) y en (b) un par de casos con  $L_1=L_3=25$  y  $30$  Å, respectivamente.

Sabemos ya cual es el efecto del aumento de los espesores de las barreras laterales sobre los valores de los anchos parciales de resonancia,  $\Gamma_n^O$  y  $\Gamma_n^L$  ( $n=1,2$ ). Estos últimos disminuyen considerablemente y en consecuencia los anchos totales  $\Gamma_n = \Gamma_n^O + \Gamma_n^L$ . El traslape se reduce en este caso debido a que los picos de resonancia son ahora más estrechos.

De las anteriores variaciones notamos que existe una especie de competencia entre el crecimiento del ancho de la barrera central y del ancho de las barreras laterales a empeorar y mejorar respectivamente la descripción mediante la fórmula (46). Siendo más sensible el segundo efecto como lo evidencia el hecho de que en la figura 9  $L_2$  se incrementó en 20 Å mientras que  $L_1$  y  $L_3$  solo necesitaron crecer la mitad (10 Å) para obtener una excelente descripción en la cual el cálculo mediante  $T_1+T_2+T_{12}$  es virtualmente exacto.

De lo anterior podemos prever lo que ocurrirá si incrementamos simultáneamente  $L_1$ ,  $L_2$  y  $L_3$ . Se definirán perfectamente bien los picos de transmisión y las tres curvas tenderán a ser indistinguibles entre sí.

### C.-Variación simultánea de $L_1$ , $L_2$ , y $L_3$ .

Solo para verificar nuestra anterior conjetura, en la

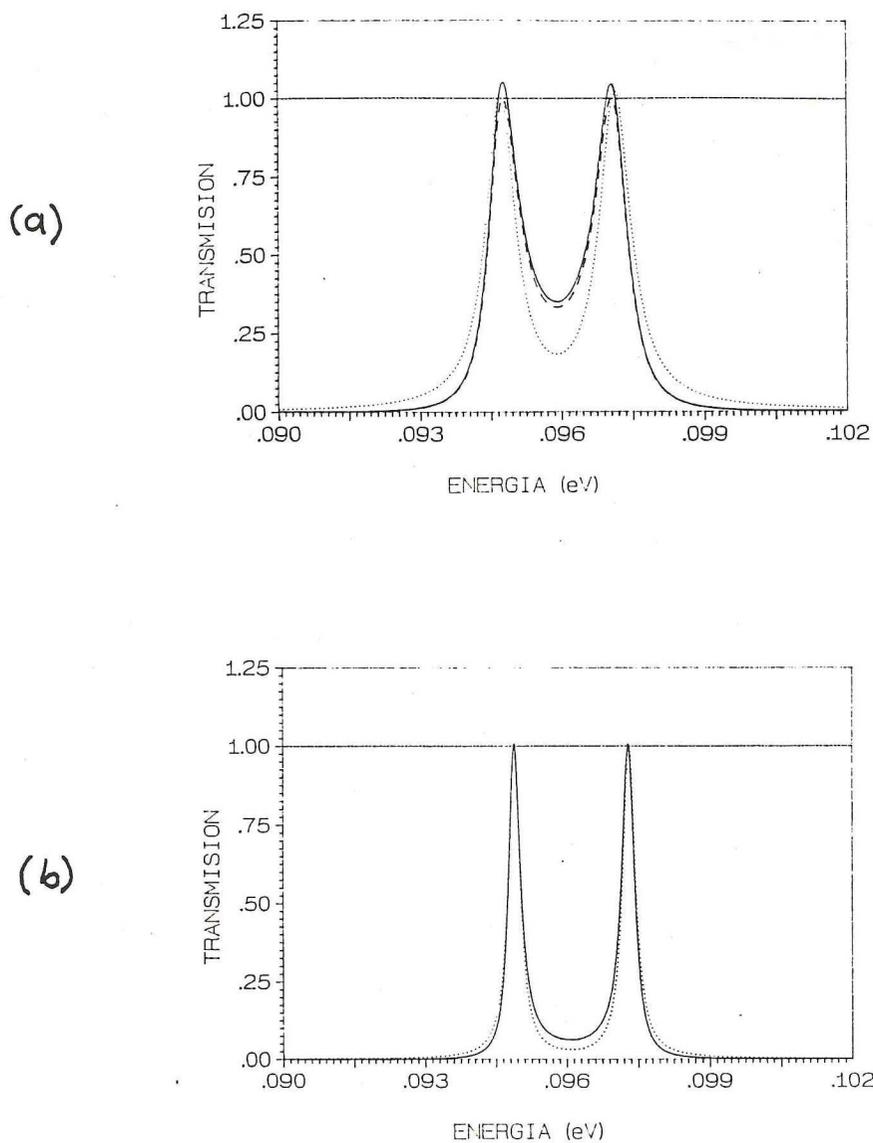


Figura 10. Gráficas del coeficiente de transmisión vs. energía del electrón incidente para valores distintos de  $L_1$  y  $L_3$ . En (a)  $L_1 = L_3 = 25$  Å; y en (b)  $L_1 = L_3 = 30$  Å; los restantes parámetros se mantienen fijos en los valores:  $L_2 = 40$  Å,  $W_1 = W_2 = 50$  Å,  $V_1 = V_2 = V_3 = 0.5$  eV. El significado de los tipos de curva: (—), (-----), y (.....) es el mismo que el dado en la figura 9.

figura 11 se presenta un caso con los mismos parámetros que el de la figura 9 (a) excepto que aquí  $L_1=L_2=L_3=30 \text{ \AA}$ . Notamos que las tres curvas se confunden entre sí. De hecho en este caso el término  $T_{12}$  ya no es tan necesario lo cual es ventajoso pues se dispone así de una parametrización más sencilla del coeficiente de transmisión (y por lo tanto de la corriente) simplemente como la suma de un par de Lorentzianas.

#### D.-Variación en el ancho de los pozos, $W_1$ y $W_2$ .

El principal efecto observado al reducir el ancho de los pozos es el corrimiento de los niveles  $\varepsilon_1$  y  $\varepsilon_2$  y sus anchos  $\Gamma_1$  y  $\Gamma_2$  a valores más grandes, lo cual se debe a que los pozos se vuelven menos atractivos. Esto es acompañado con una notable separación en los picos como se muestra en la figura 12.

En la figura 13 se presentan las correspondientes gráficas de  $|u_n(x)|^2$  vs  $x$  en el intervalo  $[0,L]$ ,  $L$  es la longitud del sistema. Como puede apreciarse, el decrecimiento en el ancho de los pozos trae como consecuencia que la función  $|u_n(x)|^2$  incremente su altura en las regiones entre barreras.

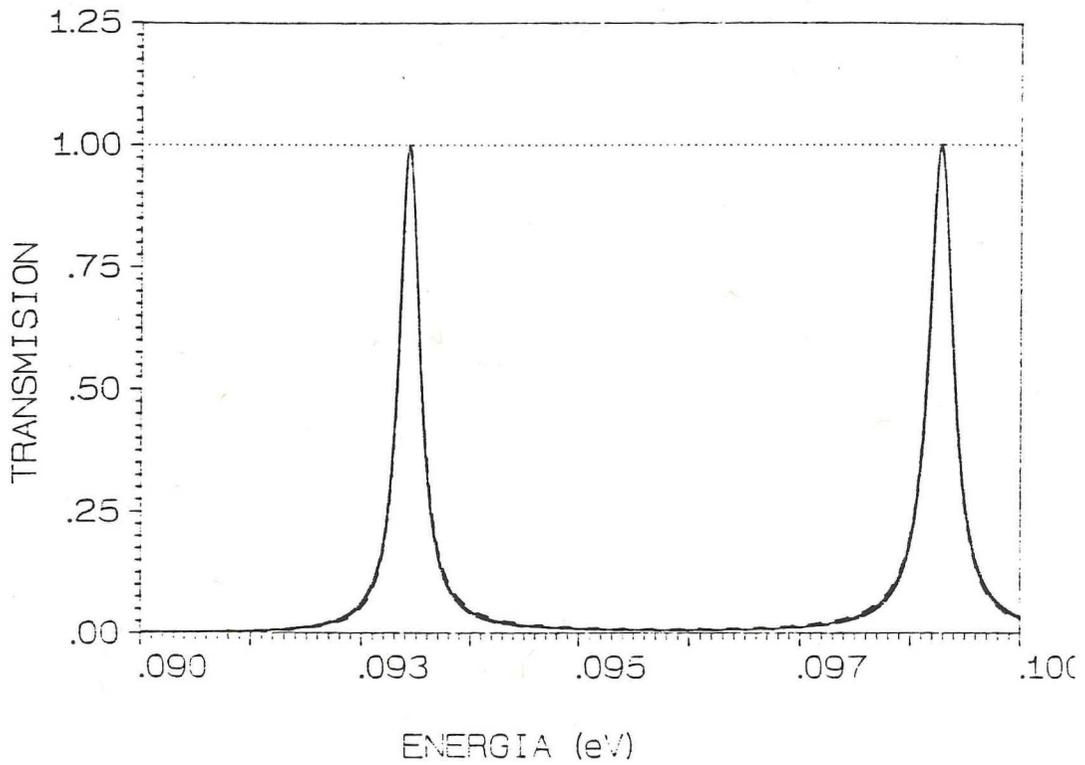
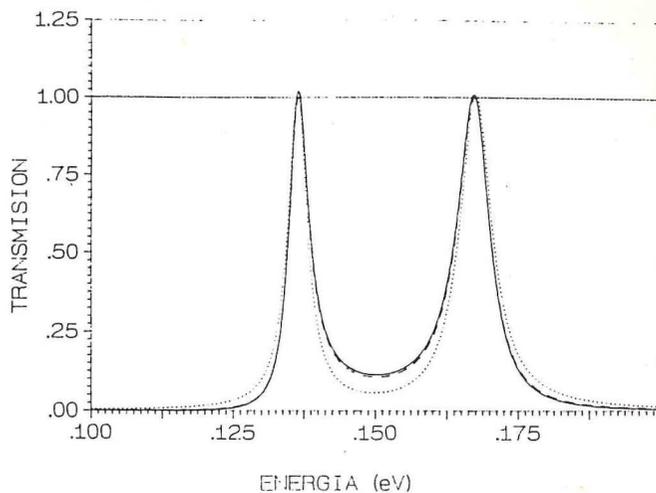


Figura 11. Gráficas del coeficiente de transmisión vs. energía del electrón incidente para el potencial cuyos parámetros son:  $W_1=W_2=50$  Å,  $V_1=V_2=V_3=0.5$  eV,  $L_1=L_2=L_3=30$  Å. El significado de los tipos de curva: (—), (-----), y (- - -) es el mismo que el dado en la figura 9.

(a)



(b)

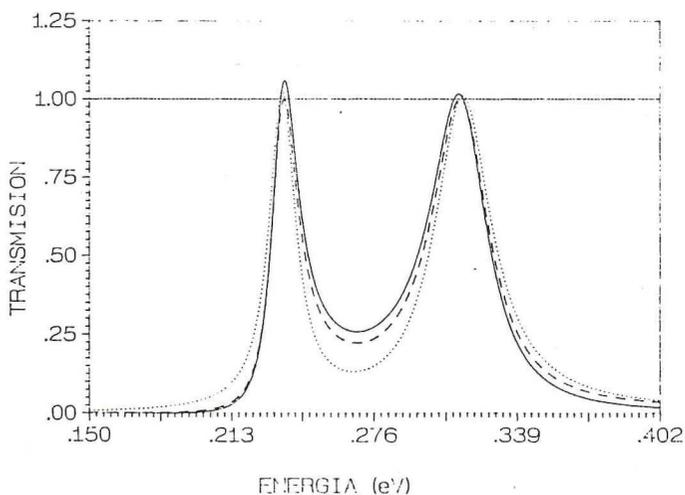


Figura 12. Gráficas del coeficiente de transmisión vs. energía del electrón incidente para valores distintos de  $W_1=W_2$ . En (a)  $W_1=W_2=35$  Å; y en (b)  $W_1=W_2=20$  Å; los restantes parámetros se mantienen fijos en los valores  $V_1=V_2=V_3=0.5$  eV,  $L_1=L_2=L_3=20$ . El significado de los tipos de curva: (—), (-----), y (.....) es el mismo que el dado en la figura 9.

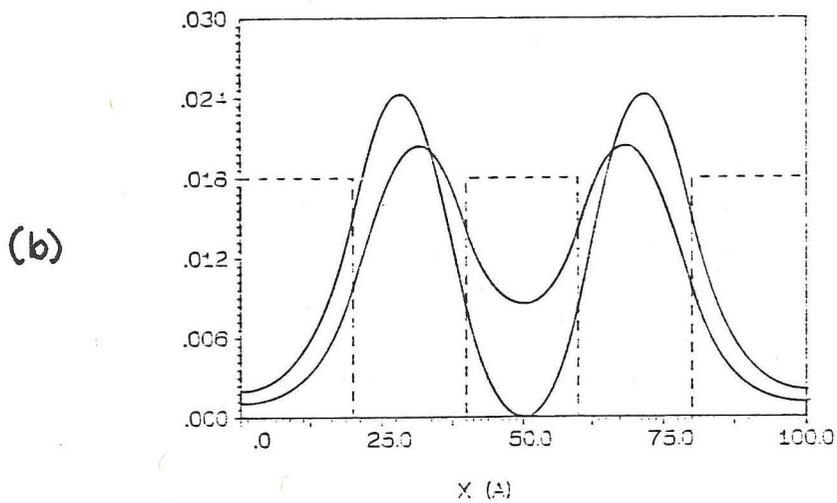
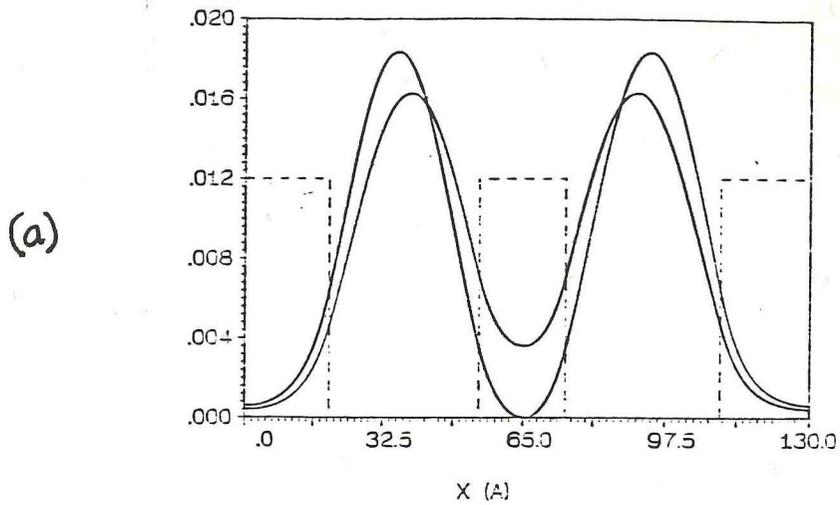


Figura 13. Gráficas del módulo de la función de onda  $|u_n(x)|^2$  vs.  $X$  donde  $X$  varía en la región interna del potencial. La curva del nodo central corresponde al segundo estado resonante y la otra curva al primero. Se ilustran las tres barreras mediante el dibujo a trazos. El caso (a) y el (b) corresponden respectivamente a los potenciales de las partes (a) y (b) de la figura 12.

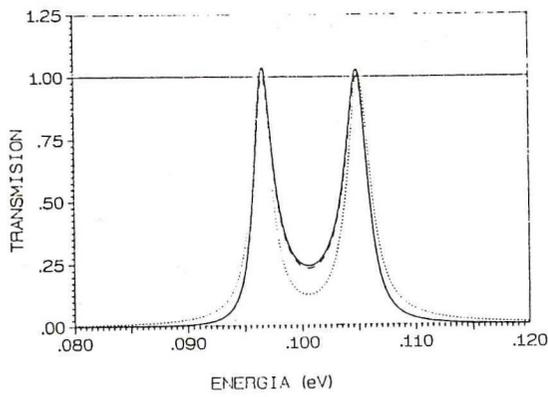
### E.-Variación de la altura en la barrera central, $V_2$ .

Al crecer  $V_2$  es de esperarse un efecto similar al que se observó al aumentar  $L_2$  en la parte A. En efecto, esto es lo que ocurre y lo podemos apreciar en las gráficas (a) y (b) de la figura 14, el traslape aumenta de nuevo debido al acercamiento de los picos.

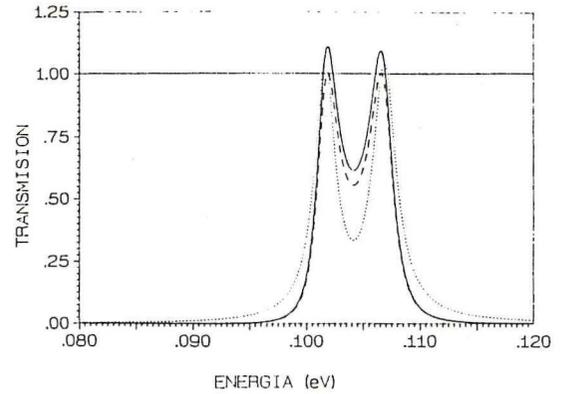
Por otro lado si disminuimos la altura  $V_2$  la aproximación se vuelve virtualmente exacta, pues en las gráficas (c) y (d) de la misma figura las tres curvas de transmisión se confunden entre sí. Con esta variación el sistema se parece cada vez más a un sistema de dos barreras con un pozo muy grande (120 Å en este caso).

### F.-Variación simultáneas de las alturas, $V_1$ , $V_2$ y $V_3$ .

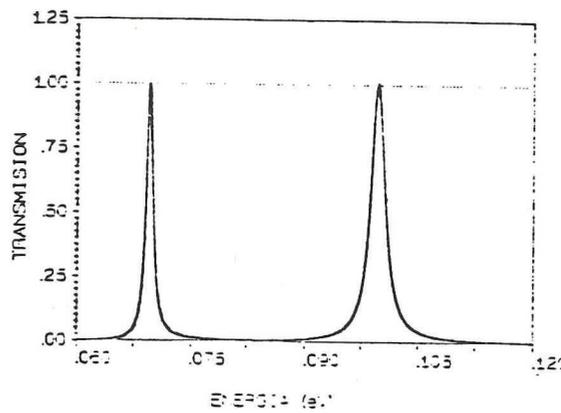
En la figura 15 se presenta una secuencia de gráficas del coeficiente de transmisión correspondiente a casos de barreras de diferentes alturas cuyos valores se indican en el pie de la figura. El traslape de los picos de resonancia crece bastante con la disminución simultánea de la altura de las tres barreras y los picos exceden a la unidad. La causa principal de tal exceso, es el valor de la integral  $I_n = \int_0^L |u_n(x)|^2 dx$  ( $n=1,2$ ) que es notablemente mayor que uno, por ejemplo para el caso de altura igual a 0.15 eV, el valor del cuadrado de estas



(a)

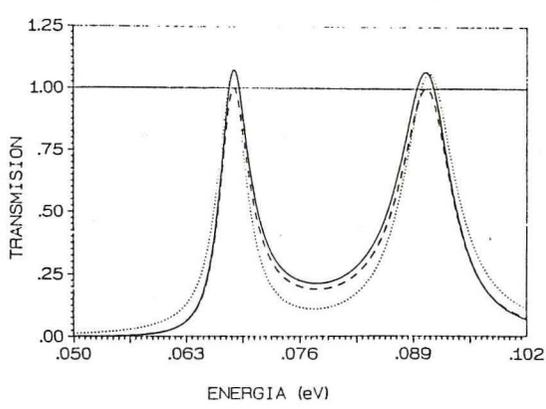


(b)

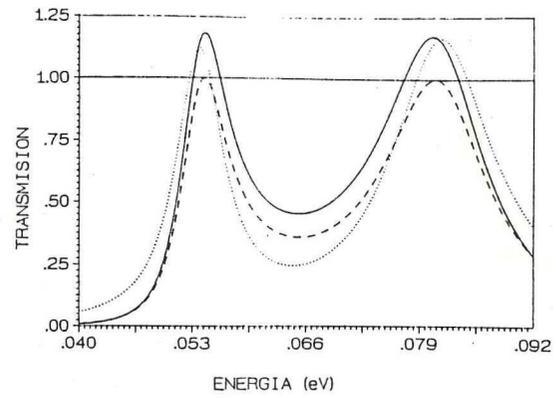


(c)

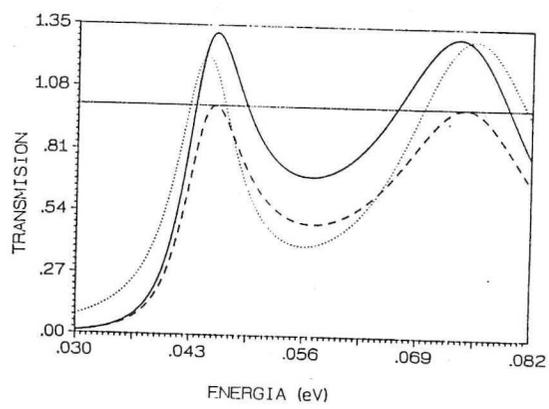
Figura 14. Gráficas del coeficiente de transmisión vs. energía del electrón incidente para valores distintos de  $V_2$ . En (a)  $V_2 = 0.75 \text{ eV}$ ; en (b)  $V_2 = 1.0 \text{ eV}$ ; y en (c)  $V_2 = 0.25 \text{ eV}$ ; los restantes parámetros adquieren los valores fijos:  $V_1 = V_3 = 0.5 \text{ eV}$ ,  $W_1 = W_2 = 50 \text{ \AA}$ ,  $L_1 = L_2 = L_3 = 20 \text{ \AA}$ . La curva continua (—) corresponde al cálculo por  $T_1 + T_2 + T_{12}$ , la curva a trazos (-----) al cálculo exacto, y la de línea y punto (-·-·-·-) al cálculo mediante  $T_1 + T_2$ .



(a)



(b)



(c)

Figura 15. Gráficas del coeficiente de transmisión vs. energía del electrón incidente para tres diferentes alturas. (a)  $V_1 = V_2 = V_3 = .3\text{eV}$ ; (b)  $V_1 = V_2 = V_3 = .2\text{eV}$ . (c)  $V_1 = V_2 = V_3 = 0.15\text{ eV}$  Los restantes parámetros adquieren los valores fijos:  $W_1 = W_2 = 50\text{ \AA}$ ,  $L_1 = L_2 = L_3 = 20\text{ \AA}$ . La curva continua (—) corresponde al cálculo por  $T_1 + T_2 + T_{12}$ , la curva a trazos (- - - -) al cálculo exacto, y la punteada (.....) al cálculo mediante  $T_1 + T_2$ .

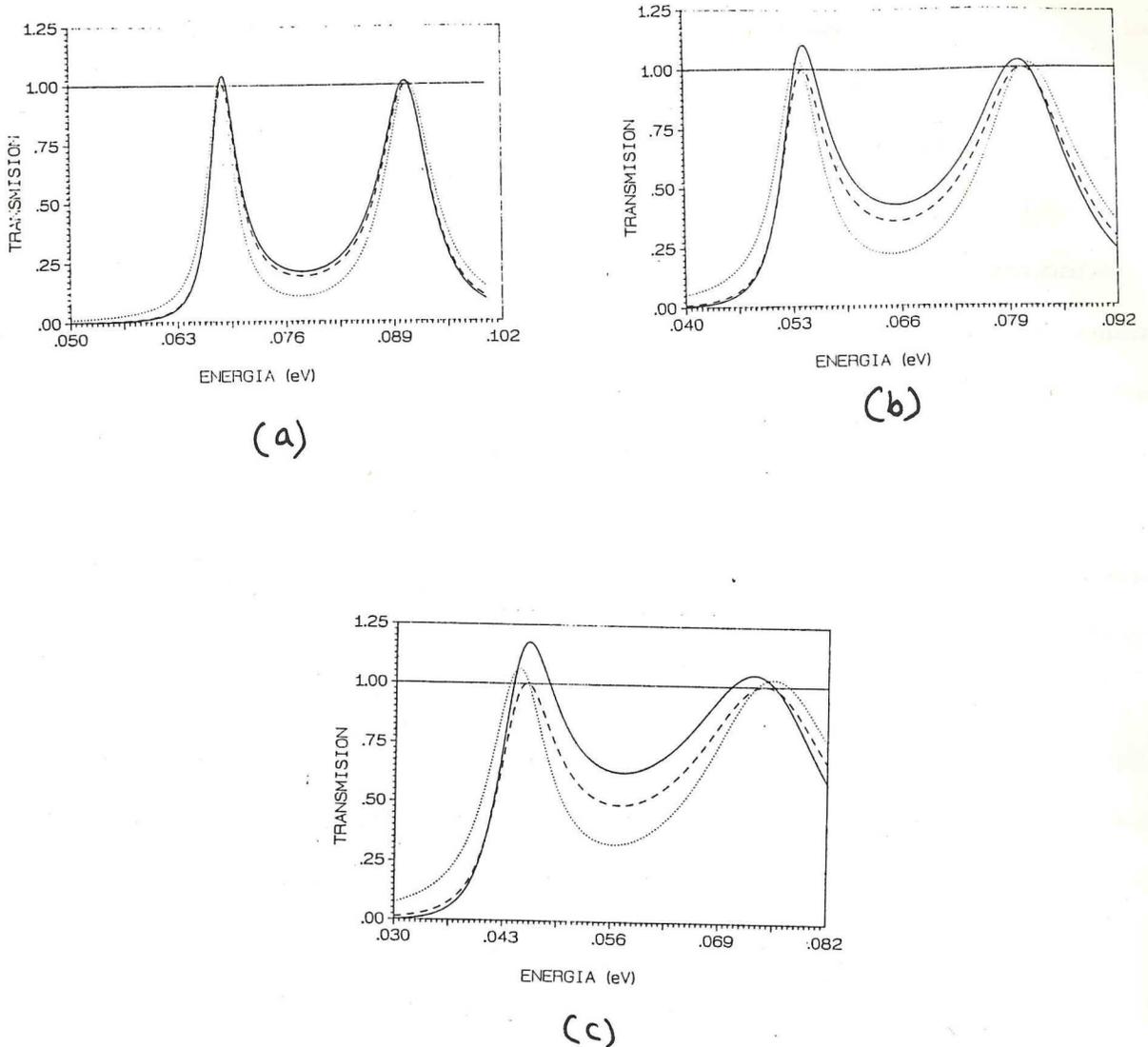


Figura 16. Gráficas del coeficiente de transmisión vs. energía del electrón incidente para tres diferentes alturas. (a)  $V_1 = V_2 = V_3 = .3\text{eV}$ ; (b)  $V_1 = V_2 = V_3 = .2\text{eV}$ ; (c)  $V_1 = V_2 = V_3 = .15\text{eV}$ . Los restantes parámetros adquieren los valores fijos:  $W_1 = W_2 = 50 \text{ \AA}$ ,  $L_1 = L_2 = L_3 = 20 \text{ \AA}$ . La curva continua (—) corresponde al cálculo por  $T_1 + T_2 + T_{12}$  (haciendo  $I_n = 1$ ), la curva a trazos (-----) al cálculo exacto, y la punteada (.....) a  $T_1 + T_2$ .

integrales es:  $I_1^2=1.1332$  e  $I_2^2=1.2710$ . Para ver la manera en que estos valores afectan al coeficiente de transmisión en las energías de resonancia reescribimos la ecuación (46) en la forma:

$$T(E) = (k_0 k_L I_1^2 / a_{10} a_{1L}) \mathcal{L}_1(E) + (k_0 k_L I_2^2 / a_{20} a_{2L}) \mathcal{L}_2(E) + T_{12}(E) \quad (52)$$

donde  $\mathcal{L}_1$  y  $\mathcal{L}_2$  son Lorentzianas centradas en cada resonancia. Entonces al evaluar en la energía de resonancia  $\varepsilon_1$  tendremos que el valor de T es (considerando que el potencial es simétrico:  $k_0 = k_L \equiv k$ ,  $a_{10} = a_{1L} \equiv a_1$ )

$$T(\varepsilon_1) = I_1^2 + (k_1^2 I_2^2 / a_2^2) \mathcal{L}_2(\varepsilon_1) + T_{12}(\varepsilon_1) \quad (53)$$

evidentemente se ve de (53) que  $T(\varepsilon_1) > 1$  pues los dos últimos términos de la ecuación anterior son positivos a esa energía (para este caso particular como lo mostró el cálculo numérico) y el valor del primero ya lo conocemos, es 1.1332. Algo análogo se tiene si se evalúa en la segunda energía de resonancia. Podemos hacer a conveniencia  $I_n=1$  para reajustar las curvas, y entonces se obtienen las gráficas de la figura 16, que son mucho mejores. Renormalizar el valor de  $I_n$  corresponde a incorporar parte del efecto de los términos del desarrollo no incluidos.

Con esta última variación hemos visto que la aproximación empieza a fallar cuando las barreras son muy débiles. Sin embargo potenciales tan débiles como este no son tan realistas, por lo general los parámetros típicos en el experimento andan

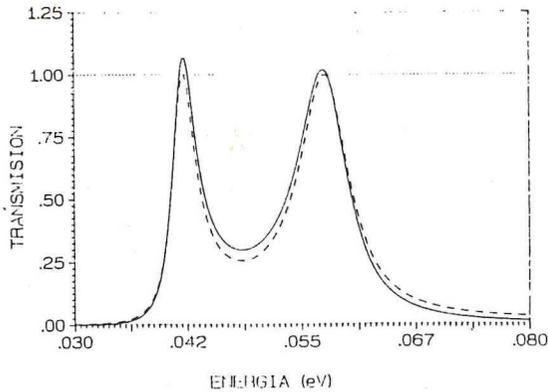
por encima de 20 Å y por encima de 0.15 eV.

**G.-Variación simultánea de  $L_1, L_2, L_3, V_1, V_2$  y  $V_3$  manteniendo fija el área de cada barrera.**

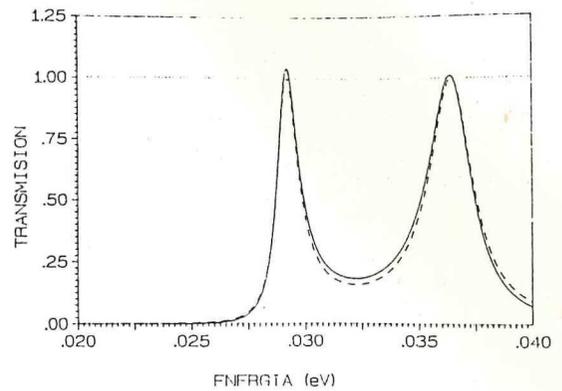
De los casos estudiados en F podemos considerar que los de alturas mayores o iguales que 0.2 eV son bien descritos por nuestra aproximación (después de haber renormalizado mediante la condición  $I_n = 1$ , donde  $n=1,2$ ). Por otro lado, tomando en consideración el análisis hecho en C, sería de esperarse que para el peor de los casos de F (el de 0.15 eV) al incrementar los espesores de las barreras eventualmente el sistema quedaría de nuevo bien descrito por la aproximación, es decir se cruzaría de nuevo la "frontera de validez". En esta parte pretendemos definir este "contorno de validez" para el caso particular del potencial de tres barreras idénticas.

Se llevó a cabo una variación simultánea de las alturas y espesores de las barreras manteniendo constante el área de cada una, es decir, variamos los parámetros  $V$  y  $L$  a lo largo de la hipérbola  $LV=k$ , siendo  $L$  y  $V$ , respectivamente, el valor de los espesores y alturas de las barreras,  $k$  es una constante cuyo valor numérico es el del área de cada barrera.

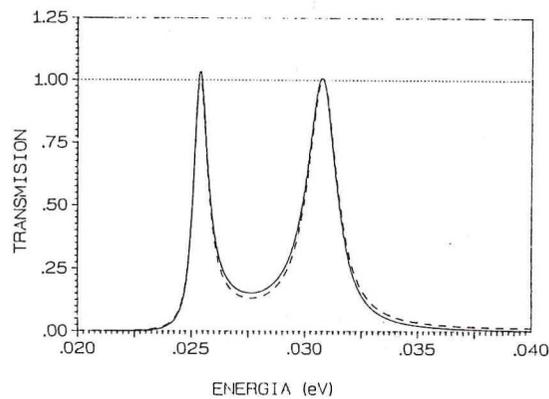
El caso de 0.2eV tiene  $k=4$ . En la figura 17 se muestran gráficas del coeficiente de transmisión para variaciones de  $L$  y  $V$  con este valor de  $k$ . Todas ellas presentan una magnífica descripción de la región de traslape mediante la curva de  $T_1 + T_2 + T_{12}$  y la eficiencia de la descripción es aproximadamente



(a)



(b)



(c)

Figura 17. Gráficas del coeficiente de transmisión vs. energía del electrón incidente para diferentes alturas y anchuras de las barreras manteniendo el área fija (a)  $V_1 = V_2 = V_3 = .1\text{eV}$  y  $L_1 = L_2 = L_3 = 40 \text{ \AA}$ ; (b)  $V_1 = V_2 = V_3 = .05 \text{ eV}$  y  $L_1 = L_2 = L_3 = 80 \text{ \AA}$ ; (c)  $V_1 = V_2 = V_3 = .04\text{eV}$  y  $L_1 = L_2 = L_3 = 100 \text{ \AA}$ .  $W_1 = W_2 = 50 \text{ \AA}$  en los tres casos. La curva sólida (—) corresponde al cálculo por  $T_1 + T_2 + T_{12}$  (haciendo  $I_n = 1$ ), y la curva a trazos (-----) al cálculo exacto.

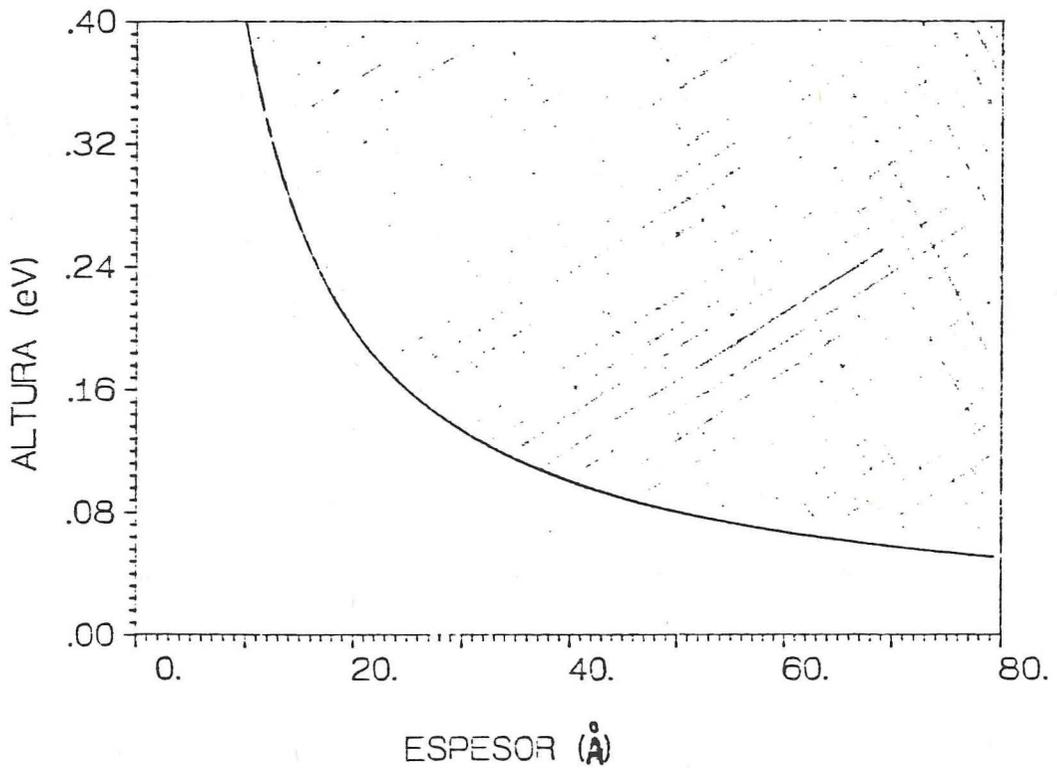


Figura 18. Región de validez de la aproximación de dos términos para  $G^+(x,x';E)$  para calcular coef. de transmisión. El eje horizontal corresponde al espesor  $L$  de las barreras (iguales) y el vertical a la altura  $V$  de las tres barreras. Los puntos  $(L,V)$  sobre la curva corresponden a un área fija,  $k=4$ .

la misma en todos los casos de  $k=4$ .

De lo anterior podemos establecer que la aproximación es buena para todos los puntos  $(L,V)$  pertenecientes a la región situada por encima de la gráfica de la hipérbola  $LV=4$  (ver figura 18).

Este valor particular de  $k$  se determinó para el caso en el que el ancho del pozo era de 50 Å. Sin embargo el estudio realizado en la parte D mostró que variaciones en el ancho de los pozos no afecta de manera importante la efectividad de nuestra descripción, de aquí que la curva  $LV=4$  se puede considerar como el límite de validez de nuestra aproximación para cualquier ancho típico de los pozos, ciertamente 50 Å es uno de los más representativos para las estructuras fabricadas en los laboratorios [Littleton y Camley, 1986].

### IV.3.2 El caso asimétrico.

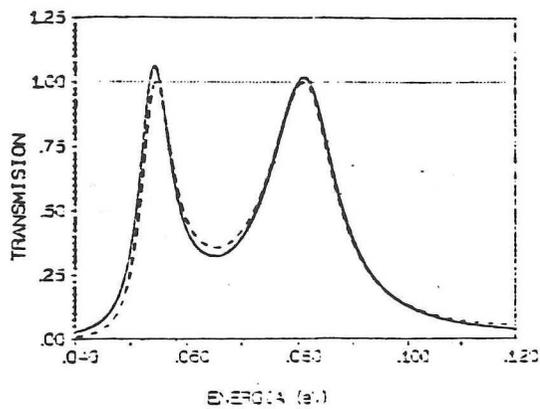
#### A.-Efectos del campo eléctrico.

En esta parte estudiaremos algunos efectos introducidos por la asimetría del potencial, en particular la asimetría debida al campo eléctrico y a variaciones en el ancho de los pozos, la cual ejerce una influencia importante sobre la localización de los estados en los pozos.

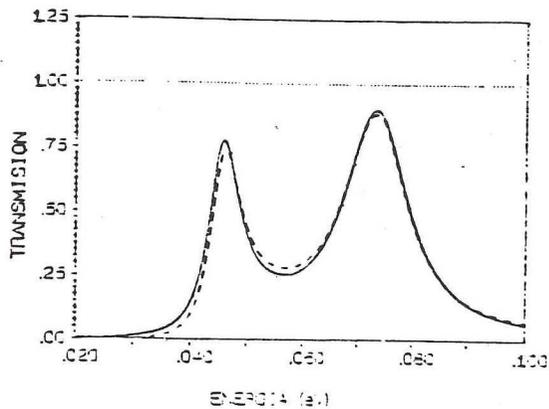
#### A.- Efectos del campo eléctrico.

Empezaremos por examinar el comportamiento del coeficiente de transmisión bajo la influencia del campo (aquí también, al igual que en la sección anterior utilizamos la aproximación de escalón). En la figura 19 se presenta una secuencia de gráficas del coeficiente de transmisión vs. energía del electrón incidente para distintos valores del campo eléctrico (o equivalentemente del voltaje) aplicado al sistema de triple barrera cuyos parámetros son:  $V_1 = V_2 = V_3 = 0.2$  eV,  $L_1 = L_2 = L_3 = 20$  Å,  $W_1 = W_2 = 50$  Å. Como podemos notar en las gráficas la descripción es muy precisa mediante la fórmula (46) pues las dos curvas tienden a coincidir una con otra conforme se incrementa el campo aplicado, no obstante que los parámetros de este sistema corresponden precisamente a un punto sobre la hipérbola de la figura 18. De esto podemos asegurar de antemano que resultarán bastante confiables los cálculos de corriente-voltaje en base a nuestro método.

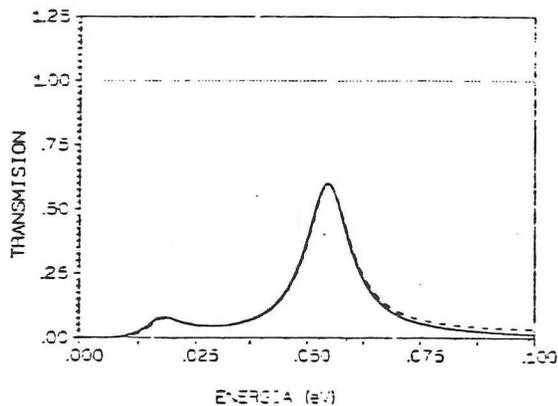
Para estos mismos casos se presentan en la figura 20 las



(a)

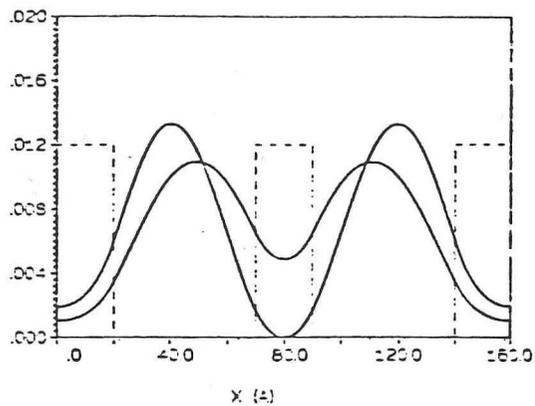


(b)

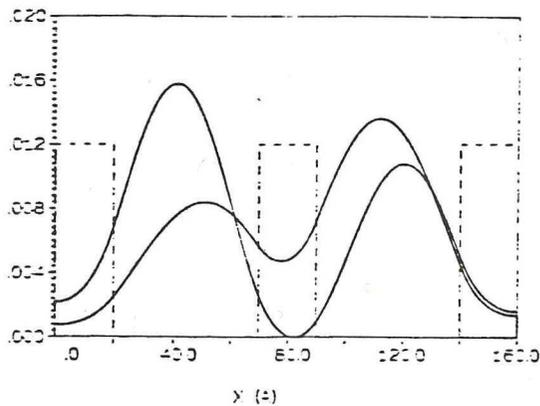


(c)

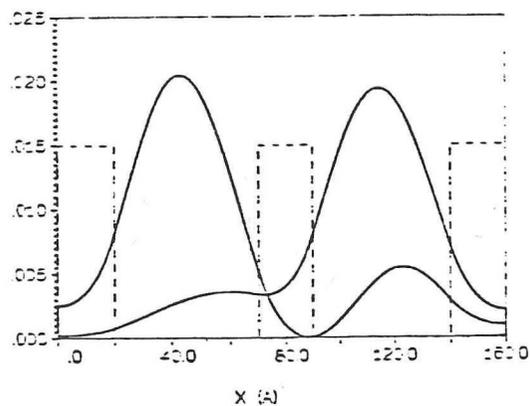
Figura 19. Gráficas del coeficiente de transmisión vs. energía para el potencial de tres barreras con parámetros:  $V_1 = V_2 = V_3 = 0.2 \text{ eV}$ ,  $W_1 = W_2 = 50 \text{ \AA}$ ,  $L_1 = L_2 = L_3 = 20 \text{ \AA}$ , para diferentes voltajes  $V$  aplicados (a)  $V = 0$ ; (b)  $V = .018$ ; (c)  $V = .074$  Volts. El significado de cada tipo de línea es el mismo que el de la figura 17.



(a)



(b)



(c)

Figura 20. Gráficas del módulo de la función de onda  $|u_n(x)|^2$  vs.  $X$  donde  $X$  varía en la región interna de un potencial de tres barreras. La curva del nodo central corresponde al segundo estado resonante y la otra curva al primero. Se ilustran las tres barreras mediante el dibujo a trazos. El caso (a), el (b) y el (c) corresponden respectivamente a los potenciales de las partes (a) (b) y (c) de la figura 19.

gráficas de  $|u_n(x)|^2$  vs  $x$  y se observa cómo a medida que el campo eléctrico aumenta el primer estado tiende a localizarse en el segundo pozo mientras que el segundo (el del nodo central) lo hace hacia el primero. Esta localización trae como consecuencia que el coeficiente de transmisión sea menor que la unidad ya que los anchos parciales de cada estado difieren entre sí,  $\Gamma_n^O \neq \Gamma_n^L$ .

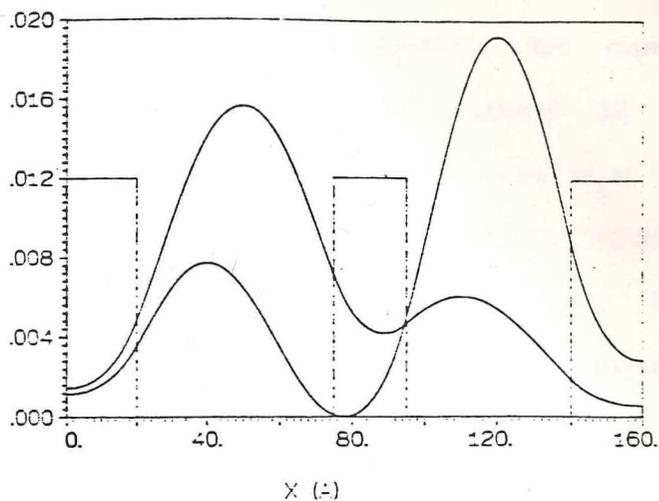
#### B.-Efectos de diferencias en el ancho de los pozos.

Diferencias en las anchuras de los pozos  $W_1$  y  $W_2$  tiene también importantes efectos sobre la localización de los estados. El estado de menor energía tiende a localizarse en el pozo más ancho y el segundo estado se localiza en el de menor anchura. En la figura 21 se muestran estos efectos. Como podemos notar, basta una ligera diferencia en el ancho de los pozos para inducir una fuerte localización. Este tipo de localización, como afirman Littleton y Camley (1986), es una cuestión de interés dentro del contexto de la fabricación de dispositivos electrónicos. Es claro que tener control sobre el grado de localización nos permite tenerlo sobre el transporte. Además las variaciones implicadas son realizables con técnicas de depósito de capas como MBE (Molecular Beam Epitaxy).

Nosotros discutiremos, en términos de los anchos parciales, los efectos de la localización sobre las curvas características I-V.

Es posible combinar adecuadamente el efecto de modificar

(a)



(b)

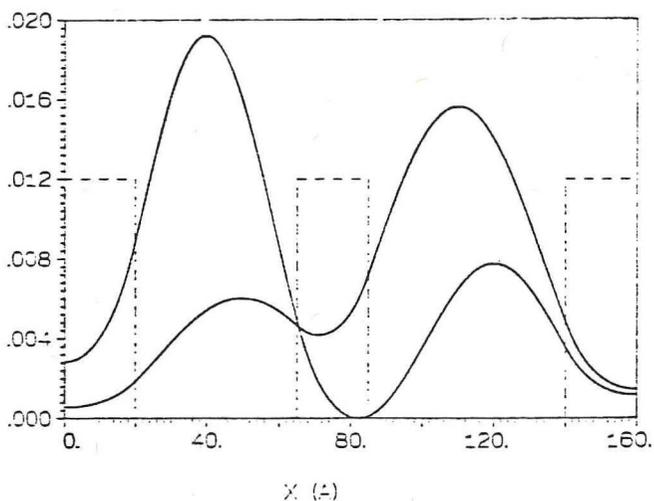


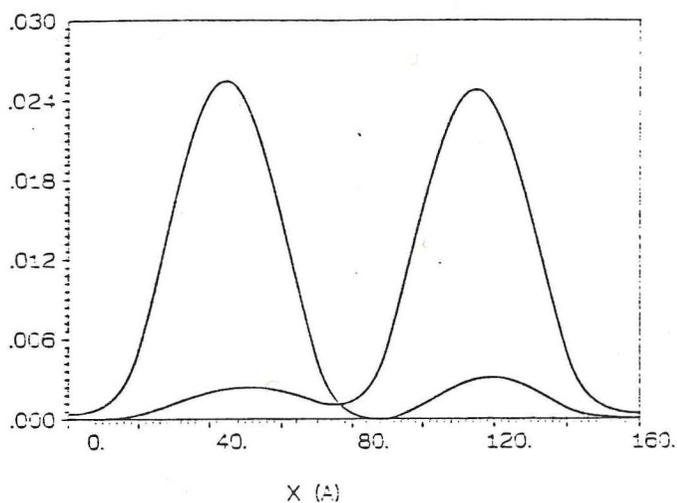
Figura 21. Gráficas del módulo de la función de onda  $|u_n(x)|^2$  vs.  $X$  donde  $X$  varía en la región interna del potencial. La curva del nodo central corresponde al segundo estado resonante y la otra curva al primero. Se ilustran las tres barreras mediante el dibujo a trazos. Los parámetros del potencial son:  $V_1 = V_2 = V_3 = 0.2\text{eV}$ ,  $L_1 = L_2 = L_3 = 20 \text{ \AA}$  y los anchos de los dos pozos están dados por (a)  $W_1 = 55 \text{ \AA}$  y  $W_2 = 45 \text{ \AA}$ , y por (b)  $W_1 = 45 \text{ \AA}$  y  $W_2 = 55 \text{ \AA}$ .

los anchos de los pozos  $W_1$  y  $W_2$  con el efecto del campo eléctrico para controlar la localización. En la figura 22 se presenta en la parte (a) un caso de un potencial con  $W_1 = W_2$  pero bajo la influencia de un voltaje aplicado (0.055 Volts), los parámetros para este sistema son los mismos que los correspondientes al caso de la figura 19, aquí el primer estado se localiza fuertemente en el segundo pozo mientras que el segundo estado lo hace en el primero. Sin embargo esta situación cambia totalmente con solo variar los anchos de los pozos a los valores  $W_1 = 60 \text{ \AA}$  y  $W_2 = 40 \text{ \AA}$ , en la parte (b) de esta figura se muestran los efectos.

#### C.- Efectos de la asimetría sobre los anchos de resonancia.

En la sección IV.2 vimos la manera en que se comportan los anchos de resonancia bajo la influencia del campo eléctrico para el caso del potencial de dos barreras. Para el caso de tres barreras los efectos son diferentes como lo muestran las gráficas de la figura 23, en (a) se presentan los anchos  $\Gamma_n^0$ ,  $\Gamma_n^L$  y  $\Gamma_n$  para  $n=1$  y en (b) para  $n=2$ , aunque hay cierto parecido en las gráficas de la parte (a) con las de la figura 6 (a) (correspondientes al potencial de doble barrera), la situación presentada en 23 (b) es totalmente diferente a la de la figura 6 (b). Notamos que para cierto intervalo del voltaje el ancho total  $\Gamma_2$  es decreciente y a partir de cierto valor crítico  $\mathcal{V}_2$  cambia drásticamente la curvatura.  $\mathcal{V}_2$  corresponde al valor del voltaje para el cual la energía del segundo estado resonante es

(a)



(b)

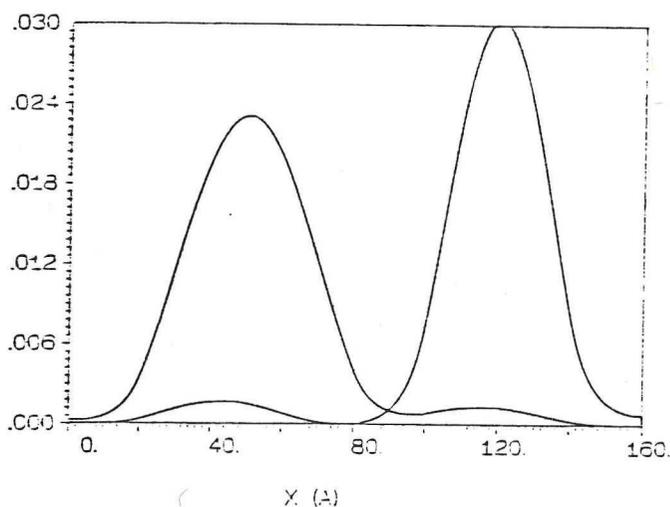
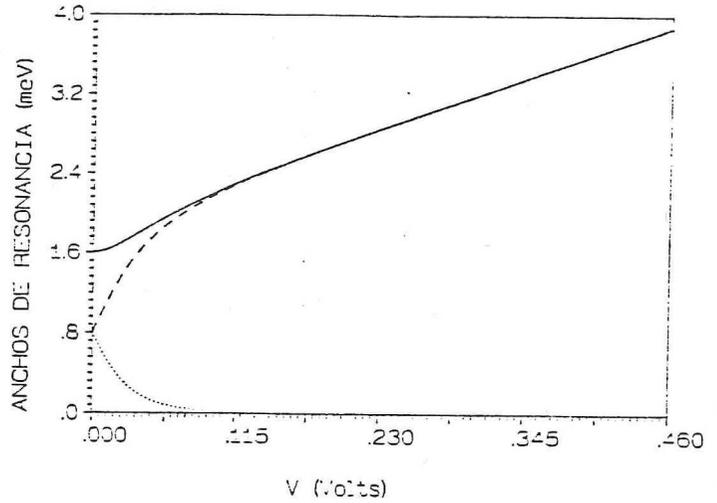


Figura 22. Gráficas del módulo de la función de onda  $|u_n(x)|^2$  vs.  $X$  donde  $X$  varía en la región interna de un potencial de tres barreras. La curva del nodo central corresponde al segundo estado resonante y la otra curva al primero. Los parámetros del potencial son:  $V_1 = V_2 = V_3 = 0.5$  eV,  $L_1 = L_2 = L_3 = 20$  Å, a un voltaje de .053 Volts (a)  $W_1 = W_2 = 50$  Å, y (b)  $W_1 = 60$  Å,  $W_2 = 40$  Å

(a)



(b)

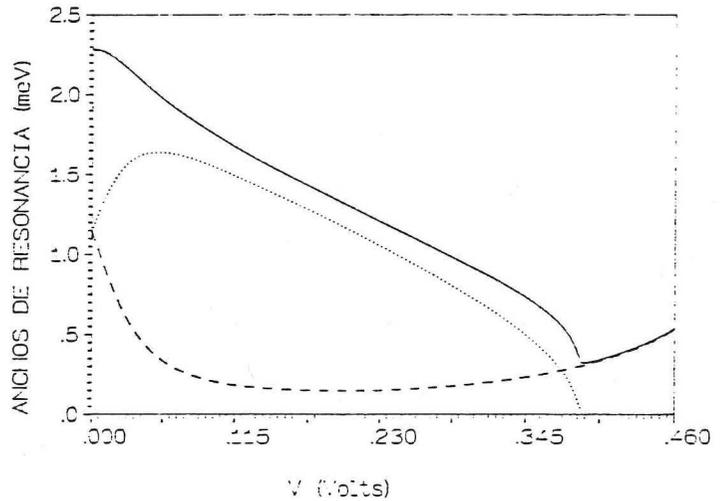
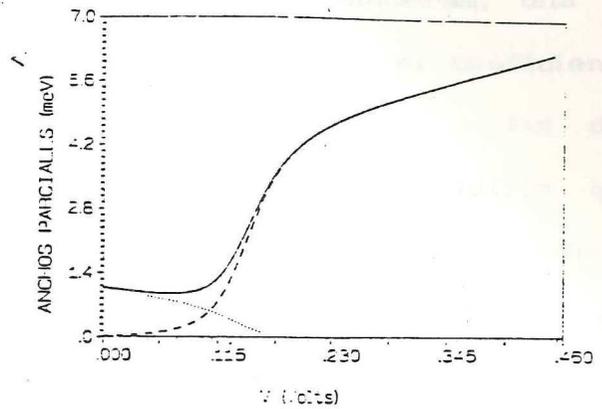


Figura 23. Anchos de resonancia  $\Gamma_n^0$ ,  $\Gamma_n^L$  y  $\Gamma_n$  como función del voltaje aplicado para el potencial de tres barreras con  $V_1 = V_2 = V_3 = 0.5$  eV,  $L_1 = L_2 = L_3 = 20$  Å,  $W_1 = W_2 = 50$  Å. En (a) se grafican los anchos para  $n=1$  y en (b) para  $n=2$ . El significado de cada tipo de curva es el especificado en la figura 6.

cero. Así para valores del voltaje mayores que  $\varphi_2$  el ancho parcial  $\Gamma_2^0$  es prácticamente cero ya que un electrón en tal estado de energía "siente" a su izquierda una barrera infinitamente ancha. Para valores menores que  $\varphi_2$  encontramos un intervalo  $[0, \varphi_c]$  con  $\varphi_c < \varphi_2$  en el cual  $\Gamma_2^0 > \Gamma_2^L$ , este hecho es una consecuencia de la localización inducida por el campo eléctrico, pues la "presencia" del segundo estado en el primer pozo contribuye a incrementar el valor del módulo de la eigenfunción en  $x=0$ ,  $|u_n(0)|^2$ , y en consecuencia del ancho parcial  $\Gamma_2^0$  de tal forma que llega a ser incluso mayor que  $\Gamma_2^L$ . El valor  $\varphi_c$  es un punto interesante ya que en él se cruzan las curvas de  $\Gamma_2^0$  y de  $\Gamma_2^L$  y por lo tanto ahí el coeficiente de transmisión debe incrementar su valor prácticamente al valor de la unidad en la energía de resonancia  $\varepsilon_2$  en virtud de la fórmula  $T(\varepsilon_2) \cong \mathcal{L}_2(\varepsilon_2) = 4 \Gamma_2^0 \Gamma_2^L / (\Gamma_2^0 + \Gamma_2^L)^2$ . Si ahora modificamos los anchos de los pozos con el fin de contrarrestar la localización originada por el campo, las gráficas de los anchos de resonancia evolucionan de la manera que se indica en la figura 24, para el caso de  $W_1 = 60 \text{ \AA}$  y  $W_2 = 40 \text{ \AA}$ . Como era de esperarse desaparece la región en la cual  $\Gamma_2^0 > \Gamma_2^L$  debido a que ahora el segundo estado está localizado en el segundo pozo como lo ilustramos en las gráficas de la figura 22 (b)

(a)



(b)

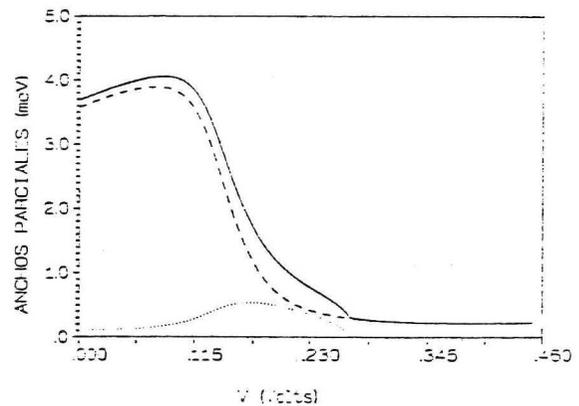
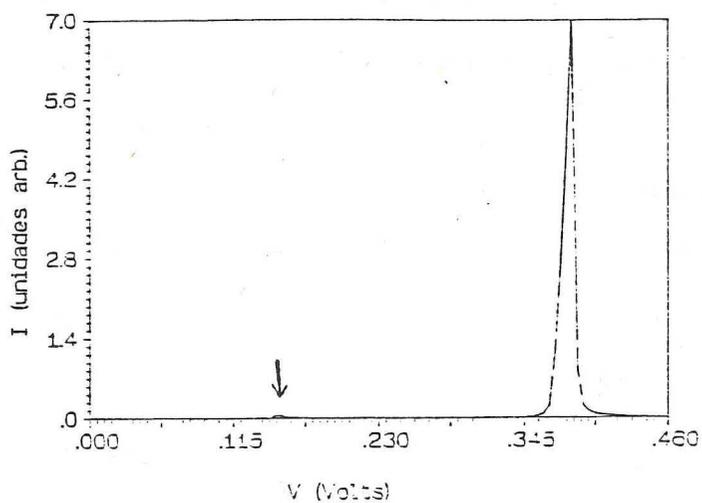


Figura 24. Anchos de resonancia  $\Gamma_n^0$ ,  $\Gamma_n^L$  y  $\Gamma_n$  como función del voltaje aplicado para el potencial de tres barreras con  $V_1=V_2=V_3=0.5$  eV,  $L_1=L_2=L_3=20$  Å,  $W_1=60$  y  $W_2=40$  Å. En (a) se grafican los anchos para  $n=1$  y en (b) para  $n=2$ . El significado de cada tipo de curva es el especificado en la figura 6.

#### D.- Curvas de corriente-voltaje.

En la figura 25 presentamos un par de ejemplos del cálculo de la corriente de tunelaje calculadas de dos maneras, una en base a nuestra aproximación y la otra en base a el coeficiente de transmisión exacto, las curvas correspondientes a los dos diferentes cálculos se confunden entre sí, esto significa que para estos casos nuestro cálculo resultó ser bastante preciso como ya antes lo habíamos anticipado. Los parámetros del potencial de la parte (a) de esta figura son los mismos que en el caso de la figura 19 (a) y los del potencial de la parte (b) son iguales a los del correspondiente a la figura 19 (b). en las gráficas de la parte (a) la flecha indica la posición del pico de corriente debido a la primera resonancia, el pico grande corresponde a la segunda. La grán diferencia de alturas entre ambos picos se debe al efecto de la localización antes discutida. En la parte (b) se aprecia mejor el primer pico debido a que se invirtió la localización de los estados por el efecto de la diferencia en los anchos:  $W_1 = 60 \text{ \AA}$  y  $W_2 = 40 \text{ \AA}$ .

(a)



(b)

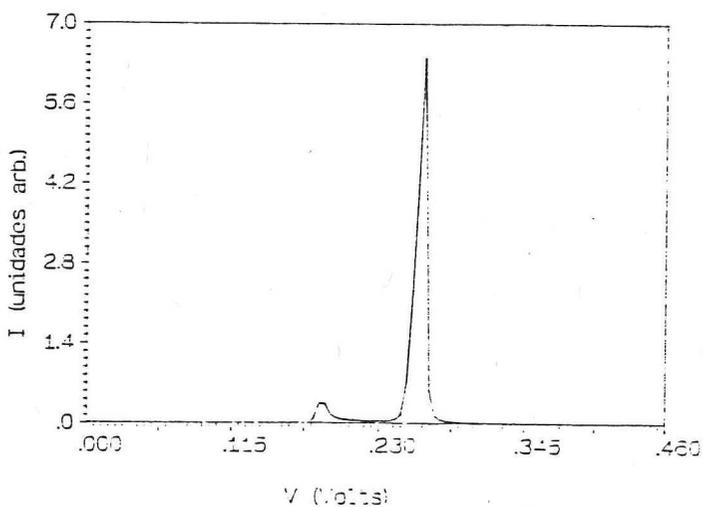


Figura 25. Gráficas de corriente-voltaje para el potencial de tres barreras con:  $V_1 = V_2 = V_3 = 0.5$  eV,  $L_1 = L_2 = L_3 = 20$  Å, (a)  $W_1 = W_2 = 50$  Å y (b)  $W_1 = 60$  Å y  $W_2 = 40$  Å. La línea continua representa a la aproximación y la discontinua al cálculo exacto.

## V CONCLUSIONES

En este trabajo se realizó un cálculo exacto de las anchuras parciales de decaimiento para potenciales rectangulares de doble y de triple barrera en base a un formalismo riguroso de estados resonantes que resulta de explotar las propiedades analíticas del propagador del sistema. Los cálculos existentes para estas cantidades en cambio son aproximados. Las anchuras parciales, como es bien sabido, tienen una importancia crucial en el estudio del transporte en heteroestructuras nanométricas.

Este formalismo proporciona además un método simple y confiable para calcular cantidades relevantes en relación con el transporte electrónico como el coeficiente de transmisión y corriente de tunelaje. Nosotros obtuvimos aquí fórmulas aproximadas para estas cantidades explícitamente en función de las anchuras parciales para los potenciales particulares antes mencionados. La confiabilidad de estas fórmulas sobre un amplio rango de parámetros de interés experimental fué mostrada mediante un análisis cualitativo del coeficiente de transmisión que se llevó a cabo variando sistemáticamente los parámetros del sistema.

Se discuten además, en términos de los anchos parciales, algunos efectos interesantes de la localización de los estados del sistema de tres barreras sobre la forma de las curvas de corriente-voltaje.

Consideramos que el estudio realizado aquí para estas estructuras unidimensionales proporciona criterios que pueden ser útiles en el diseño de dispositivos de tunelaje resonante con características específicas. Digno de destacarse es la posibilidad demostrada de manipular la localización con variaciones de los pozos combinadas con el campo eléctrico.

Por otro lado, el problema de los tiempos de tunelaje es un problema difícil tanto desde el punto de vista teórico como experimental, consideramos también que el cálculo exacto que en este trabajo realizamos para los anchos parciales de decaimiento podría contribuir en esta dirección a aclarar un poco más el problema, ya que en este contexto los anchos parciales juegan un papel muy relevante.

Finalmente hacemos hincapié en que las fórmulas explícitas que presentamos para la corriente de tunelaje son prácticamente exactas para las estructuras típicas fabricadas en laboratorios. Por lo tanto estas fórmulas podrían ser utilizadas en la medición de los anchos de resonancia por la vía del ajuste de datos experimentales de corriente.

## BIBLIOGRAFIA

- Büttiker, M., IBM J. Res. Dev. 32, 63 (1988).
- Capasso, F. y S. Datta, Physics Today, 43, 74 (Feb. 1990).
- Chang, L. L., L. Esaki, y R. Tsu, Appl. Phys. Lett. 24, 593 (1974).
- Duke, C. B., *Tunneling in Solids* (Academic, New York, 1969), p. 32.
- Esaki, L. y R. Tsu, IBM J. Res. Dev. 14, 61 (1970).
- García-Calderón, G., Nucl. Phys. A261, 130 (1976).
- García-Calderón, G. y R. Peierls, Nucl. Phys. A265, 443 (1976).
- García-Calderón, G., Solid State Commun. 62, 441 (1987).
- García-Calderón, G. y A. Rubio, Phys. Rev. B 36,4462 (1987).
- García-Calderón, G. y A. Rubio, Solid State Commun. 71, 237 (1989).
- García-Calderón, G., A. Rubio, y R. Romo, J. Appl. Phys., 69, 3612 (1991).
- Guéret, P., C. Rossel, E. Marclay, y H. Meier, J. Appl. Phys. 66, 278 (1989).
- Liu, H. C. y G. C. Aers, J. Appl. Phys. 65, 4808 (1989).
- Liu, H. C., M. Buchanan, G. C. Aers, Z. R. Wasilewski, W. T. Moore, R. L. S. Devine, y D. Landheer, Phys. Rev. B 43, 7086 (1991).
- Littleton, R. K. y R. E. Camley, J. Appl. Phys. 59, 2817 (1986).
- Méndez, E. E., en *Physics and Applications of Quantum Wells and Superlattices*, editado por E. E. Méndez y K. von Klitzing (Plenum, New York and London, 1987), p. 159.
- Newton, R. G., *Scattering Theory of Waves and Particles* (McGraw-Hill, New York, 1966).
- Ploog, K., en "Atomic and Molecular Beam Methods" Vol. 1 editado por G. Scoles (Oxford University Press, 1988)

Moore, R. L. S. Devine, y D. Landheer, Phys. Rev. B 43, 7086 (1991).

Price, P. J., Phys. Rev. B 38, 1194 (1988).

Smith, H. I. y H. G. Craighead, Physics Today 43, 24 (Feb. 1990).

Sollner, T. G. L. G., W. D. Goodhue, P. E. Tannewald, C. D. Parker, y D. D. Peck, Appl. Phys. Lett. 43, 588 (1983).

Sollner, T. G. L. G., P. E. Tannewald, D. D. Peck, y W. D. Goodhue, Appl. Phys. Lett. 45, 1319 (1984).

Sollner, T. G. L. G., W. D. Brown, W. D. Goodhue, y H. Q. Le, Appl. Phys. Lett. 50, 332 (1987).