UNIVERSIDAD AUTONOMA DE SAN LUIS POTOSI FACULTAD DE CIENCIAS

SOLUCION A LA ECUACION DE SCHRODINGER PARA UNA CADENA FINITA DE FIBONACCI DE BARRERAS DE POTENCIAL

TESIS QUE PARA OBTENER EL GRADO DE

MAESTRO EN CIENCIAS

PRESENTA EL

FIS. RAYMUNDO RODRIGUEZ ALBA

ABRIL DE 1988

A la memoria de mi Abuelo Raymundo Rodriguez Perez

AGRADECI MI ENTOS

Debo expresar mi agradecimiento de manera muy especial al Dr. José Luis Morán López por la sugerencia del tema de tésis y por la asesoría durante su desarrollo.

Gracias también a los Físicos Facundo Ruíz y José Manuel Cabrera Trujillo por su valiosa ayuda en el manejo del equipo de computación.

Los cálculos del presente trabajo se efectuaron con el equipo de computación que obtuvo el Instituto de Física de la Universidad Autónoma de San Luis Potosí con el apoyo del Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología a través de la Dirección Adjunta de la Formación de Recursos Humanos.

З

INDICE

I. INTRODUCCION

- II. SOLUCION A ECUACION DE SCHRODINGER PARA UNA Y DOS BARRERAS.
- III. SOLUCIONES A LA ECUACION DE SCHRODINGER EN UNA CADENA DE FIBONACCI FINITA.

IV. CONCLUSIONES

V. REFERENCIAS

I. INTRODUCCION

El problema de localización de los auto-estados de electrones no interactuantes inmersos en potenciales distribuidos al azar, ha sido estudiado tanto numéricamente como analíticamente [1]. Se sabe bién ahora que en sistemas unidimensionales todos los autoestados están localizados, independientemente de la magnitud del desorden [2]. Estas aseveraciones teóricas han sido confirmadas en experimentos de transporte electrónico en sistemas metálicos desordenados compuestos por hilos metálicos [3]. La forma como se relacionan los resultados teóricos con cantidades de transporte medibles es a "través de la formula de Landauer:

$$R = T^{-1} - 1, (1)$$

donde T representa el coeficiente de transmisión total de la región de dispersión y R es la resistencia Cadimensional).

La ecuación de Schrödinger en potenciales cuasiperiódicos también ha sido analizada en detalle por varios autores [4-6]. El interés en estos sistemas es tanto matemático como físico. El interés matemático surge del hecho de que el teorema de Bloch es inaplicable es estos sistemas y es necesario implementar técnicas numéricas para la solución del problema. Desde el punto de vista físico el interés radica en que ese tipo de potenciales se presenta en sistemas inconmensurables [7], en compuestos crecidos de manera no estequiométrica [8], etc.

Otro factor importante para el estudio de estos materiales ha sido el descubrimiento de cuasicristales [10]. Estos son sistemas con un nuevo tipo de ordenamiento, que no es ni cristalino ni amorfo. El patrón de difracción de rayos X de estos materiales $(AI_{0.86}Mn_{0.14})$ posee simetría icosaedral, la cual no pertenece a las simetrías cristalinas. Uno de los modelos que reproducen ese patrón de diffración es el conocido como las redes de Penrose [11]. En dos dimensiones, este modelo consiste en el embaldosado de dos tipos de celdas que llenan el plano de una manera no periódica. Esta

construcción tiene la propiedad de que sobre los ejes de simetría cinco, se alternan familias de planos de acuerdo a la secuencia de *Fibonacci* [12].

El propósito del presente trabajo es estudiar el coeficiente de transmisión de una cadena finita de barreras de potencial compuesta por dos tipos de barreras de altura diferente y dispuestas de acuerdo a la secuencia de *Fibonacci*. En particular se estudia como depende T del número de barreras.Con el fin de marcar las diferencias con sistemas periódicos, se resuelve la ecuación de Schrödinger para el caso en el que todas las barreras iguales y aquel en el que una barrera baja y una alta se alternan regularmente.

En el capítulo II se revisa someramente las soluciones para el caso de una sola barrera y se extiende a el caso de dos barreras. En el se dan algunas soluciones analíticas en casos especiales. En el capítulo III se presentan los conceptos de la serie de *Fibonacci* y se da el formalismo general para la obtención del coeficiente de transmisión en el caso general para un número

arbitrario de barreras y dispuestas de acuerdo a alguna secuencia dada. La discusión de nuestros resultados y las conclusiones están contenidas en el capítulo IV.

II. SOLUCION DE LA ECUACION DE SCHRÖDINGER PARA UNA Y DOS BARRERAS DE POTENCIAL.

En este Capitulo se revisa someramente el caso de **un**a barrera de potencial y se extiende el formalismo a **e**l caso de dos barreras. Detalles del primer caso se pueden encontrar en la ref. [13].

a) Una Barrera de Potencial.

La barrera de potencial de altura V_0 se ubica en el origen y tiene un ancho α ; entonces, la partícula es libre para valores de x < 0 y x > α (regiones I y III de ~la Fig. 1). La solución general de la ecuacion de Schrödinger para energías del electrón $\varepsilon < V_0$ se puede escribir como:



$$\Psi(x) = \begin{cases} A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx} & x < 0 \\ A_2 e^{ikx} + B_2 e^{-ikx} & 0 < x < \alpha \\ A_3 e^{ikx} + B_3 e^{-ikx} & x > \alpha \end{cases}$$
(1)

donde k = $\varepsilon^{1/2}$ y x = $(V_0 - \varepsilon)^{1/2}$. Las unidades que adoptaremos en todo el trabajo son tales que $\hbar/2m = 1$. Aplicando las condiciones de continuidad para la función de onda y su derivada en x = 0 y en x = α , obtenemos la relación entre los coeficientes de la función de onda incidente y saliente:

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix}$$
 (2)

_donde M es la matriz de transmisión y está dada por:

$$M = \begin{pmatrix} [\cosh \varkappa \alpha + \frac{i\nu}{2} \operatorname{senh} \varkappa \alpha] e^{ik\alpha} & \frac{i\mu}{2} \operatorname{senh} \varkappa \alpha e^{-ik\alpha} \\ - \frac{i\mu}{2} \operatorname{senh} \varkappa \alpha e^{ik\alpha} & [\cosh \varkappa \alpha - \frac{i\nu}{2} \operatorname{senh} \varkappa \alpha] e^{-ik\alpha} \end{pmatrix}$$
(3)

У

$$\nu = \frac{\varkappa}{k} - \frac{k}{\varkappa} , \quad \mu = \frac{\varkappa}{k} + \frac{k}{\varkappa} . \quad (4)$$

La solución que nos interesa es aquella en la que no hay onda reflejada en la región III ($B_3 = 0$). Asi el coeficiente de transmisión se define como la razón de corriente de la onda transmitida $|A_3|^2$ a la de la onda incidente $|A_1|^2$;

$$\Gamma = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2} = \frac{1}{|M_{11}|^2}$$
(5)

Tomando V_Q = 1, el resultado para el coeficiente de transmisión es:

$$T = \begin{cases} \frac{4\varepsilon(1-\varepsilon)}{4\varepsilon(1-\varepsilon) + \operatorname{senh}^{2} \varkappa \alpha} & \operatorname{para} \varepsilon \langle 1 \ ; \ \varkappa = (1-\varepsilon)^{-1/2} \\ \cdot \\ \frac{4\varepsilon(\varepsilon-1)}{4\varepsilon(\varepsilon-1) + \operatorname{sen}^{2} \varkappa \alpha} & \operatorname{para} \varepsilon \rangle 1 \ ; \ \varkappa = (\varepsilon-1)^{1/2} \end{cases}$$
(6)

En la figura 2 se presentan los resultados para el coeficiente de transmisión para tres valores del ancho de la barrera; α = 2.23, 3.16 y 6.32. En esta figura se nota claramente que entre mas angosta sea la barrera la probabilidad de que el electrón traspase la barrera es



.

-

TRANSMISION

.

mayor. El coeficiente de transmisión aumenta monotónicamente de O a el valor en el que la energía del electron es igual al de la barrera:

$$T(1) = [1 + a^2/4]^{-1}.$$
 (7)

La dependencia de T con respecto al acho de la barrera se muestra en la figura 3 con una línea punteada.

Para valores de la energía $\varepsilon > V_{0}$, la transmisión total T=1 ocurre solo para ciertos valores de la energía $(\alpha \varepsilon^{1/2} = n\pi)$. En esa región, T oscila entre 1 y un valor mínimo que disminuye al aumentar la energía.



.

Figura 3

(1)1 14 .

b) Dos barreras de Potencial.

Consideramos el caso mas general de dos barreras de potencial, en el cual tanto los anchos como las alturas son diferentes:



La función de onda en las regiones I, III y V son de la forma:

$$\psi_{i} = A_{i}e^{ik_{i}X} + B_{i}e^{-ik_{i}X}; i=1,3,5,$$
 (8)

donde $k_i = \epsilon^{1/2}$. En las regiones II y IV las funciones de onda son exponenciales si la energía es menor que el alto de la barrera;

$$\psi_i^{C\times 2} = A_i e^{\varkappa_i^{X}} + B_i e^{-\varkappa_i^{X}}; \qquad i=2,4$$
(9)

donde
$$\varkappa_{i} = (V_{i/2} - \varepsilon)^{1/2}$$
, i =2,4.

Aplicando las condiciones de continuidad para la función de onda y a su primera derivada en los puntos $x=\alpha+b$ y $x=\alpha+b+c$, obtenemos la matriz de transferencia para la segunda barrera. En el caso en el que $\varepsilon < V_2$, toma la forma:

$$M_{2} = \begin{pmatrix} i\nu \\ cosh \varkappa_{4}c + \frac{i\nu}{2} & senh\varkappa_{4}c]e^{ik_{3}c} & \frac{i\varkappa}{2} & senh\varkappa_{4}c & e^{-2ik_{3}l} \\ -\frac{i\mu}{2} & senh\varkappa_{4}c & e^{i2k_{3}l} & [cosh\varkappa_{4}c - \frac{i\nu}{2} & senh\varkappa_{4}c]e^{-ik_{3}c} \end{pmatrix}$$

$$(10)$$

donde $l=(\alpha+b)+c/2$ es el centro de la segunda barrera, y

$$\nu_{4} = \frac{\varkappa_{4}}{k_{3}} - \frac{\kappa_{3}}{\varkappa_{4}}, \qquad \mu_{4} = \frac{\varkappa_{4}}{k_{3}} + \frac{\kappa_{3}}{\varkappa_{4}}. \qquad (11)$$

Asi, para obtener los coeficientes de la onda que sale del sistema en términos de los coeficientes de la que incide, se multiplican las dos matrices de transferencia:

y el coeficiente de transmisión está dado por:

$$T = \left| (M) (M) + (M) (M) (M) \right|^{-2}$$
(13)

El cálculo de T en el caso general se tiene que hacer numéricamente. Solo se pude obtener una expresión analítica en el caso de barreras de igual ancho y con separación $b=\alpha=c$ para un electrón con $\varepsilon=1$ (recuérdese que hemos tomado en todos los casos $V_1=1$);

$$T = [(1 - \frac{\alpha^2}{2} \sin^2 \alpha)^2 + (\frac{\alpha^2}{4} \sin 2\alpha - \alpha)^2]^{-1}.$$
 (14)

La línea contínua de la figura 3 muestra la dependencia de T con respecto a el ancho de las barreras. A diferencia del comportamiento de una sóla barrera en la cual t=1 solo para α =0, en el caso de dos barreras ya hay un número infinito de anchos para los cuales eso sucede.

Esos picos a altas energías están espaciados en valores de π .

En la Figura 5 se muestran los resultados para T en el caso de dos barreras de igual altura e igual ancho $(\alpha=c=2)$ y separadas por una distancia b=1, 2 y 3. Esto muestra un comportamiento completamente diferente en la región $\varepsilon < 1$ al de una barrera; i.e. existe una transmitancia total para un valor de la energía en ese rango. Entre mas separadas estén las barreras, más localizado está ese valor de la energía.

La forma como depende T del ancho de las barreras compoarado con la separación de las mismas se ilustra en la figura 6, donde la separación se ha fijado a 2 y las diferentes curvas corresponden a los valores $\alpha=c=2y$ 4. Aquí notamos también que para valores mayores de α , el pico de máxima transmitancia, en la región $\varepsilon<1$, se localiza más y permanece en el mismo valor de la energía. En algunas gráficas los picos no llegan a 1. Esto se debe al tamaño del intervalo entre punto y punto con el que se calcularon los programas.

COEFICIENTE DE TRANSMISION V1=V2=1 a=c=2 1 0.9 0.8 0.7 -0.6 -11 0.5 -0.4 -1 0.3 -11 0.2 0.1 -0 0 2 4 6 ENERGIA b=1b=2 b=3 FIGURA 5

TRANSMISION

.



.

TRANSMISION

La figura 7 muestra el efecto de la diferencia de tamaño de las barreras. aquí se tomó a=b=c=2 y $V_2=1$, 1.42 y 2. En este caso, la resonancia en $\varepsilon < 1$ se reduce considerablemente y una transmitividad apreciable en el caso de $V_2=2$ solo sucede para valores muy altos de energía ($\varepsilon \approx 5$).



•

TRANSMISION

III. SOLUCION DE LA ECUACION DE SCHRÖDINGER PARA UNA CADENA DE Fibonacci FINITA.

Aquí discutimos el caso general de un número n de barreras de potencial de dos alturas diferentes y dispuestas de acuerdo a una secuencia dada. La figura 8 muestra uno de esos arreglos.





La solución general de la ecuación de Schrödinger en las regiones donde el potencial es cero (I,III,V,VII, etc) es de la forma:

$$\Psi_{i}(X) = A_{i} e^{ik_{i}X} + B_{i} e^{-ik_{i}X}$$
(14)

con $k_i = \varepsilon^{1/2}$ (i=1,3,5,7, etc). En la región de las barreras la función de onda tiene la forma:

$$\Psi_{i}(X) = A_{i} e^{\gamma} i j^{X} + B_{i} e^{-\gamma} i j^{X}, \qquad (15)$$

donde el primer subíndice indica la zona de la barrera (i=2,4,6, ...) y j depende de la altura de la barrera (V_{j} o V_{2}). Así $\gamma_{ij} = (V_{j} - \varepsilon)^{1/2}$, cuando la energía del electrón es menor que la altura de la barrera y $\gamma_{ij} = (\varepsilon - V_{j})^{1/2}$ cuando la energía excede la altura de la barrera.

Aquí consideraremos solo el caso en el que las barreras tienen el mismo ancho α y están separadas por una distancia b. De esta manera, para la n-ésima barrera las condiciones de continuidad de la función de onda y su derivada en el punto x=(n-1)(α +b), donde empieza la barrera n, son:

$$\Psi_{n-1}(x) = \Psi_{n-1}(x), \quad y = \Psi_{n-1}(x) = \Psi_{n-1}(x).$$
(16)

De mamera análoga para los puntos $x=(n-1)b+n\alpha$, donde termina la barrera, las condiciones de continuidad son:

$$\Psi_{n}(x) = \Psi_{n+1}(x), \quad y \quad \Psi_{n}'(x) = \Psi_{n+1}'(x). \tag{17}$$

La relación entre los coeficientes de la onda que incide sobre la barrera n, los de la onda que sale es:

$$\begin{pmatrix} A_{n-1} \\ B_{n-1} \end{pmatrix} = M_n \begin{pmatrix} A_{n+1} \\ B_{n+1} \end{pmatrix},$$
 (18)

donde la matriz de transferencia M_n tiene la forma:

$$M_{n} = \begin{pmatrix} (\cosh \gamma_{nj}a + \frac{i\nu}{2}^{nj} \operatorname{senh} \gamma_{nj}a) e^{ika} & \frac{i\mu}{2}^{nj} \operatorname{senh} \gamma_{ij}a e^{-2ikl} \\ - \frac{i\mu_{nj}}{2} \operatorname{senh} \gamma_{nj}a & e^{2ikl} n & (\cosh \gamma_{nj}a - \frac{i\nu}{2}^{nj} \operatorname{senh} \gamma_{nj}a) e^{-ika} \end{pmatrix}$$
(19)

donde $l_n = (n-1)b+(n-1/2)\alpha$ es el centro de la n-ésima barrera, j=1, 2 según sea la barrera y:

$$\nu_{nj} = \frac{\gamma_{nj}}{k} - \frac{k}{\gamma_{nj}}, \quad \mu_{nj} = \frac{\gamma_{nj}}{k} + \frac{k}{\gamma_{nj}}.$$
 (20)

La matriz de transferencia para las n barreras se obtiene del producto ordenado de las n matrices de transferencia individuales:

$$\mathcal{M} = \underset{\mathbf{1}}{\mathsf{M}} \underset{\mathbf{2}}{\mathsf{M}} \underset{\mathbf{3}}{\mathsf{M}} \dots \underset{\mathbf{n}}{\mathsf{M}}, \tag{21}$$

obteniéndose finalmente el coeficiente de transmisión para el conjunto de las n barreras:

$$T = |M_{11}|^{-2}$$
. (22)

Analizaremos ahora tres casos:

i) n barreras idénticas:

En este caso se tomó $V_1 = V_2 = 1$ y $\alpha = b = 2$. La figura 9 muestra los resultados para T en el caso de cadenas con 6, 8 y 10 barreras. Aquí se ve claramente una banda dentro de la región $\varepsilon < 1$. El número de picos es igual al número de barreras menos 1. También se observa que para $\varepsilon > 1$ se empieza a formar otra banda, que se hace más patente al aumentar el número de barreras. La figura 10 muestra T en la región de la banda para el caso de n=150. Los bordes de la banda coinciden ya con los de la cadena infinita (modelo de Kronig-Penney).



TRANSMISION



Figura 10

ii) n/2 barreras de tipo 1 alternadas regularmente con otras de tipo 2.

Este caso es parecido al anterior, con la diferencia de que la celda unidad es el doble. La figura 11 muestra los resultados para el caso en el que $V_2=2$, $\alpha=b=2$ y el número total de barreras es 6, 8 y 10. En estas figuras se observa claramente que se forman grupos con dos bandas. El número de picos en cada banda es ahora n/2-1. La figura 12 muestra la región de las dos bandas para el caso de n=40.



TRANSMISION



Figura 12

iii) n barreras dispuestas en una secuencia de Fibonacci.

En general una cadena cuasi-periódica se puede generar al proyectar sobre una recta puntos que pertenecen a una red cuadrada [14]. Esto se ilustra en la Fig. 13 donde se proyectan los puntos de la red cuadrada que caen dentro de dos líneas con pendiente r=tan θ . Si uno denota por u_n , la absisa del punto n a lo largo de la línea que pasa por el origen, la longitud de la distancia que seprara los puntos n y n+1 solo puede tomar los valores $s=sen\theta$ y $c=cos\theta$, y está dado por:

$$u_{n+1} - u_n = s - (s - c) \left[Int \left(\frac{(n+1)r}{r+1} \right) - Int \left(\frac{nr}{r+1} \right) \right], \quad (23)$$

-donde Int(z) denota el entero mayor que es menor que z. Escribiendo la secuencia de los enlaces a la derecha del origen se obtiene la palabra infinita w=sccsc... Palabras (o cadenas) de período $\lambda = \alpha + \beta$, se obtienen cuando las líneas tienen pendientes racionales $r = \alpha / \rho$. Sistemas cuasi-periódicos se obtienen cuando r es irracional. En particular la cadena de Fibonacci se obtiene cuando r=($\sqrt{5}$ -1)/2.

5 3 4 2 0 -1 θ -2 -4 -3 -5

•

.



Aquí hemos generado cadenas finitas con G barreras grandes y P barreras pequeñas, tales que el P+G es el número total de barreras y r=P/G son aproximantes de Fibonacci (2, 3/2,5/3, 8/5, 13/8, 21/13, 34/21, etc.)

En las figuras 14 y 15 se presentan los resultados para cadenas con 13, 21, 34, 55, 89 y 144 barreras, dispuestas en la secuencia de Fibonacci. De estas figuras se nota claramente que el efecto de la cuasiperiodicidad es destruir las bandas que existen en el caso de sistemas ordenados como el tratado en los incisos i) y ii). Esto es más evidente en cuanto el número de barreras se incrementa.

La diferencia entre los sistemas ordenados de una cadena con un solo tipo de barreras, con dos tipos de barreras alternados periódicamente y el caso de *Fibonacci* se observa claramente en la Figura 16, donde se muestran los resultados para cadenas de 144 barreras.



TRANSMISION

TRANSMISION

TRANSMISION





.

IV. CONCLUSIONES

En este trabajo se ha estudiado sistemáticamente el fenómeno de transmigión de funciones de onda electrónicas a través de barreras de potencial. Este estudio ha sido motivado por las propiedades de conducción que pueden tener sistemas que no están ni completamente ordenados ni completamente desordenados. Tal es el caso de los cuasicristales unidimensionales, de los cuales el que hemos analizado es el de una cadena de barreras de potencial con dos alturas diferentes y dispuestas de acuerdo a una secuencia de Fibonacci.

Con el fin de comparar con sistemas ordenados resolvimos el problema mas sencillo de cadenas de barreras iguales y el de una secuencia ordenada de barreras altas y bajas.
En el primer caso se obtiene claramente las bandas características del modelo infinito de Kronig-Penney, y en el segundo caso debido a la doble periodicidad la banda se desdobla en dos sub-bandas.

En contraste con lo obtenido en los casos ordenados en la cadena de *Fibonacci* las bandas se tienden a destruir, apareciendo gaps alternados con resonancias muy angostas. Esto es más evidente en cuanto se aumenta el número de barreras. Un efecto análogo se observa en sistemas desordenados [15].

Este es solo un estudio preliminar quedando varios aspectos por estudiar, como son: i) ¿como se van poblando las regiones donde aparecen los estados al aumentar el número de barreras?, ii) ¿están esas resonancias localizadas donde existirían bandas de periodicidad mayor que 2?, iii) ¿se presenta el fenómeno de autosimilaridad?, iv) ¿cual es el efecto de campos "eléctricos aplicados? Estas preguntas están siendo consideradas actualmente.

38

Ľ

- 1. P. Erdös and R.C. Herndon, Adv. Phys. <u>31</u>, 65 (1982)
- 2. H. Kunz and B. Souillard, Commun. Math. Phys. <u>78</u>, 201 (1980).
- 3. J.T. Masden and N. Giordano, Phys. Rev. Lett., <u>49</u>, 819 (1982).
- 4. B. Simon, Adv. Appl. Math. 3, 463 (1982)
- 5. D. Thouless and Q. Niu, J. Phys. A<u>16</u>, 1911 (1983).
- 6. S. Ostlund and R. Pandit, Phys. Rev. B29, 1394 (1984).
- S. Aubry and G. Andre, in Proceedings of the Israel Physical Society, ed. C.G. Kuper (Hilger, Bristol 1979), Vol.3, p.133.
- B. E. Batalla, F.S. Razavi, and W.R. Datars, Phys. Rev. B25, 2109 (1982).
- 9. D.S. Schechtman, I. Blech, D. Gratias, and J.W. Cahn, Phys. Rev. Lett., <u>54</u>, 2432 (1984).
- 10.D.R. Nelson and B.I. Halperin, Science <u>229</u>, 233 (1985).
- 11.R. Penrose, Bull. Inst. Math. Appl., <u>10</u>, 266 (1974)
 12.D. Levine and P. Steinhardt, Phys. Rev. Lett., <u>53</u>, 2477, (1984).

- 13.E. Merzbacher, Quantum Mechanics, Willey, 1961.
- 14.J.M. Luck and D. Petritis, J. Stat. Phys.,<u>42</u>, 289 (1986).
- 15.J. Flores and G. Monsivais, Rev. Mex. Phys. <u>33</u>, 412 (1987).



SISTEMA DE BIBLIOTECAS U.A.S.L.P.

No. DE REG.