

ANEXO: Modelos *tight-binding*

En este Anexo explicaremos sucintamente en qué se basan los modelos de *tight-binding* para las simulaciones numéricas que han corroborado los resultados teóricos expuestos a lo largo de este trabajo.

Estudiaremos un caso unidimensional para verlo de modo sencillo: un electrón en el eje x frente a una barrera de potencial $V(x)$. Nuestro objetivo es resolver la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo

$$H\psi(x) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \psi = E\psi. \quad (1)$$

Nos interesa discretizar esta ecuación para poder realizar cálculos numéricos. De este modo, el potencial $V(x)$ se divide en N secciones tal y como se ilustra en la Figura 1.

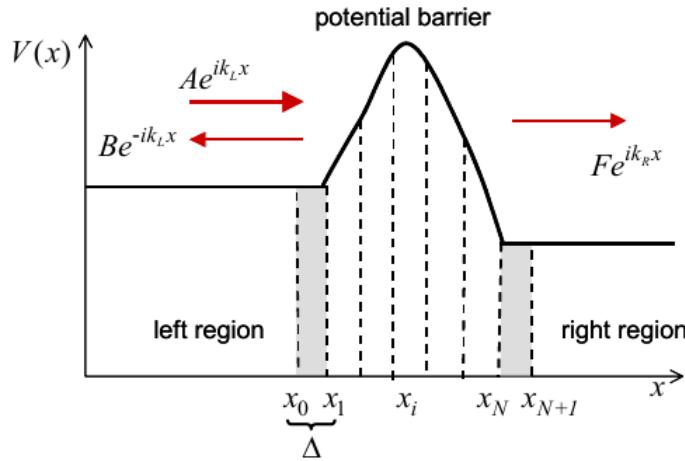


Figura 1: Barrera de potencial $V(x)$ discretizada en N puntos. A los lados de la barrera el electrón no sufre interacciones, por lo que tiene una función de onda libre.

La energía cinética y la función de ondas ψ tienen que ser discretizadas también. Para $x_0 \leq x \leq x_{N+1}$ tomamos la función de onda como un vector de $N + 2$ componentes $\vec{\psi}$, de manera que cada una de ellas es la propia función de ondas definida en el punto correspondiente. Considerando una separación Δ entre los puntos entre x_0 y x_N y recordando la definición de derivada como límite, la ecuación de Schrödinger discretizada es

$$E\psi_i - \frac{\hbar^2}{2m\Delta^2}(\psi_{i+1} - 2\psi_i + \psi_{i-1}) - V_i\psi_i = 0 \quad \text{para } 1 \leq i \leq N, \quad (2)$$

con ψ_i la función de ondas evaluada en el punto i -ésimo de la zona discretizada. A este sistema de ecuaciones 2 hemos de imponerle la continuidad de la función de ondas en los puntos 1 y N con la función de onda libre a cada lado de la barrera. Si tenemos esto en cuenta, la ecuación de Schrödinger (2) puede reescribirse en forma matricial como

$$(E\mathbb{I} - H')\vec{\psi} = \vec{q}, \quad (3)$$

de modo que \vec{q} es un vector de $N + 2$ componentes cuyas entradas son todas cero a excepción de la primera, que es $q_0 = \hbar^2 A \sinh k\Delta / (4im\Delta^2)$, con A la amplitud de la función de onda incidente por la izquierda. Este

término surge de la continuidad de la función de ondas en los extremos de la barrera. Algo similar ocurre con la definición del hamiltoniano H' (diferente a H), cuyos elementos son (nombrando $t = \hbar^2/2m\Delta^2$)

$$H'_{i,i+1} = H'_{i,i-1} = -t \quad H'_{i,i} = -2t + V_i \quad H'_{0,0} = -2t + V_0 + \Sigma_L(E) \quad H'_{N+1,N+1} = -2t + V_{N+1} + \Sigma_R(E), \quad (4)$$

con $\Sigma_{L,R}(E) = -t \exp(ik_{L,R}\Delta)$, donde k_L (k_R) es el módulo del vector de onda a la izquierda (derecha). Estos términos son las llamadas autoenergías y surgen de la continuidad de la función de ondas en los extremos de la barrera. La matriz que se obtiene sólo tiene elementos en la diagonal y en los elementos adyacentes a estos:

$$H' = \begin{pmatrix} \dots & -t & 0 & 0 & 0 \\ -t & V_{i-1} + 2t & -t & 0 & 0 \\ 0 & -t & V_i + 2t & -t & 0 \\ 0 & 0 & -t & V_{i+1} + 2t & -t \\ 0 & 0 & 0 & -t & \dots \end{pmatrix}. \quad (5)$$

La ventaja de esta formulación es que permite una resolución fácil de tratar numéricamente si trabajamos con **funciones de Green**. Hagamos un pequeño paréntesis para explicar qué son y por qué resultan de utilidad. Si volvemos a la ecuación de Schrödinger sin discretizar (1) y, para un cierto potencial $V(x)$

$$(E - H_0)\psi(x) = V(x)\psi, \quad (6)$$

con H_0 la energía cinética. Si recordamos las funciones de onda libres $\phi_s(x; E)$ (??), con $s = \pm$, estas verifican que

$$(E - H_0)\psi_s(E; x) = 0. \quad (7)$$

Así, las funciones de onda $\psi_s(E; x)$ son las funciones solución a la ecuación diferencial homogénea que se extrae de (6) (o sea, la ecuación que resulta al poner un potencial nulo). De acuerdo con la teoría de ecuaciones diferenciales, la solución a (6) estará dada la solución general de la ecuación homogénea (es decir, la función $\psi_s(E; x)$, con s según corresponda) más una solución particular de la propia ecuación (6).

Para obtener una solución particular de (6) usaremos las funciones de green $G_0^{(\pm)}(x, x')$, definidas como aquellas que verifican que

$$(E - H_0)G_0^{(\pm)}(x, x') = \delta(x - x'). \quad (8)$$

Los superíndices $+$ y $-$ indican si la función de ondas es incidente por la izquierda o la derecha. Si consideramos que, de acuerdo a la solución de (7), $E = \frac{\hbar^2}{2m}$, haciendo el álgebra correspondiente y llamando $g_0^{(\pm)}(x, x') = \frac{\hbar^2}{2m}G_0^{(\pm)}(x, x')$, la ecuación (8) se reescribe como

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + k^2 \right) g_0^{(\pm)}(x, x') = \delta(x - x'), \quad (9)$$

donde hemos expresado la energía cinética como $H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$. Podemos reescribir (6) considerando el mismo reescalado que hemos tomado para llegar hasta (9). Llamando $U(x) = 2mV(x)/\hbar^2$, (6) se reescribe como

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + k^2 \right) \psi(x) = U(x)\psi(x). \quad (10)$$

Escrita de esta manera es fácil comprobar la siguiente solución particular de la ecuación (10):

$$\int_{-\infty}^{+\infty} g_0^{(\pm)}(x, x') U(x') \psi_s^{(\pm)}(E; x') dx', \quad (11)$$

siendo $\psi_s^{(\pm)}(E; x)$ la solución general de la ecuación (10), que expresamos como

$$\psi_s^{(\pm)}(E; x) = \psi_s(E; x) + \int_{-\infty}^{+\infty} g_0^{(\pm)} U(x') \psi_s^{(\pm)}(E; x') dx', \quad (12)$$

que, como vemos, viene gobernada por una ecuación integral.

Conocer las funciones de Green g_0 significa por lo tanto resolver el problema. En el tratamiento de discretización y lenguaje matricial que proporciona el modelo *tight-binding* nos permite expresar la función de green como una matriz $\tilde{G}(E)$ que estará dada por

$$G(E) = (E\mathbb{I} - H')^{-1}. \quad (13)$$

Dada la forma de H' (5) este es un problema que puede resolverse numéricamente con relativa facilidad. Un desarrollo detallado de estas ecuaciones nos llevaría a la deducción de la siguiente expresión para el coeficiente de transmisión T en el sistema de la Figura 1

$$T = \frac{\hbar^2}{a^2} v_r v_L \tilde{G}_{N+1,0}(E) \tilde{G}_{N+1,0}^*(E), \quad (14)$$

con $v_{L,R} = -\frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k_{L,R}}$ las velocidades del electrón a cada lado de la barrera.

Así pues, los modelos *tight-binding* permiten resolver nuestro sistema a través de la discretización del hamiltoniano: al obtener la matriz de green \tilde{G} obtenemos el coeficiente de transmisión T mediante (14) y, aplicando la fórmula de Landauer, podemos saber la conductancia del sistema que estudiamos.