



FACULTAD DE MATEMÁTICA, FÍSICA Y COMPUTACIÓN
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

**Tiempo de tunelaje de fonones a través de una
heteroestructura semiconductor**

Tesis presentada en opción al grado científico de Doctor en
Ciencias Físicas

Autor: MSc. Diosdado Lorenzo Villegas Villegas

Santa Clara, Cuba
2010



FACULTAD DE MATEMÁTICA, FÍSICA Y COMPUTACIÓN
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

**Tiempo de tunelaje de fonones a través de una
heteroestructura semiconductor**

Tesis presentada en opción al grado científico de Doctor en
Ciencias Físicas

Autor: MSc. Diosdado Lorenzo Villegas Villegas
Tutor: Dr.Cs Rolando Pérez Álvarez
Cotutor: Dr.C Fernando de León Pérez

Santa Clara, Cuba
2010

“La imaginación
es más importante que el conocimiento.”
Albert Einstein

“Aunque sólo existiera una verdad única,
no se podrían pintar cien cuadros sobre el mismo tema.”
Picasso

Agradecimientos

“La gratitud es el más legítimo pago
al esfuerzo ajeno,
es reconocer que todo lo que somos
es la suma del sudor de los demás,
es tener conciencia de que un hombre solo
no vale nada,
y que la dependencia humana
además de obligatoria es hermosa.”

Quiero expresarle mi agradecimiento a mi tutor Dr. Rolando Pérez Álvarez, por aceptarme como su alumno de doctorado. Por ser paciente y solidario. Por sus consejos y ayuda en cada momento que lo he requerido.

Al Dr. Fernando de León Pérez, cotutor de esta tesis, por ser el hilo conductor en la realización de este trabajo; donde, gracias a su tesón y sabiduría, me he formado. Su ejemplo de dedicación a la investigación, muchas veces a costa de enormes sacrificios personales, su ética profesional y su desprendimiento natural para compartir sus ideas y proyectos me han hecho crecer como ser humano e investigador.

Al Profesor Giraldo Valdés Pardo, por sus valiosas enseñanzas. De él aprendí que las grandes metas se logran a base de entrega y sacrificio.

A los colegas del Departamento de Física por su presión permanente para hacerme avanzar en la investigación; en especial a los profesores Dr. Tame Gonzáles y Dr. Yoelsy Leyva Nodal.

Al Dr. Giovanni L. Vasconcelo por invitarme y recibirme, en el Departamento de Física, de la Universidad Federal de Pernambuco, Brasil. Esta estancia contribuyó de manera fundamental en mi formación.

A la Asociación Universitaria Iberoamericana de Postgrado (AUIP); la cual me concedió una beca para movilidad académica. En particular al Dr. Luís Martín Morenos por invitarme y recibirme en el Departamento de Física de la Materia Condensada, de La Universidad de Zaragoza, España.

A mis colegas y amigos del Centro de Estudio de la Electrónica y las Tecnologías de la Información (CEETI), de la Universidad Central “Marta Abreu” de Las Villas; donde siempre he recibido apoyo de manera incondicional y desinteresada.

A los servicios prestados por la biblioteca de la Facultad de Matemática, Física y Computación de la Universidad Central “Marta Abreu” de Las Villas y en especial a su especialista principal Lic. José Monteagudo Fortun.

A mi madre porque sin ella nunca hubiese llegado a esta meta. A mi hijo Eliecer por su apoyo. A mi esposa, Lic. Elia Rosa Cuellar, por su amor y apoyo incondicional y por ser la maravillosa mujer que es.

A mi abuelo Ignacio.

A mi mamá por tantos
desvelos y sacrificios.

A mi esposa Elia.

A mis familiares, en especial a mi prima Vivian.

Lista de Publicaciones

Los materiales originales en los que está basada esta Tesis han sido publicados en:

- D. Villegas, F. León-Pérez, and R. Pérez-Álvarez, “Tunneling time of long-wavelength phonons through semiconductor heterostructures,” *Phys. Rev. B.* **71** (2005) 035322.
- D. Villegas, F. León-Pérez, and R. Pérez-Álvarez, “Tunneling time of phonons: dependence on the systems’s size,” *Physica Status Solidi (b)*. **242** (2005) 1767.
- D. Villegas, F. León-Pérez, and R. Pérez-Álvarez, “Gaussian superlattice for phonons,” *Microelectronics Journal*. **36** (2005) 411.
- D. Villegas, F. León-Pérez, and R. Pérez-Álvarez, “Longwave phonon tunnelling using an impedance concept,” *PIERS on line*. **4** (2005) 227.

Los resultados de estas publicaciones han sido presentados en los siguientes Eventos Internacionales:

- *Primer Taller de Física de la Materia Condensada y Molecular*, Cuernavacas, México. 2009. **Poster**: *Resonant and non-resonant tunneling through a phonon double barrier*.
- *Progress In Electromagnetics Research Symposium*, PIERS in Hangzhou, China. 2008. **Charla**: *Longwave phonons tunnelling using an impedance concept*.
- *XVIII Latin American Symposium on Solid State Physics*, Mexico. 2006. **Poster**: *Transmission, reflexion and dwell times of phonons packets propagation through semiconductor multilayer structures: a comparative study*.
- *Son et Lumiere: from microphotronics to nanophononics*, Cargese, Francia. 2006. **Poster**: *Tunneling time of long-wavelength phonons through semiconductor multilayer structure*.
- *5th International Conference on Low Dimensional Structures and Devices*, Riviera Maya, Mexico. Diciembre de 2004. **Poster**: *Gaussian superlattice for phonons*.
- *XVII Latin American Symposium on Solid State Physics*, Habana, Cuba. Diciembre de 2004. **Poster**: *Tunneling time for phonons: dependence on the system’s size*.

Otras publicaciones del autor relacionadas con el tema de esta Tesis::

- D. Villegas, F. León-Pérez, and R. Pérez-Álvarez, “Does the generalized Hartman effect exist in the phonon tunneling?,” *no publicado*. (2010).

Lista de Símbolos

A_t	Amplitud de la onda transmitida
A_r	Amplitud de la onda reflejada
E, E_o	Energía
\hbar	Constante de Plank
\mathcal{H}	Densidad de energía vibracional unidimensional
H	Energía vibracional unidimensional
j_i	Flujo incidente sobre la barrera
j_t	Flujo transmitido por la barrera
j_r	Flujo reflejado por la barrera
k, k_o	Vector o número de onda
ℓ, d_1, L_b	Ancho de la barrera
d_2, L_w	Ancho del pozo
\mathcal{L}	Densidad Lagrangiana
m	Masa del electrón
p	Momento lineal
\mathcal{R}	Coefficiente de reflexión
t	Tiempo
t_{ph}	Tiempo de fase
t_D	Tiempo de estancia
t_{D_g}	Tiempo de estancia generalizado
\mathcal{T}	Coefficiente de transmisión
u	Desplazamiento relativo de los átomos
u_{ij}	Tensor de deformaciones relativas
V, V_o	Energía potencial
v_g	Velocidad de grupo
v_f	Velocidad de fase
z	Coordenada espacial
\hat{z}	Operador posición de una micropartícula
α_t	Fase de la onda transmitida
α_r	Fase de la onda reflejada
δ	Función generalizada delta de Dirac
δz	Retardo espacial
μ	Masa reducida
ρ	Densidad de masa reducida
σ_{ij}	Tensor de tensiones
τ_t	Tiempo total de transmisión
τ_r	Tiempo total de reflexión
τ_i	Tiempo o término de interferencia
$\tilde{\tau}$	Retardo de grupo bidireccional
ϕ	Paquete de onda en el k-espacio
ψ	Función de onda
ω	Frecuencia de las oscilaciones
ω_L	Frecuencia longitudinal del masivo
ω_T	Frecuencia transversal del masivo

SÍNTESIS

En este trabajo se estudia el tunelaje de fonones de longitud de onda larga a través de una heteroestructura semiconductor. A partir de la ecuación de continuidad de la densidad de energía del sistema se obtiene un tiempo característico análogo al tiempo de estancia para electrones; así como una relación analítica general entre el tiempo de estancia y los diferentes tiempos de transmisión y reflexión.

Las propiedades básicas de la matriz de transferencia y la equivalencia de los tiempos de transmisión y reflexión son derivadas teóricamente partiendo de principios generales; tales como la invarianza ante la inversión en el tiempo y la invarianza ante la reflexión espacial de la ecuación de onda y la conservación del flujo de la densidad de energía.

Se investigan un fenómeno análogo al Efecto Hartman durante el tunelaje de fonones de longitud de onda larga y se propone una posible explicación del mismo sobre la base de la saturación de la energía vibracional almacenada en la región de la barrera.

Los cálculos analíticos y numéricos de los diferentes tiempos de tunelaje incluye a los fonones acústicos y ópticos. En particular se realiza un estudio del tunelaje resonante en un sistema de doble barrera de fonones. Además se introduce el concepto de impedancia generalizada y su posible aplicación en el cálculo de las amplitudes de las ondas en las diferentes regiones que conforman a una estructura arbitraria.

ÍNDICE

1	INTRODUCCIÓN	1
2	Una introducción a los tiempos de tunelaje	11
2.1	Tiempos de tunelaje	11
2.1.1	Tiempos de fase	14
2.1.2	Tiempo de estancia	17
2.2	El Efecto Hartman	20
3	MODELO FENOMENOLÓGICO DE ONDA LARGA	22
3.1	Modelo fenomenológico completo	22
3.2	Densidad de energía vibracional	23
3.2.1	Ecuaciones del campo	25
3.2.2	Estados propagantes	26
3.2.3	Estados prohibidos	26
3.3	Heteroestructuras semiconductoras	27
4	TIEMPOS DE TUNELAJE PARA FONONES DE LONGITUD DE ONDA LARGA	30
4.1	Tiempos de fases asintóticos	30
4.2	Tiempo de estancia	32

4.3	Relación entre los tiempos de fase y el tiempo de estancia	34
4.4	Propiedades de la matrix de transferencia en el tunelaje de fonones de longitud de onda larga	38
4.4.1	Invarianza ante la inversión en el tiempo	38
4.4.2	Conservación del flujo de la densidad de energía	40
4.4.3	Invarianza ante la reflexión espacial.	41
4.5	Equivalencia de los tiempos de transmisión y reflexión en el tunelaje de fonones de longitud de onda larga	42
4.6	Tiempos de tunelaje para una barrera rectangular de fonones	44
4.6.1	Modos ópticos permitidos	44
4.6.2	Modos ópticos prohibidos	46
4.7	Conclusiones Parciales	46
5	CÁLCULO DEL TIEMPO DE TUNELAJE A TRAVÉS DE DIFERENTES ESTRUCTURAS SEMICONDUCTORAS	48
5.1	Efecto Hartman en el tunelaje de fonones de longitud de onda larga	49
5.1.1	Una barrera de fonones	49
5.1.2	Heteroestructuras semiconductoras	51
5.2	Tunelaje resonante a través de un sistema de doble barrera de fonones . . .	55
5.2.1	Cálculo del coeficiente de transmisión y la condición de resonancia .	58
5.2.2	Forma del espectro de transmisión	62
5.2.3	Energía vibracional y tiempo de estancia para un sistema de doble barrera de fonones	64
5.2.4	Simulaciones numéricas	65
5.3	Tunelaje de fonones de longitud de onda larga utilizando el concepto de impedancia generalizada	70
5.4	Superredes gaussianas para fonones	75

5.5	Cálculo del tiempo de tunelaje a través de una heteroestructura semiconductora	76
5.6	Conclusiones Parciales	78
6	CONCLUSIONES	85
7	RECOMENDACIONES	87
	REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS	88

1 INTRODUCCIÓN

Los primeros estudio de propagación de fonones de alta frecuencia a través de una superred de GaAs/AlGaAs fueron realizados por Narayanamurti y sus colaboradores en 1978 [1]. Sin embargo, a lo largo de las últimas dos décadas, las investigaciones sobre las propiedades vibracionales de los semiconductores a capa ha sido intensa y fructífera; y se ha obtenido una comprensión profunda del comportamiento de los fonones acústicos en estas nanoestructura. Mediante el desarrollo de nanoestructuras semiconductoras que muestran modulaciones controladas de la impedancia acústica, una nueva área está creciendo dentro de la nanociencia. En particular, el desarrollo de técnicas de crecimiento epitaxial ha permitido obtener nuevas estructuras con períodos de pocos nanómetros, y con interfaces a nivel de monocapa atómicas. Una nueva rama de estudio dentro de la nanociencia y la nanotecnología ha surgido: la nanofonónica o ingeniería de fonones acústicos [2, 3]. Referida como nanofonónica, esta área se dedica a estudiar las propiedades vibracionales y térmicas a escala nanométrica.

La reducción del tamaño de los dispositivos electrónicos por debajo del recorrido libre medio de los fonones acústicos crea una nueva situación para la propagación e interacción de los fonones. Por un lado, esto complica la eliminación del calor de los dispositivos de baja escala. Por otro lado, esto abre una oportunidad excelente para la ingeniería espectral de fonones en los materiales nanoestructrados, y un mejoramiento significativo

en la operación de los nanodispositivos [4].

La nanoescala no es solo otro paso hacia la miniaturización, sino un dominio cualitativamente nuevo regido por la mecánica cuántica, el confinamiento material en estructuras pequeñas, grandes valores de la relación área/unidad de volumen; así como por otras propiedades, fenómenos y procesos únicos.

Los fonones, el cuanto de las vibraciones de la red, se manifiesta prácticamente en todos los fenómenos eléctricos, térmicos y ópticos dentro de los semiconductores y otros sistemas materiales. En particular los fonones acústicos juegan un papel fundamental en casi todas las propiedades electrónicas y optoelectrónicas de los sólidos.

Mediante el control coherente de las vibraciones acústicas de alta frecuencia se podría procesar información acerca de diferentes propiedades de los materiales tales como: velocidades del sonido, espesores de capas delgadas, propiedades de atenuación acústicas, conductividad térmica, propiedades elásticas de multicapas, difusión electrónica e interacción electrón-fonón en metales.

La modulación en el rango de los Terahertz (THz) del transporte electrónico de portadores fotoexcitados en un diodo túnel, a partir de paquetes de ondas acústicos ultra-rápidos generados ópticamente [5], y el transporte de carga a través de pulsos acústicos de picosegundos [6, 7]; son ejemplos donde se pone de manifiesto el control de las propiedades electrónicas de los dispositivos electrónicos. La emisión de radiación electromagnética de frecuencias de THz [8], la emisión de pozos cuánticos, controlada de forma ultra-rápida por pulsos acústicos de picosegundos generados ópticamente [9]; y la modulación hipersónica de la luz en nanoestructuras tridimensionales con bandas de energías prohibidas fotónicas y fonónicas [10] evidencian la posibilidad de la influencia de las vibraciones acústicas en las propiedades ópticas de los sólidos.

Los cristales fonónicos son estructuras artificiales con una modulación periódica de sus

propiedades elásticas; la periodicidad induce la aparición de bandas de energías permitidas y prohibidas. La interacción de estos cristales con una onda acústica es, consecuentemente, similar a la de un cristal fotónico con una onda electromagnética. Luego trasladando los fenómenos típicos de los procesos ópticos a ondas de sonido, se ha demostrado que los fonones acústicos pueden ser confinados en cavidades de fonones. Una cavidad de fonones consiste en dos superredes semiconductoras, que actúan como espejos de fonones, las cuales encierran una capa separadora como cavidad. Mediante experimentos de dispersión Raman se ha demostrado el confinamiento de fonones acústicos de frecuencias del orden de 0.5 THz [11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18].

El hecho de que el sonido y los fotones se describen por ecuaciones de ondas similares, aunque con diferentes parámetros hace posible la existencia de niveles de Wannier-Stark fonónicos en el dominio espectral, y oscilaciones de Bloch acústicas en el dominio temporal, en superestructuras basadas en nanocavidades de materiales semiconductores [19, 20].

Las nanocavidades acústicas, los espejos de fonones y los filtros aperiódicos de hipersonido son las estructuras básicas para el diseño y construcción de dispositivos nanofonónicos complejos basados en apilamientos de dos materiales. Por otra parte las superredes y las nanocavidades acústicas se emplean como transductores de fonones acústicos longitudinales en el rango de GHz-THz [21].

Por otro lado nuevas y poderosas técnicas de investigación han sido desarrollada en los últimos años tales como la detección y generación óptica a escala de los Femtosegundos y los picosegundos [22, 23, 24, 25, 26, 27], o la amplificación de la dispersión inelástica de luz en cavidades ópticas sintonizadas [28, 29].

Si bien las vibraciones mecánicas pueden ser generadas y controladas mediante pulsos ópticos; existe el problema relacionado con el débil campo de amplitud generado. Luego, se requiere utilizar materiales en donde el campo de deformación pueda ser amplificado, por

ejemplo utilizando aquellos materiales donde se manifieste el efecto piezoeléctrico. Estos campos piezoeléctricos permiten la posibilidad de un nuevo mecanismo de generación y detección de fonones acústicos [30, 31].

En este trabajo se estudia el proceso de propagación de los fonones a través de diferentes estructura semiconductoras. Bajos determinadas condiciones, la propagación de fonones a través de los sistemas estudiados se considera como un proceso de tunelaje a través de las mismas; de manera análoga al tunelaje de electrones a través de una barrera de potencial. El isomorfismo existente entre las ecuaciones que describen los procesos de propagación de electrones, fotones y fonones es un aspecto a considerar en todo el desarrollo de esta tesis.

La idea principal de tunelaje es controlar el flujo de partículas, manipulando la probabilidad del tunelaje. Sin embargo, la probabilidad del tunelaje por sí sola no caracteriza completamente este efecto, ya que todo proceso físico ocurre en el espacio-tiempo. Si el proceso es considerado en el eje espacial, entonces solo nos interesa analizar cuántas de las partículas incidentes aparece en el otro lado de la barrera, luego solo estamos interesados en la probabilidad de tunelaje. Si el proceso es considerado en el eje del tiempo, estamos interesados en el tiempo de tunelaje o sea el tiempo que la partícula demora en atravesar la barrera.

La idea del tiempo de tunelaje es casi tan vieja como la propia Mecánica Cuántica. Importantes contribuciones aparecen en las décadas del 50 y 60; sin embargo no es hasta la década del 80 en que el debate sobre el tiempo de tunelaje se hizo importante estimulado por los trabajos de M. Büttiker y R. Landauer [32, 33, 34, 35, 36].

En la literatura se han definido diferentes tiempos de tunelaje entre los cuales se encuentran los tiempos de fases, el tiempo de estancia, los tiempos locales de Larmor, el tiempo de Büttiker-Landauer y los tiempos complejos [37]. Las diferentes definiciones de estos tiempos son controversiales y solo dos de ellas, el tiempo de fase y el tiempo de estancia,

se consideran bien establecidas. De manera que el tiempo de tunelaje de las partículas a través de una barrera de potencial aún continúa sin una respuesta definitiva.

Existe una amplia variedad de experimentos donde se han “detectados” velocidades superlumínicas. Estos experimentos se pueden agrupar en tres grupos fundamentales:

- Experimentos ópticos, entre los cuales se encuentran los realizados por Balcou y Dutriaux [38]; Longhi, Marano, Laporta y Belmonte [39], etc.
- Experimentos con ondas electromagnéticas en los rangos de microondas, radiofrecuencias y THz, entre los cuales se encuentran los realizados por Enders y Nimtz [40, 41, 42], Mojahedi, Schamiloglu, Hegeler y Malloy [43, 44, 45]; J. J. Carey, Zawadzka, Jaroszynski y Wynne [46]; M. T. Reiten, Grischkowsky y Cheville [47]; Hache y Poirier [48], etc.
- Experimentos acústicos, entre los cuales se encuentran los realizados por Yang, Page, Liu, Cowan, Chan y Sheng [49]; Robertson, Ash, y McGaugh [50], etc.

Los experimentos acústicos, ópticos y de microondas sobre el tiempo de tunelaje, de acuerdo con H. Winful [51], han confirmado los siguientes resultados:

- El retardo de grupo (tiempo de fase) verdaderamente describe el tiempo en el cual el pulso transmitido alcanza un máximo en la salida.
- El retardo de grupo para el (muy atenuado) pulso transmitido por la barrera es más corto que el de un pulso atravesando la misma distancia de espacio libre.
- Los retardos de grupos asociados a los pulsos transmitidos y reflejados son iguales para barreras simétricas.
- El retardo de grupo se satura con la longitud de la barrera (un fenómeno conocido como Efecto Hartman).
- No hay cambio de forma (reshaping) o acortamiento (shortening) del pulso trans-

mitido.

- El tunelaje sin distorsión es un fenómeno cuasiestático que requiere pulso más largos que la longitud de la barrera.
- Las mediciones realizadas con pulsos de banda estrecha y ondas continua producen el mismo valor para el retardo de grupo.

Un fenómeno relacionado con el problema del tiempo de tunelaje es el llamado Efecto Hartman (EF) [52]. Resulta que en el límite de barreras opacas los tiempos de fase y el tiempo de estancia se saturan. La saturación consiste en que el tiempo de tunelaje se hace independiente del ancho de la barrera, lo cual implica que en principio se pudieran encontrar velocidades superlumínicas.

En un conjunto de artículos recientes H. Winful ha brindado una posible explicación del EF. Él ha sugerido que los retardos de grupo teóricos y calculados no son tiempos de tránsito [53, 54, 55, 56, 57, 58]. Esto ha permitido explicar el EF a partir de la saturación de la energía almacenada [53] o el número de partículas dentro de la barrera [55]. Siguiendo éste razonamiento Winfull demuestra que el tiempo de retardo en el tunelaje de barrera es el tiempo de vida de la cavidad y describe el escape de la energía (o la densidad de probabilidad integrada) a partir de ambos extremos de la barrera. En otras palabra la barrera actúa como una cavidad de modo evanescente con un tiempo de vida finito. Entonces debido a que el retardo de grupo describe un proceso de escape simultáneo a través de los canales de transmisión y reflexión, no se debe emplear el retardo de grupo, para medir el tiempo de tránsito directo en el tunelaje de la barrera. Toda función de onda con componentes directa e inversa cumple con esta propiedad. Por otro lado, esta propiedad también es compartida por el tiempo de estancia; el cual no se puede interpretar como un tiempo de tránsito o utilizar para calcular la velocidad del tunelaje [37].

El tunelaje de fonones a través de una heteroestructura semiconductor ha sido estudiado

ampliamente [59, 60, 61, 62, 63]. Los fonones acústicos han sido propuestos como una alternativa para estudiar el tiempo de tunelaje. Hace varios años Mizuno y Tamura [59] sugirieron que, considerando que los fonones viajan a la velocidad del sonido (la cual es más baja que la velocidad del electrón), tomando en cuenta que su recorrido libre medio es macroscópico en muestras pura y poseen frecuencias características en el rango de los THz, las mediciones de los tiempos de retardos o avances de los fonones en las heteroestructuras son más fáciles de detectar que en el caso de los electrones. Tamura y Mizuno estudiaron la evolución temporal de un paquete de onda que incide normalmente sobre la interface de una superred. Por otra parte un estudio teórico de la velocidad de grupo de los fonones acústicos en una superred finita aparece en la referencia [62].

En la literatura consultada, las principales dificultades relacionadas con el cálculo del tiempo de tunelaje de los fonones a través de una heteroestructura semiconductor son:

- Para el caso del tunelaje de fonones a través de una o múltiples barreras:
 - No existe una definición de los tiempos totales de transmisión y reflexión para el tunelaje de fonones acústicos y ópticos a través de diferentes sistemas (superredes semiconductoras, resonadores de cavidad, reflectores de Bragg distribuidos, superredes gaussianas, etc.).
 - No existe una definición del tiempo de estancia.
 - No se ha encontrado una relación analítica entre el tiempo de transmisión, el tiempo de reflexión, el tiempo de estancia y el tiempo de interferencia.
- No se ha planteado la hipótesis de la existencia de un fenómeno análogo al EH para electrones en el tunelaje de fonones y de hecho no se ha dado ninguna explicación al respecto.
- La casi totalidad de las investigaciones se han hecho sobre excitaciones escalares

en detrimento del estudio de los casos que corresponden a excitaciones con campos de varias componentes. En particular no se ha obtenidos expresiones analíticas que relacionen los diferentes tiempos para el caso del tunelaje de fonones con incidencia oblicua.

Esta insuficiencias existente en el estudio del tunelaje de fonones nos permite hacernos las siguientes interrogantes:

¿Es posible definir diferentes tiempos de tunelaje (tiempos totales de transmisión y reflexión, tiempo de interferencia y tiempo de estancia) para caracterizar el tunelaje de fonones de longitud de onda larga? Sí es posible hacer estas definiciones ¿Es posible encontrar una expresión analítica general entre estos tiempos?

¿Existe el EH en el tunelaje de fonones? Sí el EH existe, entonces ¿Qué explicación podemos dar de este fenómeno?

El objetivo de esta investigación es profundizar en el conocimiento del tunelaje de fonones de longitud de onda larga a través de una heteroestructura semiconductor, tratando de dar respuesta a las interrogantes antes formuladas.

Sobre esta base se formulan los siguientes **objetivos**:

- Encontrar una relación general analítica entre los diferentes tiempos de tunelaje de fonones de longitud de onda larga en el caso particular de incidencia normal.
- Estudiar la posibilidad de la existencia de un fenómeno análogo al Efecto Hartman en el tunelaje de fonones de longitud de onda larga y proponer una explicación del mismo.
- Calcular los tiempos de tunelaje de fonones de longitud de onda larga a través de diferentes sistemas, considerando tantos modos acústicos y ópticos.

Teniendo en cuenta los objetivos anteriores se plantean las siguientes **hipótesis**:

- Si se parte de la ecuación de continuidad de la densidad de energía del sistema se puede obtener un tiempo característico análogo al tiempo de estancia para electrones; así como una relación analítica general entre el tiempo de estancia y los diferentes tiempos de transmisión, reflexión e interferencia.
- Partiendo de principios generales tales como la invarianza ante la inversión en tiempo y la invarianza ante la reflexión espacial de la ecuación de onda y la conservación del flujo de la densidad de energía podemos obtener las propiedades de la matriz de transferencia y la equivalencia entre los tiempos de transmisión y reflexión.
- Es posible encontrar una explicación para el fenómeno conocido como Efecto Hartman en el contexto del tunelaje de fonones de longitud de onda larga sobre la base de la saturación de la energía vibracional.

Para trabajar las hipótesis planteadas se obtuvieron las ecuaciones del campo usando el Principio Variacional. El método de la aproximación de la fase estacionaria nos permitió definir los tiempos de fases. La integración de la ecuación de continuidad nos permitió obtener una relación analítica entre los diferentes tiempos. Los métodos de la matriz de transferencia y de la impedancia de onda generalizada se utilizaron para obtener las amplitudes de los coeficientes en las diferentes regiones de los sistemas estudiados. De manera general se utilizaron los métodos del cálculo diferencial e integral.

La novedad de esta investigación radica en los siguientes resultados:

- Se obtienen por primera vez expresiones para los tiempos de tunelaje de fonones de longitud de onda larga, así como una expresión analítica general que relaciona a estos tiempos.
- Se demuestra la equivalencia de los tiempos de transmisión y reflexión en el tunelaje de fonones de longitud de onda larga partiendo de propiedades generales del sistema estudiado; tales como la invarianza ante la inversión en el tiempo y la invarianza

ante la reflexión espacial de la ecuación de onda y la conservación del flujo de la densidad de energía .

- Se demuestra la existencia de un fenómeno análogo al EH en el tunelaje de fonones de onda larga y se da una posible explicación del mismo sobre la base de la saturación de la energía vibracional.
- Se introduce el concepto de impedancia generalizada en el estudio del tunelaje de fonones de longitud de onda larga.
- Se realizan cálculos teóricos y numéricos del tiempo de tunelaje en diferentes sistemas, lo cual incluye a fonones acústicos y ópticos.

Esta Tesis está estructurada de la siguiente forma: En el Capítulo 1 se hace una breve revisión acerca del efecto túnel y de los tiempos de tunelaje. Una introducción al modelo fenomenológico de onda larga es desarrollado en el Capítulo 2. En el Capítulo 3 se derivan las expresiones fundamentales para los tiempos de tunelaje así como las propiedades básicas de estos tiempos. En el Capítulo 4 se realiza un estudio del EH acústicos en las heteroestructuras semiconductoras. Además se realizan cálculos numéricos y analíticos de los tiempos de tunelaje de fonones acústicos y ópticos en diferentes sistema. En particular se estudia el tunaleje resonante de fonones a través de un sistema de doble barrera de fonones. Las Conclusiones, Recomendaciones, Referencias Bibliográficas y Anexos se ubican a continuación.

2 Una introducción a los tiempos de tunelaje

Consideremos el movimiento de una partícula libre, la cual, en un instante determinado, se encuentra con una barrera de potencial más alta que su energía. Como es conocido, la Mecánica Cuántica predice una probabilidad diferente de cero de que la partícula atraviese la barrera. Entonces surge la interrogante, ¿Es posible definir el tiempo de duración y la velocidad promedio con la cual la partícula atraviesa la barrera de potencial?. Parece sorprendente que la respuesta directa a esa pregunta todavía no ha tenido una aceptación general. Este problema fue descrito en 1931 por Condon [64]; y un primer intento en resolverlo se debe a MacColl [65] un año más tarde.

En este Capítulo se discuten brevemente algunas de las definiciones del tiempo de tunelaje, haciendo particular énfasis en el tiempo de fase (también denominado retardo de grupo o tiempo de Wigner) y el tiempo de estancia.

2.1 Tiempos de tunelaje

Recientemente, los progresos en diferentes campos de la Física y especialmente el advenimiento de dispositivos electrónicos de alta velocidad, basados en el fenómeno del tunelaje,

han revivido el interés en el análisis del tiempo de tunelaje; cuya relevancia anteriormente había estado dentro del campo de la Física Nuclear. Los experimentos donde se han realizado mediciones reales de los tiempos de tunelaje de partículas han presentado como dificultad principal el hecho de que sus valores son demasiados pequeños. La simulación del tunelaje de partículas mediante el tunelaje de microondas o de un láser luminoso permitió algunas mediciones interesantes de estos tiempos dentro del marco de la Física Clásica; tales simulaciones se fundamentan en la analogía matemática existente entre el tunelaje de fotones y electrones [51]. Esta analogía se hace evidente cuando se compara la ecuación de Schrödinger estacionaria, en presencia de una barrera, con la ecuación de Helmholtz estacionaria para un paquete de ondas electromagnéticas en presencia de una barrera clásica (por ejemplo dentro de una guía de ondas).

En la actualidad no existe una coincidencia general sobre la definición teórica del tiempo de tunelaje para partículas; algunas razones son las siguientes:

- El problema de la definición del tiempo de tunelaje esta íntimamente conectado con una definición más general de la duración del tiempo de colisión cuántica, y con el hecho fundamental de que el Tiempo en algunos casos es justamente un parámetro (tal como la coordenada espacial z), pero en otros casos es un observable físico cuántico (similar a \hat{z}) [66, 67, 68].
- El movimiento de las partículas dentro de una barrera de potencial es un fenómeno cuántico, que hasta ahora ha estado libre de algún límite clásico directo.
- Existen diferencias esenciales entre las condiciones iniciales, de frontera y externas asumidas por las diferentes definiciones propuestas en la literatura; estas diferencias todavía no han sido suficientemente analizadas.

Los diferentes tiempos de tunelajes se pueden agrupar en diferentes grupos:

- Descripción dependiente del tiempo mediante un paquete de onda.

- Promedio sobre un conjunto de trayectorias cinemáticas, cuya distribución se supone para describir el movimiento dentro de la barrera.
- Introducción de un nuevo grado de libertad, constituyendo un reloj físico para las mediciones de los tiempos de tunelaje.
- Enfoque basado en el tiempo de estancia.

En el primer grupo se estudia el movimiento de un paquete de onda a través de una barrera, en general de forma arbitraria. Alguna característica (tal como, el pico central del paquete de onda, el centro de masa del paquete de onda, etc.) se selecciona de manera que permita comparar el paquete de onda a la salida y a la entrada de la barrera. A este grupo pertenece el denominado tiempo de fase [69, 70], el cual se obtiene aplicando el método de la fase estacionaria e introduciendo el concepto de velocidad de grupo. Los tiempos relacionados con el movimiento del centroide del paquete de onda [71, 72] y el enfoque propuesto por Olkhovsky-Recami [73].

En el segundo grupo se le atribuye al movimiento de la partícula un conjunto de trayectorias semiclásicas, con respecto a las cuáles un tiempo de tunelaje promedio se puede evaluar. Las integrales se construyen de varias formas, a través de las integrales de trayectorias de Feynman [66, 74], la distribución de trayectorias de Wigner [66, 74] y la aproximación de Bohm [66, 74]

En el tercer grupo se supone que existe algún grado de libertad en el sistema barrera-partícula, con el objetivo de definir un “reloj interno” el cual “mida” el tiempo de permanencia de la partícula dentro de la barrera. A este grupo pertenecen los tiempos denominados tiempo de Larmor [32] y el tiempo de Landaouer-Büttiker [32, 36]

2.1.1 Tiempos de fase

A continuación se esbozarán algunos resultados significativos de la descripción de los estados estacionarios del tunelaje cuántico. En esta descripción, una partícula de energía definida E y momento lineal $p=\hbar k$ incide por la izquierda sobre una barrera de potencial $V(z)$ que ocupa la región espacial $0 < z < L$. Aunque la solución para el estado estacionario existe en cualquier lugar, para todo instante de tiempo; ella no revela información directa acerca de la dinámica del tunelaje. Sin embargo, podemos construir paquetes de ondas localizados espacialmente mediante la superposición de estados estacionarios con diferentes energías.

La evolución temporal de un paquete de onda es frecuentemente muy difícil debido a su naturaleza dispersiva. Sin embargo, bajo determinadas condiciones, es posible seguir la posición del pico de un paquete de onda simétrico con una buena precisión, despreciando los efectos de dispersión del mismo. Se considera un paquete de onda estrecho centrado alrededor del número de onda k_0 , y se identifica al mismo tomando su pico como un punto de referencia.

El pico del paquete de onda está formado por aquellas componentes de Fourier para las cuales la variación de las fases en la vecindad de k_0 se reduce suficientemente; de manera que ellas no interfieren destructivamente. Los paquetes de ondas transmitido y reflejado serán descritos mediante las funciones de ondas, correspondientes a un intervalo de frecuencias pequeño. Para el paquete de onda transmitido tenemos que

$$\Psi(z; k) \propto \exp \left\{ i \left[kz - \frac{E(k)t}{\hbar} + \alpha_t(k) \right] \right\} \quad (2.1)$$

donde α_t es la fase del paquete de onda. El método de la fase estacionaria se utiliza para definir el tiempo de fase. Para seguir la posición $z_p(t)$ del pico del paquete de onda,

buscamos para cuáles valores de $z_p(t)$ la fase es estacionaria en determinado instante t .

Entonces se obtiene

$$\frac{d}{dk} \left(kz_p(t) - \frac{E(k)t}{\hbar} + \alpha_t(k) \right) = 0 \Rightarrow z_p(t) = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} t - \frac{d\alpha_t}{dk}. \quad (2.2)$$

La cantidad

$$\delta z = \left(\frac{d\alpha_t}{dk} \right)_{k_o}, \quad (2.3)$$

representa un retardo espacial δz provocado por el proceso del tunelaje. Dividiendo (2.3) por la velocidad de grupo del paquete de onda v_g se obtiene el tiempo de fase

$$t_{ph} = \frac{1}{v_g} \frac{d\alpha_t}{dk} = \hbar \frac{d\alpha_t}{dE}. \quad (2.4)$$

Las magnitudes que aparecen en la ecuación anterior son calculadas para $k = k_o$. Por razones que se fundamentan posteriormente se define el tiempo total de transmisión $\tau_t(z_1, z_2; k)$ como el tiempo que permanece la partícula entre dos puntos z_1 y z_2 externos a la barrera y suficientemente distante de ella; de manera que $z_1 \ll 0$ y $z_2 \gg L$. Entonces

$$\tau_t(z_1, z_2; k) = \frac{1}{v_g} \left(z_2 - z_1 + \frac{d\alpha_t(k)}{dk} \right), \quad (2.5)$$

y de manera análoga el tiempo total de reflexión

$$\tau_r(z_1, z_2; k) = \frac{1}{v_g} \left(-2z_1 + \frac{d\alpha_r(k)}{dk} \right). \quad (2.6)$$

donde α_r es la fase del paquete de onda reflejado.

De las ecuaciones (2.5) y (2.6) se observa que ambos tiempos dependen linealmente de las coordenadas espaciales z_1 y z_2 . Aproximando z_1 a 0 y z_2 a L obtenemos los tiempos de transmisión y reflexión extrapolados a la región de la barrera; tal aproximación está sujeta

a determinadas restricciones. De hecho, ya que hemos supuesto que las componentes del paquete de onda están distribuidas en la vecindad del número de onda k_o , la dispersión espacial del paquete es del orden de σ^{-1} ($\sigma \equiv \Delta k$). Los paquetes de ondas incidente y reflejado pueden interferir delante de la barrera. Por otra parte, en la aproximación de la fase estacionaria no se sigue realmente la evolución temporal del paquete de onda, sólo se observa (asintóticamente) el retardo de fase correspondiente al número de onda k_o . Los tiempos totales extrapolados a la región de la barrera vienen dado por las siguientes expresiones

$$\tau_t(z_1, z_2; k) = \frac{1}{v_g} \left(L + \frac{d\alpha_t(k)}{dk} \right), \quad (2.7)$$

y

$$\tau_r(z_1, z_2; k) = \frac{1}{v_g} \left(\frac{d\alpha_r(k)}{dk} \right). \quad (2.8)$$

Aunque estos tiempos parece coincidir bien con los datos experimentales presentan algunas dificultades. Entre los problemas más comunes que se le atribuyen a estos tiempos está el hecho de que el pico del paquete de onda a la salida de la barrera no siempre se corresponde con el pico de entrada, debido a la presencia, entre las componentes de Fourier del paquete de onda, de frecuencias cercanas o por encima a la energía de la barrera. Estas componentes de alta frecuencia alcanzan la barrera muy temprano, ya que ellas viajan hacia la barrera menos distorsionadas por las ondas reflejadas con respecto a las componentes de baja frecuencia. Como consecuencia además de los efectos de distorsión, aparece un efecto de aceleración del paquete de onda.

Para barreras simétricas se demuestra que $\tau_t = \tau_r$ [75]. Una barrera simétrica se caracteriza por un retardo de fase único que describe la ocurrencia de los picos de los paquetes de ondas transmitidos y reflejados. Para una barrera asimétrica se define un retardo de grupo

bidireccional $\tilde{\tau}$ como el promedio ponderado de los retardos de grupos de transmisión y reflexión, siendo los pesos las probabilidades de transmisión y reflexión

$$\tilde{\tau} = |R(k)|^2 \tau_R + |T(k)|^2 \tau_T. \quad (2.9)$$

Los retardos de grupos son definidos como cantidades asintóticas, que se aplican a eventos completos de tunelaje, alejados de la región de la barrera. H Winful ha considerado que el retardo de grupo no exige ser un tiempo de tránsito. Esto es debido a que los paquetes de ondas incidentes y transmitidos son dos entidades diferentes. Solo se puede afirmar que en $t = 0$, el pico extrapolado del paquete de onda incidente está en $z = 0$; y en $t = \tau_t$ el pico extrapolado del paquete de onda transmitido está en $z = L$. No existe nada que implique que el pico del paquete de onda incidente se ha propagado a la salida. Por otro lado no es posible conocer donde el paquete de onda transmitido estaba en $t = 0$; luego el tiempo de fase no mide el tiempo que toma al paquete de onda en viajar desde la entrada a la salida de la barrera [51].

2.1.2 Tiempo de estancia

El tiempo de estancia, t_D , fue introducido por Smith en 1960 [76], con el fin de estimar la duración promedio de un proceso de colisión sin distinguir entre los diferentes canales de transmisión y reflexión. En el contexto del tunelaje cuántico el tiempo de estancia fue introducido por Buttiker [33], como la razón entre la probabilidad de que la partícula esté en una cierta región espacial y el flujo j_i que penetra a esa región; sin tener en cuenta si la partícula es reflejada o transmitida

$$t_D = \frac{1}{j_i} \int |\Psi(z, k)|^2 dz. \quad (2.10)$$

Para una partícula libre descrita por una onda plana de amplitud unitaria el flujo incidente j_i sobre la barrera es igual a la velocidad de grupo v_g . El tiempo de estancia no distingue entre las partículas transmitidas de las partículas reflejadas, lo cual es una propiedad de la función de onda [37]. El tiempo de estancia es el tiempo de permanencia en la región dentro de la barrera, promediado sobre todas las partículas incidentes; sin considerar si la partícula es finalmente transmitida o reflejada [77]. Por otra parte Büttiker y Landauer [32] han acotado que tiempo es el tiempo promediado de permanencia de una partícula dentro de la barrera; y no es el tiempo de tránsito a través de la barrera, cuando la mayoría de las partículas son reflejadas. Luego, el tiempo de estancia no puede ser utilizado para definir una velocidad de tránsito para los diferentes canales de transmisión y reflexión. Recientemente Winful ha demostrado que el retardo de grupo en el tunelaje tiene exactamente el mismo “privilegio” que el tiempo de estancia: una característica de toda la función de onda con componentes directa e inversa [51].

Leavens y Aers [77] han probado que la expresión para el tiempo de estancia (2.10) es equivalente a

$$t_D = \int_0^\infty dt \int_0^L dz |\Psi(z, t)|^2. \quad (2.11)$$

La integración es sobre todo el tiempo de la probabilidad de encontrar a la partícula dentro de la región de la barrera. La expresión (2.11) proporciona el tiempo de estancia o permanencia dentro de la barrera, de nuevo, sin considerar si la partícula es finalmente transmitida o reflejada.

Aunque el retardo de grupo se define como la derivada de la fase respecto a la energía y el tiempo de estancia mediante la integral de la densidad de probabilidad, las dos cantidades están relacionadas. Hauge y sus colaboradores [71] han obtenido la relación general entre

estos tiempos

$$t_D(z_1, z_2; k) = \mathcal{R}\tau_r(z_1, z_2; k) + \mathcal{T}\tau_t(z_1, z_2; k) + \frac{m\sqrt{\mathcal{R}}}{\hbar k^2} \sin(\alpha_r - 2kz_1), \quad (2.12)$$

en el contexto mecánico cuántico mediante el análisis de paquetes de ondas dependientes del tiempo; donde el último término representa el tiempo de interferencia τ_i , definido mediante la siguiente relación

$$\tau_i(k) = \frac{m\sqrt{\mathcal{R}}}{\hbar k^2} \sin(\alpha_r - 2kz_1). \quad (2.13)$$

Partiendo de las ecuación (2.12) se define el tiempo de estancia generalizado t_{D_g} como la suma algebraica de los tiempos de estancia e interferencia. Luego teniendo en cuenta la relación (2.9) se demuestra que

$$\tilde{\tau} = t_D + \tau_i = t_{D_g}. \quad (2.14)$$

El estado del tiempo de estancia se considera bien establecido. Sin embargo, no es evidente que el promedio total representado por t_D se distribuya entre los diferentes canales de dispersión de manera única. Para que las expresiones generales de los tiempos de reflexión y transmisión tengan algún significado, se establece sin prueba, que un requerimiento necesario (pero no suficiente) [37] es que se verifique la relación

$$t_D = \mathcal{R}\tau_R + \mathcal{T}\tau_T. \quad (2.15)$$

La justificación para este criterio se fundamenta ampliamente en el pensamiento clásico de eventos mutuamente excluyentes. La relación anterior es una consecuencia directa del hecho de que la partícula incidente, en el tunelaje unidimensional, finalmente es transmitida

o reflejada [37].

Por otro lado, una relación general entre el retardo de grupo y el tiempo de estancia se ha obtenido para partículas relativistas descritas por la ecuación de Dirac [78].

2.2 El Efecto Hartman

Hartman [52] analizó algunos aspectos temporales del tunelaje. Él consideró las soluciones de la ecuación Schrödinger dependiente del tiempo como una superposición integral de soluciones de estados estacionarios, ponderados por una función de distribución de momentos gaussiana. Su estudio estuvo restringido al paso de un paquete de onda gaussiano estrecho a través de una barrera de potencial rectangular de altura V_o y ancho L . La integral en la energía se extiende desde cero hasta infinito y por consiguiente posee las contribuciones de las componentes que no tunelan la barrera con $E > V_o$; así como de aquellas componentes que tunelan la barrera con energía $E < V_o$. El centro de la distribución de energía del paquete de onda se localiza a la energía $E_o < V_o$.

Hartman infiere, sin tener que evaluar explícitamente las integrales, determinadas propiedades del paquete de onda transmitido mediante el análisis de la fase y la magnitud del integrando. Él encontró que para barreras delgadas el paquete transmitido posee la misma forma que el paquete incidente y que sus retardos (obtenidos mediante el método de la fase estacionaria) es mayor que el denominado “tiempo uniforme” requerido para atravesar una distancia en el espacio libre igual al espesor de la barrera. Para barreras más gruesas el pico del paquete de ondas se desplaza un poco hacia las energías más altas como resultado de la acción de filtrado. Sin embargo, lo más importante es lo que actualmente se conoce como EH, el hecho de que el tiempo de retardo es independiente del espesor de la barrera y es más pequeño que el tiempo uniforme. Para barreras muy delgadas las

componentes por debajo de la barrera son eliminadas de manera que la propagación de las componentes por encima de la barrera son dominantes; a tal punto que el tiempo de retardo comienza a incrementarse de nuevo (región clásica). La transición entre las regiones planas y clásicas fue caracterizada cuantitativamente por Brouard y sus colaboradores [79, 80]. Para un paquete de onda suficientemente estrecho, si E_o no está demasiado cerca de V_o , la integración en la energía se puede truncar hasta la altura de la barrera. Luego, no existirán contribuciones por encima de la barrera y el retardo de grupo se satura aún cuando la longitud de la barrera tiende a infinito. Además, para distribuciones de energía suficientemente estrecha, el efecto de filtrado es despreciable y la energía promedio de los paquetes de ondas incidentes y transmitidos es la misma.

Si el retardo de grupo se toma como el tiempo de tránsito a través de la distancia L , las partículas viajan con una velocidad de grupo $v_g = L/\tau_t$. Si el retardo de grupo se hace constante mientras se incrementa el espesor de la barrera la velocidad de grupo aumenta con la longitud. Como no existe restricción sobre el espesor de la barrera, finalmente la velocidad de grupo excederá la velocidad de la luz en el vacío. De hecho la transmisión de la barrera también decrece exponencialmente con la longitud, lo cual finalmente significa que cuando la transmisión se aproxima a cero, la velocidad de grupo se aproxima a infinito. La no acotación del valor de la velocidad debido al EH ha conducido a continuas controversias relacionadas con la superluminosidad y la violación del principio de la causalidad en el tunelaje a través de una barrera [51]. Esta aparente superluminosidad asociada con el retardo de grupo ha motivado la búsqueda de otros tiempos de tunelaje.

El EH también está presente en las expresiones relativistas, para los retardos de grupos y el tiempo de estancia, calculadas mediante la ecuación de Dirac [78].

3 MODELO FENOMENOLÓGICO DE ONDA LARGA

Después de presentar en el Capítulo precedente los aspectos más generales del efecto túnel y los tiempos de tunelaje, ahora, la atención estará enfocada en el modelo fenomenológico de onda larga para materiales no polares.

Los modelos fenomenológicos son ampliamente utilizados para el cálculo de los estados vibracionales en heteroestructuras de diversos materiales semiconductores. La idea general de los mismos consiste en resolver las ecuaciones del movimiento, estimando los parámetros que aparecen en la matriz dinámica con ajuste al experimento.

3.1 Modelo fenomenológico completo

Trallero y sus colaboradores [81, 82] proponen un modelo fenomenológico el cual considera los efectos electrostáticos y mecánicos acoplados entre sí de una forma natural. Para lograrlo postulan la siguiente densidad Lagrangiana

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}\rho \left| \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \right|^2 - \frac{1}{2}\rho\omega_T^2 |\mathbf{u}|^2 - \alpha \mathbf{u} \cdot \nabla \phi + \frac{\epsilon_\infty |\nabla \phi|^2}{8\pi} + \frac{\sigma_{ij} u_{ji}^* + \sigma_{ji}^* u_{ij}}{4}, \quad (3.1)$$

donde

$$\alpha^2 = \frac{1}{4} (\epsilon_0 - \epsilon_\infty) \rho \omega_T^2, \quad (3.2)$$

\mathbf{u} representa el desplazamiento relativo de los dos iones involucrados. Otros parámetros físicos del medio son $\rho = \mu/v_c$, la densidad de masa reducida, donde μ es la masa reducida de los iones y v_c el volumen de la celda unidad; ω_L y ω_T son las frecuencias longitudinal y transversal del masivo, respectivamente; β_L y β_T son dos parámetros que describen la dispersión de las oscilaciones.

El primer término es la densidad de energía cinética, el segundo término representa un acoplamiento del campo \mathbf{u} consigo mismo, el tercer término describe el acoplamiento de las oscilaciones mecánicas con el campo eléctrico y el cuarto término es la energía del campo eléctrico en el medio. El último término incorpora las tensiones internas del medio y provoca el carácter disipativo de las oscilaciones.

3.2 Densidad de energía vibracional

Los materiales no polares pueden ser vistos como un caso particular de los polares cuando ambos átomos en la celda elemental son iguales. Entonces el campo eléctrico asociado al movimiento relativo de estos átomos desaparece. Matemáticamente el problema puede ser tratado haciendo cero la constante de acoplamiento entre las oscilaciones mecánicas y el campo electrostático. Bajo esta condición muchos resultados obtenidos para medios polares serán válidos en los sistemas no polares.

Para direcciones de alta simetría de la estructura, tales como [001] y [111], las ecuaciones del movimiento se desacoplan en una oscilación longitudinal y dos oscilaciones transversales degeneradas, las cuales son descritas mediante un modelo de cadena lineal [83]. Los fonones con vectores de onda cercanos al centro de la zona de Brillouin [84] no sienten

la naturaleza discreta de la estructura atómica, y para ellos la aproximación de longitud de onda larga es válida. En estas condiciones las ecuaciones discretas del movimiento se transforman en un problema continuo descrito por un sistema de ecuaciones diferenciales de segundo orden [81, 85, 86]. Las mismas ecuaciones son válidas para oscilaciones longitudinales y transversales de manera que eliminaremos cualquier referencia al tipo de oscilación. Esta consideración también incluye a los fonones acústicos con la apropiada selección de los parámetros.

Para desarrollar todo el formalismo matemático de los tiempos de tunelaje de fonones de longitud de onda larga se parte se parte de la densidad Lagrangiana correspondiente o la densidad Hamiltoniana equivalente [85] para el caso unidimensional. La densidad de energía vibracional se expresa como

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2}\rho \left| \frac{\partial u}{\partial t} \right|^2 + \frac{1}{2}\rho\omega_0^2|u|^2 + \frac{1}{4} \left[\sigma \frac{\partial u^*}{\partial z} + \sigma^* \frac{\partial u}{\partial z} \right], \quad (3.3)$$

A semejanza con el modelo descrito en la sección anterior el primer término en (3.3) representa la densidad de energía cinética, el segundo representa la densidad de la energía de interacción del campo de fonones consigo mismo, y el tercero la densidad de la energía de la deformación que otorga el carácter dispersivo a la oscilaciones. Estos términos dependen del desplazamiento atómico relativo u , la densidad lineal de masa ρ , la frecuencia de los fonones en el centro de la zona de Brillouin ω_0 , el tensor de deformaciones unidimensional $\partial u/\partial z$, y el tensor de tensiones σ , el cual es igual a

$$\sigma = -\rho\beta^2\partial u/\partial z, \quad (3.4)$$

donde β es un parámetro que tiene en cuenta la relación de dispersión de fonones en el masivo.

Integrando la ecuación (3.3) en el intervalo espacial (z_1, z_2) se obtiene la energía vibracional H , mediante la siguiente expresión

$$H = \int_{z_1}^{z_2} \mathcal{H} dz. \quad (3.5)$$

3.2.1 Ecuaciones del campo

Partiendo de la ecuación (3.3), la ecuación del movimiento unidimensional [85] es fácilmente obtenida,

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = -\omega_0^2 u - \beta^2 \frac{\partial^2 u}{\partial z^2}, \quad (3.6)$$

y sustituyendo (3.4) en la ecuación (3.6) se obtiene

$$\frac{\partial^2 \sigma}{\partial t^2} = -\omega_0^2 \sigma - \beta^2 \frac{\partial^2 \sigma}{\partial z^2}. \quad (3.7)$$

Para obtener la ecuación de continuidad, en el caso unidimensional, sumamos la ecuación del movimiento (3.6) multiplicada por la compleja conjugada de $\partial u / \partial z$ con la compleja conjugada de la ecuación del movimiento (3.6) multiplicada por $\partial u / \partial z$. Posteriormente, la ecuación obtenida es integrada adecuadamente en la región ocupada por la barrera obteniéndose

$$\partial \mathcal{H} / \partial t + \partial j / \partial z = 0, \quad (3.8)$$

como un caso particular del desarrollo presentado en [86] donde el flujo de la densidad de energía j viene dado por

$$j = -1/2 (\sigma \partial u^* / \partial t + \sigma^* \partial u / \partial t). \quad (3.9)$$

3.2.2 Estados propagantes

Consideremos alguna región espacial con parámetros del material constante y el rango de oscilaciones ópticas permitidas $w < w_o$. La solución para la ecuación del movimiento (3.6) es igual a

$$u = [A_t e^{ikz} + A_r e^{-ikz}] e^{-i\omega t}, \quad (3.10)$$

donde $k = \sqrt{(\omega_o^2 - \omega^2) / \beta^2}$ es el vector de onda, y A_t , A_r son los coeficientes de las soluciones propagantes a la derecha (transmitida) y a la izquierda (reflejada), respectivamente. Para esta solución la energía vibracional [87] en el intervalo (z_1, z_2) es igual a

$$H = \rho \omega^2 [|A_t|^2 + |A_r|^2] \Delta z + \rho \frac{\omega_o^2}{k} |A_t| |A_r| (\sin(\alpha_t - \alpha_r + 2kz_2) - \sin(\alpha_t - \alpha_r + 2kz_1)), \quad (3.11)$$

donde los coeficientes se escriben como funciones de sus respectivas magnitudes y fases, $A_t = |A_t| e^{i\alpha_t}$ y $A_r = |A_r| e^{i\alpha_r}$; y $\Delta z = z_2 - z_1$.

Sustituyendo (3.10) en (3.9) se obtiene la expresión para el flujo de la densidad de energía [87] según la siguiente relación

$$j = -\rho \omega \beta^2 k [|A_t|^2 - |A_r|^2]. \quad (3.12)$$

3.2.3 Estados prohibidos

Consideremos alguna región espacial con parámetros del material constante y el rango de oscilaciones ópticas prohibidas $w > w_o$. La solución para la ecuación del movimiento (3.6) se puede obtener partiendo de la solución (3.10) después de realizar la sustitución $k = i\kappa$

$$u = [A_t e^{-\kappa z} + A_r e^{\kappa z}] e^{-i\omega t}, \quad (3.13)$$

donde ahora $\kappa = \sqrt{(\omega^2 - \omega_0^2) / \beta^2}$. Es importante notar que la sustitución $k = i\kappa$ la cual transforma la ecuación (3.10) en la ecuación (3.13) no es aplicable para realizar la transformación directa de (3.11). Entonces, es necesario calcular de nuevo la energía vibracional [87]. Partiendo de la ecuación (5.8) y utilizando la relación (3.13) se obtiene

$$H = \rho \frac{\omega_0^2}{2\kappa} [|A_t|^2 (-e^{-2\kappa z_2} + e^{-2\kappa z_1}) + |A_r|^2 (e^{2\kappa z_2} - e^{2\kappa z_1})] + 2\rho\omega^2 |A_t| |A_r| \cos(\alpha_t - \alpha_r) \Delta z. \quad (3.14)$$

De manera similar sustituyendo (3.13) en (3.9) se obtiene la expresión para el flujo de la densidad de energía [87] según la siguiente expresión

$$j = 2\rho\omega\beta^2\kappa |A_t| |A_r| \sin(\alpha_t - \alpha_r). \quad (3.15)$$

3.3 Heteroestructuras semiconductoras

Consideremos una heteroestructura semiconductoras con una configuración arbitraria de materiales que actúan como barreras y pozos alternativamente. Para estos sistemas son válidas las expresiones obtenidas para las oscilaciones permitidas (3.11) y (3.12) y las oscilaciones prohibidas (3.14) y (3.15). Suponemos que la heteroestructura esta intercalada entre materiales masivos que actúan como pozos y que un fonón esta incidiendo por el lado izquierdo del sistema. Parte de la energía que incide es reflejada por la heteroestructura y la otra parte es transmitida, de acuerdo con la conservación del flujo de la densidad de energía. En nuestro caso el flujo de la densidad de energía (3.12) ((3.15)) es independiente de la coordenada y es igual al flujo transmitido a la derecha de la heteroestructura j_t , el cual a su vez es proporcional al coeficiente de transmisión del sistema. Las amplitudes de las ondas utilizadas para calcular la energía (3.11) ((3.14)) en las diferentes regiones se obtienen mediante el método de la matriz de transferencia.

Una superred consiste en un apilamiento alternado de capas de dos materiales diferentes que indicaremos con los números 1 y 2. Las capas de un mismo material presentan todas el mismo espesor, de modo que la superred muestra una estructura periódica. La celda unidad de la estructura está compuesta por una capa de cada material de espesores d_1 y d_2 .

En [86] los coeficientes de transmisión y reflexión unidimensionales son calculados para una superred finita con un número arbitrario de períodos. Los resultados son generalizaciones de los fonones acústicos estudiados en [59] con el objetivo de incluir los fonones ópticos. El coeficiente del espacio solución al lado derecho de la heteroestructura es igual a

$$A_t = \frac{2e^{-ik_2Nd}}{2C(N) - i \left[\left(\frac{\Upsilon_2}{\Upsilon_1} \chi + \frac{\Upsilon_1}{\Upsilon_2} \zeta \right) \right] S(N)}, \quad (3.16)$$

donde las siguientes expresiones son tomada de [86]

$$S(N) = \begin{cases} \frac{\sin N\vartheta}{\sin \vartheta} & \text{para } \left| \frac{\lambda+\mu}{2} \right| \leq 1 \\ \left(\frac{\lambda+\mu}{|\lambda+\mu|} \right)^{N+1} \frac{\sinh N\vartheta}{\sinh \vartheta} & \text{para } \left| \frac{\lambda+\mu}{2} \right| > 1 \end{cases} \quad (3.17)$$

$$C(N) = \begin{cases} \cos N\vartheta & \text{para } \left| \frac{\lambda+\mu}{2} \right| \leq 1 \\ \left(\frac{\lambda+\mu}{|\lambda+\mu|} \right)^N \cosh N\vartheta & \text{para } \left| \frac{\lambda+\mu}{2} \right| > 1 \end{cases} \quad (3.18)$$

definiendo

$$\cos(\vartheta) \equiv \frac{\lambda + \mu}{2} \quad \text{para } \left| \frac{\lambda + \mu}{2} \right| \leq 1, \quad (3.19)$$

$$\cosh(\vartheta) \equiv \left| \frac{\lambda + \mu}{2} \right| \quad \text{for } \left| \frac{\lambda + \mu}{2} \right| > 1, \quad (3.20)$$

y

$$\lambda = \cos \alpha_1 \cos \alpha_2 - \frac{\Upsilon_1}{\Upsilon_2} \sin \alpha_1 \sin \alpha_2, \quad (3.21)$$

$$\chi = \sin \alpha_1 \cos \alpha_2 + \frac{\Upsilon_1}{\Upsilon_2} \cos \alpha_1 \sin \alpha_2, \quad (3.22)$$

$$\zeta = \sin \alpha_1 \cos \alpha_2 + \frac{\Upsilon_2}{\Upsilon_1} \cos \alpha_1 \sin \alpha_2, \quad (3.23)$$

$$\mu = \cos \alpha_1 \cos \alpha_2 - \frac{\Upsilon_2}{\Upsilon_1} \sin \alpha_1 \sin \alpha_2, \quad (3.24)$$

donde $\Upsilon_j = \rho_j \beta_j^2 k_j$, $\alpha_j = k_j d_j$, $j = 1, 2$, y d_j es el ancho de la capa. El subíndice 1(2) nombra al material que actúa como barrera (pozo). La fase de la amplitud transmitida $A_t = |A_t|e^{i\alpha_t}$ es igual a

$$\alpha_t = -k_2 N d + \arctan \left[\frac{h_+ S(N)}{2C(N)} \right], \quad (3.25)$$

donde

$$h_{\pm} = \frac{\Upsilon_2}{\Upsilon_1} \chi \pm \frac{\Upsilon_1}{\Upsilon_2} \zeta. \quad (3.26)$$

El coeficiente del espacio de solución a la izquierda de la heteroestructura $A_r = |A_r|e^{i\alpha_r}$ es igual a

$$A_r = \frac{[h_- - i(\lambda - \mu)] S(N)}{h_+ S(N) + 2iC(N)}, \quad (3.27)$$

y la fase de la amplitud reflejada es

$$\alpha_r = -k_2 d_2 + \arctan \left[\frac{h_+ S(N)}{2C(N)} \right] - \frac{\pi}{2}. \quad (3.28)$$

4 TIEMPOS DE TUNELAJE PARA FONONES DE LONGITUD DE ONDA LARGA

El modelo fenomenológico de onda larga fue introducido en el Capítulo precedente, como una alternativa para explicar el comportamiento de los materiales semiconductores no polares.

En este Capítulo se definirán los diferentes tiempos de tunelaje que permiten estudiar el tunelaje de fonones a través de diferentes sistemas construidos con estos materiales.

4.1 Tiempos de fases asintóticos

Consideremos un sistema arbitrario al cual de forma genérica le llamaremos en lo adelante barrera, salvo que se especifique lo contrario, tal como se muestra en la Figura 4.1. Analizaremos el proceso de dispersión de paquetes de ondas de fonones por la barrera. Los paquetes de ondas dependiente del tiempo transmitido y reflejado, se construyen como

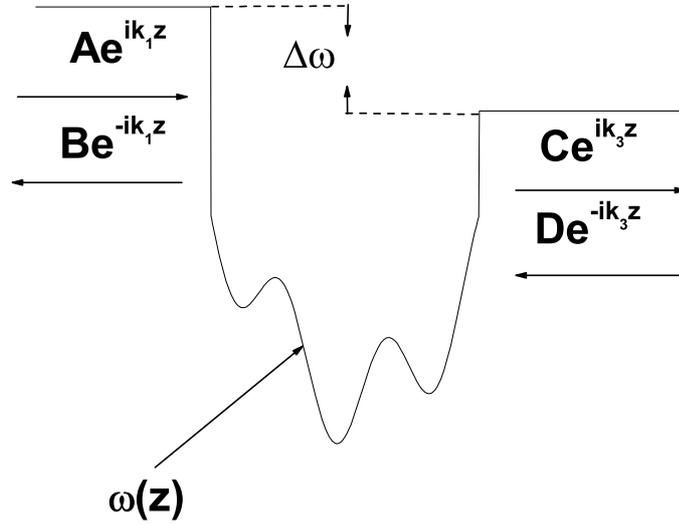


Figura 4.1: Configuración para la dispersión estacionaria en una dimensión. Una barrera arbitraria esta confinada en el intervalo espacial (z_1, z_2) entre dos medios semi-infinitos.

una superposición de las soluciones estacionarias mediante las siguientes ecuaciones,

$$u_T(z, t) = \int \frac{dk}{2\pi} \phi(k) |A_t| e^{i[kz - \omega t + \alpha_t]}, \quad (4.1)$$

$$u_R(z, t) = \int \frac{dk}{2\pi} \phi(k) |A_r| e^{-i[kz + \omega t - \alpha_r]}, \quad (4.2)$$

donde $\phi(k)$ es el paquete de onda en el espacio de los vectores de ondas; definido como la transformada de Fourier del desplazamiento de los fonones determinado por el paquete en $t = 0$. Supondremos que el paquete de onda $\phi(k)$ presenta un máximo en $k = k_o$.

En la aproximación de la fase estacionaria, las contribuciones dominantes a las integrales

(4.1) y (4.2) provienen de los valores cercanos a k_o que satisfacen que

$$\frac{d\alpha_t}{dk} + z_p - \frac{d\omega}{dk}t = 0, \quad (4.3)$$

$$\frac{d\alpha_r}{dk} - z_p - \frac{d\omega}{dk}t = 0. \quad (4.4)$$

Partiendo de la ecuaciones (4.3) y (4.4) observamos que los picos de los paquetes de ondas transmitidos y reflejados se mueven como si

$$z_p = v_g \left(t - \frac{d\alpha_t}{d\omega} \Big|_{k_o} \right), \quad (4.5)$$

$$z_p = -v_g \left(t - \frac{d\alpha_r}{d\omega} \Big|_{k_o} \right), \quad (4.6)$$

donde $v_g = d\omega/dk$ es la velocidad de grupo de los fonones. La dispersión provocada por la barrera genera retardos temporales para los paquetes de ondas transmitidos y reflejados

$$t_{ph}^t = \frac{d\alpha_t}{d\omega} \Big|_{k_o}, \quad (4.7)$$

$$t_{ph}^r = \frac{d\alpha_r}{d\omega} \Big|_{k_o}, \quad (4.8)$$

lo cual generaliza los resultados de Mizuno y Tamura [60] para los fonones acústicos al incluir los fonones ópticos [87].

4.2 Tiempo de estancia

Para la solución estacionaria de la ecuación del movimiento el flujo de la densidad de energía no depende de las coordenadas espaciales y temporales; es decir el flujo es constante a través de toda la región ocupada por la barrera. En este contexto se define el tiempo

de estancia de los fonones [87] en la región ocupada por la barrera como

$$t_D = -\frac{H}{j}, \quad (4.9)$$

donde H es la energía vibracional en el intervalo (z_1, z_2) , obtenido mediante la integración de (3.3).

En lo que sigue nosotros tomamos (4.9) como la definición del tiempo de estancia t_D . Nótese que j se refiere al flujo en el mismo intervalo donde la energía H es calculada. El signo menos en (4.9) se necesita debido a que el flujo de la densidad de energía es negativo para los fonones ópticos, determinado por la velocidad de grupo negativa asociada con la relación de dispersión parabólica dentro del masivo. Para obtener la relación de dispersión para los fonones acústicos se necesita hacer la constante ω_o igual a cero, y hacer la sustitución de $\beta^2 \rightarrow -v^2$, donde v es la velocidad del sonido. Por razones de conveniencia, en lo que sigue, escribiremos expresiones válidas para los fonones ópticos salvo que se especifique lo contrario. Luego, para los fonones acústicos la ecuación (4.9) se escribe como $t_D = H/j$.

Para un intervalo compuesto por la unión de un conjunto de intervalos $(z_1, z_2)U(z_2, z_3) \cdots$, disjuntos dos a dos; y j constante (tal como es el caso estacionario que estamos considerando) se demuestra que el tiempo de estancia es aditivo [87] y se calcula como

$$t_D = t_D^{z_1, z_2} + t_D^{z_2, z_3} + \cdots. \quad (4.10)$$

Este resultado es muy conveniente para las situaciones físicas que posteriormente consideraremos.

4.3 Relación entre los tiempos de fase y el tiempo de estancia

Sea una barrera de forma arbitraria que se encuentra dentro de la región espacial (a, b) , entre dos medios semi-infinitos de materiales que actúan como pozos. Emplearemos el método desarrollado en [71], aprovechando la analogía matemática entre los problemas de dispersión de electrones y fonones. En este trabajo particularizaremos en el caso de la dispersión de fonones.

Por razones de conveniencia es útil escribir la solución estacionaria de la ecuación del movimiento (3.6) en la siguiente forma

$$u(z) = \begin{cases} e^{ikz} + A_r(k)e^{-ikz} & z \leq a \\ \Psi(z, k) & a < z < b, \\ A_t(k)e^{ikz} & z \geq b \end{cases}, \quad (4.11)$$

y la descomposición de Fourier para cada parte de la solución, con pesos determinados por la transformada de Fourier del paquete de onda inicial, mediante las siguientes relaciones

$$u_L(z, t) = \int \frac{dk}{2\pi} \phi(k) [e^{ikz} + A_r(k)e^{-ikz}] e^{-i\omega t}, \quad (4.12)$$

$$u_{(a,b)}(z, t) = \int \frac{dk}{2\pi} \phi(k) \Psi(z, k) e^{-i\omega t}, \quad (4.13)$$

$$u_R(z, t) = \int \frac{dk}{2\pi} \phi(k) A_t(k) e^{i(kz - \omega t)}, \quad (4.14)$$

donde los subíndices L (R) significan a la izquierda (derecha) de la región (a, b) .

Integraremos la ecuación de continuidad (3.8) a través de la región de interés para una

densidad de energía dependiente del tiempo arbitraria.

$$\frac{d}{dt} \int_a^b \mathcal{H} dz + j(b, t) - j(a, t) = 0. \quad (4.15)$$

Sustituyendo (4.12), (4.13) y (4.14) en la expresiones (3.3) y (3.9) para reescribir la ecuación (4.15). Suponiendo que inicialmente el paquete de onda estaba a la izquierda de $z = a$ y considerando que su solapamiento con el intervalo (a, b) es esencialmente igual a cero; entonces (4.15) puede ser integrada dos veces respecto al tiempo. En la integración temporal la relación [87]

$$\delta(\omega - \omega') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i(\omega - \omega')\tau} d\tau = \frac{(\omega + \omega')}{\beta^2(k + k')} \delta(k - k'), \quad (4.16)$$

válida para la relación de dispersión de fonones ópticos $\omega^2 = \omega_o^2 - \beta^2 k^2$ es utilizada. La primera parte de la ecuación (4.15) después de la integración y, para la solución estacionaria se transforma en

$$\Pi_1 = \int dk \frac{|\phi(k)|^2}{2\pi} \left(\frac{\omega}{k\beta^2} \right) \int_a^b dx \mathcal{H}_{(a,b)}(k, z), \quad (4.17)$$

donde

$$\mathcal{H}_{(a,b)}(k, z) = \frac{1}{2} \rho \left| \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right|^2 + \frac{1}{2} \rho \omega_o^2 |\Psi|^2 - \frac{1}{2} \rho \left| \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right|^2. \quad (4.18)$$

Las otras dos partes de (4.15) relaciona términos muchos más grandes. La integración en las variables k o k' se cambia sin mucha dificultad a las nuevas variables $k = Q + q/2$ y $k' = Q - q/2$. Los cálculos son largos y tediosos e incluye el desarrollo en series de

potencias alrededor de $q = 0$; pero conducen directamente a

$$\begin{aligned} \Pi_2 = & - \int \frac{dk}{2\pi} |\phi(k)|^2 \rho \omega^2 [|A_t(k)|^2 \left(\frac{-d\alpha_t(k)}{d\omega} - \frac{b-a}{v_g} \right) + |A_r(k)|^2 \left(\frac{-d\alpha_r(k)}{d\omega} + \frac{2a}{v_g} \right) \\ & + \frac{\omega_0^2}{\omega \beta^2 k^2} |A_r(k)| \sin(\beta(k) - 2ka)]. \end{aligned} \quad (4.19)$$

Entonces de (4.15) se obtiene la condición de que $\Pi_1 + \Pi_2 = 0$. Dado que $|\phi(k)|^2$ es arbitraria, se obtiene la siguiente relación entre los diferentes tiempos de tunelaje [87]

$$t_D \mathcal{T} = \tau_t \mathcal{T} + \tau_r \mathcal{R} + \tau_i, \quad (4.20)$$

donde

$$\tau_t(k) = -\frac{d\alpha_t}{d\omega} - \frac{b-a}{v_g}, \quad (4.21)$$

$$\tau_r(k) = -\frac{d\alpha_r}{d\omega} + \frac{2a}{v_g}, \quad (4.22)$$

$$\tau_i(k) = \frac{\omega_0^2}{\omega \beta^2 k^2} \sqrt{\mathcal{R}} \sin(\alpha_r(k) - 2ka), \quad (4.23)$$

y la velocidad de grupo es $v_g = -\beta^2 k / \omega$. \mathcal{T} y \mathcal{R} , son los coeficientes de transmisión y reflexión, respectivamente.

Los tiempos τ_t y τ_r son denominados tiempo total de transmisión y tiempo total de reflexión, respectivamente, o de manera abreviada tiempos de transmisión y reflexión. Estos tiempos son funciones de los retardos temporales definidos anteriormente (4.7) y (4.8).

Los tiempos de fases totales se refieren a los tiempos de fases extrapolados; es decir, ellos son extrapolaciones lineales a la región local de la barrera de los tiempos de fases asintóticos, los cuales son definidos para una región con una extensión grande comparada con la extensión espacial del paquete de ondas. La relación (4.20) es aún válida para una región (a, b) , que incluya no solo la barrera sino también una región extensa donde no

exista dispersión. Es en esta región extendida donde los tiempos de fases muestran su carácter asintótico.

Por otra lado el tiempo de estancia es una cantidad definida en función de la energía y el flujo en cada región particular dentro de la barrera. El tiempo de estancia, en el intervalo $(-L, z_1)$, a la izquierda de la barrera evidentemente diverge. Con el fin de comprender el significado del tiempo de interferencia nosotros sustraemos la densidad de energía de la onda incidente \mathcal{H}_I y la densidad de energía de la onda reflejada \mathcal{H}_R de la densidad de energía a la izquierda de la barrera \mathcal{H}_L . La diferencia en la densidad de energía definida anteriormente es integrada desde el punto $-L$ (con $L > 0$), cuando L tiende a infinito, hasta un punto z_1 a la izquierda de la barrera. Después de dividir por el flujo incidente j_i sobre la barrera se obtiene [87]

$$\Delta t_D = -\frac{1}{j_i} \lim_{L \rightarrow \infty} \int_{-L}^{z_1} (\mathcal{H}_L - \mathcal{H}_I - \mathcal{H}_R) dz, \quad (4.24)$$

$$= -\frac{\omega_o^2}{\omega \beta^2 k} \sqrt{\mathcal{R}} \sin(\alpha_r - 2kz_1), \quad (4.25)$$

lo cual demuestra que τ_i es un tiempo (o un término) de interferencia que proviene del solapamiento de las ondas incidentes y reflejadas por la barrera.

El tiempo de transmisión es igual a la diferencia entre el retardo temporal y el tiempo necesitado para que los fonones se propaguen sin dispersión a través del sistema a la velocidad de grupo de los fonones incidentes. Posteriormente nosotros probaremos que el tiempo de transmisión es igual al tiempo de reflexión, $\tau_t = \tau_r$. Utilizando la identidad $\mathcal{T} + \mathcal{R} = 1$ la relación (4.20) se simplifica

$$t_D \mathcal{T} = \tau_t + \tau_i. \quad (4.26)$$

La ecuación (4.26) es idéntica a la obtenida para electrones [71], como se señaló anterior-

mente, donde τ_i es el tiempo de interferencia.

4.4 Propiedades de la matrix de transferencia en el tunelaje de fonones de longitud de onda larga

4.4.1 Invarianza ante la inversión en el tiempo

Observemos que si tomamos el complejo conjugado de (3.6) y t se sustituye por $-t$, se obtiene

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} u^*(z, -t) = -\omega_o^2(z) u^*(z, -t) - \beta(z)^2 \frac{\partial^2}{\partial z^2} u^*(z, -t), \quad (4.27)$$

considerando solamente que $\beta(z)$ y $\omega_o(z)$ son funciones reales. Esta ecuación tiene la misma forma que (3.6). Por consiguiente, si $u(z, t)$ es solución de (3.6), $u^*(z, -t)$ también lo es. La solución $u^*(z, -t)$ se conoce frecuentemente como la solución invertida en el tiempo de (3.6). Este comportamiento de la ecuación de onda (4.27) se denomina invarianza ante la inversión en el tiempo. Para los estados estacionarios la invarianza ante la inversión en el tiempo implica que, si $u(z)$ es la función de onda del estado estacionario, entonces $u^*(z)$ también lo es.

Consideremos el proceso de dispersión de fonones mostrado en la Figura 4.1 para una barrera arbitraria localizada en el intervalo espacial $(-a, a)$. Por razones de conveniencia se rescribe la ecuación (4.11) como

$$u_1(z) = \begin{cases} Ae^{ik_1z} + Be^{-ik_1z} & z < -a \\ \Psi(z, k_2) & -a < z < a, \\ Ce^{ik_3z} + De^{-ik_3z} & z > a \end{cases} \quad (4.28)$$

donde $k_1 = \sqrt{(\omega_{o1}^2 - \omega^2)/\beta_1^2}$ ($k_3 = \sqrt{(\omega_{o3}^2 - \omega^2)/\beta_3^2}$) es el vector de onda a la izquierda (derecha) de la barrera.

Considerando que la función de onda a un lado de la barrera, digamos para $z > a$, está determinada, entonces existen ecuaciones lineales que expresan los coeficientes A y B en términos de C y D . Luego, existe una matriz M que satisface la siguiente ecuación matricial

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}. \quad (4.29)$$

La solución invertida en el tiempo de la ecuación de onda (4.28) es

$$u_2(z) = \begin{cases} A^* e^{-ik_1 z} + B^* e^{ik_1 z} & z < -a \\ \Psi^*(z, k_2) & -a < z < a \\ C^* e^{-ik_3 z} + D^* e^{ik_3 z} & z > a \end{cases}. \quad (4.30)$$

Comparando las ecuaciones (4.28), (4.29) y (4.30) se obtiene

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{22}^* & M_{21}^* \\ M_{12}^* & M_{11}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}. \quad (4.31)$$

Entonces es evidente que la matriz M tiene que satisfacer las siguientes condiciones

$$M_{11}^* = M_{22} \quad M_{12}^* = M_{21}. \quad (4.32)$$

4.4.2 Conservación del flujo de la densidad de energía

Partiendo de (3.4) es posible escribir el flujo de la densidad de energía (3.9) como

$$j = \frac{\rho\beta^2}{2} \left(\frac{\partial u^*}{\partial t} \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial u}{\partial t} \frac{\partial u^*}{\partial z} \right). \quad (4.33)$$

Para los propósitos que siguen es útil escribir la solución de la ecuación del movimiento (3.6) en la forma $u(z, t) = u(z)e^{-i\omega t}$. Entonces se puede calcular el flujo de la densidad de energía en cada parte de la región partiendo de la ecuación (4.33) y utilizando (4.28) se obtiene

$$j_L = \rho_1\omega\beta_1^2 \text{Im} \left[u_1^*(z) \frac{du_1(z)}{dz} \right] = -\rho_1\omega k_1\beta_1^2 [|A|^2 - |B|^2], \quad (4.34)$$

$$j_R = \rho_3\omega\beta_3^2 \text{Im} \left[u_1^*(z) \frac{du_1(z)}{dz} \right] = -\rho_3\omega k_3\beta_3^2 [|C|^2 - |D|^2], \quad (4.35)$$

donde el subíndice L (R) se refiere a la región a la izquierda (derecha) de la barrera. La conservación del flujo de la densidad de energía se expresa como $j_L = j_R$, o de manera equivalente como

$$\begin{pmatrix} M_{11} & M_{21} \\ M_{12} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} M_{11}^* & M_{12}^* \\ M_{21}^* & M_{22}^* \end{pmatrix} = \frac{\rho_3\beta_3^2 k_3}{\rho_1\beta_1^2 k_1} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (4.36)$$

Utilizando la ecuación (4.36) y las condiciones (4.32) se obtiene una condición adicional sobre los elementos de la matriz de transferencia

$$\det M = M_{11}M_{22} - M_{12}M_{21} = \frac{\rho_3\beta_3^2 k_3}{\rho_1\beta_1^2 k_1}. \quad (4.37)$$

4.4.3 Invarianza ante la reflexión espacial.

Consideremos que $\beta(z)$ y $\omega_o(z)$ son funciones pares de la variable espacial z , entonces otra solución de la ecuación de onda (4.28) se obtiene reemplazando z por $-z$. La solución general de la ecuación de onda se transforma en

$$u_3(z) = \begin{cases} Ae^{-ik_1z} + Be^{ik_1z} & z > a \\ \Psi(-z, k_2) & a > z > -a \\ Ce^{-ik_3z} + De^{ik_3z} & z < -a \end{cases}, \quad (4.38)$$

obteniéndose fácilmente la siguiente relación

$$\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{22} & M_{21} \\ M_{12} & M_{11} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}. \quad (4.39)$$

Por otra parte sustituyendo (4.39) en (4.31) obtenemos la condición

$$\begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} M_{22} & M_{21} \\ M_{12} & M_{11} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (4.40)$$

la cual se expresa equivalentemente como

$$|M_{11}|^2 + (M_{12})^2 = 1; \quad M_{11}(M_{12} + M_{12}^*) = 0, \quad (4.41)$$

imponiendo un nuevo conjunto de restricciones sobre los elementos de la matriz M .

4.5 Equivalencia de los tiempos de transmisión y reflexión en el tunelaje de fonones de longitud de onda larga

La amplitud de la onda transmitida (reflejada) $A_t^R(A_r^R)$ para un fonón que incide normalmente sobre la barrera desde la derecha (el proceso inverso, se describe mediante $D = 1, C = A_r^R, A = 0, B = A_t^R$) y la amplitud de la onda transmitida (reflejada) $A_t^L(A_r^L)$ para un fonón que incide normalmente sobre la barrera desde la izquierda (el proceso directo, se describe mediante $A = 1, B = A_r^L, C = A_t^L, D = 0$) están determinadas por las siguientes ecuaciones

$$A_t^R(k_3, k_1) = \frac{\det M}{M_{11}}, \quad A_t^L(k_1, k_3) = \frac{1}{M_{11}}, \quad (4.42)$$

$$A_r^R(k_3, k_1) = -\frac{M_{12}}{M_{11}}, \quad A_r^L(k_1, k_3) = \frac{M_{21}}{M_{11}}. \quad (4.43)$$

Por consiguiente, si se supedita las ecuaciones (4.42) y (4.43) a las condiciones (4.32) y (4.37), se obtiene

$$A_t^R(k_3, k_1) = \frac{\det M}{M_{11}} = \frac{\rho_3 \beta_3^2 k_3}{\rho_1 \beta_1^2 k_1} A_t^L(k_1, k_3), \quad (4.44)$$

$$A_r^R(k_3, k_1) = -\frac{M_{12}}{M_{21}} A_r^L(k_1, k_3). \quad (4.45)$$

Los coeficientes de transmisión y reflexión se definen como

$$\begin{aligned} \mathcal{T}^R(k_3) &= \frac{j_t^R}{j_i^R} = \frac{\rho_1 \beta_1^2 k_1}{\rho_3 \beta_3^2 k_3} |A_t^R(k_3, k_1)|^2, \\ \mathcal{T}^L(k_1) &= \frac{j_t^L}{j_i^L} = \frac{\rho_3 \beta_3^2 k_3}{\rho_1 \beta_1^2 k_1} |A_t^L(k_1, k_3)|^2, \\ \mathcal{R}^R(k_3) &= \frac{j_r^R}{j_i^R} = |A_r^R(k_3, k_1)|^2, \\ \mathcal{R}^L(k_1) &= \frac{j_r^L}{j_i^L} = |A_r^L(k_1, k_3)|^2. \end{aligned} \quad (4.46)$$

Por consiguiente, de acuerdo a la ecuaciones (4.32), (4.43), (4.44) y (4.46) se prueba que $\mathcal{T}^R(k_3) = \mathcal{T}^L(k_1)$ y $\mathcal{R}^R(k_3) = \mathcal{R}^L(k_1)$.

Los coeficientes se escriben en términos de sus módulos y fases como,

$$\begin{aligned} A_t^L(k_1, k_3) &= |A_t^L(k_1, k_3)| e^{i\alpha_t^L(k_1, k_3)}, \\ A_r^L(k_1, k_3) &= |A_r^L(k_1, k_3)| e^{i\beta_r^L(k_1, k_3)}, \\ A_t^R(k_3, k_1) &= |A_t^R(k_3, k_1)| e^{i\alpha_t^R(k_3, k_1)}, \\ A_r^R(k_3, k_1) &= |A_r^R(k_3, k_1)| e^{i\beta_r^R(k_3, k_1)}. \end{aligned}$$

Entonces, partiendo de la ecuación (4.44) se obtiene

$$\alpha_t^R(k_3, k_1) = \alpha_t^L(k_1, k_3), \quad (4.47)$$

y de las ecuaciones (4.32), (4.42), (4.43), (4.44) y (4.45) se deduce la relación

$$\beta_r^R(k_3, k_1) = \pm\pi - \beta_r^L(k_1, k_3) + 2\alpha_t^L(k_1, k_3). \quad (4.48)$$

Para funciones con simetría a la reflexión espacial $\beta(z) = \beta(-z)$ y $\omega(z) = \omega(-z)$ y con $k_1 = k_3 \equiv k$ (lo cual significa que los materiales del sustrato y el detector son iguales); se observa que $\alpha_t^R(k_3, k_1) = \alpha_t^L(k_1, k_3) \equiv \alpha_t(k)$ y $\beta_r^R(k_3, k_1) = \beta_r^L(k_1, k_3) \equiv \alpha_r(k)$. Utilizando las relaciones anteriores, obtenemos una nueva ecuación que relaciones las

$$\alpha_t(k) = \pm\pi/2 + \alpha_r(k). \quad (4.49)$$

Empleando la relaciones (4.49), (4.21) y (4.22) es inmediato probar que

$$\tau_t = \tau_r. \quad (4.50)$$

El resultado anterior es reportado por Villegas y sus colaboradores en la referencias [87, 88].

4.6 Tiempos de tunelaje para una barrera rectangular de fonones

En esta sección se considera la transmisión y reflexión a través de una barrera de fonones para la cual se obtienen de manera sencilla expresiones analíticas para los diferentes tiempos. Este análisis ayuda a predecir el comportamiento de sistemas más grandes

4.6.1 Modos ópticos permitidos

Consideremos que un fonón incide perpendicularmente sobre una barrera de ancho ℓ centrada en el origen de coordenadas. Es fácil chequear que para la región de frecuencias permitidas en la región de la barrera, las amplitudes de las ondas transmitidas y reflejadas son

$$A_t = \frac{e^{-ik_2\ell}}{\cos(k_1\ell) - i\frac{\xi_{\pm}}{2}\sin(k_1\ell)}, \quad (4.51)$$

$$A_r = \frac{i}{2}\xi_{-}\sin(k_1\ell)A_t, \quad (4.52)$$

y las fases correspondientes se expresan como

$$\alpha_t = -k_2\ell + \arctan\left(\frac{\xi_{+}\tan(k_1\ell)}{2}\right), \quad (4.53)$$

$$\alpha_r = \frac{\pi}{2} - k_2\ell + \arctan\left(\frac{\xi_{+}\tan(k_1\ell)}{2}\right). \quad (4.54)$$

Es fácil verificar que $t_{ph}^t = t_{ph}^r$. Sustituyendo las expresiones (4.53) y (4.54) en las expresiones para los tiempos de fases (4.21) y (4.22) se obtiene

$$\tau_t = \tau_r = \omega \left\{ \frac{\xi_-}{4} \left(\frac{1}{\beta_2^2 k_2^2} - \frac{1}{\beta_1^2 k_1^2} \right) \frac{\sin(2k_1 \ell)}{1 + \frac{\xi_-^2}{4} \sin^2(k_1 \ell)} - \left[\frac{\xi_+}{2\beta_1^2 k_1} \frac{1}{1 + \frac{\xi_-^2}{4} \sin^2(k_1 \ell)} \right] \ell \right\} \quad (4.55)$$

donde $\xi_{\pm} = \rho\beta_1^2 k_1 / (\rho_2\beta_2^2 k_2) \pm \rho_2\beta_2^2 k_2 / (\rho\beta_1^2 k_1)$, $k_1 = \sqrt{(\omega_{10}^2 - \omega^2) / \beta_1^2}$ es la expresión para el vector de onda.

Una expresión para el tiempo de fase de los fonones acústicos es posible obtener partiendo de (4.55). Haciendo $\omega_{10} = \omega_{20} = 0$, y $\beta_1^2 \rightarrow v_1^2$, $\beta_2^2 \rightarrow v_2^2$ esta ecuación se escribe en función de la velocidad de fase de la onda. Entonces, el primer término desaparece quedando que

$$\tau_t^{ac} = \tau_r^{ac} = \omega \left[\frac{\xi_+^{ac}}{2v_1^2 k_1} \frac{1}{1 + \frac{(\xi_-^{ac})^2}{4} \sin^2(k_1 \ell)} \right] \ell \quad (4.56)$$

donde $\xi_{\pm}^{ac} = \rho_1 v_1 / (\rho_2 v_2) \pm \rho_2 v_2 / (\rho_1 v_1)$.

El tiempo de interferencia (4.23) se calcula como

$$\tau_i = \frac{\omega_{o2}^2}{\omega\beta_2^2 k_2} \sin(\alpha_r + k_2 \ell) = \frac{\omega_{o2}^2}{\omega\beta_2^2 k_2} \sqrt{T} \cos(k_1 \ell), \quad (4.57)$$

el cual es igual a cero en el caso de los fonones acústicos. Mediante la integración directa de la ecuación de la onda, en la región de la barrera, se calcula el tiempo de estancia tal como se define en la sección (4.2)

$$t_D = \frac{1}{2\beta_1^2 k_1} [\omega \xi_+ \ell + (\omega_{10}^2 / \omega) \xi_- \sin(2k_1 \ell) / 2k_1]. \quad (4.58)$$

Sustituyendo las ecuaciones (4.51), (4.52), (4.55), (4.57) en la identidad (4.20) se calcula de forma alternativa el tiempo de estancia. Los resultados obtenidos al calcular el tiempo de estancia por ambas vías muestran una coincidencia absoluta. De manera que esto

constituye una comprobación teórica de los resultados analíticos anteriormente obtenidos.

Haciendo $\omega_{o2} = 0$ en la ecuación (4.58) e intercambiando $t_D \rightarrow -t_D^{ac}$ se obtiene el tiempo de estancia para los fonones acústicos

$$t_D^{ac} = \frac{\xi_+^{ac} \ell}{2v_1} \quad (4.59)$$

4.6.2 Modos ópticos prohibidos

Utilizando la metodología empleada en la sección (4.6.1) o de manera operativa (siempre que sea posible) haciendo la sustitución de $k_1 \rightarrow i\sqrt{(\omega^2 - \omega_{10}^2)/\beta_1^2} = i\kappa_1$ se obtienen las expresiones para τ_t , τ_i y t_D las cuales vienen dadas por las siguientes relaciones

$$\tau_t = \tau_r = \omega \left\{ \frac{\tilde{\xi}_+}{4} \left(\frac{1}{\beta_2^2 k_2^2} + \frac{1}{\beta_1^2 \kappa_1^2} \right) \frac{\sinh(2\kappa_1 \ell)}{1 + \frac{\tilde{\xi}_+^2}{4} \sinh^2(\kappa_1 \ell)} - \left[\frac{\tilde{\xi}_-}{2\beta_1^2 \kappa_1} \frac{1}{1 + \frac{\xi_-^2}{4} \sinh^2(\kappa_1 \ell)} \right] \ell \right\}, \quad (4.60)$$

$$\tau_i = \frac{\omega_{o2}^2}{\omega \beta_2^2 k_2} \sin(\alpha_r + k_2 \ell) = -\frac{\omega_{o2}^2}{\omega \beta_2^2 k_2} \sqrt{T} \cosh(\kappa_1 \ell), \quad (4.61)$$

y

$$t_D = \frac{1}{2\beta_1^2 \kappa_1} \left[\omega \tilde{\xi}_- \ell + (\omega_{10}^2 / \omega) \tilde{\xi}_+ \sinh(2\kappa_1 \ell) / 2\kappa_1 \right], \quad (4.62)$$

donde $\tilde{\xi}_\pm = \rho_1 \beta_1^2 \kappa / \rho_2 \beta_2^2 k_2 \pm \rho_2 \beta_2^2 k_2 / \rho_1 \beta_1^2 \kappa$. Entonces de nuevo es posible chequear la validez de la identidad (4.20).

4.7 Conclusiones Parciales

En este capítulo, partiendo del método de la fase estacionaria, los tiempos de fase propuestos inicialmente por Mizuno y Tamura son generalizados de manera que se facilite el estudio de los fonones ópticos.

Partiendo de la ecuación de continuidad de la densidad de energía vibracional se ha obtenido el tiempo de estancia. Este tiempo se relaciona con la energía vibracional almacenada en la región ocupada por la barrera y permite caracterizar el tunelaje de fonones de longitud de onda larga. Además, dicho tiempo es una magnitud aditiva lo cual facilita su cálculo en estructuras con una distribución de pozos y barreras arbitraria. El estado del tiempo de estancia se considera bien establecido; sin embargo, no es evidente establecer como el tiempo de estancia se distribuye entre los diferentes canales de dispersión de forma única

Las expresiones para los diferentes tiempos de transmisión, reflexión e interferencia que permiten estudiar el tunelaje de fonones de longitud de onda larga a través de diferentes sistemas semiconductores son definidas. En particular, por primera vez se obtiene una expresión para el cálculo del término o tiempo de interferencia y se logra dar una explicación del sentido físico de este tiempo.

Partiendo de una adecuada integración de la ecuación de continuidad se obtiene una relación analítica general entre los diferentes tiempos de tunelaje. El estudio de un sistema formado por una única barrera permite comprobar de manera teórica las relaciones existentes entre los diferentes tiempos de tunelaje para los modos acústicos y ópticos.

Las propiedades físicas generales como la invarianza ante la inversión temporal y la invarianza ante la inversión espacial de la ecuación de onda y la conservación del flujo de la densidad de energía son empleadas para obtener las propiedades de la matriz de transferencia y la equivalencia entre los tiempos de transmisión y reflexión en el tunelaje de fonones de longitud de onda larga.

5 CÁLCULO DEL TIEMPO DE TUNELAJE A TRAVÉS DE DIFERENTES ESTRUCTURAS SEMICONDUCTORAS

En el capítulo anterior se obtuvieron las expresiones generales para el cálculo de los tiempos de tunelaje de fonones de longitud de onda larga. En el presente capítulo se aplicará la teoría formulada anteriormente a diferentes sistemas físicos. Además, se estudia las condiciones bajo las cuales el tiempo de tunelaje se hace independiente del tamaño del sistema, es decir un fenómeno equivalente al EH en el tunelaje de fonones de longitud de onda larga [89]. Entonces una valoración de la energía vibracional almacenada en la región ocupada por la barrera es importante para este análisis. De hecho el EH es explicado sobre la base de la saturación de la energía vibracional almacenada en la región de la barrera.

Se realiza un estudio del tunelaje resonante a través de un sistema de doble barrera de fonones (SDB); y las condiciones para que aparezcan las frecuencias de resonancias. Además, el concepto de impedancia generalizada en el contexto del tunelaje de fonones se introduce explotando el isomorfismo entre los procesos de propagación de ondas en una

heteroestructura semiconductor y una línea de transmisión eléctrica.

Finalmente se realizan cálculos numéricos de los diferentes tiempos de tunelaje para una superred.

5.1 Efecto Hartman en el tunelaje de fonones de longitud de onda larga

En esta sección se analiza bajo que condiciones es posible la ocurrencia del EH en el tunelaje de fonones de longitud de onda larga a través de diferentes estructuras semiconductoras.

5.1.1 Una barrera de fonones

Para tener una imagen más clara de la física relacionado con el EH primeramente se estudia el caso de una barrera de fonones, para el cual existen expresiones analíticas de la energía vibracional y los tiempos de tunelaje. Lo anterior ayuda a predecir el comportamiento de sistemas de mayor complejidad. A continuación se considera el caso del tunelaje unidimensional donde un fonón incide perpendicularmente sobre una barrera de ancho ℓ .

El tiempo de estancia caracteriza el tunelaje de fonones de longitud de onda larga a través de los diferentes sistemas semiconductores estudiados. Para las soluciones estacionarias éste es igual a $t_D = -H/j_t$ ($t_D = H/j_t$) para fonones ópticos (acústicos). Partiendo de la relación (4.26) la energía almacenada dentro del sistema se relaciona de una manera

sencilla con los tiempos de transmisión e interferencia

$$H = |j_i|(\tau_t + \tau_i), \quad (5.1)$$

donde la relación $j_t = \mathcal{T}j_i$ es utilizada, siendo j_i la densidad del flujo de energía incidente.

Para el caso de los fonones acústicos $\tau_i = 0$, la relación (5.1) expresa que el tiempo de transmisión es proporcional a la energía vibracional almacenada dentro de la barrera. La saturación de τ_t cuando el tamaño del sistema aumenta está relacionada con la saturación de la energía vibracional almacenada dentro de la barrera. Esto significa que el retardo temporal no es un retardo de propagación, un argumento equivalente al empleado por Winful para resolver la paradoja del EH [55, 57] en el contexto del tunelaje de electrones y fotones. De hecho sí el tunelaje es un fenómeno de propagación, la saturación de τ_t con el incremento del tamaño del sistema implica el surgimiento de velocidades superlumínicas arbitrariamente grandes para el tránsito del paquete de onda a través de la barrera o equivalentemente, en el caso del tunelaje de fonones, se superará la velocidad del sonido en el medio.

Partiendo de la ecuación (4.56), en el caso de los fonones acústicos, es directo comprobar que la energía vibracional H^{ac} en la región de la barrera viene dada por la siguiente expresión

$$H^{ac} = \tau_t j_i = \frac{\xi_+^{ac} j_i \mathcal{T}}{2v_1} \ell. \quad (5.2)$$

Al considerar el fenómeno del tunelaje de manera semejante a un fenómeno energético, con el incremento de la longitud de la barrera aumenta la energía almacenada dentro de la misma; luego nunca ocurre una saturación de la misma. La conclusión es que un límite teórico para este tiempo de transmisión es imposible de encontrar en el caso del tunelaje de los fonones acústicos a través de una barrera.

Sin embargo, para los fonones ópticos con frecuencias prohibidas en la región de la barrera τ_t tiende a un valor asintótico cuando ℓ tiende a infinito. Entonces partiendo de la ecuación (4.60) se obtiene

$$\tau_t^{lim} = \frac{2\omega}{\tilde{\xi}_+} \left(\frac{1}{\beta_2^2 k_2^2} + \frac{1}{\beta_1^2 \kappa^2} \right). \quad (5.3)$$

Por consiguiente el tiempo de transmisión converge a un valor constante τ_t^{lim} (Efecto Hartman). Argumentos similares a los empleados anteriormente se pueden utilizar para explicar el comportamiento del sistema en este caso.

5.1.2 Heteroestructuras semiconductoras

El comportamiento asintótico de τ_t para los fonones acústicos cambia dramáticamente cuando se considera una secuencia periódica de materiales que actúan como pozos y barreras para formar una superred. Un ejemplo de este comportamiento se presenta en la Figura 5.1.

En este caso se estudia numéricamente la superred de tamaño finito $(^{70}\text{Ge})_4-(^{74}\text{Ge})_4$ previamente considerada en la referencias [85, 86]. En lo adelante los parámetros de entrada de los materiales semiconductores utilizados se toman de la referencia [85]

En la Figura 5.1 se observa que para una frecuencia de 66 cm^{-1} τ_t tiende a un valor límite cuando se incrementa el número de períodos de la superred. La razón para este comportamiento se encuentra en la Figura 5.2, donde el coeficiente de transmisión es ploteado como una función de la frecuencia del sistema considerado. Una banda prohibida aparece alrededor de la frecuencia de 66 cm^{-1} . La profundidad de \mathcal{T} se reduce prácticamente a cero cuando se incrementa el número de períodos. La reducción de \mathcal{T} implica que más energía almacenada está acumulada dentro de la superred incrementando así el valor de τ_t hasta un valor límite. Por otra parte t_D diverge, cuando se incrementa el número de

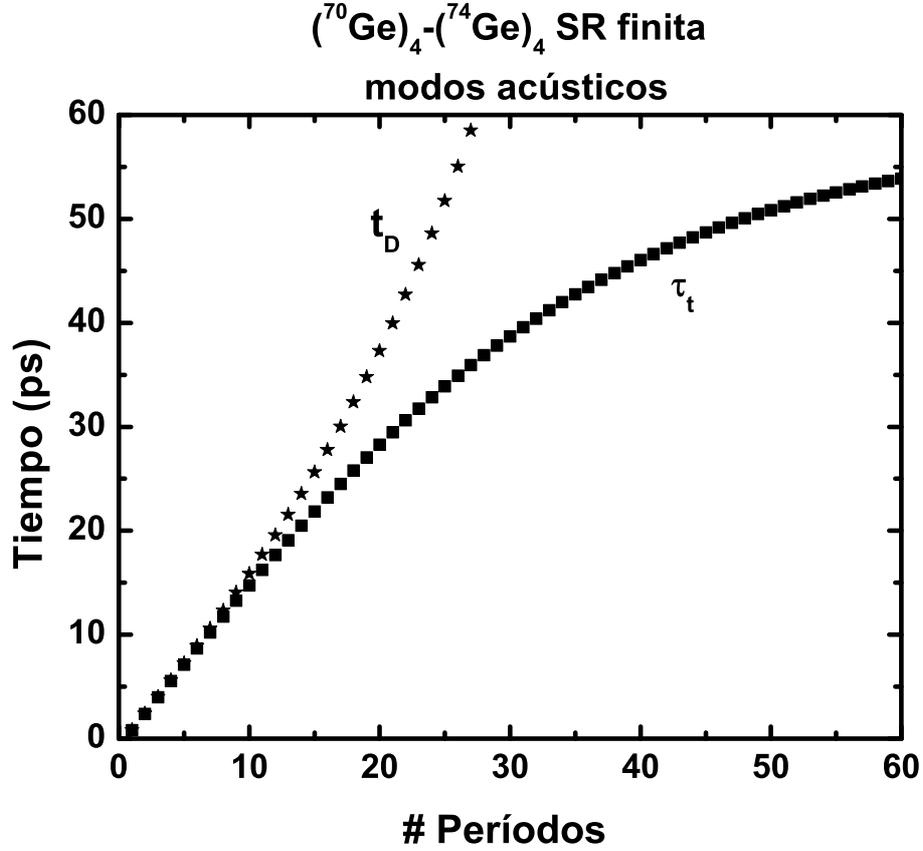


Figura 5.1: Los modos acústicos de una superred de tamaño finito son graficados $(^{70}\text{Ge})_4-(^{74}\text{Ge})_4$. τ_t y t_D (en ps) son ploteados como función del número de períodos para una frecuencia de 66 cm^{-1} .

períodos. Luego, el tiempo de estancia t_D no experimenta el EH.

Para los fonones ópticos con frecuencias permitidas en los materiales que actúan como pozos y barreras se obtiene un comportamiento similar del sistema. Los cálculos numéricos en este caso son presentados en la Figura 5.3 y la Figura 5.4.

Para modos ópticos con frecuencias prohibidas en los materiales que actúan como barrera se obtienen resultados equivalentes a los reportados por Pereyra [90] en el estudio del tunelaje de electrones y fotones. Estos resultados aparecen en Figuras 5.5 y 5.6. En la Figura 5.5 el coeficiente de transmisión para una superred de período 8 (línea a raya),

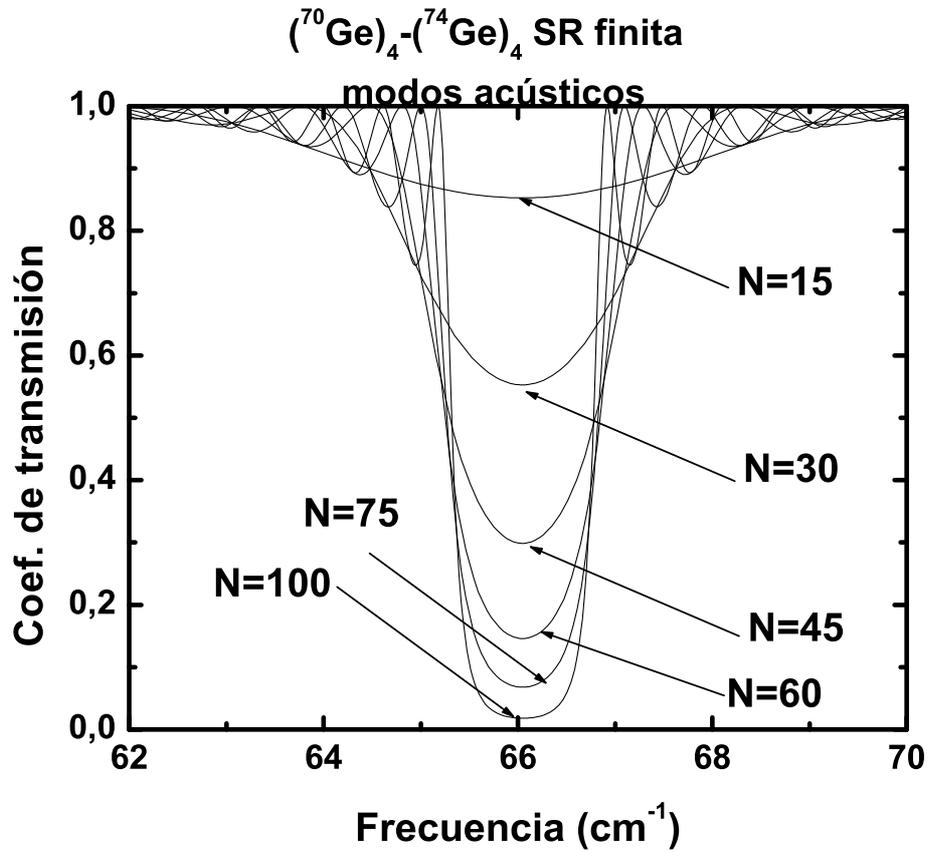


Figura 5.2: El coeficiente de transmisión como una función de la frecuencia para diferentes períodos de la superred de la superredes finita de $(^{70}\text{Ge})_4-(^{74}\text{Ge})_4$ en la Figura 5.1.

el tiempo de transmisión τ_8 (línea sólida), el tiempo de movimiento libre $t_f = L/|v_g| = L\omega/\beta_2^2 k_2$ (línea de puntos y rayas) y el tiempo de transmisión para una única barrera, en ns, son graficados como función de la frecuencia, en cm^{-1} . La dimensión lineal del sistema es L .

Una estructura de bandas es evidente para el coeficiente de transmisión y el tiempo de transmisión. Dentro de los gaps, \mathcal{T} tiende a cero y τ_8 se aproxima a τ_1 , el cual se comporta como un limite inferior. Dentro de la región de las bandas, por el contrario, τ_8 muestra un comportamiento resonante cuyo limite inferior es el tiempo del movimiento libre t_f .

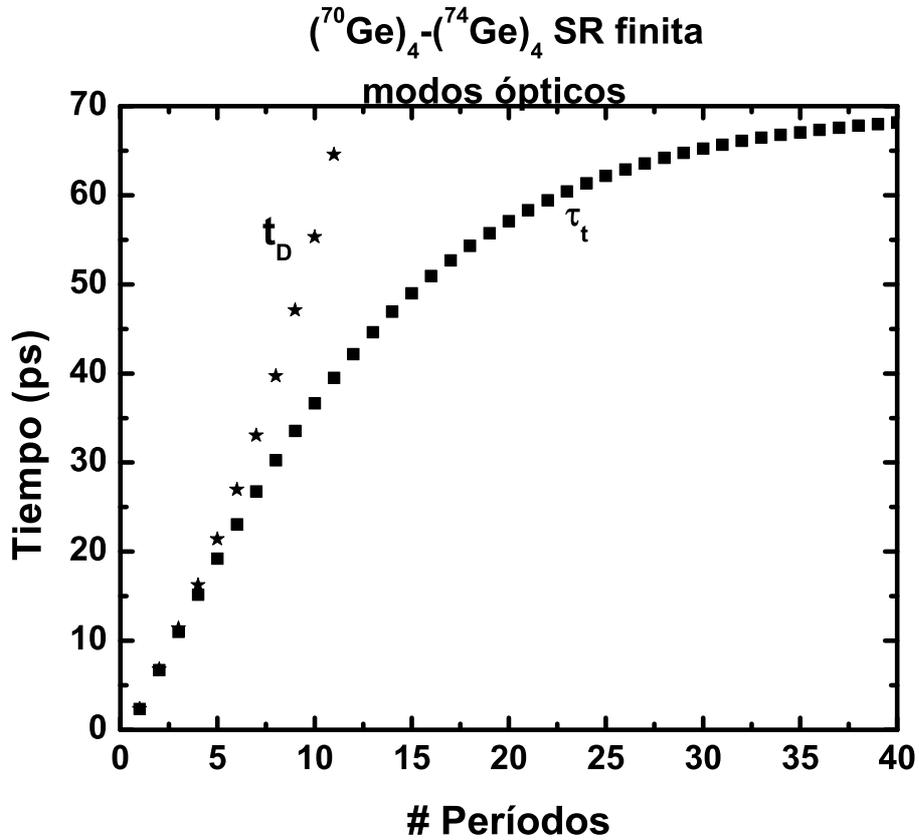


Figura 5.3: Similar a la Figura 5.1 pero para fonones ópticos permitidos de frecuencia igual a 271.5 cm^{-1}

Hasta este momento, es evidente que el tiempo de transmisión del fonón en la región de dispersión crece cuando la energía se aproxima a cualquiera de los niveles de energía permitidos. En la Figura 5.6 se observa el mismo comportamiento asintótico para τ_t ; no así para el tiempo de estancia. A manera de resumen τ_t presenta un comportamiento de tiempo de fase superlumínico dependiendo de si el fonón está dentro de una banda o dentro de un gap. El fenómeno descrito anteriormente y el EH son fenómenos relacionados aunque no son idénticos.

A manera de resumen se comprueba la existencia de un límite asintótico para el tiempo de transmisión de los fonones de longitud de onda larga cuando se incrementa el tamaño del

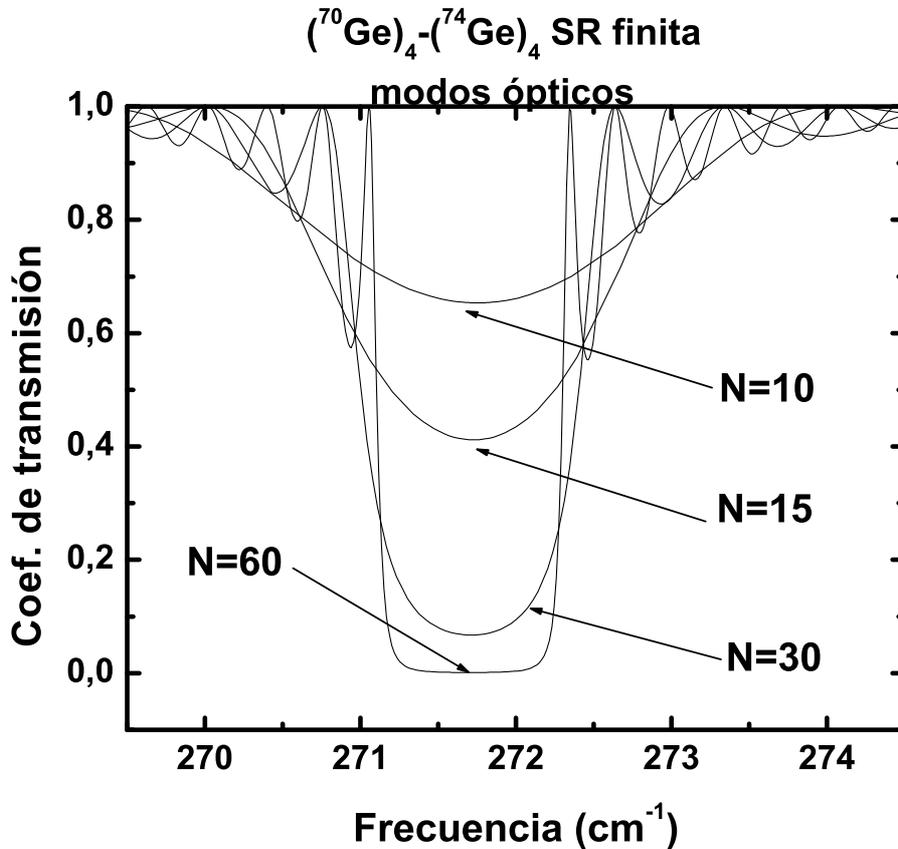


Figura 5.4: Similar a la Figura 5.2 pero para fonones ópticos permitidos de frecuencia igual a 271.5 cm^{-1} .

sistema, el cual se puede relacionar con la saturación de la energía vibracional almacenada en el mismo. Por el contrario, el tiempo de estancia propuesto en este trabajo no se satura en todo el rango de frecuencias que incluye a los fonones acústicos y ópticos [88].

5.2 Tunelaje resonante a través de un sistema de doble barrera de fonones

Desde los primeros trabajos de Tsu y Esaki, [91, 92] el fenómeno del tunelaje resonante (TR) a través de un SDB unidimensional ha generado considerable interés teórico y ex-

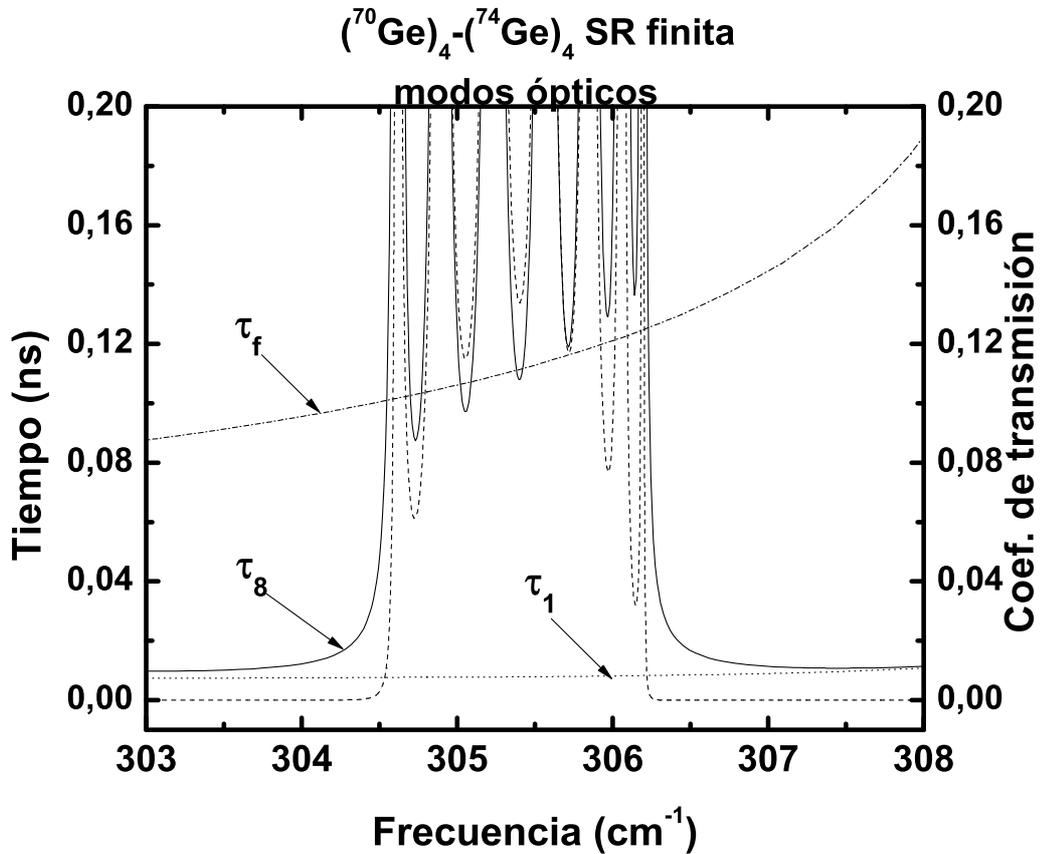


Figura 5.5: El coeficiente de transmisión para una superred de período 8 (línea a rayas), el tiempo de transmisión τ_8 (línea sólida), el tiempo del movimiento τ_f (línea a rayas y puntos), y el tiempo de transmisión τ_t para una sola barrera como una función de las frecuencias de los fonones cm^{-1} .

perimental. El fenómeno del TR a través de un SDB hace de estos sistemas, candidatos muy promisorios para una nueva generación de dispositivos electrónicos de alta velocidad. Un SDB de $(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As})$ separadas por un pozo cuántico de (GaAs) operando a la frecuencia de THz muestra un incremento dramático de la transmitividad electrónica si la energía del electrón incidente está cercana a uno de los estados cuasi-acotado dentro del pozo. Una característica importante de dicha estructura es que muestra una resistencia diferencial negativa, haciendo posible su aplicación como uno oscilador de alta frecuencia. Yamamoto y sus colaboradores [93, 94, 95, 96] han realizado un amplio estudio acerca

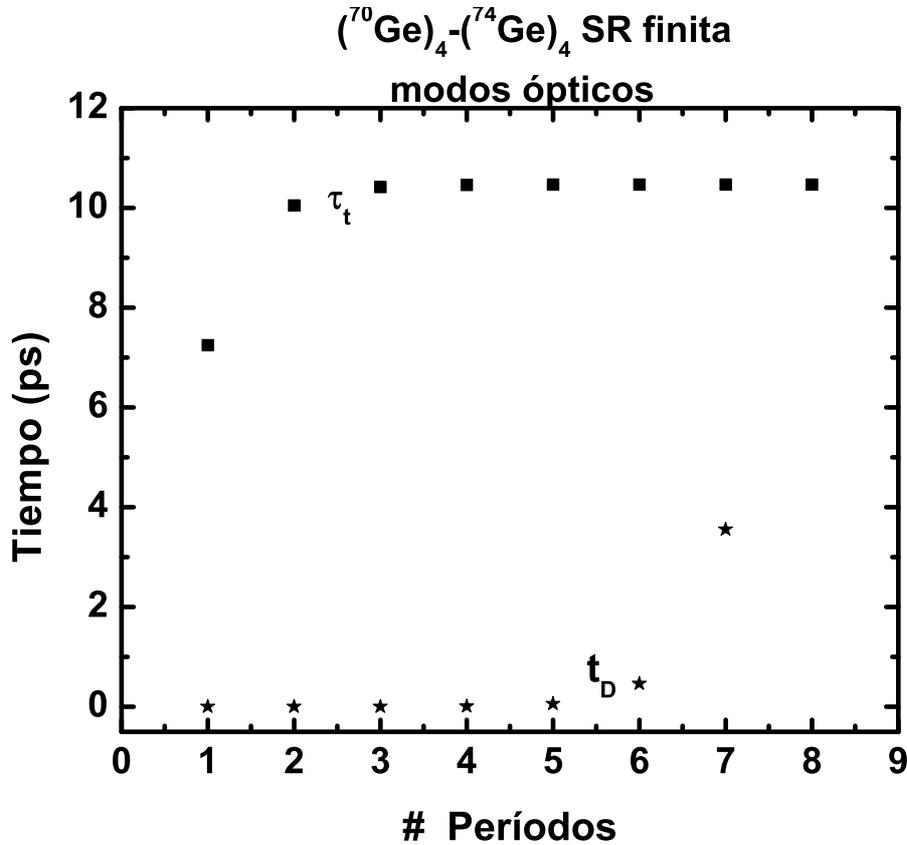


Figura 5.6: Similar a la Figura 5.1 pero para fonones ópticos prohibidos de frecuencia igual a 302 cm^{-1}

del TR en diferentes estructuras. Ellos han derivado teóricamente una condición para el TR y el coeficiente de transmisión para un SDB bajo la suposición de que la condición de masa efectiva constante se cumple [93]. Ellos han obtenido una expresión analítica para el tiempo de tunelaje de los electrones en un SDB, el cual coincide con el tiempo de estancia a las frecuencias de resonancia del sistema [96].

El papel que desempeñan las resonancias sobre el tiempo de retardo fue investigado inicialmente por Wigner [70]. Cerca de una resonancia el tiempo de retardo se escribe mediante una expresión analítica, denominada fórmula de Breit-Wigner [70, 97]; la cual posee una validez general para el tunelaje de electrones a través de un SDB cerca de las resonancias

[96, 98]. Por otra parte el tiempo de vida de los cuasi-niveles resonantes es un parámetro de importancia para los dispositivos electrónicos [99, 100]. En La dependencia del tiempo de vida de la masa efectiva de los portadores que atraviesan el SDB ha sido estudiada en la referencia [100].

Es en este marco de investigación donde tiene importancia el estudio de un SDB de fonones. Por otra parte, generalmente, el estudio de sistemas más simples ayuda a comprender el comportamiento de sistemas de mayores dimensiones y complejidad.

5.2.1 Cálculo del coeficiente de transmisión y la condición de resonancia

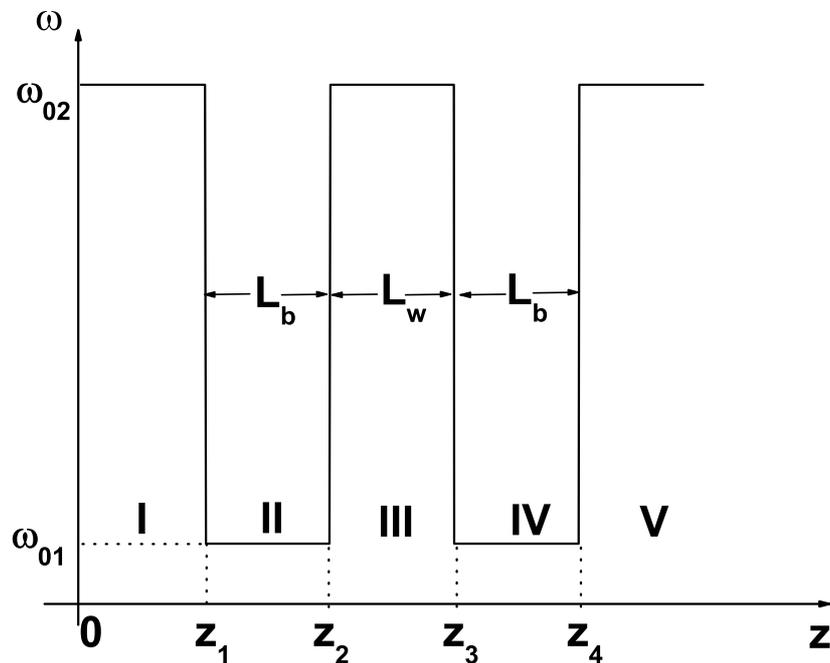


Figura 5.7: Una doble barrera de fonones. La altura de la barrera es ω_{o1} , su ancho L_b , y la distancia entre ellas es L_w .

Se considera que los fonones inciden normalmente sobre el SDB mostrado en la Figura 5.7, el cual consiste en un apilamiento alternado de capas A_1 y A_2 . El sistema estudiado se expresa como $XA_1A_2A_1Y$, donde X e Y denotan las capas del sustrato y el detector, respectivamente. Se asume que las capas del sustrato y el detector son hechos del mismo material, es decir, $X = Y = A_2$. Luego las propiedades vibracionales se suponen iguales a la de la capa A_2 . En el intervalo de frecuencias $(\omega_{o1}, \omega_{o2})$, las oscilaciones del masivo A_2 no se dispersan en la capa del masivo A_1 . Por esta razón se denomina a la capa A_2 pozo, con ancho L_w , y la capa A_1 barrera, con ancho L_b . Las cinco regiones son especificadas por las coordenadas z_j con $j = 1, \dots, 5$. Se supone que los fonones se propagan perpendicularmente a las interface de las capas y se adopta el modelo del continuo válido para la propagación de oscilaciones de longitud de onda larga; por consiguiente las relaciones de dispersión del masivo, acústicas y ópticas, son lineales y parabólicas, respectivamente. Los desplazamientos de la red $u_j(z)$ y las tensiones $\sigma_j(z)$ deben ser continuos en la interfase de las diferentes capas. Los coeficientes A_{t_j} y A_{r_j} , de la función de onda en la j-ésima región, son constante a ser determinada por las condiciones de frontera. Las condiciones de frontera requieren que $u_j(z_j) = u_{j+1}(z_j)$ y $\sigma_j(z_j) = \sigma_{j+1}(z_j)$. Luego, se obtiene la siguiente relación aplicando el método de la matriz de transferencia

$$\begin{pmatrix} A_{t1} \\ A_{r1} \end{pmatrix} = M_1 M_2 M_3 M_4 \begin{pmatrix} A_{t5} \\ A_{r5} \end{pmatrix}, \quad (5.4)$$

donde

$$M_j(z_j) = \frac{1}{2Z_j} \begin{pmatrix} \delta_{Z_+} e^{-i(k_j - k_{j+1})z_j} & \delta_{Z_-} e^{-i(k_j + k_{j+1})z_j} \\ \delta_{Z_-} e^{i(k_j + k_{j+1})z_j} & \delta_{Z_+} e^{i(k_j - k_{j+1})z_j} \end{pmatrix}, \quad (5.5)$$

con $\delta_{Z_+} = Z_j + Z_{j+1}$, $\delta_{Z_-} = Z_j - Z_{j+1}$, $Z_1 = Z_3 = Z_5 = \rho_1 \beta_1^2 k_1$, $Z_4 = Z_2 = iZ$, $Z = \rho_2 \beta_2^2 \kappa_2$, $k_1 = \sqrt{(\omega_{o2}^2 - \omega^2) / \beta_1^2}$ es el vector de onda y $\kappa_2 = \sqrt{(\omega^2 - \omega_{o1}^2) / \beta_2^2}$.

Ahora es directo probar que la matriz de transferencia $M = M_1 M_2 M_3 M_4$ satisface las condiciones $M_{11}^* = M_{22}$, $M_{12}^* = M_{21}$ y $\det M = Z_5/Z_1$, tal como se derivó en las secciones 4.4.1 y 4.4.2

En algunas regiones espaciales del SDB de fonones, para frecuencias $\omega > \omega_{o1}$, las oscilaciones son prohibidas. La solución de la ecuación del movimiento (3.6) toma la siguiente forma

$$u_j(z) = (A_{tj} e^{-\kappa_j z} + A_{rj} e^{\kappa_j z}) e^{-i\omega t}, \quad (5.6)$$

donde A_{tj} , A_{rj} son los coeficientes asociados con las ondas evanescentes a la derecha e izquierda, respectivamente.

En este caso el coeficiente de transmisión viene dado por la siguiente expresión

$$\mathcal{T} = \frac{1}{1 + \left(\frac{Z^2 + Z_1^2}{2ZZ_1}\right)^2 \sinh^2(\kappa_2 L_b) \tilde{H}^2}, \quad (5.7)$$

donde

$$\tilde{H} = 2ZZ_1 \cos(k_1 L_w) \cosh(\kappa_2 L_b) + \delta \sin(k_1 L_w) \sinh(\kappa_2 L_b), \quad (5.8)$$

con $\delta = \delta_+ \delta_-$, $\delta_+ = Z + Z_1$ y $\delta_- = Z - Z_1$.

Así, cuando $\tilde{H} = 0$ el coeficiente de transmisión es $\mathcal{T} = 1$. Entonces, las frecuencias de resonancias se evalúan mediante la siguiente ecuación

$$\coth(\kappa_2 L_b) = \frac{(Z_1^2 - Z^2)}{2ZZ_1} \tan(k_1 L_w). \quad (5.9)$$

Por otro lado en alguna regiones espaciales del SDB de fonones, para frecuencias $\omega < \omega_{o1}$, la soluciones son permitidas. La solución de la ecuación del movimiento (3.6) toma la siguiente forma

$$u_j(z) = (A_{tj} e^{ik_j z} + A_{rj} e^{-ik_j z}) e^{-i\omega t}, \quad (5.10)$$

donde A_{lj} , A_{rj} son los coeficientes asociados con las soluciones propagantes a la derecha e izquierda, respectivamente.

Si se considera que los estados son propagantes en todas las regiones que ocupa la doble barrera, sustituyendo $\kappa_2 = -ik_2$, la ecuación (5.7) se transforma como

$$\mathcal{T} = \frac{1}{1 + \left(\frac{Z_1^2 - Z_2^2}{2Z_1^2 Z_2^2}\right)^2 \sin^2(k_2 L_b) \tilde{H}^2}, \quad (5.11)$$

donde

$$\tilde{H} = -2Z_1 Z_2 \cos(k_1 L_w) \cos(k_2 L_b) + \tilde{\delta} \sin(k_1 L_w) \sin(k_2 L_b), \quad (5.12)$$

con $\tilde{\delta} = \tilde{\delta}_+ \tilde{\delta}_-$, $\tilde{\delta}_+ = Z_1 - iZ_2$ y $\tilde{\delta}_- = -Z_1 - iZ_2$.

Ahora el coeficiente de transmisión es $\mathcal{T} = 1$ cuando $\tilde{H} = 0$. La ecuación (5.12) se utiliza para obtener los correspondientes valores de frecuencias

$$\cot(k_2 L_b) = \frac{(Z_1^2 + Z_2^2)}{2Z_1 Z_2} \tan(k_1 L_w). \quad (5.13)$$

Por otra parte, $\mathcal{T} = 1$ cuando $\sin(k_2 L_b) = 0$, para lo cual debe cumplirse que $k_2 = n\pi/L_b$, con $n=1,2,\dots$. Los nuevos valores de frecuencia que satisfacen la condición anterior se calculan como

$$\omega_n = \sqrt{\omega_{o2}^2 - \frac{n^2 \pi^2 \beta_2^2}{L_b^2}} = \frac{n\pi \beta_2^2}{L_b v_{g2}}, \quad (5.14)$$

para las frecuencias de los fonones ópticos permitidos donde v_{g2} es la velocidad de grupo del medio 2. Entonces partiendo de (5.14), tomando $\omega_{o2} = 0$ y haciendo la sustitución de $\beta_2^2 = -v_{f2}^2$ se obtiene las frecuencias para los fonones acústicos como

$$\omega_n = \frac{n\pi v_{f2}}{L_b}, \quad (5.15)$$

donde v_{f2} es la velocidad de fase del medio 2.

5.2.2 Forma del espectro de transmisión

Para comprender mejor el comportamiento de este sistema es útil reescribir el coeficiente de transmisión (5.7) en términos de los coeficientes de transmisión y reflexión de las barreras de la derecha (\mathcal{R}_R y \mathcal{T}_R , respectivamente) e izquierda (\mathcal{R}_L y \mathcal{T}_L , respectivamente). En el caso de barreras simétricas se cumple que ($\mathcal{R}_R = \mathcal{R}_L = \mathcal{R}_1$ y $\mathcal{T}_R = \mathcal{T}_L = \mathcal{T}_1$). Entonces el coeficiente de transmisión para un SDB se escribe como

$$\mathcal{T} = \frac{\mathcal{T}_1^2}{\mathcal{T}_1^2 + 4\mathcal{R}_1 \cos^2\left(\frac{\Phi}{2}\right)}, \quad (5.16)$$

donde

$$\mathcal{T}_1 = \frac{1}{\cosh(\kappa_2 L_b) + \xi_-^2 \sinh(\kappa_2 L_b)}, \quad (5.17)$$

$$\mathcal{R}_1 = \frac{\xi_+^2 \sinh(\kappa_2 L_b)}{\cosh(\kappa_2 L_b) + \xi_-^2 \sinh(\kappa_2 L_b)}, \quad (5.18)$$

$$\Phi = 2k_1 L_w + 2\theta, \quad (5.19)$$

y

$$\theta = -\arctan(\xi_- \tanh(\kappa_2 L_b)). \quad (5.20)$$

Suponiendo que \mathcal{T}_1 , \mathcal{R}_1 y θ son funciones que varían suavemente alrededor de la frecuencia de resonancia ω_r y desarrollando el término coseno en series de Taylor hasta el primer orden, se obtiene que

$$\mathcal{T} \approx \frac{\frac{\Gamma_r^2}{4}}{\frac{\Gamma_r^2}{4} + (\omega - \omega_r)^2}, \quad (5.21)$$

donde

$$\Gamma_r = \left(\frac{\beta_1^2}{L_w^2} \left(\frac{\omega_{o1}^2}{\omega_r^2} - 1 \right) \frac{\mathcal{T}_1^2}{\mathcal{R}_1} \right)^{1/2}. \quad (5.22)$$

El coeficiente de transmisión (5.21) para el SDB simétrica de fonones tiene forma Lorentziana cerca de las frecuencias de resonancias. Esta ecuación tiene la forma de la fórmula de Breit-Wigner. La magnitud Γ_r es el ancho total a la mitad del máximo de la resonancia. El pico resonante cae a la mitad de su valor a $\omega = \omega_r \pm \Gamma_r/2$.

Analizando la ecuación (5.21) es conveniente escribir la amplitud de trasmisión compleja como

$$t = \frac{\frac{\Gamma_r}{2}}{(\omega - \omega_r) + \frac{i\Gamma_r}{2}}, \quad (5.23)$$

entonces una fórmula aproximada para la fase de la amplitud de transmisión cerca de un pico en el tunelaje resonante se obtiene partiendo de la ecuación (5.23) como

$$\alpha = -\arctan\left(\frac{\frac{\Gamma_r}{2}}{\omega - \omega_r}\right). \quad (5.24)$$

En el sistema estudiado $z_1 = 0$ y $z_4 = 2L_b + L_w \equiv L$. Sustituyendo apropiadamente la fase (5.24) en la ecuación (4.21) el tiempo de trasmisión se expresa como

$$\tau_t(\omega_r) = \frac{2}{\Gamma_r} + \frac{L}{v_g}. \quad (5.25)$$

El tiempo de fase $t^{ph} = 2/\Gamma_r$ es una consecuencia del tunelaje resonante. Este retardo es el inverso del ancho de la resonancia, entonces mientras más abrupta es la resonancia mayor será el tiempo de retardo.

5.2.3 Energía vibracional y tiempo de estancia para un sistema de doble barrera de fonones

Partiendo de la ecuación para la densidad de energía (3.3) una expresión para la energía vibracional a la derecha del pozo se obtiene

$$H_{b_4} = \mathcal{T} \rho_4 \omega^2 L_b \frac{(Z_4^2 + Z_5^2)}{2Z_4^2} \left[\cos(-2\alpha_z) + \frac{\omega_{o_4}^2}{\omega^2} \frac{\sinh(2k_4 L_b)}{2k_4 L_b} \right], \quad (5.26)$$

donde $\alpha_z = \arctan(Z_5/Z_4)$.

Por otra parte la energía vibracional a la izquierda del pozo viene dada por la siguiente expresión

$$H_{b_2} = \mathcal{T} \rho_2 \omega^2 L_b \left[-2 \left| \tilde{A}_2 \right| \left| \tilde{B}_2 \right| \cos(\alpha_{\tilde{A}_2} - \alpha_{\tilde{B}_2}) + \frac{\omega_{o_4}^2}{\omega^2} \left(\left| \tilde{A}_2 \right|^2 e^{-k_2 L_b} + \left| \tilde{B}_2 \right|^2 e^{k_2 L_b} \right) \frac{\sinh(k_2 L_b)}{k_2 L_b} \right], \quad (5.27)$$

donde

$$\tilde{A}_2 = Z_{23} (M_{11} e^{-i\alpha_z} + M_{21} e^{i(2k_3 L_w + \alpha_z)}) e^{(k_2 + ik_3) L_b}, \quad (5.28)$$

$$\tilde{B}_2 = Z_{23} (M_{11} e^{i\alpha_z} + M_{21} e^{i(2k_3 L_w - \alpha_z)}) e^{(k_2 + ik_3) L_b}, \quad (5.29)$$

con $Z_{23} = \frac{\sqrt{Z_2^2 + Z_3^2}}{2Z_2}$. Los términos de fases son

$$\alpha_{\tilde{A}_2} = \frac{|M_{11}| \sin(k_3 L_b - \alpha_z + \theta_{11}) + |M_{21}| \sin(k_3(L_b + 2L_w) + \alpha_z + \theta_{21})}{|M_{11}| \cos(k_3 L_b - \alpha_z + \theta_{11}) + |M_{21}| \cos(k_3(L_b + 2L_w) + \alpha_z + \theta_{21})}, \quad (5.30)$$

y

$$\alpha_{\tilde{B}_2} = \frac{|M_{11}| \sin(k_3 L_b + \alpha_z + \theta_{11}) + |M_{21}| \sin(k_3(L_b + 2L_w) - \alpha_z + \theta_{21})}{|M_{11}| \cos(k_3 L_b + \alpha_z + \theta_{11}) + |M_{21}| \cos(k_3(L_b + 2L_w) - \alpha_z + \theta_{21})}, \quad (5.31)$$

con $M_{11} = |M_{11}| e^{\theta_{11}}$, $M_{21} = |M_{21}| e^{\theta_{21}}$ donde

$$M_{11} = \left(\cosh(k_2 L_b) + i \frac{(Z_2^2 - Z_3^2)}{2Z_2 Z_3} \sinh(k_3 L_b) \right) e^{ik_3 L_b}, \quad (5.32)$$

y

$$M_{21} = i \frac{(Z_2^2 - Z_3^2)}{2Z_2 Z_3} \sinh(k_3 L_b) e^{ik_3 L_b}. \quad (5.33)$$

La energía vibracional dentro del pozo viene dada por la siguiente expresión

$$H_w = \frac{\rho \omega^2 A_o^2 L_w}{D(\Phi)} \left[1 - \mathcal{R}_1^2 + \frac{2\omega_o^2 \mathcal{T}_1 \sqrt{\mathcal{R}_1}}{\omega^2} \sin(\Phi/2) \left(\frac{\sin(2kL_w)}{2kL_w} \right) \right], \quad (5.34)$$

donde $D(\Phi) = 1 + \mathcal{R}_1^2 + 2\mathcal{R}_1 \cos(\Phi)$. Partiendo de la ecuación (4.9) es fácil obtener las ecuaciones para el tiempo de estancia en las diferentes regiones ocupadas por las barreras y el pozo, teniendo en cuenta que el flujo transmitido es igual a $j_t = j_5 = \rho_5 \omega \beta_5^2 k_5 T$.

5.2.4 Simulaciones numéricas

A continuación se estudia numéricamente un SDB $(^{74}\text{Ge})_4 - (^{70}\text{Ge})_n$. Los parámetros utilizados son tomados de la referencia [85]

En la Figura 5.8 el coeficiente de transmisión, el tiempo de transmisión y el tiempo de estancia como funciones de la frecuencia de los fonones en unidades de cm^{-1} son representados para los fonones ópticos. Esta figura muestra el caso de los modos ópticos prohibidos dentro del rango de frecuencias prohibidas en la región de la barrera y permitidas dentro del pozo. Para los cálculos la distancia entre las barreras se incrementa aumentando el número de monocapas dentro del pozo desde 4 hasta 12 monocapas.

En la Figura 5.8 (c) (línea sólida) la resonancia resultante de la presencia de un pozo interior entre las barreras aparece a la frecuencia de $\omega_1 = 305,57 \text{ cm}^{-1}$. Cerca de una

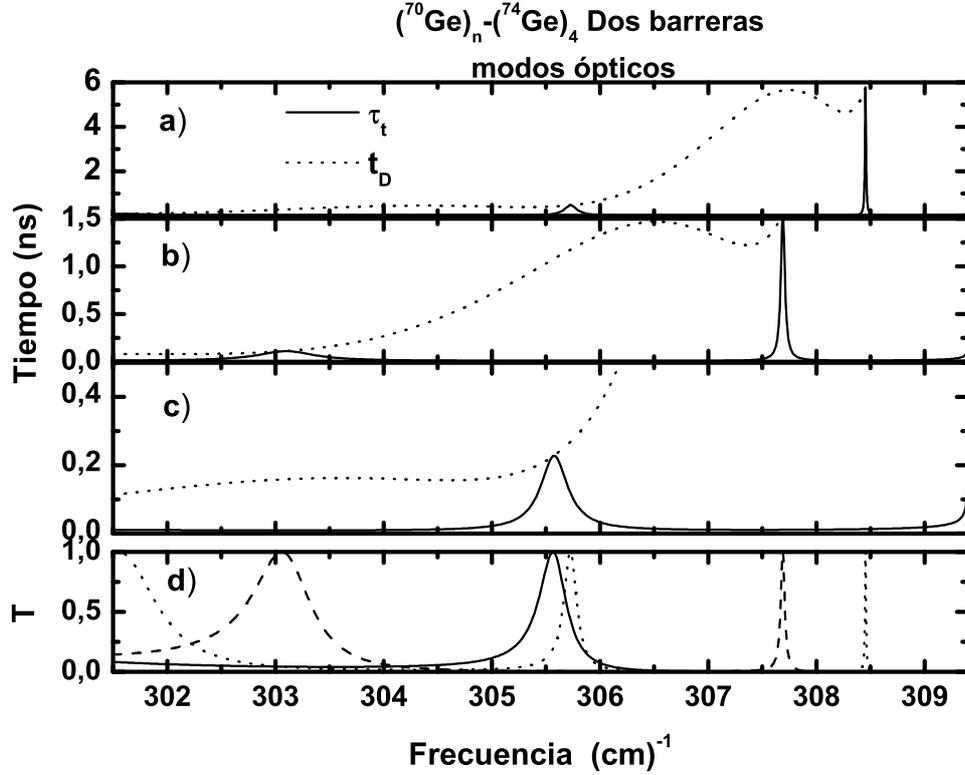


Figura 5.8: El tiempo de transmisión (línea sólida) y el tiempo de estancia (línea de puntos), ambos en ns, son graficados como función de la frecuencias de los fonones ópticos (en cm^{-1}) para la doble barrera, con $n=4$ (c), $n=8$ (b) y $n=12$ (a) monocapas. En (d) el coeficiente de transmisión se proporciona para comparación para $n=4$ (línea sólida), $n=8$ (línea de puntos) y $n=12$ (línea a rayas) monocapas.

resonancia, T alcanza su valor máximo de la unidad si el sistema es simétrico, a pesar de la opacidad de las barreras individuales. El comportamiento a tales frecuencias es similar a como si la onda fonónica estuviera atrapada por un tiempo grande en la región entre las dos barreras antes de ser transmitida. Cuando el ancho del pozo incrementa (a $n=8$ monocapas) otra frecuencia de resonancia aparece a las frecuencias de $\omega_1 = 303,061 \text{ cm}^{-1}$ y $\omega_2 = 307,685 \text{ cm}^{-1}$ como se muestra en la Figura 5.8 (b) (línea de puntos). La misma situación física aparece en la Figura 5.8 (a). En las Figuras 5.8 (a), (b) y (c) se observa que el tiempo de transmisión (línea sólida) tiene un máximo en las posiciones próxima a

las frecuencias de resonancias. A las frecuencias de resonancias el tiempo de transmisión es igual al tiempo de estancia. Se observa evidentemente que el tiempo de estancia es la función envolvente del tiempo de fase. Entonces el tiempo de interferencia es igual a cero a las frecuencias de resonancias como se muestra en la Figura 5.9.

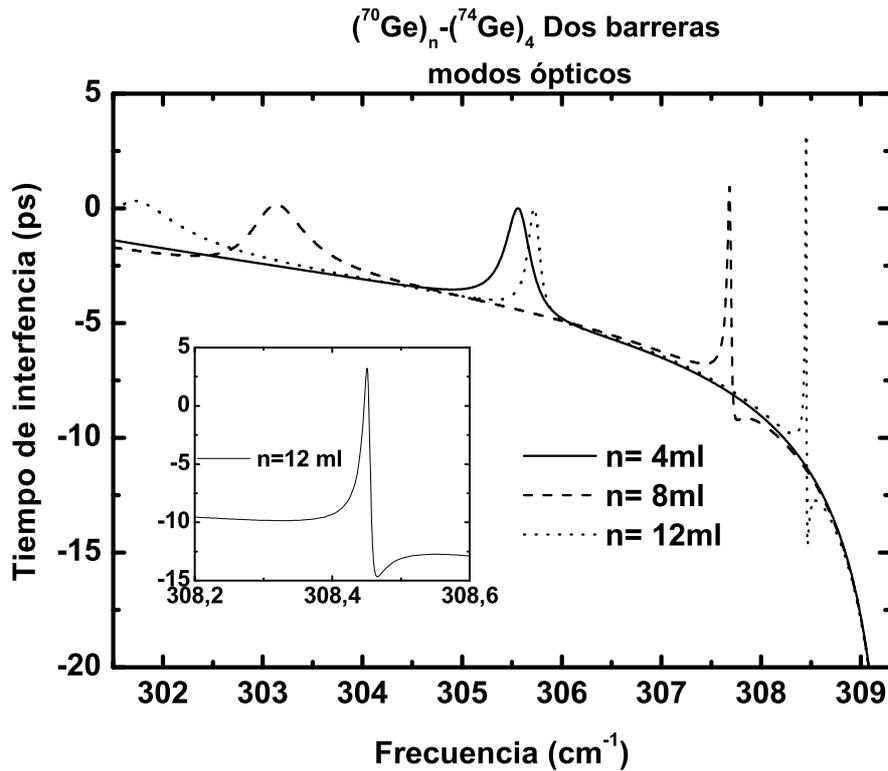


Figura 5.9: El tiempo de interferencia en ps, se gráfica como una función de la frecuencias de los fonones ópticos (en cm^{-1}) para $n=4$ (línea sólida), $n=8$ (línea de puntos) y $n=12$ (línea a rayas) monocapas. El gráfico insertado muestra algunos detalles del tiempo de interferencia para $n=12$ monocapas.

Este resultado parece coincidir con el hecho de que a las frecuencias de resonancias el coeficiente de reflexión es igual a cero; y no existe paquete de onda reflejado que interaccione con el paquete de onda incidente.

En la Figura 5.10 se muestra la energía vibracional como una función de las frecuencias de los fonones ópticos en cm^{-1} . La energía vibracional muestra picos abruptos a la fre-

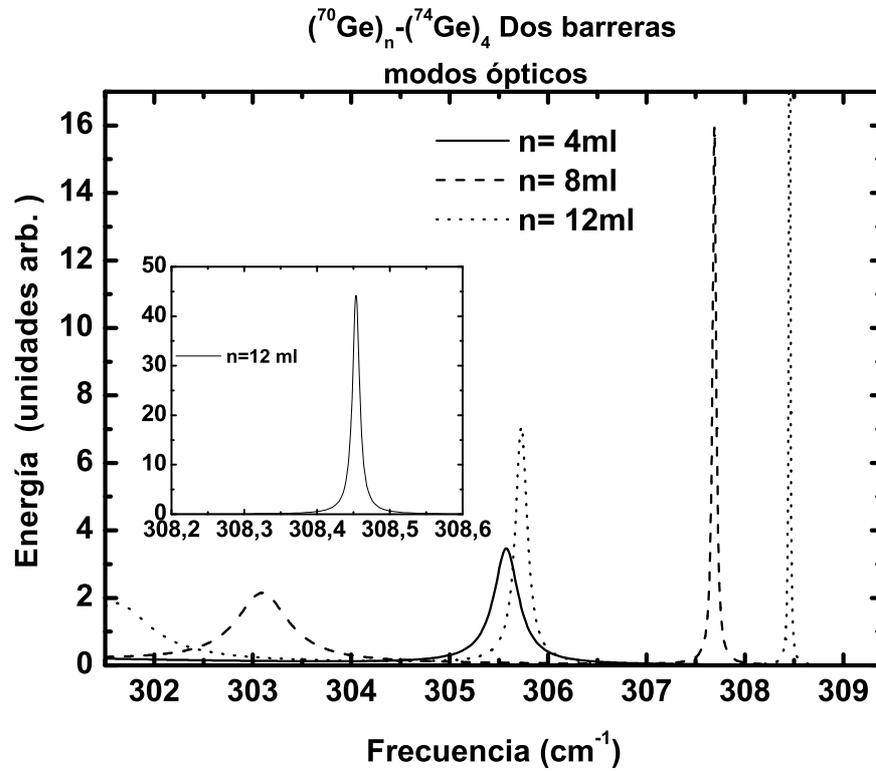


Figura 5.10: La energía vibracional (en unidades arbitraria), es graficada como una función de las frecuencia de los fonones ópticos (en cm^{-1}) para $n=4$ (línea sólida), $n=8$ (línea de puntos) y $n=12$ (línea a rayas) monocapas. El gráfico insertado muestra algunos detalles de la energía vibracional para $n=12$ monocapas.

cuencia de resonancias. En general esta energía incrementa cuando aumenta el valor de la frecuencia de resonancia o con el incremento del ancho del pozo. Para estas frecuencias de resonancias el flujo transmitido es igual al flujo incidente, de manera que el tiempo de transmisión y la energía vibracional (energía almacenada promediada en el tiempo) son proporcionales; Por consiguiente, τ_t incrementa cuando H incrementa, indicando que el fonón permanece más tiempo dentro del sistema.

En la Figura (5.11) el coeficiente de transmisión, el tiempo de transmisión y el tiempo de estancia se representan como funciones de la frecuencia de los fonones acústicos. Se observa que el coeficiente de transmisión posee valores muy cercanos a la unidad; sin

embargo solamente para aquellos valores de frecuencias determinados por la ecuación (5.13) \mathcal{T} es igual a uno. El gráfico insertado en la Figura 5.11 (d) muestra que $\mathcal{T} = 1$ a la frecuencia $\omega_1 = 130,34 \text{ cm}^{-1}$ independientemente del ancho del pozo. El valor de esta frecuencia se obtiene a partir de la ecuación (5.15).

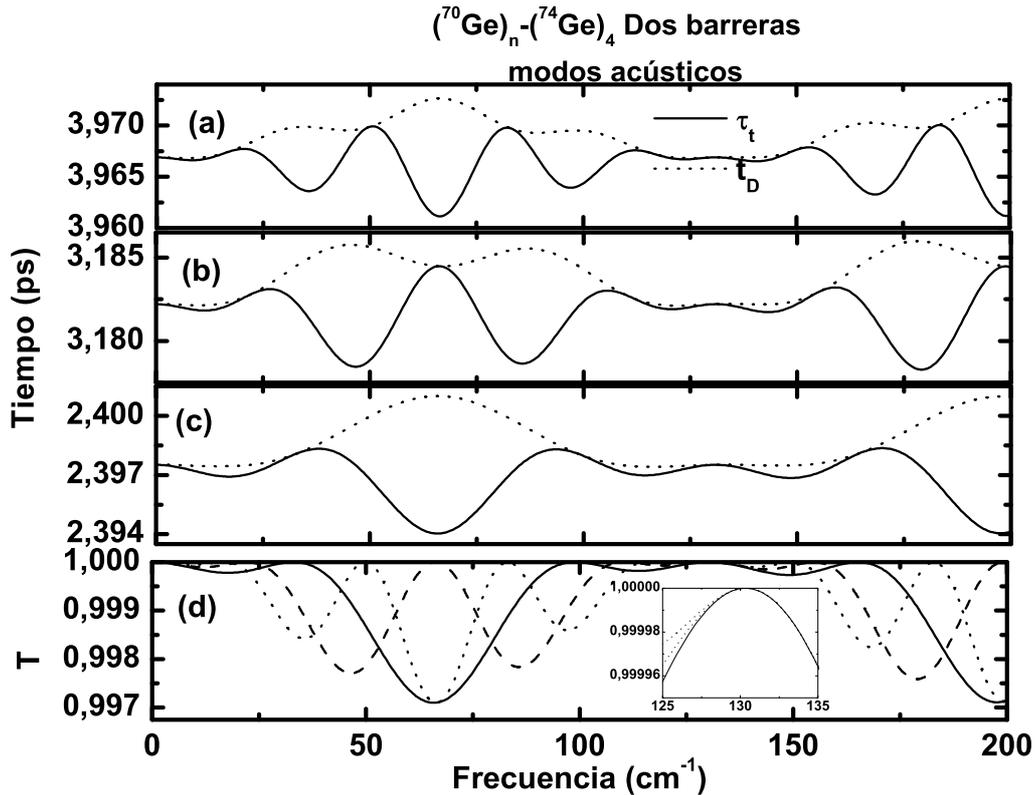


Figura 5.11: El tiempo de transmisión (línea sólida) y el tiempo de estancia (línea de puntos), ambos en ns, son graficados como función de la frecuencias de los fonones ópticos (en cm^{-1}) para la doble barrera, con $n=4$ (c), $n=8$ (b) y $n=12$ (a) monocapas. En (d) el coeficiente de transmisión se proporciona para comparación para $n=4$ (línea sólida), $n=8$ (línea de puntos) y $n=12$ (línea a rayas) monocapas. El gráfico insertado muestra el comportamiento del coeficiente de transmisión alrededor de la frecuencia de $130,34 \text{ cm}^{-1}$.

5.3 Tunelaje de fonones de longitud de onda larga utilizando el concepto de impedancia generalizada

En esta sección se propone un método para calcular los coeficientes de transmisión a través de una superred semiconductor con una distribución de barreras y pozos arbitraria; utilizando el concepto de impedancia de onda generalizada desarrollado en el contexto del tunelaje de fonones de onda larga por Villegas y sus colaboradores [101].

El método propuesto se basa en el concepto de impedancia de onda generalizada, el cual fue inicialmente desarrollado por A. Khondker y sus colaboradores [102] en el contexto del tunelaje mecánico-cuántico. Él demostró que la teoría de las líneas de transmisión eléctrica puede ser utilizada efectivamente para calcular la probabilidad de transmisión mecánico-cuántica durante el tunelaje cuántico. A diferencia de otros métodos empleados en la literatura donde se utilizan de manera extensiva el álgebra matricial, este método no requiere de un uso extensivo del cálculo matricial.

La implementación del método descansa en el hecho de que las soluciones estacionarias de las ecuaciones del movimiento (3.6) y (3.7) conducen a ecuaciones de Helmholtz. Estas ecuaciones son isomorfas a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo y a la ecuación de propagación de ondas electromagnéticas en una línea de transmisión eléctrica. Entonces, las ecuaciones del movimiento se transforman en

$$\frac{d^2u}{dz^2} + k^2u = 0 \tag{5.35}$$

$$\frac{d^2\sigma}{dz^2} + k^2\sigma = 0. \tag{5.36}$$

Dentro del intervalo de frecuencia con oscilaciones ópticas permitidas, las soluciones para

las ecuaciones del movimiento son

$$u = A_t^+ e^{ikz} + A_r^- e^{-ikz} \quad (5.37)$$

$$\sigma = A_t^+ e^{ikz} + A_r^- e^{-ikz}. \quad (5.38)$$

donde $k = \sqrt{(\omega_0^2 - \omega^2)/\beta^2}$.

Para frecuencias tales que $\omega > \omega_0$ las oscilaciones son prohibidas. La solución para las ecuaciones del movimiento son

$$u = A_r^+ e^{\kappa z} + A_t^- e^{-\kappa z} \quad (5.39)$$

$$\sigma = A_r^+ e^{\kappa z} + A_t^- e^{\kappa z}, \quad (5.40)$$

donde $\kappa = \sqrt{(\omega^2 - \omega_0^2)/\beta^2}$.

Por otra parte una línea de transmisión es una red de parámetros distribuidos, donde las corrientes y tensiones pueden variar en magnitud y fase con la distancia. Las ecuaciones de ondas se obtienen partiendo de las leyes de corriente y tensión de Kirchoff. Para la condición de estado estable del sistema se obtienen las ecuaciones del movimiento

$$\frac{d^2 I}{dz^2} - \gamma^2 I = 0 \quad (5.41)$$

$$\frac{d^2 V}{dz^2} - \gamma^2 V = 0, \quad (5.42)$$

donde I es la corriente, V es la tensión, y γ es la constante de propagación compleja, la cual es una función de la frecuencia.

Las soluciones de ondas viajeras para la corriente (5.41) y la tensión (5.42) se expresan

mediantes las siguientes ecuaciones

$$V = V^+ e^{-\gamma z} + V^- e^{\gamma z} \quad (5.43)$$

$$I = \frac{V^+}{Z_0} e^{-\gamma z} + \frac{V^-}{Z_0} e^{\gamma z}, \quad (5.44)$$

donde el factor $e^{-\gamma z}$ representa la propagación de la onda en la dirección z , y el factor $e^{\gamma z}$ representa la propagación de la onda en la dirección $-z$. La impedancia característica Z_0 de la línea de transmisión se define como

$$Z_0 = V^+ / I^+ = -V^- / I^- \quad (5.45)$$

y es una magnitud que depende de los parámetros del sistema. Es fácil verificar que las ecuaciones que describen la propagación de ondas en una línea de transmisión eléctrica (5.41) y (5.42), y las ecuaciones que describen la propagación de fonones de longitud de onda larga a través de heteroestructura semiconductoras (5.35) y (5.36) son isomorfas. Lo anteriormente expresado también es válido para las soluciones de estas ecuaciones.

Con el objetivo de introducir y definir el concepto de impedancia de onda en el contexto del tunelaje de fonones de longitud de onda larga se considera un sistema formado por dos materiales semi-infinitos, denominados A_1 y A_2 , respectivamente. Para este sistema, las ecuaciones (5.37) y (5.38) se transforman como

$$u(z) = A^+ (e^{\gamma z} - r e^{-\gamma z}), \quad (5.46)$$

$$\sigma(z) = -\rho \beta^2 \gamma A^+ (e^{\gamma z} + r e^{-\gamma z}), \quad (5.47)$$

donde

$$\gamma = i \sqrt{(\omega_0^2 - \omega^2) / \beta^2}, \quad (5.48)$$

y

$$\tilde{r} = (\rho_2\beta_2^2\gamma_2 - \rho_1\beta_1^2\gamma_1)/(\rho_2\beta_2^2\gamma_2 + \rho_1\beta_1^2\gamma_1), \quad (5.49)$$

es el coeficiente de reflexión de amplitud.

En este momento es importante recordar el isomorfismo entre las ecuaciones (5.46) y (5.47) y las correspondientes ecuaciones de ondas mecánico-cuántica [102]. Definiendo las magnitudes auxiliares $\Phi(z) = i\sigma(z)$ y $U(z) = u(z)$, se identifica la impedancia característica como

$$Z_0 = i\rho\beta^2\gamma. \quad (5.50)$$

.

La impedancia de onda en cualquier lugar z de la línea de transmisión se define como

$$Z(z) = \Phi(z)/U(z). \quad (5.51)$$

La impedancia a la entrada de la línea de transmisión de fonones $Z_i = Z(-l)$, se obtiene en función de la impedancia de carga $Z_T = Z(0)$. Entonces, de manera directa se obtiene que

$$\frac{Z_i}{Z_0} = \frac{Z_T \cosh(\gamma l) - Z_0 \sinh(\gamma l)}{Z_0 \cosh(\gamma l) - Z_T \sinh(\gamma l)}. \quad (5.52)$$

Por otra parte una línea de transmisión eléctrica sin pérdida, de impedancia característica Z_0 , y terminada con una impedancia de cargas Z_T , posee un coeficiente de reflexión de amplitud de la onda igual a

$$\Gamma = (Z_T - Z_0) / (Z_T + Z_0), \quad (5.53)$$

luego, $r \equiv \Gamma$.

Las soluciones estacionarias para las ecuaciones del movimiento (3.6) y (3.7) se escriben como $u(z, t) = U(z)e^{i\omega t}$ y $\sigma(z, t) = -i\Phi(z)e^{i\omega t}$. Lo anterior permite que las ecuaciones para la densidad de energía vibracional (3.3) y el flujo de la densidad de energía (3.9) se calculen por las siguientes relaciones

$$\mathcal{H}(z) = \frac{1}{2}\rho\omega^2 |U(z)|^2 + \frac{1}{2}\rho\omega_0^2 |U(z)|^2 - \frac{1}{2}Re \left[i\Phi(z) \frac{dU(z)^*}{dz} \right], \quad (5.54)$$

$$j(z) = \frac{\omega}{2} Re [\Phi(z)U^*(z)]. \quad (5.55)$$

Las nuevas ecuaciones (5.54) y (5.55) son utilizadas para calcular el tiempo de estancia (4.9).

Con vista a ejemplificar la implementación de este método consideremos el sistema mostrado en la Figura 5.7. Calculemos el coeficiente de transmisión para un fonón que incide por el lado izquierdo del sistema. Para un valor determinado de frecuencia ω , los valores de γ y Z_0 (ecuaciones (5.48) y (5.50), respectivamente) son calculados utilizando los valores constantes de los parámetros de ρ , β y ω_0 en cada región. La impedancia característica para la región más a la derecha del sistema sirve como impedancia de carga ya que no existe ninguna otra discontinuidad en esa región y por consiguiente $Z_L = Z_{o5}$. Encontrando la impedancia de carga en el punto $z = z_4$, la impedancia de entrada Z_3 en el punto $z = z_3$ se calcula mediante la ecuación (5.52) con $Z_o = Z_{o4}$ y $l = L_b$. Ahora con Z_3 como la carga en el punto $z = z_3$, se calcula la impedancia de entrada en el punto $z = z_2$ y este proceso continúa hasta llegar al punto $z = z_1$. El coeficiente de reflexión de todo el sistema se calcula utilizando Z_1 como la impedancia de carga y Z_{o1} como la impedancia característica y sustituyendo estos valores en la ecuación (5.53). Mediante este procedimiento también se obtiene el coeficiente de transmisión de todo el sistema.

Resumiendo la impedancia de onda generalizada definida en este trabajo depende de los parámetros de los materiales y la frecuencia. Esta impedancia esta relacionada con los tensores de tensión y deformación unidimensional.

5.4 Superredes gaussianas para fonones

En esta sección se propone la estructura de una superred la cual posee una característica de transmisión semejante a la de un filtro pasabanda.

La transmisión total se obtiene cuando la frecuencia de los fonones está dentro de las respectiva banda de paso. La estructura se considera una superred regular modulada mediante una función gaussiana. El tope de la barrera de fonones es centrada en z_b (donde z denota la coordenada espacial a lo largo de la dirección de crecimiento de la estructura) y se coloca de acuerdo a la función $V_0 \exp(-z_b^2/\sigma_g^2)$ donde V_0 es la magnitud de la barrera más alta y σ_g es la desviación estándar de la función gaussiana. En este caso, la altura de la barrera V_0 es igual a la diferencia entre las frecuencia de fonones para el masivo del Si , $\omega_{Si} = 518\text{cm}^{-1}$, y la frecuencia de fonones para el masivo del Ge , $\omega_{Ge} = 303,4\text{cm}^{-1}$. El perfil del potencial se puede obtener, por ejemplo, variando gradualmente la fracción molar en el sistema Si/Si_xGe_{1-x} . Los pozos se construyen del mismo material (por ejemplo Si) y solo las barreras (Si_xGe_{1-x}) son moduladas. Los parámetros reportados en la referencia [104] son empleados.

En la Figura 5.12 el coeficiente de transmisión para una superred gaussiana Si/Si_xGe_{1-x} con 20 períodos y $\sigma = 2.5 L$ se muestra como función de la frecuencia de los fonones incidentes. Dos bandas de pasos diferentes son observadas, una para frecuencias menores que 295 cm^{-1} y la segunda para las frecuencias entre 295 cm^{-1} y 352 cm^{-1} . Las bandas de pasos son planas pero las bandas de parada no muestran una reflexión perfecta como

en el caso electrónico.

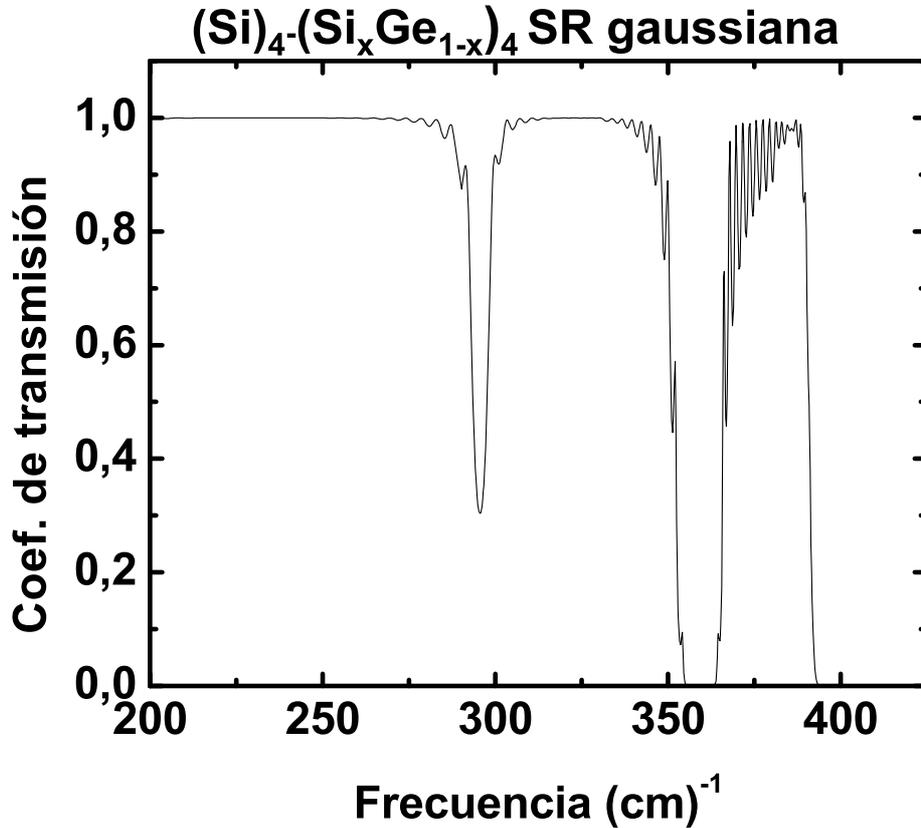


Figura 5.12: El coeficiente de transmisión para una superred gaussiana con 20 períodos y $\sigma = 2.5 L$ como función de la frecuencia de los fonones incidentes.

5.5 Cálculo del tiempo de tunelaje a través de una heteroestructura semiconductor

En esta sección se estudian numéricamente las superredes finitas de $(^{74}\text{Ge})_4-(^{70}\text{Ge})_4$, previamente consideradas en las referencias [85] y [86].

En las Figuras 5.13, 5.14 y 5.15 se grafican el tiempo de estancia (líneas sólidas) y el tiempo de transmisión (líneas a rayas) como funciones de la frecuencia en cm^{-1} para los

fonones acústicos y ópticos.

En la Figura 5.13 se muestran los fonones acústicos; mientras que en las Figuras 5.14 y 5.15 se estudian los fonones ópticos para las regiones de frecuencias permitidas (Figura 5.14) y prohibidas (Figura 5.15). Con el objetivo de esclarecer el significado de ambos tiempos se gráfica el coeficiente de transmisión \mathcal{T} como una función de la frecuencia de los fonones. En los cálculos el número de barrera se incrementa desde 2 barreras hasta 15 barreras. En [86] se obtuvo que para 15 barreras las características de los modos de fonones son suficientemente cercanas a la relación de dispersión de un sistema periódico infinito.

La característica más significativa en la Figura 5.13 es la existencia de un gap para los modos de fonones (equivalente a un valle para \mathcal{T}), el cual es más estrecho y profundo para sistemas más grandes. El tiempo de fase presenta el mismo comportamiento que \mathcal{T} . El tiempo de estancia muestra picos característicos, indicando que el fonón permanece más tiempo dentro de la heteroestructura para estas frecuencias. Con la excepción de los modos dentro del gap, los fonones acústicos tiene un coeficiente de transmisión muy cercano a la unidad. En la Figura 5.13 (d) se representa \mathcal{T} para 15 barreras con líneas a rayas con el objetivo de diferenciar los picos. En el gráfico insertado de la Figura 5.13 (a) se muestran los picos de τ_t para el sistema de las 15 barreras. Se observa que t_D es la envolvente para estos picos de τ_t . Por otra parte se nota que t_D incrementa más rápido que τ_t cuando el tamaño del sistema es incrementado.

En la Figura 5.14 se muestra el caso de los modos de fonones ópticos dentro del rango de frecuencia permitidas que se propagan tanto dentro de las capas de los pozos y las barreras. La situación física presenta en esta caso es similar al caso de los modos acústicos. La diferencia esencial proviene de la nueva relación de dispersión para los modos ópticos. La característica novedosa en el comportamiento del tiempo de estancia es la divergencia

que aparece cuando la frecuencia se aproxima al valor correspondiente para el material del masivo de 301.5 cm^{-1} . El coeficiente de transmisión tiende a cero cuando se aproxima a este valor de frecuencia.

En la Figura 5.15 se presenta el caso de los modos de fonones ópticos dentro del rango de frecuencias prohibidas dentro de la capa de la barrera y permitida dentro de la capa del pozo. Es importante en este caso analizar las resonancias resultantes de la presencia de los pozos interiores entre las barreras. Dado la hibridación de los modos, la resonancia que aparece dentro del sistema de doble barrera a $305,57 \text{ cm}^{-1}$, se duplica para el sistema de tres barreras y dos pozos interiores. El número de picos incrementa para sistemas mucho más grandes. Evidentemente se observa que el tiempo de estancia es la función envolvente del tiempo de fase. También ambos tiempos son iguales a las frecuencias de resonancias, como se probó anteriormente. Este comportamiento aparece en todas las figuras mostradas. En este caso el orden de magnitud de t_D y τ_i es tres veces más grande que en los casos de fonones acústicos y ópticos permitidos. En general se encuentra que los valores de los tiempos para los fonones ópticos son mucho más grande que para los fonones acústicos.

5.6 Conclusiones Parciales

Se ha demostrado la existencia de un límite asintótico para el tiempo de transmisión de los fonones de longitud de onda larga en el caso de fonones ópticos con frecuencias prohibidas en la región de la barrera. Este fenómeno es un análogo del EH en el tunelaje de electrones. Este límite asintótico del tiempo de transmisión está relacionado con la saturación de la energía vibracional dentro del sistema. Lo anterior permite reinterpretar el retardo temporal como un tiempo de vida de la cavidad y no como un tiempo de tránsito del paquete de onda a través de la estructura. Tal argumento soluciona el problema del

surgimiento de velocidades superlumínica. Por otra parte el tiempo de estancia propuesto no se satura en todo el rango de frecuencia considerado (tanto para fonones acústicos y ópticos).

El estudio de la dependencia de los tiempos de estancia y transmisión con el número de períodos de una superred genera determinadas propiedades que son de interés actual. En particular, en el caso que se consideren modos ópticos con frecuencias prohibidas en los materiales que actúan como barrera, τ_t presenta un comportamiento de tiempo de fase superlumínico dependiendo de si el fonón esta dentro de una banda o dentro de un gap. Este comportamiento y el EH son propiedades relacionadas pero no el mismo efecto; aunque se pueden explicar desde el mismo punto de vista. Fenómenos semejantes aparecen en el tunelaje de electrones y fotones a través de superredes.

Estas predicciones teóricas sobre la existencia del EH en el contexto de la nanofononica hoy tiene su eviencia experimental en los trabajos realizados por A. Huynh, N. D. Lanzillotti-Kimura y sus colaboradores. Ellos estudian el tiempo de transmisión de fonones acústicos en el rango GHz-THz a través de un espejo hipersónico [21]; observando que dentro de la banda de parada, los tiempos de tránsito son menores que el tiempo de tránsito libre a través de la estructura. Además, N. D. Lanzillotti-Kimura analiza para el caso un espejo de fonones la dependencia del tiempo de transmisión del número de períodos de la estructura observando la saturación de este tiempo con el aumento el número de períodos.

El tunelaje resonante a través de una estructura de doble barrera de fonones restringido al caso unidimensional es investigado teóricamente. Expresiones analíticas para el coeficiente de transmisión y la condición de resonancia las cuáles pueden evaluarse numéricamente son obtenidas aplicando el método de la matriz de transferencia. La condición $\tilde{H} = 0$ se considera la base para comprender el tunelaje resonante en el sistema de doble barrera estudiado. El calculo de los tiempos de tunelaje propuesto y la comprobación numérica de

la relación existente entre ellos validan los resultados teóricos presentados en el capítulo precedente.

El empleo adecuado del isomorfismo existente entre las ecuaciones físicas que describen diferentes sistemas físicos permite establecer otro punto de vista diferente para analizar determinados fenómenos físicos. Desde este punto de vista es posible definir una impedancia de onda generalizada en el tunelaje de fonones de onda larga, la cual es semejante a la definida en el estudio de las líneas de transmisión eléctrica y en el tunelaje mecánico-cuántico. Este enfoque es de gran utilidad en el cálculo de los coeficiente de transmisión y reflexión para el caso de superredes semiconductoras y en el estudio del tunelaje resonante.

En este capítulo se estudia numéricamente las superredes finitas de $(^{74}\text{Ge})_4-(^{70}\text{Ge})_4$, lo cual ayuda a esclarecer el significado de los tiempos de estancia y fase. En general se demuestra que ambos tiempos se pueden utilizar para describir las características de los modos de fonones. Para los fonones ópticos se encuentra que la magnitud de los tiempos es más grande que para los fonones acústicos. Estas magnitudes aumentan, con el incremento del tamaño del sistema. Para los fonones ópticos el término de interferencia, resultante del solapamiento de las ondas incidentes y reflejadas delante de la heteroestructura no es cero (a diferencia de los fonones acústicos, este tiene un valor pequeño. Se observa que el tiempo de estancia es la función envolvente de los picos del tiempo de fase para los estados permitido. En particular, en los estados resonantes, t_D es igual a τ_i y $\tau_i = 0$.

En la referencia [50] las ecuaciones Christoffel son empleadas para estudiar un sistema macroscópico, es decir, las mismas ecuaciones utilizadas para estudiar los fonones acústicos de longitud de onda larga. Estos autores consideran modos desacoplados. Ellos calculan teóricamente los coeficientes de transmisión utilizando el método de la matriz de transferencia y las velocidades de grupo simulan la propagación de paquetes de ondas. Sus resultados teóricos están en correspondencia con sus propios datos experimentales. Deter-

minado por que en éste trabajo se emplea la velocidad del sonido dentro del medio como un parámetro de entrada, un chequeo cualitativo del orden de magnitud de los tiempos se obtiene reemplazando las dimensiones de sus sistemas por las dimensiones nanométricas de la dimensiones empleadas en este trabajo. Como resultado se obtiene el mismo orden de magnitud de los tiempos mostrados en la Figura 5.13. No obstante se necesita de más evidencia experimental.

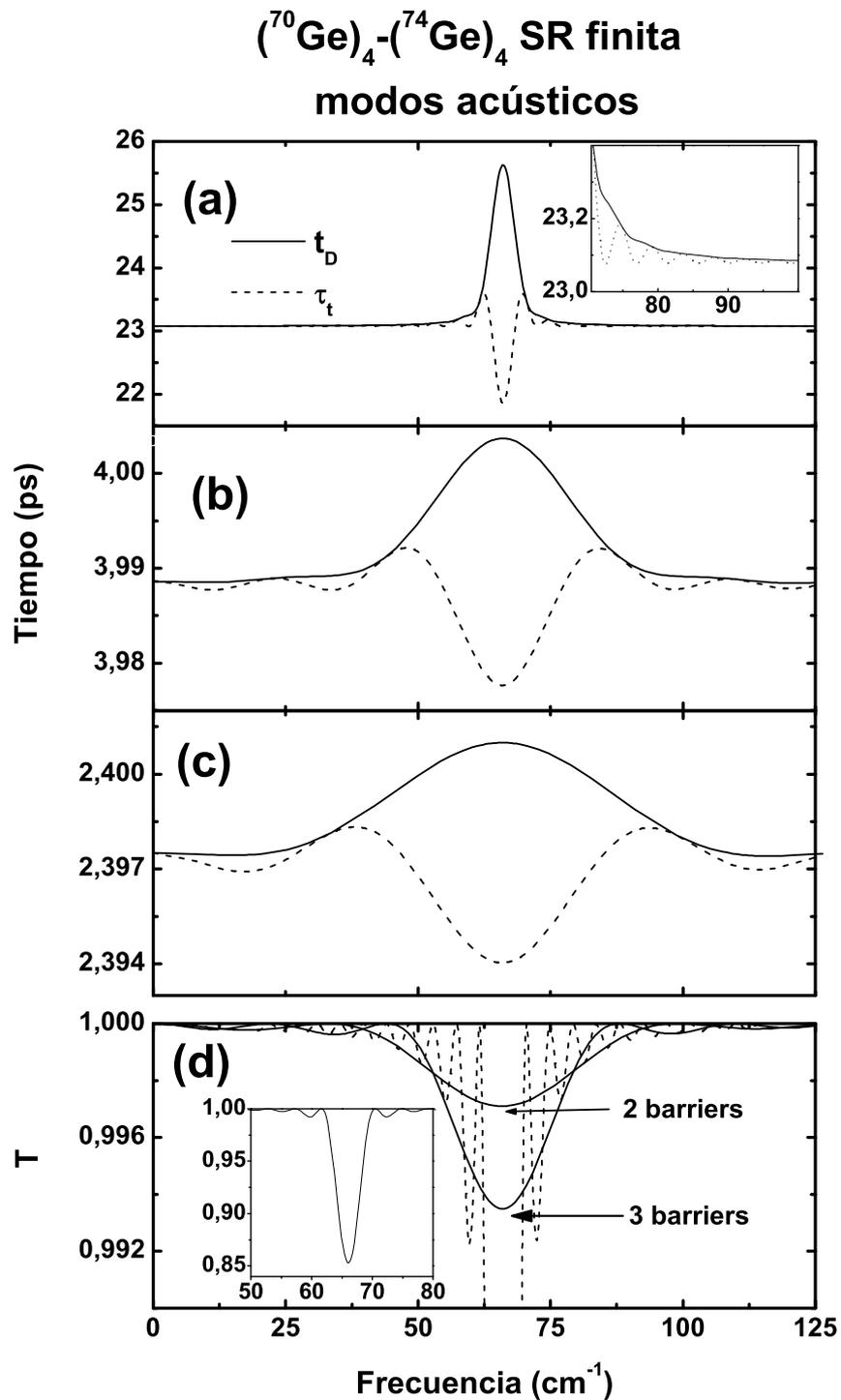


Figura 5.13: El tiempo de estancia (línea sólida y el tiempo de transmisión (línea a rayas), ambos en ps, son ploteados como una función de la frecuencia de los fonones acústicos (en cm^{-1}) para la superred de tamaño finito $(^{74}\text{Ge})_4-(^{70}\text{Ge})_4$, con 3, 4 y 15 barreras. El coeficiente de transmisión se proporcióna para comparación. Por razones de conveniencia el coeficiente de transmisión para 15 barreras es ploteados con líneas a rayas e insertado dentro de la figura. El gráfico insertado en la parte superior de la figura muestra algunos detalles del tiempo de transmisión para 15 barreras.

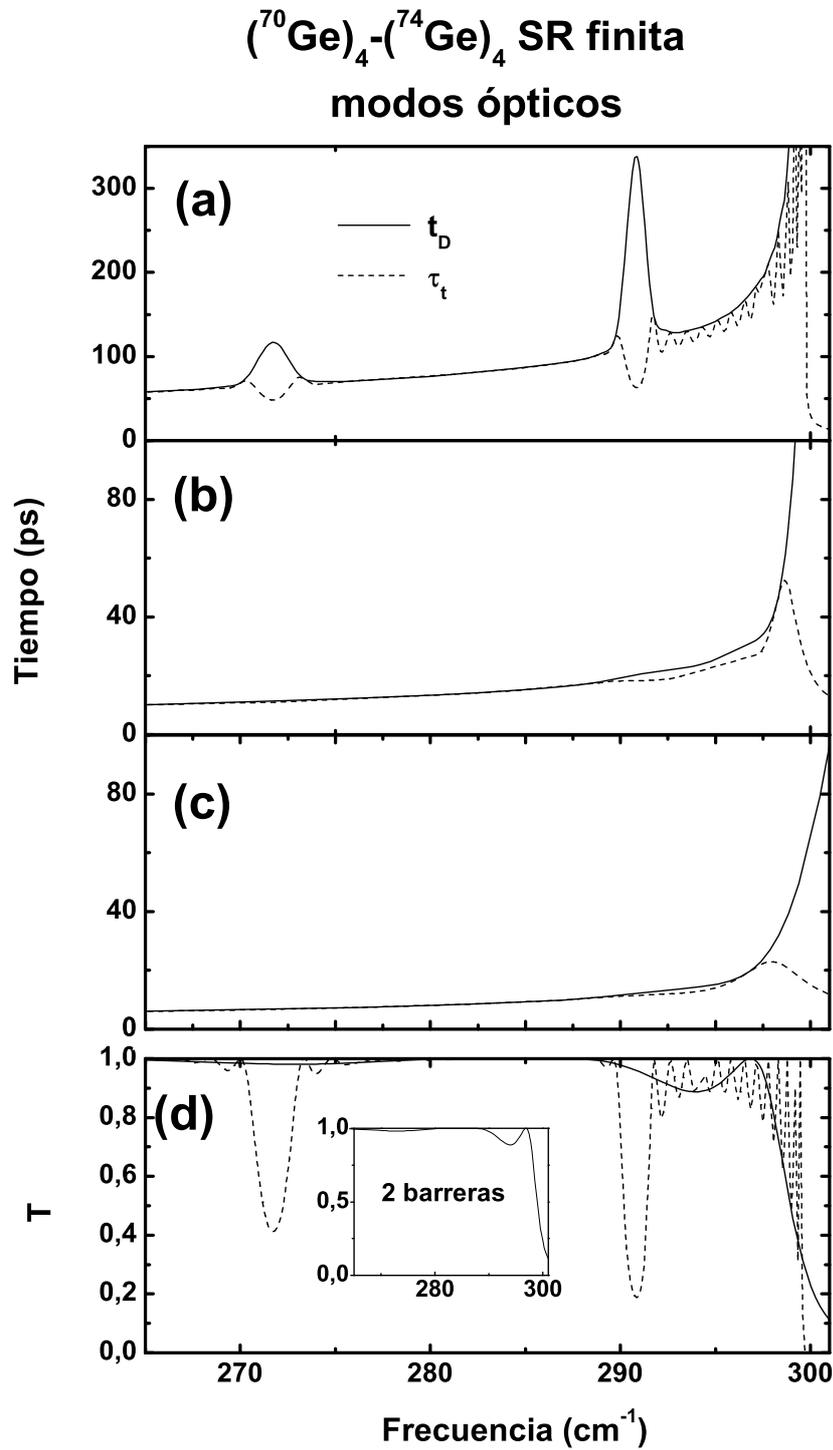


Figura 5.14: Semejante a la Figura 5.13 para los estados de fonones ópticos permitidos. Por razones de claridad el coeficiente de transmisión para 15 barreras se gráfica con líneas a rayas y para dos barreras se muestra en el grafico insertado.

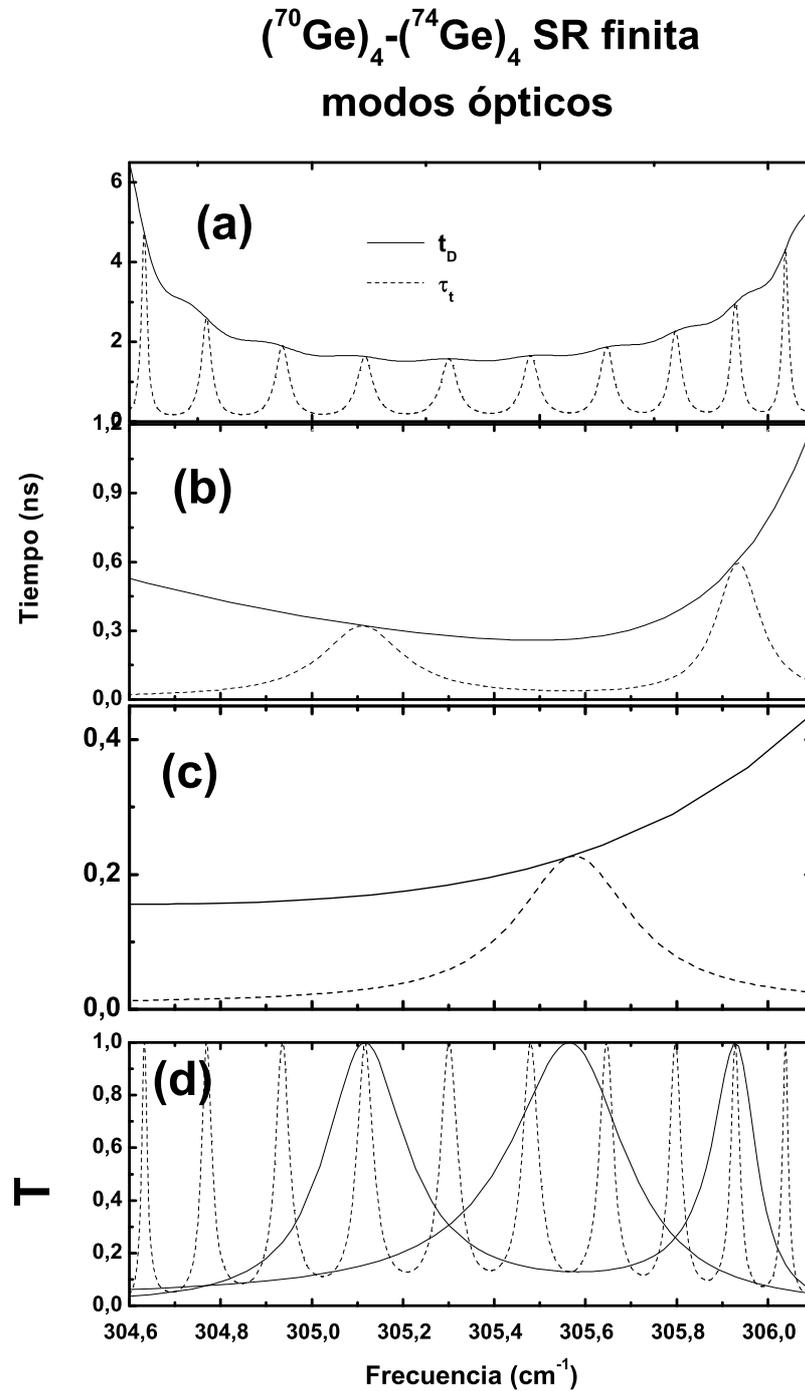


Figura 5.15: Semejante a las figuras anteriores para los estados de fonones ópticos prohibidos. El tiempo esta ahora en ns. Por razones de claridad el coeficiente de Transmisión para 15 barreras se gráfica con líneas a rayas.

6 CONCLUSIONES

Este trabajo ha estado dirigida a ahondar en el conocimiento del origen y naturaleza del efecto túnel para lo cual se ha partido de la validez del modelo fenomenológico de onda larga, el cual permite estudiar de manera adecuada los materiales semiconductores no polares. El isomorfismo existente entre los fenómenos del tunelaje de electrones, ondas electromagnéticas y fonones nos ha permitido obtener ecuaciones de naturaleza semejante.

Partiendo de la ecuación de continuidad del flujo de la densidad de energía se ha podido obtener una expresión analítica de validez general que relaciona a los diferentes tiempos (tiempo de estancia, tiempo total de transmisión, tiempo total de reflexión y tiempo de interferencia) utilizados para caracterizar el tunelaje de fonones de longitud de onda larga a través de heteroestructuras semiconductoras. En particular, se define por primera vez el tiempo de estancia en el contexto del tunelaje de fonones y se estudian sus principales propiedades.

Partiendo de principios físicos generales como la invarianza ante la inversión temporal, la invarianza ante la inversión espacial y la conservación del flujo de la densidad de energía se obtienen las propiedades que deben cumplir los elementos de la matriz de transferencia del sistema estudiado y se demuestra la equivalencia existente entre los tiempos de transmisión y reflexión.

Las condiciones bajo las cuales aparece el Efecto Hartman en el tunelaje de fonones

de longitud de onda larga son analizadas. En particular, para el caso de una barrera de fonones se obtiene un límite asintótico para el tiempo de transmisión, lo cual es el equivalente fonónico del Efecto Hartman. Una posible explicación del mismo, tomando en cuenta la saturación de la energía vibracional almacenada en la región de la barrera permite dar una explicación satisfactoria de este fenómeno. También se estudia la dependencia del tiempo de tunelaje de tamaño del sistema (número de períodos de la superred) o lográndose predecir que un fenómeno semejante al Efecto Hartman puede ocurrir en estos sistema. Este fenómeno recientemente ha sido observado experimentalmente durante el tunelaje de fonones en heteroestructuras.

El estudio del comportamiento de un sistema de doble barrera de fonones permite obtener las condiciones bajo las cuales es posible observar el tunelaje resonantes de fonones, así como la forma de su espectro de transmisión.

El empleo adecuado del isomorfismo existente entre las ecuaciones matemáticas que describen diferentes sistemas físicos permite establecer otro punto de vista diferente para analizar determinados fenómenos. Luego es posible definir una impedancia de onda generalizada en el tunelaje de fonones de onda larga, la cual es semejante a la definida en el estudio de las líneas de transmisión eléctrica y en el tunelaje mecánico-cuántico. Este enfoque es de utilidad en el cálculo de los coeficiente de transmisión y reflexión para el caso de superredes semiconductoras de formas arbitraria y en el estudio del tunelaje resonante.

Los cálculos analíticos y numéricos realizados confirman la validez de las ecuaciones obtenidas y proporcionan un orden de magnitud del tiempo de tunelaje el cual puede ser utilizado como punto de partida para la realización de algunas mediciones reales.

Este estudio también es importante por que permite el diseño de nuevos dispositivos tales como son las llamadas superredes gaussianas. A su vez los resultados obtenidos en este trabajo pueden ser extrapolados al estudio de electrones y ondas electromagnéticas

7 RECOMENDACIONES

Luego de realizar un estudio de los tiempos de tunelaje de fonones de longitud de onda larga a través de una heteroestructura semiconductor se realizan las siguientes recomendaciones:

- Extender el estudio al caso de excitaciones escalares con varias componentes acopladas.
- Realizar un estudio experimental de las propiedades del tiempo de tunelaje.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] V. Narayanamurti, H. L. Störmer, M. A. Chin, A. C. Gossard, y W. Wiegmann, *Selective Transmission of High-Frequency Phonons by a Superlattices: The “Dielectric” Phonon Filter*, Phys. Rev. Lett. **43**, 2012 (1979).
- [2] N. D. Lanzillotti-Kimura, A. Fainstein, A. Lemaître, y B. Jusserand, *Nanowave devices for terahertz acoustic phonons*, Appl. Phys. Lett. **88**, 083113 (2006).
- [3] N. D. Lanzillotti-Kimura, A. Fainstein, B. Jusserand, A. Lemaître, O. Mauguin, y L. Largeau, *Acoustic phonon nanowave devices based on aperiodic multilayers: Experiments and theory*, Phys. Rev. **B 76**, 174301 (2007).
- [4] A. A. Balandin, *Nanophononics: Phonon Engineering in Nanostructures and Nanodevices*, J. Nanosci. Nanotech. **5**, 1015 (2005).
- [5] D. Moss, A. V. Akimov, O. Makarovskiy, R. P. Campion, C. T. Foxon, L. Eaves, y A. J. Kent, *Ultrafast acoustical gating of the photocurrent in a p-i-n tunneling diode incorporating a quantum well*, Phys. Rev. **B 80**, 113306 (2009).
- [6] D. R. Fowler, A. V. Akimov, A. G. Balanov, M. T. Greenaway, M. Henini, T. M. Fromhold, y A. J. Kent, *Semiconductor charge transport driven by a picosecond strain pulse*, Appl. Phys. Lett. **92**, 232104 (2008).
- [7] M. T. Greenaway, A. G. Balanov, D. Fowler, A. J. Kent, y T. M. Fromhold, *Using*

- sound to generate ultra-high-frequency electron dynamics in superlattices*, *Microelec. J.* **40**, 725 (2009).
- [8] T. Dekorsy, H. Auer, C. Waschke, H. J. Bakker, H. G. Roskos, H. Kurz, V. Wagner, y P. Grosse *Emission of Submillimeter Electromagnetic Waves by Coherent Phonons*, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 738 (1995).
- [9] A. V. Scherbakov, T. Berstermann, A. V. Akimov, D. R. Yakovlev, G. Beaudoin, D. Bajoni, I. Sagnes, J. Bloch, y M. Bayer, *Ultrafast control of light emission from a quantum-well semiconductor microcavity using picosecond strain pulses*, *Phys. Rev. B* **78**, 241302(R) (2008).
- [10] A. V. Akimov, Y. Tanaka, A. B. Pevtsov, S. F. Kaplan, V. G. Golubev, S. Tamura, D. R. Yakovlev, y M. Bayer, *Hypersonic Modulation of Light in Three-Dimensional Photonic and Phononic Band-Gap Materials*, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 033902 (2008).
- [11] M. Trigo, A. Bruchhausen, A. Fainstein, B. Jusserand, y V. Thierry-Mieg, *Confinement of Acoustical Vibrations in a Semiconductor Planar Phonon Cavity*, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 227402 (2002).
- [12] P. Lacharmoise, A. Fainstein, B. Jusserand, y V. Thierry-Mieg, *Optical cavity enhancement of light-sound interaction in acoustic phonon cavities*, *Appl. Phys. Lett.* **84**, 3274 (2004).
- [13] M. F. Pascual Winter, A. Fainstein, M. Trigo, T. Eckhause, R. Merlin, A. Cho, y J. Chen, *InP acoustic cavity phonon spectra probed by Raman scattering*, *Phys. Rev. B* **71**, 085305 (2005).
- [14] G. Rozas, M. F. Pascual Winter, A. Fainstein, B. Jusserand, P. O. Vaccaro, S. Saravanan, y N. Saito, *Piezoelectric semiconductor acoustic cavities*, *Phys. Rev. B* **72**, 035331 (2005).

- [15] A. Fainstein, N. D. Lanzillotti Kimura, y B. Jusserand, *Cavities and devices for sound and light*. In W. Y. Lai, S. Pau, y O. D. Lopez, editors, Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers (SPIE) Conferences Series, volume 5592 of Presented at the Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers (SPIE) Conference, pages 254-264, January 2005.
- [16] G. Rozas, M. F. Pascual Winter, A. Fainstein, B. Jusserand, y P. O. Vaccaro, *Confined optical phonons in piezoelectric [311] GaInAs/AlAs superlattices probed by Raman scattering*, J. of Phys:Conference Series **92**, 0112067 (2007).
- [17] G. Rozas, M. F. Pascual Winter, A. Fainstein, B. Jusserand, P. O. Vaccaro, y S. Saravanan, *Acoustic phonon Raman scattering induced by a built-in electric field*, Phys. Rev. **B 77**, 165314 (2008).
- [18] G. Rozas, M. F. Pascual Winter, B. Jusserand, A. Fainstein, B. Perrin, E. Semenova, y A. Lemaître, *Lifetime of THz Acoustic Nanocavity Modes*, Phys. Rev. Lett. **102**, 015502 (2009).
- [19] N. D. Lanzillotti-Kimura, A. Fainstein, y B. Jusserand, *Phonon Bloch oscillations in acoustic-cavity structures*, Phys. Rev. **B 71**, 041305 (2005).
- [20] N. D. Lanzillotti-Kimura, A. Fainstein, C. A. Balseiro, y B. Jusserand, *Phonon engineering with acoustic nanocavities: Theoretical considerations on phonon molecules, band structures, and acoustic Bloch oscillations*, Phys. Rev. **B 75**, 024301 (2005).
- [21] A. Huynh, B. Perrin, N. D. Lanzillotti-Kimura, B. Jusserand, A. Fainstein, y A. Lemaître, *Subterahertz monochromatic acoustic wave propagation using semiconductor superlattices as transducers*, Phys. Rev. **B 78**, 233202 (2008).
- [22] C. Thomsen, H. T. Grahn, H. J. Maris, y J. Tauc, *Surface generation and detection of phonons by picosecond light pulses*, Phys. Rev. **B 34**, 4129 (1986).

- [23] T. Dekorsy, G. C. Cho, y H. Kurz, *Light Scattering in Solids VIII*, editado por M. Cardona y G. Güntherodt (Springer, Heidelberg, 1986).
- [24] A. Bartels, T. Dekorsy, H. Kurz, y K. Köhler, *Coherent control of acoustic phonons in semiconductor superlattices*, Appl. Phys. Lett. **72**, 2844 (1998).
- [25] C-K Sun, J-C. Liang, y X-Y Yu, *Coherent Acoustic Phonon Oscillations in Semiconductor Multiple Quantum Wells with Piezoelectric Fields*, Phys. Rev. Lett. **84**, 179 (2000).
- [26] U. Özgür, C-W. Lee, y H. O. Everitt, *Control of Coherent Acoustic Phonons in Semiconductor Quantum Wells*, Phys. Rev. Lett. **86**, 5604 (2001).
- [27] M. F. Pascual Winter, A. Fainstein, B. Jusserand, B. Perrin, y A. Lemaître, *Optimized optical generation and detection of superlattice acoustic phonons*, Appl. Phys. Lett. **94**, 103103 (2009).
- [28] A. Fainstein, B. Jusserand, y V. Thierry-Mieg, Phys. Rev. Lett. **75**, 3764 (1995).
- [29] P. Lacharmoise, A. Fainstein, B. Jusserand, y V. Thierry-Mieg, *Optical cavity enhancement of lightsound interaction in acoustic phonon cavities*, Appl. Phys. Lett. **84**, 3274 (2004).
- [30] A. J. Kent, N. M. Stanton, R. N. Kini, y M. Henini, *Angle dependence of the phonon assisted tunnelling in a weakly coupled superlattice: evidence for terahertz phonon amplification*, J. Appl. Phys. **98**, 033514 (2005).
- [31] D. Moss, A. V. Akimov, J. Kent, B. A. Glavin, M. J. Kappers, J. L. Hollander, M. A. Moram, y C. J. Humphreys, *Coherent terahertz acoustic vibrations in polar and semipolar gallium nitride-based superlattices*, App. Phys. Lett. **94**, 011909 (2009).
- [32] M. Büttiker y R. Landauer, *Traversal time for tunneling*, Phys. Rev. Lett. **49**, 1739 (1982).

- [33] M. Büttiker, *Larmor precession and the traversal time for tunneling*, Phys. Rev. **B 27**, 6178 (1983).
- [34] M. Büttiker y R. Landauer, *Traversal Time for Tunneling*, Phys. Scr. **32** 429 (1985).
- [35] M. Büttiker y R. Landauer, *Traversal Time for Tunneling*, J. Res. Dev. **30**, 451 (1986).
- [36] M. Büttiker y R. Landauer, *Comment on: The quantum mechanical tunneling time problem revisited*, J.Phys. C. **21**, 6207 (1988).
- [37] E. H. Hauge y J. A. Stövneng, *Tunneling times: a critical review*, Rev. Mod. Phys. **61**, 917 (1989).
- [38] Ph. Balcou y L. Dutriaux, *Dual optical tunneling times in frustrated total internal reflection*, Phys. Rev. Lett. **78**, 851 (1997).
- [39] S. Longhi, M. Marano, P. Laporta, y M. Belmonte, *Superluminal optical pulse propagation at 1.5 μm in periodic fiber Bragg gratings*, Phys. Rev. **E 64**, 055602(R) (2001).
- [40] A. Enders y G. Nimtz, *On superluminal barrier traversal*, J.Phys. I (France) **2**, 1693 (1992).
- [41] A. Enders y G. Nimtz, *Evanescent-mode propagation and quantum tunneling*, Phys. Rev. **E 48**, 632 (1993).
- [42] A. Enders y G. Nimtz, *Zero-time tunneling of evanescent mode packets*, J. Phys. I (France) **3**, 1089 (1993).
- [43] M. Mojahedi, E. Schamiloğlu, F. Hegeler, y K. J. Malloy, *Time-domain detection of superluminal group velocity for single microwave pulses*, Phys. Rev. **E 62**, 5758 (2000).
- [44] M. Mojahedi, E. Schamiloğlu, K. Agi, y K. J. Malloy, *Frequency domain detection of*

- superluminal group velocities in a distributed Bragg reflector*, IEEE J. Quant. Electron. **36**, 418 (2000).
- [45] M. Mojahedi, K. J. Malloy, G.V. Eleftheriades, y J. Woodley, *Abnormal wave propagation in passive media*, IEEE J. Sel. Top. Quant. Electron. **9**, 30 (2003).
- [46] J. J. Carey, J. Zawadzka, D. A. Jaroszynski, y K. Wynne, *Noncausal Time Response in Frustrated Total Internal Reflection?*, Phys. Rev. Lett. **84**, 1431, (2000).
- [47] M. T. Reiten, D. Grischkowsky, y R. A. Cheville, *Optical tunneling of single-cycle terahertz bandwidth pulses*, Phys. Rev. **E 64**, 036604 (2001).
- [48] A. Hache y L. Poirier, *Long-range superluminal pulse propagation in a coaxial photonic crystal*, Appl. Phys. Lett. **80**, 518 (2002).
- [49] S. Yang, J. H. Page, Z. Liu, M. L. Cowan, C. T. Chan, y P. Sheng, *Ultrasound Tunneling through 3D Phononic Crystal* Phys. Rev. Lett. **88**, 104301 (2002).
- [50] W. M. Robertson, J. Ash, y J. M. McGaugh, *Breaking the sound barrier: tunneling of acoustic waves through the forbidden transmission region of a one-dimensional acoustic band gap array*, Am. J. Phys. **70**, 689 (2002).
- [51] H. G. Winful, *Tunneling time, the Hartman effect, and superluminality: A proposed resolution of an old paradox*, Physics Reports **436**, 1 (2006).
- [52] T. E. Hartman, *Tunneling of a wave packet*, J. Appl. Phys. **33**, 3427 (1962).
- [53] H. G. Winful, *Energy storage in superluminal barrier tunneling: Origin of the “Hartman effect”*, Opt. Express **10**, 1491 (2002).
- [54] H. G. Winful, *Nature of “Superluminal” Barrier Tunneling*, Phys. Rev. Lett. **90**, 023901 (2003).
- [55] H. G. Winful, *Delay Time and the Hartman Effect in Quantum Tunneling*, Phys.

- Rev. Lett. **91**, 260401 (2003).
- [56] H. G. Winful, *Physical Mechanism for Apparent Superluminality in Barrier Tunneling*, IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron. **9**, 17 (2003).
- [57] H. G. Winful, *Group delay, stored energy, and the tunneling of evanescent electromagnetic waves*, Phys. Rev. **E 68**, 016615 (2003).
- [58] H. G. Winful, *Mechanism for superluminal tunnelling*, Nature **424**, 638 (2003).
- [59] S. Mizuno y S. Tamura, *Theory of acoustic-phonon transmission in finite-size superlattice systems*, Phys. Rev. **B 45**, 734 (1992).
- [60] S. Mizuno y S. Tamura, *Transmission and reflection times of phonon packets propagating through superlattices*, Phys. Rev. **B 50**, 7708 (1994).
- [61] K. Imamura, Y. Tanaka, S. Mizuno y S Tamura, *Phonon-packet propagation through solidliquid interfaces: resonant effects in the presence of a superlattice* J. Phys.:Condens. Matter **12**, 9843 (2000).
- [62] K. Imamura, Y. Tanaka, y S. Tamura, *Group velocities of phonons in superlattices*, Phys. Rev. **B 65**, 174301 (2002).
- [63] S. Mizuno, *Resonance and mode conversion of phonons scattered by superlattices with inhomogeneity*, Phys. Rev. **B 68**, 193305 (2003).
- [64] E. U. Condon, *Quantum mechanics of collision processes*, Rev. Mod. Phys. **3**, 43 (1931).
- [65] L. A. MacColl, *Note on the transmission and reflection of wave packets by potential barriers*, Phys. Rev. **40**, 621 (1932).
- [66] J. G. Muga, R. S. Mayato, y I. L. Egusquiza, *Time in Quantum Mechanics* (Springer-Verlag, Heidelberg, Germany, 2001).

- [67] V.S. Olkhovsky, E. Recami, J. Jakiel, Unified time analysis of photon and particle tunneling, *Phys. Rep.* **398** (2004) 133.
- [68] V. S. Olkhovsky, *Time as a Quantum Observable, Canonically Conjugated to Energy, and Foundations of Self-Consistent Time Analysis of Quantum Processes*, *Advances in Mathematical Physics* **2009**,1 (Hindawi Publishing Corporation 2008)
- [69] D. Bohm, *Quantum Theory*, (Prentice-Hall, New York, 1952).
- [70] E. Wigner, *Lower limit for the energy derivative of the scattering phase shift*, *Phys. Rev.* **98**,145 (1955).
- [71] E. H. Hauge, J. P. Falck, y T. A. Fjeldly, *Transmission and reflection times for scattering of wave packets off tunneling barriers*, *Phys. Rev. B*, **36**, 4203 (1987).
- [72] R. Landauer y Th. Martin, *Time delay in wave packet tunneling*, *Solid State Commun.* **84**, 115 (1992).
- [73] V. S. Olkhovsky y E. Recami, *Recent developments in the time analysis of tunnelling processes*, *Phys. Rep.* **214**,339 (1992).
- [74] R. Landauer y Th. Martin, *Barrier interaction time in tunneling*, *Rev. of Mod. Phys* **66**, 217 (1994).
- [75] J. P. Falck y E. H. Hauge, *Larmor clock reexamined*, *Phys. Rev. B* **38**, 3287 (1988).
- [76] F. T. Smith, *Lifetime matrix in collision theory*, *Phys. Rev.* **118**, 349 (1960).
- [77] C. R. Leavens y G.C. Aers, *Dwell time and phases times for transmission and reflection*, *Phys. Rev. B* **39**, 1202 (1989).
- [78] H. G. Winful, M. Ngom, y N. M. Litchinitser, *Relation between quantum tunneling times for relativistic particles*, *Phys. Rev. A* **70**, 052112 (2004).
- [79] S. Brouard, R. Sala Mayato, y J.G. Muga, *Systematic approach to define and classify*

- quantum transmission and reflection times*, Phys. Rev. A **49**, (1994).
- [80] V. Delgado, y J.G. Muga, *Are anomalously short tunneling times measurable?*, Ann. Phys. (N.Y.) **248**,122 (1996).
- [81] C. Trallero-Giner, F. García-Moliner, V. R. Velasco, y M. Cardona, *Analysis of the phenomenological models for long-wavelength polar optical modes in semiconductor layered systems*, Phys. Rev. **B 45**, 11944 (1992).
- [82] C. Trallero-Giner, R. Pérez-Álvarez, y F. Garcia-Moliner, *Long wave polar modes in semiconductor heterostructures*, (Pergamon/Elsevier Science, London, 1998).
- [83] A. Fasolino, E. Molinari, y K. Kunc, *Plane force-constant method for lattice dynamics of superstructures*, Phys. Rev. **B 41**, 8302 (1990).
- [84] B. Jusserand y M. Cardona, *Raman spectroscopy of vibrations in superlattices*, en *Light Scattering in Solids*, editado por M. Cardona y G. Guntherodt (Springer-Verlag, Heidelberg, 1989).
- [85] F. de León-Pérez y R. Pérez-Álvarez, *Long-wavelength nonpolar optical modes in semiconductor heterostructures: Continuum phenomenological model*, Phys. Rev. **B 61**, 4820 (2000).
- [86] F. de León-Pérez y R. Pérez-Álvarez, *Phonon propagation in nonpolar semiconductor heterostructures*, Phys. Rev. **B 63**, 245304 (2001).
- [87] D. Villegas, F. de León-Pérez y R. Pérez-Álvarez, *Tunneling time of long-wavelength phonons through semiconductor heterostructures*, Phys. Rev. **B 71**, 035322 (2005).
- [88] D. Villegas, F. de León-Pérez y R. Pérez-Álvarez, no publicado, *Does the generalized Hartman effect exist in the phonon tunneling?* phonon double barrier, (2010), no publicado.
- [89] D. Villegas, F. de León-Pérez y R. Pérez-Álvarez, *Tunneling time for phonons: de-*

- pendence on the systems size*, Phys. Status Solidi B **242**, 1767 (2005).
- [90] P. Pereyra, *Closed Formulas for Tunneling Time in Superlattices*, Phys. Rev. Lett. **84**, 1772 (2000).
- [91] R. Tsu y L. Esaki, *Tunneling in a finite superlattice*, Appl. Phys. Lett. **22**, 562 (1973).
- [92] L. L. Chang, L. Esaki, y R. Tsu, *Resonant Tunneling in Semiconductor Double Barriers*, Appl. Phys. Lett. **24**, 593 (1974).
- [93] H. Yamamoto, *Resonant Tunneling Condition in a Symmetrical One-Dimensional Rectangular Double-Barrier System*, Appl. Phys. **A 42**, 245 (1987).
- [94] H. Yamamoto, Y. Kanie, M. Arakawa, y K. Taniguchi, *Theoretical Study of Resonant Tunneling in Rectangular Double-, Triple-, Quadruple-, and Quintuple-Barrier Structures*, Appl. Phys. **A 50**, 577 (1990).
- [95] H. Yamamoto, Y. Senshu, K. Miyamoto y S. Tanaka, *Resonance Conditions in Asymmetrical Rectangular Double -Barrier Structures under DC Bias Field*, Phys. Stat. Sol. (b) **206**, 601 (1998).
- [96] H. Yamamoto, K. Miyamoto, y T. Hayashi, *Analytical Expression for the Tunneling Time in Symmetrical Rectangular Double-Barrier Structures*, Phys. Stat. Sol. (b) **209**, 305 (1998).
- [97] A. Galindo y P. Pascual, *Quantum Mechanics I*, (Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1990).
- [98] V. S. Olkhovsky, E. Recami, y A. K. Zaichenko, *Resonant and non-resonant tunneling through a double barrier*, Europhys. Lett. **70** (6), 712 (2005).
- [99] H. Xu, M. Zhu y B. Hou, *Analytical expressions for resonant-tunneling lifetime in symmetrical double-barrier structures*, Phys. Lett. **A 223**, 227 (1996).

-
- [100] H. Xu y B. Y. Okada, *Analytical calculation of the resonant quasi-level lifetime in double-barrier quantum structures*, Physica **B 305**,113 (2001).
- [101] D. Villegas, F. de León-Pérez y R. Pérez-Álvarez, *Longwave Phonon Tunnelling Using an Impedance Concept*, PIERS on line. **4**, 227 (2008).
- [102] A. N. Khondker, *Transmission line analogy of resonance tunneling phenomena: The generalized impedance concept*, J. Appl. Phys. **63**63, 5191 (1988).
- [103] D. Villegas, F. de León-Pérez y R. Pérez-Álvarez, *Gaussian superlattice for phonons*, Microelectronics Journal **36**, 411 (2005).
- [104] F. Schaffler, *Properties of Advanced Semiconductor Materials GaN, AlN, InN, BN, SiC, SiGe*, (Wiley, New York, 2001)