

Modelización de superredes cuánticas con MATHEMATICA[©]

J.A. Monsoriu, M.H. Giménez, F. Giménez

UNIVERSIDAD POLITÉCNICA DE VALENCIA

jmonso@fis.upv.es, mhgimene@fis.upv.es, fgimenez@mat.upv.es

M.J. Marín

UNIVERSITAT DE VALÈNCIA

marinfer@uv.es

Abstract

Las superredes cuánticas son dispositivos nanoestructurados formados por varias capas delgadas de semiconductores distribuidas generalmente de forma periódica. Desde un punto de vista pedagógico, resulta sencillo determinar la dispersión de electrones en estos sistemas aplicando un modelo de pozos de potencial definido por la estructura de la red. De esta forma, los coeficientes de transmisión y reflexión pueden calcularse con fines docentes mediante el uso del Método de las Matrices de Transferencia (MMT). En esta contribución se presenta un sencillo código MMT desarrollado con Mathematica que permite la modelización tanto de redes periódicas como de superredes aperiódicas cuasirregulares con la intención de motivar a los estudiantes de física cuántica mediante el uso de geometrías no convencionales como son los fractales o la sucesión de Fibonacci.

Quantum superlattices are composite aperiodic structures comprised of alternating layers of several semiconductors following the rules of an aperiodic sequence. From a pedagogical point of view, it is easy to obtain the electronic scattering properties of these systems by means of the Transfer Matrix Method (TMM). In this work we present a TMM code developed in Mathematica that allows modeling periodic and aperiodic superlattices for motivating students of quantum physics by using unconventional geometries such as fractals or the Fibonacci sequence.

Keywords: Fibonacci, Fractal, Física Cuántica.

1 Introducción

Las superredes cuánticas son heteroestructuras formadas por varias capas de semiconductor de escala de nanométrica [1] donde los efectos cuánticos juegan un papel muy importante en sus propiedades físicas. Las primeras superredes cuánticas se fabricaron con una distribución periódica de semiconductores [2], aunque también se han fabricado superredes basadas en distribuciones aperiódicas amorfas [3] y fractales [4]. En ausencia de un campo eléctrico externo, las superredes de semiconductores pueden ser consideradas como un sistema unidimensional de pozos de energía potencial, lo que permite un análisis sencillo de la interacción de electrones con estas estructuras desde un punto de vista pedagógico. Para ello, el método de las matrices de transferencia resulta idóneo para calcular los coeficientes de transmisión y reflexión de electrones en estos sistemas, permitiendo considerar cualquier distribución de las láminas de semiconductor, ya sea periódica o fractal [5, 6]. En este trabajo nos centraremos en superredes cuánticas fractales basadas en el conjunto Cantor y en superredes cuasiperiódicas basadas en la sucesión de Fibonacci.

2 Teoría básica

Consideremos la ecuación de Schrödinger unidimensional independiente del tiempo,

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

donde $\psi(x)$, m y E son, respectivamente, la función de onda, masa y energía de una partícula cuántica, \hbar es la constante de Planck, y $V(x)$ es un pozo de potencial que puede representarse como una función constante a trozos, por ejemplo, con N barreras de potencial. Para resolver el problema de dispersión cuántica para este potencial, es decir, determinar los coeficientes de reflexión y transmisión para una partícula, consideraremos en primer lugar la interacción de la partícula con cada salto de potencial imponiendo la continuidad de la función de onda y de su derivada y que caracterizaremos a través de la matriz de dispersión D_i . En segundo lugar, con la matriz P_i propagaremos la función de onda en cada escalón constante del potencial. Finalmente, ensamblaremos la solución completa con la matriz de transferencia M , como producto de cada solución parcial encontrada. Dicha solución se obtiene como productos de matrices 2×2 fácilmente programable desde un punto de vista pedagógico en lenguajes de cálculo simbólico como es MATHEMATICA[©]. En las referencias [5],[6] vienen recogidos los detalles de la derivación de la matriz de transferencia M a través de las matrices de dispersión y propagación.

3 Superredes fractales

Los fractales son objetos geométricos con dimensión no entera y recientemente han atraído bastante la atención de físicos e ingenieros ya que permiten modelar ciertas estructuras naturales complejas [7]. La definición matemática de fractal comprende a estructuras matemáticas auto-semejantes que se obtienen iterando una operación geométrica básica, llamada generador. Este proceso iterativo se repite múltiples veces a diferentes niveles de escala, partiendo de un objeto que se denomina iniciador.

Una de las distribuciones fractales más simples es la que se conoce como conjunto de Cantor (figura 1). El iniciador ($S = 0$) consiste únicamente en una barra de longitud L . En el

siguiente paso ($S = 1$) se divide el segmento en tres partes iguales de longitud $L/3$ y se elimina el segmento central. Mediante la repetición de este proceso sobre cada segmento resultante, obtenemos en el paso de orden S un total de 2^S segmentos de longitud $L/3^S$ separados por $2^S - 1$ bandas (gaps). En la figura 1 se muestran únicamente las 4 primeras etapas del conjunto de Cantor. Al final, el sistema se puede considerar como una estructura periódica de periodo $2L/3^S$ donde se han introducido una serie de defectos eliminando determinados segmentos. La idea básica de este trabajo consiste en considerar estos sistemas periódicos y fractales como una distribución de pozos de potencial de profundidad $-V$ y determinar su espectro de transmisión utilizando el método de las matrices de transferencia implementado en MATHEMATICA[®].

Consideremos una distribución de pozos de potencial definida por la figura 1 y de profundidad $V_N = a\sqrt{2mV}/\hbar$, donde V y a son la profundidad y ancho de cada pozo de potencial respectivamente. En la figura 2 se muestra el espectro de reflexión de este sistema con $V_N = 0.85$ para diferentes grados de fractalidad en función de la variable normalizada $E_N = a\sqrt{2mE}/\hbar$, donde E es la energía de la partícula incidente. Se ha considerado un intervalo de energías que contiene la primera banda prohibida (bandgap) del potencial periódico finito con el mismo periodo, i.e., $1.36 < E_N < 1.54$. En este rango de energías, las funciones de onda de Bloch para un potencial periódico no se propagan y el coeficiente de reflexión es exactamente la unidad. Para un potencial periódico finito, dicho valor es muy próximo a la unidad pero no alcanza dicho valor en ningún punto, permitiendo una probabilidad no nula de transmisión por efecto túnel, aunque muy pequeña. Sin embargo, el espectro de la figura 2 muestra que el coeficiente de reflexión para el potencial fractal de grado S es una versión modulada del asociado al grado anterior $S - 1$. Estas figuras muestran cualitativamente la auto- semejanza del coeficiente de reflexión para el potencial fractal, dado que cada pico en el fractal S se transforma en tres picos en el $S + 1$. Además, se observan valores de transmisión total ($R = 0$) para valores discretos de la energía, aunque para otros valores la reflexión es casi total.

4 Superredes cuasiperiódicas

La segunda distribución aperiódica que vamos a considerar viene dada por la sucesión de Fibonacci. En matemáticas, la sucesión de Fibonacci es una serie de números enteros que fue descrita por primera vez por Leonardo de Pisa (1170-1250), también conocido como Fibonacci [8]. Esta sucesión, F_i con $i = 0, 1, 2, \dots$, se obtiene a partir de la siguiente función recursiva,

$$F_{i+1} = F_i + F_{i-1}, \quad F_0 = 0, \quad F_1 = 1,$$

por lo que $F = \{0, 1, 1, 2, 3, 5, 8, 13, 21, \dots\}$. La razón o cociente entre un término y el inmediatamente anterior varía continuamente, pero se estabiliza en un número irracional conocido como *razón áurea*, *número áureo*, o *número φ* (pronunciado fi), que es la solución positiva de la ecuación $\varphi^2 - \varphi - 1 = 0$, dada por

$$\varphi = \lim_{i \rightarrow +\infty} \frac{F_i}{F_{i-1}} = \frac{1 + \sqrt{5}}{2} \approx 1.618.$$

Además, cualquier número natural se puede escribir mediante la suma de un número limitado de términos de la sucesión de Fibonacci, cada uno de ellos distinto a los demás. Por ejemplo, $17 = 13 + 3 + 1$, $65 = 55 + 8 + 2$. A partir de la sucesión de números de Fibonacci es posible generar la cadena de Fibonacci (figura 3) de dos elementos A y B con un procedimiento recursivo similar dado por $D_{i+1} = \{D_i, D_{i-1}\}$ para $i \geq 1$, con $D_0 = \{B\}$ y $D_1 = \{A\}$, por lo que $D_2 = \{AB\}$,

$D_3 = \{ABA\}$, $D_4 = \{ABAAB\}$, $D_5 = \{ABAABABA\}$ y así sucesivamente hasta el orden S deseado (figura 3). Nótese que para un determinado orden S , la sucesión tendrá un total F_{S+1} elementos repartidos en F_S veces 'A' y F_{S-1} veces 'B' de forma que $F_{S+1} = F_S + F_{S-1}$, por lo que la proporción de elementos 'A' respecto 'B' tenderá hacia el número φ conforme hacemos crecer el orden de generación S .

En la última década podemos encontrar multitud de trabajos científicos sobre las propiedades de transmisión de las denominadas superredes de Fibonacci, es decir, sistemas multipaca de semiconductores en el que se van alternando láminas de material 'A' y 'B' en una cadena de Fibonacci. Desde un punto de vista pedagógico, en una primera aproximación, estos sistemas se pueden modelizar mediante el *Métodos de las Matrices de Transferencia* que hemos implementado en MATHEMATICA[©] distribuyendo los pozos de potencial en los elementos 'A' de la cadena de Fibonacci. En la figura 4 se muestra el espectro de reflexión para una superred de Fibonacci de órdenes de generación $S = 10$ y $S = 11$. Este espectro, además de ser autosimilar, presencia de unos picos de reflexión localizados en energías normalizadas de $E_N = 0.65, 1.15$ y 1.91 . Si calculamos la proporción de energía de uno de estos picos de reflexión y el anterior resulta aproximadamente el número φ por lo que las propiedades matemáticas de la propia sucesión de Fibonacci se han trasladado al espectro de reflexión.

5 Conclusiones

Se han obtenido el espectro de reflexión de superredes cuánticas aperiódicas basadas en el fractal de Cantor y en la sucesión de Fibonacci mediante el Método de las Matrices de Transferencia implementado en MATHEMATICA[©] (Anexo I) Desde un punto de vista pedagógico, se ha tratado de motivar a los estudiantes de física cuántica mediante el uso de geometrías no convencionales.

Agradecimientos. Este trabajo ha sido financiado por el Ministerio de Ciencia e Innovación (DPI2008-02953 y TRA2009-0215), la Generalitat Valenciana (PROMETEO2009-077 y ACOMP/2010/052) y la Universidad Politécnica de Valencia (PAID-05-09 y PAID-06-08). Este trabajo ha sido desarrollado por el Grupo de Innovación Docente e-MACAFI de la Universidad Politécnica de Valencia.

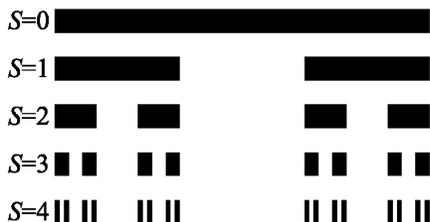


Figura 1: Conjunto de Cantor. Las barras negras representan la distribución de los pozos de potencial.

ANEXO I: Método de las Matrices de Transferencias en MATHEMATICA[©]

(* FUNCIONES *)

```
redC[S_]:=Product[Table[If[EvenQ[Ceiling[i/3^j]],0,1],{i,1,3^S}],{j,0,S-1}];
```

```
redF[S_]:=Module[{}, tBarras=Table[,{i,0,S}]; tBarras[[1]]=0;
tBarras[[2]]=1;
```

```
Do[tBarras[[i+1]]=Flatten[{tBarras[[i]],tBarras[[i-1]]}],{i,2,S}];
tBarras[[S+1]]];
```

```
DD[f_]:=N[{{1,1},{f,-f}}];
```

```
PP[f_,d_]:=N[{{Exp[I f d],0},{0,Exp[-I f d]}}]; MM[fv_,dn_,f_]:=Module[{tmp},
```

```
tmp=IdentityMatrix[2]; Do[fi=Sqrt[f^2+fv[[i]]^2];
```

```
tmp=tmp.DD[fi].PP[fi,dn[[i]]],
```

```
Inverse[DD[fi]]; ,{i,1,Length[dn]}; Inverse[DD[f]].tmp.DD[f];
```

```
RR[fv_,dn_,f_]:=Abs[Module[{M},M=MM[fv,dn,f];(M[[2,1]]/M[[1,1]])]^2;
```

(* EJEMPLO ESPECTRO RED FRACTAL *)

```
S=3; fi0=0.85; rango={-0.025,1.025}; fiv=fi0*redC[S];
```

```
dn=Table[1,{i,1,Length[fiv]}];
```

```
Plot[RR[fiv,dn,fi],{fi,0.5,2.5},Frame->True, PlotRange->rango, PlotPoints->100,
AspectRatio->1]
```

(* EJEMPLO ESPECTRO RED FIBONACCI *)

```
S=10; fi0=0.45; rango={-0.025,1.025}; fiv=fi0*redF[S];
```

```
dn=Table[1,{i,1,Length[fiv]}];
```

```
Plot[RR[fiv,dn,fi],{fi,0.5,2.5},Frame->True, PlotRange->rango, PlotPoints->100,
AspectRatio->1]
```

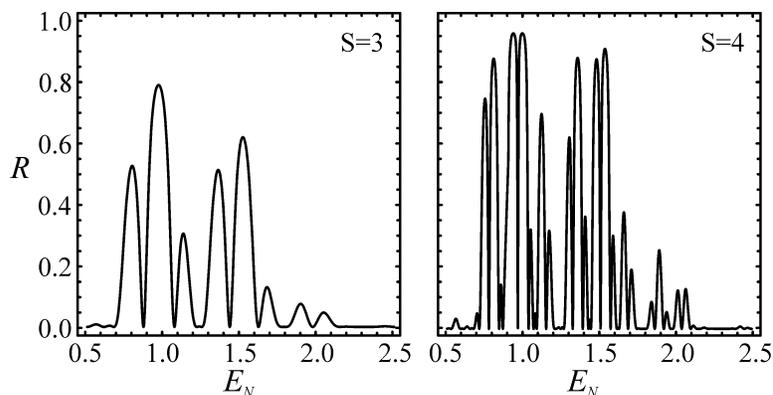


Figura 2: Coeficiente de reflexión para diferentes grados de generación del potencial fractal.

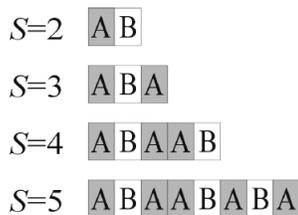


Figura 3: Primeros órdenes de la cadena de Fibonacci.

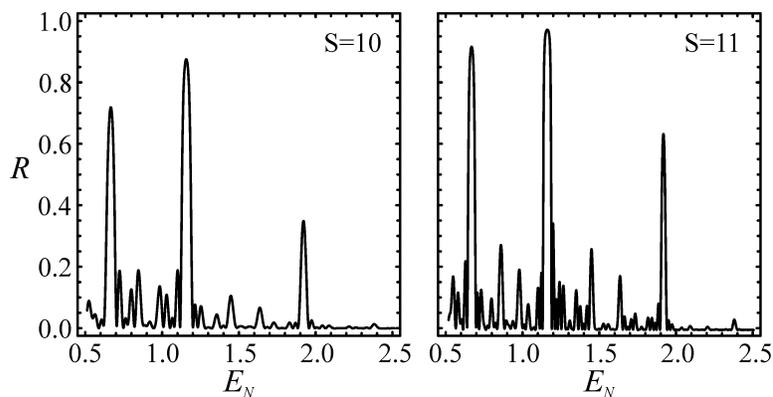


Figura 4: Coeficiente de reflexión para diferentes grados de generación del potencial de Fibonacci.

Referencias

- [1] R.M. Kolbas y N. Holonyak, Jr. *Am. J. Phys.*, 52 (5), 431-437 (1984).
- [2] B.R. Nag. *Physics of Quantum Well Devices*. Kluwer Academic, Dordrecht (2001).
- [3] R. Mazurczyk. *Chaos, Solitons Fractals* 10 (12), 1971-1982 (1999).
- [4] K. Järrendahl, M. Duela, J. Birch, y J.-E. Sundgren. *Phys. Rev. B* 51(12), 7621-7631 (1995).
- [5] J.A. Monsoriu, F.R. Villatoro, M.J. Marín, J.F. Urchueguía, y P. Fernández de Córdoba. *Eur. J. Phys.* 26(4), 603-610 (2005).
- [6] J.A. Monsoriu, F.R. Villatoro, M.J. Marín, J. Pérez, y L. Monreal. *Am. J. Phys.* 26(9), 831-836 (2006).
- [7] B.B. Mandelbrot. *The Fractal Geometry of Nature*. Freeman, San Francisco (1982).
- [8] J. Gier y F. Gies, *Leonard of Pisa and the New Mathematics of the Middle Ages* (New York: Comwell, 1969).

