

Visualización de la propagación electrónica en guías de onda cuánticas



P.A. Pantaleón¹, Roberto Romo¹, Alberto Hernández Maldonado²

¹Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Baja California, Carretera Tijuana-Ensenada Km.106, CP 22800, Ensenada, B.C.

²Centro de Ingeniería y Tecnología, Unidad Valle de las Palmas, Universidad Autónoma de Baja California, Tijuana, B.C

E-mail: ppantaleon@uabc.edu.mx

(Recibido el 13 de Noviembre de 2013; aceptado el 20 de Febrero de 2014)

Resumen

La visualización de la propagación espacial y temporal de ondas cuánticas constituye un instrumento muy valioso para entender las principales características de la dinámica del transporte electrónico en estos sistemas, el cual es un fenómeno de gran interés tanto en investigación básica como aplicada de los sistemas de baja dimensionalidad. En este trabajo, analizamos el comportamiento dinámico del transporte electrónico en guías de onda cuánticas, mediante la solución analítica de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo, con una condición inicial de obturador de Moshinsky cuasi-unidimensional. Mostramos mapas de densidad de probabilidad bidimensionales para exhibir las principales características de la propagación electrónica en guías de onda cuánticas. Desde el punto de vista pedagógico, el presente análisis provee una valiosa herramienta para visualizar el comportamiento de las soluciones de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo, el cual es un tópico muy importante para estudiantes de física tanto intermedios como avanzados.

Palabras clave: Guías de onda cuánticas, efectos transitorios, funciones de Moshinsky.

Abstract

The visualization of propagation of quantum waves in space and time constitutes a valuable instrument to understand the main features of the dynamics of quantum electron transport, a phenomenon of great interest in basic and applied research in the context of the physics of low-dimensional systems. In this work, we analyze the dynamical behavior of the electronic transport in quantum waveguides based on the analytical solution of the time-dependent Schrödinger equation where we use a quasi-one-dimensional quantum shutter. We show two-dimensional probability density maps that exhibit the main features of the quantum wave propagation along the quantum waveguides. From the pedagogical point of view, the present analysis provides a valuable tool in visualizing the behavior of solutions of the time-dependent Schrödinger equation, which is an important topic of quantum mechanics for both intermediate and advanced physics students.

Keywords: Quantum waveguides, quantum transients, Moshinsky functions.

PACS: 05.60.Gg, 01.50.F, 03.67.Ac

ISSN 1870-9095

I. INTRODUCCIÓN

Uno de los aspectos más relevantes, inherentes a toda estructura nanométrica, es el fenómeno de la cuantización de los niveles energéticos de los electrones, el cual ocurre como resultado del confinamiento en alguna dirección espacial [1]. El confinamiento resulta un aspecto crucial en las propiedades físicas relevantes de los sistemas nanométricos, el cual puede ocurrir de diferentes formas. Por ejemplo, si el confinamiento ocurre en una sola dirección espacial, se tiene como resultado lo que en este contexto se conoce como un sistema bidimensional [2]; si el confinamiento ocurre en dos direcciones espaciales, se forma un sistema unidimensional, conocido también como alambre cuántico [3]; si el confinamiento tiene lugar en las tres direcciones espaciales, lo que resulta es una estructura

llamada cero-dimensional conocida como punto cuántico [1, 4].

Existe un régimen intermedio de confinamiento muy interesante, que podemos ubicarlo entre el caso unidimensional y el caso bidimensional. Las estructuras que se ubican en esta categoría suele llamarseles sistemas *cuasi-unidimensionales*. En esta clase de nanoestructuras la propagación electrónica ocurre en una sola dirección, es decir, las ondas electrónicas se ven constreñidas a moverse en dirección perpendicular al confinamiento, razón por la cual a estos sistemas suele llamarseles también con el popular nombre de *guías de onda cuánticas* [5, 6].

El confinamiento lateral que define a las guías de onda juega un papel crucial en las características del transporte longitudinal, ya que los niveles discretos de la energía que resultan de dicho confinamiento, *distribuyen* el transporte a

lo largo de *canales*, llamados *canales de propagación*, que también suele llamárseles *modos transversales* o *sub-bandas*.

La propagación de electrones en los sistemas cuasi-unidimensionales es análogo a la propagación de ondas electromagnéticas o guías de onda ópticas, esto se debe a la naturaleza ondulatoria del electrón, la cual se manifiesta plenamente en los fenómenos que ocurren en este tipo de nanoestructuras. El nombre de guías de onda cuánticas surge precisamente de la analogía con el caso óptico [7, 8].

Es por ello que, inspirados en los fenómenos que ocurren en las guías de onda debido a la cuantización transversal, surge nuestro interés por estudiar el problema de un sistema cuasi-unidimensional, desde un punto de vista dinámico. Para esto usamos una condición inicial de *obturador de Moshinsky* [9], la cual consiste en una onda plana confinada a la región $x < 0$, mediante un obturador (obturador de Moshinsky) colocado en $x = 0$, el cual, al ser removido súbitamente, libera la onda permitiendo que se propague libremente a la región $x > 0$ a lo largo de la guía.

El problema del obturador de Moshinsky ha sido ampliamente estudiado en sistemas unidimensionales, se ha analizado el caso libre [9], se han introducido potenciales arbitrarios [10] y se han hecho estudios detallados de algunos fenómenos como el retraso temporal [11, 12], entre otros. La extensión a sistemas cuasi-unidimensionales involucra efectos adicionales, debido al potencial de confinamiento lateral, el cual induce una cuantización de la energía en la dirección transversal.

El objetivo de este trabajo es mostrar el formalismo básico, acompañado de una visualización gráfica de la propagación electrónica en guías de onda con un potencial de confinamiento de paredes rígidas y una condición inicial de obturador de Moshinsky. Mostramos mapas de densidad de probabilidad para exhibir los efectos de propagación, justo después de la apertura del obturador. Finalmente, mostramos la importancia del número de modos transversales abiertos en el transporte, los cuales influyen en la velocidad de la onda dependiendo del modo transversal en el que se encuentre la onda justo al abrir el obturador.

II. FORMALISMO

A. Ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo para una guía de onda cuántica

Consideremos una onda propagándose en la dirección x en una guía de onda como la mostrada en la Fig. 1, donde la onda está confinada en la dirección transversal y por un potencial de confinamiento $V_c(y)$ simétrico. La ecuación de Schrödinger bidimensional dependiente del tiempo es de la forma,

$$-\frac{\hbar^2}{2m_{ef}} \nabla^2 \Psi_n + V_c \Psi_n = i\hbar \frac{\partial \Psi_n}{\partial t}, \quad (1)$$

donde $m_{ef} = 0.067 m_e$ es la masa efectiva y m_e es la masa del electrón, donde $\Psi_n(x, y, t)$ es la función que representa a la onda dentro de la guía. El subíndice n indica que la onda incide solo en un modo transversal. Para poder resolver la Ec. (1) utilizamos el método de separación de variables y se propone una solución de la forma

$$\Psi_n(x, y, t) = \varphi_n(x, t) \chi_n(y). \quad (2)$$

Al sustituir la Ec. (2) en la Ec. (1) y reordenando términos se obtiene,

$$-\frac{\hbar^2}{2m_{ef}} \frac{\partial^2 \varphi_n(x, t)}{\partial x^2} + \varepsilon_n \varphi_n(x, t) = i\hbar \frac{\partial \varphi_n(x, t)}{\partial t}. \quad (3)$$

La cual es la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo para la parte longitudinal, mientras que para la parte transversal se tiene

$$-\frac{\hbar^2}{2m_{ef}} \frac{\partial^2 \chi_n(y)}{\partial y^2} + V_c(y) \chi_n(y) = \varepsilon_n \chi_n(y), \quad (4)$$

cuyas soluciones dependen del potencial de confinamiento $V_c(y)$.

Las ecuaciones (3) y (4) están acopladas mediante el término ε_n , que proviene de la separación de variables y representa la energía de cada modo transversal n .

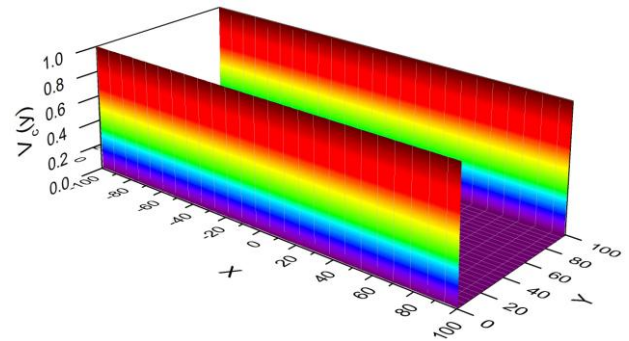


FIGURA 1. Perfil de potencial de una guía de onda. El potencial de confinamiento es de paredes rígidas, la propagación ocurre en la dirección positiva de x .

La energía total del electrón se reparte entre la energía transversal (ε_n) de la sub-banda n y la energía asociada al movimiento longitudinal, es decir,

$$E = \varepsilon_n + \frac{k_n^2 \hbar^2}{2m_{ef}}. \quad (5)$$

donde el número de onda es,

$$k_n = \sqrt{\frac{2m_{ef}}{\hbar^2} (E - \varepsilon_n)}. \quad (6)$$

Los modos del caso electromagnético son comparables con los modos electrónicos o sub-bandas transversales del caso cuántico, que se originan de los estados del confinamiento transversal, los cuales gobiernan el transporte longitudinal [13].

El número de onda en la Ec. (5) describe una onda propagante sólo si k_n es un número real, y su correspondiente sub-banda n se nombra como modo o canal propagante. Por otro lado, cuando el número de onda es imaginario, la correspondiente sub-banda se dice que es un modo o canal *evanescente*.

De acuerdo a lo anterior, para una energía dada E , sólo un número finito de modos son propagantes (aquellos donde

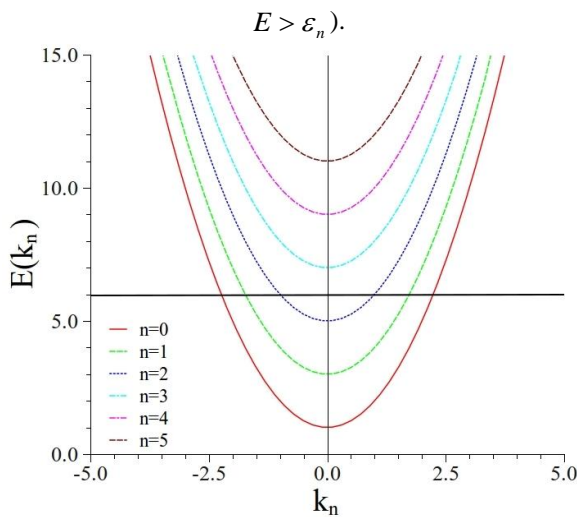


FIGURA 2. Curvas de energía contra número de onda para los niveles de energía transversales en una guía de onda. Para una energía de incidencia dada (línea horizontal), existe un número finito de canales propagantes y una infinidad de canales evanescentes.

En la Fig. 2 se muestra la gráfica de la Ec. (6) para distintos valores de n , donde la línea horizontal continua representa la energía E de incidencia, las energías transversales ε_n debajo de esta energía de incidencia son los modos propagantes, y los que están sobre ella son los modos evanescentes. Lo anterior significa que una onda puede propagarse en un modo n sólo si su energía es mayor a la correspondiente energía ε_n de ese modo.

Por ejemplo, en el caso de las guías de onda, la mínima energía requerida para que una onda se propague es la del primer modo transversal (llamado canal de estado base transversal), por lo cual, si una onda incide con una energía menor a la del tal estado, esta no se transmitirá. Si incrementamos la energía de incidencia de la onda, se incrementa el número de modos propagantes, es decir, habrá

Visualización de la propagación electrónica en guías de onda cuánticas
modos evanescentes que cambian su identidad, pasando a ser propagantes conforme la energía E va rebasando las energías de los modos transversales ε_n .

A. Obturador de Moshinsky cuasi-unidimensional

Un obturador de Moshinsky es una condición matemática que simula un dispositivo que constriñe a una onda plana a una región $x < 0$, dicha onda está en un modo transversal propagante n a una energía E . En $t=0$, se propone una condición inicial de la forma,

$$\Psi_n(x, y, t=0) = \begin{cases} e^{ik_n x} \chi_n(y), & x \leq 0 \\ 0, & x > 0 \end{cases}, \quad (7)$$

A diferencia de la condición inicial introducida originalmente por Moshinsky [9], aquí hemos considerado que la onda está sometida a un potencial de confinamiento lateral, por lo cual la onda inicial esta modulada por la función $\chi_n(y)$ asociada al modo transversal n .

Si aplicamos la condición inicial (7) a la Ec. (3), usando el método de la transformada de Laplace como en la ref. [11, 14], obtenemos la solución para la propagación en la dirección longitudinal, la cual es de la forma

$$\varphi_n(x, t) = e^{\frac{ik_n t}{\hbar}} M(x, k_n, t), \quad (8)$$

donde $M(x, k_n, t)$ es la función de Moshinsky [9].

Finalmente, podemos escribir la solución general a cualquier tiempo t , para una guía de onda con un obturador en $x = 0$ y un confinamiento de paredes rígidas como,

$$\Psi_n(x, y, t) = e^{\frac{ik_n t}{\hbar}} M(x, k_n, t) \chi_n(y), \quad (9)$$

donde las funciones del confinamiento transversal son

$$\chi_n(y) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L} y\right), \quad (10)$$

con energías

$$\varepsilon_n = \frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2, \quad (11).$$

donde L es el ancho de la guía de onda.

III. EVOLUCION TEMPORAL DE LA DENSIDAD DE PROBABILIDAD

La evolución temporal de la densidad de probabilidad depende de la energía de incidencia E y el modo de

propagación transversal n . Dicha energía nos indica cuantos modos de propagación están abiertos y el modo de propagación determina el perfil de la onda que se propaga.

Por ejemplo, para una guía de onda cuyo ancho es $L=100$ Å, una energía de incidencia $E = 0.25$ eV, de acuerdo a la Ec. (6) hay dos canales de propagación abiertos, los correspondientes a $\varepsilon_1 = 0.056$ eV y $\varepsilon_2 = 0.224$ eV. Basta con elegir uno de ellos para la propagación, justo como se observa en la Fig. 3. Si la propagación ocurre en $n=1$, como se muestra en la Fig. 3 (a), tenemos un solo frente de onda y la anteceden un conjunto de oscilaciones; en este caso, ha transcurrido un tiempo $t=0.11$ ps desde la apertura del obturador. La barra de colores lateral nos indica el valor de la densidad de probabilidad en función de la posición a un tiempo fijo.

En el caso de la Fig. 3 (b), la propagación ocurre en el modo $n=2$ y ha transcurrido un tiempo $t=0.60$ ps después de la apertura del obturador. A diferencia del caso unidimensional, aquí se observa cómo hay dos frentes de onda, esto se debe a las funciones del confinamiento [Ec. (10)], que modulan el perfil transversal de la onda en la guía.

Un interesante comportamiento es el conjunto de oscilaciones que anteceden el frente de onda, estas oscilaciones provienen de la solución a la parte longitudinal [Ec. (8)] que solo considera la función de Moshinsky y una fase que se anula al calcular el modulo cuadrado. Dichas oscilaciones se observan en el caso unidimensional [9], pero en los sistemas cuasi-unidimensionales son moduladas en la dirección transversal por las funciones del confinamiento. A diferencia del caso unidimensional, en los sistemas cuasi-unidimensionales aparece un conjunto de frentes de onda, dependiendo del modo de propagación, aquí solo se muestra para $n=1$ y $n=2$, pero la extensión a canales superiores mostrará un número de frentes igual al correspondiente modo de propagación.

En la parte inferior de cada gráfica se han incluido mapas de contorno para visualizar la propagación en el plano, este tipo de gráficas son la que usaremos a lo largo de este trabajo.

IV. PROPAGACION EN DIFERENTES CANALES

Dependiendo del modo transversal incidente, habrá cierto número de frentes de onda propagándose a lo largo de la guía. Para visualizar esto, en la Fig. 4 se muestra la propagación a distintos tiempos en el mismo modo transversal $n=1$, a una energía $E = 0.25$ eV. Los tiempos corresponden a $t=0.065$, 0.125 y 0.200 ps para las Figs. 4 (a), (b) y (c), respectivamente. Se observa claramente que un único frente de onda se propaga a lo largo de la guía. Si consideramos tiempos muy grandes, se tiende al caso estacionario, lo cual se muestra en la Fig. 4 (d), en la que

han transcurrido $t=50$ ps después de la apertura del obturador.

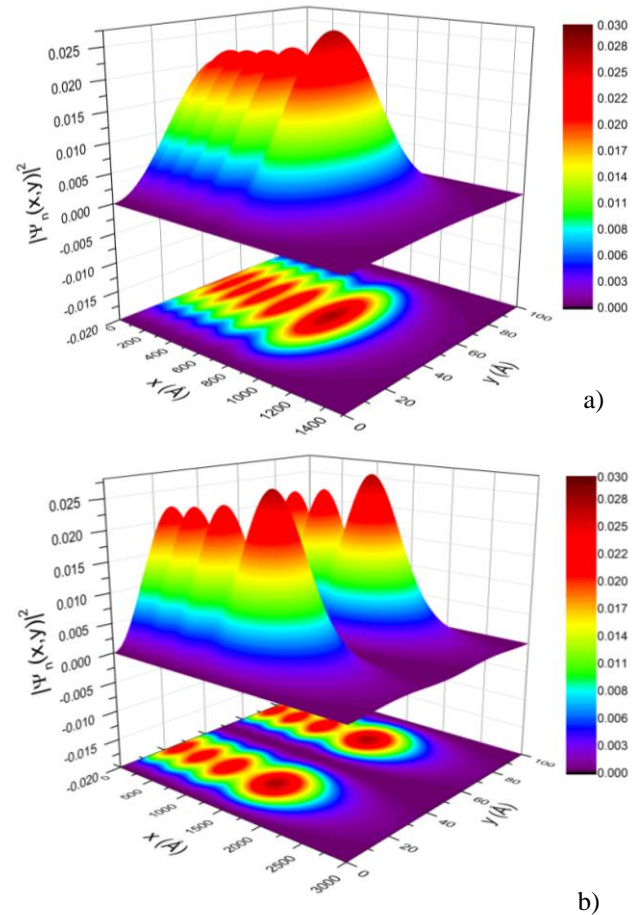


FIGURA 3. Propagación de ondas cuánticas a lo largo del eje x a una energía de incidencia $E = 0.25$ eV, en los canales $n=1$ y $n=2$. En (a) se muestra la propagación de la onda en el primer canal, a un tiempo $t = 0.11$ ps, en (b) la onda viaja en el segundo canal a un tiempo $t = 0.60$ ps.

En la Fig. 5 se muestra la propagación en el segundo modo transversal, en la que se observan dos frentes de onda, la energía de incidencia es la misma que en la Fig. 4, se puede observar como ambos frentes de onda se propagan simétricamente a lo largo de la guía. Los tiempos corresponden a $t=0.150$, 0.350 y 0.600 ps para las Figuras. 5 (a), (b) y (c), respectivamente. Al considerar tiempos grandes ($t=50$ ps) hay una tendencia al caso estacionario, Fig. 5 (d).

La propagación en un modo transversal n nos dará n frentes de onda. Ésta dependencia del número de frentes de onda con el modo incidente, es exclusivo de los sistemas cuasi-unidimensionales.

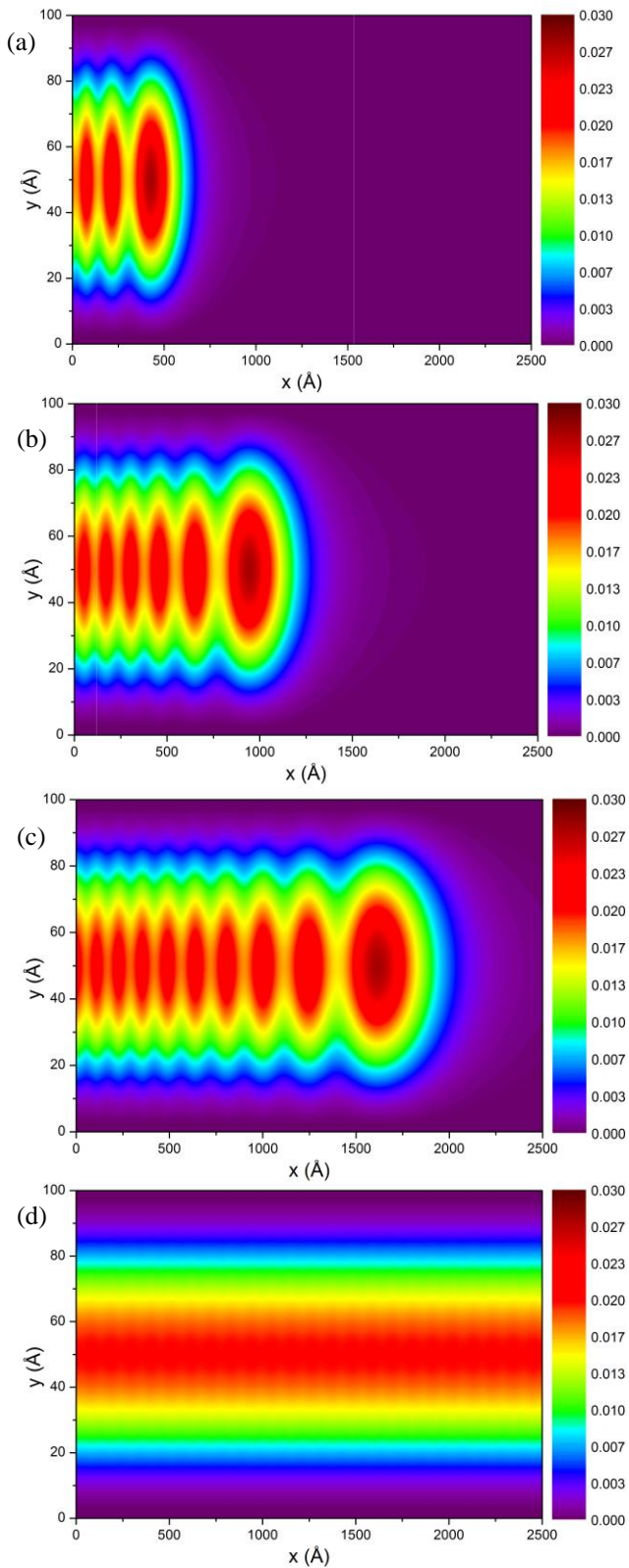


FIGURA 4. Evolución de una onda cuántica a lo largo del eje x , a energía de incidencia $E = 0.25$ eV. La propagación es en el canal $n = 1$, para diferentes tiempos. Se observa un frente de onda propagándose hacia la derecha. Los parámetros se muestran en el texto.

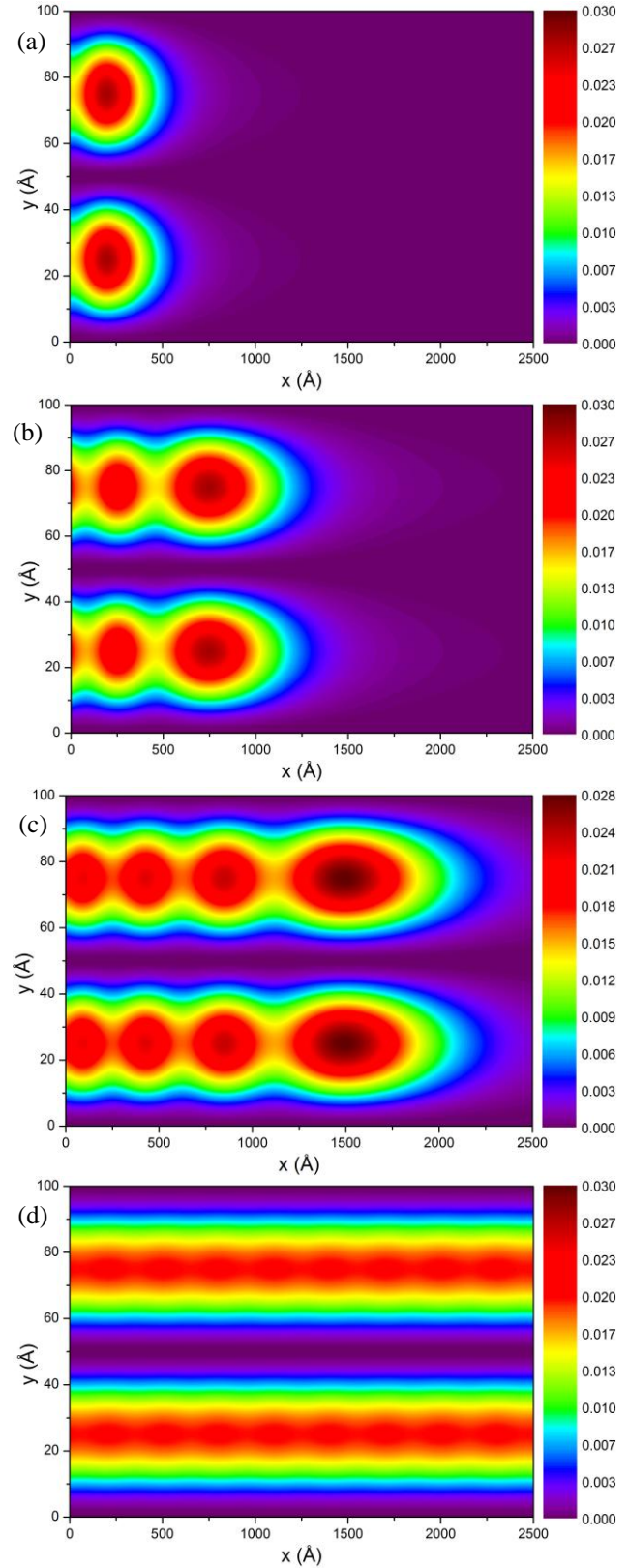


FIGURA 5. Evolución de una onda cuántica a lo largo del eje x , a energía de incidencia $E = 0.25$ eV. Se observan dos frentes de onda debido que la propagación es en el segundo modo transversal. Los parámetros se muestran en el texto.

V. CONCLUSIONES

En este trabajo presentamos una solución analítica de la ecuación de Schrödinger bidimensional dependiente del tiempo, con condición inicial de obturador de Moshinsky cuasi-unidimensional, para una onda propagándose a lo largo de una guía de ondas. Se muestran gráficas de la densidad de probabilidad como función de la posición x para diferentes tiempos fijos t , después de abrir el obturador. Se observan diferentes frentes de onda, dependiendo del modo de propagación, es decir, si la propagación ocurre en el primer canal ($n=1$), se observa un solo frente de ondas, al cual le anteceden un conjunto de oscilaciones; si ocurre en el segundo canal ($n=2$), aparecen dos frentes de onda y así sucesivamente.

Para que haya propagación, es necesario que la energía de incidencia E , sea mayor que el estado base ($n=1$). Parte de la energía de incidencia E se emplea en alcanzar el estado n , mientras que la energía restante es energía de propagación. El número de canales abiertos o disponibles para la propagación, son aquellos en los que la energía de incidencia E es mayor que la energía correspondiente ϵ_n de ese modo.

Estos resultados, además de ser novedosos, ayudan a visualizar soluciones de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo, en un sistema cuasi-unidimensional simple las cuales son de gran apoyo didáctico en la enseñanza de la mecánica cuántica a estudiantes universitarios.

AGRADECIMIENTOS

P. A Pantaleón agradece al M.C Ramón Carrillo de la UNAM por sus útiles discusiones y al CITEC UABC por su hospitalidad. A. Hernández agradece a la UABC y al CITEC por su apoyo para el presente trabajo.

REFERENCIAS

- [1] Waser, R., *Nanoelectronics and information technology: Advanced Electronic Materials and Novel Devices*, (WILEY-VCH, USA, 2005).
- [2] Davies, J., *The physics of Low-Dimensional semiconductors*, (Cambridge University Press, USA, 1998).
- [3] Ferry, D. K. and Goodnick, S. M., *Transport in Nanostructures.*, (Cambridge University Press, USA, 1977).
- [4] Malyshev, A. V., Orellana, P. A. and Dominguez-Adame, F., *Quantum electron splitter based on two quantum dots attached to leads*, Phys. Rev. **B 74**, 033308 (2006).
- [5] Sols, F., Macucci, M., Ravaioli, U. and Hess, K., *On the possibility of transistor action based on quantum interference phenomena*, Appl. Phys. Lett. **54**, 350, (1989).
- [6] Weisshaar, A., Lary, J., Goodnick, S. M. and Tripathi, V. K., *Analysis and modeling of quantum waveguide structure*, J. Appl. Phys. **70**, 355 (1991).
- [7] Kuhn, E., *A mode matching method for solving problems in waveguide and resonator circuits*, Archiv fur elektronik und ubertragungstechnik **27**, 51 516, (1973).
- [8] Hu, H., Sprung, D., Martorell, J. and Klarsfeld, S., *Quantum wire with periodic serial structure*, Phys. Rev. **B**, **44**, 6351-6360 (1991).
- [9] Moshinsky, M., *Diffraction in time*, Phys. Rev. **88**, 625–631 (1952).
- [10] Garcia-Calderon, G. y Rubio, A., *Transient effects and delay time in the dynamics of resonant tunneling*, Phys. Rev **A**, **55**, 5 (1997).
- [11] Hernandez, A., *Delay time for a movable quantum shutter*, Phys. Rev **A 81**, 054101 (2010).
- [12] Garcia-Calderon, G. y Hernández-Maldonado, A., *Delay time as a quantum transient interference effect*, Phys. Rev. **A 86**, 062118 (2012).
- [13] Pantaleón, P. A., *Dispersión por potenciales arbitrarios en guías de onda cuánticas*, Tesis de maestría, Universidad Autónoma de Baja California, (2010).
- [14] Hernández, A., Ph.D. thesis, Centro de Investigación Científica y de Educación Superior de Ensenada, México, (2004), pp. 47–59.