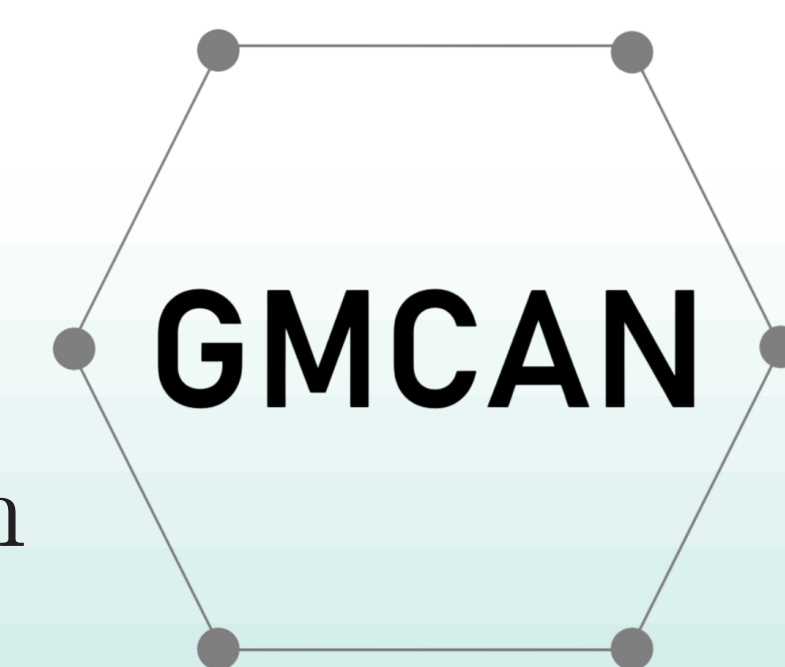


Estudio teórico de la influencia de la forma geométrica de la barrera de potencial triangular sobre el coeficiente de transmisión



Cesar V. Galindo R.^{1,2}, Percy S. Herrera M.¹, Johan M. Calla S.^{1,2}, Jhover H. Zanabria. M.^{1,2}, Brayan A. Quispe O.¹, Sergio J. Zarate P.¹, Robert M. Espinoza-Bernardo^{1,2}

¹ Universidad Nacional Mayor de San Marcos (UNMSM)

² Grupo de Métodos Computacionales Aplicado a Nanomateriales (GMCAN)

Introducción

La modelización del transporte en nanoestructuras exige tratar rigurosamente potenciales asimétricos unidimensionales. Este trabajo presenta una formulación analítica para barreras de potencial triangulares unidimensionales de geometría variable, utilizando el Método de la Matriz de Transferencia (TMM) mediante funciones de Airy exactas. Este enfoque simplifica el cálculo de la transmitancia $T(E, \eta)$ y revela cómo la deformación geométrica altera la transmitancia, superando las limitaciones de los modelos simétricos.

Metodología

Ecuación de Schrödinger (Tramo j):

$$\frac{d^2\psi}{dz^2} + \frac{2m}{\hbar^2}[E - V_j(x)]\psi = 0$$

Solución base: Ondas planas para $V(x)$ constante. Combinación lineal de funciones de Airy $\{u, v\}$ para $V(x)$ lineal.

$$\Psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & x < a \\ Cu(z_1) + Dv(z_1) & a \leq x \leq b \\ Fu(z_2) + Gv(z_2) & b \leq x \leq c \\ He^{ikx} + Ie^{-ikx} & x > c \end{cases}$$

Matriz de Transferencia. Imponiendo la continuidad de ψ y $\frac{d\psi}{dx}$ en cada interfaz, la matriz que relaciona las amplitudes izquierda/derecha para incidencia desde la izquierda ($A = 1$):

$$\begin{pmatrix} 1 \\ r \end{pmatrix} = \Gamma(a^-, c^+) \begin{pmatrix} t \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\Gamma = M_1^{-1} M_2 M_3^{-1} M_4 M_5^{-1} M_6$$

Definimos los operadores y coeficientes de interfaz para sistematizar la forma exacta de la matriz:

Operadores de Frontera (\hat{O}) (Evaluación en a)

$$\hat{O}_a^\pm = ik \pm \alpha_1 \partial_{z_1}|_a$$

Coefficientes de Interfaz (Π) (Evaluación en b y c)

$$\Pi_u = h_1 u|_b + h_2 u'|_b + h_3 u|_c + h_4 u'|_c$$

$$\Pi_v = l_1 v|_b + l_2 v'|_b + l_3 v|_c + l_4 v'|_c$$

$$\tilde{\Pi}_u = h_1^* u|_b + h_2^* u'|_b - h_3 u|_c + h_4 u'|_c$$

$$\tilde{\Pi}_v = l_1^* v|_b + l_2^* v'|_b - l_3 v|_c + l_4 v'|_c$$

Configuración Estructural

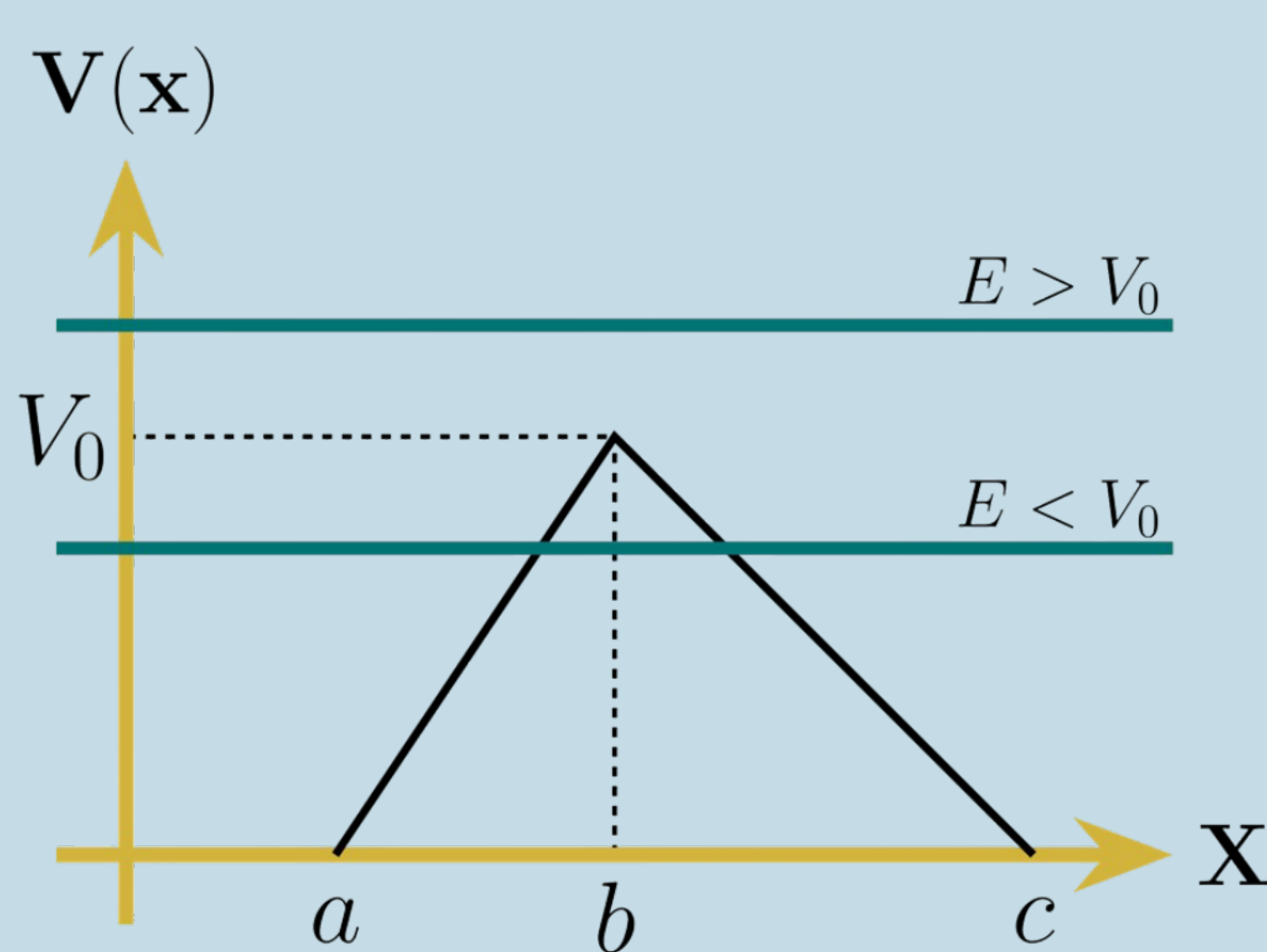


Figura 1: Potencial triangular con perfil asimétrico. $c - a$: longitud de barrera; η : parámetro de asimetría.

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x \leq a \\ \frac{V_0}{b-a}(x-a) & a \leq x \leq b \\ -\frac{V_0}{c-b}(x-c) & b \leq x \leq c \\ 0 & x \geq c \end{cases}, \quad \eta = \frac{c-b}{b-a}$$

Agradecimientos

Esta investigación fue financiada por la Universidad Nacional Mayor de San Marcos. Los autores C.V.G.R., J.M.C.S., J.H.Z.M. y R.M.E.B. agradecen al proyecto de investigación básica B25131971 (RR N° 005446-2025-R/UNMSM). Asimismo, C.V.G.R., J.M.C.S., J.H.Z.M., B.A.Q.O., S.J.J.Z.P., P.S.H.M. y R.M.E.B. reconocen el apoyo del proyecto B2513016V (RR N° 004814-2025-R/UNMSM).

Matriz de Transferencia y Coeficientes de Transporte

La conexión entrada-salida está determinada por la matriz de transferencia:

$$\Gamma(a^-, c^+) = \mathcal{K} \begin{pmatrix} e^{ik(c-a)} [(\hat{O}^+u)\Pi_u + (\hat{O}^+v)\Pi_v] & e^{-ik(a+c)} [(\hat{O}^+u)\tilde{\Pi}_u + (\hat{O}^+v)\tilde{\Pi}_v] \\ e^{ik(c+a)} [(\hat{O}^-u)\Pi_u + (\hat{O}^-v)\Pi_v] & e^{ik(a-c)} [(\hat{O}^-u)\tilde{\Pi}_u + (\hat{O}^-v)\tilde{\Pi}_v] \end{pmatrix}$$

Con constante de normalización $\mathcal{K} = \frac{\pi^2}{2ik\alpha_1\alpha_2}$.

A partir de los elementos de la matriz de transferencia (Γ_{11}, Γ_{21}), se definen los coeficientes de transmisión y reflexión:

$$T(E, \eta) = \left| \frac{1}{\Gamma_{11}} \right|^2 = \left| \frac{2k\alpha_1\alpha_2}{\pi^2 [(\hat{O}^+u) \cdot \Pi_u + (\hat{O}^+v) \cdot \Pi_v]} \right|^2$$

$$R(E, \eta) = \left| \frac{\Gamma_{21}}{\Gamma_{11}} \right|^2 = \left| \frac{(\hat{O}^-u) \cdot \Pi_u + (\hat{O}^-v) \cdot \Pi_v}{(\hat{O}^+u) \cdot \Pi_u + (\hat{O}^+v) \cdot \Pi_v} \right|^2$$

Resultados

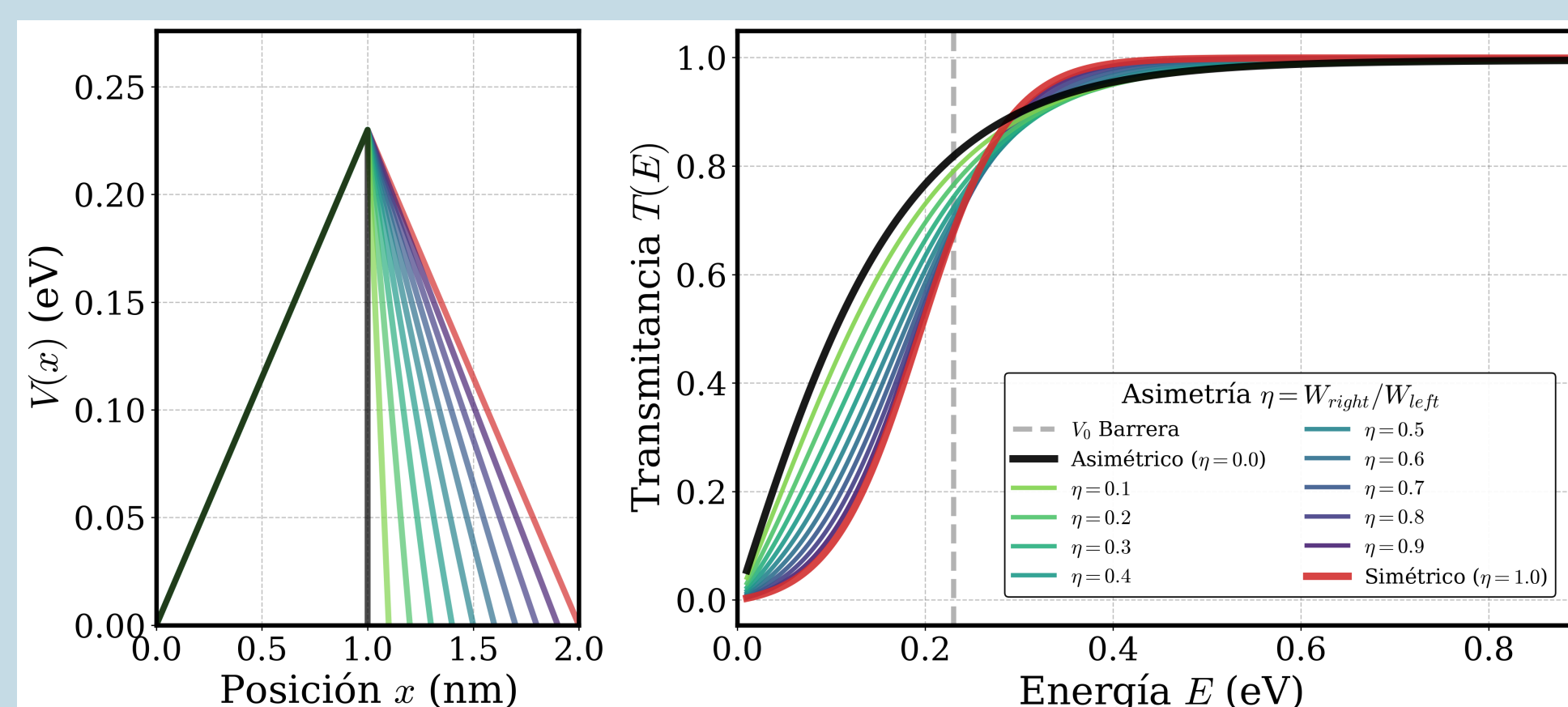


Figura 2: Perfiles de potencial de altura fija ($V_0 = 0,23$ eV) variando la asimetría η , junto a sus espectros de transmisión $T(E)$.

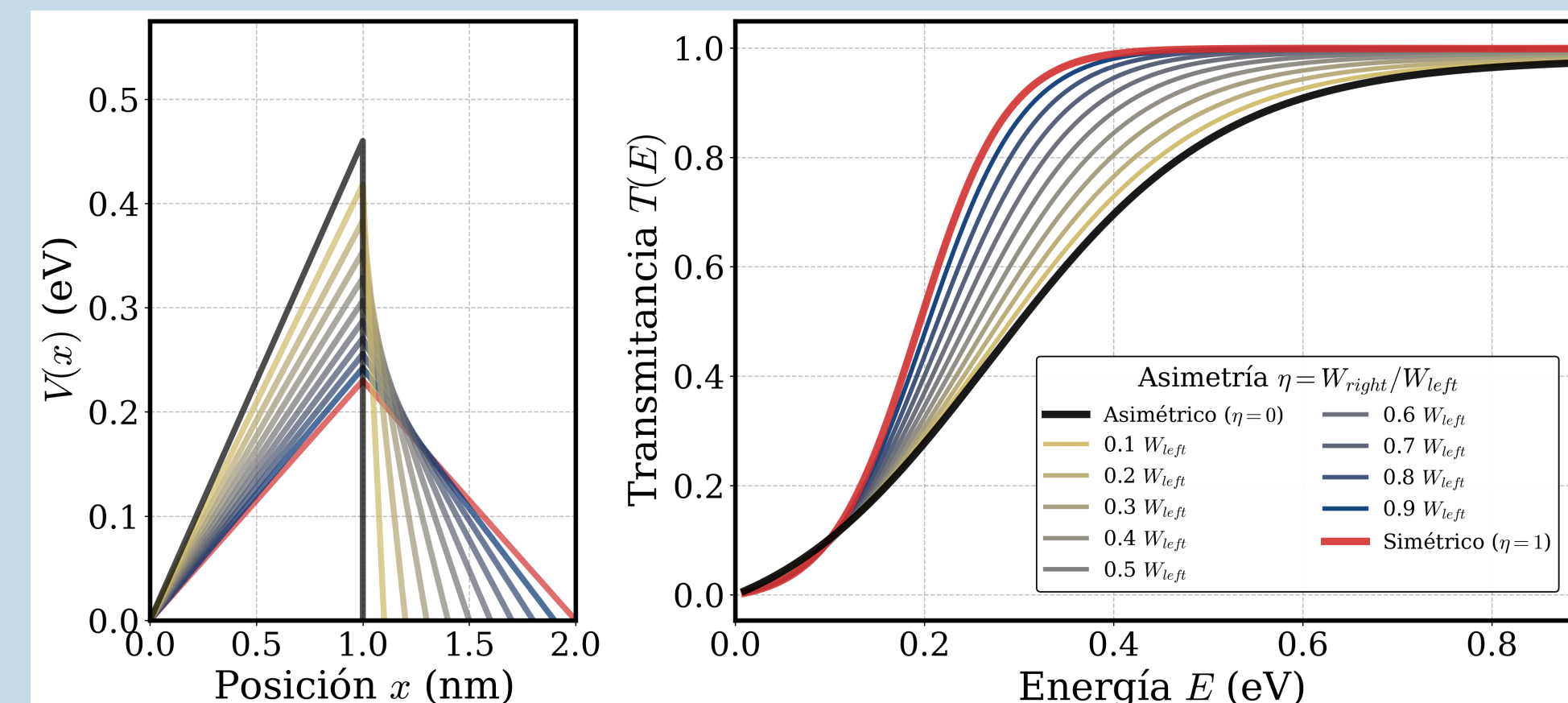


Figura 3: Perfiles de potencial de área constante (V variable) variando la asimetría η , junto a sus espectros de transmisión $T(E)$.

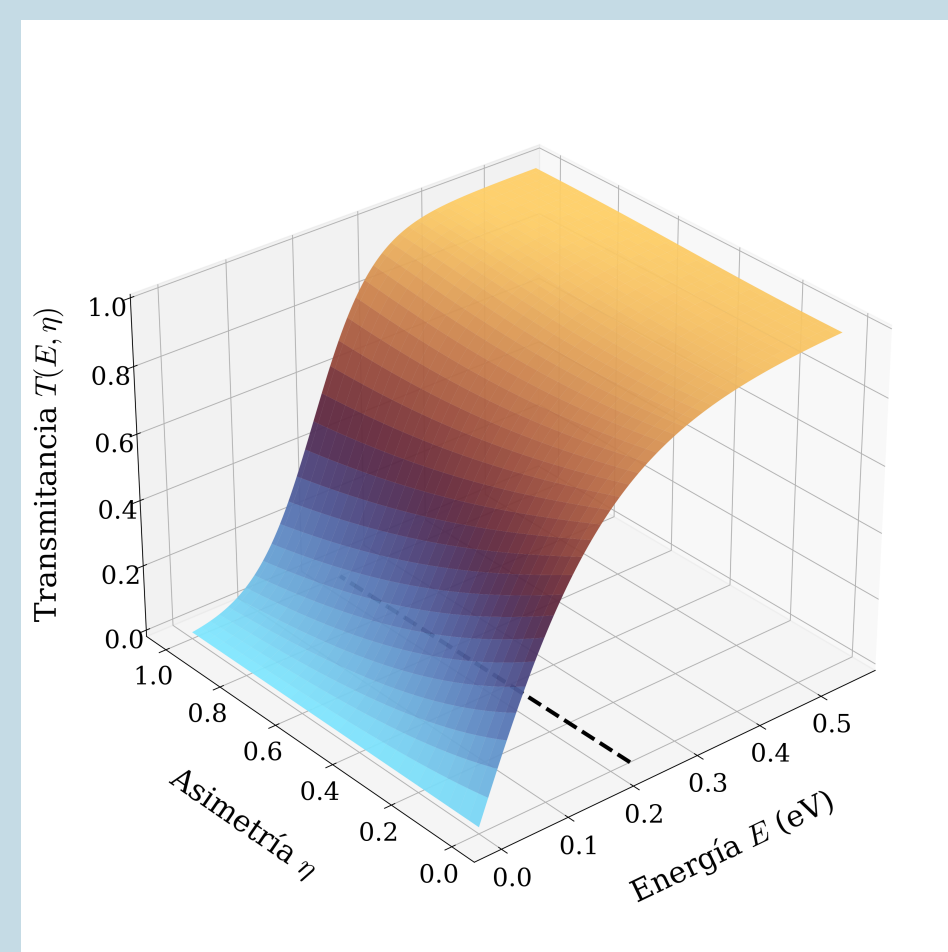


Figura 4: Superficie de Transmisión Cuántica de transmisión $T(E, \eta)$ en el plano energía-asimetría; la línea punteada indica la altura máxima del potencial ($V_{left} = 1,0$ nm) y altura $V_0 = 0,23$ eV.

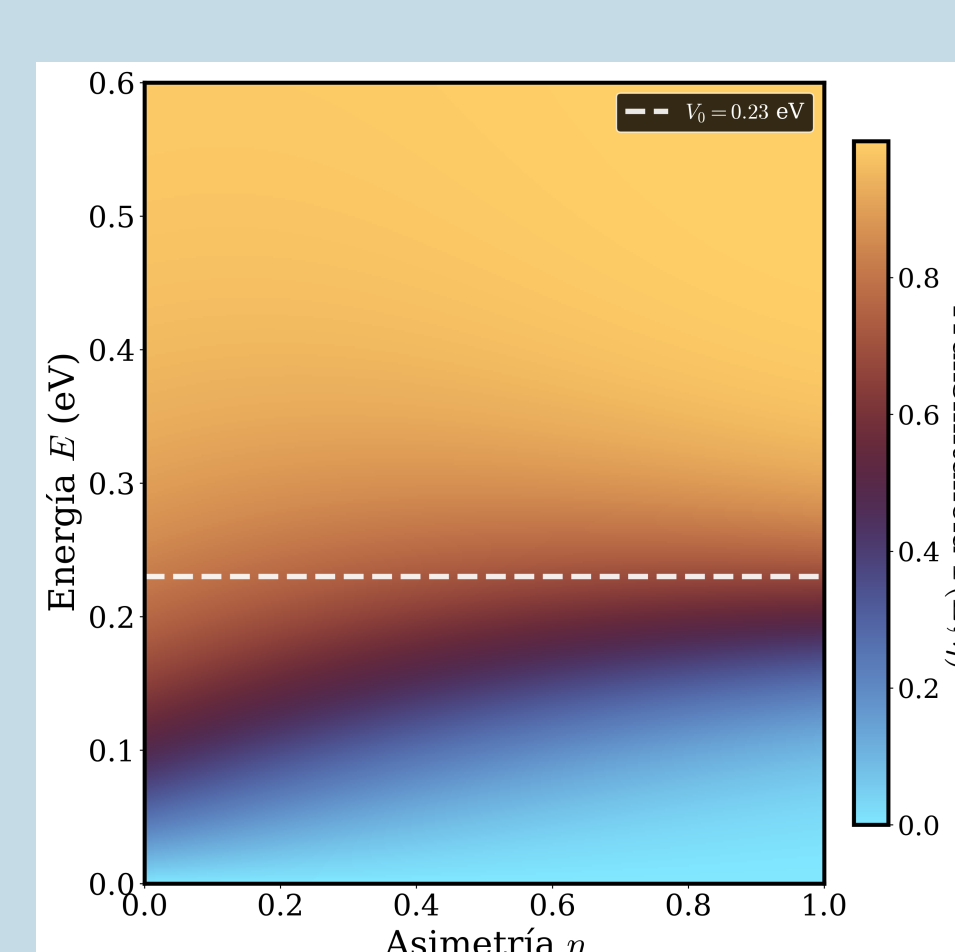


Figura 5: Mapa de fase de transmisión $T(E, \eta)$ en el plano energía-asimetría; la línea punteada indica la altura máxima del potencial ($V_{left} = 1,0$ nm) y altura $V_0 = 0,23$ eV.

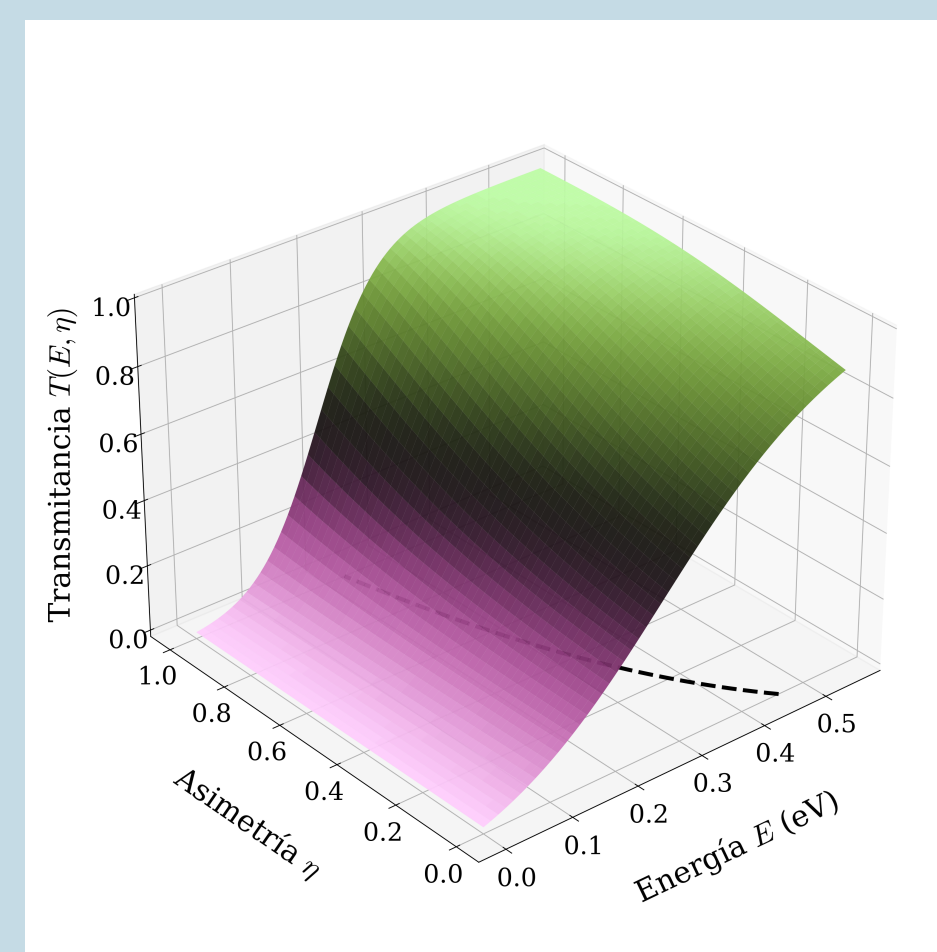


Figura 6: Superficie de transmisión cuántica $T(E, \eta)$ para barrera triangular con ancho fijo ($W_{left} = 1,0$ nm) y altura $V(\eta)$, conservando área.

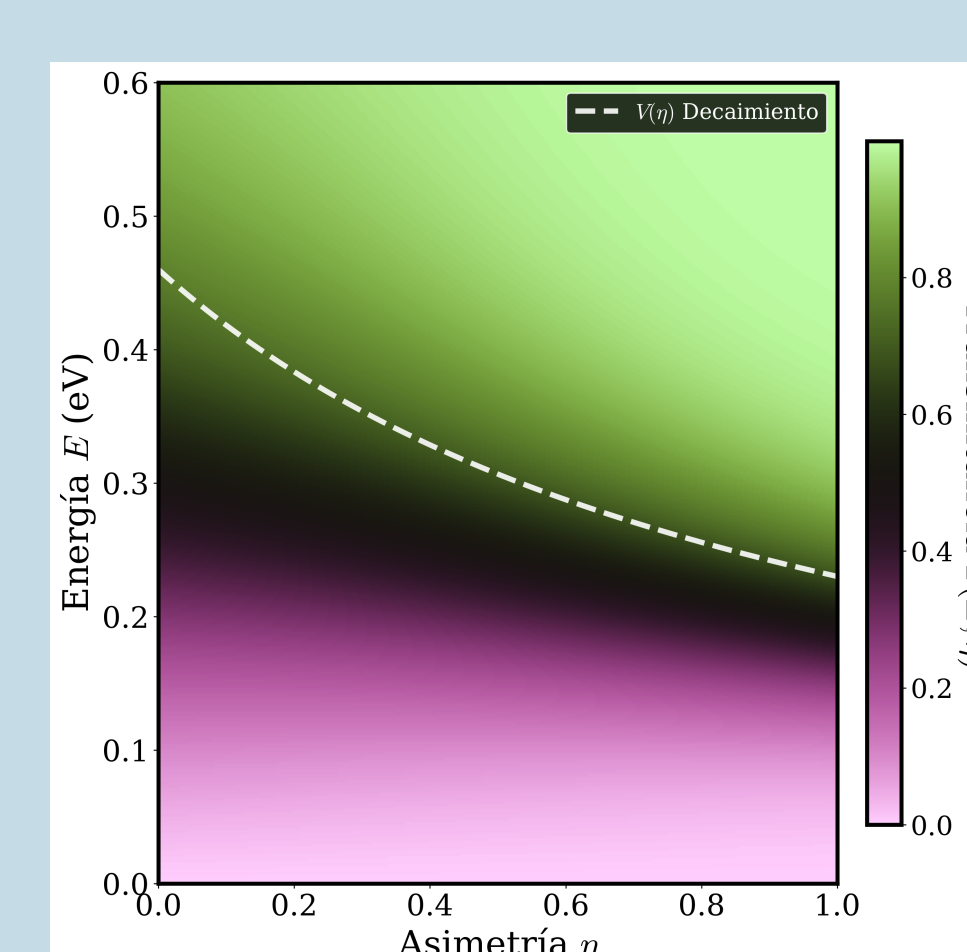


Figura 7: Mapa de fase de transmisión $T(E, \eta)$ en el plano energía-asimetría para área constante; la línea punteada indica el decaimiento de la altura del potencial $V(\eta)$.

Conclusiones

- Potencial de altura fija:** La asimetría favorece el efecto túnel al reducir el ancho efectivo de la barrera. Se observa una mayor transmitancia a medida que $\eta \rightarrow 0$, permitiendo el flujo de corriente a menores energías.
- Potencial de área constante:** La asimetría perjudica la transmisión. Para conservar el área, una mayor asimetría obliga a un aumento en la altura del potencial, lo cual suprime exponencialmente la probabilidad de tunelaje.
- Conclusión general:** El efecto túnel en barreras triangulares es gobernado principalmente por la altura del potencial (V) sobre el ancho (W_{total}). La configuración simétrica es óptima cuando existen restricciones energéticas (área constante), mientras que la asimetría es ventajosa si la altura está acotada externamente.

Referencias

- [1] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. Laloë, *Quantum Mechanics, Vol. 1*. New York: Wiley, 2019.
- [2] R. Lefebvre, *Scattering by a Triangular Barrier*, Int. J. Quantum Chem., vol. 107, pp. 2643–2649, 2007.
- [3] P. Pereyra, *Fundamentals of Quantum Physics: Textbook for Students of Science and Engineering*. Springer, 2012.
- [4] O. Vallée and M. Soares, *Airy Functions and Applications to Physics*. London: Imperial College Press, 2004.