La matriz de transferencia y algunas propiedades del problema unidimensional de Schrodinger

R.Pérez Álvarez
Departamento de Física Teórica
Universidad de La Habana, Cuba

RESUMEN

Mediante el método de las matrices de transferencia aplicado a la ecuación unidimensional de Schrodinger se obtiene la ecuación para los estados acotados de un pozo de potencial de forma arbitraria, así como para su coeficiente de trasmisión. Se demuestra la posibilidad del empalme entre los estados virtuales y los acotados al variar un parámetro de dicho pozo.

1. INTRODUCCIÓN

Desde la creación de la Mecánica Cuántica los problemas unidimensionales (1D) han despertado un gran interés. Para ponerse al tanto del tema el lector puede consultar el libro de Lieb y Mattis /1/, así como el trabajo de Strandberg /2/, y las referencias que allí se dan.

En los últimos años esta problemática ha tomado un nuevo impulso con la aparición de sistemas donde una descripción mediante un problema 1D es adecuada. Nos referimos a los pozos cuánticos múltiples (MQW: multiple quantum wells) y las superreds (SL: superlattices) (ver, por ejemplo, /3/).

Cuando estos problemas se tratan dentro del marco de la teoría de masa efectiva a una sola banda, la ecuación a resolver es la de Schrodinger; en el lugar de la masa del electrón aparece la masa efectiva de la banda en cuestión, y la función incógnita es la llamada envolvente /4,5/.

El método de las matrices de tansferencia (TM: transfer matrix) ha demostrado ser excelente para la demostración de propiedades generales /6/, obtención de soluciones en casos particulares /7,8,9/, así como para el cálculo numérico /10/.

En el presente artículo nos proponemos continuar desarrollando este método, analizando cómo se expresa la solución de diversos problemas en términos de la TM. En el segundo epígrafe resumimos los resultados obtenidos previamente /6/. En las partes 3 y 4 reportamos la solución de varios problemas no periódicos. Por último se establecen algunas conclusiones del trabajo.

2. ALGUNOS RESULTADOS PREVIOS

La ecuación de Schrodinger

$$\Psi''(z)+2m/\hbar^2[E-v(z)]\Psi(z) = 0 \tag{1}$$

se puede llevar a la forma

$$d\Psi(z)/dz = P(z)\Psi(z) \tag{2}$$

donde

$$P(z) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -2m/\hbar^2[E-v(z)] & 0 \end{pmatrix} \; ; \; \Psi(z) = \begin{pmatrix} \psi(z) \\ \psi'(z) \end{pmatrix} \tag{3}$$

Cualquier solución $\Psi(z)$ se puede expresar en términos de su valor en un punto fijo z_0:

$$\Psi(z) = M(z,z_0)\Psi(z_0) \tag{4}$$

siendo $M(z,z_0)$ la TM que lleva de z_0 a z. Si $g_1(z)$ y $g_2(z)$ son dos soluciones linealmente independientes, entonces

$$M(z,z_0) = \frac{1}{\Delta}\begin{pmatrix} g_2'(z_0)g_1(z)-g_1'(z_0)g_2(z) & g_1(z_0)g_2(z)-g_2(z_0)g_1(z) \\ g_2'(z_0)g_1'(z)-g_1'(z_0)g_2'(z) & g_1(z_0)g_2'(z)-g_2(z_0)g_1'(z) \end{pmatrix} \tag{5a}$$

$$\Delta=g_1(z_0)g_2'(z_0)-g_1'(z_0)g_2(z_0) \tag{5b}$$

En particular, si en el intervalo $[z_0,z]$, $v(z)=v$ es constante

$$M(z,z_0)= \begin{pmatrix} \cos[p(z-z_0)] & (1/p)\sin[p(z-z_0)] \\ -p\sin[p(z-z_0)] & \cos[p(z-z_0)] \end{pmatrix} \tag{6}$$

$$p = \sqrt{2m/h^2(E-v)}$$

3. ESTADOS ACOTADOS Y COEFICIENTE DE TRANSMISIÓN

Supongamos que nuestra partícula se mueve en un potencial de forma arbitraria en el intervalo $[a_1,a_2]$, constante e igual a v_1 en $(-\infty, a_1)$, y cons tante e igual a v_2 en (a_2,∞). Llamemos M a la TM que lleva las soluciones de a_1 hasta a_2 y

$$k_j = \sqrt{2m/h^2(E-v_j)} = i\,\varkappa_j;\quad j=1,2 \tag{7}$$

Siguiendo los métodos tradicionales de solución de estos problemas no es difícil llegar a que las energías de los estados acotados son las soluciones de la ecuación trascendente

$$\varkappa_2 M_{11} + \varkappa_1 M_{22} + \varkappa_1\varkappa_2 M_{12} + M_{21} = 0 \tag{8}$$

así como que el coeficiente de trasmisión viene dado por

$$T = 4k_1k_2/[(k_2M_{11} + k_1M_{22})^2 + (k_1k_2M_{12} - M_{21}^2)^2] \tag{9}$$

Si $v_1=v_2$, ponemos $k=k_1=k_2$, $f=.5(M_{11}+M_{22})$ y nos percatamos de que $k^2M_{12}-M_{21}= 2f'= 2df/dz$, podemos poner

$$T = k^2/[k^2f^2 + f'^2] \tag{10}$$

fórmula que nos será útil en lo que sigue.

4. ESTADOS VIRTUALES Y ESTADOS ACOTADOS EN UN POZO

Analicemos un pozo simétrico ($v=v_1=v_2$, etcétera y denominemos estados virtuales a aquellos cuya energía E es tal que T=1 /12/.

Por su parte los estados acotados tienen energías E que satisfacen la ecuación (8) o, lo que es lo mismo

$$-\,k\,f + f'i=0 \tag{11}$$

Si ahora prestamos atención a la variación de la energía de un estado virtual cuando modificamos algún parámetro del problema nos percataremos de que esta en general varía; de llegar a ser E igual al potencial v de la barrera, se cumplirá que $k^2f^2+ f'^2= 0$, o sea $f'= 0$, pues si no, T no puede ser igual a la unidad; pero en dicho caso se satisface también la ecuación para los estados acotados, y de continuar variando el parámetro, este estado puede manifestarse. Este fenómeno ha sido visto en ciertos casos particulares /13/; he aquí la demostración de su posibilidad cualquiera que sea el potencial. El hecho básico es que para la energía del borde de la barrera (E=v), la condición de existencia de un estado acotado y de uno virtual coinciden.

5. CONCLUSIONES

Resumiendo brevemente lo tratado, podemos decir que el método de la TM nos ha permitido llegar a soluciones generales para los estados acotados y coeficientes de trasmisión de cualquier potencial localizado. Esta forma general nos llevó a mostrar la posibilidad del empalme de un estado virtual con uno acotado al variar cualquier parámetro del problema, hecho que tiene una importancia decisiva en la explicación de los espectros de fotoluminiscencia /13/.

Los resultados obtenidos han sido verificados en un buen número de situaciones previamente conocidas, como son: pozo infinito cuadrado /11/, pozo infinito cuadrado sometido a campo eléctrico /14/, heteroestructuras de confinamiento separado de dos y tres escalones con bordes finitos e infinitos /15/, etcétera.

La aplicación del método debe ser particularmente interesante para cálculos autoconsistentes, pues a priori no se conoce la dependencia espacial del potencial y éste se puede sustituir por una función escalonada cada vez que se resuelva la ecuación de Schrodinger, incluyendo la primera ocasión. La TM se hallaría por un algoritmo simple para multiplicar matrices del tipo (6).

BIBLIOGRAFÍA

1. Lieb, E. D.Mattis
   "Mathematical Physics in One Dimesion", Academic Press, New York, (1966).
2. Strandberg, M.W.P.
   Am. J. Phys. (1983), v.51, No.1, p.60.
3. Esaki, L.
   J.Phys. Coll. (1984), v.C5, suppl. No.4, Tome 45, p. 519.
4. Bastard, G.
   Phys. Rev. B(1981), v.24, No.10, p.5693.
5. Milanovic, V.
   Physica B (1983), v.121, p.181.
6. Mora, M., R.Pérez y Ch. B. Sommers por publicar.
7. Smith, R.A.
   "Wave Mechanics of Crystalline Solids", Chapman & Hall (1961).
8. Bastard, G.
   Phys. Rev. B(1982), v.25, No.12, p.7584.
9. Ricco, B; M.Ya.Azbel
   Phys. Rev. B(1984), No.4, p.1970.
10. Kolbas, R.M. y N.Holonyak Jr.
    Am. J. Phys. (1984), v.52, No.5, p.431.
11. Landau. L.D.; I.M.Lifshitz
    "Quantum Mechanics", Pergamon Press (1965).
12. Messiah, A.
    "Mécanique Quantique", Tome I, Dunod (1965).

13. Bastard, G. et al.
Solid State Commun. (1984), v.49, No.7, p.671.

14. Trallero Giner, C.L.
por publicar.

15. Bastard, G.
Phys. Rev. B(1984), v.30, No.6, p.3547.

16. Dios, M. de y R.Pérez
Rev. Cub. de Física (1981), v.I, No.3, p.81.

17. Dios, M. de R.Pérez y J.López
Phys. Stat. Solidi (b) (1984), v.125, p.221.