

# Efectos de Superficie en la Difusión Cuántica

G. USAJ† Y H. M. PASTAWSKI\*

LANAIS DE R.M.N., F.A.M.A.F. (UNIVERSIDAD NACIONAL DE CÓRDOBA)  
CIUDAD UNIVERSITARIA- (5000) CÓRDOBA-ARGENTINA  
e-mail: usaj@famaf.fis.uncor.edu o horacio@famaf.fis.uncor.edu

La evolución cuántica de una excitación local se estudia mediante el propagador  $P(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)$ . En cercanías de una superficie (cadena semi-infinita) resulta  $P(\mathbf{r}_s, \mathbf{r}_s, t) \sim t^{-3}$ . Esta interferencia de 'antilocalización' en el sitio se manifiesta en una mayor tendencia a difundir que en los sitios interiores  $\mathbf{r}_i$ :  $\langle (\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}_i)^2 \rangle \rightarrow 3/2 \langle (\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}_j)^2 \rangle \sim t^2$ . Se discute la aplicación de este fenómeno en la propagación de excitaciones electrónicas en superredes y en la difusión de espines nucleares en moléculas lineales.

Quantum evolution of a local excitation is studied with the propagator  $P(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)$ . Close to a surface (semi-infinite chain) it results  $P(\mathbf{r}_s, \mathbf{r}_s, t) \sim t^{-3}$ . This 'antilocalization' interference in the site shows up in a stronger tendency to diffuse than in bulk sites  $\mathbf{r}_i$ :  $\langle (\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}_i)^2 \rangle \rightarrow 3/2 \langle (\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}_j)^2 \rangle \sim t^2$ . We discuss this effect in the context of electronic excitations in superlattices and nuclear spin diffusion in linear molecules.

## Introducción

A partir de las predicciones teóricas<sup>1</sup> de oscilaciones de Aharonov-Bohm en la conductancia en cilindros, otros sistemas mesoscópicos han mostrado interferencias cuánticas<sup>2</sup> en los parámetros de transporte del estado estacionario. En los últimos años, el gran desarrollo de técnicas espectroscópicas con resolución temporal (laser, R.M.N., etc.), estimuló el interés<sup>3-5</sup> por el estudio de fenómenos dinámicos. Nuestro interés está orientado a la predicción y caracterización de ecos dinámicos en magnitudes observables como la magnetización local de espines nucleares en una molécula<sup>6</sup>, la corriente eléctrica<sup>3</sup> en microdispositivos, etc. Estos ecos dan información sobre los parámetros dinámicos del sistema y podrían ser de gran interés tanto tecnológico como básico.

La magnitud física a estudiar es  $P(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1, t)$ , la probabilidad de encontrar una excitación en  $\mathbf{r}_2$  al tiempo  $t$  si en  $t=0$  esta se encontraba en  $\mathbf{r}_1$ . Esta magnitud se encuentra íntimamente relacionada con la 'constante' de difusión  $D$  que, en presencia de interacciones incoherentes caracterizadas por un tiempo  $\tau_0$ , gobierna la respuesta lineal<sup>7</sup> del sistema (por ej. la

conductividad  $\sigma = e^2 N_0 D$ ). Un caso particular es la función de espera  $p(\mathbf{r}, t) = P(\mathbf{r}, \mathbf{r}, t)$  que da la probabilidad de volver a encontrar a la partícula en el punto inicial. Al considerar sistemas finitos esta función presenta oscilaciones<sup>8</sup> donde es posible distinguir el ciclo de Poincaré  $T$  siempre que  $T \ll \tau_0$ . En un sistema unidimensional muy grande (infinito) con una excitación interior, es posible distinguir dos regímenes. Cuando se consideran tiempos menores que el tiempo entre colisiones incoherentes  $t \ll \tau_0$ , se encuentra que la función de espera tiene un comportamiento balístico con  $p(\mathbf{r}, t) \sim t^{-1}$ , asociado con la *difusión cuántica*. Este contrasta con el comportamiento de tiempos largos  $t \gg \tau_0$  donde se obtiene un resultado de difusión clásica  $p(\mathbf{r}, t) \sim t^{-1/2}$ .

Al considerar el efecto de la superficie<sup>1</sup> en un cálculo de difusión clásica, es usual requerir la condición de contorno de corriente nula:  $\nabla P(\mathbf{r}, \mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{n} = 0$ ,  $\mathbf{r} \in S$  y  $\mathbf{n}$  es la normal a la superficie con lo que la solución no trivial requiere que  $P(\mathbf{r}, \mathbf{r}, t) \neq 0$ . Sin embargo, esta condición macroscópica aparece en contradicción con la condición microscópica satisfecha por los autoestados  $\alpha$  del sistema  $\varphi_\alpha(\mathbf{r}) = 0$ ,  $\mathbf{r} \in S$ . Entonces es natural preguntarse cómo es la evolución cuántica de una excitación cerca de la

† Becario CONICET

\* Investigador CONICET

superficie y si la relación entre difusión clásica en el seno y en la superficie se mantiene en el régimen cuántico. En este trabajo encontramos que, por efecto de las interferencias, se produce una 'difusión' mucho más rápida  $p(r_s, t) \sim t^{-3}$  donde  $r_s$  es un sitio cercano a la superficie.

## Modelo

El hamiltoniano usado corresponde a una cadena unidimensional:

$$H = \sum_{n=n_0}^{\infty} E_n |n\rangle\langle n| + V_{n,n+1} |n\rangle\langle n+1| + V_{n+1,n} |n+1\rangle\langle n|,$$

donde  $|n\rangle$  es el  $n$ -ésimo estado localizado centrado en  $r_n = n b$ . Este estado podría un estado localizado en un pozo dentro de una superred (fig.1). Por simplicidad hemos tomado  $E_n = E_0$  y  $V_{n,n+1} = V_{n+1,n} = V, \forall n$ .

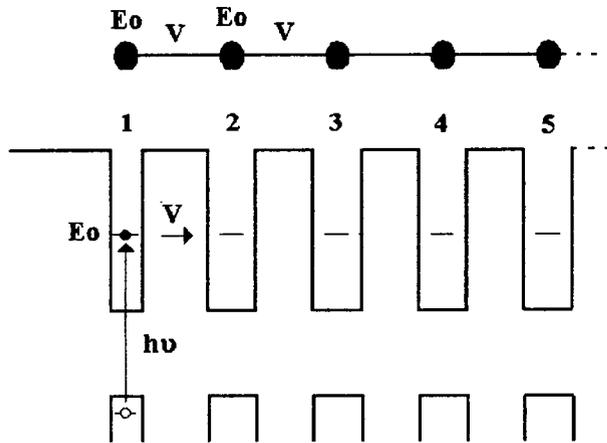


Figura 1: Representación del Hamiltoniano modelo. Esquema de la superred GaAs-AlGaAs propuesta para medir la función de espera. Nótese que la energía de ligadura del excitón es compensada con un menor tamaño del pozo.

Si escribimos el estado del sistema al tiempo  $t$  como

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n=n_0}^{\infty} a_n(t) |n\rangle$$

y utilizamos la ecuación de Schrödinger, obtenemos las siguientes ecuaciones para los coeficientes  $a_n(t)$ :

$$i\hbar \frac{\partial a_n}{\partial t} = V(a_{n+1} + a_{n-1}) + E_0 a_n \quad n \geq n_0 + 1$$

$$i\hbar \frac{\partial a_{n_0}}{\partial t} = V a_{n_0+1} + E_0 a_{n_0}$$

Dada la condición inicial  $a_n(0) = \delta_{n,m}$  esta ecuación puede resolverse exactamente y simplemente resulta  $P(r_n, r_m, t) = |a_n(t)|^2$ . Los cálculos fueron desarrollados simultáneamente utilizando funciones de Green dentro del formalismo de Keldysh en acuerdo con trabajos anteriores<sup>3,6</sup>.

## Cadena infinita

En este caso  $n_0 = -\infty$  y así obtenemos  $P(r_n, r_m, t) = J_{|n-m|}^2(2Vt/\hbar)$  donde  $J_n(x)$  es la función de Bessel de 1<sup>era</sup> especie y orden  $n$ . Puede observarse que el comportamiento asintótico resulta ser

$$P(r_n, t) = J_0^2(2Vt/\hbar) \rightarrow \frac{\hbar}{\pi Vt}$$

y la variación de la desviación cuadrática media debida a la difusión cuántica

$$\frac{\langle (r_n - r_m)^2 \rangle}{b^2} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} n^2 J_n^2(2Vt/\hbar) = \frac{1}{2} \left( \frac{2Vt}{\hbar} \right)^2$$

## Superficie

Para este caso trabajamos con una cadena semi-infinita, es decir  $n_0 = 1$  y por lo tanto

$$P(r_n, r_m, t) = |J_{|n-m|}(2Vt/\hbar) - i^{-|n+m|+n-m} J_{|n+m|}(2Vt/\hbar)|^2$$

Si la excitación se encuentra inicialmente en la superficie,  $m = 1$ , el comportamiento asintótico resulta ser:

$$P(r_n, r_1, t) \rightarrow \frac{n^2}{\pi} \left( \frac{\hbar}{Vt} \right)^3, \quad \forall n.$$

Esta nueva ley de potencia sugiere una difusión más rápida y la magnitud que la representa es

$$\frac{\langle (r_n - r_1)^2 \rangle}{b^2} = f(2Vt/\hbar) \frac{1}{2} \left( \frac{2Vt}{\hbar} \right)^2,$$

donde la función  $f(2Vt/\hbar)$  permite comparar la dispersión de la excitación superficial con la del interior. Comparando  $f$  con 1 (fig.2) vemos que para tiempos cortos ( $t \ll \hbar/V$ )  $f(2Vt/\hbar) \sim 1/2$ , es decir la difusión en la superficie es dos veces

más lenta que en el seno. Esto es lo que uno esperaría obtener con una ecuación difusiva clásica o bien en el régimen  $\tau_0 \ll \hbar/V$ . Sin embargo esta similitud no se mantiene para tiempos largos, ya que en la difusión clásica  $f(2Vt/\hbar) \rightarrow 1$  (igual que en el interior) mientras que en el caso cuántico resulta  $f(2Vt/\hbar) > 1$  para  $t > 2.7 \hbar/V$  convergiendo a  $3/2$ . Es decir que la difusión en la superficie es más rápida que en el seno del material

$$\langle (r_n - r_1)^2 \rangle \sim \frac{3}{2} \langle (r_n - r_m)^2 \rangle \quad t \geq \frac{10\hbar}{V}$$

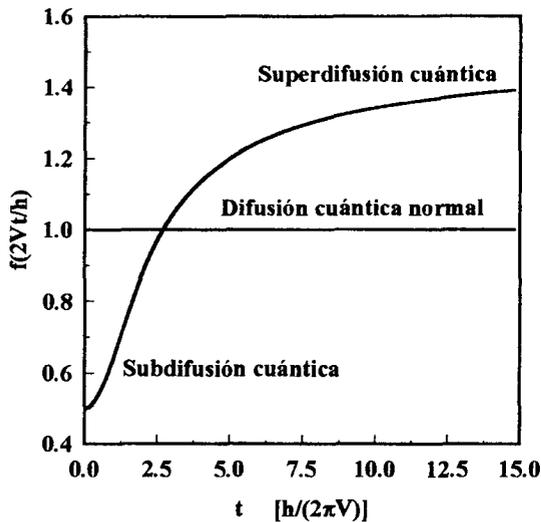


Figura 2: *Superdifusión en sistemas infinitos.* Evolución de la razón entre la dispersión cuadrática media en un sitio superficial y uno interior (difusión cuántica normal).

### Sistema finito

Para poder apreciar la estabilidad del fenómeno mostramos en la fig.3 la solución exacta para una cadena de 21 sitios. Vemos que cuando las reflexiones en los contornos no son importantes, todos los resultados discutidos continúan siendo válidos. Cabe notar el sorprendente efecto de la superficie en el decaimiento de la  $p(r,t)$ , que además de las oscilaciones correspondientes al salto entre vecinos cercanos, presenta ecos debidos a las reflexiones en las superficies. El tiempo característico para su aparición resulta lineal con la distancia recorrida por la excitación, manifestando su naturaleza mesoscópica. Estos

fenómenos están totalmente ausentes en la difusión clásica.

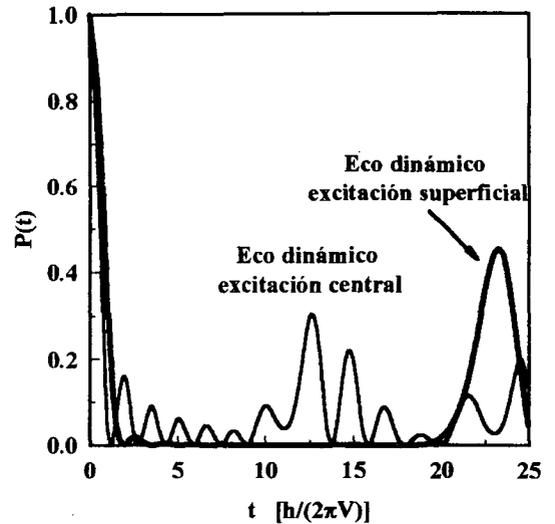


Figura 3: *Evolución cuántica de un sistema finito.* Función de espera en una cadena con 21 sitios para el sitio central (11) y el superficial (1). Para tiempos cortos aproximan las de la cadena infinita y semi-infinita. Ambas excitaciones presentan ecos (dinámicos). El de la excitación superficial duplica el retraso del eco en la excitación central.

### Conclusiones

Hemos demostrado que una excitación creada cerca de una superficie difunde hacia el interior mucho más rápido que una excitación en el seno, presentando una 'antilocalización'. Este fenómeno de interferencia no es estrictamente local ya que la ley de decaimiento es válida para todos los sitios. También es necesario notar que si bien en el sitio de la superficie el efecto es rápidamente apreciable (fig.3), en un proceso dependiente de la dispersión cuadrática media, cuantificada por  $f(2Vt/\hbar)$ , el tiempo necesario para llegar a la superdifusión es mayor (fig.2). Por lo tanto presentará superdifusión durante el tiempo de evolución cuántica 'libre'  $10\hbar/V \approx t < \tau_0$ . Para  $t > \tau_0$  hay difusión clásica<sup>7</sup> con una constante de difusión mayor que la del interior. Una forma cualitativa de explicar la interferencia tan marcada en la superficie es mirar los nodos de las autofunciones en el sistema finito impar. Una gran cantidad de estados presentan un nodo en el sitio central (o bien los sitios interiores tienen una mayor probabilidad de tener un nodo

cercano) por lo que una excitación colocada en ese sitio no tendrá componentes en esos estados. Por el contrario el sitio superficial tiene componentes de todos los estados dado que estos deben anularse en el sitio  $0$  (condición de contorno) y no tienen nodo en el sitio  $1$ . Por lo tanto se espera una mayor interferencia originada en la mayor cantidad de frecuencias involucradas. Por otro lado al haber más estados involucrados se espera que la mínima frecuencia (menor diferencia de energías) sea menor que en el caso del interior y por lo tanto que el eco dinámico se retrase<sup>5</sup>.

En super-redes semiconductoras, el fenómeno descrito podría observarse en la propagación de una excitación electrónica generada por un pulso LASER. Experimentalmente debe construirse una super-red con un pozo cuántico más angosto de manera que la mayor energía de localización compense la energía de ligadura excitónica. De esta manera el estado excitónico queda en resonancia con la excitación de electrón libre-hueco localizado. El salto de la partícula de menor masa efectiva (electrón) y su inmediata difusión deja fuera de resonancia al hueco impidiendo su escape. Para decaer, el electrón debe volver al sitio donde permanece el hueco, y de esta manera la luminiscencia es proporcional a la función de espera. Para esta interpretación es importante que el tiempo de recombinación (nanosegundos) sea mayor que el tiempo de tunelamiento de los electrones (picosegundos), de manera que la evolución es el fenómeno dominante.

Los espines nucleares en una molécula lineal también presentan<sup>6</sup> una fenomenología similar pero más convolucionada. La solución analítica<sup>9</sup> del modelo XY a altas temperaturas presenta exactamente la misma solución que la aquí obtenida debido a que dicho modelo es asimilable a fermiones no interactuantes. En el

modelo de Heisenberg ferromagnético a  $T=0$ , la función de espera en un sitio lejos de los bordes coincide con la de la cadena lineal infinita. Sin embargo, en cercanías de una superficie la  $p(r,t)$  ya no decae como  $t^{-3}$  si bien aún  $f(2Vt/\hbar)$  tiene un comportamiento anómalo (vale  $\sim 3/2$  para tiempos cortos y tiende asintóticamente a  $1$ ). Otro hecho que distingue a los espines nucleares es que siempre se trabaja en el régimen de altas temperaturas y por lo tanto el problema es realmente de muchas partículas.

### Agradecimientos

Agradecemos el financiamiento de Fundación Antorchas, SeCyT-UNC y CONICOR, discusiones con A. Goñi, E. Gagliano y P. Pury.

### Referencias

- 1- B. L. Altshuler, A. G. Aronov and B. Z. Spivak *Pis'ma Zh. Teor. Fiz.* **33**, 101 (1981) [*Sov. Phys. JETP Lett.* **33**, 94 (1981)]
- 2- S. Washburn and Webb, *Rep. Prog. Phys.* **55**, 1311 (1992)
- 3- H. M. Pastawski, *Phys. Rev. B*, **46**, 4053 (1992)
- 4- N.S. Wingreen, A.P. Jauho and Y. Meir, *Phys. Rev. B*, **48**, 8487 (1993)
- 5- V.N. Prigodin, B. L. Altshuler, K. B. Efetov and S. Iida, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 546 (1994)
- 6- H. M. Pastawski, P.R. Levstein and G. Usaj, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 4310 (1995)
- 7- H. M. Pastawski, *Phys. Rev. B*, **44**, 6329 (1991)
- 8- P. R. Levstein, H. M. Pastawski and J. L. D'Amato, *J. Phys. Condens. Matter* **2**, 1781 (1990)
- 9- H. B. Cruz, L. L. Goncalves, *J. Phys. C: Solid St. Phys.*, **14**, 2785 (1981), J. Stolze, V. S. Viswanath, G. Müller, *Z. Phys. B*, **89**, 45 (1992)