

UNIVERSIDAD NACIONAL DE CÓRDOBA

FACULTAD DE MATEMÁTICA, ASTRONOMÍA Y
FÍSICA

TRABAJO ESPECIAL

Licenciatura en Física
**Resonancias en el Espacio de Fock: Optimización de un dispositivo
de Efecto Túnel para la generación de Ultrasonido (SASER).**

Autor
Luis Eduardo Francisco Foá Torres
Director
Horacio Miguel Pastawski

Córdoba, República Argentina

Diciembre de 1999

A mis padres y a Jorge

Agradecimientos

A mis padres, por su apoyo;

A Horacio, por su dedicación y guía;

A Patricia y Fernando;

A los integrantes del LANAIS de RMS.

Resumen

El tunelamiento de una partícula a través de una barrera de potencial juega un papel importante en muchos dispositivos semiconductores, donde sus pequeñas dimensiones permiten la manifestación de efectos de interferencia cuántica en las excitaciones relevantes. En particular, en este trabajo el objeto de estudio es el tunelamiento de electrones a través de las denominadas estructuras de doble-barrera, esto es, estructuras formadas por dos barreras en serie. En este trabajo se analizan los efectos coherentes de la interacción electrón-fonón en el tunelamiento resonante en estructuras de doble barrera, modelando el espacio de Fock de electrones y fonones en forma simple, desarrollándose el concepto de resonancia en el espacio de Fock. Se analiza la optimización de la geometría para lograr una emisión de fonones máxima como se requiere en un dispositivo SASER (generador de ultrasonidos). Se estudia también el papel de los estados electrónicos excitados en la doble barrera en el tunelamiento resonante.

Índice General

1	Introducción	6
2	Un Modelo Simple	11
2.1	Funciones de Green	11
2.2	Un Modelo para el Tunelamiento Resonante	20
2.3	Un modelo simple para el Tunelamiento Resonante incluyendo la interacción electrón-fonón	23
2.3.1	Cálculo de las Transmitancias y la Corriente con emisión de fonones en un espacio truncado	26
2.3.2	Resultados	31
3	Optimización de los parámetros geométricos	40
3.1	El Modelo	40
3.2	Cálculo Numérico de las Transmitancias	44
3.3	Resultados	48
3.3.1	Optimización de la Emisión de Fonones	52
4	Rol de los estados excitados en el tunelamiento resonante	59
5	Conclusiones	66
	Referencias	68
	Apéndice: Programas de cálculo numérico	70

Capítulo 1

Introducción

El tunelamiento (tunneling) de una partícula a través de una barrera de potencial es uno de los fenómenos más estudiados en mecánica cuántica. El tunelamiento juega un papel importante en muchos dispositivos semiconductores donde sus pequeñas dimensiones permiten la manifestación de efectos de interferencia cuántica en las excitaciones relevantes [1]. En particular, en este trabajo nuestro objeto de estudio será el tunelamiento de electrones a través de las denominadas estructuras de doble-barrera, esto es, estructuras formadas por dos barreras en serie.

El tuneleo resonante en heteroestructuras de doble barrera ha sido objeto de muchos estudios desde el trabajo original de Chang, Tsu y Esaki en 1974 [2], quienes construyeron un pozo cuántico. Este consistía de dos barreras de potencial en serie, las barreras son formadas por finas capas ($\sim 50 \text{ \AA}$) de un material con una brecha energética (gap) ancha como AsGaAl y las regiones restantes estaban compuestas por un material con un gap más pequeño como AsGa y cuya banda de conducción contiene portadores provistos por impurezas donoras. Estas heteroestructuras resultan muy atractivas debido a sus diversas aplicaciones tecnológicas [3] como por ejemplo diodos, lasers, detectores y generadores de alta frecuencia entre otros.

Las curvas de corriente-voltaje para una estructura de doble barrera (característica $I - V$) pueden entenderse fácilmente si notamos que la región entre las barreras actúa como una 'caja cuántica' que confina los electrones. Supongamos que la caja es lo suficientemente pequeña de manera que tenemos sólo unos pocos niveles de energía E_j en el rango de energías de interés, véase la figura I. Un voltaje aplicado, disminuye la

energía de los estados resonantes con respecto a la energía de los electrones incidentes desde la izquierda (emisor). Cuando el voltaje aplicado es tal que alguno de los niveles de la caja cae dentro del rango de energía de los electrones incidentes, los electrones en el emisor pueden tunelear hacia el pozo y permanecer allí hasta que sean liberados y tuneleen a través de la segunda barrera hacia el colector. Es de esperar que la corriente crezca fuertemente para este voltaje. Este fenómeno se conoce como *tunelamiento resonante* (*resonant tunneling*). Una vez que la energía del nivel resonante cae por debajo de la banda de conducción en el emisor la corriente caerá abruptamente, ver la figura I . Debido a que las energías involucradas son mayores que la térmica (eV , $(E_2 - E_1) > k_B T$) el dispositivo funciona aún a temperatura ambiente. En la figura II se muestra una curva de corriente-voltaje para un dispositivo de doble barrera a temperatura ambiente. Posteriormente, en cuidadosas mediciones de bajas temperaturas, se observaron débiles picos adicionales al pico resonante central en la curva corriente-voltaje (ver figura III). Estos picos satélites son interpretados como provenientes del tunelamiento resonante asistido por fonones [4] . Para estos voltajes, los electrones pueden entregar su exceso de energía cinética a modos vibracionales locales de la red cristalina pudiendo acceder al estado confinado antes de escapar al colector. A partir de estos trabajos se hizo evidente la importancia de la interacción electrón-fonón en las propiedades de las estructuras nanométricas.

La interacción electrón-fonón es un tema importante de la teoría de muchos cuerpos. La interacción electrón-fonón origina la superconductividad en muchos metales e influencia las propiedades de transporte de cualquier metal. En semiconductores puros y en cristales iónicos esta interacción usualmente domina las propiedades de transporte. La formulación moderna del problema se debe a Fröhlich (1950), y su estudio es una parte importante de la teoría de muchos cuerpos. En lo que sigue se señala brevemente la naturaleza de la interacción electrón fonón en compuestos

polares como los de los grupos III-V, del cual el AsGa es un arquetipo.

El acoplamiento polar entre electrones y fonones puede ser muy grande en estos compuestos donde se alternan átomos positivamente y negativamente cargados. Un fonón óptico hace que los iones contiguos en el cristal vibren fuera de fase. Los iones positivos y negativos oscilan en direcciones opuestas generándose un campo de polarización que dispersa a los electrones. Este acoplamiento polar es sólo con los fonones longitudinales ópticos (LO) y no con los transversales ópticos (TO), dado que sólo los fonones LO generan campos intensos. La palabra polarón se utiliza para describir las excitaciones elementales que resultan cuando un único electrón está acoplado a los fonones. La interacción electrón-fonón en estos compuestos está descrita por el Hamiltoniano de Fröhlich [5] [6] y es proporcional a la densidad de probabilidad electrónica y a la amplitud vibracional de la red. Una deducción de la interacción electrón-fonón en el pozo de una doble-barrera fue presentada en la Ref. [7]. En ese trabajo se consideran los efectos del confinamiento de los fonones LO en el pozo.

La posibilidad de generar fonones coherentes en un dispositivo semiconductor de doble barrera, en lo que sería un SASER (el origen de la palabra viene de una analogía con LASER, reemplazando la L de luz por la S de sonido), fue propuesta por primera vez algunos años atrás [8]. Un dispositivo semiconductor del tipo SASER [9] transforma la energía potencial eléctrica en un único modo vibracional de la red. Esto es facilitado por el confinamiento electrónico tipo pozo en una estructura de doble barrera. La emisión de fonones aparece cuando la energía del estado resonante está por debajo de la energía de los electrones incidentes en $\hbar\omega_0$, i.e., la energía de los fonones longitudinales ópticos (LO), que son los que se acoplan más fuertemente con los electrones en el pozo en el material que compone el pozo. Como sucede en dispositivos laser esto es fortalecido si la energía del primer estado excitado en el pozo supera a la del estado fundamental en exactamente $\hbar\omega_0$ y se vuelve superpoblado. Esto se lograría con un muy cuidadoso

diseño de la estructura. Un detalle importante es que los fonones LO se encuentran confinados en el pozo de la doble barrera. De acuerdo con el análisis de la Ref. [10] los fonones LO emitidos poseen un tiempo de vida corto decayendo en un par de fonones \widetilde{LO} y TA (transversales acústicos). Estos últimos, los fonones TA , tienen un tiempo de vida muy largo y forman un haz coherente potencialmente útil en diversas aplicaciones. Un SASER de este tipo funcionaría emitiendo estos fonones transversales acústicos (TA) de alta frecuencia (THz).

En este trabajo queremos explorar un dispositivo SASER alternativo, en el cual el estado *fundamental* del pozo actúa como un estado intermedio en el decaimiento de los estados del emisor en los del colector *más* un fonón. Esto representa una *resonancia en el espacio de Fock de electrones y fonones* y se observa como un pico satélite en la corriente [4]. Para ello, la energía del estado polarónico excitado (electrón +1 fonón) debe encontrarse en el rango de energía de los electrones incidentes. Esta condición de resonancia puede sintonizarse simplemente mediante la elección del potencial externo.

En el capítulo segundo se modela en forma simple el espacio de Fock para el tunelamiento resonante a través de un dispositivo de doble barrera incluyendo los efectos coherentes de la interacción electrón-fonón. En el capítulo tercero se analiza un modelo más complejo donde se incluyen los parámetros geométricos del sistema. Se discute también la optimización de la emisión de los fonones primarios, LO , para diferentes configuraciones geométricas del sistema lo cual sería de utilidad en un dispositivo SASER. En el capítulo cuarto se discute el rol de los estados electrónicos excitados en el tunelamiento resonante. En el apéndice se incluyen los programas de cálculo numérico utilizados en el trabajo.

Figura I. En i) se muestran las características corriente-voltaje y la conductancia para un dispositivo de doble barrera como el descrito en el texto. En ii) se muestran diagramas de energía para diferentes voltajes aplicados a la doble barrera. El pico que se observa para un voltaje de aproximadamente 0,8 V en la figura i) se corresponde con el esquema b) en ii). Estas figuras fueron tomadas de L. Esaki, *Rev. Mod. Phys.* 46 (2), 237 (1974).

Figura II. Característica corriente-voltaje para un dispositivo de doble barrera medida a temperatura ambiente; tomada de E. Brown, C. Parker, T. Sollner, C. Huang, and C. Stutz, *Proceedings of the OSA Topical Meeting on Picosecond Electronics and Optoelectronics* (1989).

Figura III. Curva de corriente-voltaje y derivada de la corriente respecto del voltaje para un dispositivo de doble barrera a 4.2 K. La región que corresponde al pico satélite se muestra también ampliada en un factor cinco. La línea punteada indica la corriente de fondo en el pico satélite. Esta figura fue tomada de V. J. Goldman, D. C. Tsui, and J. E. Cunningham, *Phys. Rev. B* 36, 7635 (1987).

Capítulo 2

Un Modelo Simple

En este capítulo, se busca modelar la conductancia eléctrica por tunelamiento a través de una doble barrera incluyendo los efectos coherentes de la interacción electrón-fonón de la forma más sencilla posible. Esto permitirá comprender algunos aspectos del problema en términos simples.

La función de Green es una herramienta muy poderosa que nos da la respuesta en cualquier punto del espacio debido a una excitación en cualquier otro. Debido a que el concepto de función de Green está relacionado con las posibles funciones de onda en condiciones de contorno que representan inyección de partículas, y por lo tanto se conectan formalmente con la teoría de scattering (véase por ejemplo la Ref.[11]), el conocimiento de aquella nos permitirá obtener las probabilidades de transmisión a través del sistema. A continuación se hará una breve introducción al concepto de funciones de Green.

2.1 Funciones de Green

El concepto de función de Green aparece en muchos contextos físicos diferentes incluyendo electrostática, electromagnetismo y teoría de circuitos. Para nuestro problema, dada la ecuación de Schrödinger en forma matricial,

$$(\varepsilon \mathbf{I} - \mathbf{H}) \vec{u} = 0,$$

si introducimos en el segundo miembro un conjunto de inhomogeneidades, que representan inyección de probabilidad en los estados base escogidos para escribir la

matriz del Hamiltoniano, y colectamos los vectores solución \vec{u} adecuadamente en una matriz, obtenemos la función de Green para el sistema. Formalmente, definimos la función de Green retardada,

$$\mathbf{G}^R(\varepsilon) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} ((\varepsilon + i\eta)\mathbf{I} - \mathbf{H})^{-1}. \quad (1)$$

Cada elemento de esta matriz puede expresarse como:

$$G_{i,j}^R = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \sum_{\alpha} \frac{u_i^*(\alpha)u_j(\alpha)}{(\varepsilon + i\eta) - E_{\alpha}} \quad (2)$$

donde $u_i(\alpha)$ es la componente i -ésima del autovector $\vec{u}(\alpha)$ de la matriz del Hamiltoniano (\mathbf{H}), E_{α} es el autovalor correspondiente al autovector $\vec{u}(\alpha)$.

De manera análoga se define la función de Green avanzada,

$$\mathbf{G}^A(\varepsilon) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} ((\varepsilon - i\eta)\mathbf{I} - \mathbf{H})^{-1}. \quad (3)$$

Sus elementos pueden escribirse como:

$$G_{i,j}^A = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \sum_{\alpha} \frac{u_i^*(\alpha)u_j(\alpha)}{(\varepsilon - i\eta) - E_{\alpha}}. \quad (4)$$

La elección de una función de Green u otra implica la elección de condiciones de contorno definidas sobre las autofunciones [12]. El signo de la parte imaginaria η está relacionado con el signo del tiempo que queremos observar. En particular estaremos interesados en la función de Green retardada que en adelante llamaremos simplemente función de Green. Los autovalores de \mathbf{H} corresponden a los polos en el eje real de $\mathbf{G}^R(\varepsilon)$ [13]. Otra cantidad de interés es la densidad local de estados en un sitio i del sistema que denotaremos con $N_i(\varepsilon)$. Escribiendo la función de Green en una base de estados localizados en los diferentes sitios del sistema, la densidad local de estados está dada por:

$$N_i(\varepsilon) = \frac{-1}{\pi} \text{Im}(G_{i,i}^R) = \frac{1}{\pi} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{|u_i(\alpha)|^2 \eta}{[(\varepsilon + i\eta) - E_{\alpha}]^2 + \eta^2}. \quad (5)$$

La densidad de estados a la energía ε , $N(\varepsilon)$, puede obtenerse sumando las densidades

locales de estados en los diferentes sitios, esto es:

$$N(\varepsilon) = \frac{-1}{\pi} \sum_i \text{Im}(G_{i,i}^R) = \frac{-1}{\pi} \text{Tr}[\text{Im}(\mathbf{G}^R)]. \quad (6)$$

$N(\varepsilon) d\varepsilon$ dá el número de estados en el intervalo $[\varepsilon, \varepsilon + d\varepsilon]$. En el caso en que el sistema es finito, la densidad de estados es una suma de funciones delta.

Teniendo una representación matricial para el Hamiltoniano parece sencillo calcular la matriz $((\varepsilon + i\eta)\mathbf{I} - \mathbf{H})$ e invertirla. Sin embargo, esta matriz es en general de dimensión infinita. En particular, este el caso para los sistemas tratados que son sistemas abiertos con cables que se prolongan hasta el infinito. En consecuencia sería de utilidad poder truncar la matriz \mathbf{H} incorporando el efecto de los cables adecuadamente.

A tal fin, dividamos el espacio de Hilbert en dos subespacios \mathcal{H}_A y \mathcal{H}_B que contienen a los estados del subsistema finito en los que estamos interesados y su complemento ortogonal. Luego, la matriz del Hamiltoniano total puede particionarse de la siguiente forma:

$$\mathbf{H} = \begin{bmatrix} \mathbf{H}_{A,A} & \mathbf{H}_{A,B} \\ \mathbf{H}_{B,A} & \mathbf{H}_{B,B} \end{bmatrix}, \quad (7)$$

donde $\mathbf{H}_{A,A}$ contiene los elementos de matriz de \mathbf{H} calculados en la base de \mathcal{H}_A , $\mathbf{H}_{B,B}$ está calculado en la base de \mathcal{H}_B y $\mathbf{H}_{A,B}$ y $\mathbf{H}_{B,A}$ corresponden a los términos que mezclan estados en ambos subespacios.

La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo puede escribirse como:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{H}_{A,A} & \mathbf{H}_{A,B} \\ \mathbf{H}_{B,A} & \mathbf{H}_{B,B} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \vec{u}_A \\ \vec{u}_B \end{pmatrix} = \varepsilon \begin{pmatrix} \vec{u}_A \\ \vec{u}_B \end{pmatrix} \quad (8)$$

donde los vectores \vec{u}_A y \vec{u}_B representan las amplitudes en cada subespacio. Dado que sólo estamos interesados en el subsistema A , eliminamos de la ecuación anterior las amplitudes \vec{u}_B obteniendo,

$$[\mathbf{H}_{A,A} + \mathbf{H}_{A,B} (\varepsilon \mathbf{I} - \mathbf{H}_{B,B})^{-1} \mathbf{H}_{B,A}] \vec{u}_A = \varepsilon \vec{u}_A.$$

En consecuencia, podemos definir un Hamiltoniano efectivo $\mathbf{H}_{A,A}^{\text{ef}}$ que tenga en cuenta

exactamente los efectos de B sobre A sumando a $\mathbf{H}_{A,A}$ una auto-energía $\Sigma_{A,A}(\varepsilon)$,

$$\Sigma_{A,A}(\varepsilon) = \mathbf{H}_{A,B} \mathbf{G}_{B,B}^{(0)} \mathbf{H}_{B,A}, \quad (9)$$

$$\mathbf{H}_{A,A}^{\text{ef}} = \mathbf{H}_{A,A} + \Sigma_{A,A}(\varepsilon), \quad (10)$$

donde $\mathbf{G}_{B,B}^{(0)}$ denota la función de Green para el sistema B aislado, esto es,

$$\mathbf{G}_{B,B}^{(0)} = (\varepsilon \mathbf{I} - \mathbf{H}_{B,B})^{-1}.$$

Este es un paso importante porque posibilita reemplazar un sistema abierto infinito por uno finito. Pero, dado que los cables son infinitos, la matriz a invertir, $(\varepsilon \mathbf{I} - \mathbf{H}_{B,B})$, también lo es por lo que parece que no hemos ganado demasiado. Sin embargo, la función de Green para el sistema B aislado usualmente puede determinarse en forma analítica. Veamos algunos ejemplos concretos que nos serán de utilidad más adelante.

Ejemplo 1: Sistema de dos niveles

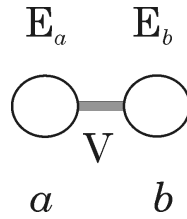


Figura 2.1. a) Esquema representativo del sistema de dos sitios del ejemplo 1.

Consideremos un sistema con dos sitios a y b como se muestra en la figura 2.1.a), con el siguiente Hamiltoniano:

$$\mathbf{H} = \begin{bmatrix} E_a & V \\ V & E_b \end{bmatrix}.$$

Pensemos al sitio a como el sistema A y al sitio b como el sistema B. La función de Green para el sitio b aislado es simplemente $G_{b,b}^{(0)} = (\varepsilon - E_b)^{-1}$. Luego, de acuerdo con la expresión (9), la auto-energía $\Sigma_{a,a}$ para el sitio a está dada por:

$$\Sigma_{a,a}(\varepsilon) = V(\varepsilon - E_b)^{-1}V. \quad (11)$$

La función de Green para el sitio a del sistema, $G_{a,a}$, es:

$$G_{a,a}(\varepsilon) = [\varepsilon - (E_a + \Sigma_{a,a}(\varepsilon))]^{-1}. \quad (12)$$

Esta expresión puede escribirse como un desarrollo en serie como sigue:

$$\begin{aligned} G_{a,a}(\varepsilon) &= \frac{1}{[G_{a,a}^{(0)}(\varepsilon)]^{-1} - VG_{b,b}^{(0)}V} \\ &= G_{a,a}^{(0)}(\varepsilon) \frac{1}{1 - VG_{b,b}^{(0)}VG_{a,a}^{(0)}(\varepsilon)} \\ &= G_{a,a}^{(0)}(\varepsilon)(1 + VG_{b,b}^{(0)}VG_{a,a}^{(0)}(\varepsilon) + \\ &\quad + VG_{b,b}^{(0)}VG_{a,a}^{(0)}(\varepsilon) \times VG_{b,b}^{(0)}VG_{a,a}^{(0)}(\varepsilon) + \dots) \\ &= G_{a,a}^{(0)}(\varepsilon) + G_{a,a}^{(0)}(\varepsilon)VG_{b,b}^{(0)}VG_{a,a}^{(0)}(\varepsilon) + \\ &\quad + G_{a,a}^{(0)}(\varepsilon)VG_{b,b}^{(0)}VG_{a,a}^{(0)}(\varepsilon) \times G_{a,a}^{(0)}(\varepsilon)VG_{b,b}^{(0)}VG_{a,a}^{(0)}(\varepsilon) + \dots \end{aligned}$$

donde $G_{a,a}^{(0)}$ representa la función de Green para el sitio a aislado. Esta serie puede representarse mediante el diagrama de Feynman de la Figura 1.1.b) donde las funciones de Green no perturbadas (sin considerar el término de interacción V) se representan con una línea simple con los índices de matriz correspondientes. La función de Green completa se representa con una línea doble y las interacciones correspondientes a la perturbación con líneas punteadas.

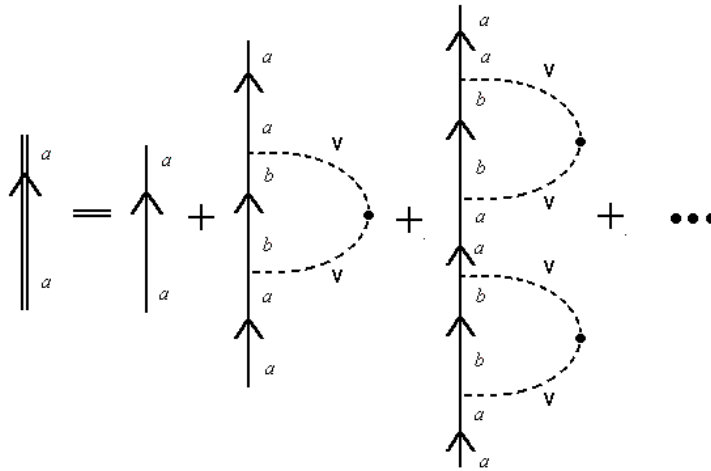


Figura 1.1.b) Diagrama de Feynman para el desarrollo en serie de la función de Green $G_{a,a}(\epsilon)$ para el sistema con sitios a y b .

Ejemplo 2: Cadena ordenada semi-infinita

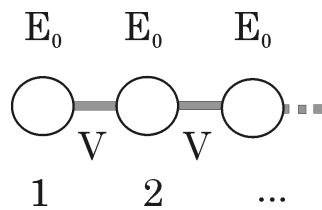


Figura 1.1.c) Cadena tight-binding ordenada semi-infinita.

Consideremos ahora una cadena semi-infinita como la de la figura 1.1.c) con energías diagonales E_0 y amplitudes de transición entre primeros vecinos V . El Hamiltoniano para este sistema es:

$$H = \begin{bmatrix} E_0 & V & 0 & \dots \\ V & E_0 & V & \dots \\ 0 & V & E_0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}.$$

Deseamos calcular la auto-energía $\Sigma_{1,1}$ para el primer sitio de la cadena debida a la presencia de los sitios restantes. Para ello, pensemos que tenemos originalmente sólo tres sitios en la cadena. Como vimos en el ejemplo anterior, podemos renormalizar al

segundo sitio por la presencia del tercero corrigiendo su energía. Así, obtenemos un sistema efectivo de dos sitios con energías E_0 y $E_0 + V(\varepsilon - E_0)^{-1}V$ y un parámetro de salto V . La auto-energía para el primer sitio debida a la presencia de los otros dos es, de acuerdo con (11):

$$\Sigma_{1,1}(\varepsilon) = \frac{V^2}{\varepsilon - E_0 - \frac{V^2}{\varepsilon - E_0}}.$$

Si continuamos extendiendo el sistema se obtiene la siguiente fracción continua para la auto-energía correspondiente al sitio 1 de la figura 1.1.c),

$$\Sigma_{1,1}(\varepsilon) = \frac{V^2}{\varepsilon - E_0 - \left(\frac{V^2}{\varepsilon - E_0 - \frac{V^2}{\varepsilon - E_0 - \dots}} \right)}.$$

Identificando el término entre paréntesis como $\Sigma_{1,1}(\varepsilon) \equiv \Sigma(\varepsilon)$ se obtiene:

$$\Sigma(\varepsilon) = \frac{V^2}{\varepsilon - E_0 - \Sigma(\varepsilon)} \quad (13)$$

Las soluciones complejas de esta ecuación con $\Sigma = \Delta - i\Gamma$ son:

$$\Delta = \frac{\varepsilon - E_0}{2} + \sqrt{\left(\frac{\varepsilon - E_0}{2}\right)^2 - V^2} \quad \text{si } \varepsilon - E_0 < -2|V|, \quad (14a)$$

$$\Delta = \frac{\varepsilon - E_0}{2} \quad \text{si } |\varepsilon - E_0| < 2|V|, \quad (14b)$$

$$\Delta = \frac{\varepsilon - E_0}{2} - \sqrt{\left(\frac{\varepsilon - E_0}{2}\right)^2 - V^2} \quad \text{si } \varepsilon - E_0 > 2|V|, \quad (14c)$$

$$\Gamma = 0 \quad \text{si } \varepsilon - E_0 < -2|V|, \quad (15a)$$

$$\Gamma = \sqrt{V^2 - \left(\frac{\varepsilon - E_0}{2}\right)^2} \quad \text{si } |\varepsilon - E_0| < 2|V|, \quad (15b)$$

$$\Gamma = 0 \quad \text{si } \varepsilon - E_0 > 2|V|. \quad (15c)$$

La parte real de la auto-energía Δ representa un corrimiento en la energía debido a la interacción del electrón en el sitio 1 con la cadena tight-binding semi-infinita a su derecha. Por otro lado, tenemos una parte imaginaria Γ no nula sólo cuando la energía

ε está dentro de la banda de energías permitidas de la cadena tight-binding (Ec.(15b)). Esto indica el hecho de que un electrón en el sitio 1 escapará eventualmente a través del cable (donde por cable entenderemos la cadena tight-binding semi-infinita acoplada al sitio 1). La cantidad $2\hbar/\Gamma$ puede interpretarse como el ‘tiempo de vida’ o el tiempo medio que un electrón permanece en el sitio 1 antes de escapar a través del cable. Recordemos que la relación de dispersión para una cadena tight-binding está dada por:

$$E = E_0 - 2|V| \cos(ka) \quad (16)$$

donde k es el vector de onda, con lo cual la banda de energías permitidas se encuentra entre $E_0 - 2|V|$ y $E_0 + 2|V|$. Luego, podemos ver que, para $|\varepsilon - E_0| < 2|V|$, $\Gamma(\varepsilon)$ puede escribirse como $\frac{\hbar}{2a} \left(\frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon}{\partial k} \right)$ que esencialmente es una constante por una velocidad.

La función de Green $G_{1,1}(\varepsilon)$ puede obtenerse en términos de la auto-energía $\Sigma(\varepsilon)$ como:

$$G_{1,1}(\varepsilon) = [\varepsilon - (E_0 + \Sigma(\varepsilon))]^{-1}.$$

Esta expresión nos será útil en el ejemplo que sigue.

Ejemplo 3: Estado resonante superficial

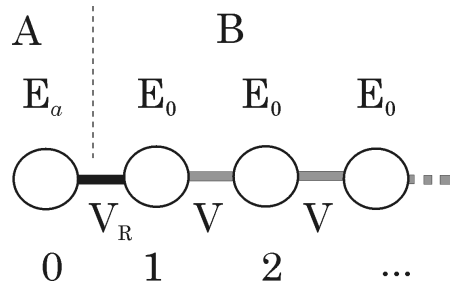


Figura 1.1d) Cadena semi-infinita acoplada a un sitio con energía E_a .

Como último ejemplo analicemos el sistema de la figura 1.1.d) consistente en un sitio con energía E_a acoplado mediante un parámetro de salto V_R a una cadena ordenada semi-infinita como la del ejemplo anterior. Supongamos que el sitio 0 con energía E_a es la parte del sistema en que estamos interesados. Luego, siguiendo la notación de la

ecuación (7) tenemos:

$$\mathbf{H} = \begin{bmatrix} \mathbf{H}_{A,A} & \mathbf{H}_{A,B} \\ \mathbf{H}_{B,A} & \mathbf{H}_{B,B} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} E_a & V_R & 0 & \cdots \\ V_R & E_0 & V & \cdots \\ 0 & V & E_0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}.$$

La auto-energía para el sitio 0 debido a la presencia de la cadena ordenada semi-infinita es, de acuerdo con la ecuación (9):

$$\Sigma_{0,0}(\varepsilon) = V_R G_{1,1}^{(0)} V_R,$$

donde $G_{1,1}^{(0)}$ es la función de Green para el sitio 1 de la cadena ordenada aislada que calculamos en el ejemplo anterior. Luego,

$$\begin{aligned} \Sigma_{0,0}(\varepsilon) &= V_R \frac{1}{\varepsilon - E_0 - \left(\frac{V^2}{\varepsilon - E_0 - \frac{V^2}{\varepsilon - E_0 - \dots}} \right)} V_R, \\ &= \left(\frac{V_R}{V} \right)^2 \Sigma(\varepsilon) \end{aligned} \quad (17)$$

donde se denota con Σ la auto-energía para el sitio 1 de la cadena ordenada aislada. Esta auto-energía puede escribirse como $\Sigma = \Delta - i\Gamma$, con Δ y Γ dados por las ecuaciones (14) y (15). Para el caso en que el sitio 0 se encuentra débilmente acoplado a la cadena ordenada, esto es, $|V_R| \ll |V|$, se tiene un estado resonante para una energía $\varepsilon_r \simeq E_a + \text{Re}(\Sigma_{0,0}(E_a))$ cuando ε_r se encuentra dentro de la banda de energías permitidas de la cadena tight-binding ordenada ($|\varepsilon_r - E_0| \leq 2|V|$). Este estado resonante se manifiesta como una Lorentziana en la densidad local de estados en el sitio 0 para ε próxima a ε_r :

$$N_0(\varepsilon) \simeq \frac{1}{\pi} \frac{\left(\frac{V_R}{V} \right)^2 \Gamma(\varepsilon_r)}{\left[\varepsilon - E_0 - \left(\frac{V_R}{V} \right)^2 \Delta(\varepsilon_r) \right]^2 + \left[\left(\frac{V_R}{V} \right)^2 \Gamma(\varepsilon_r) \right]^2}.$$

2.2 Un Modelo para el Tunelamiento Resonante

A modo de introducción consideremos el caso más sencillo en el cual no tenemos interacción electrón fonón en la doble barrera. Consideremos un sistema unidimensional y supongamos que tenemos un único estado resonante en el pozo. El sistema puede en este caso modelarse mediante un sitio central débilmente acoplado a los cables como se muestra en la figura 2.2. El modelo propuesto puede describirse en términos de un Hamiltoniano “tight-binding” de la forma:

$$\mathcal{H}_e = \sum_j \varepsilon_j c_j^\dagger c_j - \sum_{j,k} V_{j,k} (c_j^\dagger c_k + c_k^\dagger c_j), \quad (18)$$

donde c_j^\dagger y c_j son los operadores de creación y aniquilación de electrones en el sitio j , ε_j la energía potencial en el sitio j y los $V_{j,k}$ son las amplitudes de transición entre primeros vecinos.

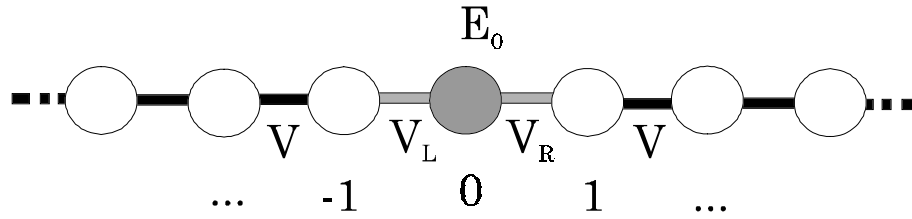


Figura 2.2. Representación esquemática del modelo introducido.

Para simular las barreras se considera un sitio central débilmente acoplado a los cables izquierdo y derecho ($V_L \ll V$, $V_R \ll V$).

$$V_{j,k} = V, \quad |j - k| = 1, \quad j \neq 0, \quad k \neq 0 \quad (19a)$$

$$V_{-1,0} = V_{0,-1} = V_L, \quad (19b)$$

$$V_{1,0} = V_{0,1} = V_R. \quad (19c)$$

A los efectos de modelar el voltaje aplicado se toman los siguientes valores para las energías:

$$\varepsilon_j = \begin{cases} 0, & j < 0 \\ (E_0 - 2|V|) - eV/2, & j = 0 \\ -eV, & j > 0 \end{cases} \quad (20)$$

donde eV es la diferencia de potencial aplicada entre las barreras y E_0 denota la energía del estado fundamental del pozo respecto del fondo de la banda cuando eV es cero. De esta manera, la caída de potencial está limitada a la región de tunelamiento.

Para calcular la transmitancia a través del sistema se utiliza el formalismo de funciones de Green. En general, para un electrón con energía ε , la transmitancia de izquierda (L) a derecha (R) entre un sitio i y un sitio j del sistema está relacionada con las funciones de Green de la siguiente forma [14] [15] :

$$T_{R \leftarrow L}(\varepsilon) = 2\Gamma_L(\varepsilon) |G_{i,j}^R(\varepsilon)|^2 2\Gamma_R(\varepsilon),$$

donde $G_{i,j}^R(\varepsilon)$ es la función de Green entre el sitio i y el sitio j , $2\Gamma_L(\varepsilon)$ representa una tasa (rate) de ingreso del electrón al sitio i y $2\Gamma_R(\varepsilon)$ una tasa de egreso del sitio j . Veamos cómo se calcula la transmitancia para el caso particular de nuestro modelo. A tal fin, eliminemos primero el cable izquierdo procediendo como en el ejemplo de la sección anterior. De esta manera, la presencia del cable izquierdo puede considerarse exactamente sumando al sitio central una auto-energía Σ_L . Dado que estamos interesados en energías dentro de la banda de energías permitidas para los electrones incidentes, Σ_L está dada por (ver Ec.(17)):

$$\Sigma_L(\varepsilon) = \Delta_L(\varepsilon) - i\Gamma_L(\varepsilon), \quad (21)$$

con

$$\Delta_L(\varepsilon) = \left(\frac{V_L}{V}\right)^2 \left(\frac{\varepsilon - 2|V|}{2}\right), \quad (22a)$$

$$\Gamma_L(\varepsilon) = \left(\frac{V_L}{V}\right)^2 \sqrt{V^2 - \left(\frac{\varepsilon - 2|V|}{2}\right)^2}, \quad (22b)$$

y donde, por conveniencia, la energía ε se ha referido al fondo de la banda en el cable izquierdo ($-2|V|$). De igual forma podemos eliminar el cable derecho. La auto-energía Σ_R correspondiente es:

$$\Sigma_R(\varepsilon) = \Delta_R(\varepsilon) - i\Gamma_R(\varepsilon), \quad (23)$$

con

$$\Delta_R(\varepsilon) = \left(\frac{V_R}{V}\right)^2 \left(\frac{(\varepsilon - 2|V|) - (-eV)}{2}\right), \quad (24a)$$

$$\Gamma_R(\varepsilon) = \left(\frac{V_R}{V}\right)^2 \sqrt{V^2 - \left(\frac{(\varepsilon - 2|V|) - (-eV)}{2}\right)^2}. \quad (24b)$$

En consecuencia se obtiene un sistema efectivo de un único sitio con energía:

$$\tilde{E}_0 = E_0 - eV/2 + \Sigma_R(\varepsilon) + \Sigma_L(\varepsilon). \quad (25)$$

Para un electrón propagándose de izquierda (L) a derecha (R), la transmitancia a través del sitio central está relacionada con las funciones de Green de la siguiente forma [14] [15]:

$$T_{R \leftarrow L}(\varepsilon) = 2\Gamma_L(\varepsilon) |G_{0,0}^R(\varepsilon)|^2 2\Gamma_R(\varepsilon), \quad (26)$$

donde $G_{0,0}^R(\varepsilon)$ denota la función de Green retardada para el sitio cero (sitio central) que es simplemente $(\varepsilon - \tilde{E}_0)^{-1}$. Luego, obtenemos:

$$T_{R \leftarrow L}(\varepsilon) = \frac{4\Gamma_L(\varepsilon)\Gamma_R(\varepsilon)}{[\varepsilon - (E_0 - eV/2 + \Delta_L(\varepsilon) + \Delta_R(\varepsilon))]^2 + [\Gamma_L(\varepsilon) + \Gamma_R(\varepsilon)]^2}. \quad (27)$$

Este resultado puede obtenerse también proponiendo ondas planas para la función de onda a cada lado del sitio central e imponiendo condiciones de contorno adecuadas, véase por ejemplo la sección 13.6 de la referencia [16]. En este caso, el coeficiente de transmisión puede calcularse como el módulo cuadrado del cociente entre las amplitudes de la onda transmitida y la incidente.

Tenemos un pico en la transmitancia para una energía ε_r que, para $E_0 \ll |V|$ y $eV \ll |V|$, está dada aproximadamente por:

$$\varepsilon_r \simeq E_0 - eV/2 - \frac{V_L^2}{V} - \frac{V_R^2}{V}.$$

El valor de pico para la transmitancia es:

$$T_{R \leftarrow L}(\varepsilon_r) = \frac{4\Gamma_L(\varepsilon_r)\Gamma_R(\varepsilon_r)}{[\Gamma_L(\varepsilon_r) + \Gamma_R(\varepsilon_r)]^2}.$$

Notemos que la transmitancia puede alcanzar el valor 1 cuando se satisface la condición:

$$\Gamma_L(\varepsilon_r) = \Gamma_R(\varepsilon_r). \quad (28)$$

Esto se muestra en la figura 2.3 donde, para un voltaje fijo y un parámetro de salto V_L dado, se grafica la transmitancia para diferentes valores de V_R . Puede verse que cuando V_R se elige de manera que la ecuación (28) se satisface (curva a trazos), la transmitancia alcanza el valor uno. Vemos que, para alguna energía y configuración del sistema, podemos lograr una condición de *resonancia* con una transmitancia del 100%. Este fenómeno de tunelamiento resonante surge de la naturaleza ondulatoria de los electrones. La alta transmitancia es debida a que, para ciertas longitudes de onda, las ondas reflejadas en el interior interfieren destructivamente con las ondas incidentes de manera que sólo queda la onda transmitida. Cabe notar que siempre hemos supuesto que la coherencia de fase se mantiene durante el proceso de scattering, lo cual es esencial para que ocurran estos efectos de interferencia.

2.3 Un modelo simple para el Tunelamiento Resonante incluyendo la interacción electrón-fonón

A los efectos de lograr una comprensión de los aspectos esenciales de la interacción electrón-fonón en una estructura de doble barrera, consideremos un modelo unidimensional simple para el sistema. Supongamos que tenemos un único estado resonante en el pozo, que se modela mediante un sitio central acoplado débilmente a los cables. El Hamiltoniano utilizado puede escribirse como la suma de una contribución electrónica, otra debida a los fonones y un término de interacción electrón-fonón.

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_e + \mathcal{H}_f + \mathcal{H}_{e-f} \quad (29)$$

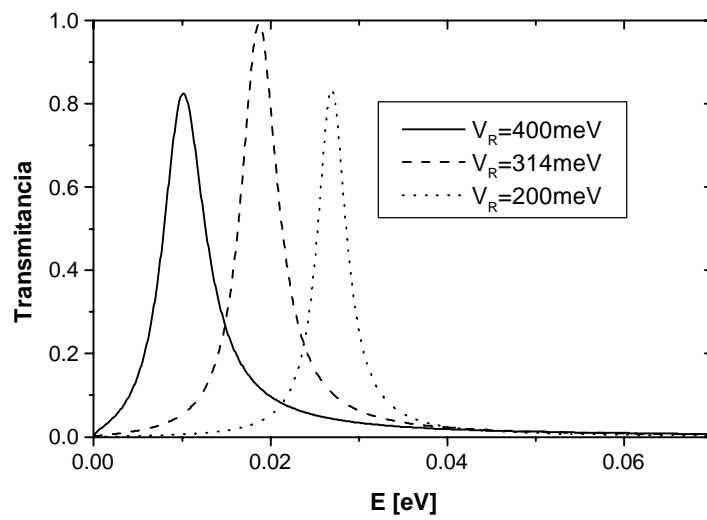


Figura 2.3. Transmitancia en función de la energía de los electrones incidentes para $V_L = 400$ meV y diferentes valores de V_R , el voltaje es $eV=50$ meV. Los restantes parámetros toman los valores: $V = -7, 150$ eV y $E_0 = 80$ meV, los valores escogidos para estos parámetros se explicarán en la sección siguiente.

La parte electrónica puede describirse en términos de un Hamiltoniano “tight-binding” como el de la ecuación (18):

$$\mathcal{H}_e = \sum_j \varepsilon_j c_j^\dagger c_j - \sum_{j,k} V_{j,k} (c_j^\dagger c_k + c_k^\dagger c_j), \quad (30)$$

donde ε_j y $V_{j,k}$ tienen la misma forma que en la sección anterior.

Para la contribución correspondiente a los fonones se considera un único modo con frecuencia ω_0 . La interacción electrón-fonón está limitada a la región de tunelamiento y el acople del electrón en el sitio cero con el modo de fonones se denota con V_g . En estas condiciones tenemos:

$$\mathcal{H}_f = \hbar\omega_0(b^\dagger b), \quad (31)$$

$$\mathcal{H}_{e-f} = V_g c_0^\dagger c_0 (b^\dagger + b). \quad (32)$$

donde b^\dagger y b son los operadores de creación y destrucción de fonones en el pozo. Para V_g y $\hbar\omega_0$ nulos reobtenemos el Hamiltoniano utilizado en el modelo de la sección anterior.

En consecuencia, el problema de scattering en una dimensión espacial con electrones y fonones puede verse como un problema equivalente 2-dimensional de 1 cuerpo donde el número de fonones n es la segunda dimensión [17]. Esto se ilustra en la figura 2.4 donde nuestro modelo se representa como un modelo tight-binding en dos dimensiones.

Restrinjamos el problema de muchos cuerpos al caso en que tenemos sólo 0 ó 1 fonones. En el límite de bajas temperaturas, $k_B T \rightarrow 0$, antes del proceso de scattering no se tienen fonones en el sitio 0.

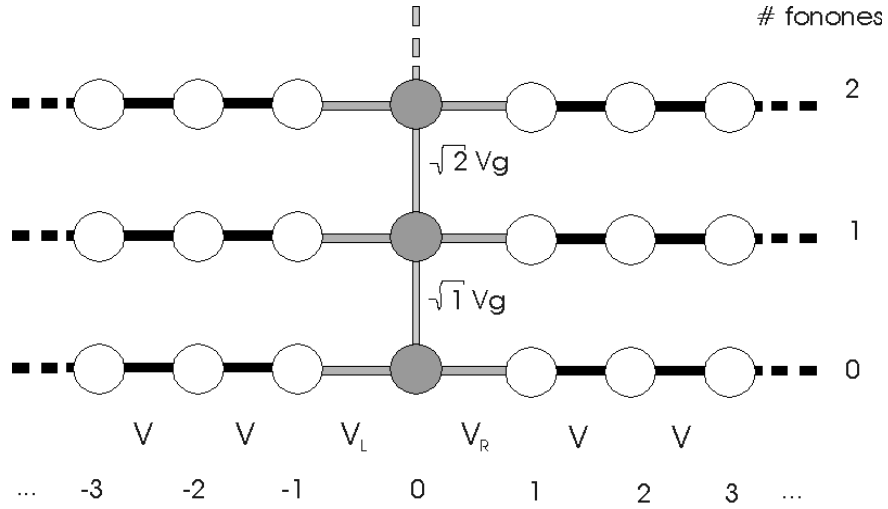


Figura 2.4. Cada punto representa un estado base $|j, n\rangle$ en el *espacio de Fock*. La fila inferior representa estados localizados en los diferentes sitios. Las filas superiores representan los mismos sitios con $n = 1$ y $n = 2$ fonones en el sitio 0. Las líneas representan elementos no diagonales en el Hamiltoniano, las horizontales son las amplitudes de salto $v_{j,k}$ y las verticales corresponden a la interacción electrón-fonón.

2.3.1 Cálculo de las Transmitancias y la Corriente con emisión de fonones en un espacio truncado

A los efectos de calcular las transmitancias entre los diferentes canales (0 y 1 fonones) se utiliza el formalismo de funciones de Green. Primeramente se eliminan los cables izquierdo y derecho para cada uno de los canales. Nuevamente, como en la sección anterior, cada cable eliminado introduce una auto-energía compleja en el sitio central correspondiente. Como resultado se obtiene un sistema efectivo de dos sitios. Las energías para estos sitios, referidas al fondo de la banda de los electrones incidentes, están dadas por:

$$\tilde{E}_0^{(0)} = E_0 - eV/2 + \Sigma_R^{(0)}(\varepsilon) + \Sigma_L^{(0)}(\varepsilon) \quad (33)$$

y

$$\tilde{E}_0^{(1)} = E_0 - eV/2 + \hbar\omega_0 + \Sigma_R^{(1)}(\varepsilon) + \Sigma_L^{(1)}(\varepsilon) \quad (34)$$

donde los supraíndices indican el número de fonones en el sitio correspondiente y las

auto-energías que se incorporan al eliminar los cables están dadas por:

$$\Sigma_L^{(j)}(\varepsilon) = \Delta_L^{(j)}(\varepsilon) - i\Gamma_L^{(j)}(\varepsilon), \quad j = 0, 1 \quad (35a)$$

$$\Sigma_R^{(j)}(\varepsilon) = \Delta_R^{(j)}(\varepsilon) - i\Gamma_R^{(j)}(\varepsilon), \quad (35b)$$

con

$$\Delta_L^{(j)}(\varepsilon) = \left(\frac{V_L}{V}\right)^2 \left(\frac{\varepsilon - 2|V| - j\hbar\omega_0}{2}\right), \quad (36a)$$

$$\Delta_R^{(j)}(\varepsilon) = \left(\frac{V_R}{V}\right)^2 \left(\frac{\varepsilon - 2|V| + eV - j\hbar\omega_0}{2}\right), \quad (36b)$$

$$\Gamma_L^{(j)}(\varepsilon) = \left(\frac{V_L}{V}\right)^2 \sqrt{V^2 - \left(\frac{\varepsilon - 2|V| - j\hbar\omega_0}{2}\right)^2}, \quad (36c)$$

$$\Gamma_R^{(j)}(\varepsilon) = \left(\frac{V_R}{V}\right)^2 \sqrt{V^2 - \left(\frac{\varepsilon - 2|V| + eV - j\hbar\omega_0}{2}\right)^2}. \quad (36d)$$

Se denota con ε la energía del electrón incidente (a través del canal sin fonones) respecto del fondo de la banda de energías para el cable izquierdo. Refiriendo todas las energías al fondo de la banda de energías de los electrones incidentes, el Hamiltoniano efectivo para el sistema es:

$$\mathbf{H}_{eff} = \begin{bmatrix} \tilde{E}_0^{(0)} & V_g \\ V_g & \tilde{E}_0^{(1)} \end{bmatrix} \quad (37)$$

En la figura 2.5 se representa el sistema efectivo resultante después de eliminar los cables izquierdo y derecho.

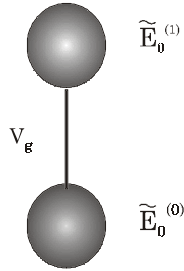


Figura 2.5. Representación esquemática para el Hamiltoniano efectivo.

Por simplicidad omitiremos en adelante el supraíndice R en las funciones de

Green retardadas (G^R). Denotando con $G_{0,0}^{(i,j)}$ la función de Green retardada entre el sitio espacial 0 con i fonones y el mismo sitio espacial con j fonones. En estas condiciones las funciones de Green retardadas, $G_{0,0}^{(i,j)}$ con $i, j = 0, 1$ están dadas por el elemento de matriz i, j de:

$$\begin{aligned}
\mathbf{G}(\varepsilon) &= (\varepsilon\mathbf{I} - \mathbf{H}_{eff})^{-1} \\
&= \begin{bmatrix} \varepsilon - \tilde{E}_0^{(0)} & -V_g \\ -V_g & \varepsilon - \tilde{E}_0^{(1)} \end{bmatrix}^{-1} \\
&= \frac{1}{\det(\varepsilon\mathbf{I} - \mathbf{H}_{eff})} \begin{bmatrix} \varepsilon - \tilde{E}_0^{(1)} & V_g \\ V_g & \varepsilon - \tilde{E}_0^{(0)} \end{bmatrix} \\
&= \frac{1}{(\varepsilon - \tilde{E}_0^{(0)})(\varepsilon - \tilde{E}_0^{(1)}) - V_g^2} \begin{bmatrix} \varepsilon - \tilde{E}_0^{(1)} & V_g \\ V_g & \varepsilon - \tilde{E}_0^{(0)} \end{bmatrix} \quad (38)
\end{aligned}$$

Notemos que si ε' es la energía del electrón saliente, luego a $T = 0$ K debe satisfacerse $\varepsilon = \varepsilon' + n(\hbar\omega_0)$, donde n es el número de fonones a la salida. Esta condición expresa la conservación de la energía.

Para portadores propagándose de izquierda (L) a derecha (R) las transmitancias entre los diferentes canales (con 0 y 1 fonón), denotando con el primer supraíndice el número de fonones a la salida y con el segundo el número incidente, están relacionadas con las funciones de Green de la siguiente forma [14] [15] :

$$T_{R \leftarrow L}^{(0,0)}(\varepsilon) = 2\Gamma_L^{(0)}(\varepsilon) \left| G_{0,0}^{(0,0)}(\varepsilon) \right|^2 2\Gamma_R^{(0)}(\varepsilon), \quad (39)$$

$$T_{R \leftarrow L}^{(1,0)} = 2\Gamma_L^{(0)}(\varepsilon) \left| G_{0,0}^{(0,1)}(\varepsilon) \right|^2 2\Gamma_R^{(1)}(\varepsilon) \quad (40)$$

La transmitancia total para electrones incidentes desde el canal con 0 fonones es la suma de $T_{R \leftarrow L}^{(0,0)}$ y $T_{R \leftarrow L}^{(1,0)}$.

Resulta conveniente definir el parámetro adimensional,

$$g = \left(\frac{V_g}{\hbar\omega_0} \right)^2$$

que es una medida de la “fuerza” de la interacción electrón-fonón. Puede verse que para $\varepsilon \simeq \text{Re}(\tilde{E}_0^{(0)}) - \hbar\omega_0 g$ y $\varepsilon \simeq \text{Re}(\tilde{E}_0^{(1)}) + \hbar\omega_0 g$ se tienen resonancias que se manifiestan

como picos tanto en la transmitancia elástica (sin emisión de fonones) como en la transmitancia inelástica (con la emisión de un fonón). Estos picos pueden aproximarse por:

$$1) \text{ para } \varepsilon \simeq \text{Re}(\tilde{E}_0^{(0)}) - \hbar\omega_0 g \simeq E_0 - eV/2 - \left(\frac{V_L^2}{V} + \frac{V_R^2}{V} \right) - \hbar\omega_0 g,$$

$$T_{R \leftarrow L}^{(0,0)} = \frac{4\Gamma_L^{(0)}\Gamma_R^{(0)}}{[\varepsilon - (\text{Re}(\tilde{E}_0^{(0)}) - \hbar\omega_0 g)]^2 + [\Gamma_L^{(0)} + \Gamma_R^{(0)} + (\Gamma_L^{(1)} + \Gamma_R^{(1)})g]^2}, \quad (41)$$

$$T_{R \leftarrow L}^{(1,0)} = \frac{4\Gamma_L^{(0)}\Gamma_R^{(1)}g}{[\varepsilon - (\text{Re}(\tilde{E}_0^{(0)}) - \hbar\omega_0 g)]^2 + [\Gamma_L^{(0)} + \Gamma_R^{(0)} + (\Gamma_L^{(1)} + \Gamma_R^{(1)})g]^2}; \quad (42)$$

$$2) \text{ para } \varepsilon \simeq \text{Re}(\tilde{E}_0^{(1)}) + \hbar\omega_0 g \simeq E_0 + \hbar\omega_0 - eV/2 - \left(\frac{V_L^2 + V_R^2}{V} \right) + \hbar\omega_0 g,$$

$$T_{R \leftarrow L}^{(0,0)} = \frac{4\Gamma_L^{(0)}\Gamma_R^{(0)}}{[\varepsilon - (\text{Re}(\tilde{E}_0^{(1)}) + \hbar\omega_0 g)]^2 + [(\Gamma_L^{(0)} + \Gamma_R^{(0)})g + \Gamma_L^{(1)} + \Gamma_R^{(1)}]^2}, \quad (43)$$

$$T_{R \leftarrow L}^{(1,0)} = \frac{4\Gamma_L^{(0)}\Gamma_R^{(1)}g}{[\varepsilon - (\text{Re}(\tilde{E}_0^{(1)}) + \hbar\omega_0 g)]^2 + [(\Gamma_L^{(0)} + \Gamma_R^{(0)})g + \Gamma_L^{(1)} + \Gamma_R^{(1)}]^2} \quad (44)$$

donde se supone $g \ll 1$ y se desprecian correcciones en las energías de resonancia de orden $\hbar\omega_0 g^2$, los diferentes Γ son funciones de la energía ε .

Notemos que de no tener interacción con los fonones tendríamos una única resonancia para $\varepsilon \simeq \text{Re}(\tilde{E}_0^{(0)})$. Una característica importante de estas resonancias es que los picos en las transmitancias tienen un ancho finito debido a la probabilidad no nula de tunear fuera del pozo. Este ancho está relacionado con el tiempo de vida medio del estado resonante. Si los diferentes Γ son aproximadamente constantes en función de la energía ε , se tienen formas Lorentzianas para los picos en las transmitancias. En lo que se conoce como aproximación de banda ancha se supone que los distintos Γ son constantes en función de la energía. Es importante notar que las expresiones obtenidas para las transmitancias son exactas para el modelo considerado y no se ha recurrido a la aproximación de banda ancha [18].

A partir de las expresiones (41) y (42) puede verse que para la primera resonancia,

los picos en las transmitancias elástica e inelástica tienen el mismo ancho $A = \Gamma_L^{(0)} + \Gamma_R^{(0)} + (\Gamma_L^{(1)} + \Gamma_R^{(1)})g$. Este ancho tiene dos contribuciones. Por un lado la tasa de escape (por \hbar) desde el estado fundamental resonante en el pozo hacia los cables izquierdo y derecho en el canal sin fonones ($\Gamma_L^{(0)} + \Gamma_R^{(0)}$) y por otra parte la tasa de escape desde el estado fundamental hacia el canal con un fonón. Esta última contribución es igual a la tasa de escape desde el estado excitado en el pozo (1 electrón +1 fonón) hacia los cables ($\Gamma_L^{(1)} + \Gamma_R^{(1)}$) reducida en un factor g debido a que el electrón debe pasar primero al estado excitado emitiendo un fonón. Una interpretación similar puede hacerse para la segunda resonancia (43-44) teniendo en cuenta que el nivel resonante en este caso es el excitado.

Hasta el momento hemos obtenido expresiones para las probabilidades de transmisión. Experimentalmente no se miden directamente estas cantidades sino la dependencia de la corriente de tunelamiento con el voltaje aplicado (llamadas características I - V del dispositivo de tuneleo resonante). Sin embargo, la corriente total I puede obtenerse sumando las probabilidades de tuneleo sobre las distribuciones electrónicas en el emisor y en el colector. La corriente total es una suma de una corriente elástica I_{el} (sin emisión de fonones durante el proceso de scattering) y de una inelástica I_{in} (con la emisión de un fonón). Concretamente, utilizando el formalismo de Landauer-Büttiker se tienen las siguientes expresiones para las componentes elástica e inelástica de la corriente total [19] :

$$I_{el} = (2e/h) \int [T_{R \leftarrow L}^{(0,0)} f_L(\varepsilon) - T_{L \leftarrow R}^{(0,0)} f_R(\varepsilon)] d\varepsilon, \quad (45a)$$

$$I_{in} = (2e/h) \int [T_{R \leftarrow L}^{(1,0)} f_L(\varepsilon) - T_{L \leftarrow R}^{(1,0)} f_R(\varepsilon)] d\varepsilon; \quad (45b)$$

donde $f_L(\varepsilon)$ y $f_R(\varepsilon)$ son las funciones de Fermi para los cables izquierdo y derecho. Para $k_B T \rightarrow 0$ y alto voltaje podemos despreciar la corriente producida por los

portadores que se mueven del cable derecho hacia el izquierdo obteniendo:

$$I_{el} = (2e/h) \int_0^{\varepsilon_F} T_{R \leftarrow L}^{(0,0)} d\varepsilon, \quad (46a)$$

$$I_{in} = (2e/h) \int_0^{\varepsilon_F} T_{R \leftarrow L}^{(1,0)} d\varepsilon, \quad (46b)$$

donde ε_F es la energía de Fermi de los electrones en los cables.

2.3.2 Resultados

A continuación se muestran algunos resultados obtenidos para las transmitancias y corrientes con el modelo anterior. Primero necesitamos estimar un valor para el parámetro de salto V . El mismo se elige de manera de reproducir la masa efectiva experimental para los electrones en AsGa (véase por ejemplo Ref. [6] pág.89) como se explica a continuación. Teniendo en cuenta que la relación de dispersión para electrones en una cadena tight-binding, con las energías referidas al fondo de la banda, está dada por (ver la ecuación (16)):

$$E = 2V(\cos(ka) - 1)$$

donde a es la constante de red y k es el vector de onda. Desarrollando en serie de Taylor esta última expresión se tiene,

$$E \cong -(ka)^2 V.$$

Dado que en la base de la banda vale la aproximación de banda parabólica

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$$

donde m^* es la masa efectiva del electrón para el pozo, que corresponde al valor $m^* = 0.067 m_e$ (m_e es la masa del electrón), tenemos la siguiente expresión para V ,

$$V = -\frac{\hbar^2}{2m^* a^2}. \quad (47)$$

Usando el valor experimental para el parámetro de red $a = 2.825 \text{ \AA}$ se obtiene para V el valor $-7,150 \text{ eV}$. La energía $\hbar\omega_0$ se toma igual a 36 meV como corresponde a la situación experimental para fonones LO en AsGa [4], ε_F se elige igual a 20 meV . Valores típicos para la intensidad de la interacción electrón-fonón son $0,1 < g < 0,5$

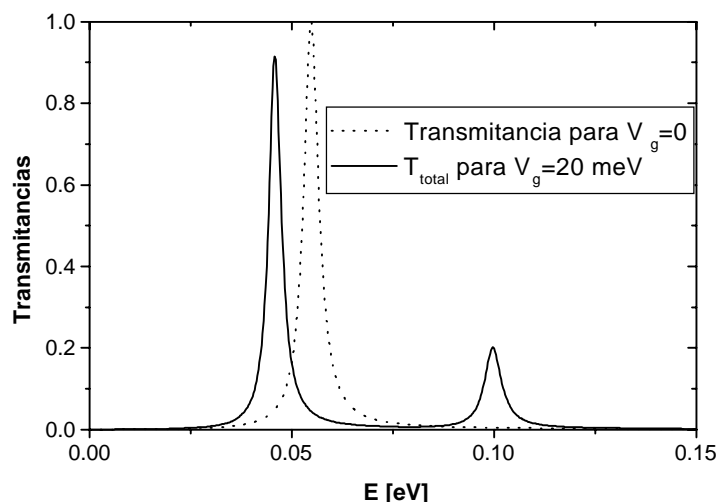


Figura 2.6. Transmancia total para $V_g = 20\text{meV}$ (línea llena) y transmancia sin interacción electrón-fonón (curva punteada) en función de la energía del electrón incidente, para $V_L = V_R = 300\text{ meV}$.

[20] . La energía del estado resonante E_0 se toma igual a 80 meV que corresponde a un pozo de unas 20 constantes de red de longitud.

En la figura 2.6 se muestra una curva de transmancia total (curva llena) en función de la energía de los electrones incidentes, como referencia (curva punteada) se muestra la transmancia para el caso en que no se tiene interacción electrón-fonón ($V_g = 0$). En esta figura puede verse que la posición del pico resonante principal se ve desplazada con respecto al caso en que no se tiene interacción electrón-fonón ($V_g = 0$). Este corrimiento, como puede verse a partir de las ecuaciones (41-42), es igual a $V_g^2/\hbar\omega_0$. También se observa la aparición de un segundo pico (curva llena), más débil, para una energía mayor que la del primero. La separación entre ambos picos es de aproximadamente $\hbar\omega_0 + 2V_g^2/\hbar\omega_0$.

La figura 2.7 muestra nuevamente la curva de transmancia total (curva llena)

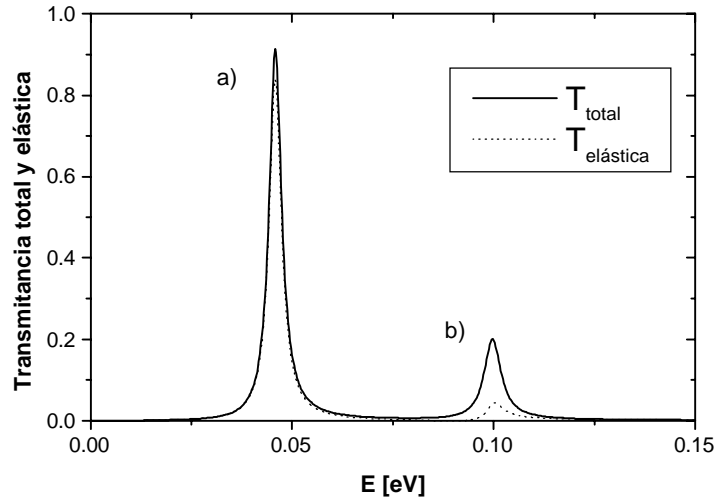


Figura 2.7. Transmitancia total y transmitancia elástica (sin emisión de fonones) vs. energía de los electrones incidentes para $V_g = 20\text{meV}$ y $V_L = V_R = 300\text{meV}$.

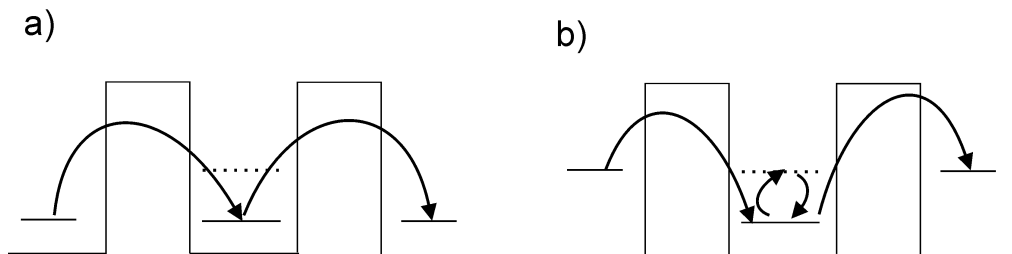


Figura 2.8. Las figuras a) y b) representan los procesos que originan el primero y segundo pico respectivamente en la transmitancia elástica. Los niveles en línea llena a cada lado de la doble barrera corresponden a las energías polarónicas antes y después del proceso de scattering. En el pozo se esquematiza el nivel fundamental y el excitado (1 electrón + 1 fonón).

en función de la energía de los electrones incidentes, también se muestra la curva correspondiente a la transmitancia elástica (curva punteada). Vemos que ambos picos tienen contribuciones elásticas e inelásticas debido a la interacción electrón-fonón. En el primer pico estas curvas prácticamente coinciden, siendo la transmitancia elástica levemente menor que la transmitancia total. En cambio, el segundo pico en la transmitancia total tiene una contribución mayormente inelástica. El primer pico en la transmitancia elástica (sin emisión de fonones durante el proceso de scattering) corresponde al caso en que la energía del electrón incidente, ε , es igual a la energía del estado polarónico fundamental en el pozo. El segundo pico se tiene cuando ε es igual a la energía del estado polarónico excitado en el pozo (electrón + 1 fonón), sin embargo no hay una emisión neta de fonones. El proceso puede interpretarse pensando que un electrón tunela a través del sistema de doble barrera emitiendo y absorbiendo un fonón en un proceso virtual. Estos procesos que dan lugar al primero y segundo pico en la transmitancia elástica se esquematizan en las figuras 2.8 a) y 2.8 b) respectivamente.

En la figura 2.9 se grafica la transmitancia inelástica. El primer pico en esta transmitancia se produce cuando ε es igual a la energía del primer estado resonante en el pozo. El mismo puede entenderse pensando que el acople electrón-fonón en el pozo permite al electrón tunear emitiendo un fonón. El pico correspondiente a la segunda resonancia se tiene cuando ε es igual a la energía del estado polarónico excitado en el pozo (electrón + 1 fonón) y el electrón tunela hacia la derecha emitiendo un fonón. En ambos casos parte de la energía cinética del electrón se transfiere a los fonones. Estos procesos se representan en las figuras 2.10 a) y 2.10 b) respectivamente, los niveles en línea llena a ambos lados de la doble barrera corresponden a energías polarónicas (que se conservan durante el proceso). Los niveles a la derecha de la doble barrera en línea de trazos corresponden a la energía electrónica final.

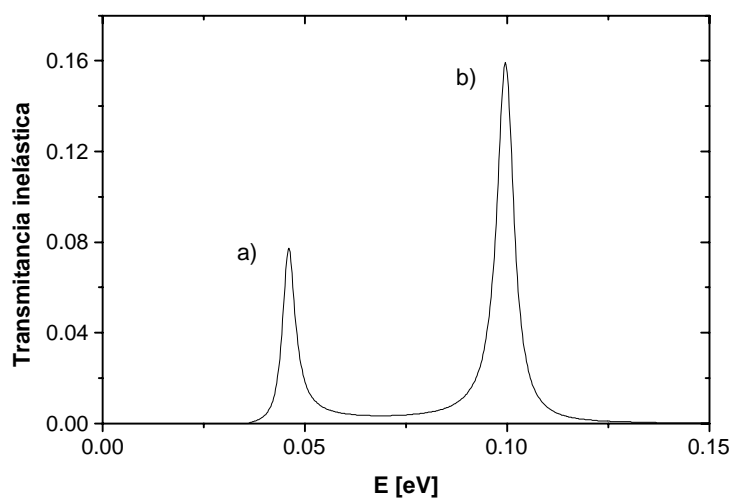


Figura 2.9. Transmitancia inelástica en función de la energía de los electrones incidentes para $V_g = 20\text{meV}$ y $V_L = V_R = 300\text{meV}$. Notar el cambio de escala en el eje vertical.

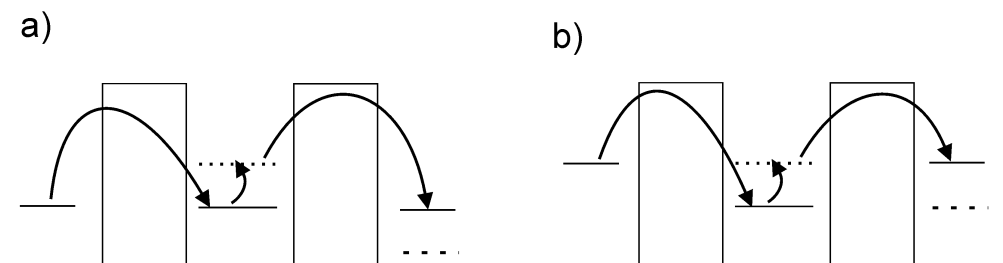


Figura 2.10. Los esquemas mostrados en a) y b) representan los procesos que originan el primero y segundo pico en la transmitancia inelástica. Los niveles en línea llena a cada lado de la doble barrera corresponden a las energías polarónicas antes y después del proceso de scattering. Las líneas de trazos a la derecha de la doble barrera corresponden a la energía electrónica final. En el pozo se esquematiza el nivel fundamental y el excitado (1 electrón + 1 fonón).

Si aplicamos ahora un voltaje al sistema, el centro de la banda de los electrones en el cable derecho se reduce en eV y la energía del estado resonante en el pozo se reduce en $eV/2$. En consecuencia, variando el voltaje aplicado al sistema (para una energía de Fermi dada) se observará un comportamiento resonante en las transmitancias cada vez que un estado resonante en el pozo posea una energía en el rango de energías de los electrones incidentes, ver figura 2.11. En presencia de un voltaje aplicado, la condición para la existencia de las resonancias en la transmitancia inelástica es: $\varepsilon + eV - \hbar\omega_0 > 0$, donde ε es la energía del electrón incidente.

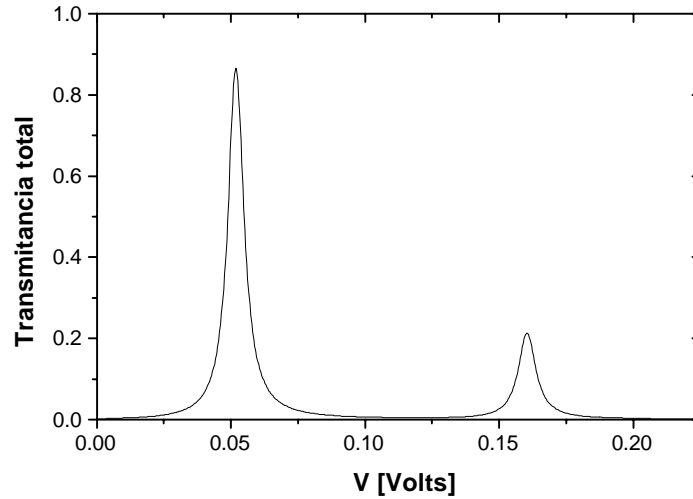


Figura 2.11. Transmitancia total en función del voltaje aplicado a la doble barrera para $V_g = 20$ meV y $V_L = V_R = 300$ meV.

A partir de las expresiones (45) puede obtenerse una curva característica de corriente vs. voltaje para el sistema. Estas curvas se muestran en las figuras 2.12 y 2.13. El segundo pico que se observa en la corriente total a través del sistema (ver Fig.2.12), se aprecia sólo débilmente en la curva de corriente elástica vs. voltaje (ver

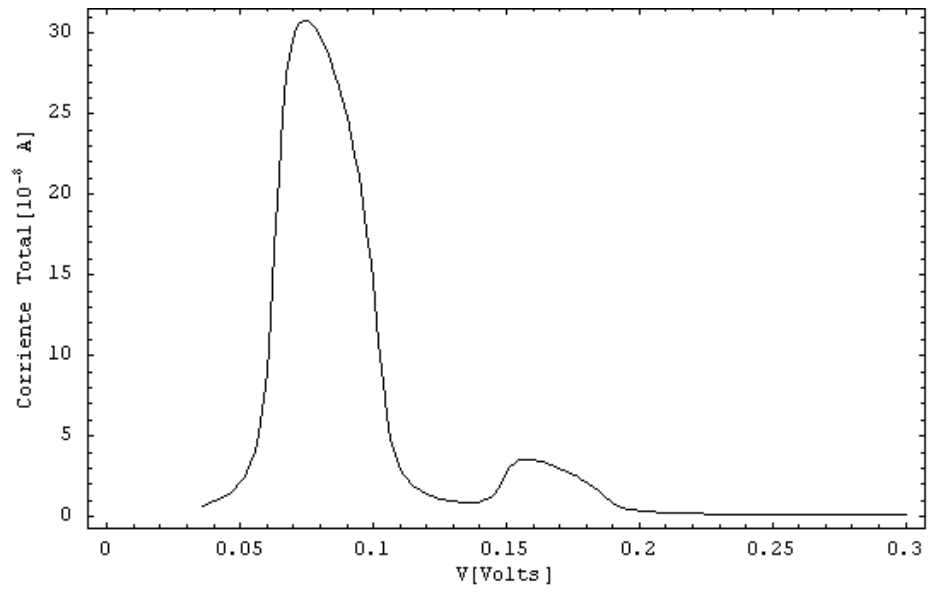


Figura 2.12. Curva de corriente total vs. voltaje para $g = 0, 1$, $\hbar\omega_0 = 36meV$, $Ef = 20meV$.

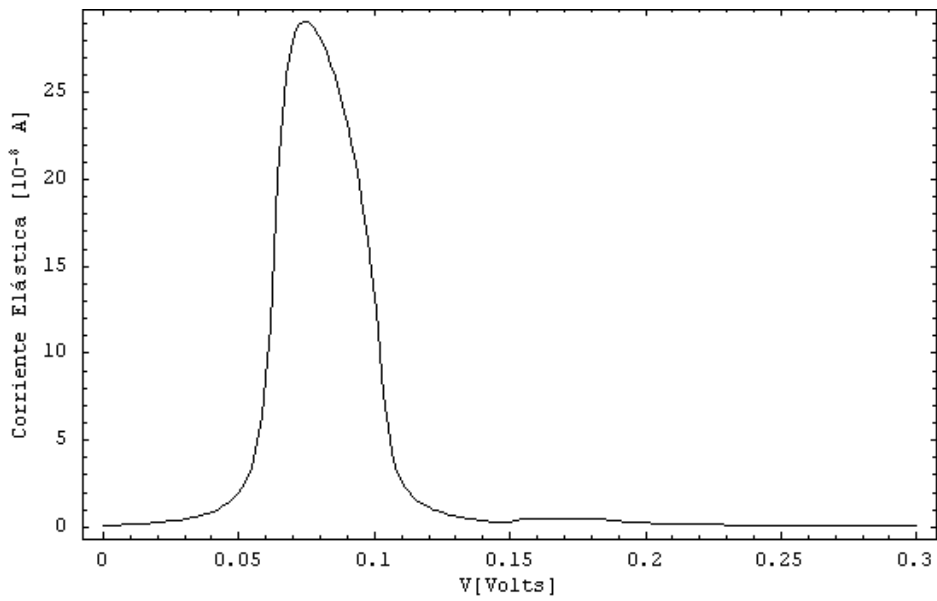


Figura 2.13. Corriente elástica vs. voltaje para $g = 0, 1$, $\hbar\omega_0 = 36meV$, $Ef = 20meV$.

Fig.2.13). En consecuencia, vemos que este pico se debe principalmente al tunelamiento inelástico a través del sistema. Este pico fue observado experimentalmente por primera vez por Goldman, Tsui y Cunningham [4] .

Un detalle a notar es que la separación entre las energías resonantes no es $\hbar\omega_0$ sino de aproximadamente $\hbar\omega_0 + 2V_g^2/\hbar\omega_0$. Esto se debe a que hemos truncado el Hamiltoniano incluyendo sólo los canales con 0 y 1 fonones y dando lugar a una repulsión de niveles. Incluyendo un número mayor de canales puede verse que las energías de los estados resonantes se encuentran equiespaciadas en $\hbar\omega_0$. Para ello, volvamos al modelo representado en la figura 2.4 y, en lugar de efectuar los cálculos quedándonos sólo con las dos primeras filas (canales con 0 y 1 fonones), efectuemos los cálculos incluyendo canales con un número mayor de fonones. En la figura 2.14 se grafica la transmitancia total en función de la energía de los electrones incidentes incluyendo hasta 9 fonones (canales con 0,1,...y 9 fonones) en los cálculos. Se observa ahora la presencia de picos adicionales debidos a resonancias con estados que corresponden a un electrón en el estado fundamental en el pozo más n fonones. Estos picos están espaciados en $\hbar\omega_0$ y van decreciendo en magnitud (sólo se aprecian cuatro picos en la figura). Esta figura fue obtenida resolviendo numéricamente el modelo mediante el programa que se incluye en el apéndice.

En este capítulo se ha modelado en forma simple el tunelamiento resonante a través de una estructura de doble barrera, incluyendo los efectos coherentes de la interacción electrón-fonón en el pozo. Resolviendo el modelo en un espacio truncado, esto es, considerando sólo los canales con 0 y 1 fonones, se obtuvieron soluciones analíticas para las transmitancias. Aunque previamente se han publicado resultados numéricos para este modelo [17] , no se han reportado, a conocimiento del autor, soluciones analíticas para el mismo. Se analizaron las características de las curvas de transmitancia elástica e inelástica en función de la energía de los electrones incidentes

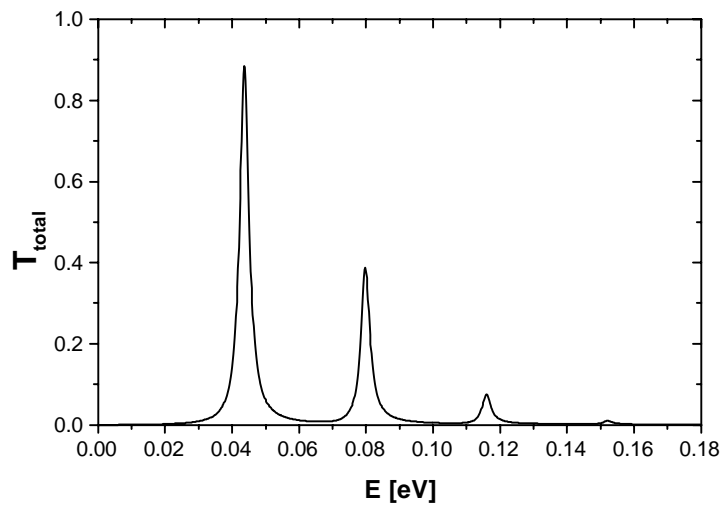


Figura 2.14. Transmitancia total en función de la energía electrónica incidente incluyendo 9 fonones en los cálculos para $V_L = V_R = 300$ meV y $V_g = 20$ meV.

como también las características corriente-voltaje. De esta manera, se ha obtenido una comprensión de los aspectos esenciales del problema. En el capítulo siguiente trataremos de modelar al sistema incluyendo los parámetros geométricos. Esto nos permitirá analizar la optimización de estos parámetros a los efectos de lograr una emisión de fonones LO máxima, como se requiere en un dispositivo SASER como se describió en la introducción.

Capítulo 3

Optimización de los parámetros geométricos

El modelo considerado en el capítulo anterior presenta una forma conceptualmente simple de entender algunos aspectos de la interacción electrón-fonón en una doble barrera. Sin embargo, no incluye algunos efectos como la asimetrización de las barreras y de la función de onda del estado cuasi-ligado en el pozo debido al voltaje aplicado. Esto ocasiona que los parámetros de salto (hopping) efectivos entre los cables y el sitio central sea una cantidad dependiente del voltaje y no una constante como se supuso anteriormente. Además, los hoppings entre el sitio central y los cables tienen una dependencia con la energía del electrón incidente que no se ha considerado hasta el momento. Por otro lado, sería de interés incluir parámetros del sistema como la longitud y altura de las barreras y las dimensiones del pozo. Este capítulo se orienta a modelar el sistema tratando de incluir estos efectos.

3.1 El Modelo

A los efectos de considerar los aspectos mencionados, se modela el sistema incluyendo un número dado de sitios en las barreras y en el pozo. El Hamiltoniano es nuevamente una suma de una contribución electrónica, otra debida a los fonones y un término de interacción electrón-fonón,

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_e + \mathcal{H}_f + \mathcal{H}_{e-f} \quad (48)$$

con

$$\mathcal{H}_e = \sum_j E_j c_j^\dagger c_j - \sum_{j,k} V_{j,k} (c_j^\dagger c_k + c_k^\dagger c_j), \quad (49)$$

donde E_j es la energía diagonal del sitio j y $V_{j,k} = V\delta_{j\pm 1,k}$ son los parámetros de salto. Se supone que la caída de potencial eV es lineal a lo largo de la doble barrera y limitada a la misma. N_L y N_R son los números de sitios en las barreras izquierda y derecha y N_w aquel para el pozo. Las longitudes asociadas con estos números están dadas por $L_i = N_i 2.825\text{\AA}$ ($i = L, R, w$), donde se ha tomado el valor 2.825\AA para la constante de red que corresponde al valor experimental para el AsGa. En este modelo, las barreras se simulan a través del perfil para las energías diagonales E_j ,

$$E_j = \begin{cases} 0, & \text{si } j \leq 0 \\ E_L - \frac{j}{N+1}eV, & \text{si } 1 \leq j \leq N_L \\ -\frac{j}{N+1}eV, & \text{si } N_L + 1 \leq j \leq N_L + N_w \\ E_R - \frac{j}{N+1}eV, & \text{si } N_L + N_w + 1 \leq j \leq N \end{cases}$$

donde $N = N_L + N_w + N_R$. Este perfil se muestra en la figura 3.1. Dado que la

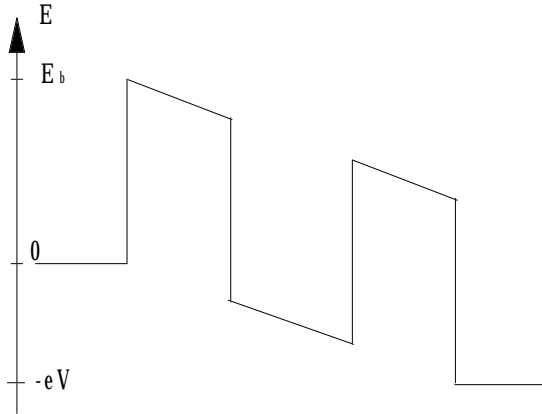


Figura 3.1. Perfil del potencial para las energías diagonales E_j . E_b es la altura de las barreras y eV es la diferencia de potencial aplicada.

interacción más importante entre electrones y fonones en semiconductores polares como

el AsGa involucra fonones longitudinales ópticos (LO), consideramos un único modo de fonones con frecuencia ω_0 . La interacción electrón-fonón está limitada a la región del pozo.

$$\mathcal{H}_f = \hbar\omega_0 b^\dagger b, \quad (50)$$

$$\mathcal{H}_{e-f} = V_g \sum_{j \text{ [pozo]}} c_j^\dagger c_j (b^\dagger + b). \quad (51)$$

Por simplicidad y a los efectos de obtener una estructura mínima en el espacio de Fock restringiremos el problema al caso en que tenemos sólo 0 o 1 fonones y ningún fonón en el pozo antes del proceso de scattering ($k_B T \rightarrow 0$). En la figura 3.2-a) se representa el fondo de la banda de conducción y los dos primeros niveles polarónicos en el pozo. En la figura 3.2-b) se representa esquemáticamente el modelo.

A los efectos de calcular las transmitancias entre los diferentes canales debemos calcular la función de Green entre los sitios ubicados antes y después de la doble barrera (L y R) para los canales adecuados. Los cables en cada uno de los canales pueden eliminarse exactamente introduciendo una auto-energía compleja en los primeros sitios de las cadenas ordenadas, a cada lado de la doble barrera, similarmente a lo realizado para el modelo del capítulo anterior. En consecuencia, las transmitancias entre el canal con cero fonones y los canales con 0 y 1 fonón están dadas por:

$$T_{R \leftarrow L}^{(0,0)}(\varepsilon) = 2\Gamma_L^{(0)}(\varepsilon) \left| G_{0,N+1}^{(0,0)}(\varepsilon) \right|^2 2\Gamma_R^{(0)}(\varepsilon), \quad (52)$$

$$T_{R \leftarrow L}^{(1,0)}(\varepsilon) = 2\Gamma_L^{(0)}(\varepsilon) \left| G_{0,N+1}^{(0,1)}(\varepsilon) \right|^2 2\Gamma_R^{(1)}(\varepsilon), \quad (53)$$

donde $G_{A,B}^{(i,j)}$ denota la función de Green entre el sitio espacial A con i fonones y el sitio espacial B con j fonones y los diferentes Γ se definen como en las ecuaciones (36c-36d). Obtener las funciones de Green, dada la dimensión de la matriz a invertir, puede ser muy costoso numéricamente pues el proceso debe repetirse para cada energía en la que deseemos conocer los coeficientes de transmisión. Por lo tanto, sería conveniente reducir las dimensiones de las matrices involucradas. Para ello se utilizará el procedimiento de decimación que se explica en la sección siguiente.

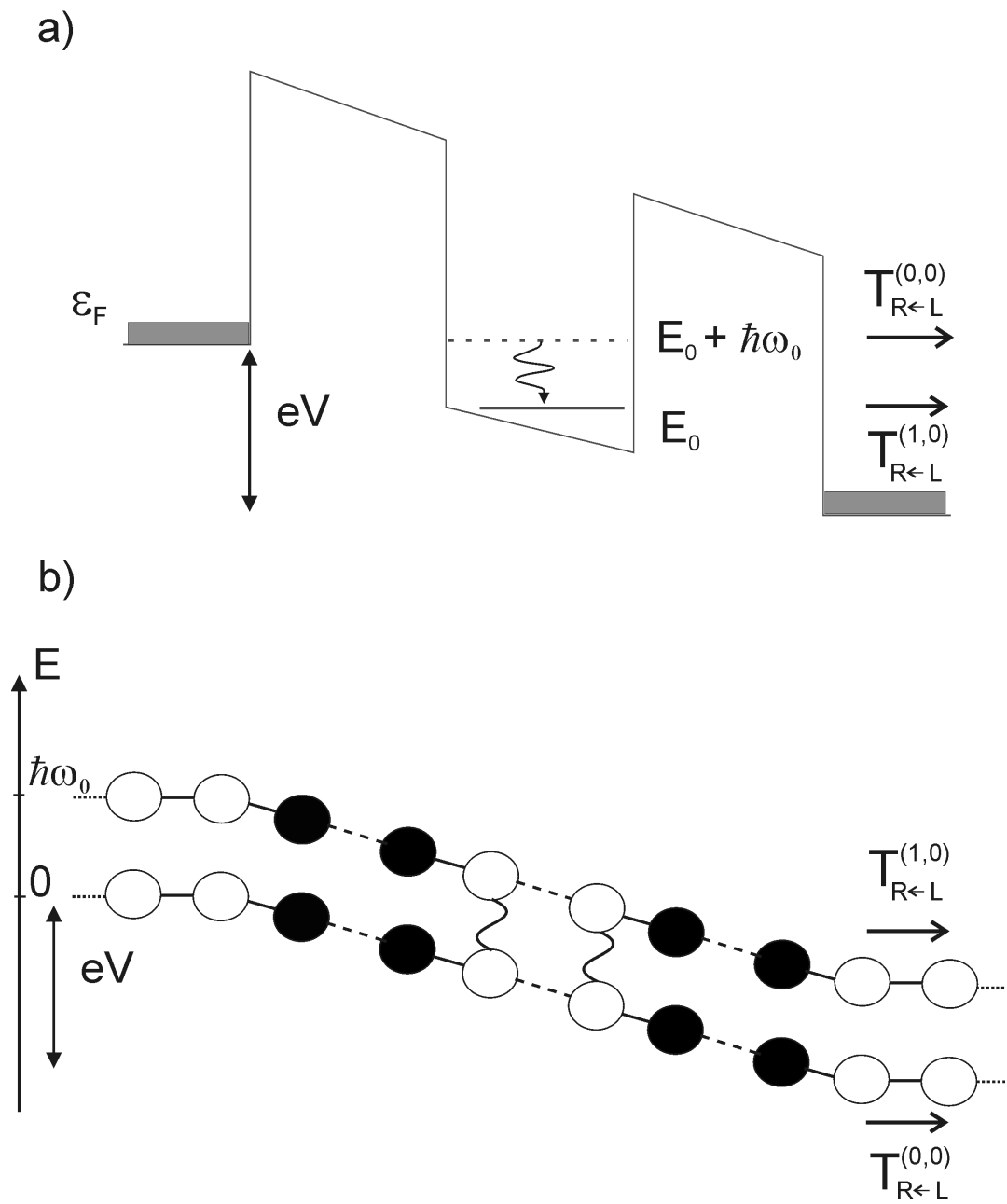


Figura 3.2. En la figura a) se esquematiza el fondo de la banda de conducción como también los niveles en el pozo. En b) se esquematiza el modelo, cada círculo representa un estado base en el espacio de Fock. La fila inferior representa estados localizados en diferentes sitios, los sitios en negro corresponden a las barreras. La fila superior representa los mismos sitios con un fonón. Las líneas representan los elementos no diagonales en el Hamiltoniano.

3.2 Cálculo Numérico de las Transmitancias

A continuación se introducirá un método que utilizaremos para resolver en forma exacta el modelo planteado. Este es el denominado procedimiento de decimación [21] .

Consideremos un sistema de tres sitios 1, 2 y 3 con el siguiente Hamiltoniano:

$$\mathbf{H} = \begin{bmatrix} E_1 & V_{1,2} & 0 \\ V_{2,1} & E_2 & V_{2,3} \\ 0 & V_{3,2} & E_3 \end{bmatrix}. \quad (54)$$

La ecuación de Schödinger independiente del tiempo para este sistema puede escribirse como:

$$\mathbf{H} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix} = \varepsilon \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix}.$$

donde c_1 , c_2 y c_3 son las amplitudes en los distintos sitios. Si estamos interesados solamente en los sitios 1 y 3, podemos eliminar el coeficiente c_2 de la ecuación anterior obteniendo el siguiente sistema de ecuaciones para las amplitudes,

$$[E_1 + V_{1,2}(\varepsilon - E_2)^{-1}V_{2,1}]c_1 + (V_{1,2}(\varepsilon - E_2)^{-1}V_{2,3})c_3 = \varepsilon c_1, \quad (55a)$$

$$(V_{3,2}(\varepsilon - E_2)^{-1}V_{2,1})c_1 + [E_3 + V_{3,2}(\varepsilon - E_2)^{-1}V_{2,3}]c_3 = \varepsilon c_3. \quad (55b)$$

En consecuencia, vemos que la presencia del sitio 2 puede computarse exactamente renormalizando adecuadamente las energías y los parámetros de salto. Puede verse que si los elementos del Hamiltoniano de la ecuación (54) son matrices en lugar de números, las ecuaciones anteriores (55) siguen siendo válidas con los coeficientes c_i reemplazados por vectores cuyos elementos representan las amplitudes en el subespacio correspondiente.

A los efectos de calcular numéricamente los coeficientes de transmisión para un sistema como el esquematizado en la figura 3.2, y en general para un sistema con un número arbitrario de fonones, se utiliza el siguiente esquema de cálculo.

1) En primer lugar se eliminan los cables izquierdo y derecho en cada canal (0, 1, 2, ... fonones). Cada cable eliminado introduce una auto-energía compleja en los

sitios de las barreras contiguos a las cadenas ordenadas. Se denota con $\Sigma_k^{(j)}(\varepsilon)$ a la auto-energía que surge de eliminar el cable izquierdo, $k = L$, o derecho, $k = R$, en el canal con j fonones. Estas auto-energías, $\Sigma_k^{(j)}(\varepsilon)$ con $j = 0, 1, \dots$ y $k = L, R$, están dadas por las ecuaciones (35-36) con $V_L = V_R = V$.

2) Se eliminan los sitios correspondientes a las barreras en cada canal. Como se vio en la sección de funciones de Green, podemos eliminar los sitios de la barrera de uno en uno desde los cables hacia el pozo.

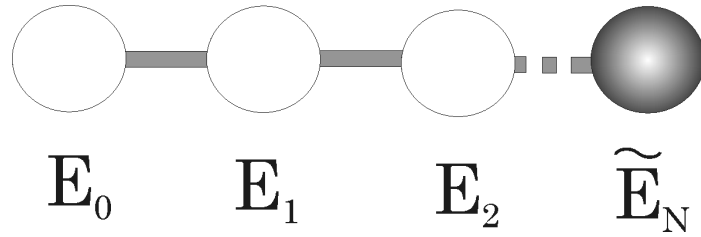


Figura 3.3. Cadena con N sitios. Los parámetros de salto son todos iguales a V.

Así por ejemplo, para la cadena de la figura 3.3 los sitios a la derecha de 0 pueden eliminarse introduciendo una autoenergía:

$$\Sigma_b = \frac{V^2}{\varepsilon - E_1 - \frac{V^2}{\varepsilon - E_2 - \frac{V^2}{\dots - \frac{V^2}{\varepsilon - E_{N-1} - \frac{V^2}{\varepsilon - \widetilde{E}_N}}}}}$$

donde \widetilde{E}_N denota la energía del último sitio en la barrera renormalizada debido a la presencia del cable correspondiente. De esta manera, la energía del primer sitio a cada lado del pozo (izquierda y derecha) en cada canal ve su energía renormalizada debido a las barreras y a los cables.

3) Una vez eliminados los cables y las barreras nos quedan sólo los sitios del pozo, que ahora están renormalizados debido a la presencia de aquellos. Renumeremos los

sitios del pozo de izquierda a derecha como $1, 2, \dots, N_w$, y sea N_f el número de fonones que incorporamos en el modelo. Sea \mathbf{E}_i la matriz correspondiente al subespacio del Hamiltoniano en el sitio i con $0, 1, 2, \dots, N_f$ fonones y $\mathbf{V}_{i,j}$ las matrices que conectan los subespacios i y j . Estas matrices son cuadradas de dimensión $(N_f + 1) \times (N_f + 1)$ y sus elementos tienen la siguiente forma:

$$\begin{aligned} [\mathbf{E}_i]_{\alpha,\beta} &= E_{\alpha,\alpha} \delta_{\alpha,\beta} + V_g (\delta_{\alpha,\beta+1} + \delta_{\alpha,\beta-1}), \\ [\mathbf{V}_{i,j}]_{\alpha,\beta} &= V \delta_{\alpha,\beta} (\delta_{i,j+1} + \delta_{i,j-1}), \end{aligned}$$

donde $\alpha, \beta = 0, 1, \dots, N_f$ y $i, j = 1, 2, \dots, N_w$.

A continuación, se eliminan los sitios 2 a $N_w - 1$. Para ello se utiliza el procedimiento de decimación descrito al comienzo de la sección. Primero se elimina el sitio 2 renormalizando los sitios 1 y 3. A partir de la ecuación (55) tenemos:

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{E}}_1 &= \mathbf{E}_1 + \mathbf{V}_{1,2} (\varepsilon \mathbf{I} - \mathbf{E}_2)^{-1} \mathbf{V}_{2,1}, \\ \tilde{\mathbf{E}}_3 &= \mathbf{E}_3 + \mathbf{V}_{3,2} (\varepsilon \mathbf{I} - \mathbf{E}_2)^{-1} \mathbf{V}_{2,3}, \\ \tilde{\mathbf{V}}_{1,3} &= \mathbf{V}_{1,2} (\varepsilon \mathbf{I} - \mathbf{E}_2)^{-1} \mathbf{V}_{2,3}, \\ \tilde{\mathbf{V}}_{3,1} &= \mathbf{V}_{3,2} (\varepsilon \mathbf{I} - \mathbf{E}_2)^{-1} \mathbf{V}_{2,1}. \end{aligned}$$

De igual manera podemos eliminar ahora el sitio 3 (ahora renormalizado debido al sitio 2) renormalizando los sitios 1 y 4, y así siguiendo hasta eliminar los sitios 2 al $N_w - 1$. En consecuencia se obtiene un Hamiltoniano efectivo para los sitios 1 y N_w en el pozo con la forma:

$$\mathbf{H}_{eff} = \begin{pmatrix} \tilde{\mathbf{E}}_1 & \mathbf{V}_{eff} \\ \mathbf{V}_{eff} & \tilde{\mathbf{E}}_{N_w} \end{pmatrix}. \quad (56)$$

4) Las transmitancias de izquierda a derecha desde el canal con i fonones al canal con j fonones están dadas por [14] [15] :

$$T_{R \leftarrow L}^{(i,j)}(\varepsilon) = 2 \tilde{\Gamma}_L^{(i)}(\varepsilon) |[G_{1,N_w}^R(\varepsilon)]_{i,j}|^2 \tilde{\Gamma}_R^{(j)}(\varepsilon), \quad (57)$$

donde $[G_{1,N_w}^R]_{i,j}(\varepsilon)$ denota la función de Green retardada entre el sitio 1 con i fonones y el sitio N_w con j fonones, y los escapes por izquierda y por derecha están dados por

las partes imaginarias de las energías en el sitio y canal correspondiente:

$$\begin{aligned}\tilde{\Gamma}_L^{(i)}(\varepsilon) &= -\text{Im}\{\tilde{\mathbf{E}}_1]_{i,i}\}, \\ \tilde{\Gamma}_R^{(j)}(\varepsilon) &= -\text{Im}\{\tilde{\mathbf{E}}_{Nw}]_{j,j}\}.\end{aligned}\tag{58}$$

Las funciones de Green $[G_{1,Nw}^R]_{i,j}(\varepsilon)$ pueden obtenerse invirtiendo la matriz $(\varepsilon\mathbf{I}-\mathbf{H}_{eff})$, que es de dimensión $[2.(N_f + 1)] \times [2.(N_f + 1)]$, y tomando la componente (i, j) .

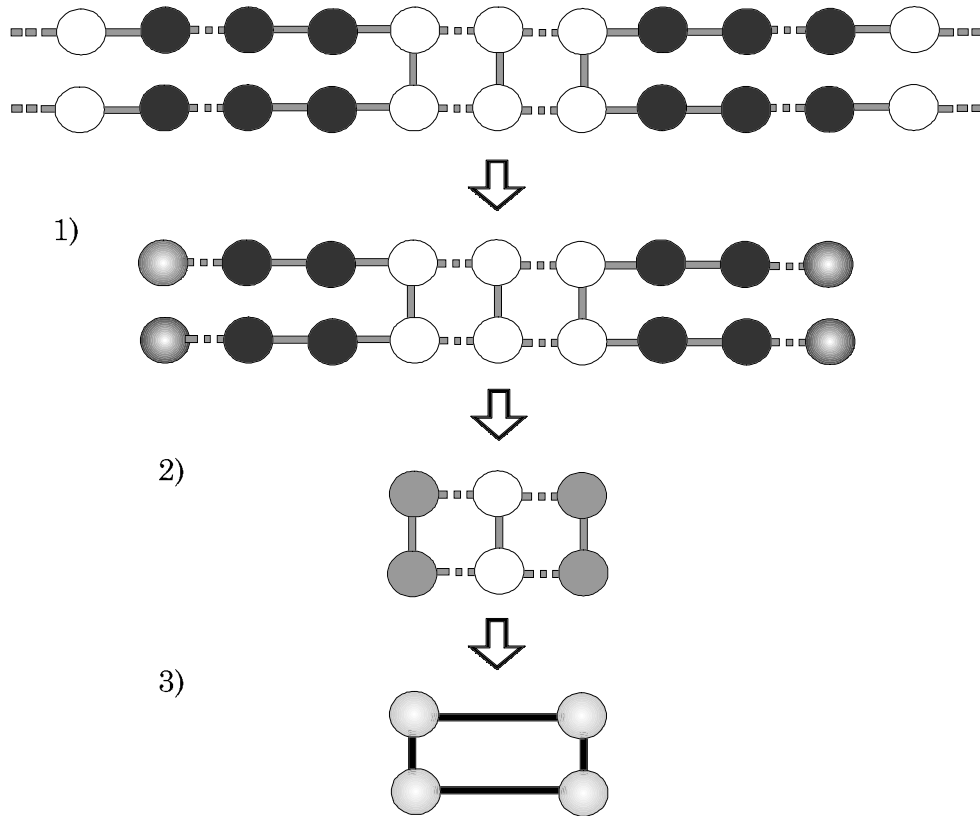


Figura 3.4. Representación esquemática del método de decimación explicado en el texto. La figura superior representa el sistema antes del proceso de decimación. Los sitios en negro representan las barreras. Las figuras restantes representan los pasos 1) a 3) del procedimiento.

Los pasos 1 a 3 del procedimiento descrito para el caso en que se consideran sólo

0 y 1 fonones de esquematiza en la figura 3.4. Una vez calculados los coeficientes de transmisión, las corrientes pueden obtenerse a partir de las ecuaciones (45) efectuando una integración numérica.

3.3 Resultados

A continuación se muestran algunos resultados numéricos obtenidos para este modelo utilizando el método de la sección anterior. En estos resultados, la masa efectiva se toma igual a $0.067 m_e$, la energía de los fonones LO $\hbar\omega_0 = 36$ meV y el parámetro de salto $V = -7.1018$ eV como en el capítulo anterior. El parámetro V_g se elige igual a 10 meV, las alturas de las barreras son de 300 meV y la energía de Fermi entre 10 y 20 meV como corresponde a la situación experimental [4]. El número de sitios en el pozo se elige de manera que se tiene un único nivel electrónico en el pozo en el rango de energías de interés. Para $N_w = 20$ por ejemplo, el estado fundamental para el sistema, sin voltaje aplicado, se encuentra para una energía de aproximadamente 80 meV. Las curvas mostradas en las figuras 3.5 a 3.7 corresponden a $N_L = N_R = 8$, $N_w = 20$ y $\varepsilon_F = 20$ meV.

Nótese que las características cualitativas de estos resultados para los picos principal y de fonón pueden entenderse en base al modelo del capítulo anterior.

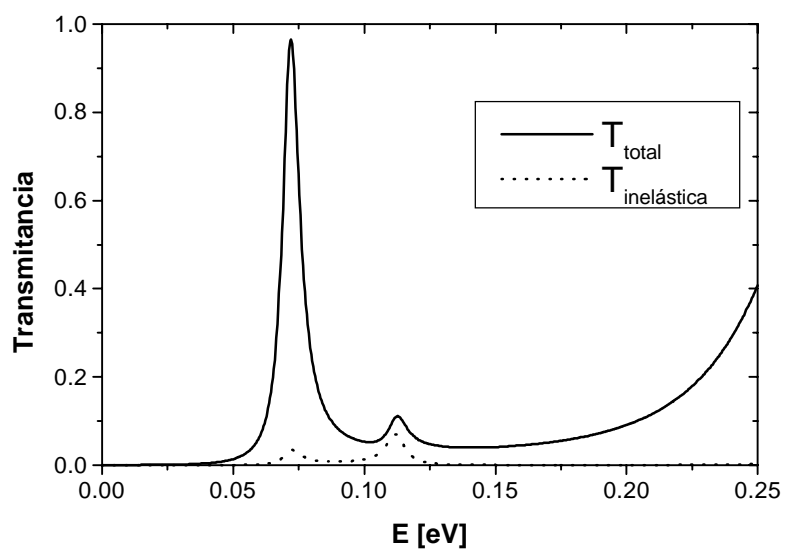


Figura 3.5. Transmitancias total e inelástica en función de la energía de los electrones incidentes.

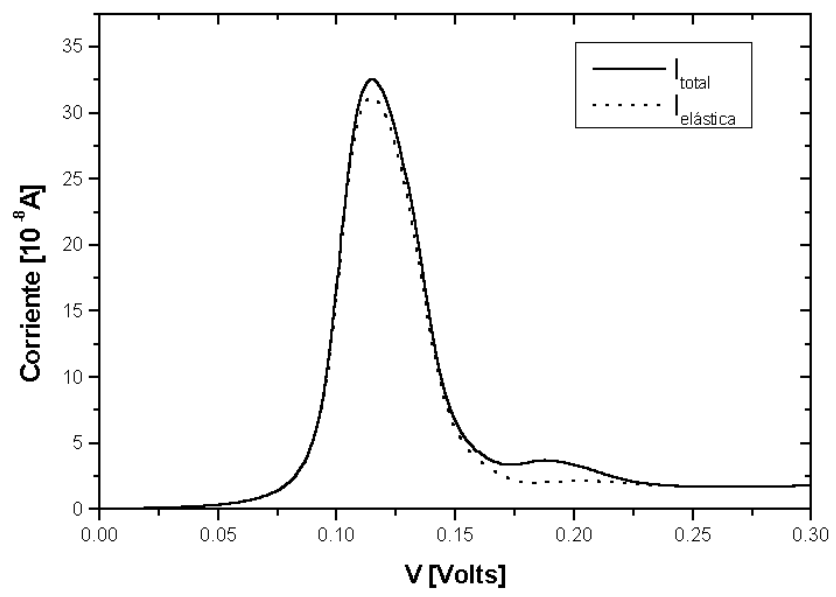


Figura 3.6. Corriente total y corriente elástica en función del voltaje aplicado.

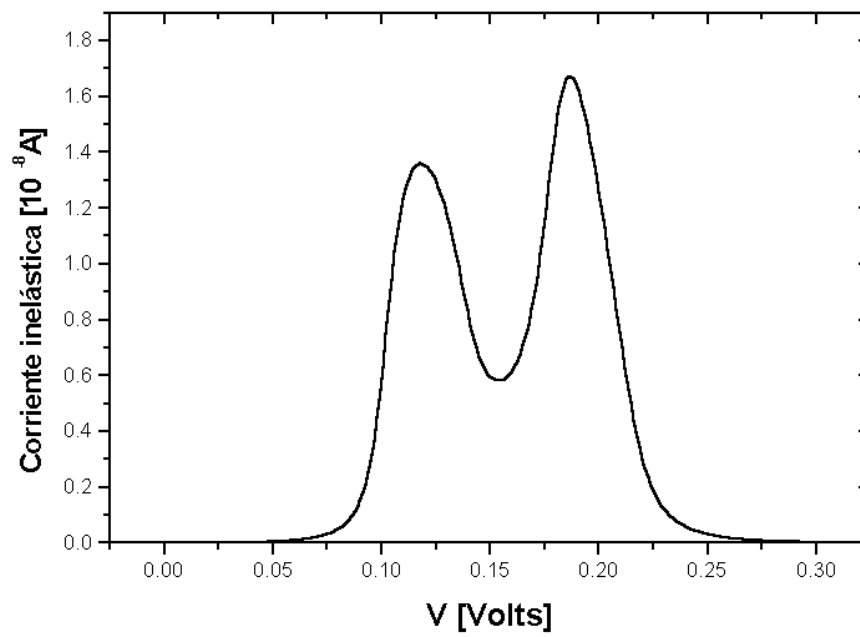


Figura 3.7. Corriente inelástica en función del voltaje.

3.3.1 Optimización de la Emisión de Fonones

Dado que en este modelo hemos incorporado los parámetros geométricos del sistema (longitud y altura de las barreras), resulta interesante analizar si la emisión de fonones puede optimizarse para alguna configuración geométrica particular. Esto podría ser de utilidad para un dispositivo del tipo SASER como se describió en la introducción. En este modelo no consideramos la interacción fonón-fonón que dá lugar al decaimiento de los fonones primarios LO generados. En consecuencia nos concentraremos sólo en la emisión de estos fonones primarios.

Dejando fijas las alturas de las barreras, se toman diferentes valores para el número de sitios N_L y N_R en las barreras izquierda y derecha respectivamente. Para una configuración dada del sistema se obtiene la curva corriente inelástica vs. voltaje y se extrae el valor máximo de la misma. De esta manera para un número N_L dado se puede trazar una curva de corriente inelástica máxima vs. N_R . A continuación se muestran estos resultados [22].

Las figuras 3.8 y 3.9 muestran curvas de I_{in} - V para diferentes valores de N_R . Los picos en estas curvas corresponden a las contribuciones inelásticas al pico principal y al pico satélite respectivamente en la corriente total. Puede observarse que los picos se corren hacia voltajes más altos al incrementar N_R . Esto se debe a que para una estructura asimétrica en presencia de un voltaje aplicado, el nivel electrónico fundamental se desplaza en una cantidad que depende de la longitud de las barreras y del pozo. Este desplazamiento puede aproximarse como la caída de voltaje en el centro del pozo ($-\left(\frac{N_L + N_w/2}{N_L + N_w + N_R}\right) eV$). Luego, si para una dada configuración del sistema y a determinado voltaje el nivel fundamental se encuentra en una dada posición, al alargar la barrera derecha se requerirá un voltaje mayor para llevarlo a la misma posición que antes.

En la figura 3.10 se muestran curvas de I_{in}^{max} vs. N_R para diferentes valores de N_L .

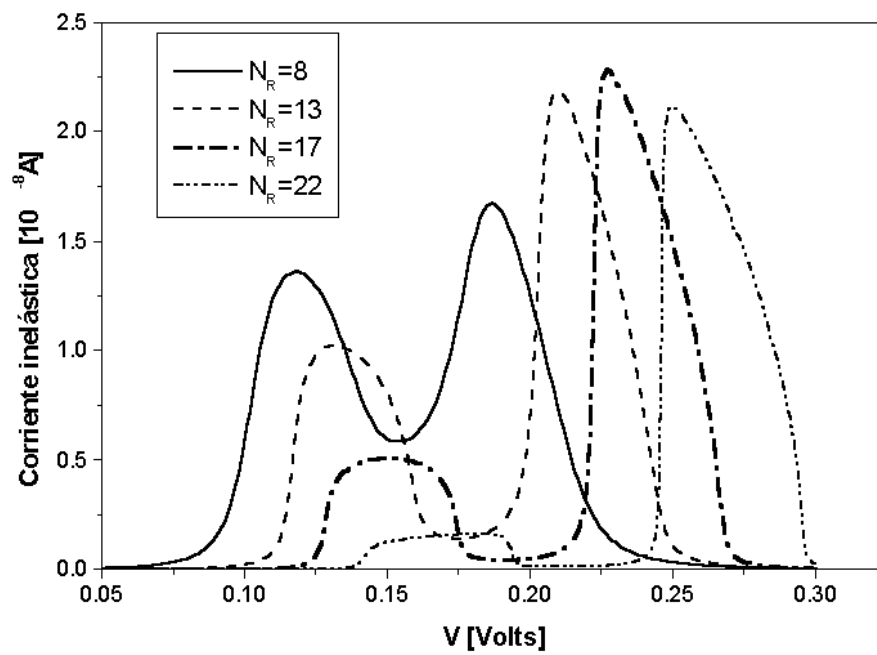


Figura 3.8. Corriente inelástica en función del voltaje aplicado para $N_L = 8$ y diferentes valores de N_R .

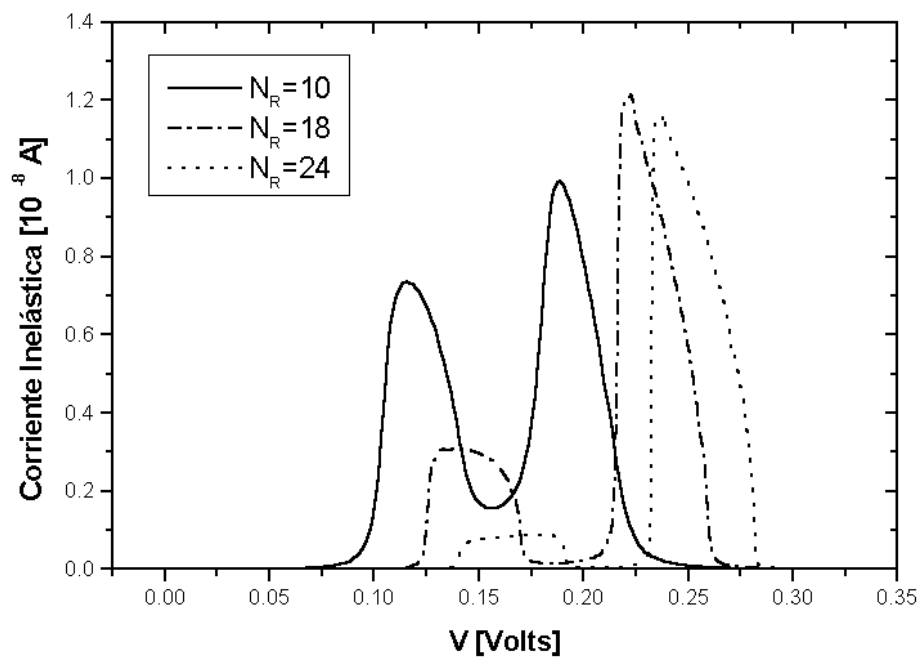


Figura 3.9. Corriente inelástica en función del voltaje aplicado para $N_L = 10$ y diferentes valores de N_R .

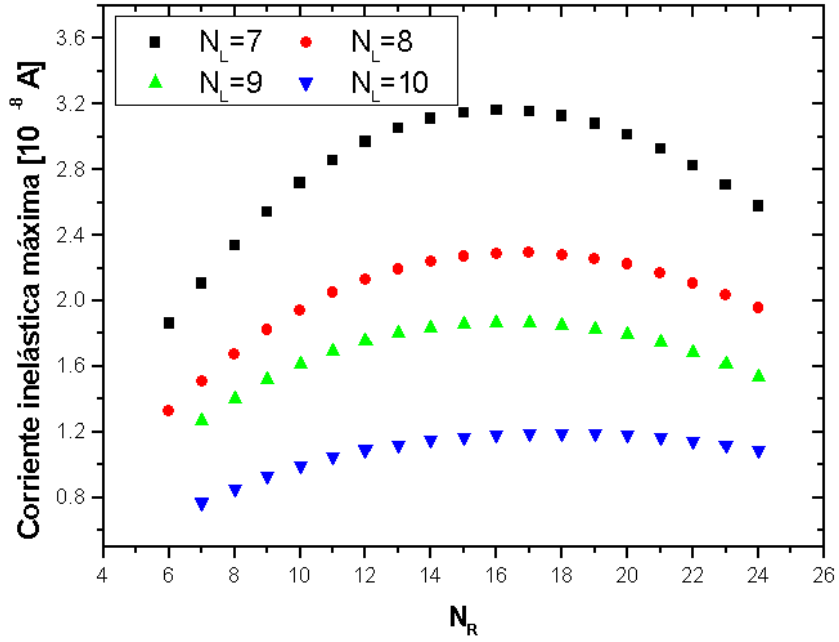


Figura 3.10. Corriente inelástica máxima como función de N_R para $N_w = 20$ y $\varepsilon_F = 20$ meV.

Estas curvas exhiben un máximo para I_{in}^{max} como función de N_R . Las configuraciones óptimas corresponden a estructuras asimétricas con barreras derechas más largas. Esto puede entenderse mediante el siguiente argumento. Incrementando el “tiempo de vida” de los electrones en el pozo se favorece la interacción con los fonones y en consecuencia aumenta la corriente inelástica. Esto puede hacerse eligiendo barreras más largas (o más altas) puesto que de esta forma se disminuye el escape de los electrones en el pozo hacia los cables. A pesar de ello, como un efecto de la asimetría provocada por el voltaje aplicado, el tiempo de vida está controlado principalmente por la barrera derecha (la probabilidad de escapar hacia la derecha es mayor que hacia la izquierda debido a la asimetría originada por el voltaje aplicado). Por otra parte, aumentar la longitud de

las barreras aumenta la reflectividad del dispositivo disminuyendo las corrientes, aquí es la barrera izquierda la que juega el papel más importante. Por lo tanto existe una competencia entre ambos efectos que dá lugar a un máximo en la emisión de fonones.

Incluir sólo 0 y 1 fonones en los cálculos permite estudiar el problema reduciéndolo a su mínima estructura. Esta simplificación es razonable siempre que el “tiempo de vida” de los electrones en el pozo, sea lo suficientemente corto en relación con el tiempo medio que requieren para interactuar con la red y emitir un fonón. Al incluir más fonones en los cálculos, las tendencias mostradas (optimización de la emisión de fonones) no se modifican aunque los valores de las corrientes son superiores (en alrededor de un 15%). Esto puede apreciarse en la figura 3.11 donde se muestran las curvas de corriente inelástica vs. voltaje incluyendo diferentes números de fonones en los cálculos. Puede verse que la curva obtenida permitiendo la emisión de hasta dos fonones prácticamente coincide con las resultantes de considerar un número superior de fonones. En la figura 3.12 se muestran las curvas de corriente inelástica máxima en función de N_R para $N_L = 8$, incluyendo 1 y 2 fonones en los cálculos.

En este capítulo hemos tratado un modelo unidimensional para el sistema. Esto no es una limitación grave dado que si las interfases entre los materiales que componen las barreras y el pozo son perfectas, en el sentido de que en cada región se tiene invariancia traslacional en la dirección perpendicular a la corriente, entonces el problema 3-D puede reducirse a un problema unidimensional para cada vector de onda correspondiente a la solución en las direcciones perpendiculares.

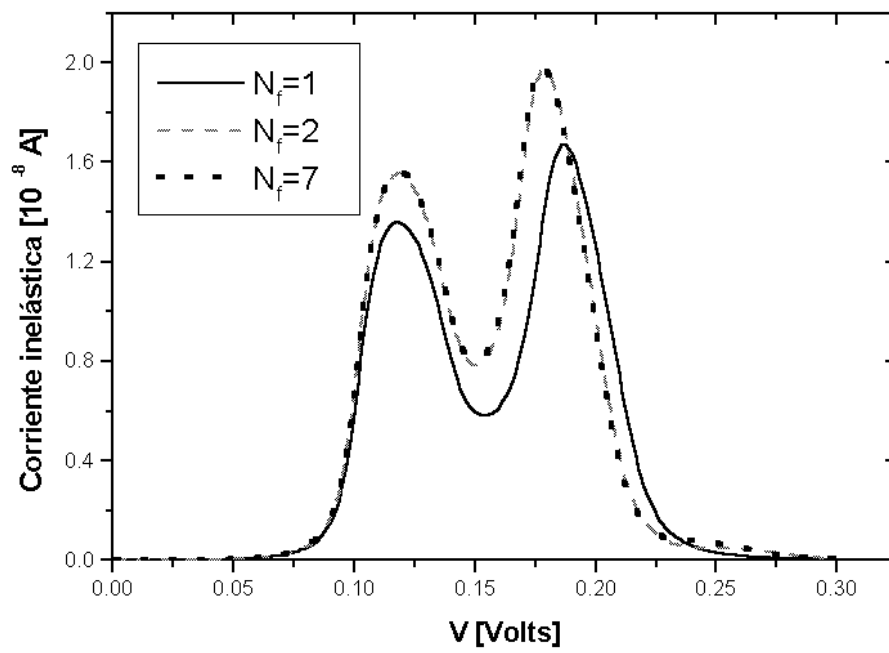


Figura 3.11. Curvas de corriente inelástica en función del voltaje considerando diferentes números de fonones N_f en los cálculos. Estos resultados corresponden a $N_L = N_R = 8$, $N_w = 20$ y $\varepsilon_F = 20$ meV.

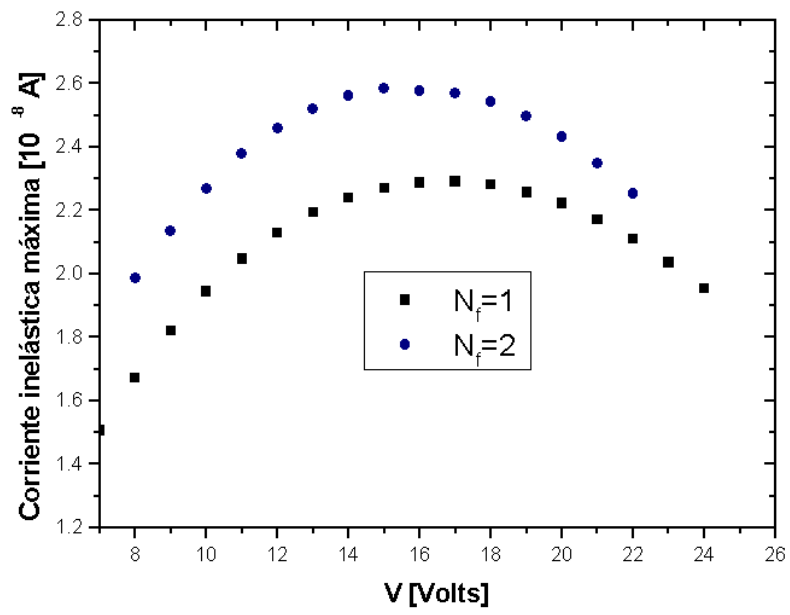


Figura 3.12. Corriente inelástica máxima como función de N_R considerando diferentes números de fonones en los cálculos.

Capítulo 4

Rol de los estados excitados en el tunelamiento resonante

En este capítulo trataremos de analizar el papel de los estados excitados en el tunelamiento resonante a través de un dispositivo de doble barrera como los que hemos venido considerando. Aunque este es un aspecto importante del problema, no se encuentra en la literatura un análisis del mismo. A los efectos de mantener el problema en términos simples, no consideraremos la interacción electrón-fonón en el pozo. El conocer el rol de los estados excitados en el tunelamiento resonante podría ser de utilidad en caso de desearse obtener expresiones analíticas para el problema con interacción electrón-fonón por ejemplo, permitiendo decidir la relevancia de conservarlos en los cálculos. Consideremos el caso en que los parámetros geométricos del sistema se escogen de forma tal que, en el rango de energías de interés, sólo nos importa la resonancia con el estado electrónico fundamental en la doble barrera.

Analicemos un sistema con un Hamiltoniano como el de la ecuación (48) sin incluir los términos que involucran la interacción con los fonones,

$$\mathcal{H} = \sum_j E_j c_j^\dagger c_j - \sum_{j,k} V_{j,k} (c_j^\dagger c_k + c_k^\dagger c_j). \quad (59)$$

Las energías diagonales E_j que simulan la doble barrera son:

$$E_j = \begin{cases} 0, & \text{si } j \leq 0 \\ E_L - \frac{j}{N+1} eV, & \text{si } 1 \leq j \leq N_L \\ -\frac{j}{N+1} eV, & \text{si } N_L + 1 \leq j \leq N_L + N_w \\ E_R - \frac{j}{N+1} eV, & \text{si } N_L + N_w + 1 \leq j \leq N \end{cases}$$

donde $N = N_L + N_w + N_R$.

Separaremos el espacio en tres regiones, la correspondiente a la cadena izquierda (L), a la doble barrera (DB) y a la cadena derecha (R). En la base de sitios, la matriz del Hamiltoniano (que es tridiagonal) puede separarse en bloques correspondientes a cada una de estas regiones,

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} \mathbf{H}_L & \mathbf{V}_{L,DB} & 0 \\ \mathbf{V}_{DB,L} & \mathbf{H}_{DB} & \mathbf{V}_{DB,R} \\ 0 & \mathbf{V}_{R,DB} & \mathbf{H}_R \end{pmatrix}.$$

$\mathbf{V}_{L,DB}$ y $\mathbf{V}_{DB,R}$ tienen un único elemento no nulo que son los que conectan el primer sitio de la cadena izquierda y derecha respectivamente con los primeros en las barreras. El bloque correspondiente a la doble barrera, \mathbf{H}_{DB} , puede diagonalizarse obteniéndose de esa forma N autovalores que pueden escribirse como $E_\alpha = \varepsilon_\alpha - 2|V|$ (así, ε_α está referida al fondo de la banda de los electrones incidentes) ($\alpha = 0, 1, 2, \dots, N-1$, en orden creciente) con sus correspondientes autovectores $|\varepsilon_\alpha\rangle$, que en la base de sitios se escriben:

$$|\varepsilon_\alpha\rangle = \sum_{j=1}^N u_{j,\alpha} |j\rangle \quad (60)$$

Efectuemos ahora un cambio de base de la base de sitios en la doble barrera a esta nueva base de estados $|\varepsilon_\alpha\rangle$. En esta nueva base el bloque \mathbf{H}_{DB} es diagonal. \mathbf{H}_L y \mathbf{H}_R tienen la misma forma que antes y los elementos de matriz que conectan estos bloques con la doble barrera están dados por:

$$\begin{aligned} V_{j,\varepsilon_\alpha} &= V_{\varepsilon_\alpha,j} = \langle j | \mathbf{H}_{DB} | \varepsilon_\alpha \rangle \\ &= V u_{1,\alpha} \delta_{j,0} + V u_{N,\alpha} \delta_{j,N+1} \end{aligned} \quad (61)$$

El sistema resultante en esta nueva base se representa esquemáticamente en la figura 4.1 a). Para valores típicos de los parámetros del sistema como $N_L = N_R = 10$, $N_w = 20$, $V = -7.1018$ eV, barreras con alturas de 300 meV y sin voltaje aplicado, el nivel fundamental tiene una energía (respecto del fondo de la banda de los electrones incidentes) $\varepsilon_0 = 78,6$ meV, el primer excitado $\varepsilon_1 = 199$ meV. Los parámetros de salto entre estos niveles y las cadenas izquierda y derecha son: $V_{1,\varepsilon_0} = V_{N+1,\varepsilon_0} = 51,1$ meV, $V_{1,\varepsilon_1} = -V_{N+1,\varepsilon_1} = 141,3$ meV. Para los restantes estados excitados estos parámetros de salto continúan creciendo en magnitud.

Eliminando los estados ε_α para $\alpha = 1, 2, \dots, N-1$, e incorporando el efecto de los cables como una auto-energía compleja en los primeros sitios de cada cadena ordenada obtenemos un sistema efectivo de tres sitios con el siguiente Hamiltoniano:

$$H_{eff} = \begin{bmatrix} \tilde{E}_0 & V_L & V_{LR} \\ V_L & \varepsilon_0 - 2|V| & V_R \\ V_{LR} & V_R & \tilde{E}_{N+1} \end{bmatrix} \quad (62)$$

donde

$$\begin{aligned} \tilde{E}_0 &= \Sigma_L(\varepsilon) + \sum_{\alpha=1}^{N-1} \frac{V_{0,\alpha}^2}{\varepsilon - \varepsilon_\alpha}, \\ \tilde{E}_{N+1} &= -eV + \Sigma_R(\varepsilon) + \sum_{\alpha=1}^{N-1} \frac{V_{N+1,\alpha}^2}{\varepsilon - \varepsilon_\alpha}, \\ V_L &= V_{0,\varepsilon_0}, \\ V_R &= V_{N+1,\varepsilon_0}, \\ V_{LR} &= \sum_{\alpha=1}^{N-1} V_{0,\alpha} \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_\alpha} V_{\alpha,N+1}, \end{aligned} \quad (63)$$

donde ε está referida al fondo de la banda de los electrones incidentes, Σ_L y Σ_R se definen como en las ecuaciones (21) y (23) y en las primeras dos ecuaciones se ha hecho uso de que $V_{i,\alpha} = V_{\alpha,i}$. El sistema efectivo obtenido se esquematiza en la figura 4.1 b). El parámetro de salto V_{LR} representa una posibilidad de tunelamiento a través de los niveles excitados y para la resonancia con el estado fundamental ε_0 puede despreciarse.

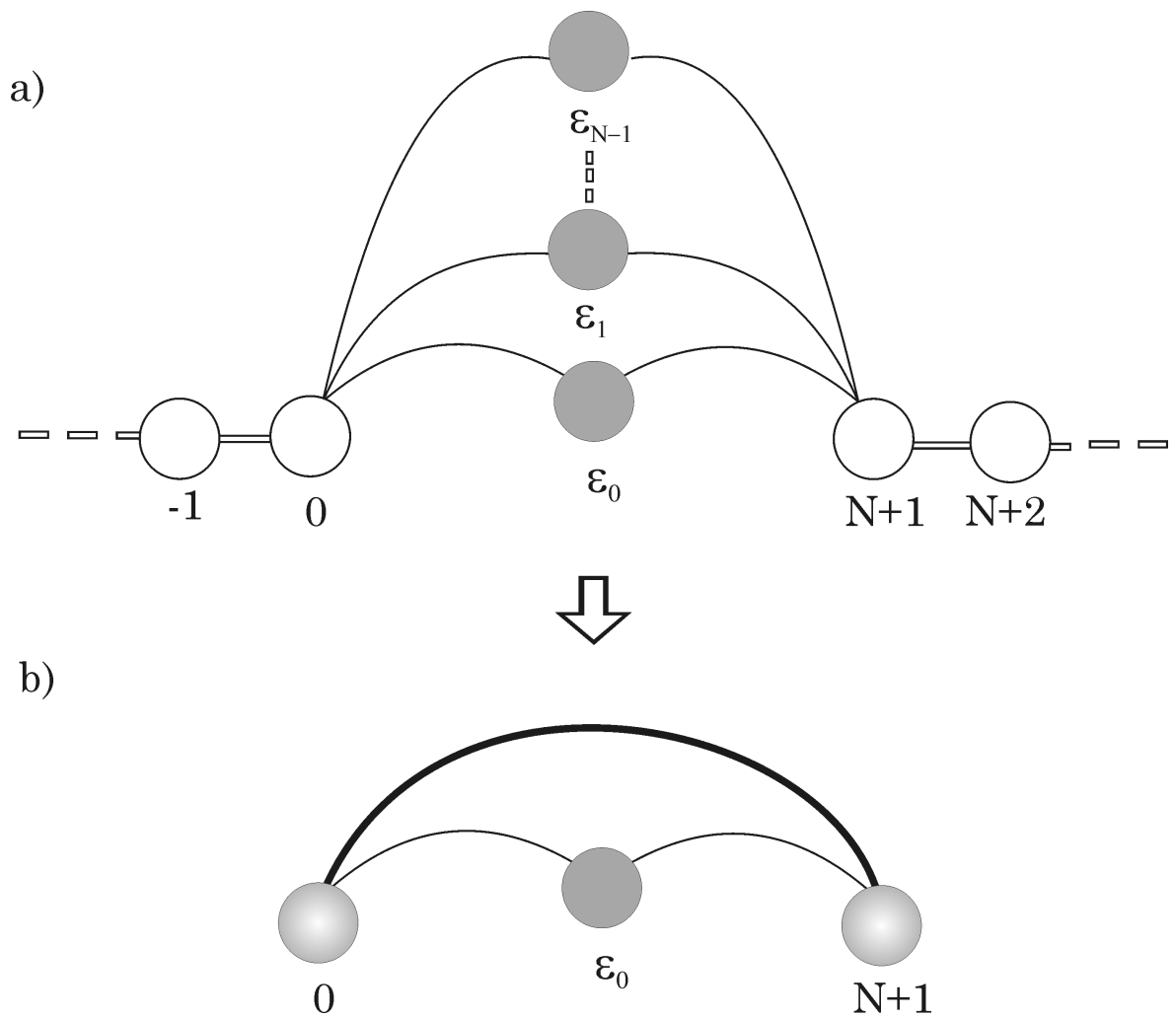


Figura 4.1. En a) se representa esquemáticamente el sistema después de efectuar el cambio de base de la base de sitios en la doble barrera a la base de los estados ε_α . En b) se muestra el sistema efectivo que se obtiene luego de renormalizar las energías incluyendo los efectos de los estados excitados y de los cables.

Esto puede verse teniendo en cuenta que para los estados excitados, $V_{i,\alpha}$ y $V_{\alpha,i}$ pueden tener signos diferentes y la suma tiende a cancelarse. En consecuencia, el efecto más importante de los estados excitados en esta resonancia es renormalizar las energías de los sitios a 0 y $N + 1$. La pregunta ahora es: ¿cómo modifica esto la forma de la resonancia en el coeficiente de transmisión? Para responder esta pregunta, eliminamos los sitios 0 y $N + 1$ obteniendo un sistema efectivo de un único sitio con energía:

$$\tilde{\varepsilon}_0 = \varepsilon_0 - 2|V| + \frac{V_{0,\varepsilon_0}^2}{\varepsilon - \tilde{E}_0} + \frac{V_{\varepsilon_0,N+1}^2}{\varepsilon - \tilde{E}_{N+1}}. \quad (64)$$

Luego, el coeficiente de transmisión de izquierda a derecha para el sistema está dado por:

$$T_{R \leftarrow L}(\varepsilon) = 2\tilde{\Gamma}_L |G_{\varepsilon_0,\varepsilon_0}(\varepsilon)|^2 2\tilde{\Gamma}_R(\varepsilon), \quad (65)$$

donde

$$\tilde{\Gamma}_L(\varepsilon) = -\text{Im}\left(\frac{V_{0,\varepsilon_0}^2}{\varepsilon - 2|V| - \tilde{E}_0}\right), \quad \tilde{\Gamma}_R(\varepsilon) = -\text{Im}\left(\frac{V_{\varepsilon_0,N+1}^2}{\varepsilon - 2|V| - \tilde{E}_{N+1}}\right), \quad (66)$$

la función de Green $G_{\varepsilon_0,\varepsilon_0}(\varepsilon)$ es simplemente $(\varepsilon - 2|V| - \tilde{\varepsilon}_0)^{-1}$.

Analicemos estas expresiones para ε próximo a ε_0 , es decir, cerca de la resonancia para el estado fundamental de la doble barrera. La presencia de los estados excitados hace que la posición del pico para esta resonancia se encuentre a una energía algo menor que ε_0 . El ancho de la resonancia está determinado por $\tilde{\Gamma}_L$ y $\tilde{\Gamma}_R$. $\tilde{\Gamma}_L$ está dado por:

$$\tilde{\Gamma}_L(\varepsilon) = \frac{V_{\varepsilon_0,N+1}^2}{[\varepsilon - 2|V| - (\sum_{\alpha=1}^{N-1} V_{0,\alpha} \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_\alpha} V_{\alpha,0} + \text{Re}(\Sigma_L(\varepsilon)))]^2 + [\text{Im}(\Sigma_L(\varepsilon))]^2} \text{Im}(\Sigma_L(\varepsilon))$$

puesto que $\text{Re}(\Sigma_L(\varepsilon)) \simeq -|V|$ ($\varepsilon \ll |V|$) y que $\text{Im}(\Sigma_L(\varepsilon)) \ll \text{Re}(\Sigma_L(\varepsilon))$, vemos que el primer factor en el segundo miembro de esta expresión es aproximadamente,

$$\frac{V_{\varepsilon_0,N+1}^2}{\left[-2|V| + \left(|V| + \sum_{\alpha=1}^{N-1} \frac{V_{0,\alpha}^2}{\varepsilon - \varepsilon_\alpha}\right)\right]^2}.$$

La suma sobre los estados excitados que aparece en el denominador, es siempre negativa ($E_j > \varepsilon \simeq \varepsilon_0$, $j = 1, 2, \dots, N-1$) y, para los valores típicos tomados para los parámetros del sistema, es del mismo orden de magnitud que V . Un análisis similar vale para $\tilde{\Gamma}_R$.

Por lo tanto, vemos que de considerar sólo el estado fundamental en nuestros cálculos obtendríamos resultados que pueden diferir mucho del resultado exacto, obteniéndose resonancias mucho más angostas. Esto se aprecia claramente en la figura 4.2 donde se muestran los resultados numéricos obtenidos para la transmitancia en función de ε reteniendo los primeros n estados del pozo. $n = 1$ corresponde a considerar el fundamental y ninguno de los excitados. Para $n = 40$ se reobtiene el resultado exacto, que coincide con el obtenido mediante el programa de cálculo numérico utilizado en el capítulo anterior para $V_g = 0$. Allí puede verse que los estados excitados determinan mayormente el ancho de la resonancia; sin embargo, no afectan el valor de pico de las mismas y sólo afectan levemente su posición.

Este es un efecto en cierta medida sorprendente, dado que uno esperaría que la contribución de los estados excitados fuese sólo el debido a las colas de las resonancias con los mismos. Si bien este efecto puede notarse en el gráfico anterior (obsérvese la asimetría en las colas del pico resonante, las amplitudes son mayores a la derecha del pico que a la izquierda), es débil y no es el más importante. Cualitativamente, este efecto de “ensanchamiento de la resonancia” puede pensarse que es debido a que los estados excitados en la doble barrera, puesto que poseen amplitudes mayores que el fundamental en las regiones próximas a los cables, actúan favoreciendo el escape a los mismos. En consecuencia aumentan el ancho de la resonancia.

Es en consecuencia relevante considerar los estados electrónicos excitados en los cálculos. Este es un aspecto que a nuestro conocimiento no ha sido analizado previamente en la literatura. Notemos que estos estados virtuales se consideraron exactamente en el procedimiento de cálculo (incluyendo la interacción electrón-fonón) utilizado en el capítulo anterior. Nótese también que en el problema del capítulo anterior (con interacción electrón-fonón) no ocurre lo mismo con los estados con más fonones en el pozo como puede verse en la figura 3.11.

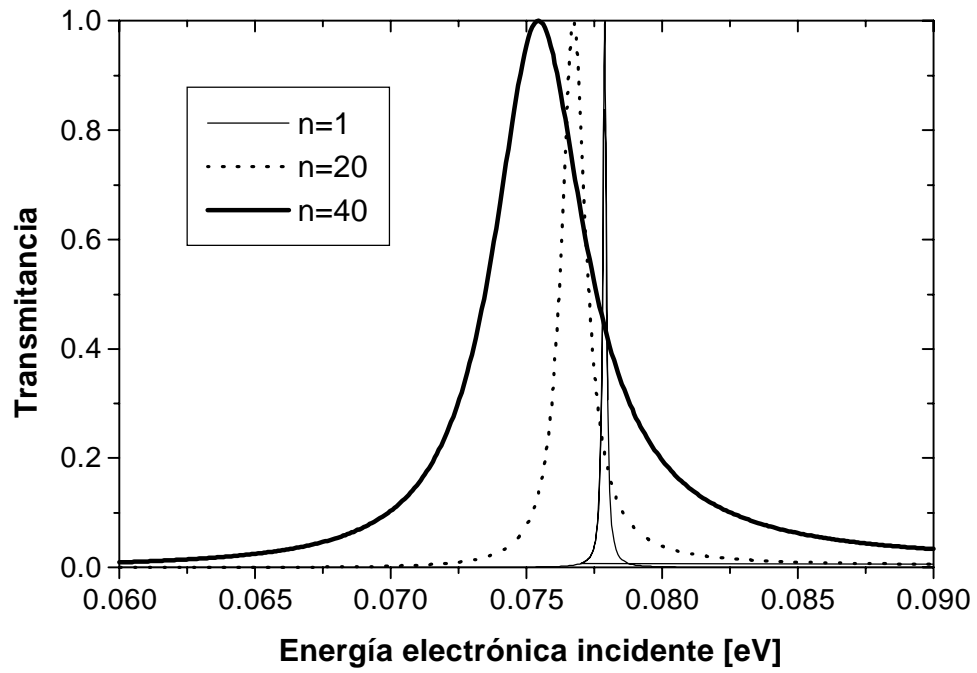


Figura 4.2. Transmitancia en función de la energía electrónica incidente incluyendo los primeros n estados de la doble barrera en los cálculos, para $N_L = N_R = 10$, $N_w = 20$ (sin voltaje aplicado). Con estos valores, $n = 40$ corresponde a la solución exacta.

Capítulo 5

Conclusiones

En este trabajo se han analizado los efectos coherentes de la interacción electrón-fonón en el tunelamiento resonante en estructuras de doble barrera, modelando el espacio de Fock de electrones y fonones en forma simple, desarrollándose el concepto de resonancia en el espacio de Fock y optimizándose las condiciones para la emisión de fonones.

En el capítulo segundo, utilizando un modelo sencillo, se obtuvo una comprensión de los aspectos esenciales de este fenómeno de resonancia geométrica y de efectos coherentes en el espacio de Fock.

En el capítulo tercero se modeló el sistema incorporando los parámetros geométricos (altura y longitudes de las barreras y del pozo). Se exploró el caso en que el estado *fundamental* del pozo actúa como un estado intermedio en el decaimiento de los estados del emisor en los del colector *más* un fonón, en lo que representa una *resonancia en el espacio de Fock de electrones y fonones*. A partir de los resultados obtenidos puede verse que la asimetría en las estructuras de doble barrera juega un papel importante en las características $I_{in}-V$, mostrándose que la emisión de fonones puede incrementarse significativamente eligiendo adecuadamente la longitud de las barreras. En particular, se observa que las configuraciones óptimas corresponden a sistemas con barreras del colector con longitudes que doblan las del emisor.

El modelo unidimensional considerado dará resultados comparables a dispositivos realistas (3-D) en las situaciones:

- 1) cuando ε_F es pequeña, limitando entonces el número de modos transversales;

2) en presencia de un campo magnético intenso aplicado perpendicularmente al plano de las barreras [23] que cuantiza estos modos en niveles de Landau.

En el capítulo cuarto se analizó el efecto de los estados electrónicos excitados en el pozo en la resonancia con el estado fundamental. Como resultado, se mostró que estos estados virtuales juegan un papel importante en la determinación del ancho de la resonancia.

Referencias

- [1] L. Esaki, *Rev. Mod. Phys.* **46** (2), 237 (1974)
- [2] Chang, Esaki y Tsu, *Appl. Phys. Lett.* **24**, 593 (1974).
- [3] E. Corcoran, Tendencias en Materiales: Nanotécnica, *Investigación y Ciencia* **172**, 76 (1991).
- [4] V. J. Goldman, D. C. Tsui, and J. E. Cunningham, *Phys. Rev. B* **36**, 7635 (1987).
- [5] G.D. Mahan, *Many-particle Physics*, Plenum.
- [6] P.Y. Yu, and M. Cardona, *Fundamentals of Semiconductors*, Springer (1996).
- [7] C. Trallero Giner, and F. Comas, *Phys. Rev. B* **37**, 4583 (1988).
- [8] E.V. Anda, S.S. Makler, H.M. Pastawski, and R.G. Barrera, *Braz.J.Phys.* **24**, 330 (1994).
- [9] A. Watson, *New Scientist* **161** (2179), 36 (1999).
- [10] S.S. Makler, M.I. Vasilevskiy, E.V. Anda, D.E. Tuyarot, J. Weberszpil and H.M. Pastawski, *J.Phys.: Condens. Matter* **10**, 5905 (1998).
- [11] S. Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*, Cambridge University Press.
- [12] Eugen Merzbacher, *Quantum Mechanics*, JohnWiley & Sons (1998).
- [13] E.N. Economou, *Green's Functions in Quantum Physics*, Springer Series in Solid-State Sciences **7**, 1979.
- [14] J.L. D 'Amato, and H.M. Pastawski, *Phys. Rev. B* **41**, 7411 (1990).

- [15] D.S. Fisher, and P.A. Lee, *Phys. Rev. B* **23**, 6851 (1981).
- [16] R.P. Feynman, R.B. Leighton, and M. Sands, *Física, Vol III: Mecánica Cuántica*, Fondo Educativo Interamericano (1971).
- [17] J. Bonca and S.A. Trugman, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 2566 (1995).
- [18] N. S. Wingreen, K. W. Jacobsen, and J. W. Wilkins, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 1396 (1988); *Phys. Rev. B* **40**, 11834 (1989).
- [19] H.M. Pastawski, *Phys. Rev. B* **44**, 6329 (1991); **46**, 4053 (1992).
- [20] E.V. Anda, and F. Flores, *J.Phys.: Condens. Matter* **3**, 9087 (1991).
- [21] P. Levstein, H.M. Pastawski and J.L. D 'Amato, *J.Phys.: Condens. Matter* **2**, 1781 (1990).
- [22] L.E.F. Foá Torres, H.M. Pastawski, and S.S. Makler, artículo presentado para los proceedings de la "VI Latin American Workshop on Non-Linear Phenomena", a publicarse en una edición especial de *Physica A* (1999).
- [23] G.S. Boebinger, A.F.J. Levi, S. Schmitt-Rink, A. Passner, L.N. Pfeiffer, and K.W. West, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 235 (1990).

Apéndice: Programas de cálculo numérico

En este apéndice se incluyen los programas de cálculo numérico utilizados. Estos programas están escritos en FORTRAN 90 y corren en Microsoft Fortran PowerStation version 4.0 bajo Windows 95. Los programas que se listan a continuación son tres: el programa “EphoS” utilizado en el capítulo segundo, el programa “ElPho” utilizado en el capítulo tercero y el programa “DB2por2” utilizado en el capítulo cuarto. Las curvas mostradas en los capítulos 2 y 4 demandan un tiempo de cálculo de aproximadamente un minuto en un procesador Pentium MMX de 233MHz. Una curva de corriente inelástica-voltaje para un sistema con $N_L = N_R = 10$, $N_w = 20$, como las mostradas en el capítulo tercero, requieren un tiempo de cómputo de alrededor de 50 minutos en el mismo procesador.

! **PROGRAMA EphoS**: calcula las transmitancias para el modelo utilizado en el capítulo 2 (con interacción electrón-fonón). Estas transmitancias pueden obtenerse en función de la energía de los electrones incidentes o, para una energía fija, en función del voltaje aplicado al sistema.

! Ef : Fermi energy investigated

! E : energy of the polaron

! hv : quantum of phonon energy

! Nt : number of phonon channels

! a_o : lattice constant

! Vg : value of the e-ph interaction

! Vx : hopping parameter ($=\hbar^2/(2m(a_o)^2)$). It gives the energy scale

! Heff : effective Hamiltonian.

! cSR, cSL : complex vectors with the self energies due to the leads.

! T(j,i) : transmittance between channels i and j

! GLR : matrix of the Green's function.

```

PROGRAM EphoS
USE MSIMSLMS
USE MSFLIB
IMPLICIT NONE
REAL, PARAMETER :: PI = 3.141592654
INTEGER, PARAMETER :: Nt = 2
CHARACTER(32) Filename, Filename2, Filename3
INTEGER :: nE, neV, i, j, n, ierror
REAL :: E, Eo, Ef, hv, Vg, Vx, VL, VR, dE, deV, &
& effM, hbar, a_o, he2, eVmx, eVmn, eV, Ttot, a_i
REAL T(Nt,Nt)
COMPLEX :: cIM, cRE
COMPLEX :: SR(Nt), SL(Nt), Heff(Nt,Nt), &
& GLR(Nt,Nt), E_Heff(Nt,Nt)
Filename = 'TransvsE.dat'
Filename2 = 'TransvsV.dat'
Filename3 = 'Paramtrs.dat'
OPEN( 1, FILE = FileName )
OPEN( 2, FILE = FileName2 )
! request for inputs
write(6,*)'Write inputs Ef, hv, nE, Vg, eVmx, neV ?'
READ(5,*) Ef, hv, nE, Vg, eVmx, neV
write(6,*)'Type inputs VL, VR, Eo?'
READ(5,*) VL, VR, Eo
Uw=0; UI=0.3; Ur=0.3
effM=0.067*0.512E4 ! effective mass [eV/c^2]
hbar=1.239E-7/(2*PI)! [eV*s/c]
he2=25.2 !h/e**2 in [kOhms]
a_o=2.825E-10
Vx=-(hbar)**2 / ( 2*effM*a_o**2 ) ! [ eV ]
cRE=(1.,0.)
! the input variables in eV
dE=Ef/nE
deV=(eVmx-eVmn)/neV
E_Heff=0
T =0
! CALL ERSET (0, 0, -1) ! Change the default printing or stopping actions
! when errors of a particular error severity level occur(MSFLIB):
! turn off printing of error messages.

```

```

DO eV=eVmn+deV,eVmx, deV
DO E=0., Ef, dE
  ierror =0 ! Initialize ierror (error handling variable).
  ! define the non-diagonal elements of the layer hamiltonian
  ! E_Heff = E - Heff
  do i=1,Nt-1
    a_i=i
    E_Heff(i,i+1)=-Vg*sqrt(a_i)
    E_Heff(i+1,i)=E_Heff(i,i+1)
  end do
  ! initialize EFFECTIVE HAMILTONIAN variables SR=0, SL=0
  SR = 0
  SL = 0
  ! define the external self-energies.
  do i=1,Nt !pick each phonon state
    !_____self-energies due to the leads
    SL(i)=(VL/Vx)**2 * cself(E- (2*abs(Vx)+(i-1)*hv), Vx)
    SR(i)=(VR/Vx)**2 * cself(E- (2*abs(Vx)+(i-1)*hv-eV ), Vx)
  end do
  do i=1,Nt
    E_Heff(i,i)=E-(Eo + (i-1)*hv - eV/2)-SL(i)-SR(i)
  end do
  CALL LINGC (Nt, E_Heff, Nt, GLR, Nt) ! GLR = (E_Heff)^(-1)
  IF ((IERCD() .EQ. 1).or.(IERCD() .EQ. 2)) CYCLE ! If there is
  ! any problem with the inversion subroutine conclude the E loop.
  ! evaluate the transmittances
  do n=1,Nt !initial phonon channels
    do j=1,Nt !final phonon channels
      T(j,n)= 2.*aimag(SR(j))*( cabs(GLR(j,n)) **2 &
        & *2.*aimag(SL(n))
    end do ! j
  end do !n
  Ttot=0.00
  ! Almacena el valor de Tinel(E).
  do j=1,Nt ! Calcula la transmitancia total de izq. a derecha.
    Ttot= Ttot+T(j,1) !cero fonones incidentes.
  end do
  if(eV .eq. eVmx) then
    WRITE( 1, * ) E, T(2,1), Ttot
  end if
end do

```



```

    end if
  END DO ! E
  WRITE( 2, * ) eV, T(2,1), T(1,1) ! Transmittance between channels 1 and 2, 1 and 1.
END DO ! eV
CLOSE( 1 )
CLOSE( 2 )
OPEN( 3, FILE = FileName3 )
WRITE( 3, * ) ' Ef=', Ef, ' Vx=', Vx, ' a=', a_o
WRITE( 3, * ) ' Vg=', Vg, ' eVmx=', eVmx, ' hv=', hv
WRITE( 3, * ) ' VL=', VL, ' VR=', VR, ' Eo=', Eo
CLOSE( 3 )
CONTAINS
complex function cSELF(E,V)
complex*8 cRE, cIM
real rdisc, E, V
cRE=(1.,0.)
cIM=(0.,1.)
rdisc=(E/2.)**2- V**2
if(rdisc.gt.0.)then
cself=( E/2.-(E/abs(E))*sqrt(rdisc) )*cRE
else
cself=E/2.*cRE - cIM* sqrt(-rdisc)
endif
return
end function cSELF
END PROGRAM EphoS

```

! PROGRAMA EIPho: calcula la corriente inelástica en función del voltaje aplicado al sistema para una configuración geométrica dada..

```

PROGRAM PhononII
USE MSIMSLMS
USE MSFLIB
IMPLICIT REAL*4 (z)
IMPLICIT REAL*4 (A-B,d-H,O-Y)
IMPLICIT COMPLEX*8 (C)
IMPLICIT INTEGER (I-N)
REAL, PARAMETER :: rPI = 3.141592654
INTEGER, PARAMETER :: Nmx=7, Nt=Nmx+1, Nt2=2*Nt, nE=700, neV=300
CHARACTER(32) Filename, Filename2, Filename3
DIMENSION :: SR(Nt,Nt), SL(Nt,Nt), Gi(Nt,Nt),Swap(Nt,Nt), &
& E_H(Nt,Nt),Veff(Nt,Nt), cEHeff(Nt2,Nt2),cGLR(Nt2,Nt2), &
& T(Nt2,Nt2), cSR(Nt),cSL(Nt)
DIMENSION :: Tinel(0:nE), Simpson(1:neV)
! Tinel almacena la curva de Tinelástica=Suma sobre j(=2,Nt)de Tj1.
!para E entre 0 y Ef a un dado eV para luego integrarla y obtener
!Simpson(eV)=Iin/(2e/h).
Filename = 'IinvseV.dat'
Filename2 = 'Paramtrs.dat'
Filename3 = 'IpicovsNR.dat'
OPEN( 3, FILE = FileName3 )
!request for inputs
write(6,*)'Write inputs Ef, hv, Vg eVmn eVmx ? '
READ(5,*) Ef, hv, Vg, eVmn,eVmx
! define the potential at the well and barriers
write(6,*)'Type inputs Lw (>=2), Ll, Lrmin, Lrmax ? '
READ(5,*)Lw,Ll,Lrmin,Lrmax
write(6,*)'Type band off-sets Uw,Ul,Ur ? '
READ(5,*)Uw,Ul,Ur
effM=0.067*0.512E4 ! effective mass [eV/c^2]
hbar=1.239E-7/(2*rPI)! [eV*s/c]
he2=25.2 !h/e**2 in [kOhms]
a_o=2.825E-10
Vx=-(hbar)**2/( 2*effM*a_o**2) ! [ eV ]
cRE=(1.,0.)
! the input variables in eV
nfrequency=4000; nduration=1000 ! BEEPQQ variables.

```

```

!valores para las contantes de discretización para energía y voltaje.
dE=Ef/nE
deV=(eVmx-eVmn)/neV
DO Lr=Lrmin,Lrmax
  IF(Lr .EQ. Lrmax) THEN
    OPEN( 1, FILE = FileName )
  END IF
  Lt=Lw+Ll+Lr
  E_H=0
  Tinel=0.
  Simpson=0.
  DO l=1,neV
    eV=eVmn+l*deV
    Tinel=0.
    DO E=0, Ef, dE
      ierror =0 ! Initialize ierror (error handling variable).
      !define the non-diagonal elements of the layer hamiltonian
      do i=1,Nt-1
        a_i=i
        E_H(i,i+1)=-Vg*sqrt(a_i)
        E_H(i+1,i)=E_H(i,i+1)
      end do
      !define self-energies and effective hoppings (decimation procedure)
      ! initialize EFFECTIVE HAMILTONIAN variables
      ! SR=0, SL=0, Veff=Vx*rUNIT
      SR = 0
      SL = 0
      Veff= 0
      do i=1,Nt
        Veff(i,i)=Vx
      end do

      ! starts ellimination of (Lw-2) internal layers of the well
      do i=2,Lw-1 !pick each slice
        do j=1,Nt !pick a phonon state and evaluate the energy
          E_H(j,j)=E-( 2*abs(Vx)+Uw-eV*(Ll+i)/(Lt+1)+(j-1)*hv )
        end do
        call SUM(Gi,1.,E_H,-1.,SR,Nt)
        CALL LINRG(Nt, Gi, Nt, Gi, Nt) ! Invert Matrix Gi.
      end do
    end do
  end do

```

```

IF ((IERCD() .EQ. 1).or.(IERCD() .EQ. 2)) THEN
  ierror=1
  CYCLE
END IF
! SL=SL+Veff(1/(E-Ei-SR))Veff
  call PROD(Swap,1.,Veff,Gi,Nt)
call PROD(SR,1.,Swap,Veff,Nt) !SR temp. variable
call SUM(SL,1.,SL,1.,SR,Nt)
! SR=(V(i+1)**2)/(E-Ei-SR)
call EQUAL(SR,Vx**2,Gi,Nt)
! Veff=Veff*V(i+1)/(E-Ei-SR)
  call EQUAL(Veff,Vx,Swap,Nt)
end do
IF(ierror.EQ.1) CYCLE ! If the inversion subroutine fails
!(or the results may not be reliable) continue with the next value for E.
! define the external self-energies for the well sites
do i=1,Nt !pick each phonon state
  ! self-energies due to the leads
  cSL(i)=cself(E- (2*abs(Vx)+(i-1)*hv), Vx)
  cSR(i)=cself(E- (2*abs(Vx)+(i-1)*hv-eV ), Vx)
  ! store the leads for future use
  if(i.eq.1) then
    aiSLo=aimag(cSL(i))
    aiSRo=aimag(cSR(i))
  end if
  ! now decimate the barriers
  do j=1,Ll !left barrier from left to right
    cSL(i)=Vx*Vx/(E-(2*abs(Vx)+Ul-eV*j/(Lt+1)+(i-1)*hv)-cSL(i))
  end do !j (left barrier sites)
  do j=Lr,1,-1 !right barrier from right to left
    cSR(i)=Vx*Vx &
    & /(E-(2*abs(Vx)+Ur-eV*(Ll+Lw+j)/(Lt+1)+(i-1)*hv)-cSR(i))
  end do! j (right barrier sites)
end do !i (phonon states)
!define the effective Hamiltonian written in the basis of the first and
! last layers of the well and accounting for the leads and phonons
! starts defining contr.from well and leads decimations
do i=1,Nt
  do j=1,Nt

```

```

cEHeff(i,j)= -cRE*SL(i,j)
cEHeff(Nt+i,Nt+j)=-cRE*SR(i,j)
cEHeff(i,Nt+j)= -cRE*Veff(i,j)
cEHeff(j+Nt,i)= cEHeff(i,j+Nt)! right because real
end do !j
cEHeff(i,i)= cEHeff(i,i)-cSL(i)+ &
& cRE*( E-(2*abs(Vx)+Uw-eV*(Ll+1)/(Lt+1)+hv*(i-1)) )
cEHeff(Nt+i,Nt+i)= cEHeff(Nt+i,Nt+i)-cSR(i)+ &
& cRE*( E-(2*abs(Vx)+Uw-eV*(Ll+Lw)/(Lt+1)+hv*(i-1)) )
end do ! i
! now define the isolated layer non-diagonal contributions
do i=1,Nt-1
a_i=i
cEHeff(i,i+1)=cEHeff(i,i+1)-cRE*Vg*sqrt(a_i)
cEHeff(i+1,i)=cEHeff(i+1,i)-cRE*Vg*sqrt(a_i)
cEHeff(Nt+i,Nt+i+1)=cEHeff(Nt+i,Nt+i+1)-cRE*Vg*sqrt(a_i)
cEHeff(Nt+i+1,Nt+i)=cEHeff(Nt+i+1,Nt+i)-cRE*Vg*sqrt(a_i)
end do !
call cEQUAL(cGLR,1.,cEHeff,Nt2)
CALL LINCG (Nt2, cGLR, Nt2, cGLR, Nt2)
! call cINV(cGLR,Nt2)
IF ((IERCD() .EQ. 1).or.(IERCD() .EQ. 2)) CYCLE ! If there is
! any problem with the inversion subroutine conclude the E loop.
! evaluate the transmittances
do n=1,Nt !initial phonon channels
do j=1,Nt !final phonon channels
T(j+Nt,n)= 2.*aimag(cSR(j))*( cabs(cGLR(j+Nt,n)) )**2 &
& *2.*aimag(cSL(n))
if(j.ne.n) then
T(j,n)= 2.*aimag(cSL(j))*( cabs(cGLR(j,n)) )**2 &
& * 2.* aimag(cSL(n))
end if !(j.ne.n)
end do ! j
! end if ! (Ekin.LE.Ef.and.Ekin.GT.0.)
end do !n
! Almacena el valor de Tinel(E).
do j=2,Nt ! Calcula la transmitancia inelástica de izq. a derecha.
Tinel(INT(E/dE))= Tinel(INT(E/dE))+T(Nt+j,1)
end do

```

```

END DO ! E
tempodd=0.
tempeven=0.
do i=1,nE-1,2
    tempodd=tempodd+Tinel(i)
end do
do i=1,nE-1,2
    tempeven=tempeven+Tinel(i)
end do
Simpson(l)= dE/3*(Tinel(0)+Tinel(nE)+2*tempodd+4*tempeven)
!Evalúa la integral de Tinel entre 0 y Ef utilizando la regla de Simpson.
IF(Lr .EQ. Lrmax) THEN
    WRITE( 1, * ) eV, Simpson(l)
END IF
END DO ! eV
seconds = SECNDS (TimeOrigin)
WRITE( 3, * ) Lr, MAXVAL(Simpson)
! Almacena el valor de la corriente inelástica de pico para el par
! de valores Ll y Lr actuales.
write(6,*) 'Program has used', seconds, 'seconds.'
write(6,*) (Lr+1-Lrmin)*100/(Lrmax-Lrmin+1),'% completed'
END DO ! Lr
CALL BEEPQQ(nfrequency, nduration)
CLOSE( 1 )
OPEN( 2, FILE = FileName2 )
WRITE( 2, * ) ' Ef=', Ef, ' Vx=', Vx, ' a=', a_o
WRITE( 2, * ) ' Vg=', Vg, ' eVmx=', eVmx, ' hv=', hv
WRITE( 2, * ) ' Lw=', Lw, ' Ll=', Ll, ' Lr=', Lr-1
WRITE( 2, * ) ' Uw=', Uw, ' Ul=', Ul, ' Ur=', Ur
CLOSE( 2 )
CLOSE( 3 )
CONTAINS
complex function cSELF(E,V)
complex*8 cRE, cIM
cRE=(1.,0.)
cIM=(0.,1.)
rdisc=(E/2.):**2- V**2
if(rdisc.gt.0.)then
cself=( E/2.-(E/abs(E))*sqrt(rdisc) )*cRE

```

```

else
cself=E/2.*cRE - cIM* sqrt(-rdisc)
endif
return
end function cSELF
END PROGRAM ElPho
subroutine PROD(D,a1,A,B,n)
! product of two square matrices
! D= a1* A* B
dimension A(n,n),B(n,n),D(n,n)
do 3 i=1,n
do 2 j=1,n
D(i,j)=0.
do 1 k=1,n
1 D(i,j)= D(i,j)+a1*A(i,k)*B(k,j)
2 continue
3 continue
return
end subroutine PROD
subroutine cPROD(cD,r1,cA,cB,n)
! product of two square matrices
! D= r1* A* B
complex*8 cA(n,n),cB(n,n),cD(n,n)
do 3 i=1,n
do 2 j=1,n
cD(i,j)=(0.,0.)
do 1 k=1,n
1 cD(i,j)= cD(i,j)+r1*cA(i,k)*cB(k,j)
2 continue
3 continue
return
end subroutine cPROD
subroutine SUM(D,a1,A,a2,B,n)
! evaluates the sum of two matrices
! a1*A + a2* B= D
dimension A(n,n),B(n,n), D(n,n)
do 2 i=1,n
do 1 j=1,n
1 D(i,j)=a1*A(i,j)+a2*B(i,j)

```

```

2 continue
return
end subroutine SUM
subroutine EQUAL(D, a1,A,n)
! evaluates  $D = a1 * A$ 
dimension A(n,n),D(n,n)
do 2 i=1,n
do 1 j=1,n
1 D(i,j)= a1* A(i,j)
2 continue
return
end
subroutine cEQUAL(cD, r1,cA,n)
! evaluates  $cD = r1 * cA$ 
complex*8 cA(n,n),cD(n,n)
do 2 i=1,n
do 1 j=1,n
1 cD(i,j)= r1* cA(i,j)
2 continue
return
end subroutine cEQUAL

```


! **PROGRAMA DB2por2**: calcula la transmitancia a través de una doble barrera incluyendo un número dado de estados excitados en los cálculos.

```

PROGRAM DB2por2
USE MSIMSLMS
USE MSFLIB
USE MSIMSLSS
IMPLICIT NONE
CHARACTER(32) Filename, Filename2, Filename3
INTEGER N, Nw, NL,NR,LDH, LDEVEC, NOUT, ERR_ALLOC, m, d, &
& Natoms, ierror, nE, neV, i, Nwstates, NRS, NCS, LDS, ICOMP, &
& IORDR, IRET, NKEY, NGROUP, INDKEY(1)
INTEGER, DIMENSION(:), ALLOCATABLE :: IPERM,NI
REAL, PARAMETER :: PI = 3.141592654
INTEGER, PARAMETER :: Nt = 1
REAL Ezero, EL, ER, V, eV, PerfIndex, temp, effM,hbar,he2,a_o,Vx, &
& dE, deV,eVmx, eVmn, E, Ef, hv, Veff, Veff_1, deltaL_1, deltaL, deltaR
REAL, DIMENSION(:,:), ALLOCATABLE :: Hdb, EVEC, S
REAL, DIMENSION(:), ALLOCATABLE :: EVAL, VEC
REAL T(Nt,Nt)
COMPLEX :: cIM, cRE
COMPLEX :: SR(Nt), SL(Nt), E_H(1:2*Nt, 1:2*Nt), &
& G(1:2*Nt, 1:2*Nt), Identity(1:2*Nt, 1:2*Nt), H(1:2*Nt, 1:2*Nt)
Filename = 'TyVeffvsE.dat'
Filename2 = 'TvseV.dat'
Filename3 = 'EgvlA1AN.dat'
effM=0.067*0.512E4 ! effective mass [eV/c^2]
hbar=1.239E-7/(2*PI)! [eV*s/c]
he2=25.2 !h/e**2 in [kOhms]
a_o=2.825E-10
V=- (hbar)**2 / ( 2*effM*a_o**2) ! [ eV ]
Vx=V
Ezero= 0.0000
write(6,*)'Write inputs Nw, NL, Nr, El, Er, NrWellStates?'
READ(5,*) Nw, NL, NR, EL, ER, Nwstates
! request for inputs
write(6,*)'Write inputs Ef, nE, eVmx, neV ?'
READ(5,*) Ef, nE, eVmx, neV
N=NL+Nw+NR
dE=Ef/nE

```

```

deV=(eVmx-eVmn)/neV
LDevec = N; LDH = N
d=2*Nt
Natoms=N
ALLOCATE(Hdb(1:N,1:N), EVEC(1:N,1:N),EVAL(1:N),VEC(1:N),&
& S(1:N+1,1:N), IPERM(N), NI(N), STAT = ERR_ALLOC)
IF (ERR_ALLOC .NE. 0) PRINT *, "ALLOCATION ERROR"
Hdb=0
S=0
OPEN( 1, FILE = FileName )
OPEN( 2, FILE = FileName2 )
OPEN( 3, FILE = FileName3 )
DO eV=eVmn+deV,eVmx, deV
! Define Hamiltonian matrix (supposed real and symmetric)
CALL defineHamiltonian(Hdb, N, NL, NR, Ezero, EL, ER, V, eV)
! (HamiltonianMatrix, Natoms, Nl, Nr, Ezero, El, Er, V, eV)
! Obtain the eigenvalues and eigenvectors of the Hamiltonian.
! Eigenvalues are stored in the real vector 'Eval' in
! decreasing order of magnitude. The J-th eigenvector, corresponding
! to eigenvalues(J), is stored in the J-th column of the real matrix
! 'Evec'. Each vector is normalized to have Euclidean length
! equal to the value one.
CALL EVCSF (N, Hdb, LDH, EVAL, EVEC, LDEVEC)
! Compute performance index
PerfIndex = EPISF (N, N, Hdb, LDH, EVAL, EVEC, LDEVEC)
IF( PerfIndex .GT. 0.1) WRITE (NOUT, '(/,A,F6.3)')
' Performance index = ', PerfIndex
! ordenar los autovectores de acuerdo con el orden algebraico de
! los autovalores corresp..
do m=1,N
S(N+1,m)=EVAL(m)
do i=1,N
S(m,i)=EVEC(m,i)
end do
end do
NRS=N+1; NCS=N; LDS=NRS; ICOMP=0; IORDR=0; IRET=0; NKEY=1;
INDKEY(1)=NRS
CALL SCOLR (NRS, NCS, S, LDS, ICOMP, IORDR, IRET, NKEY, INDKEY,
IPERM, NGROUP, NI)

```

```

do m=1,N
EVAL(m)=S(N+1,m)
do i=1,N
EVEC(m,i)=S(m,i)
end do
end do
!sweep over polaron energies
DO E=0.000, Ef, dE
ierror =0 ! Initialize ierror (error handling variable).
Veff=0.000
deltaL=0.000; deltaR=0.000
Identity=0.; E_H=0.; H=0.; G=0.
! define E* identity matrix.
do i=1,2*Nt
Identity(i,i)=E-2*abs(V)
end do
do i=1,Nt !pick each phonon state
!_____self-energies due to the leads
SL(i)= cself(E- (2*abs(V)+(i-1)*hv), V)
SR(i)= cself(E- (2*abs(V)+(i-1)*hv-eV ), V)
end do
do i=1,Nwstates
Veff= Veff + EVEC(1,i)*V * EVEC(N,i)*V / ( E-2*abs(V)-EVAL(i) )
deltaL= deltaL + EVEC(1,i)*V * EVEC(1,i)*V / ( E-2*abs(V)-EVAL(i) )
deltaR= deltaR + EVEC(N,i)*V * EVEC(N,i)*V / ( E-2*abs(V)-EVAL(i) )
end do
! Add the corresponding self-energies due to the leads and sites in the well.
H(1,1)=SL(1)+deltaL
H(2,2)=-eV+SR(1)+deltaR
H(1,2)=Veff
H(2,1)=H(1,2)
! H= E *IdentityMatrix - H
E_H=Identity-H
! Calculate the Green Function G.
CALL LINCG (d, E_H, d, G, d) ! G = (E*1-H)^(-1)
IF ((IERCD() .EQ. 1).or.(IERCD() .EQ. 2)) CYCLE ! If there is
! any problem with the inversion subroutine conclude the E loop.
! evaluate the transmittances
T(1,1)= 2.*aimag(SR(1))*( cabs(G(2,1)) )**2 &

```

```

& *2.*aimag(SL(1))
if(eV .eq. eVmx) then
deltaL_1=deltaL-EVEC(1,1)*V * EVEC(1,1)*V / ( E-2*abs(V)-EVAL(1) )
Veff_1=Veff-EVEC(1,1)*V * EVEC(N,1)*V / ( E-2*abs(V)-EVAL(1) )
WRITE( 1, * ) E, T(1,1), Veff_1, deltaL_1
end if
END DO ! E
WRITE( 2, * ) eV, T(1,1)
do m=1,N
WRITE( 3, * ) EVAL(m), EVEC(1,m), EVEC(N,m)
end do
END DO ! eV
CLOSE( 1 )
CLOSE( 2 )
DEALLOCATE(EVEC,EVAL,VEC)
CALL CLEARSCREEN($GVIEWPORT)
PRINT *, 'Los resultados han sido almacenados en el archivo seleccionado.'
PRINT *
CONTAINS
complex function cSELF(E,V)
complex*8 cRE, cIM
real rdisc, E, V
cRE=(1.,0.)
cIM=(0.,1.)
rdisc=(E/2.):**2- V**2
if(rdisc.gt.0.)then
cself=( E/2.-(E/abs(E))*sqrt(rdisc) )*cRE
else
cself=E/2.*cRE - cIM* sqrt(-rdisc)
endif
return
end function cSELF
! Subroutine defineHamiltonian: defines Hamiltonian for nearest
! neighbors interaction.
SUBROUTINE defineHamiltonian(HamiltonianMatrix, Natoms, Nl, Nr, Ezero, El,
Er, V, eV)
INTENT(IN) :: Natoms, NL, NR, Ezero, El, Er, V
INTENT(INOUT) :: HamiltonianMatrix
INTEGER Natoms, NL, NR, p, q

```

```

REAL HamiltonianMatrix(1:Natoms,1:Natoms), Ezero, El, Er, V, eV
HamiltonianMatrix=0
DO p=1,Natoms
DO q=1,Natoms
IF(p .EQ. q) THEN
HamiltonianMatrix(p,q)=Ezero
ELSE IF( ABS(p-q).EQ.1 ) THEN
HamiltonianMatrix(p,q)=V
END IF
END DO
END DO
DO p=1,Natoms
IF(p .LT. NL+1) THEN
HamiltonianMatrix(p,p)=HamiltonianMatrix(p,p)+El-eV*p/Natoms
ELSE IF(p .GT. (Natoms-NR)) THEN
HamiltonianMatrix(p,p)=HamiltonianMatrix(p,p)+Er-eV*p/Natoms
ELSE
HamiltonianMatrix(p,p)=HamiltonianMatrix(p,p)-eV*p/Natoms
END IF
END DO
END SUBROUTINE defineHamiltonian
END PROGRAM DB2por2

```