



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA  
DE MÉXICO

---

---

FACULTAD DE CIENCIAS

ESTUDIO DEL TRANSPORTE EN LA ECUACIÓN DE  
SCHRÖDINGER UNIDIMENSIONAL CON  
DISPERSORES ARBITRARIOS

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

FÍSICO

PRESENTA:

RODRIGO LEÓN GUILLÉN

TUTOR

DR. CARLOS RAMÍREZ RAMOS

CIUDAD UNIVERSITARIA, CD. MX.

2018





Universidad Nacional  
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

**Biblioteca Central**



**UNAM – Dirección General de Bibliotecas**  
**Tesis Digitales**  
**Restricciones de uso**

**DERECHOS RESERVADOS ©**  
**PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

1. Datos del alumno  
León  
Guillén  
Rodrigo  
Universidad Nacional Autónoma de México  
Facultad de Ciencias  
Física  
411067731
2. Datos del tutor  
Doctor  
Carlos  
Ramírez  
Ramos
3. Datos del sinodal 1  
Doctor  
Chumin  
Wang  
Chen
4. Datos del sinodal 2  
Doctor  
Juan Carlos  
Alonso  
Huitrón
5. Datos del sinodal 3  
Doctor  
Ricardo  
Méndez  
Fragoso
6. Datos del sinodal 4  
Doctor  
Luis Antonio  
Pérez  
López
7. Datos del trabajo escrito  
Estudio del transporte en la ecuación de Schrödinger unidimensional con dispersores arbitrarios  
61 p.  
2018

*A mis padres, Andrés y Diana.*

# Agradecimientos

Agradezco ampliamente al Dr. Carlos Ramírez, por la oportunidad de trabajar con él y por todo lo que me ha enseñado a lo largo de mi carrera, han sido fundamentales para mi formación.

Agradezco a mis padres, por el apoyo incondicional que me han brindado durante toda la vida, nada de esto podría suceder sin ustedes. A mi hermano, por siempre ser un gran ejemplo a seguir.

Agradezco a mis amigos, que de alguna forma u otra hicieron más fácil y divertido todo este proceso.

Agradezco a mis sinodales, por haberse tomado el tiempo de leer mi tesis y por sus comentarios que me ayudaron a mejorarla.

Se agradece el apoyo otorgado por los proyectos UNAM-DGAPA-PAPIIT IA106617 y LANCAD-UNAM-DGTIC-329.

---

## Resumen

En este trabajo presentamos una manera nueva y eficiente para calcular la matriz de dispersión (matriz  $S$ ) de un potencial arbitrario. El método consiste en dividir el potencial en  $N$  partes y aproximar cada rebanada con un polinomio de grado  $n_{max}$ . La matriz  $S$  total se puede obtener iterativamente de las matrices  $S$  de cada división, donde el cálculo de cada matriz  $S$  es independiente de las demás. Esto permite al cálculo computacional ser altamente preciso y no propagar errores. Primero, se calculó el coeficiente de transmisión para una barrera de potencial con los bordes suavizados expresada como una potencia de grado  $P$  y se hizo una comparación con los resultados obtenidos de aproximar al potencial por diferentes grados  $n_{max}$  para un número de divisiones,  $N$ . También, se midió el tiempo que se toma en calcular la transmitancia para una energía con diferentes combinaciones de  $P$  y  $n_{max}$ . Se encontró que al aumentar  $N$  y  $n_{max}$  la precisión del método aumenta notablemente, mientras que al aumentar  $P$  la precisión disminuye, pero en un orden mucho menor en comparación a los otros dos. Por otro lado, se halló que a mayor  $N$ , se producen mejoras más significativas en la precisión, si  $n_{max}$  es mayor. Asimismo, se puede incrementar  $n_{max}$  y lograr una mejor precisión sin que se requiera un mayor tiempo de cómputo. Adicionalmente, se prueba, por medio del teorema de Bloch, que la matriz  $S$  puede ser usada para calcular las estructuras de bandas en un potencial periódico e infinito. Se obtuvo la estructura de bandas para un potencial Kronig-Penney y el de una sucesión infinita de parábolas. Este método nos permite hallar la estructura de bandas para potenciales arbitrarios periódicos e infinitos de una manera rápida y eficaz.

# Índice general

<b>Resumen</b>	<b>V</b>
<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
<b>2. Dispersión</b>	<b>3</b>
2.1. Ecuación de Schrödinger . . . . .	3
2.2. Barrera de potencial . . . . .	5
2.3. Matriz de transferencia . . . . .	9
2.4. Matriz de dispersión . . . . .	10
2.5. Teorema de Bloch . . . . .	11
2.6. Modelo de Kronig-Penney . . . . .	13
<b>3. Conductividad de Landauer</b>	<b>17</b>
3.1. Nanouniones . . . . .	17
3.2. Guías de onda . . . . .	19
3.3. Conductividad de Landauer . . . . .	21
<b>4. Matriz S de un potencial arbitrario</b>	<b>25</b>
4.1. Producto estrella de Redheffer . . . . .	25
4.2. Matriz S para una pequeña región dispersora . . . . .	27
4.3. Estructura de bandas en potenciales periódicos generales . . . . .	30
<b>5. Matriz S para barreras de potencias suavizadas</b>	<b>34</b>
5.1. Barrera suavizada . . . . .	34
5.2. Estructura de bandas a partir de la matriz S . . . . .	39
<b>6. Conclusiones</b>	<b>42</b>
<b>A. Solución para la unión de dos potenciales</b>	<b>43</b>
<b>B. Producto estrella de Redheffer</b>	<b>45</b>
<b>C. Artículo publicado</b>	<b>48</b>
<b>Bibliografía</b>	<b>54</b>

# 1. Introducción

El transporte electrónico en escalas nanométricas se presenta en muchos de los aparatos electrónicos modernos, debido al reducido tamaño de los circuitos que lo conforman. El estudio de este tipo de transporte permite predecir el comportamiento de algún material nanométrico cuando se le hace pasar corriente y es descrito mediante el formalismo de Landauer. En este, se propone que la conductancia  $G$  en una nanounión, depende linealmente de la probabilidad de transmisión  $T$  de la misma. Así, la conducción a través de una nanounión se basa en el cálculo de la probabilidad de que un electrón la atraviese. Con un potencial simple, como un potencial delta o una barrera de potencial, las expresiones para  $T$  se pueden obtener analíticamente y son bien conocidas [1]. En cambio, cuando el problema se hace más general y se considera un potencial arbitrario, usualmente se aborda con el método de matriz de transferencia [2], en el que se aproxima al potencial como una secuencia de barreras de potencial. Después, se calcula la matriz de transferencia total multiplicando las matrices de transferencia de cada barrera, para finalmente obtener  $T$  a partir de estos valores. Estas aproximaciones resultan atinadas cuando el número de barreras es grande. Sin embargo, esto conduce a errores causados por la multiplicación de matrices, mientras que el aumento en el número de barreras incrementa considerablemente el tiempo de cómputo. Es por esto que en este trabajo, se propone calcular  $T$  de una manera más eficiente y precisa a partir de la matriz de dispersión (matriz  $S$ ). Esta matriz contiene toda la información de las ondas transmitidas y reflejadas por lo que resulta mucho más directo calcular  $T$  a partir de la matriz  $S$  para un potencial arbitrario. En este método, también dividimos el potencial en  $N$  partes, pero ahora, cada parte se aproxima por un polinomio de grado  $n_{max}$ , mejorando la precisión de los resultados. La matriz  $S$  del potencial completo, se obtiene haciendo el producto estrella de Redheffer [3] de la matriz  $S$  de todas las divisiones, donde el cálculo de cada matriz  $S$  es independiente del cálculo de todas las demás, mejorando la eficiencia en los cálculos. Además, dado que las matrices  $S$  son unitarias, se reduce la propagación de errores.

La estructura de la tesis esta conformada de la siguiente manera: en la segunda sección se aborda el problema de dispersión, que proviene de resolver la ecuación de Schrödinger en una dimensión con diferentes potenciales; también se aborda el teorema de Bloch para potenciales periódicos y se estudia la formación de energías prohibidas y permitidas para un potencial estilo Kronig-Penney [4]. En la tercer sección se discute el transporte cuántico a través de nanouniones, mediante el formalismo de Landauer, en el que se prueba que la conductividad eléctrica de un material se puede determinar a partir de la probabilidad de transmisión. En la cuarta sección, se introduce el método descrito previamente; primero se propone un método basado en el producto estrella de Redheffer, que nos permite hallar la matriz  $S$  de un sistema en términos de las matrices  $S$  de sus subsistemas. Luego, se deduce una expresión para la matriz  $S$  de un potencial expresado como una serie en una región pequeña. Además, se propone un método para hallar la estructura de bandas de potenciales periódicos arbitrarios por medio de la matriz  $S$  de su celda unitaria. En la sección 5, se aplican los métodos anteriores. Primeramente se calcula la probabilidad de transmisión para potenciales con bordes *suavizados*, para probar la eficiencia y precisión, se usan aproximaciones con polinomios de diferentes grados y divisiones, comparándolos con resultados exactos. Adicionalmente, se calcula el tiempo que le toma a la

---

computadora calcular el coeficiente de transmisión de una energía. Finalmente, se hallan las estructuras de bandas de potenciales Kronig-Penney y de un potencial formado por una secuencia periódica de parábolas.

## 2. Dispersión

### 2.1. Ecuación de Schrödinger

La forma más general de la ecuación de Schrödinger se resuelve para obtener información sobre la función de onda,  $\Psi(\mathbf{r}, t)$ , de una partícula. La ecuación que planteó Schrödinger es [5]

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \hat{H} \Psi(\mathbf{r}, t), \quad (2.1)$$

con  $i = \sqrt{-1}$ ,  $\hbar$  es la constante de Planck reducida  $\frac{h}{2\pi}$  y  $\hat{H}$  el operador Hamiltoniano, el cual tiene como eigenvalores a las energías del sistema. Para un sistema de una partícula en una dimensión, sujeta a un potencial  $V(x, t)$ , la ecuación de Schrödinger se escribe de la siguiente forma

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x, t) \Psi(x, t). \quad (2.2)$$

Al igual que en el caso clásico, se puede obtener la información del sistema dadas unas condiciones iniciales. Para este caso, basta con tener la función de onda al tiempo  $t = 0$ , para calcular  $\Psi(x, t)$  a tiempos posteriores.

Max Born le dio una interpretación estadística a la función de onda, argumentando que  $|\Psi(x, t)|^2 dx$  es la probabilidad de encontrar a la partícula en un punto entre  $x$  y  $x + dx$  al tiempo  $t$ .

Si se considera que el potencial  $V$  es independiente del tiempo, entonces la ecuación (2.2) se puede resolver por separación de variables, por lo que la solución general toma la forma

$$\Psi(x, t) = \psi(x) f(t), \quad (2.3)$$

pero como  $\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \psi \frac{df}{dt}$  y  $\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \frac{d^2 \psi}{dx^2} f$ , la ecuación (2.2) se vuelve

$$i\hbar \psi(x) \frac{df}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} f(t) + V(x) \psi(x) f(t), \quad (2.4)$$

y si se divide entre  $f(t) \psi(x)$ , resulta

$$i\hbar \frac{1}{f(t)} \frac{df}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi(x)} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + V(x). \quad (2.5)$$

Se puede apreciar que el lado izquierdo de la ecuación (2.5) sólo depende de  $t$ , mientras que el lado derecho sólo depende de  $x$ , por lo que forzosamente ambos lados tienen que ser igual a una constante, la cual llamaremos  $E$ . Del lado izquierdo de la ecuación (2.5) se tiene que

$$i\hbar \frac{1}{f(t)} \frac{df}{dt} = E, \quad (2.6)$$

y resolviendo para  $f(t)$ ,

$$f(t) = e^{-\frac{iEt}{\hbar}}. \quad (2.7)$$

Mientras que del lado derecho de la ecuación (2.5) resulta

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi = E\psi. \quad (2.8)$$

A esta última se le conoce como la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo. Notamos que tiene la forma de una ecuación de eigenvalores

$$\hat{H}\psi = E\psi. \quad (2.9)$$

Los eigenvalores de esta ecuación,  $E$ , representan a las energías del sistema, que resultan de aplicar el operador  $\hat{H}$  sobre las eigenfunciones  $\psi(x)$  [6].

Si despejamos la ecuación (2.8) se tiene que

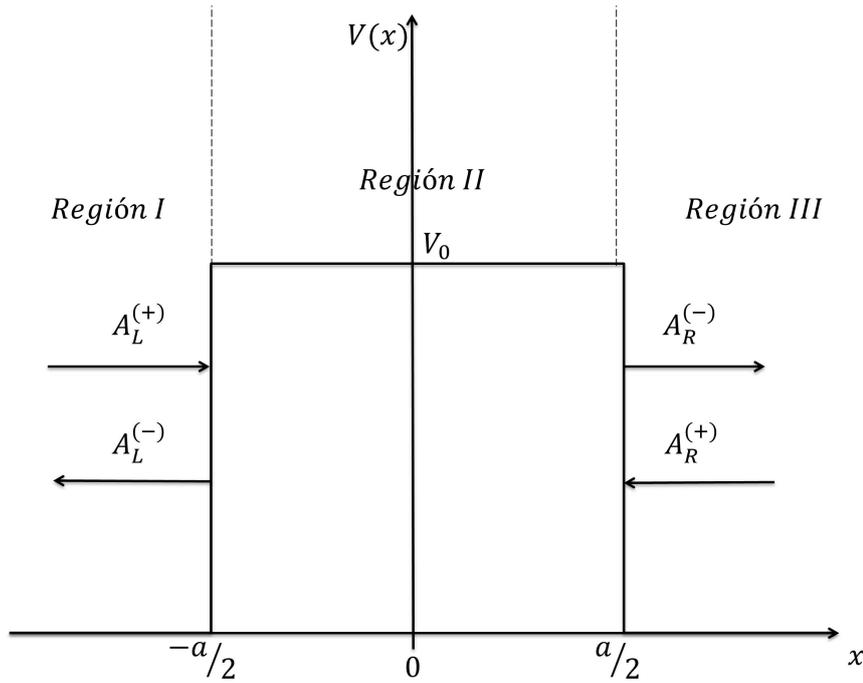
$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}(V(x) - E)\psi. \quad (2.10)$$

Consideremos a un potencial  $V(x)$  con su valor mínimo en  $V_{min}$ . Si se toma a una energía  $E < V_{min}$  entonces la segunda derivada de  $\psi$  va a tener siempre el mismo signo que  $\psi$ . Lo que esto significa, es que  $\psi$  diverge a  $\pm\infty$ , por lo que no se puede normalizar y las soluciones no serán soluciones físicas, poniendo como condición  $E > V_{min}$  para tener soluciones físicas.

Ahora, al igual que en el caso clásico, al considerar un potencial  $V(x)$ , la partícula puede quedar ‘atrapada’ dentro del potencial si no tiene la suficiente energía para salir, o el otro caso, que la partícula tenga la suficiente energía para pasar por el potencial. Al primer caso se le conoce como *estado ligado*, mientras que al segundo caso como *estado no ligado*. En el caso cuántico, a diferencia del clásico, existe el fenómeno de tunelaje. En este, una partícula que atraviesa a una barrera con menor energía que la altura de la barrera, tiene una probabilidad no nula de atravesarla, mientras que en el caso clásico se quedaría atrapada. Es por eso que en el caso cuántico se tiene que analizar el comportamiento del potencial en infinito para saber si se trata de un estado ligado o no ligado. Si la energía es menor que los potenciales evaluados en  $\pm\infty$ , entonces se tiene un estado ligado, mientras que si  $E$  es mayor que  $V(\infty)$  ó  $V(-\infty)$ , se tendrá un estado no ligado. No obstante, si consideramos potenciales que tienden a 0 en  $\pm\infty$ , tenemos que las condiciones se limitan a

$$\begin{cases} E < 0 \Rightarrow \text{Estado ligado} \\ E > 0 \Rightarrow \text{Estado no ligado} \end{cases} \quad (2.11)$$

En casos como la partícula libre o las barreras de potencial, sólo se admiten estados no ligados, ya que no hay potenciales negativos y  $V \rightarrow 0$  cuando  $x \rightarrow \pm\infty$ , mientras que en casos como el del pozo de potencial infinito o el oscilador armónico sólo se admiten estados ligados (ya que el potencial diverge cuando  $x \rightarrow \pm\infty$ ). Por último, en el caso de los pozos de potencial finitos, se pueden admitir estados tanto ligados como no ligados [1].



**Figura 2.1:** Barrera de potencial con amplitud  $V_0$ , se muestran las 3 diferentes regiones y los coeficientes de las ondas entrantes y salientes.

## 2.2. Barrera de potencial

Consideremos una barrera de potencial, es decir, un potencial de la forma

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & \text{si } |x| < \frac{a}{2} \\ 0, & \text{si } |x| > \frac{a}{2} \end{cases}, \quad (2.12)$$

representado esquemáticamente en la figura 2.1. En este ejemplo,  $V_{min} = 0$ , causando que la energía sea forzosamente mayor que cero para que se tengan soluciones físicas a la ecuación de Schrödinger. Esto también significa que este tipo de potencial (a diferencia del pozo de potencial) sólo admite estados no ligados. Para este, se tienen que analizar 2 casos:

1.  $E > V_0$ .
2.  $E \leq V_0$ .

Empecemos con el caso  $E > V_0$ . Se puede dividir el potencial en tres regiones (figura 2.1), por lo que habrá tres soluciones diferentes. Para la región I ( $x < -\frac{a}{2}$ ), la ecuación (2.8) tiene la forma:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_1(x)}{dx^2} = E \psi_1(x), \quad (2.13)$$

o

$$\frac{d^2 \psi_1(x)}{dx^2} + k^2 \psi_1(x) = 0, \quad (2.14)$$

con  $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ , la cual tiene como solución general

$$\psi_I(x) = A_L^{(+)} e^{ik(x+\frac{a}{2})} + A_L^{(-)} e^{-ik(x+\frac{a}{2})}, \quad (2.15)$$

donde  $A_L^{(+)}$  y  $A_L^{(-)}$  son constantes que representan respectivamente a los coeficientes de amplitud de las ondas incidentes y reflejadas. En la región II ( $-\frac{a}{2} < x < \frac{a}{2}$ ),  $V(x) = V_0$ , entonces la ecuación (2.8) es

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi_{II}(x)}{\partial x^2} + V_0 \psi_{II}(x) = E \psi_{II}(x), \quad (2.16)$$

la cual también puede ser reescrita como

$$\frac{\partial^2 \psi_{II}(x)}{\partial x^2} + k'^2 \psi_{II}(x) = 0, \quad (2.17)$$

con  $k' = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}$ . Las soluciones para esta región serán

$$\psi_{II}(x) = C e^{ik'x} + D e^{-ik'x}. \quad (2.18)$$

Por último, en la región III ( $x > \frac{a}{2}$ ) se tiene la misma ecuación que en (2.14), por lo que

$$\psi_{III}(x) = A_R^{(-)} e^{ik(x-\frac{a}{2})} + A_R^{(+)} e^{-ik(x-\frac{a}{2})}. \quad (2.19)$$

Hay que notar que las soluciones fuera de la barrera son exponenciales imaginarias, que representan ondas planas viajando hacia la derecha e izquierda. Las soluciones (y sus derivadas) en las fronteras de la barrera tienen que ser continuas, lo que da a lugar a 4 condiciones de frontera

1.  $\psi_I(-\frac{a}{2}) = \psi_{II}(-\frac{a}{2})$ .
2.  $\psi_I'(-\frac{a}{2}) = \psi_{II}'(-\frac{a}{2})$ .
3.  $\psi_{II}(\frac{a}{2}) = \psi_{III}(\frac{a}{2})$ .
4.  $\psi_{II}'(\frac{a}{2}) = \psi_{III}'(\frac{a}{2})$ .

Estas condiciones de frontera plantean 4 ecuaciones relacionando las 6 incógnitas de la siguiente manera

$$A_L^{(+)} + A_L^{(-)} = C e^{-\frac{ik'a}{2}} + D e^{\frac{ik'a}{2}}, \quad (2.20)$$

$$ik \left( A_L^{(+)} - A_L^{(-)} \right) = ik' \left( C e^{-\frac{ik'a}{2}} - D e^{\frac{ik'a}{2}} \right), \quad (2.21)$$

$$C e^{\frac{ik'a}{2}} + D e^{-\frac{ik'a}{2}} = A_R^{(-)} + A_R^{(+)}, \quad (2.22)$$

$$ik' \left( C e^{\frac{ik'a}{2}} - D e^{-\frac{ik'a}{2}} \right) = ik \left( A_R^{(-)} - A_R^{(+)} \right). \quad (2.23)$$

Consideremos el caso en el que sólo incide una onda por la izquierda. Al incidir en la barrera, parte de la onda se transmite y la otra parte se refleja, sin embargo, la onda

transmitida ya no tiene donde reflejarse, y en consecuencia para este modelo,  $A_R^{(+)} = 0$ . Como ahora se tienen 4 ecuaciones (ecs. (2.20) - (2.23)) con 5 incógnitas, se puede poner 4 incógnitas en términos de una variable independiente (véase la sección 4.2 para ver como se hace esto en términos generales). En particular, si se quiere estudiar las probabilidades de reflexión y transmisión del electrón cuando choca con la barrera, es útil poner los coeficientes asociados a la onda reflejada,  $A_L^{(-)}$ , y transmitida,  $A_R^{(-)}$ , en términos del coeficiente de la onda incidente,  $A_L^{(+)}$ . Sustituyendo y haciendo un poco de álgebra en las ecuaciones (2.20) - (2.23), nos queda que

$$A_R^{(-)} = \frac{2ikk'}{2ikk' \cos(k'a) + (k^2 + k'^2) \sin(k'a)} A_L^{(+)}, \quad (2.24)$$

y

$$A_L^{(-)} = \frac{(k^2 - k'^2) \sin(k'a)}{2ik'k \cos(k'a) + (k^2 + k'^2) \sin(k'a)} A_L^{(+)}. \quad (2.25)$$

El coeficiente de transmisión  $T$  está dado entonces por

$$T = \frac{|A_R^{(-)}|^2}{|A_L^{(+)}|^2} = \frac{1}{1 + (k^2 - k'^2) \sin^2(k'a)/4k^2k'^2}, \quad (2.26)$$

que en términos de sus parámetros originales se convierte en

$$T = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(E-V_0)} \sin^2\left(\frac{a}{\hbar} \sqrt{2m(E-V_0)}\right)}, \quad (2.27)$$

el cual se ilustra en la figura 2.2 para una barrera de altura  $V_0 = 50$ .<sup>1</sup> Nótese que se tiene una probabilidad de transmisión perfecta,  $T = 1$ , cuando el argumento del seno es 0, es decir, cuando

$$\frac{a}{\hbar} \sqrt{2m(E-V_0)} = n\pi. \quad (2.28)$$

Es importante resaltar que a diferencia del caso clásico, sí existe una probabilidad de reflexión,  $R = 1 - T$ , a pesar de que la partícula tenga una energía mayor al de la barrera.

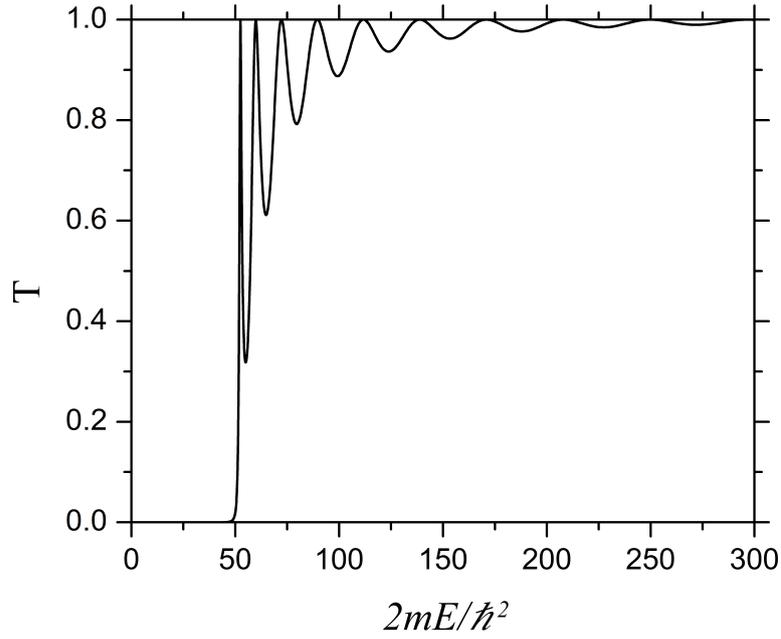
Cuando se consideran los estados en los que  $E < V_0$ , las soluciones fuera de la barrera son iguales a las del caso previamente analizado, pero dentro de la barrera se tiene la ecuación

$$\frac{\partial^2 \psi_{II}(x)}{\partial x^2} - k''^2 \psi_{II}(x) = 0, \quad (2.29)$$

donde  $k'' = \frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar}$ , por lo que las soluciones para este caso son

$$\psi(x) = \begin{cases} A_L^{(+)} e^{ik(x+\frac{a}{2})} + A_L^{(-)} e^{-ik(x+\frac{a}{2})} & \text{para } x < -\frac{a}{2} \\ Ce^{k''x} + De^{-k''x} & \text{para } |x| < \frac{a}{2} \\ A_R^{(-)} e^{ik(x-\frac{a}{2})} + A_R^{(+)} e^{-ik(x-\frac{a}{2})} & \text{para } x > \frac{a}{2} \end{cases} \quad (2.30)$$

<sup>1</sup>A o largo del trabajo se usa que  $\frac{2m}{\hbar^2} = 1$  como unidad.



**Figura 2.2:** Coeficiente de transmisión para una barrera de potencial de altura 50.

De nuevo, se tienen las mismas 4 condiciones de frontera que en el caso anterior, entonces para el caso de onda incidente por la izquierda, los coeficientes de amplitud son

$$A_R^{(-)} = \frac{2ikk''}{2ikk'' \cosh(k'a) + \sinh(k''a)(k^2 - k''^2)} A_R^{(+)}, \quad (2.31)$$

y

$$A_L^{(+)} = \frac{(k^2 + k''^2) \sinh(k''a)}{2ik''k \cosh(k''a) + \sinh(k''a)(k^2 - k''^2)} A_L^{(+)}. \quad (2.32)$$

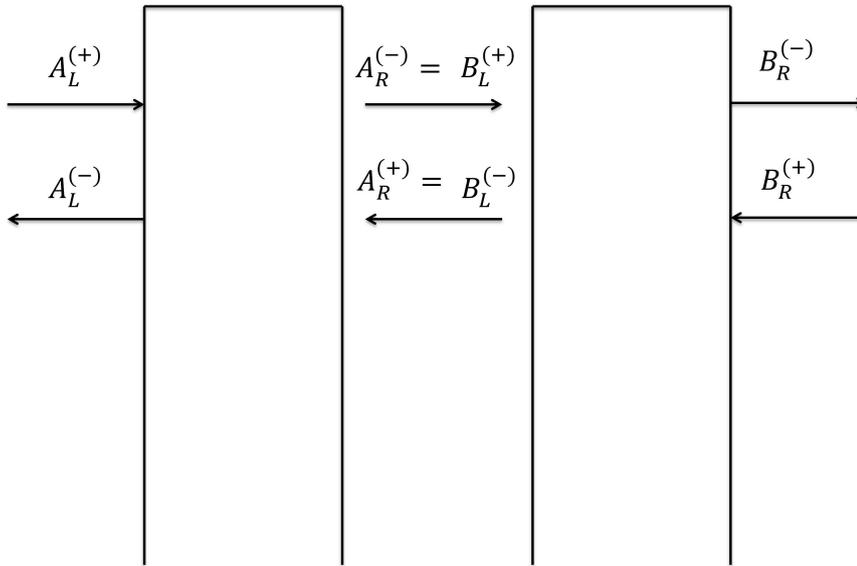
La probabilidad de transmisión es

$$T = \frac{|A_R^{(-)}|^2}{|A_L^{(+)}|^2} = \frac{1}{1 + \frac{(k^2 - k''^2) \sinh^2(k''a)}{4k^2 k''^2}}, \quad (2.33)$$

o también

$$T = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(E-V_0)} \sinh^2\left(\frac{a}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)}\right)}. \quad (2.34)$$

Ahora, lo que resulta curioso, es que siempre hay una probabilidad de transmisión no nula, aún cuando la partícula tiene una energía menor a la altura de la barrera. El único caso en el que la probabilidad de transmisión es 0, es cuando  $\sinh \rightarrow \infty$ , que sólo se da cuando se tiene una barrera de potencial infinita. Este fenómeno es conocido como tunelamiento cuántico.



**Figura 2.3:** Ilustración para la condición  $A_R^{(-)} = B_L^{(+)}$  y  $A_R^{(+)} = B_L^{(-)}$

### 2.3. Matriz de transferencia

Partamos de las ecuaciones que salen de las condiciones de frontera en (2.20) - (2.23). Puesto que tenemos 6 incógnitas y 4 ecuaciones, siempre podemos resolver el problema en términos de 2 incógnitas. El propósito de la matriz de transferencia es relacionar a los coeficientes de las ondas del lado izquierdo ( $A_L^{(+)}$  y  $A_L^{(-)}$ ) con las del lado derecho ( $A_R^{(+)}$  y  $A_R^{(-)}$ ). Despejando a  $A_L^{(+)}$  y  $A_L^{(-)}$  de las ecuaciones (2.20) - (2.23), nos deja con una expresión del tipo

$$\begin{pmatrix} A_L^{(+)} \\ A_L^{(-)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_R^{(-)} \\ A_R^{(+)} \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} A_R^{(-)} \\ A_R^{(+)} \end{pmatrix}, \quad (2.35)$$

donde a  $M$  se le conoce como la matriz de transferencia para ese sistema. Ahora consideremos dos sistemas con su matriz de transferencia respectiva  $M^{(1)}$  y  $M^{(2)}$

$$\begin{pmatrix} A_L^{(+)} \\ A_L^{(-)} \end{pmatrix} = M^{(1)} \begin{pmatrix} A_R^{(-)} \\ A_R^{(+)} \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad \begin{pmatrix} B_L^{(+)} \\ B_L^{(-)} \end{pmatrix} = M^{(2)} \begin{pmatrix} B_R^{(-)} \\ B_R^{(+)} \end{pmatrix}. \quad (2.36)$$

Supongamos que la onda transmitida del primer sistema es la onda entrante por la izquierda del segundo sistema y la onda reflejada del segundo sistema es la onda entrante por la derecha del primer sistema (i.e.  $A_R^{(-)} = B_L^{(+)}$  y  $A_R^{(+)} = B_L^{(-)}$ ), como se muestra esquemáticamente en la figura 2.3. Sustituyendo esta condición resulta en

$$\begin{pmatrix} A_L^{(+)} \\ A_L^{(-)} \end{pmatrix} = M^{(1)}M^{(2)} \begin{pmatrix} B_R^{(-)} \\ B_R^{(+)} \end{pmatrix} = M^{(T)} \begin{pmatrix} B_R^{(-)} \\ B_R^{(+)} \end{pmatrix}, \quad (2.37)$$

donde  $M^{(1)}M^{(2)} = M^{(T)}$  representa la matriz de transferencia total del sistema. Esto se puede generalizar para un sistema con  $N$  dispersores y la matriz de transferencia total estaría dada por el producto de las matrices de cada subsistema,

$$M^{(T)} = M^{(1)} \cdot M^{(2)} \dots M^{(N)}. \quad (2.38)$$

La matriz de transferencia total resulta ser producto de  $N - 1$  multiplicaciones de matrices, haciendo un cálculo simple para la computadora pero propagando error en cada multiplicación y alargando el tiempo de cómputo.

## 2.4. Matriz de dispersión

Si ahora se relacionan los coeficientes de las ondas entrantes,  $A_L^{(+)}$  y  $A_R^{(+)}$ , con las ondas salientes,  $A_L^{(-)}$  y  $A_R^{(-)}$ , de las condiciones de frontera, se tendrá una relación muy parecida a la de la matriz de transferencia

$$\begin{pmatrix} A_L^{(-)} \\ A_R^{(-)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_L^{(+)} \\ A_R^{(+)} \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} A_L^{(+)} \\ A_R^{(+)} \end{pmatrix}, \quad (2.39)$$

donde ahora los coeficientes de amplitud de las ondas entrantes, son las variables independientes. Si se quiere estudiar una onda que incide por la izquierda ( $A_R^{(+)} = 0$ ), entonces de la ecuación (2.39) se pueden obtener los coeficientes de reflexión y transmisión

$$R_l = \frac{|A_L^{(-)}|^2}{|A_L^{(+)}|^2} \Bigg|_{A_R^{(+)}=0} = |S_{11}|^2 \quad \text{y} \quad T_l = \frac{|A_R^{(-)}|^2}{|A_L^{(+)}|^2} \Bigg|_{A_R^{(+)}=0} = |S_{12}|^2. \quad (2.40)$$

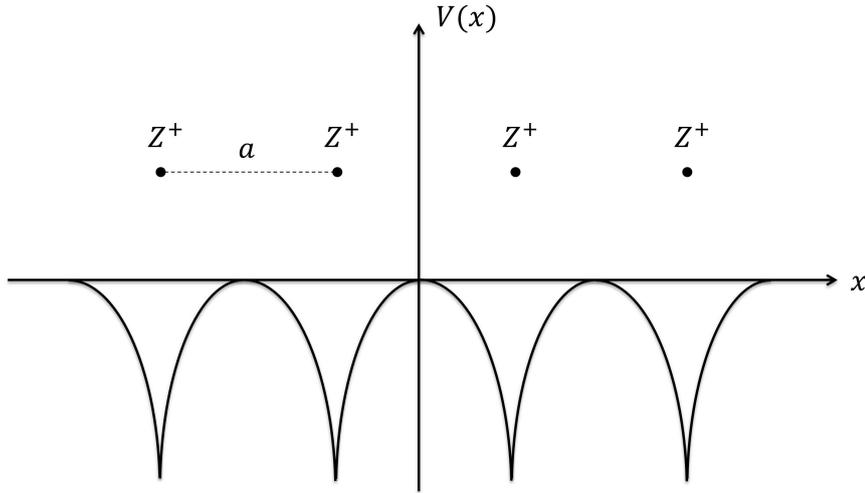
Mientras que si la onda incide por la derecha ( $A_L^{(-)} = 0$ ),

$$R_r = \frac{|A_R^{(-)}|^2}{|A_R^{(+)}|^2} \Bigg|_{A_L^{(-)}=0} = |S_{22}|^2 \quad \text{y} \quad T_r = \frac{|A_L^{(+)}|^2}{|A_R^{(+)}|^2} \Bigg|_{A_L^{(-)}=0} = |S_{21}|^2. \quad (2.41)$$

Se puede obtener la matriz de dispersión  $S$  a partir de la matriz de transferencia  $M$  mediante la siguiente relación [7]

$$S = \begin{pmatrix} \frac{M_{21}}{M_{11}} & \frac{\det(M)}{M_{11}} \\ 1 & -\frac{M_{12}}{M_{11}} \end{pmatrix} \quad (2.42)$$

Al igual que con la matriz de transferencia, se puede calcular la matriz  $S$  de un sistema conformado por  $N$  subsistemas con su respectiva matriz  $S$ . Sin embargo, en este caso, la matriz  $S$  no es el resultado de la multiplicación de las matrices de los subsistemas, en cambio, va a estar dado por el producto estrella de Redheffer, el cual se prueba en la sección 4.



**Figura 2.4:** Potencial de una red periódica de átomos, separados una distancia  $a$ , dentro de un cristal.

## 2.5. Teorema de Bloch

Dentro de un cristal, es bien conocido que los átomos forman redes periódicas. Si se considera un sistema conformado por iones separados por una distancia  $a$ , el potencial de la red se vería como se muestra en la figura 2.4. Este potencial, como es periódico, tiene la característica de que

$$V(x+a) = V(x). \quad (2.43)$$

Consideremos el operador de traslación  $\hat{D}$ , que al aplicarlo al potencial  $V(x)$ , lo mueve un periodo  $a$ , es decir,

$$\hat{D}V(x) = V(x+a). \quad (2.44)$$

Un potencial periódico tiene la característica que es invariante ante traslaciones, es decir,  $\hat{D}V(x) = V(x)$ . Lo anterior a su vez implica que el operador  $\hat{D}$  conmuta con el operador  $\hat{V}$ , *i.e.*  $[\hat{D}, \hat{V}] = 0$ . El operador de traslación, también puede ser expresado por el operador momento,  $\hat{p}$ , como

$$\hat{D} = e^{-i\frac{\hat{p}a}{\hbar}}. \quad (2.45)$$

De esta propiedad resulta que  $[\hat{D}, \hat{p}^2] = 0$  y si lo juntamos con que conmuta con el potencial, entonces el operador de traslación también conmuta con el Hamiltoniano

$$[\hat{D}, \hat{H}] = 0. \quad (2.46)$$

Sabemos de la mecánica cuántica que cuando dos operadores conmutan, existe una base de eigenfunciones en común, tanto de  $\hat{H}$  como de  $\hat{D}$ , es decir,

$$\hat{H}\psi_{E,\beta} = E\psi_{E,\beta} \quad \text{y} \quad \hat{D}\psi_{E,\beta} = \lambda\psi_{E,\beta}, \quad (2.47)$$

donde los subíndices  $E$  y  $\beta$  indican que dependen de los eigenvalores de los operadores. El eigenvalor  $\lambda$ , que resulta del operador  $\hat{D}$ , es un operador unitario, por lo que su eigenvalor es sólo una fase  $e^{i\beta}$  con  $\beta \in \mathbb{R}$ , entonces

$$\hat{D}\psi_{E,\beta} = e^{i\beta}\psi_{E,\beta}. \quad (2.48)$$

Ahora, definamos la función

$$u(x) = e^{-ikx}\varphi_{\beta}(x), \quad (2.49)$$

si se traslada la función  $u(x)$

$$\hat{D}u(x) = u(x+a) = e^{-ik(x+a)}\varphi_{\beta}(x+a), \quad (2.50)$$

y usando la propiedad (2.48) se tiene que

$$= e^{-ika}e^{-ikx}e^{i\beta}\varphi_{\beta}(x), \quad (2.51)$$

$$= e^{i(\beta-ka)}u(x). \quad (2.52)$$

Notamos que para el caso en el que  $k = \beta/a$  la fase se anula y se tiene que

$$\hat{D}u(x) = u(x), \quad (2.53)$$

indicando que la función es periódica con una fase  $\beta$ . Este resultado nos permite escribir a la eigenfunción de (2.49),  $\psi_{E,\beta}$ , como

$$\psi_{E,k}(x) = e^{ikx}u_k(x), \quad (2.54)$$

con  $u(x)$  una función periódica multiplicada por una fase  $e^{ikx}$ . A esta función de onda se le conoce como onda de Bloch, que satisface la ecuación de Schrödinger cuando se tiene un potencial periódico. Se puede ver de la ecuación (2.54) que la función de onda no es periódica, sin embargo, la amplitud de probabilidad si es periódica (ya que la norma cuadrada quita la fase), o visto como ecuación

$$|\psi(x+a)|^2 = |\psi(x)|^2. \quad (2.55)$$

Con esto, se puede obtener información importante sobre la función de onda en puntos periódicos. De la ecuación (2.54) tenemos además que

$$\psi_k(x+a) = e^{ik(x+a)}u_k(x+a) = e^{ik(x+a)}u_k(x), \quad (2.56)$$

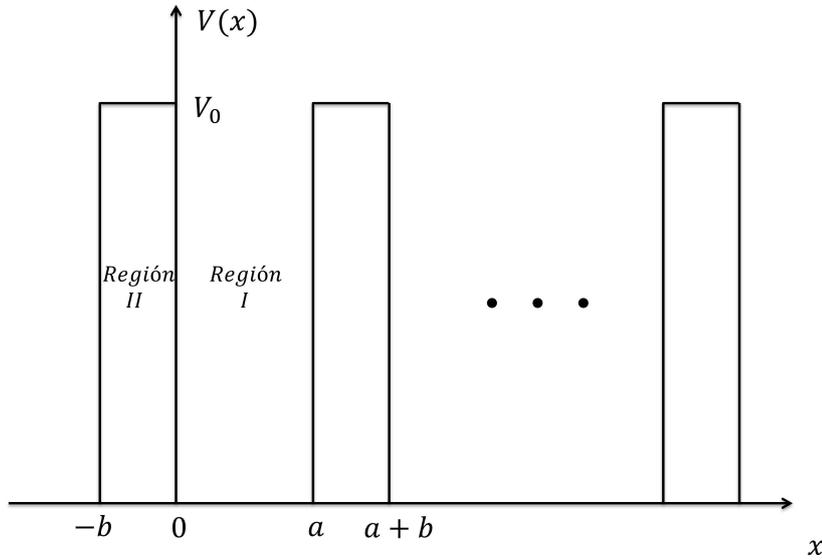
y si se substituye el valor de  $u(x)$  de (2.54), entonces

$$\psi_k(x+a) = e^{ik(x+a)}\frac{\psi_k(x)}{e^{ikx}}, \quad (2.57)$$

por lo que

$$\psi_k(x+a) = e^{ika}\psi_k(x). \quad (2.58)$$

Lo que nos muestra que la función de onda varía por una fase  $e^{ika}$  en cada periodo,  $a$ . A este se le conoce como el teorema de Bloch.



**Figura 2.5:** Modelo de Kronig-Penney que consiste en un arreglo periódico de barreras de potencial de ancho  $b$  separadas por una distancia  $a$ .

## 2.6. Modelo de Kronig-Penney

El modelo de Kronig-Penney se basa en un arreglo periódico de barreras de potencial que se extiende al infinito, como se muestra en la figura 2.5. Para resolver este potencial, hacemos uso del teorema de Bloch. Como se explicó en la sección anterior, podemos aprovechar la periodicidad del problema para poderlo estudiar. Fijémonos en la sección  $[-b, a]$ , esto nos conduce a soluciones de la forma

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_I(x) = Ae^{i\alpha x} + Be^{-i\alpha x} & \text{para } 0 < x < a, \\ \psi_{II}(x) = Ce^{\beta x} + De^{\beta x} & \text{para } -b < x < 0, \end{cases} \quad (2.59)$$

con

$$\alpha = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad \text{y} \quad \beta = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}. \quad (2.60)$$

Ahora, como el potencial es periódico, hacemos uso del teorema de Bloch, el cual nos dice que las funciones de onda en cada periodo se relacionan con una fase

$$\psi(x+c) = e^{ikc} \psi(x), \quad (2.61)$$

con  $c = a + b$ . La función de onda tiene que ser continua en  $x = 0$  y  $x = a$ , lo que da a lugar 4 condiciones de frontera. En  $x = 0$ , se tiene que

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0) \quad \text{y} \quad \psi'_I(0) = \psi'_{II}(0). \quad (2.62)$$

En  $x = a$ , usando el teorema de Bloch sabemos que

$$\psi_{II}(-b)e^{ik(a+b)} = \psi_I(a) \quad y \quad \psi'_{II}(-b)e^{ik(a+b)} = \psi'_I(a). \quad (2.63)$$

Estas 4 ecuaciones se ven de la siguiente forma

$$\begin{aligned} A + B &= C + D, \\ \beta C - \beta D &= i\alpha A - i\alpha B, \\ Ae^{i\alpha a} + Be^{-i\alpha a} &= (Ce^{-\beta b} + De^{\beta b})e^{ik(a+b)}, \\ i\alpha(Ae^{i\alpha a} - Be^{-i\alpha a}) &= \beta(Ce^{-\beta b} - De^{\beta b})e^{ik(a+b)} \end{aligned}$$

Para que haya una solución, aparte de la trivial, el determinante de los coeficientes que multiplican a  $A, B, C$  y  $D$  tiene que ser cero, es decir,

$$\begin{vmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 \\ i\alpha & -i\alpha & -\beta & \beta \\ e^{i\alpha a} & e^{-i\alpha a} & -e^{-\beta b}e^{ik(a+b)} & -e^{\beta b}e^{ik(a+b)} \\ i\alpha e^{i\alpha a} & -i\alpha e^{-i\alpha a} & -\beta e^{-\beta b}e^{ik(a+b)} & \beta e^{\beta b}e^{ik(a+b)} \end{vmatrix} = 0. \quad (2.64)$$

Desarrollando la igualdad y simplificándola, nos conduce a [8]

$$\frac{\beta^2 - \alpha^2}{2\alpha\beta} \sinh(\beta b) \sin(\alpha a) - \cosh(\beta b) \cos(\alpha a) = k \cos(a+b). \quad (2.65)$$

Pero de 2.60 sigue que

$$\alpha^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2} \frac{E}{V_0} = \frac{2mV_0}{\hbar^2} \varepsilon, \quad (2.66)$$

y

$$\beta^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} = \frac{2mV_0}{\hbar^2} (1 - \varepsilon), \quad (2.67)$$

con  $\varepsilon = \frac{E}{V_0}$ , por lo que

$$\frac{\beta^2 - \alpha^2}{2\alpha\beta} = \frac{1 - 2\varepsilon}{2(\varepsilon(1 - \varepsilon))^{\frac{1}{2}}}. \quad (2.68)$$

Además

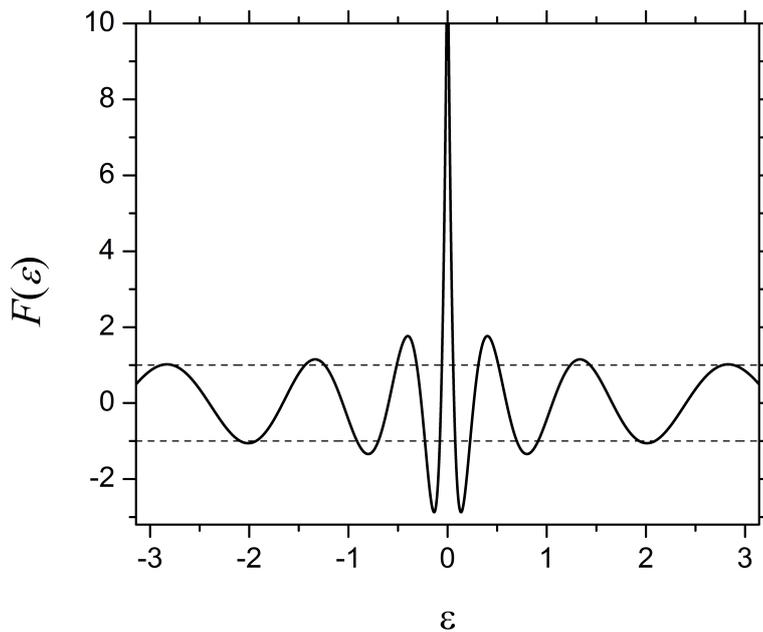
$$\beta b = \frac{b}{a} \left( \frac{2mV_0}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} a(1 - \varepsilon)^{\frac{1}{2}} = rA(1 - \varepsilon)^{\frac{1}{2}}, \quad (2.69)$$

y

$$\alpha a = \left( \frac{2mV_0}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} a\varepsilon^{\frac{1}{2}} = A\varepsilon^{\frac{1}{2}}, \quad (2.70)$$

definiendo a las constantes  $r = b/a$  y  $A = (2mV_0/\hbar^2)^{\frac{1}{2}}a$ . Si se substituyen en la ecuación (2.65) resulta que, para  $\varepsilon \leq 1$

$$\begin{aligned} \frac{(1 - 2\varepsilon)}{2(\varepsilon(1 - \varepsilon))^{\frac{1}{2}}} \sinh[rA(1 - \varepsilon)^{\frac{1}{2}}] \sin(A\varepsilon^{\frac{1}{2}}) + \cosh[rA(1 - \varepsilon)^{\frac{1}{2}}] \cos(A\varepsilon^{\frac{1}{2}}) \\ = \cos[ka(1 + r)]. \end{aligned} \quad (2.71)$$



**Figura 2.6:** Representación gráfica de la parte izquierda de la ecuación (2.73) con  $A = 10$  y  $r = 0.15$ . Las líneas punteadas en  $-1$  y  $1$  representan la cota de los valores permitidos de  $F(\epsilon)$ .

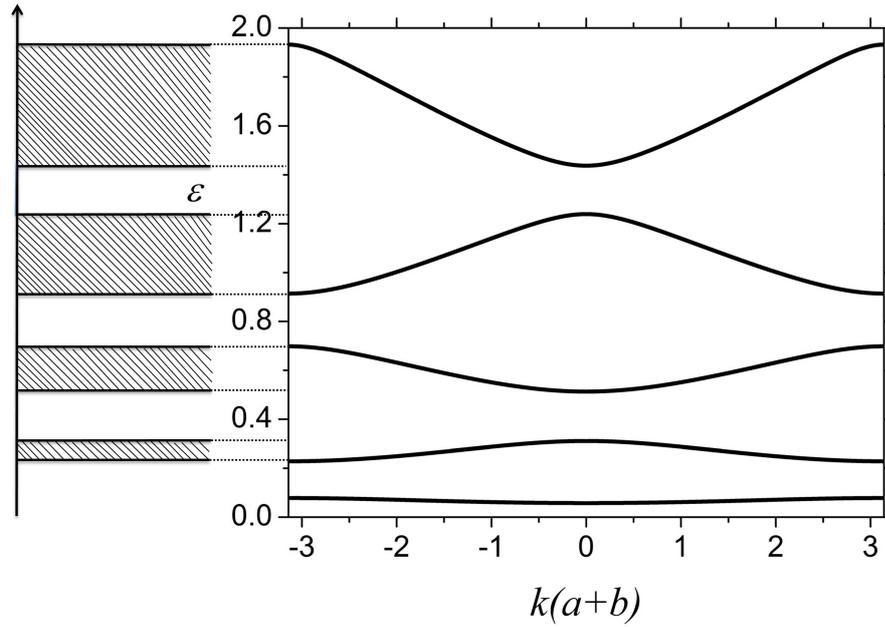
Para el caso de  $\epsilon > 1$  se cambia el factor  $(1 - \epsilon)^{\frac{1}{2}}$  por  $i(\epsilon - 1)^{\frac{1}{2}}$  y se hacen uso de las identidades  $\sinh iz = i \sin z$  y  $\cosh iz = \cos z$ , por lo que la ecuación (2.65) se convierte en

$$\frac{(1 - 2\epsilon)}{2(\epsilon(\epsilon - 1))^{\frac{1}{2}}} \sin[rA(\epsilon - 1)^{\frac{1}{2}}] \sin(A\epsilon^{\frac{1}{2}}) + \cos[rA(\epsilon - 1)^{\frac{1}{2}}] \cos(A\epsilon^{\frac{1}{2}}) = \cos[ka(1 + r)]. \quad (2.72)$$

Por conveniencia escribiremos las ecuaciones (2.71) a (2.72) en una sola ecuación como

$$F(\epsilon) = \cos[ka(1 + r)] = \cos[k(a + b)], \quad (2.73)$$

donde  $F(\epsilon)$  es la parte izquierda de las ecuaciones (2.71) y (2.72). Esta ecuación nos permite poner a la energía,  $\epsilon$  en términos de  $k$ . En esta ocasión, no se puede tener una relación tan simple entre la energía y  $k$  (como el caso de la partícula libre en el que se tiene una dependencia cuadrática), ya que la ecuación (2.73) no se puede resolver analíticamente. Para obtener dicha relación, primero hay que encontrar la dependencia de  $F(\epsilon)$  con  $\epsilon$ . Esto se puede calcular fácilmente en la computadora y se muestra en la figura 2.6 (línea sólida). Hay que notar que del lado derecho de la ecuación (2.73) se encuentra un coseno, por lo que los valores de  $F(\epsilon)$  tienen que estar acotados entre  $-1$  y  $1$ , representadas por líneas punteadas en la figura 2.6. Los valores de  $E$  que cumplan esta condición, van a representar a las energías permitidas y formarán bandas de energía. Por otro lado, las energías para las cuales  $|F(\epsilon)| > 1$ , no van a tener una solución física a la ecuación de Schrödinger, por lo que se pueden considerar como energías prohibidas



**Figura 2.7:** Del lado derecho se muestra la gráfica de  $\varepsilon$  contra el número de onda  $ka(1+r)$ . Del lado izquierdo se muestra el esquema de las bandas también mostrado en 2.6. La primera banda no se ilustra debido a que es demasiado pequeña para visualizar.

y formarán brechas de energía. Este se puede apreciar mejor si se gráfica los valores permitidos de  $E$  contra  $k$ , o,

$$ka(1+r) = \cos^{-1}[F(\varepsilon)], \quad (2.74)$$

En la figura 2.7 se muestran algunas bandas de energía (área rayada) al igual que las brechas que se dan para este potencial. Se puede apreciar que las bandas de energía se hacen más grandes a energías mayores. El comportamiento periódico que se presenta de  $-\pi$  a  $\pi$  se repite a lo largo del eje  $k$ , a esta zona se le conoce como la primera zona de Brillouin y equivale a un periodo de la onda. Para recuperar el caso de la partícula libre, hacemos  $V_0 = 0$  en la ecuación (2.65). Con esta suposición  $\beta = i\alpha$  y  $(\beta^2 - \alpha^2)/2\alpha\beta = i$ , con lo que la ecuación (2.65) se vuelve

$$-\sin(\alpha b)\sin(\alpha a) + \cos(\alpha b)\cos(\alpha a) = k\cos(a+b). \quad (2.75)$$

Usando la identidad del doble ángulo para el coseno

$$\cos[\alpha(a+b)] = \cos[k(a+b)], \quad (2.76)$$

o simplemente  $\alpha = k$ . Y de la ecuación (2.60) se obtiene que

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad (2.77)$$

la cual es consistente con la energía de la partícula libre (2.77) y es continua en todo el espectro de  $k$ .

## 3. Conductividad de Landauer

El transporte electrónico en escalas mesoscópicas es descrito por el formalismo de Landauer. En este, se relaciona la conductancia de un material con la probabilidad de transmisión a través de él. Este enfoque ha demostrado ser bastante efectivo en la práctica, prediciendo acertadamente los modelos de la conductancia en nanoestructuras. La expresión obtenida por Landauer es válida en ciertas condiciones: se tiene que tener bajas temperaturas ( $\approx 0K$ ) y el transporte a través del conductor tiene que ser coherente, es decir, que los electrones sólo sufren choques elásticos y mantienen la información de su fase al atravesar la nanounión. De esta manera, las energías a lo largo del conductor no cambiarán y se formarán *canales de transporte*, en donde la dispersión juega un gran papel. En este capítulo, primero se da una expresión para la corriente a través de una nanounión, para luego llegar a la expresión de la conductancia propuesta por R. Landauer [9].

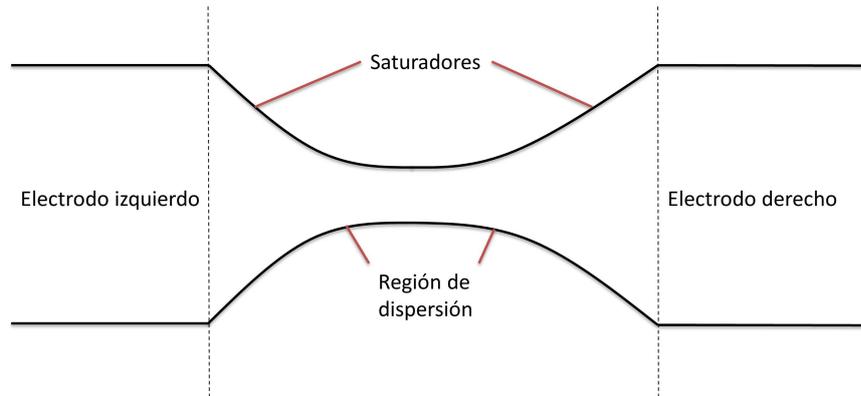
### 3.1. Nanouniones

Consideremos un sistema conformado por dos electrodos conectados por una región central, como se muestra en la figura 3.1. Ambos electrodos, en el caso más simple, están en equilibrio y no interactúan entre sí. El transporte que hay entre electrodos se asume que es coherente, es decir, que no se toman en cuenta los choques inelásticos, y así otras partículas de la región central no contribuyen a la energía del electrón. Otra característica, es que los electrones mantienen la información de su fase a lo largo de la región central. Esta región se puede dividir en dos partes: la región de dispersión y los saturadores. La primera usualmente está conformada por algún material el cual va a reflejar o transmitir a un electrón que incida en él. Los saturadores conectan a los electrodos con la región central y sirven como *guías de onda* (figura 3.3) para los electrones que viajan por la región de dispersión. Como el transporte en la región central es coherente y los electrones mantienen su fase, el transporte se describe mediante la función de onda  $\psi(\mathbf{r})$ . Cada saturador tendrá dos funciones de onda asociadas, la entrante  $\psi_{\sigma}^{(+)}(\mathbf{r})$ , donde  $\sigma = L, R$  representa al saturador izquierdo y derecho respectivamente; mientras que la otra es la función de onda saliente,  $\psi_{\sigma}^{(-)}(\mathbf{r})$ .

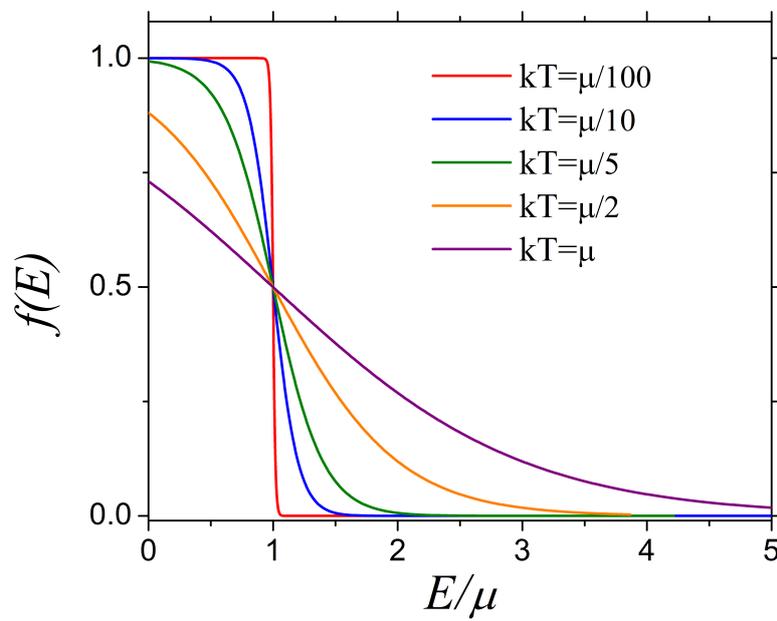
Los electrodos van a estar caracterizados por su función de distribución a una temperatura  $T$ . Los electrones siguen la distribución de Fermi-Dirac, la cual nos indica la probabilidad de ocupación del electrón, dada por la función de Fermi

$$f_{\sigma}(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu_{\sigma}}{k_B T}} + 1}, \quad (3.1)$$

donde  $\mu_{\sigma}$  representa al potencial químico izquierdo y derecho. En la figura 3.2 se muestra la función de Fermi para diferentes temperaturas. Se puede apreciar que cuando  $T \rightarrow 0K$  la función de distribución tiende a la función escalón y al valor  $\mu$  se le conoce como nivel de Fermi. Este representa a la energía debajo de la cual todos los estados están ocupados (probabilidad 1), mientras que por encima todos están desocupados (probabilidad 0).



**Figura 3.1:** Esquema de una nanounión conformada por dos reservorios en equilibrio y una región dispersora conectada por los saturadores.



**Figura 3.2:** Distribución de Fermi para diferentes temperaturas.

### 3.2. Guías de onda

Consideremos una guía de onda como la que se ilustra en la figura 3.3, que también puede ser descrita por el potencial

$$V(x,y,z) = \begin{cases} U(z) & \text{si } 0 < x < a/2 \text{ y } 0 < y < b/2 \\ \infty & \text{en otros casos.} \end{cases} \quad (3.2)$$

Hay que notar que este potencial está definido en 3 dimensiones, pero puesto que el potencial confina el movimiento en las direcciones  $x$  y  $y$ , el sistema sólo puede describir movimiento a lo largo de la coordenada  $z$ . Hay que notar que es un problema de una partícula en una caja de potencial infinita dentro de la sección transversal, por lo que las soluciones entonces van a estar dadas por [10]

$$\psi_n(x,y) = \frac{2}{\sqrt{ab}} \sin\left(k_{n_x}\left(x - \frac{a}{2}\right)\right) \sin\left(k_{n_y}\left(y - \frac{b}{2}\right)\right), \quad (3.3)$$

donde estaremos asumiendo que  $n = n_x, n_y$ . La continuidad en las paredes nos dan la condición que

$$\psi\left(\frac{a}{2}, y, z\right) = \psi\left(x, \frac{b}{2}, z\right) = 0, \quad (3.4)$$

lo que resulta en la condición  $k_{n_x} = \frac{\pi n_x}{a}$  y  $k_{n_y} = \frac{\pi n_y}{b}$ . Por otro lado, para la dirección  $z$ , se tiene la ecuación de Schrödinger para un potencial arbitrario  $U(z)$ , pero si hacemos que  $U(z) = 0$ , entonces

$$\phi_{k_n}(z) = e^{ik_n z}. \quad (3.5)$$

Por lo que la solución total es la suma del producto de la solución longitudinal (dirección  $x, y$ ) y transversal (dirección  $z$ ), es decir,

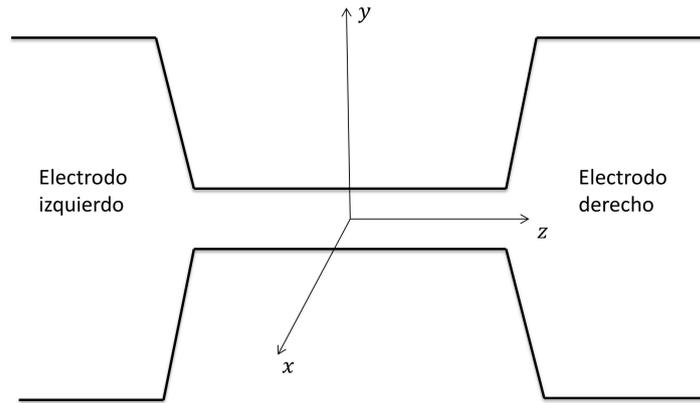
$$\Psi_n = \sum_n \psi_n(x,y) \phi_{k_n}(z), \quad (3.6)$$

o

$$\Psi_n = \sum_n \frac{2}{\sqrt{ab}} \sin\left(k_{n_x}\left(x - \frac{a}{2}\right)\right) \sin\left(k_{n_y}\left(y - \frac{b}{2}\right)\right) e^{ik_n z}. \quad (3.7)$$

Notamos que el movimiento en la parte transversal del electrón está cuantizada por  $k_n$ . Para una cierta  $n$  dada sólo tiene un grado de libertad (en la dirección del movimiento), por lo que un problema en 3 dimensiones se reduce a una dimensión. El espectro de energía  $E$ , entonces estará dado por las energías de la caja de potencial  $E_n$  mas la energía que resulte de resolver la ecuación de Schrödinger para el potencial  $U(z)$ , para este caso es simplemente la energía cinética de la partícula y la energía total resulta ser

$$E = \frac{(\hbar k_n)^2}{2m} + E_n, \quad (3.8)$$



**Figura 3.3:** Esquema de una guía de onda (en la dirección  $z$ ) que se forma al tener una sección transversal constante entre dos electrodos.

donde,  $E_n = \frac{(\pi\hbar)^2}{2m} \left( \frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} \right)$  son las energías de la caja de potencial infinita.

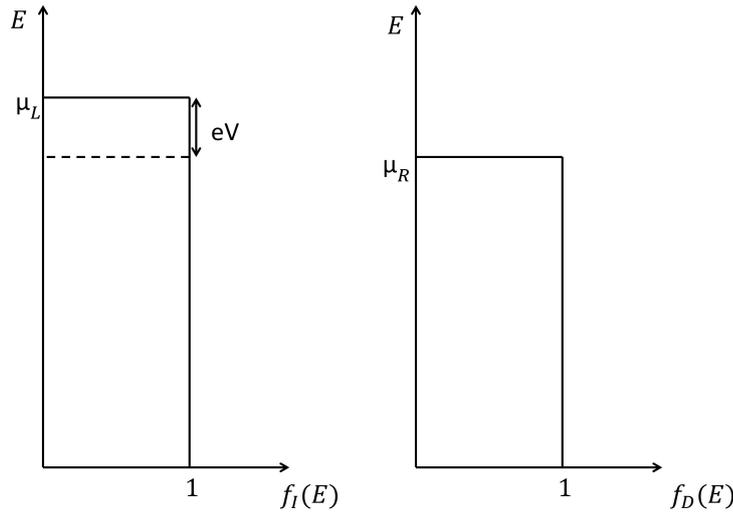
Ahora, de la ecuación (3.8), se puede despejar el vector de onda y resulta que

$$k_n = \pm \frac{\sqrt{2m(E - E_n)}}{\hbar}. \quad (3.9)$$

Una  $k_n$  positiva representa a una onda que viaja a la derecha, mientras que una  $k_n$  negativa representa a una onda que viaja a la izquierda, esto se puede ver también más adelante en la ecuación (3.14). También hay que notar que cuando  $E_n > E$  entonces se tiene una  $k$  imaginaria, que conduce a funciones evanescentes que divergen en  $x \rightarrow \pm\infty$  y por lo tanto no representa una solución física del sistema. A esto también se le conoce como un canal cerrado. Por otro lado, cuando se tienen energías que cumplan la condición  $E - E_n > 0$ , se va a tener un *canal abierto*. Se puede notar que el número de canales abiertos es un número discreto y va a ser igual a la cantidad de  $n$  que cumplan la última condición. En términos formales, el número de canales abiertos es

$$M(E) = \sum_n \theta(E - E_n), \quad (3.10)$$

donde  $\theta$  es la función escalón la cual depende de  $n$ .



**Figura 3.4:** Función de distribución a  $0K$  de ambos electrodos cuando se aplica una diferencia de potencial  $V$

### 3.3. Conductividad de Landauer

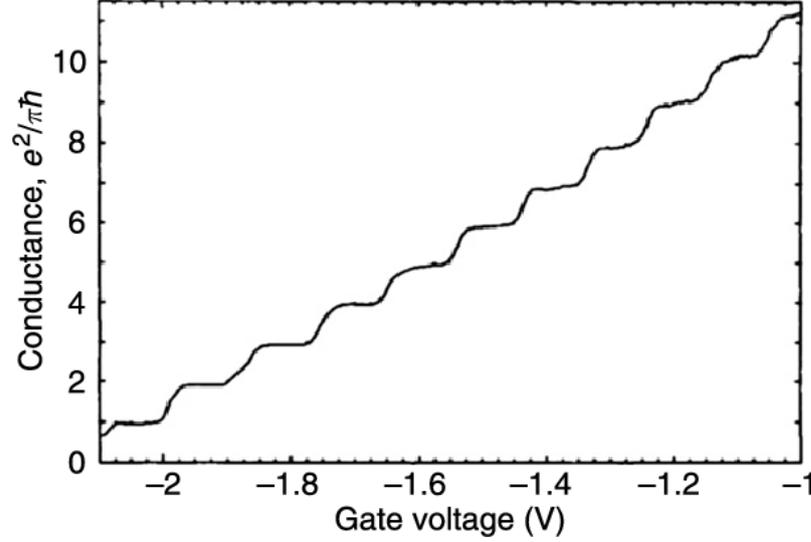
#### 3.3.1. Desequilibrio químico

Al aplicar una diferencia de potencial en los electrodos, se pueden sustituir los potenciales químicos en la expresión (3.1) por potenciales electroquímicos ( $\mu'$ ) que contienen los efectos causados por la diferencia de energía  $eV$ . De esta forma, la diferencia de potencial creará un desbalance en los potenciales electroquímicos, siguiendo la relación  $\mu'_L - \mu'_R = eV$ , como se ilustra en la figura 3.4. Hay que notar que en el intervalo  $eV$  para el lado izquierdo la función de distribución vale 1, pero del lado derecho vale 0. Esto va a causar un flujo neto de electrones, ya que los electrones que ingresen del lado izquierdo en el intervalo  $eV$  se dirigirán al electrodo derecho, sin haber un flujo en dirección opuesta que lo compense. En este modelo se asume que los electrones no sufren reflexiones al entrar de nuevo en los electrodos.

La densidad de corriente  $j$  a través de un material con una sección transversal constante y longitud  $L$ , se relaciona con la velocidad de deriva  $v_d$ , la densidad de electrones  $n$  y la carga del electrón  $e$  mediante la relación [11]

$$j = I/L = nv_d e. \quad (3.11)$$

En este caso, se tiene que tomar en cuenta la corriente que lleva cada canal abierto por cada estado  $k$ , con una probabilidad  $T$  de que se transmita a través de la región dispersora. Para el caso de una corriente que va hacia la derecha  $I^+$ , la probabilidad de tener un electrón desplazándose a la derecha desde el electrodo izquierdo, está representada por



**Figura 3.5:** Conductancia como función de la tensión de puerta para un punto cuántico. La temperatura es de 0.6K. Figura obtenida de [13]

$f_L(E)$ . Sumando todos los estados  $+k$  se puede obtener una relación para la corriente [12]

$$I^+ = \frac{e}{L} \sum_k v_d M(E) T(E) f_L(E), \quad (3.12)$$

donde  $T(E)$  representa a la función de transmisión y es la suma de la probabilidad de transmisión de cada canal abierto, asumiendo que hay  $n$  canales abiertos, la función de transmisión es

$$T(E) = \sum_n T(E - E_n), \quad (3.13)$$

Con  $T(E - E_n) = 0$ , si  $E - E_n < 0$ .

Por otro lado, también se sabe que la velocidad del electrón en un estado  $k$  es

$$v = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k}, \quad (3.14)$$

por lo que la expresión de la corriente se vuelve

$$I^+ = \frac{e}{L} \sum_k \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k} M(E) T(E) f_L(E). \quad (3.15)$$

Para pasarlo a su forma integral, hay que multiplicar por un factor  $\frac{L}{2\pi}$  y adicionalmente por 2 si se considera el espín y de esta forma la integral es sobre las energías

$$I^+ = \frac{2e}{h} \int_{-\infty}^{\infty} M(E) T(E) f_L(E) dE. \quad (3.16)$$

Análogamente, la corriente que va del electrodo izquierdo será

$$I^- = \frac{2e}{h} \int_{-\infty}^{\infty} M(E) T(E) f_R(E) dE. \quad (3.17)$$

Es importante notar que se tomó la misma función de transmisión para ambos casos ya que en equilibrio, no puede haber un flujo neto de electrones. La corriente total a través de la nanounión entonces es la diferencia de ambas corrientes

$$I = I^+ - I^- = \frac{2e}{h} \int_{-\infty}^{\infty} M(E)T(E)[f_L(E) - f_R(E)]dE. \quad (3.18)$$

### 3.3.2. Conductividad en guías de onda

Partamos de la ecuación (3.18), si asumimos que el número de canales y la probabilidad de transmisión son constantes en el intervalo  $\mu_L < E < \mu_R$ , se pueden extraer estas cantidades de la integral. Además, si se tiene una temperatura  $0K$  simplemente resulta la integral de una función escalón y la expresión (3.18) se convierte en

$$I = \frac{2e}{h}MT[\mu_L - \mu_R] = \frac{2e}{h}MTeV. \quad (3.19)$$

Despejando, se obtiene la relación para la conductancia obtenida por Landauer en sus estudios [9]

$$G = I/V = \frac{2e^2}{h}MT. \quad (3.20)$$

Nótese que la conductancia esta cuantizada por el número de canales abiertos  $M$ . Esta relación sólo es válida cuando se tiene transporte coherente y la sección transversal de la nanounión no depende de  $z$ , formando guías de onda. En el caso clásico,  $G = \sigma W/L$ , la conductancia crece linealmente con el ancho del conductor, sin embargo para dimensiones más pequeñas,  $G$  depende del número de canales abiertos del conductor y crece en pasos de  $\frac{2e^2}{h}$ . Esta relación se sigue manteniendo como una buena aproximación para una temperaturas cercanas a  $0K$ , lo cual se puede observar experimentalmente. La figura 3.5 muestra que al variar el ancho (o el *voltaje de puerta*) la conductancia crece en pasos de  $\frac{2e^2}{h}$ . Consideremos el caso de un *alambre perfecto*, en el que se tienen varios canales abiertos con probabilidad de transmisión  $T = 1$ . Al no tener resistencia, la conductancia debería tender a infinito, no obstante, de la expresión (3.20) se puede ver que se mantiene finita. La resistencia a lo largo del sistema equivale a

$$R = \frac{h}{2e^2M} = \frac{12.9k\Omega}{M}. \quad (3.21)$$

Para un sistema de un canal abierto, la resistencia toma su máximo valor  $R_c = 12.9k\Omega$  la cual proviene de la unión entre el electrodo y el saturador. El numero de canales abiertos es demasiado pequeño en comparación con el número de electrones en los electrodos. La expresión (3.20) se refiere a la conductancia entre dos electrodos, pero si se quiere obtener la conductancia entre los saturadores, hay que considerar los cambios en los valores de los potenciales electroquímicos. Ahora, los potenciales serán afectados por las reflexiones que sufren. Definamos a  $\mu_L^{\rightarrow}$  a los potenciales de los electrones que viajan a la derecha. Antes de reflejarse tenemos que  $\mu_L' = \mu_L^{\rightarrow}$ . Análogamente,  $\mu_R' = \mu_R^{\leftarrow}$ . Después de reflejarse ahora tomamos en cuenta el coeficiente de transmisión y de reflexión, de tal forma

que

$$\mu_R^{\rightarrow} = T\mu_L^{\rightarrow} + (1-T)\mu_R^{\rightarrow}, \quad (3.22)$$

$$\mu_L^{\leftarrow} = T\mu_R^{\leftarrow} + (1-T)\mu_L^{\leftarrow}. \quad (3.23)$$

La diferencia entre los potenciales que se mueven a la derecha y a la izquierda es igual en ambos sentidos, es decir,

$$\mu_L^{\rightarrow} - \mu_R^{\rightarrow} = \mu_L^{\leftarrow} - \mu_R^{\leftarrow} = (1-T)(\mu_L^{\rightarrow} - \mu_R^{\rightarrow}). \quad (3.24)$$

La diferencia de voltaje entre los saturadores se relaciona con la diferencia de potenciales electroquímicos de la siguiente manera

$$eV_S = (1-T)(\mu_L^{\rightarrow} - \mu_R^{\rightarrow}). \quad (3.25)$$

Por lo que la conductancia (con corriente (3.19)), será

$$G' = \frac{I}{V_S} = \frac{e^2}{h} \frac{T}{1-T} = \frac{e^2}{h} \frac{T}{R}. \quad (3.26)$$

Para este caso la conductancia sí tiende a infinito cuando se tiene una transmisión perfecta ya que no se considera el contacto entre saturadores y electrodos. A la expresión (3.26) se le conoce como la primera fórmula de Landauer. Hay que notar que ambas expresiones ((3.20) y (3.26)) son correctas, sin embargo resulta más útil usar la primera expresión. En resumen, el formalismo de Landauer nos permite expresar la conductancia en términos del coeficiente de transmisión que puede ser obtenido de la matriz S a partir de la relación (2.40).

## 4. Matriz S de un potencial arbitrario

Como se explicó en el capítulo pasado, el transporte en niveles cuánticos se puede describir mediante el formalismo de Landauer, el cual se basa en obtener el coeficiente de transmisión  $T$  para así poder calcular la conductancia. Para una barrera de potencial o un potencial delta,  $T$  tiene soluciones bien conocidas, [14], sin embargo, cuando se tiene un potencial arbitrario las soluciones se complican. Generalmente, en los casos reportados en la literatura, se calcula la matriz de transferencia [15, 16], o métodos de elemento finito [17] para luego obtener la transmitancia a través de un potencial arbitrario. En todas ellas, el potencial se divide y se aproxima cada sección por barreras de potencial, obteniendo una mayor precisión aumentando el número de divisiones pero a su vez conduce a una mucho menor eficiencia en el cálculo. Una forma de mejorar la precisión y la eficiencia es aproximando al potencial mediante una serie infinita. En el método descrito en este capítulo, se obtiene la matriz  $S$  para un potencial  $V(x)$  que se divide en varias regiones dispersoras pequeñas y que se expresa como una serie infinita. Las soluciones a la ecuación de Schrödinger para este potencial se van obteniendo iterativamente. Planteando las condiciones de frontera, se puede calcular computacionalmente la matriz  $S$  para un potencial expresado como una serie infinita. Posteriormente, la matriz  $S$  de la región dispersora completa se obtiene haciendo el producto estrella de las  $N$  divisiones. Este producto se prueba formalmente en la primera sección de este capítulo. Adicionalmente, se muestra que esta matriz  $S$  puede ser usada para encontrar el estructura de bandas de cualquier potencial periódico e infinito, usando el teorema de Bloch. La precisión de este método es probada en el siguiente capítulo.

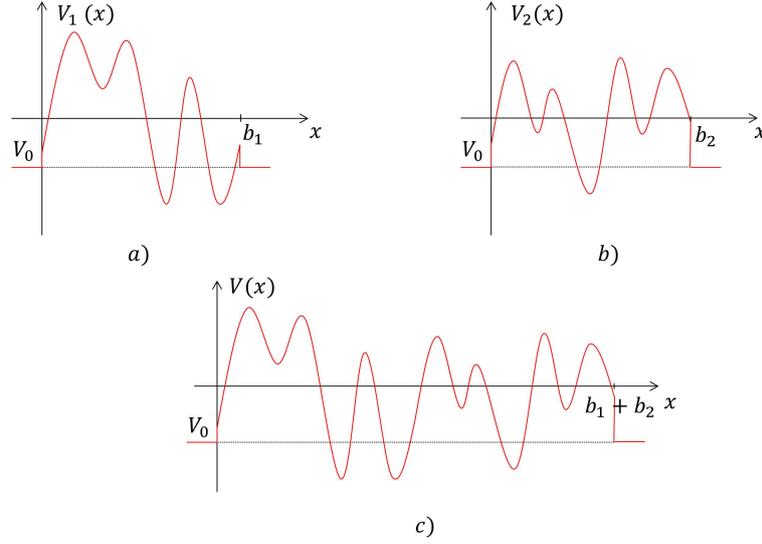
### 4.1. Producto estrella de Redheffer

Consideremos a dos potenciales arbitrarios  $V_1(x)$  y  $V_2(x)$  los cuales tienen una región dispersora para  $x$  entre 0 y  $b_j$ , donde  $j = 1, 2$  y representan al potencial 1 y 2 como se ilustra en la figura 4.1 a) y b). Como se vio en la sección 2.2, las soluciones generales a la ecuación de Schrödinger fuera de la región dispersora para el potencial  $V_j(x)$  pueden escribirse como

$$\Psi(x) = \begin{cases} A_{j,L}^{(+)} e^{ik(x-a_j)} + A_{j,L}^{(-)} e^{-ik(x-a_j)} & \text{para } x \leq a_j, \\ A_{j,R}^{(+)} e^{-ik(x-a_j-b_j)} + A_{j,R}^{(-)} e^{ik(x-a_j-b_j)} & \text{para } x \geq a_j + b_j. \end{cases} \quad (4.1)$$

Donde  $A_{j,\sigma}^{(\pm)}$  representan a los coeficientes de amplitud de las ondas entrantes (+) y salientes (-);  $\sigma = L, R$  indica el lado izquierdo o derecho del potencial respectivamente y  $k = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}$ . Hay que notar que  $k$  es la misma para ambos potenciales ya que tienen el mismo valor  $V_0$  en los extremos. De las condiciones de frontera se plantea la matriz  $S^{(j)}$  para cada potencial  $V_j(x)$  como

$$\begin{pmatrix} A_{j,L}^{(-)} \\ A_{j,R}^{(-)} \end{pmatrix} = S^{(j)} \begin{pmatrix} A_{j,L}^{(+)} \\ A_{j,R}^{(+)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11}^{(j)} & S_{12}^{(j)} \\ S_{21}^{(j)} & S_{22}^{(j)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{j,L}^{(+)} \\ A_{j,R}^{(+)} \end{pmatrix}. \quad (4.2)$$



**Figura 4.1:** La figura a) muestra una región dispersora de  $x = 0$  a  $x = b_1$ , mientras que en b) la región se da de  $x = 0$  a  $x = b_2$ . Ambos potenciales tienen un valor  $V_0$  en los saturadores. La figura c) muestra la unión de ambos potenciales.

Al juntar los dos potenciales, se tienen que hacer dos suposiciones; primero que existe una región entre los dos potenciales infinitesimalmente pequeña la cual tiene un potencial constante  $V_0$ , haciendo las condiciones de frontera iguales para ambos potenciales. De esta manera, las matriz S del segundo potencial es independiente de los valores de la matriz S del primer potencial. La segunda condición es que

$$A_{1,R}^{(\pm)} = A_{2,L}^{(\mp)}. \quad (4.3)$$

En el apéndice se demuestra que al aplicar la condición (4.3) en las ecuaciones (4.1) se obtiene que la función de onda es

$$\psi(x) = \begin{cases} A_{1,L}^{(+)} e^{ikx} + A_{1,L}^{(-)} e^{-ikx} & \text{para } x \leq 0, \\ A_{2,R}^{(+)} e^{-ik(x-b_1-b_2)} + A_{2,R}^{(-)} e^{ik(x-b_1-b_2)} & \text{para } x \geq b_1 + b_2. \end{cases}, \quad (4.4)$$

y resuelve la ecuación de Schrödinger para un potencial  $V(x)$  definido como

$$V(x) = \begin{cases} V_1(x) & \text{si } x < b_1 \\ V_1(b_1) + V_2(0) & \text{si } x = b_1 \\ V_2(x - b_1) & \text{si } x > b_1 \end{cases} \quad (4.5)$$

como se ilustra en la figura 4.1. También, las ecuaciones (4.4) y (4.3) nos permiten tener la expresión

$$\begin{pmatrix} A_{1,L}^{(-)} \\ A_{2,R}^{(-)} \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} A_{1,L}^{(+)} \\ A_{2,R}^{(+)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{1,L}^{(+)} \\ A_{2,R}^{(+)} \end{pmatrix}, \quad (4.6)$$

donde  $S$  es la matriz  $S$  de un sistema con potencial (4.5) y cuyos elementos están dados por el producto estrella de Redheffer [3] como

$$S^{(1)} \otimes S^{(2)} = S = \begin{cases} S_{11} = S_{11}^{(1)} + S_{12}^{(1)} \left( \mathbf{I} - S_{11}^{(2)} S_{22}^{(1)} \right)^{-1} S_{11}^{(2)} S_{21}^{(1)}, \\ S_{12} = S_{12}^{(1)} \left( \mathbf{I} - S_{11}^{(2)} S_{22}^{(1)} \right)^{-1} S_{12}^{(2)}, \\ S_{21} = S_{21}^{(2)} \left( \mathbf{I} - S_{22}^{(1)} S_{11}^{(2)} \right)^{-1} S_{21}^{(1)}, \\ S_{22} = S_{22}^{(2)} + S_{21}^{(2)} \left( \mathbf{I} - S_{22}^{(1)} S_{11}^{(2)} \right)^{-1} S_{22}^{(1)} S_{12}^{(2)}. \end{cases} \quad (4.7)$$

los cuales también se derivan en el apéndice B. Esta relación nos permite obtener la matriz de dispersión para dos regiones que estén unidas por el mismo potencial constante en los saturadores. Este producto se puede extender a  $N$  regiones dispersoras, con la condición de que todas tengan el mismo potencial constante en los extremos, y se puede obtener la matriz  $S$  total mediante la expresión

$$S^{(T)} = S^{(1)} \otimes S^{(2)} \otimes \dots \otimes S^{(N)}. \quad (4.8)$$

Como el cálculo de cada matriz  $S$  se hace independiente de la matriz de los vecinos, se puede obtener resultados muy precisos para cada rebanada y de la matriz  $S$  total, como se discute en la próxima sección.

De esta manera, si se hace el producto estrella para  $N$  regiones dispersoras de ancho  $\Delta x$ , entonces se puede obtener la matriz de dispersión total  $S^{(T)}$  para un potencial definido de  $0 < x < b_j$ .

## 4.2. Matriz $S$ para una pequeña región dispersora

Consideremos la ecuación de Schrödinger en una dimensión con potencial  $V(x)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x) \psi = E \psi. \quad (4.9)$$

la cual sería equivalente a

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(x)] \psi = 0. \quad (4.10)$$

Ahora tomemos un potencial analítico, con una región dispersora entre 0 y  $2\Delta$ , con  $\Delta \ll 1$  y que tome un valor constante en todo lo demás, lo definimos de la siguiente manera

$$\frac{2m[E - V(x)]}{\hbar^2} = \begin{cases} v(x) & \text{si } 0 \leq x \leq 2\Delta \\ V_0 & \text{en otros casos} \end{cases}, \quad (4.11)$$

Como  $\Delta \ll 1$  y  $v(x)$  una función analítica en el rango  $x \in [0, 2\Delta]$ , se puede escribir a  $v(x)$  como una serie convergente

$$v(x) = \sum_{\lambda=0}^{\infty} v_{\lambda} (x - \Delta)^{\lambda}. \quad (4.12)$$

Si analizamos el caso particular de un potencial constante, es decir, cuando sólo tenemos el término  $\lambda = 0$  en (4.12), las dos soluciones linealmente independientes son  $\exp[\pm i\sqrt{v_0}(x - \Delta)]$ . Por lo anterior, se propone como soluciones linealmente independientes en la ecuación de Schrödinger dentro de la región dispersora a

$$\psi_{\pm}(x) = e^{\pm i\sqrt{v_0}(x-\Delta)} \varphi_{\pm}(x), \quad (4.13)$$

y su segunda derivada entonces será

$$\psi_{\pm}''(x) = e^{\pm i\sqrt{v_0}(x-\Delta)} [-v_0 \varphi_{\pm}(x) \pm 2i\sqrt{v_0} \varphi_{\pm}'(x) + \varphi_{\pm}''(x)]. \quad (4.14)$$

Sustituyendo estos valores en la ecuación de Schrödinger nos deja con la expresión

$$e^{\pm i\sqrt{v_0}(x-\Delta)} [-v_0 \varphi_{\pm}(x) \pm 2i\sqrt{v_0} \varphi_{\pm}'(x) + \varphi_{\pm}''(x)] + \sum_{\lambda=0}^{\infty} v_{\lambda}(x-\Delta)^{\lambda} e^{\pm i\sqrt{v_0}(x-\Delta)} \varphi_{\pm}(x) = 0. \quad (4.15)$$

Si se separa el primer término de la sumatoria y eliminando la exponencial, se simplifica a la expresión

$$\varphi_{\pm}''(x) \pm \alpha \varphi_{\pm}'(x) + \sum_{\lambda=1}^{\infty} v_{\lambda}(x-\Delta)^{\lambda} \varphi_{\pm}(x) = 0, \quad (4.16)$$

con  $\alpha = 2i\sqrt{v_0}$ . Las soluciones de la ecuación (4.16), cuando tomamos a  $\varphi_0 = 1$  y  $\varphi_1 = 0$ , se pueden escribir como una serie infinita

$$\varphi_{\pm}(x) = 1 + \sum_{\lambda=3}^{\infty} \varphi_{\lambda}^{(\pm)}(x-\Delta)^{\lambda}. \quad (4.17)$$

Si se substituye la expresión anterior en la ecuación (4.16) nos conduce a

$$\begin{aligned} & \sum_{\lambda=1}^{\infty} \varphi_{\lambda+2}^{(\pm)}(\lambda+2)(\lambda+1)(x-\Delta)^{\lambda} \pm \sum_{\lambda=2}^{\infty} \alpha \varphi_{\lambda+1}^{(\pm)}(\lambda+1)(x-\Delta)^{\lambda} \\ & + \sum_{\lambda=3}^{\infty} \sum_{\lambda'=1}^{\infty} \varphi_{\lambda}^{(\pm)} v_{\lambda'}(x-\Delta)^{\lambda+\lambda'} + \sum_{\lambda=1}^{\infty} v_{\lambda}(x-\Delta)^{\lambda} = 0. \end{aligned} \quad (4.18)$$

Al ser soluciones linealmente independientes, los coeficientes de cada grado del polinomio tienen que ser igual a cero. Esta condición nos permite poner a las  $\varphi_{\lambda}$  en términos de  $v_{\lambda}$ , las expresiones para  $\lambda = [1, 3]$  son

$$\varphi_3^{(\pm)} = -\frac{v_1}{3!}, \quad (4.19)$$

$$\varphi_4^{(\pm)} = \frac{1}{4!}(\pm\alpha v_1 - 2v_2), \quad (4.20)$$

$$\varphi_5^{(\pm)} = \frac{1}{5!}(-\alpha^2 v_1 \pm 2\alpha v_2 - 6v_3), \quad (4.21)$$

Para  $\lambda > 3$  ya se tiene que considerar los términos con  $\lambda$  y  $\lambda'$  en la ecuación (4.18) y en general la relación de las  $\varphi$  en términos de las anteriores es

$$\varphi_{n+2}^{(\pm)} = \mp \frac{\alpha}{n+2} \varphi_{n+1}^{(\pm)} - \frac{1}{(n+1)(n+2)} \left[ v_n + \sum_{\lambda=3}^{n-1} \varphi_{\lambda}^{(\pm)} v_{n-\lambda} \right], \quad (4.22)$$

o bien

$$\varphi_n^{(\pm)} = \mp \frac{\alpha}{n} \varphi_{n-1}^{(\pm)} - \frac{1}{n(n-1)} \left[ v_{n-2} + \sum_{\lambda=3}^{n-3} \varphi_{\lambda}^{(\pm)} v_{n-\lambda-2} \right]. \quad (4.23)$$

Las  $\varphi_n^{(\pm)}$  dependen entonces de las  $v_{\lambda}$ , que son los coeficientes de los potenciales en la serie infinita (4.12).

Con estos resultados, ya se puede escribir la solución más general de la ecuación de Schrödinger en una dimensión, como

$$\psi(x) = \begin{cases} A_L^{(+)} e^{ikx} + A_L^{(-)} e^{-ikx} & \text{para } x \leq 0 \\ B_+ \psi_+(x) + B_- \psi_-(x) & \text{para } 0 \leq x \leq 2\Delta \\ A_R^{(+)} e^{-ik(x-2\Delta)} + A_R^{(-)} e^{ik(x-2\Delta)} & \text{para } x \geq 2\Delta \end{cases} \quad (4.24)$$

Con  $k = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}$ . Al igual que en los casos anteriores se tiene que tener continuidad de la función de onda  $\psi(x)$  y su derivada en los puntos  $x = 0$  y  $x = 2\Delta$ . Estas restricciones resultan en 4 ecuaciones con 6 incógnitas.

$$A_L^{(+)} + A_L^{(-)} = B_+ \psi_+(0) + B_- \psi_-(0), \quad (4.25)$$

$$ik(A_L^{(+)} - A_L^{(-)}) = B_+ \psi'_+(0) + B_- \psi'_-(0), \quad (4.26)$$

$$A_R^{(+)} + A_R^{(-)} = B_+ \psi_+(2\Delta) + B_- \psi_-(2\Delta), \quad (4.27)$$

$$ik(A_R^{(-)} - A_R^{(+)}) = B_+ \psi'_+(2\Delta) + B_- \psi'_-(2\Delta). \quad (4.28)$$

Como queremos tener a  $A_L^{(-)}$  y  $A_R^{(-)}$  en términos de  $A_L^{(+)}$  y  $A_R^{(+)}$  entonces si despejamos estos últimos dos de las ecuaciones anteriores tenemos que

$$-A_L^{(-)} + B_+ \psi_+(0) + B_- \psi_-(0) = A_L^{(+)}, \quad (4.29)$$

$$ikA_L^{(-)} + B_+ \psi'_+(0) + B_- \psi'_-(0) = ikA_L^{(+)}, \quad (4.30)$$

$$-A_R^{(-)} + B_+ \psi_+(2\Delta) + B_- \psi_-(2\Delta) = A_R^{(+)}, \quad (4.31)$$

$$-ikA_R^{(-)} + B_+ \psi'_+(2\Delta) + B_- \psi'_-(2\Delta) = -ikA_R^{(+)}, \quad (4.32)$$

o de forma matricial

$$\underbrace{\begin{pmatrix} -1 & 0 & \psi_+(0) & \psi_-(0) \\ ik & 0 & \psi'_+(0) & \psi'_-(0) \\ 0 & -1 & \psi_+(2\Delta) & \psi_-(2\Delta) \\ 0 & -ik & \psi'_+(2\Delta) & \psi'_-(2\Delta) \end{pmatrix}}_{\mathbf{Q}} \begin{pmatrix} A_L^{(-)} \\ A_R^{(-)} \\ B_+ \\ B_- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ ik \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} A_L^{(+)} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ -ik \end{pmatrix} A_R^{(+)}. \quad (4.33)$$

Si ahora multiplicamos por  $\mathbf{Q}^{-1}$ , del lado derecho de la ecuación también tendremos otro vector columna de puras constantes, por lo que,

$$\begin{pmatrix} A_L^{(-)} \\ A_R^{(-)} \\ B_+ \\ B_- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{Q}_{11}^{-1} + ik\mathbf{Q}_{12}^{-1} \\ \mathbf{Q}_{21}^{-1} + ik\mathbf{Q}_{22}^{-1} \\ \mathbf{Q}_{31}^{-1} + ik\mathbf{Q}_{32}^{-1} \\ \mathbf{Q}_{41}^{-1} + ik\mathbf{Q}_{42}^{-1} \end{pmatrix} A_L^{(+)} + \begin{pmatrix} \mathbf{Q}_{13}^{-1} - ik\mathbf{Q}_{14}^{-1} \\ \mathbf{Q}_{23}^{-1} - ik\mathbf{Q}_{24}^{-1} \\ \mathbf{Q}_{33}^{-1} - ik\mathbf{Q}_{34}^{-1} \\ \mathbf{Q}_{43}^{-1} - ik\mathbf{Q}_{44}^{-1} \end{pmatrix} A_R^{(+)}, \quad (4.34)$$

donde  $\mathbf{Q}_{ij}^{-1}$  es el elemento  $ij$  de la matriz inversa. Ahora, sólo nos interesan las dos primeras columnas de la ecuación (4.34), es decir,

$$\begin{pmatrix} A_L^{(-)} \\ A_R^{(-)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{Q}_{11}^{-1} + ik\mathbf{Q}_{12}^{-1} \\ \mathbf{Q}_{21}^{-1} + ik\mathbf{Q}_{22}^{-1} \end{pmatrix} A_L^{(+)} + \begin{pmatrix} \mathbf{Q}_{13}^{-1} - ik\mathbf{Q}_{14}^{-1} \\ \mathbf{Q}_{23}^{-1} - ik\mathbf{Q}_{24}^{-1} \end{pmatrix} A_R^{(+)}. \quad (4.35)$$

De esta manera, la matriz  $S$  de un sistema con un potencial arbitrario, aproximándolo por un polinomio de grado  $\lambda$ , va a estar dada por

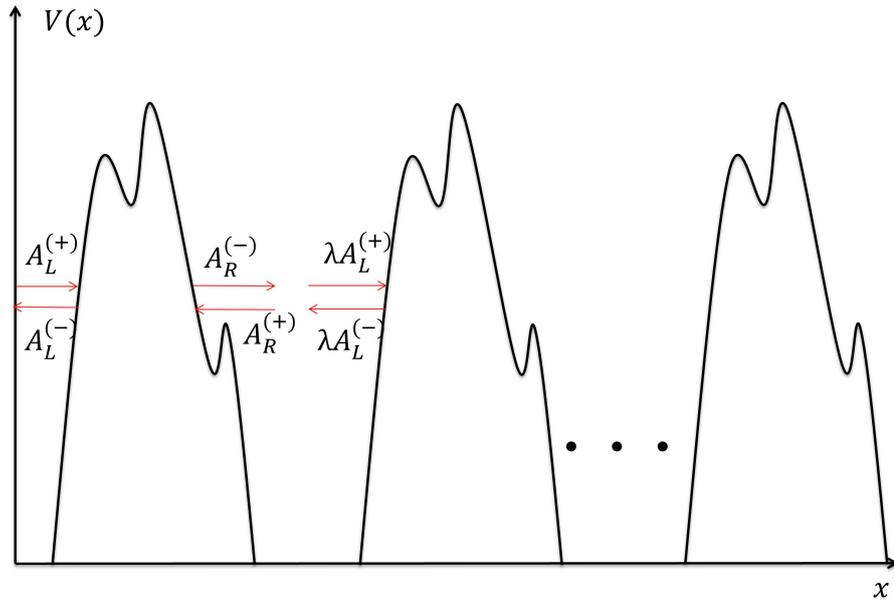
$$S = \begin{pmatrix} \mathbf{Q}_{11}^{-1} + ik\mathbf{Q}_{12}^{-1} & \mathbf{Q}_{13}^{-1} - ik\mathbf{Q}_{14}^{-1} \\ \mathbf{Q}_{21}^{-1} + ik\mathbf{Q}_{22}^{-1} & \mathbf{Q}_{23}^{-1} - ik\mathbf{Q}_{24}^{-1} \end{pmatrix}. \quad (4.36)$$

Donde los coeficientes de la matriz están principalmente relacionados con las  $\psi_{\pm}$  dadas en la expresión (4.13). Hay que notar que las soluciones en (4.17) están dadas por series infinitas, pero como  $\Delta \ll 1$ , se pueden tener series finitas y aún así tener resultados altamente precisos.

### 4.3. Estructura de bandas en potenciales periódicos generales

La matriz  $S$  también nos puede proporcionar información útil acerca de potenciales periódicos e infinitos. Aquí, se adapta el modelo del estudio del transporte en un sistema de varios electrodos con potenciales periódicos [18], a un sistema periódico con dos terminales. Primero consideremos a un potencial arbitrario, como se ha visto en secciones pasadas, afuera de la región dispersora, las soluciones se expresaran como combinación de ondas entrantes  $A_{\sigma}^{(+)}$  y salientes  $A_{\sigma}^{(-)}$ , donde  $\sigma = L, R$  denota a los coeficientes de las ondas del lado izquierdo y derecho, respectivamente. Ahora, si extendemos este potencial periódicamente, como se ilustra en la figura 4.2, se puede aplicar el teorema de Bloch. De la ecuación (2.58), lo que se sabe es que las funciones de onda van a estar relacionadas por una fase  $\lambda$  de forma

$$\psi(x+a) = \lambda \psi(x), \quad (4.37)$$



**Figura 4.2:** Modelo de un potencial arbitrario periódico e infinito. Se muestra esquemáticamente los coeficientes de amplitud de las ondas incidentes y reflejadas.

donde  $a$  es el periodo del sistema, y como las fases de los electrones son las mismas esta relación se traslada a los coeficientes de amplitud, es decir, dos subsistemas contiguos del potencial periódico, cumplirán que

$$B_L^{(\pm)} = \lambda A_L^{(\pm)} \quad (4.38)$$

Si ahora aplicamos el método descrito en la sección 4.1 para unir ambos subsistemas, tendremos que  $A_R^{(\pm)} = B_L^{(\mp)}$ . Sustituyendo esto en la ecuación (4.38) concluimos que en un sistema periódico se cumple que

$$A_R^{(\mp)} = \lambda A_L^{(\pm)}. \quad (4.39)$$

Por otro lado, también sabemos que se debe de cumplir la relación

$$\begin{pmatrix} A_L^{(-)} \\ A_R^{(-)} \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} A_L^{(+)} \\ A_R^{(+)} \end{pmatrix}, \quad (4.40)$$

y si se substituyen las relaciones (4.39) en esta ecuación entonces se tendrá que

$$\begin{pmatrix} A_L^{(-)} \\ \lambda A_L^{(+)} \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} A_L^{(+)} \\ \lambda A_L^{(-)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_L^{(+)} \\ \lambda A_L^{(-)} \end{pmatrix}. \quad (4.41)$$

Desarrollando la multiplicación de matrices resulta en dos ecuaciones

$$A_L^{(-)} = S_{11}A_L^{(+)} + \lambda S_{12}A_L^{(-)}, \quad (4.42)$$

$$\lambda A_L^{(+)} = S_{21}A_L^{(+)} + \lambda S_{22}A_L^{(-)}. \quad (4.43)$$

Si se ponen los términos con  $\lambda$  del lado derecho y los demás del lado izquierdo tenemos que

$$A_L^{(-)} - S_{11}A_L^{(+)} = \lambda S_{12}A_L^{(-)}, \quad (4.44)$$

$$-S_{21}A_L^{(+)} = -\lambda A_L^{(+)} + \lambda S_{22}A_L^{(-)}, \quad (4.45)$$

lo cual resulta en otra ecuación matricial

$$\begin{pmatrix} -S_{11} & \mathbf{I} \\ -S_{21} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{A}_L^{(+)} \\ \mathbf{A}_L^{(-)} \end{pmatrix} = \lambda \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & S_{12} \\ -\mathbf{I} & S_{22} \end{pmatrix}}_{\mathbf{U}} \begin{pmatrix} \mathbf{A}_L^{(+)} \\ \mathbf{A}_L^{(-)} \end{pmatrix}. \quad (4.46)$$

La inversa  $\mathbf{U}^{-1}$  está definida como

$$\mathbf{U}^{-1} = \frac{1}{S_{12}} \begin{pmatrix} S_{22} & -S_{12} \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.47)$$

Ahora, si se multiplica por  $\mathbf{U}^{-1}$  de ambos lados de la ecuación (4.46) entonces se tiene

$$\frac{1}{S_{12}} \begin{pmatrix} S_{22} & -S_{12} \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -S_{11} & 1 \\ -S_{21} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_L^{(+)} \\ A_L^{(-)} \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} A_L^{(+)} \\ A_L^{(-)} \end{pmatrix} \quad (4.48)$$

o

$$\frac{1}{S_{12}} \begin{pmatrix} -S_{22}S_{11} + S_{12}S_{21} & S_{22} \\ -S_{11} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_L^{(+)} \\ A_L^{(-)} \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} A_L^{(+)} \\ A_L^{(-)} \end{pmatrix} \quad (4.49)$$

la cual es una ecuación clásica de eigenvalores. Para encontrar los valores de  $\lambda$ , la despejamos del lado izquierdo y nos deja con la expresión

$$\begin{pmatrix} \frac{-S_{22}S_{11} + S_{12}S_{21}}{S_{12}} - \lambda & S_{22} \\ -S_{11} & \frac{1}{S_{12}} - \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_L^{(+)} \\ A_L^{(-)} \end{pmatrix} = 0. \quad (4.50)$$

La ecuación (4.50) se cumple cuando determinante de la matriz sea 0, es decir,

$$\left| \begin{pmatrix} \frac{S_{12}S_{21} - S_{11}S_{22}}{S_{12}} - \lambda & \frac{S_{22}}{S_{12}} \\ \frac{-S_{11}}{S_{12}} & \frac{1}{S_{12}} - \lambda \end{pmatrix} \right| = 0. \quad (4.51)$$

Desarrollando este determinante se tiene que

$$\left( \frac{S_{12}S_{21} - S_{11}S_{22}}{S_{12}} - \lambda \right) \left( \frac{1}{S_{12}} - \lambda \right) + \frac{S_{22}S_{11}}{S_{12}^2} = 0, \quad (4.52)$$

expandiendo,

$$\frac{S_{12}S_{21}}{S_{12}^2} - \frac{S_{22}S_{11}}{S_{12}^2} - \lambda \frac{1}{S_{12}} - \lambda \left[ \frac{S_{12}S_{21} - S_{11}S_{22}}{S_{12}} \right] + \lambda^2 + \frac{S_{22}S_{11}}{S_{12}^2} = 0, \quad (4.53)$$

y agrupando términos

$$\lambda^2 - \lambda \left[ \frac{S_{12}S_{21} - S_{22}S_{11} + 1}{S_{12}} \right] + \frac{S_{21}}{S_{12}} = 0. \quad (4.54)$$

Notamos que la ecuación (4.54) tiene la forma  $a\lambda^2 + b\lambda + c = 0$ , entonces las soluciones estarán dadas por

$$\lambda = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}, \quad (4.55a)$$

con los coeficientes siendo

$$a = 1, \quad b = \left[ \frac{S_{12}S_{21} - S_{22}S_{11} + 1}{S_{12}} \right], \quad c = \frac{S_{21}}{S_{12}}. \quad (4.55b)$$

De acuerdo con el teorema de Bloch, las soluciones físicas de este sistema ocurren cuando  $|\lambda| = 1$ , en los otros casos las soluciones no son físicas y representan funciones evanescentes. Podemos usar la expresión (4.55a) con los coeficientes (4.55b) para hallar la estructura de bandas del sistema periódico infinito. Para ello, debemos identificar las energías que conducen a  $|\lambda| = 1$ , las cuales representan a las energías permitidas. Por otro lado, las energías prohibidas son aquellas que cumplen  $|\lambda| \neq 1$ . En el caso de las energías permitidas, la fase se expresa como  $\lambda = e^{ika}$ , de donde se obtiene la dependencia de  $k$  como función de  $E$ . En la sección 5.2 se encuentran los estructuras de bandas para el modelo de Kronig-Penney al igual que para una sucesión de potenciales parabólicos.

# 5. Matriz S para barreras de potencias suavizadas

## 5.1. Barrera suavizada

Tomemos un potencial de la forma

$$V(x) = \begin{cases} -\gamma(x^P - 1) & \text{para } |x| \leq 1, \\ 0 & \text{para } |x| \geq 1. \end{cases} \quad (5.1)$$

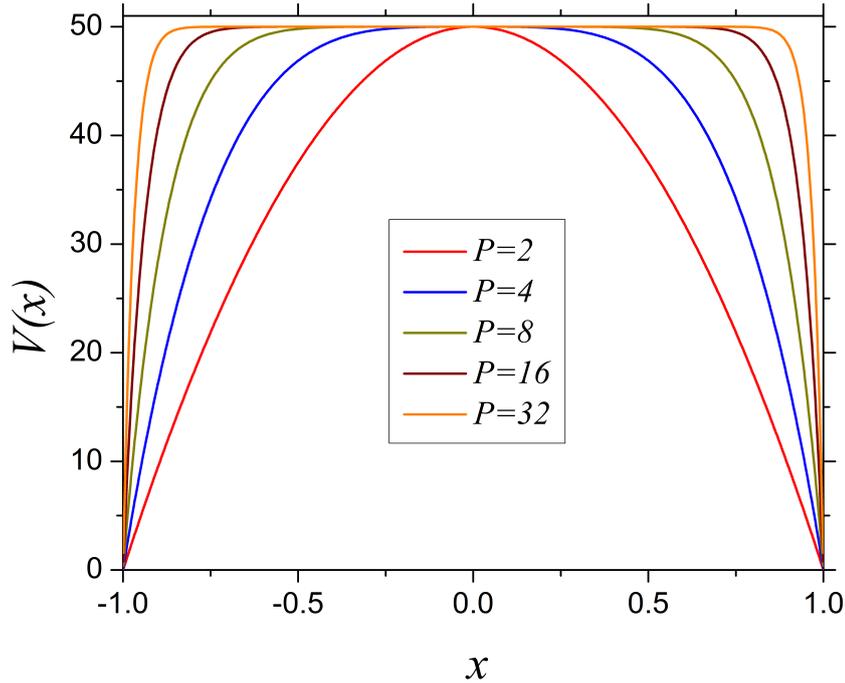
El potencial en (5.1) modela a una barrera de potencial con los bordes superiores suavizados. La figura 5.1 ilustra el caso con  $P = 2, 4, 8, 16$  y  $32$ , siendo  $\gamma = 50$ . Notemos que para casos en los que  $P \gg 1$  la función tiende a una barrera de potencial rectangular. Tener los bordes suavizados representa mucho más adecuadamente un modelo real como ocurre en semiconductores heteroestructurados [19, 20], ya que en la unión de cada semiconductor se crea una redistribución de cargas haciendo que el potencial cambie de manera suave, por lo que aproximar con potenciales constantes no sería una buena aproximación [21].

Para poder aplicar el método que se describió en el capítulo anterior, podemos primero dividir el potencial (5.1) en  $N$  partes iguales de forma que cada rebanada tenga un ancho de  $2/N = 2\Delta$  y para cada parte hacemos su desarrollo en serie de Taylor a orden  $n_{max}$  alrededor del centro  $\Delta$  de cada rebanada. El potencial (5.1) de la  $i$ -ésima rebanada entonces quedaría de la forma

$$V_i(x) = \sum_{n=0}^{n_{max}} \frac{V_i^{(n)}(\Delta)}{n!} (x - \Delta)^n, \quad (5.2)$$

donde  $V_i^{(n)}(\Delta)$  representa la  $n$ -ésima derivada del potencial  $V(x)$  evaluada en el centro de cada rebanada,  $x = -1 + \frac{2i-1}{N}$ . Así, se puede aproximar al potencial  $V(x)$  de grado  $P$ , con un polinomio de grado  $n_{max}$  para cada rebanada. Es intuitivo que entre más se acerque el grado del polinomio al grado del potencial, mejor será la aproximación. Ahora, la ecuación (4.36) nos permite calcular la matriz S para una área dispersora de ancho  $2\Delta$ . La matriz S para el sistema con potencial (5.1) es el producto estrella de Redheffer (4.7) de las  $N$  rebanadas.

La figura 5.2 muestra el coeficiente de transmisión para potenciales de grado  $P = 2$  (línea roja), 4 (línea azul), 8 (línea verde), 16 (línea vino), 32 (línea naranja). Todos los cálculos se hicieron con cuádruple precisión, tomando  $\gamma = 50$ . Las series en (4.23) se truncaron en  $\lambda_{max} = 40$  y se hicieron  $N = 10^6$  divisiones. Estas soluciones se consideran exactas, teniendo la precisión numérica que permite la máquina. Hay que notar que los picos de máxima transmitancia, cuando se tiene  $E > \gamma$ , se reducen ampliamente para una  $P$  pequeña. También es importante mencionar que cuando  $P$  aumenta, los picos de alta transmitancia se desplazan asintóticamente hacia los que hallamos en una barrera de potencial rectangular. Con el fin de probar la eficiencia y exactitud de este método, se obtuvieron resultados para los casos con  $P = 2, 4$  y  $8$ , donde el potencial en cada

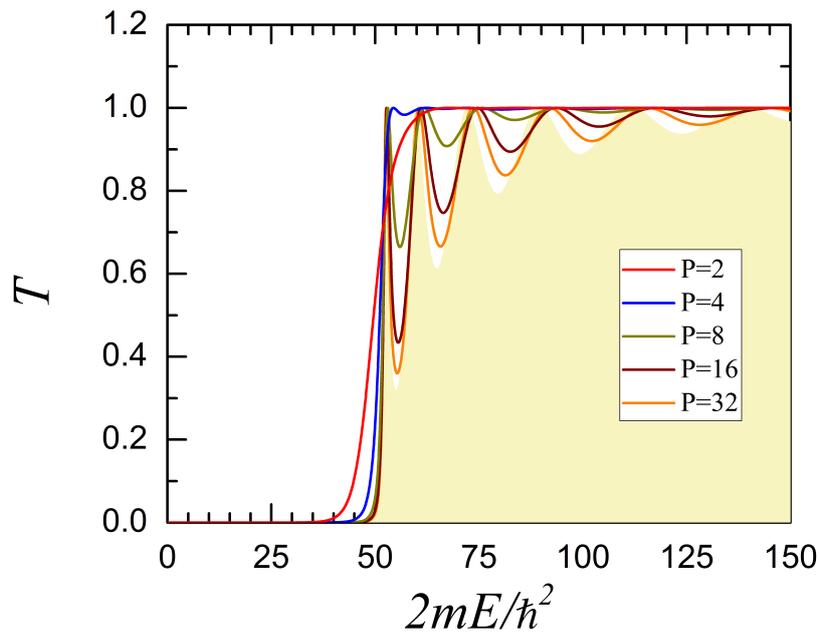


**Figura 5.1:** Potencial (5.1) como función de la posición. Se muestran los casos con  $P = 2$  (línea roja),  $P = 4$  (línea azul),  $P = 8$  (línea verde),  $P = 16$  (línea vino),  $P = 32$  (línea naranja) y  $\gamma = 50$ .

rebanada es aproximado por un polinomio de grado  $n_{max} = 0, 2, 4, 6$  y  $8$ , considerando  $N = 100, 1000$  y  $10000$  divisiones para la región dispersora del potencial. Para ello, se hizo un cálculo de el error relativo, dado por

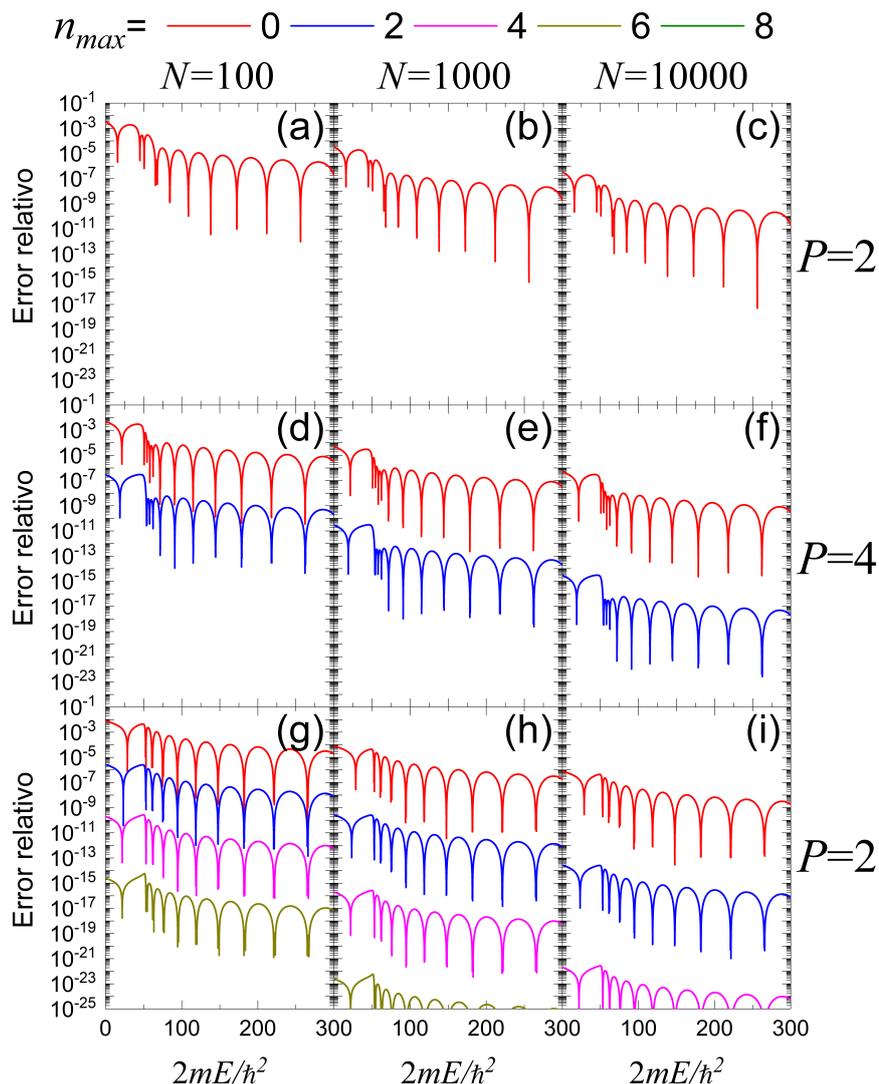
$$\text{Error relativo} = \frac{|T - T_{\text{exacta}}|}{T_{\text{exacta}}}, \quad (5.3)$$

Estos resultados se ilustran en la figura 5.3 para las distintas posibilidades de  $P$ ,  $N$  y  $n_{max}$ . Nótese que si se incrementa  $N$  o  $n_{max}$  se obtienen resultados más precisos. En contraste, aumentar  $P$  disminuye la precisión del resultado, sin embargo, su efecto es menos notorio. Por otro lado, observe que a mayor energía, la envolvente superior del error relativo decrece, demostrando la validez de este método incluso a energías altas. Asimismo, se puede observar que un aumento en el número de divisiones produce mejoras más importantes en la precisión si  $n_{max}$  es mayor. Como tendencia general, se observa que aumentar en un factor de 10 el valor de  $N$ , reduce el error relativo por  $n_{max} + 2$  órdenes de magnitud. También es importante mencionar que cuando  $n_{max} = P$ , se tiene un error relativo cercano al error de la máquina ( $\sim 10^{-30}$ ), para todos los valores de  $N$  considerados, *i.e.*, se encuentran más abajo de la escala mostrada en la figura 5.3. Aumentar el valor de  $n_{max}$  es computacionalmente menos caro que aumentar el valor de  $N$ . Esto puede apreciarse en la figura 5.4 donde se muestra el tiempo de cómputo requerido para obtener el coeficiente de transmisión para una energía dada para  $P = 8$  y distintos valores de  $N$  y  $n_{max}$ , los cuales se grafican como función del error relativo máximo. Nótese que incrementar  $n_{max}$  implica una importante mejora en la precisión, sin que esto requiera de un mayor tiempo de cómputo. Por ejemplo, para el caso con  $N = 25600$  divisiones, el tiempo de cómputo es similar, sin embargo el caso con  $n_{max} = 0$  produce errores relativos del orden de  $10^{-7}$

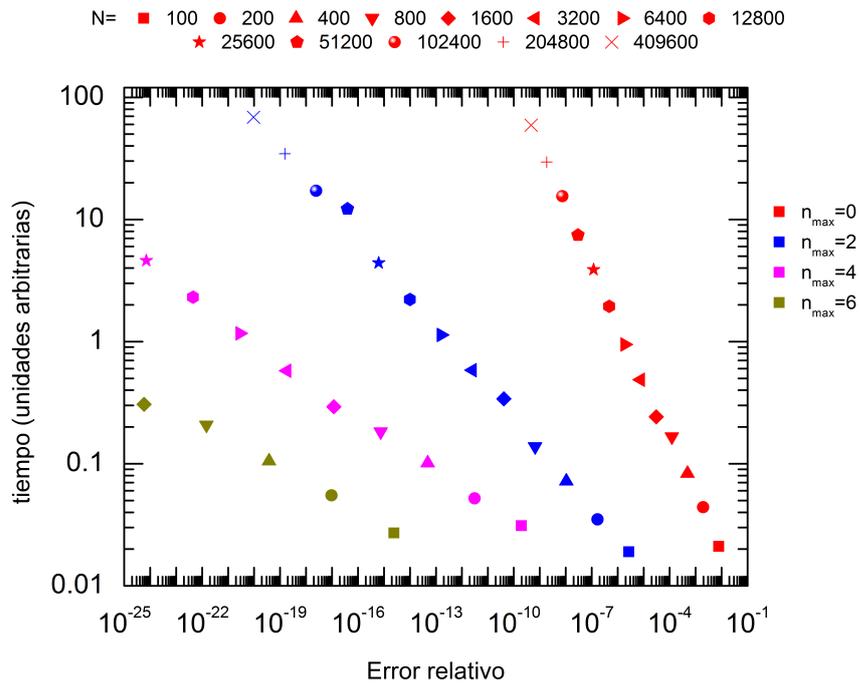


**Figura 5.2:** Función de transmisión contra la energía para potenciales de grado  $P = 2$  (línea roja),  $P = 4$  (línea azul),  $P = 8$  (línea verde),  $P = 16$  (línea vino),  $P = 32$  (línea naranja) mientras que la barrera de potencial es representada por el área amarilla.

mientras que con  $n_{max} = 4$  es menor a  $10^{-24}$ . Lo anterior brinda una importante ventaja del método descrito en la sección anterior cuando los potenciales de cada rebanada son aproximados por polinomios, en lugar de constantes, como comúnmente se hace en otros métodos [2, 17].



**Figura 5.3:** Error relativo en función de la energía para *a*)  $P = 2$ ,  $n_{max} = 0$  (línea roja),  $n_{max} = 2$  (línea azul) y  $N = 100$  divisiones. *b*)  $P = 2$ ,  $n_{max} = 0$  (línea roja),  $n_{max} = 2$  (línea azul) y  $N = 1000$ . *c*)  $P = 2$ ,  $n_{max} = 0$  (línea roja),  $n_{max} = 2$  (línea azul) y  $N = 10000$ . *d*)  $P = 4$ ,  $n_{max} = 0$  (línea roja),  $n_{max} = 2$  (línea azul),  $n_{max} = 4$  (línea magenta),  $n_{max} = 6$  (línea verde oliva) y  $N = 100$ . *e*)  $P = 4$ ,  $n_{max} = 0$  (línea roja),  $n_{max} = 2$  (línea azul),  $n_{max} = 4$  (línea magenta),  $n_{max} = 6$  (línea verde oliva) y  $N = 1000$ . *f*)  $P = 4$ ,  $n_{max} = 0$  (línea roja),  $n_{max} = 2$  (línea azul),  $n_{max} = 4$  (línea magenta),  $n_{max} = 6$  (línea verde oliva) y  $N = 10000$ . *g*)  $P = 8$ ,  $n_{max} = 0$  (línea roja),  $n_{max} = 2$  (línea azul),  $n_{max} = 4$  (línea magenta),  $n_{max} = 6$  (línea verde oliva),  $n_{max} = 8$  (línea verde) y  $N = 100$ . *h*)  $P = 8$ ,  $n_{max} = 0$  (línea roja),  $n_{max} = 2$  (línea azul),  $n_{max} = 4$  (línea magenta),  $n_{max} = 6$  (línea verde oliva),  $n_{max} = 8$  (línea verde) y  $N = 1000$ . *i*)  $P = 8$ ,  $n_{max} = 0$  (línea roja),  $n_{max} = 2$  (línea azul),  $n_{max} = 4$  (línea magenta),  $n_{max} = 6$  (línea verde oliva),  $n_{max} = 8$  (línea verde) y  $N = 10000$ .



**Figura 5.4:** Tiempo de cómputo como función del error relativo con escala logarítmica. Cada recta de color representa a una  $n_{max}$  fija, mientras que cada símbolo es una  $N$  diferente.

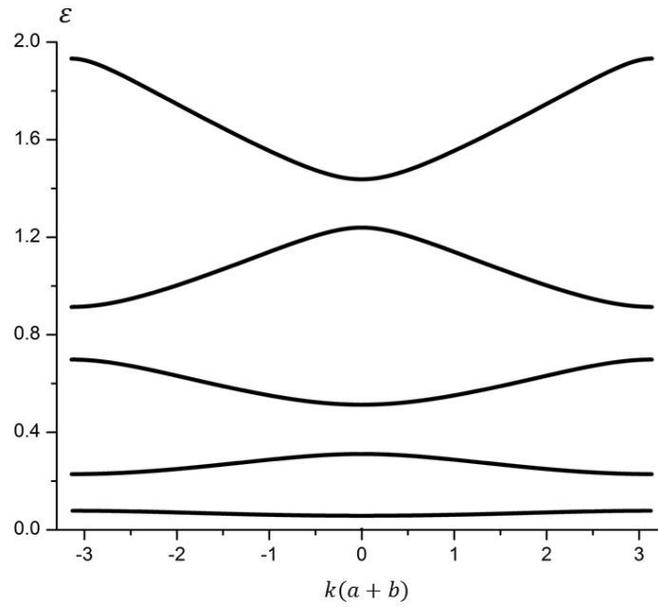
## 5.2. Estructura de bandas a partir de la matriz S

El método que se describió en la sección 4.3 nos sirve para obtener el estructura de bandas de un potencial periódico infinito. Empecemos con un caso simple: el potencial de Kronig-Penney que se estudió en la sección 2.6. En este, se obtuvo una estructura de bandas para un potencial con  $r = b/a = 0.15$  y  $A = 10$  (figura 2.6). Usando el método de la sección 4.3, hay que obtener la matriz S de una rebanada del potencial que contiene un periodo para después calcular  $\lambda$  mediante la ecuación (4.54) considerando diferentes energías. Para que los coeficientes coincidan con el ejemplo usado previamente, primero consideramos una barrera de potencial de altura  $V_0 = 25$  de  $x = 0$  a  $x = 0.3$ , luego tomamos a  $V_0 = 0$  de  $x = 0.3$  a  $x = 2.3$  y así las constantes  $r$  y  $A$  coinciden con las del ejemplo visto en la figura 2.6. La matriz S del periodo es el producto estrella entre las matrices S de estos dos segmentos (de  $x = 0$  a  $x = 0.3$  y de  $x = 0.3$  a  $x = 2.3$ ). Al resolver la ecuación (4.54), obtenemos valores de  $\lambda$  para las diferentes energías usadas. Aquellas donde  $|\lambda| = 1$ , corresponden a energías permitidas. En casos con energías permitidas, podemos escribir  $\lambda = e^{ik(a+b)}$  de donde se obtiene la estructura de bandas mostrada en la figura 5.5, la cual coincide con aquella mostrada en la figura 2.7.

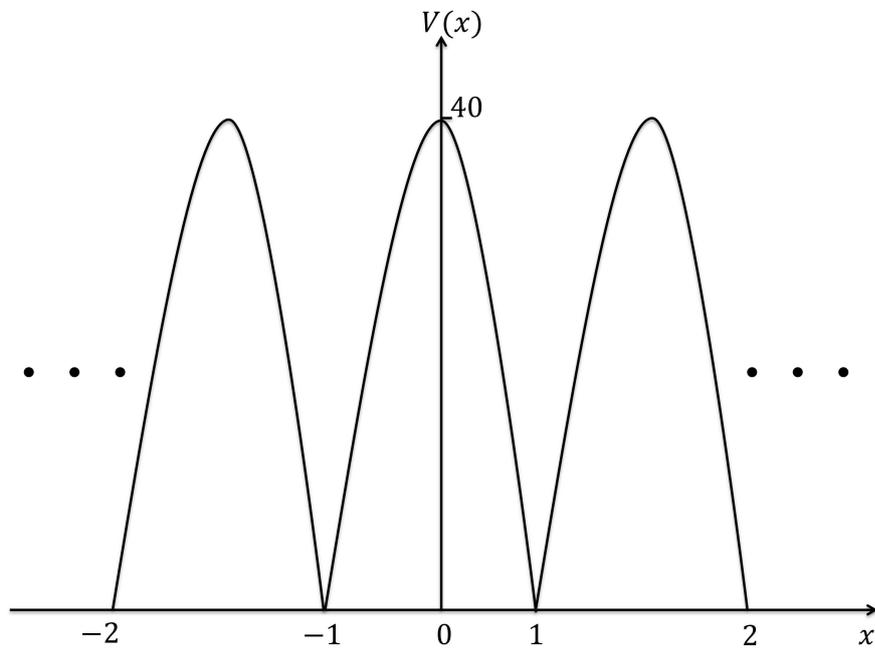
Puesto que tenemos la libertad de hallar a la matriz de dispersión para potenciales arbitrarios, podemos calcular fácilmente la estructura de bandas de potenciales periódicos infinitos más realistas. Por ejemplo, un potencial como el de la figura 2.4, puede ser modelado por una secuencia periódica de barreras parabólicas, como las mostradas en la figura 5.6. Este potencial cumple con la condición de que  $V(x) = V(x+a)$  con  $a = 2$  y

$$V(x) = -40(x^2 - 1) \text{ para } |x| \leq 1. \quad (5.4)$$

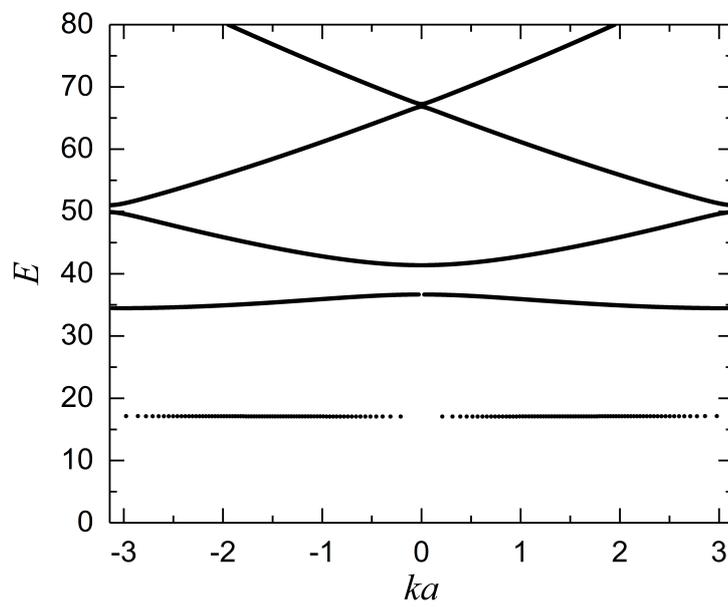
La estructura de bandas asociada a este potencial se muestra en la figura 5.7. Nótese que al igual que en el caso del potencial de Kronig-Penney, tenemos la formación de bandas de energías permitidas y prohibidas. Se puede observar que las bandas con energías menores a la altura de la barrera son más planas que aquellas por encima de esta, lo cual implica una velocidad de grupo menor producida por efectos de tunelaje. Por otro lado, podemos notar que el tamaño de las brechas energéticas disminuyen a medida que aumentamos la energía. Cabe mencionar que el tiempo de cómputo requerido para calcular la estructura de bandas es despreciable en comparación con el de obtener la matriz S de un periodo del potencial, debido a la expresión analítica que nos permite hallar  $\lambda$  usando los elementos de la matriz S.



**Figura 5.5:** Estructura de bandas calculado a partir de la ecuación (4.54) para un potencial de Kronig-Penney con  $a = 0.3$ ,  $b = 2$  y  $V_0 = 25$ .



**Figura 5.6:** Esquema de una sucesión infinita de parábolas.



**Figura 5.7:** Estructura de bandas para un potencial periódico infinito conformado por parábolas como se muestra en la figura 2.4.

## 6. Conclusiones

En esta tesis se presentó un método eficiente, preciso y novedoso en el que se obtiene la matriz  $S$  para la ecuación de Schrödinger unidimensional con una región dispersora arbitraria y con saturadores constantes. Esto nos sirvió para calcular la transmitancia ante barreras de potencial con bordes suavizados al igual que para obtener la estructura de bandas para diferentes potenciales periódicos e infinitos.

El método para hallar la matriz de dispersión consiste en dos etapas:

1. Se divide la región dispersora del potencial en pequeñas rebanadas y se determina la matriz  $S$  individual de cada una de ellas usando el método descrito en la sección 4.2. Para ello, se aproxima el potencial de cada rebanada por una expresión polinomial.
2. Se unen los efectos de las matrices  $S$  de cada rebanada, para obtener la matriz  $S$  del sistema completo aplicando iterativamente el método de la sección 4.1, basado en el producto estrella de Redheffer.

Entre las características que presenta este método, podemos mencionar:

- Permite abordar potenciales analíticos generales.
- Incrementar el número de rebanadas ( $N$ ), aumenta la precisión del resultado. Sin embargo, esto reduce la eficiencia del cálculo.
- Incrementar el grado del polinomio con el que se aproxima el potencial de cada rebanada, aumenta la precisión del resultado. Esto se logra sin afectar de manera significativa al tiempo de cómputo. Con esto se pueden alcanzar exactitudes más allá de la vigésima cifra significativa.
- La precisión del resultado aumenta conforme crece la energía, lo que demuestra la validez de este método incluso a altas energías.

Esta matriz de dispersión puede ser usada para hallar el coeficiente de transmisión de potenciales arbitrarios, el cual está dado como  $T = |S_{12}|^2$ . Asimismo, la ecuación analítica (4.55), permite hallar la estructura de bandas de un potencial periódico arbitrario usando los elementos de la matriz  $S$  de su celda unitaria, como se hizo al modelar un potencial de Kronig-Penney y otro formado por la repetición periódica de barreras parabólicas. En un futuro, el trabajo se puede extender a un estudio de más dimensiones para así abordar casos más reales.

# Apéndice A. Solución para la unión de dos potenciales

En este apéndice, se prueba formalmente la expresión de la función de onda (4.1) que proviene de aplicar la condición (4.3) en (4.2). Empezamos con la ecuación de Schrödinger en una dimensión para dos potenciales  $V_1(x)$  y  $V_2(x)$

$$\frac{d^2 \psi_j(x)}{dx^2} + \frac{2m[E - V_j(x)]}{\hbar^2} \psi_j(x). \quad (\text{A.1})$$

Para  $\varepsilon \ll 1$ , la segunda derivada se puede aproximar como

$$\frac{d^2 \psi_j(x)}{dx^2} \approx \frac{\psi_j(x + \varepsilon) + \psi_j(x - \varepsilon) - 2\psi_j(x)}{(\varepsilon)^2}. \quad (\text{A.2})$$

Sustituyéndola en la ecuación (A.1) resulta

$$\psi_j(x + \varepsilon) + \psi_j(x - \varepsilon) + \left( \frac{2m[E - V_j(x)]}{\hbar^2} - 2 \right) \psi_j(x) \approx 0. \quad (\text{A.3})$$

Ahora, definamos a la variable discreta  $x_n = n\varepsilon$ , con  $n \in \mathbb{Z}$ , el número de divisiones. De esta manera se puede obtener la función de onda  $\psi_j(x_{n+1})$  en términos de  $\psi_j(x_n)$  y  $\psi_j(x_{n-1})$ . Usando las soluciones en (A.3) con la ecuación (4.1) nos dan las ecuaciones

$$\psi_{j,n+1} + \psi_{j,n-1} + \left( \frac{2m[E - V_j(x_n)]}{\hbar^2} \varepsilon^2 - 2 \right) \psi_{j,n} \approx 0, \quad (\text{A.4})$$

$$\psi_{j,1} + (A_{j,L}^{(+)} e^{-ik\varepsilon} + A_{j,L}^{(-)} e^{ik\varepsilon}) + \left( \frac{2m[E - V_{j,0}]}{\hbar^2} \varepsilon^2 - 2 \right) (A_{j,L}^{(+)} + A_{j,L}^{(-)}) \approx 0, \quad (\text{A.5})$$

y

$$\psi_{j,N_j+1} + (A_{j,R}^{(+)} e^{-ik\varepsilon} + A_{j,R}^{(-)} e^{ik\varepsilon}) + \left( \frac{2m[E - V_{j,N_j}]}{\hbar^2} \varepsilon^2 - 2 \right) (A_{j,R}^{(+)} + A_{j,R}^{(-)}) \approx 0, \quad (\text{A.6})$$

para  $n = 1, \dots, N_j - 1$ , con  $N_j \equiv \lceil b_j/\varepsilon \rceil$ ,  $\psi_{j,n} = \psi_j(x_n)$  y  $V_{j,n} = V_j(x_n)$ . De la ecuación se obtiene que  $\psi_{1,N_1} \equiv \psi_{2,0} \equiv \psi_{N_1}$ . También definimos  $\psi_n \equiv \psi_{1,n}$  para  $n < N_1$  y  $\psi_n \equiv \psi_{2,n-N_1}$  para  $n > N_1$ . Así, sumando las ecuaciones (A.5) para  $j = 2$  y (A.6) para  $j = 1$  y aproximando la exponencial como  $e^{ikx} \approx 1 + ik\varepsilon - \frac{1}{2}k^2\varepsilon^2$  se obtiene que

$$\psi_{N_1-1} + \psi_{N_1+1} + \left( \frac{2m[E - V_{N_1}]}{\hbar^2} \varepsilon^2 - 2 \right) \psi_{N_1} \approx 0, \quad (\text{A.7})$$

con  $V_{N_1} \equiv V_{1,N_1} + V_{2,0}$ , por lo que las ecuaciones (A.4) a (A.7) se pueden reescribir como

$$\psi_{n+1} + \psi_{n-1} + \left( \frac{2m[E - V_n]}{\hbar^2} \varepsilon^2 - 2 \right) \psi_n \approx 0, \quad (\text{A.8})$$

---


$$\psi_1 + (A_{1,L}^{(+)} e^{-ik\varepsilon} + A_{1,L}^{(-)} e^{ik\varepsilon}) + \left( \frac{2m[E - V_0]}{\hbar^2} \varepsilon^2 - 2 \right) (A_{1,L}^{(+)} + A_{1,L}^{(-)}) \approx 0, \quad (\text{A.9})$$

$$\psi_{N_1+N_2-1} + (A_{2,R}^{(+)} e^{-ik\varepsilon} + A_{2,R}^{(-)} e^{ik\varepsilon}) + \left( \frac{2m[E - V_{N_1+N_2}]}{\hbar^2} \varepsilon^2 - 2 \right) (A_{2,R}^{(+)} + A_{2,R}^{(-)}) \approx 0, \quad (\text{A.10})$$

para  $n = 1, 2, \dots, N_1 + N_2 - 1$ , donde  $V_n \equiv V(x_n)$  se define en la ecuación (4.5). Finalmente, tomando  $\varepsilon \rightarrow 0$ , todas las aproximaciones se vuelven exactas, demostrando que (4.1) es solución de la ecuación de Schrödinger con potencial (4.5).

## Apéndice B. Producto estrella de Redheffer

Consideremos a dos sistemas con su matriz S correspondiente  $S^{(1)}$  y  $S^{(2)}$ , tal que

$$\begin{pmatrix} A_{1,L}^{(-)} \\ A_{1,R}^{(-)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11}^{(1)} & S_{12}^{(1)} \\ S_{21}^{(1)} & S_{22}^{(1)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{1,L}^{(+)} \\ A_{1,R}^{(+)} \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad \begin{pmatrix} A_{2,L}^{(-)} \\ A_{2,R}^{(-)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11}^{(2)} & S_{12}^{(2)} \\ S_{21}^{(2)} & S_{22}^{(2)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{2,L}^{(+)} \\ A_{2,R}^{(+)} \end{pmatrix}. \quad (\text{B.1})$$

Estas dos matrices dan lugar a 4 ecuaciones

$$A_{1,L}^{(-)} = S_{11}^{(1)} A_{1,L}^{(+)} + S_{12}^{(1)} A_{1,R}^{(+)}, \quad (\text{B.2})$$

$$A_{1,R}^{(-)} = S_{21}^{(1)} A_{1,L}^{(+)} + S_{22}^{(1)} A_{1,R}^{(+)}, \quad (\text{B.3})$$

$$A_{2,L}^{(-)} = S_{11}^{(2)} A_{2,L}^{(+)} + S_{12}^{(2)} A_{2,R}^{(+)}, \quad (\text{B.4})$$

$$A_{2,R}^{(-)} = S_{21}^{(2)} A_{2,L}^{(+)} + S_{22}^{(2)} A_{2,R}^{(+)}. \quad (\text{B.5})$$

Usando la condición

$$A_{1,R}^{(\pm)} = A_{2,L}^{(\mp)} \quad (\text{B.6})$$

en las ecuaciones (B.2)-(B.5) resulta en

$$A_{1,L}^{(-)} = S_{11}^{(1)} A_{1,L}^{(+)} + S_{12}^{(1)} A_{2,L}^{(-)}, \quad (\text{B.7})$$

$$A_{1,R}^{(-)} = S_{21}^{(1)} A_{1,L}^{(+)} + S_{22}^{(1)} A_{2,L}^{(-)}, \quad (\text{B.8})$$

$$A_{2,L}^{(-)} = S_{11}^{(2)} A_{1,R}^{(-)} + S_{12}^{(2)} A_{2,R}^{(+)}, \quad (\text{B.9})$$

$$A_{2,R}^{(-)} = S_{21}^{(2)} A_{1,R}^{(-)} + S_{22}^{(2)} A_{2,R}^{(+)}. \quad (\text{B.10})$$

Ahora, si se sustituye (B.3) en (B.9) tenemos que

$$A_{2,L}^{(-)} = S_{11}^{(2)} \left( S_{21}^{(1)} A_{1,L}^{(+)} + S_{22}^{(1)} A_{2,L}^{(-)} \right) + S_{12}^{(2)} A_{2,R}^{(+)}. \quad (\text{B.11})$$

y despejando

$$\left( 1 - S_{11}^{(2)} S_{22}^{(1)} \right)^{-1} A_{2,L}^{(-)} = S_{11}^{(2)} S_{21}^{(1)} A_{1,L}^{(+)} + S_{12}^{(2)} A_{2,R}^{(+)}. \quad (\text{B.12})$$

y poniéndolo en términos de  $A_{2,L}^{(-)}$

$$A_{2,L}^{(-)} = \left( 1 - S_{11}^{(2)} S_{22}^{(1)} \right)^{-1} S_{11}^{(2)} S_{21}^{(1)} A_{1,L}^{(+)} + \left( 1 - S_{11}^{(2)} S_{22}^{(1)} \right)^{-1} S_{12}^{(2)} A_{2,R}^{(+)}. \quad (\text{B.13})$$

Sustituyendo (B.13) en (B.7) se obtiene que

$$A_{1,L}^{(-)} = S_{11}^{(1)} A_{1,L}^{(+)} + S_{12}^{(1)} \left[ \left( 1 - S_{11}^{(2)} S_{22}^{(1)} \right)^{-1} S_{11}^{(2)} S_{21}^{(1)} A_{1,L}^{(+)} + \left( 1 - S_{11}^{(2)} S_{22}^{(1)} \right)^{-1} S_{12}^{(2)} A_{2,R}^{(+)} \right], \quad (\text{B.14})$$

o

$$A_{1,L}^{(-)} = \left[ S_{11}^{(1)} + S_{12}^{(1)} \left( 1 - S_{11}^{(2)} S_{22}^{(1)} \right)^{-1} S_{11}^{(2)} S_{21}^{(1)} \right] A_{1,L}^{(+)} + \left[ S_{12}^{(1)} \left( 1 - S_{11}^{(2)} S_{22}^{(1)} \right)^{-1} S_{12}^{(2)} \right] A_{2,R}^{(+)}. \quad (\text{B.15})$$

Ahora, la matriz  $S$  total del sistema es

$$\begin{pmatrix} A_{1,L}^{(-)} \\ A_{2,R}^{(-)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{1,L}^{(+)} \\ A_{2,R}^{(+)} \end{pmatrix}, \quad (\text{B.16})$$

la cual da lugar a las ecuaciones

$$A_{1,L}^{(-)} = S_{11}A_{1,L}^{(+)} + S_{12}A_{2,R}^{(+)} \quad (\text{B.17})$$

$$A_{2,R}^{(-)} = S_{21}A_{1,L}^{(+)} + S_{22}A_{2,R}^{(+)}. \quad (\text{B.18})$$

De la expresión (B.15) y (B.17) se sigue que

$$S_{11} = S_{11}^{(1)} + S_{12}^{(1)} \left(1 - S_{11}^{(2)} S_{22}^{(1)}\right)^{-1} S_{11}^{(2)} S_{21}^{(1)}, \quad (\text{B.19})$$

y

$$S_{12} = S_{12}^{(1)} \left(1 - S_{11}^{(2)} S_{22}^{(1)}\right)^{-1} S_{12}^{(2)}. \quad (\text{B.20})$$

Por otro lado, de sustituir (B.9) en (B.8) se tiene que

$$A_{1,R}^{(-)} = S_{21}^{(1)} A_{1,L}^{(+)} + S_{22}^{(1)} \left( S_{11}^{(2)} A_{1,R}^{(-)} + S_{12}^{(2)} A_{2,R}^{(+)} \right), \quad (\text{B.21})$$

o

$$\left(1 - S_{22}^{(1)} S_{11}^{(2)}\right) A_{1,R}^{(-)} = S_{21}^{(1)} A_{1,L}^{(+)} + S_{22}^{(1)} S_{12}^{(2)} A_{2,R}^{(+)}, \quad (\text{B.22})$$

por lo que

$$A_{1,R}^{(-)} = \left(1 - S_{22}^{(1)} S_{11}^{(2)}\right)^{-1} S_{21}^{(1)} A_{1,L}^{(+)} + \left(1 - S_{22}^{(1)} S_{11}^{(2)}\right)^{-1} S_{22}^{(1)} S_{12}^{(2)} A_{2,R}^{(+)}, \quad (\text{B.23})$$

También, si ponemos a (B.23) en (B.10) da como resultado

$$A_{2,R}^{(-)} = S_{21}^{(2)} \left[ \left(1 - S_{22}^{(1)} S_{11}^{(2)}\right)^{-1} S_{21}^{(1)} A_{1,L}^{(+)} + \left(1 - S_{22}^{(1)} S_{11}^{(2)}\right)^{-1} S_{22}^{(1)} S_{12}^{(2)} A_{2,R}^{(+)} \right] + S_{22}^{(2)} A_{2,R}^{(+)}, \quad (\text{B.24})$$

y agrupando términos

$$A_{2,R}^{(-)} = \left[ S_{21}^{(2)} \left(1 - S_{22}^{(1)} S_{11}^{(2)}\right)^{-1} S_{21}^{(1)} \right] A_{1,L}^{(+)} + \left[ S_{21}^{(2)} \left(1 - S_{22}^{(1)} S_{11}^{(2)}\right)^{-1} S_{22}^{(1)} S_{12}^{(2)} + S_{22}^{(2)} \right] A_{2,R}^{(+)}. \quad (\text{B.25})$$

De (B.25) y (B.18) ahora se tiene que

$$S_{12} = S_{21}^{(2)} \left(1 - S_{22}^{(1)} S_{11}^{(2)}\right)^{-1} S_{21}^{(1)} \quad (\text{B.26})$$

y

$$S_{22} = S_{21}^{(2)} \left(1 - S_{22}^{(1)} S_{11}^{(2)}\right)^{-1} S_{22}^{(1)} S_{12}^{(2)} + S_{22}^{(2)}. \quad (\text{B.27})$$

Las ecuaciones (B.19), (B.20), (B.26) y (B.27) conforman las ecuaciones del producto estrella de Redheffer.



## **Apéndice C. Artículo publicado**

A continuación se presenta el manuscrito del artículo titulado "Scattering Matrix of the One-Dimensional Schrödinger Equation with Arbitrary Potential", el cual se publicó en la revista *Journal of the Physical Society of Japan*, el 20 de octubre del 2017.



# Scattering Matrix of the One-Dimensional Schrödinger Equation with Arbitrary Potential

Carlos Ramírez\* and Rodrigo León

*Departamento de Física, Facultad de Ciencias, Universidad Nacional Autónoma de México, Apartado Postal 70-542, 04510 Ciudad de México, México*

(Received April 25, 2017; accepted September 25, 2017; published online October 20, 2017)

This article presents a new highly accurate and efficient method to determine the scattering matrix (SM) of one-dimensional Schrödinger equations with arbitrary potentials. The method allows iterative computation of one SM in terms of the SM of its subsystems, where the SM obtained at each iteration-step do not depend on the properties of their neighbors. This fact makes the SM unitary, avoiding computational instabilities during calculations, and allows high accuracy calculations of SM when potential is given as a series. Finally, the accuracy of the method is tested by using polynomial approximations in a sinusoidal potential and a potential barrier with smooth edges.

## 1. Introduction

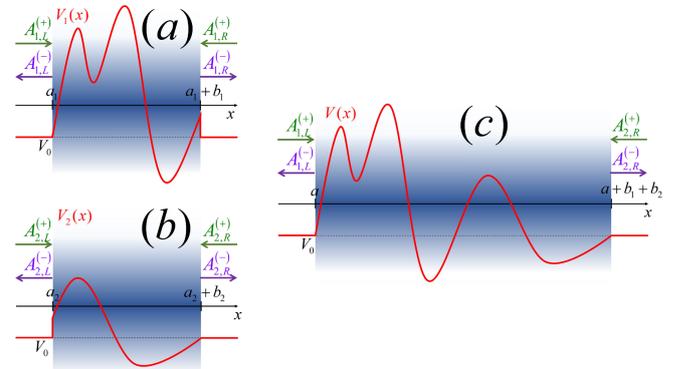
The problem of scattering in quantum mechanics is relevant to determine transport properties of different materials. Theoretically, it can be studied by means of the Landauer formula,<sup>1,2)</sup>

$$G = \frac{e^2}{\pi\hbar} T, \quad (1)$$

where  $G$  is the conductance at zero-temperature and  $T$  is the transmission coefficient in one-dimensional systems. For the one-dimensional Schrödinger equation (1D-SE), this problem can be modeled by two semi-infinite constant potential leads connected by a scattering region of potential  $V_1(x)$ , as schematically illustrated in Fig. 1(a) for a system with a scattering region that extends from  $x = a_1$  to  $x = a_1 + b_1$ . Unbound solutions of 1D-SE can be represented by ingoing and outgoing waves of the scattering region. The scattering matrix (SM) relates the amplitudes of the scattered waves in terms of those of the incoming ones, containing all information of effects caused by the scattering region.

There are well known analytical expressions of the SM for constant and delta-function potentials in the scattering regions.<sup>3)</sup> For arbitrary potentials, fast techniques based on transfer matrix calculations have been developed.<sup>4-8)</sup> They divide the scattering region in small potential-slices that are approximated by constant potentials, giving a better approximation when the number of divisions is large. Calculations are then reduced to matrix multiplications, which sometimes lead to numerical instabilities.<sup>9)</sup> To avoid instabilities, methods that calculate the SM have been proposed.<sup>9-11)</sup> Ordinarily, calculation of each SM of a potential-slice depends on the potential of neighbor slices, which could reduce computational efficiency.<sup>12)</sup> Actually, neighbor-independent scattering-matrix methods have been developed for electromagnetic waves<sup>12)</sup> and arbitrary tight-binding Hamiltonians.<sup>13)</sup>

In this article, we introduce a new method to calculate the SM in 1D-SE iteratively from the SM of its components, where each SM is calculated independently of neighbor slices, as described in Sect. 2. This fact allows highly accurate calculation of the SM for each slice, because their potential can be approximated by polynomials instead of constants, as done in Sect. 3. Finally, in Sect. 4 an accuracy



**Fig. 1.** (Color online) Schematic representation of (a) a potential  $V_1(x)$  with scattering region between  $x = a_1$  and  $x = a_1 + b_1$ ; (b) a potential  $V_2(x)$  with scattering region between  $x = a_2$  and  $x = a_2 + b_2$ ; (c) a potential  $V(x)$  with scattering region between  $x = a$  and  $x = a + b_1 + b_2$  obtained by using the method described in Sect. 2 with  $A_{1,R}^{(+)} = A_{2,L}^{(+)}$ . Notice that all cases have semi-infinite leads with constant potential  $V_0$ .

analysis is performed by using a sinusoidal potential and potential barriers with smooth edges.

## 2. The Method

Let us consider two arbitrary potentials,  $V_1(x)$  and  $V_2(x)$ , with scattering regions from  $x = a_j$  to  $x = a_j + b_j$  for  $V_j(x)$ , being  $j = 1, 2$ , as illustrated in Figs. 1(a) and 1(b), where both systems have leads with constant potential  $V_0 < E$ , being  $E$  the energy. General solutions in leads for the 1D-SE with potential  $V_j(x)$  can be written as

$$\psi_j(x) = \begin{cases} A_{j,L}^{(+)} e^{ik(x-a_j)} + A_{j,L}^{(-)} e^{-ik(x-a_j)} & \text{if } x \leq a_j \\ A_{j,R}^{(+)} e^{-ik(x-a_j-b_j)} + A_{j,R}^{(-)} e^{ik(x-a_j-b_j)} & \text{if } x \geq a_j + b_j \end{cases}, \quad (2)$$

where  $k^2 = 2m(E - V_0)/\hbar^2$ ,  $A_{j,\sigma}^{(+)}$  and  $A_{j,\sigma}^{(-)}$  are respectively the amplitude coefficients of the incoming and scattered waves, while  $\sigma = L, R$  stands for left and right. Such incoming and scattered coefficients are related by the SM as

$$\begin{pmatrix} A_{j,L}^{(-)} \\ A_{j,R}^{(-)} \end{pmatrix} = \mathbf{S}^{(j)} \begin{pmatrix} A_{j,L}^{(+)} \\ A_{j,R}^{(+)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11}^{(j)} & S_{12}^{(j)} \\ S_{21}^{(j)} & S_{22}^{(j)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{j,L}^{(+)} \\ A_{j,R}^{(+)} \end{pmatrix}, \quad (3)$$

where  $\mathbf{S}^{(j)}$  is the SM of a system with potential  $V_j(x)$ . Notice that Eq. (2) indicates that determination of  $\mathbf{S}^{(j)}$  does not depend on  $a_j$ . Hence, without loss of generality, we will take  $a_1 = a_2 = 0$  in following calculations.

We can join both potentials by inserting a zero-length free space gap (with potential  $V_0$ ) separating the scattering regions of both potentials, which is achieved by setting,<sup>12</sup>

$$A_{1,R}^{(\pm)} = A_{2,L}^{(\mp)}. \quad (4)$$

As shown in the Appendix, Eqs. (2) and (4) imply that

$$\psi(x) = \begin{cases} A_{1,L}^{(+)} e^{ikx} + A_{1,L}^{(-)} e^{-ikx} & \text{if } x \leq 0 \\ A_{2,R}^{(+)} e^{-ik(x-b_1-b_2)} + A_{2,R}^{(-)} e^{ik(x-b_1-b_2)} & \text{if } x \geq b_1 + b_2 \end{cases}, \quad (5)$$

solve the 1D-SE for a potential  $V(x)$  defined as

$$V(x) \equiv \begin{cases} V_1(x) & \text{if } x < b_1 \\ V_1(b_1) + V_2(0) & \text{if } x = b_1, \\ V_2(x - b_1) & \text{if } x > b_1 \end{cases} \quad (6)$$

as illustrated in Fig. 1(c). On the other hand, Eqs. (3) and (4) allow us to write

$$\begin{pmatrix} A_{1,L}^{(-)} \\ A_{2,R}^{(-)} \end{pmatrix} = \mathbf{S} \begin{pmatrix} A_{1,L}^{(+)} \\ A_{2,R}^{(+)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{1,L}^{(+)} \\ A_{2,R}^{(+)} \end{pmatrix}, \quad (7)$$

where  $\mathbf{S}$  is the SM for the system with potential (6), and whose elements are given by means of the Redheffer star product as<sup>12,14</sup>

$$\begin{cases} S_{11} = S_{11}^{(1)} + S_{12}^{(1)}(1 - S_{11}^{(2)}S_{22}^{(1)})^{-1}S_{11}^{(2)}S_{21}^{(1)} \\ S_{12} = S_{12}^{(1)}(1 - S_{11}^{(2)}S_{22}^{(1)})^{-1}S_{12}^{(2)} \\ S_{21} = S_{21}^{(2)}(1 - S_{22}^{(1)}S_{11}^{(2)})^{-1}S_{21}^{(1)} \\ S_{22} = S_{22}^{(2)} + S_{21}^{(2)}(1 - S_{22}^{(1)}S_{11}^{(2)})^{-1}S_{22}^{(1)}S_{12}^{(2)} \end{cases}. \quad (8)$$

This method allows us to calculate iteratively the SM of a general potential by using the SM of subsystems with smaller scattering regions. Since leads in each subsystem are given by the constant potential  $V_0$ , SM calculation of subsystems does not depend on the behavior of other subsystems. This permits a highly accurate determination of the scattering matrix of each subsystem as discussed in the next section.

### 3. Scattering Matrix of Systems with Small Scattering Regions

Let us consider the 1D-SE with potential  $V(x)$  given as

$$\frac{2m[E - V(x)]}{\hbar^2} = \begin{cases} v(x) & \text{if } 0 \leq x \leq 2\Delta \\ V_0 & \text{other cases} \end{cases}, \quad (9)$$

being  $\Delta \ll 1$ , and  $v(x)$  an analytical function in the range  $x \in [0, 2\Delta]$ , so we can express  $v(x)$  as the convergent series

$$v(x) = \sum_{\lambda=0}^{\infty} v_{\lambda}(x - \Delta)^{\lambda}. \quad (10)$$

In the case of  $v_{\lambda} = 0$  for all  $\lambda \geq 1$ , we have a rectangular potential barrier (or well), and its two linear independent solutions in the range  $x \in [0, 2\Delta]$  become  $\exp[\pm i\sqrt{v_0}(x - \Delta)]$ . These solutions are also expected in the limit case  $E \gg V$ , where  $v_{\lambda} \ll v_0$ . Hence, we propose the two linear solutions of the 1D-SE within the scattering region as

$$\psi_+(x) = e^{+i\sqrt{v_0}(x-\Delta)}\varphi_+(x), \quad (11)$$

and

$$\psi_-(x) = e^{-i\sqrt{v_0}(x-\Delta)}\varphi_-(x), \quad (12)$$

which lead us to

$$\varphi_{\pm}''(x) \pm \alpha\varphi_{\pm}'(x) + \sum_{\lambda=1}^{\infty} v_{\lambda}(x - \Delta)^{\lambda}\varphi_{\pm}(x) = 0, \quad (13)$$

being  $\alpha \equiv 2i\sqrt{v_0}$ . Solutions of Eq. (13) with unit  $\varphi_{\pm}(x)$  when  $v_{\lambda} = 0$  for all  $\lambda \geq 1$  can be written as

$$\varphi_{\pm}(x) = 1 + \sum_{\lambda=3}^{\infty} \varphi_{\lambda}^{(\pm)}(x - \Delta)^{\lambda}, \quad (14)$$

where

$$\varphi_3^{(\pm)} = -\frac{v_1}{3!}, \quad (15)$$

$$\varphi_4^{(\pm)} = \frac{1}{4!}(\pm\alpha v_1 - 2v_2), \quad (16)$$

$$\varphi_5^{(\pm)} = \frac{1}{5!}(-\alpha^2 v_1 \pm 2\alpha v_2 - 6v_3), \quad (17)$$

while  $\varphi_6^{(\pm)}, \varphi_7^{(\pm)}, \varphi_8^{(\pm)} \dots$  can be recursively obtained from

$$\varphi_n^{(\pm)} = \mp \frac{\alpha}{n} \varphi_{n-1}^{(\pm)} - \frac{1}{n(n-1)} \left[ v_{n-2} + \sum_{\lambda=3}^{n-3} \varphi_{\lambda}^{(\pm)} v_{n-\lambda-2} \right], \quad (18)$$

with  $n = 6, 7, 8, \dots$ . Hence the most general solution of the SE for  $E > V_0$  becomes

$$\psi(x) = \begin{cases} A_L^{(+)} e^{ikx} + A_L^{(-)} e^{-ikx} & \text{if } x \leq 0 \\ B_+ \psi_+(x) + B_- \psi_-(x) & \text{if } 0 \leq x \leq 2\Delta. \\ A_R^{(+)} e^{-ik(x-2\Delta)} + A_R^{(-)} e^{ik(x-2\Delta)} & \text{if } x \geq 2\Delta \end{cases} \quad (19)$$

In consequence, by demanding continuity of  $\psi(x)$  and its derivative at  $x = 0$  and  $x = 2\Delta$ , we can obtain the SM of this system. Finally, since  $\Delta \ll 1$ , we can use truncated series in Eqs. (10) and (14), and still obtain highly accurate solutions.

Note that this solution is exact for cases with constant potentials. On the other hand, SM of a delta-function potential should instead be obtained from its well-known exact expression.<sup>3)</sup> Moreover, exponential factors in Eqs. (11) and (12) ensures good approximations even for  $E \gg V$ , where high-frequency oscillations of the wavefunction are expected. It is worth to mention that results of this section only require that  $E > V_0$ , and are valid independently of the sign of  $E - V(x)$ .

### 4. Accuracy Analysis

To evaluate accuracy of this method, let us first consider a potential

$$V(x) = \begin{cases} \gamma \sin(2\pi x) & \text{if } 0 \leq x \leq 1 \\ 0 & \text{if other cases} \end{cases}, \quad (20)$$

whose scattering region extends from  $x = 0$  to  $x = 1$ . Let us divide such scattering region in  $N$  slices of equal width. We calculate the scattering matrix of each slice by approximating their potential by polynomials of degree  $M$  obtained from the Taylor series around the middle of each slice, as schematically shown in Fig. 2 for  $N = 10$  and  $M = 0$  (blue solid line),  $M = 1$  (red dashed line), or  $M = 2$  (green dotted line). All calculations are performed using quadruple precision, which sets 31 significant figures as machine precision.

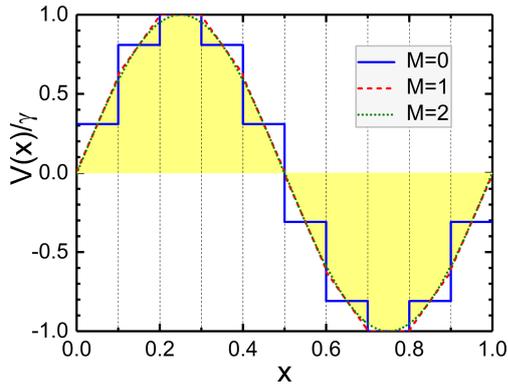


Fig. 2. (Color online) Schematic representation of the scattering region of potential (20) (yellow area) divided in  $N = 10$  potential-slices, where each potential-slice is approximated by polynomials of degree  $M = 0$  (blue solid line),  $M = 1$  (red dashed line), and  $M = 2$  (green dotted line).

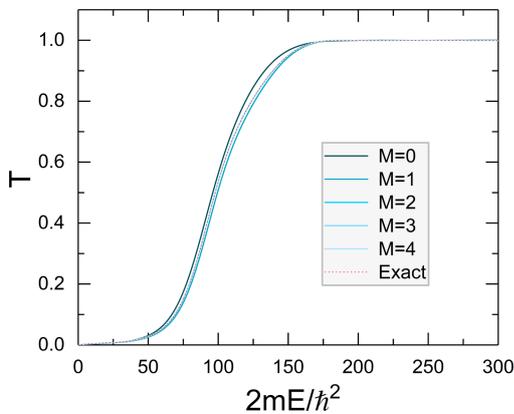


Fig. 3. (Color online) Transmission coefficient ( $T$ ) of potential (20) with  $\gamma = 100\hbar^2/2m$  as function of energy ( $E$ ) when the scattering region is divided in  $N = 10$  slices, and each slice is approximated by polynomials of degree  $M = 0$  to 4 (blue solid lines), as indicated in the legend, in comparison to the exact one (red dotted line).

Figure 3 shows the transmission coefficient,

$$T = |S_{21}|^2 = |S_{12}|^2, \quad (21)$$

of potential (20) for  $\gamma = 100\hbar^2/2m$ ,  $N = 10$  and  $M = 0, 1, 2, 3$ , and 4 (blue solid lines). In these calculations, series (14) are truncated to  $\lambda_{\max} = 10$ . Results are compared to the one obtained with  $N = 10^6$ ,  $M = 30$ , and  $\lambda_{\max} = 30$ , which is presumed to be the exact solution within machine precision (red dotted line). Notice that cases with  $M \geq 2$  are indistinguishable from the exact solution even when the number of slices is small, in contrast to those where slice-potentials are approximated by constants ( $M = 0$ ) or lines ( $M = 1$ ). However, all of them become good approximations for large energies and reproduce qualitatively well the tunneling behavior observed for  $E < \gamma$ .

A better comparison between approximations can be visualized by means of the relative error, defined by

$$\text{Relative Error} \equiv \frac{|T - T_{\text{Exact}}|}{T_{\text{Exact}}}. \quad (22)$$

Figure 4 illustrates the relative error in transmittance calculations of potential (20) as a function of energy ( $E$ ) for (a)  $N = 10$ , (b)  $N = 100$ , (c)  $N = 1000$ , and (d)

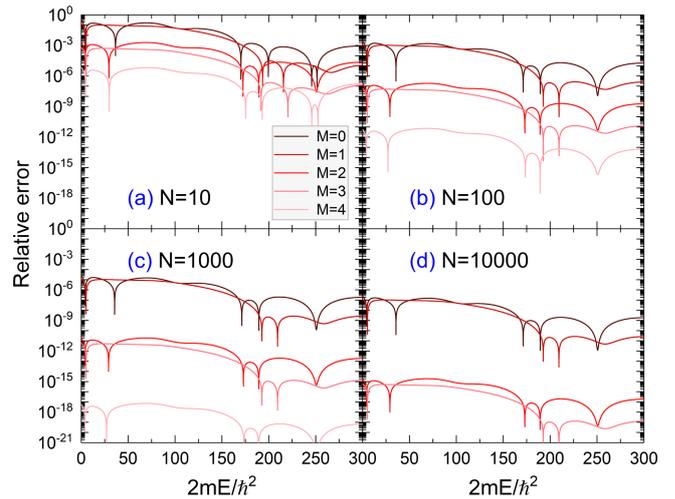


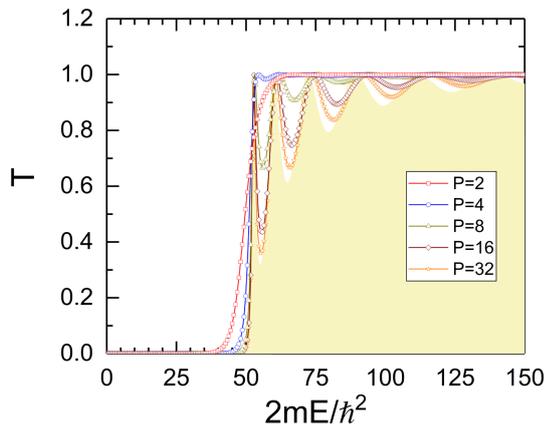
Fig. 4. (Color online) Relative error in transmission coefficient calculations of potential (20) as a function of energy ( $E$ ) for (a)  $N = 10$ , (b)  $N = 100$ , (c)  $N = 1000$ , and (d)  $N = 10000$  divisions of the scattering region, where each potential-slice is approximated by polynomials of degree  $M = 0$  to 4, as indicated in the legend.

$N = 10000$  divisions of the scattering region, where each potential-slice is approximated by polynomials of degree  $M = 0$  to 4, and the same parameters of Fig. 3 are used. Notice that the relative error is decreased by increasing  $N$  or  $M$ . For energies in the tunneling region, where  $E < \gamma$ , the superior envelope of the relative error behaves almost constant, in contrast to cases with  $E > \gamma$  where such envelope decreases when  $E$  is increased. Minor improvements in calculations are found between  $M = 0$  and 1 or between  $M = 2$  and 3. On the other hand, calculations are significantly improved, by several orders of magnitude, between  $M = 0, 2$ , and 4, being such difference more remarkable when  $N$  is increased. For example, accuracy given by constant potential approximations ( $M = 0$ ) with  $N = 10000$  are comparable to those obtained by parabolic ones ( $M = 2$ ) with  $N = 100$ . It is worth to mention that increasing  $M$  is highly efficient in terms of computational time, in comparison to increase  $N$ , i.e., the method in Sect. 3 allows us to improve accuracy, without losing efficiency. Finally, the tendency to reduce the relative error by increasing  $N$  illustrates the numerical stability of the method.

Now, let us consider a potential barrier with smooth edges given as

$$V(x) = \begin{cases} -\beta(x^P - 1) & \text{if } -1 \leq x \leq 1 \\ 0 & \text{other cases} \end{cases}. \quad (23)$$

This potential approximates a rectangular potential barrier of height  $\beta$  for  $P \gg 1$ . Figure 5 shows the transmittance as function of energy using potential (23) with  $\beta = 50\hbar^2/2m$  and  $P = 2$  (red squares),  $P = 4$  (blue circles),  $P = 8$  (dark yellow triangles),  $P = 16$  (wine diamonds), and  $P = 32$  (orange stars). These calculations were performed using  $N = 10^6$  divisions of the potential barrier,  $M = P$  and  $\lambda_{\max} = 40$ , which lead us to exact results within machine precision. The transmittance for the case of a rectangular barrier of height  $\beta$  is given by the yellow area. Notice that each peak of maximum transmission is displaced to the left when  $P$  is increased, and for large  $P$ , its position approaches that of a rectangular potential barrier. Moreover, the



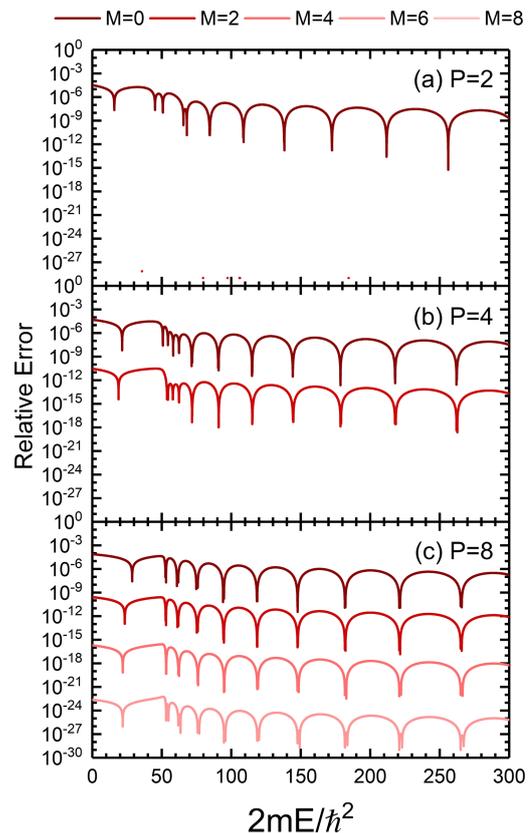
**Fig. 5.** (Color online) Transmission coefficient ( $T$ ) of potential (23) with  $\beta = 50\hbar^2/2m$  as function of energy ( $E$ ) for  $P = 2, 4, 8, 16,$  and  $32$ , as indicated in the legend. Yellow area represents the transmission coefficient of a rectangular potential barrier of height  $\beta$ .

oscillation amplitude of the transmittance spectrum is reduced for small  $P$ . For  $E < \beta$ , evanescent wavefunctions reduce significantly the transmittance, being this effect more remarkable when  $P$  is greater. As expected, a bigger  $P$  produces a transmittance spectra more similar to that of a rectangular potential barrier.

For the cases of (a)  $P = 2$ , (b)  $P = 4$ , and (c)  $P = 8$ , Fig. 6 shows the relative error when the scattering region of potential (23) is divided in  $N = 1000$  slices, and the potential in each slice is approximated by polynomials of degree  $M = 0, 2, 4, 6,$  and  $8$  obtained from the Taylor series around the middle of each slice. In these cases, calculations were done by truncating series (14) to  $\lambda_{\max} = 20$ . Notice that for  $M < P$ , the behavior of the relative error has a strong dependence on  $M$ , while the transmittance is almost exact (within machine precision) for  $M = P$ . On the other hand, for fixed  $M$ , we can observe a slight increase in the error when  $P$  is increased. In general, the order of magnitude of the relative error using potential (23) assimilates to those obtained for the sinusoidal potential for the same  $N$  and  $M$ .

### 5. Conclusions

A novel, efficient and accurate method to determine iteratively the scattering matrix of the one-dimensional Schrödinger equation with arbitrary potential has been presented. This method divides the scattering region in small slices, whose potential can be approximated by polynomials. A series solution to the scattering matrix of each potential-slice is given. Since the scattering matrix obtained in each iteration-step is unitary, the method is numerically stable. To evaluate accuracy, cases with a sinusoidal potential and potential barriers with smooth edges were discussed. They show an important improvement in calculation accuracy in comparison to previous techniques that approximate slice-potentials as constants, reaching rapidly the exact solution within machine precision. This method can be immediately extended to cases with piecewise constant variations in their effective mass, such as semiconductor heterostructures,<sup>15,16</sup> by substituting the mass in Eq. (9) by the effective mass of the slice. Moreover, the obtained scattering matrix may be employed to determine band structure of general infinite periodical potentials (where the Kronig-Penney potential is



**Fig. 6.** (Color online) Relative error in transmission coefficient calculations as function of energy of the scattering region of potential (23), with (a)  $P = 2$ , (b)  $P = 4$ , and (c)  $P = 8$ , is divided in  $N = 1000$  slices. Cases where the potential of each slice is approximated by polynomials of degree  $M = 0, 2, 4, 6,$  and  $8$  are presented, as indicated in the legend.

an example) and to model scattering through a system connected to general semi-infinite (non-constant) periodic leads, by following the method in Ref. 17. SM obtained in this paper could also be used to determine bound-states of general analytic potentials, which is currently under development.

**Acknowledgments** This work has been supported by UNAM-DGAPA-PAPIIT IA106617. Computations were performed at Miztli under project LANCAD-UNAM-DGTIC-329.

### Appendix

In this appendix, it is proved that condition (4) applied to solution (3) lead us to the solution (5) of 1D-SE with potential (6). We start from the 1D-SE,

$$\frac{d^2\psi_j(x)}{dx^2} + \frac{2m[E - V_j(x)]}{\hbar^2}\psi_j(x) = 0. \tag{A.1}$$

For  $\epsilon \ll 1$ , the second derivative can be approximated by

$$\frac{d^2\psi_j(x)}{dx^2} \approx \frac{\psi_j(x - \epsilon) + \psi_j(x + \epsilon) - 2\psi_j(x)}{\epsilon^2}, \tag{A.2}$$

whose substitution in Eq. (A.1) allow us to write

$$\psi_j(x + \epsilon) + \psi_j(x - \epsilon) + \left\{ \frac{2m[E - V_j(x)]}{\hbar^2} \epsilon^2 + 2 \right\} \psi_j(x) \approx 0. \tag{A.3}$$

Let us define a discrete variable  $x_n = n\epsilon$ , where  $n \in \mathbb{Z}$ . Then Eq. (A.3) permit us to compute  $\psi_j(x_{n+2})$  and  $\psi_j(x_{n-1})$  if

$\psi_j(x_n)$  and  $\psi_j(x_{n+1})$  are given. By using solution (2) and Eq. (A.3) we obtain

$$\psi_{j,n+1} + \psi_{j,n-1} + \left[ \frac{2m(E - V_{j,n})}{\hbar^2} \varepsilon^2 + 2 \right] \psi_{j,n} \approx 0, \quad (\text{A.4})$$

$$\psi_{j,1} + (A_{j,L}^{(+)} e^{-ike} + A_{j,L}^{(-)} e^{ike}) + \left[ \frac{2m(E - V_{j,0})}{\hbar^2} \varepsilon^2 + 2 \right] (A_{j,L}^{(+)} + A_{j,L}^{(-)}) \approx 0, \quad (\text{A.5})$$

and

$$\psi_{j,N_j-1} + (A_{j,R}^{(+)} e^{-ike} + A_{j,R}^{(-)} e^{ike}) + \left[ \frac{2m(E - V_{j,N_j})}{\hbar^2} \varepsilon^2 + 2 \right] (A_{j,R}^{(+)} + A_{j,R}^{(-)}) \approx 0, \quad (\text{A.6})$$

for  $n = 1, \dots, N_j - 1$ , being  $N_j \equiv [b_j/\varepsilon]$ ,  $\psi_{j,n} \equiv \psi_j(x_n)$ , and  $V_{j,n} \equiv V_j(x_n)$ .

Equation (4) implies that  $\psi_{1,N_1} = \psi_{2,0} \equiv \psi_{N_1}$ . Let us also define  $\psi_n \equiv \psi_{1,n}$  for  $n < N_1$ , and  $\psi_n \equiv \psi_{2,n-N_1}$  for  $n > N_1$ . Then by adding Eq. (A.6) for  $j = 1$  and Eq. (A.5) for  $j = 2$ , and using approximation  $e^{ike} \approx 1 + ik\varepsilon - \frac{1}{2}k^2\varepsilon^2$  we obtain

$$\psi_{N_1-1} + \psi_{N_1+1} + \left[ \frac{2m(E - V_{N_1})}{\hbar^2} \varepsilon^2 + 2 \right] \psi_{N_1} \approx 0, \quad (\text{A.7})$$

with  $V_{N_1} \equiv V_{1,N_1} + V_{2,0}$ . Therefore, Eqs. (A.4) to (A.7) are rewritten as

$$\psi_{n+1} + \psi_{n-1} + \left[ \frac{2m(E - V_n)}{\hbar^2} \varepsilon^2 + 2 \right] \psi_n \approx 0, \quad (\text{A.8})$$

$$\psi_1 + (A_{1,L}^{(+)} e^{-ike} + A_{1,L}^{(-)} e^{ike}) + \left[ \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2} \varepsilon^2 + 2 \right] (A_{1,L}^{(+)} + A_{1,L}^{(-)}) \approx 0, \quad (\text{A.9})$$

and

$$\psi_{N_1+N_2} - 1 + (A_{2,R}^{(+)} e^{-ike} + A_{2,R}^{(-)} e^{ike}) + \left[ \frac{2m(E - V_{N_1+N_2})}{\hbar^2} \varepsilon^2 + 2 \right] (A_{2,R}^{(+)} + A_{2,R}^{(-)}) \approx 0 \quad (\text{A.10})$$

for  $n = 1, 2, \dots, N_1 + N_2 - 1$ , where  $V_n \equiv V(x_n)$  is defined in Eq. (6). Finally, by taking  $\varepsilon \rightarrow 0$ , all previous approximations become exact, demonstrating solution (5).

\*Corresponding author: carlos@ciencias.unam.mx

- 1) Y. Imry and R. Landauer, *Rev. Mod. Phys.* **71**, S306 (1999).
- 2) D. A. Ryndyk, *Theory of Quantum Transport at Nanoscale* (Springer, New York, 2016) p. 32.
- 3) D. J. Griffiths, *Introduction to Quantum Mechanics* (Pearson Prentice Hall, México, 2006) p. 68.
- 4) B. Jonsson and S. T. Eng, *IEEE J. Quantum Electron.* **26**, 2025 (1990).
- 5) Y. Wen, Y. Cheng, W. Xian-Ping, and C. Zhuang-Qi, *Chin. Phys. B* **19**, 093402 (2010).
- 6) L. L. Sánchez-Soto, J. J. Monzón, A. G. Barriuso, and J. F. Cariñena, *Phys. Rep.* **513**, 191 (2012).
- 7) O. Pujol, R. Carles, and J.-P. Pérez, *Eur. J. Phys.* **35**, 035025 (2014).
- 8) F. Loran and A. Mostafazadeh, *Phys. Rev. A* **93**, 042707 (2016).
- 9) H. Taniyama and A. Yoshii, *Phys. Rev. B* **53**, 9993 (1996).
- 10) T. Aktosun, *J. Math. Phys.* **33**, 3865 (1992).
- 11) M. S. De Bianchi and M. D. Ventura, *Eur. J. Phys.* **16**, 260 (1995).
- 12) R. C. Rumpf, *Prog. Electromagn. Res.* **35**, 241 (2011).
- 13) C. Ramírez and L. A. Medina-Amayo, *Ann. Phys.* **378**, 303 (2017).
- 14) R. Redheffer, in *Modern Mathematics for the Engineer*, ed. E. F. Beckenbach (McGraw-Hill, New York, 1961) Difference Equations and Functional Equations in Transmission-line Theory, Chap. 12.
- 15) E. Momox and N. Zakhleniuk, *J. Comput. Phys.* **231**, 6173 (2012).
- 16) S. K. Ray, A. K. Katiyar, and A. K. Raychaudhuri, *Nanotechnology* **28**, 092001 (2017).
- 17) C. Ramírez, *Ann. Phys. (Berlin)* (2017). DOI: 10.1002/andp.201700170.

## Bibliografía

- [1] E. Schrödinger, “An undulatory theory of the mechanics of atoms and molecules,” *Physical Review*, vol. 28, no. 6, p. 1049, 1926.
- [2] L. L. Sánchez-Soto, J. J. Monzón, A. G. Barriuso, and J. F. Cariñena, “The transfer matrix: A geometrical perspective,” *Physics Reports*, vol. 513, no. 4, pp. 191–227, 2012.
- [3] R. Redheffer, “Difference equations and functional equations in transmission-line theory,” *Modern mathematics for the engineer*, vol. 12, pp. 282–337, 1961.
- [4] R. d. L. Kronig and W. Penney, “Quantum mechanics of electrons in crystal lattices,” in *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, vol. 130, pp. 499–513, The Royal Society, 1931.
- [5] S. Gasiorowicz, *Quantum physics*. John Wiley & Sons, 2007.
- [6] J. J. Sakurai and E. D. Commins, “Modern quantum mechanics, revised edition,” 1995.
- [7] D. A. Ryndyk *et al.*, *Theory of Quantum Transport at Nanoscale*. Springer, 2016.
- [8] C. Kittel, *Introduction to solid state physics*. Wiley, 2005.
- [9] Y. Imry and R. Landauer, “Conductance viewed as transmission,” *Reviews of Modern Physics*, vol. 71, no. 2, p. S306, 1999.
- [10] Y. V. Nazarov and Y. M. Blanter, *Quantum transport: introduction to nanoscience*. Cambridge University Press, 2009.
- [11] D. J. Griffiths, “Electrodynamics,” *Introduction to Electrodynamics, 3rd ed.*, Prentice Hall, Upper Saddle River, New Jersey, pp. 301–306, 1999.
- [12] S. Datta, *Electronic transport in mesoscopic systems*. Cambridge university press, 1997.
- [13] B. Van Wees, H. Van Houten, C. Beenakker, J. G. Williamson, L. Kouwenhoven, D. Van der Marel, and C. Foxon, “Quantized conductance of point contacts in a two-dimensional electron gas,” *Physical Review Letters*, vol. 60, no. 9, p. 848, 1988.
- [14] D. J. Griffiths, *Introduction to quantum mechanics*. Cambridge University Press, 2016.
- [15] B. Jonsson and S. T. Eng, “Solving the schrodinger equation in arbitrary quantum-well potential profiles using the transfer matrix method,” *IEEE journal of quantum electronics*, vol. 26, no. 11, pp. 2025–2035, 1990.
- [16] Y. Wen, Y. Cheng, W. Xian-Ping, and C. Zhuang-Qi, “Quantum reflection as the reflection of subwaves,” *Chinese Physics B*, vol. 19, no. 9, p. 093402, 2010.
- [17] K. Nakamura, A. Shimizu, M. Koshiba, and K. Hayata, “Finite-element calculation of the transmission probability and the resonant-tunneling lifetime through arbitrary

- 
- potential barriers,” *IEEE journal of quantum electronics*, vol. 27, no. 5, pp. 1189–1198, 1991.
- [18] C. Ramírez, “Determining transport properties of complex multiterminal systems: S-matrix of general tight-binding periodic leads,” *Annalen der Physik*.
- [19] E. Momox, N. Zakhleniuk, and N. Balkan, “Solution of the 1d schrödinger equation in semiconductor heterostructures using the immersed interface method,” *Journal of Computational Physics*, vol. 231, no. 18, pp. 6173–6180, 2012.
- [20] S. K. Ray, A. K. Katiyar, and A. K. Raychaudhuri, “One-dimensional si/ge nano-wires and their heterostructures for multifunctional applications—a review,” *Nanotechnology*, vol. 28, no. 9, p. 092001, 2017.
- [21] S. Grinyaev and G. Karavaev, “Electron tunneling through thin barrier with smooth potential at gaas/alas (001) heterointerfaces,” *Physics of the Solid State*, vol. 42, no. 4, pp. 772–779, 2000.