UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE BAJA CALIFORNIA

FACULTAD DE CIENCIAS

DESCRIPCIÓN DE LA FUNCIÓN DE ONDA MEDIANTE UN DESARROLLO EN ESTADOS RESONANTES, LIGADOS Y ANTILIGADOS PARA UN POTENCIAL ATRACTIVO

TESIS

Que para obtener el título de:

Físico

Presenta:

Enrique de Jesús Armengol Saucedo

2017

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE BAJA CALIFORNIA

FACULTAD DE CIENCIAS

DESCRIPCIÓN DE LA FUNCIÓN DE ONDA MEDIANTE UN DESARROLLO EN ESTADOS RESONANTES, LIGADOS Y ANTILIGADOS PARA UN POTENCIAL ATRACTIVO

TESIS PROFESIONAL

QUE PRESENTA

ENRIQUE DE JESÚS ARMENGOL SAUCEDO

APROBADO POR:

DR. ROBERTO ROMO MARTÍNEZ
Presidente del jurado

DR. JORGE A. VILLAVICENCIO AGUILAR
Secretario

DR. ALBERTO HERNANDEZ MALDONADO
1er vocal

RESUMEN de la tesis de **ENRIQUE DE JESÚS ARMENGOL SAUCEDO** presentada como requisito parcial para la obtención de la Licenciatura en **FÍSICA.** Ensenada, Baja California, México. Mayo de 2017.

DESCRIPCIÓN DE LA FUNCIÓN DE ONDA MEDIANTE UN DESARROLLO EN ESTADOS RESONANTES, LIGADOS Y ANTILIGADOS PARA UN POTENCIAL ATRACTIVO

Resumen aprobado por:

DR. ROBERTO ROMO MARTÍNEZ

DR. JORGE A. VILLAVICENCIO AGUILAR

Se realiza la extensión de un formalismo de estados resonantes para incorporar las contribuciones de estados ligados y estados antiligados en la descripción del coeficiente de transmisión para potenciales unidimensionales de alcance finito. Como resultado de dicha extensión, el desarrollo de la amplitud de transmisión en estados resonantes incluye adicionalmente un número finito de términos asociados a las contribuciones de los estados ligados y de los estados antiligados del sistema. Aplicándolo al caso de un potencial atractivo de anchura y profundidad finitas, se realiza un estudio sistemático de la evolución de los polos de la amplitud de transmisión y sus efectos en la convergencia de este desarrollo. Se encuentra que existe un régimen en el cual todos los estados ligados y todos los antiligados resultan esenciales para la descripción del coeficiente de transmisión, y un segundo régimen en el cual la contribución de los estados antiligados es muy pequeña resultando suficiente la incorporación de los estados ligados.

Índice general

Índice de figuras

Capítulo 1

Introducción

1.1. Antecedentes

En 1928, George Gamow realizó un estudio teórico del fenómeno de decaimiento cuántico utilizando un modelo simple unidimensional de doble barrera de potencial (Gamow, 1928). Aplicando condiciones de frontera de onda saliente apropiadas para describir el escape de partículas, Gamow demostró que las eigenfunciones de la ecuación de Schrödinger en este problema correspondían a eigenvalores complejos. Estas eigenfunciones, conocidas en la literatura como funciones de Gamow, además de su importancia histórica en el problema de decaimiento cuántico, han demostrado ser muy útiles debido a sus propiedades matemáticas en otros contextos de la física, tales como la teoría de dispersión y problemas diversos de tunelaje cuántico. En particular, se han utilizado como funciones base para obtener desarrollos en serie de propagadores de Green de las amplitudes de probabilidad en sistemas cuánticos con resonancias. Debido a que los eigenvalores complejos resultan ser las resonancias del sistema, estas eigenfunciones son también conocidas como estados resonantes. En la década de los 70s, García Calderón y Peierls demostraron que las funciones de onda del continuo se pueden expresar como un desarrollo en serie en términos de los polos complejos de la matriz de dispersión y sus correspondientes residuos, resultando estos últimos proporcionales a las funciones de Gamow (García-Calderón y Peierls, 1976). Posteriormente, estas ideas fueron traídas al contexto del transporte electrónico en estructuras unidimensionales resonantes de barreras y pozos de potencial, introduciendo un desarrollo en serie de la función de onda unidimensional y los estados resonantes (García-Calderón y Rubio, 1987). Dicho desarrollo se conoce como desarrollo de estados resonantes, y ha sido exitosamente aplicado al estudio del tunelaje resonante tanto en el régimen estacionario (García-Calderón et al., 1993; García-Calderón y Rubio, 1987) como el transitorio (García-Calderón y Rubio, 1997; Romo y Villavicencio, 1999; Romo et al., 1999; Villavicencio y Romo, 2000). El desarrollo de estados resonantes antes mencionado, ha sido aplicado en sistemas que involucran solo resonancias. Para potenciales que se anulan fuera de un intervalo finito, es bien sabido que el propagador de Green del sistema tiene polos en los estados cuánticos del sistema, los cuales además de resonancias, pueden ser estados ligados o estados antiligados (García-Calderón y Villavicencio, 2005). La diferencia entre estas especies de estados cuánticos la determina su ubicación en el plano complejo del número de onda k. Los estados ligados se encuentran en el eje imaginario positivo, mientras que los antiligados (también conocidos como estados virtuales) se encuentran en el eje imaginario negativo. Las resonancias por su parte, son polos que poseen tanto parte real como imaginaria diferentes de cero, y se encuentran distribuidas simétricamente en el tercero y cuarto cuadrante del plano-k. La variedad de potenciales en los que se presentan estos tres tipos de estados es muy amplia. En el presente estudio nos enfocaremos en uno de los más simples, el cual consiste en un potencial de pozo finito. El desarrollo de estados resonantes deberá ser modificado de tal forma que incluya términos adicionales que contengan las contribuciones de los estados ligados y los antiligados. Las expresiones matemáticas de dichos términos se determinarán como parte de los objetivos de este trabajo. En general, las posiciones de los polos de la función de Green dependen de los parámetros del potencial, y al variar dichos parámetros, los polos cambian sus posiciones siguiendo ciertas trayectorias en el plano complejo. Diversas cantidades físicas de interés (entre las que podemos mencionar, la amplitud de transmisión, amplitud de reflexión, tiempos de tunelaje, función de onda dentro y fuera del potencial, entre otras) pueden expresarse como desarrollos en serie en términos de los polos de la función de Green, y por lo tanto son susceptibles de experimentar efectos notables cuando dichos polos se mueven en el plano complejo.

Capítulo 2

Marco Teórico

Los desarrollos en serie que involucran conjuntos discretos de funciones base han probado ser herramientas poderosas para describir amplitudes de onda, propagadores, y cantidades físicas relacionadas. Un conjunto especial de funciones base que han sido muy útiles al desarrollar propagadores de Green y amplitudes de probabilidad son las llamadas funciones de Gamow (Gamow, 1928). En el contexto del decaimiento cuántico, corresponden a eigenfunciones complejas de la ecuación de Schrödinger con condiciones de frontera de onda saliente. A lo largo de décadas, las propiedades y aplicaciones de las funciones de Gamow han sido tema de investigación, principalmente en el contexto de la física nuclear y la teoría de dispersión. La proporcionalidad entre los estados de Gamow y los residuos en los polos complejos fue demostrada por García-Calderón (García-Calderón y Peierls, 1976), obteniéndose expresiones analíticas de funciones de onda continuas en términos de los estados resonantes para sistemas tridimensionales. Estas ideas fueron importadas (García-Calderón y Rubio, 1987) al contexto del transporte electrónico en heteroestructuras semiconductoras unidimensionales, introduciendo una representación de la función de Green en términos de funciones de Gamow en una dimensión, y su conexión con la función de onda estacionaria $\psi(x, k)$. Lo anterior constituye la base de un formalismo de estados resonantes, el cual ha sido satisfactoriamente aplicado para el estudio de tunelaje resonante en potenciales de forma arbitraria en una región finita $0 \leq x \leq L$, tanto en el contexto estacionario como el dinámico. Las propiedades de convergencia de la función de onda $\psi(x, k)$ a lo largo de la región de transmisión $(x > L)$ y la región interna $0 < x < L$ han sido recientemente analizadas mediante el desarrollo de estados resonantes. Sin embargo, la mayoría de estos estudios solo han sido desarrollados en casos que involucran resonancias. En el presente trabajo, además de las resonancias, nos interesa investigar la contribución de los estados ligados y antiligados en la convergencia de la función de onda.

2.1. Desarrollo de la función de onda en estados resonantes

En esta sección se mostrará el procedimiento analítico para la obtención del desarrollo en estados resonantes para la función de onda en la región interna. Para ello consideremos a continuación un procedimiento que involucra el desarrollo de la función de Green en términos de sus polos y residuos. Con base en este desarrollo, demostraremos que es posible desarrollar la función de onda del sistema en términos de estados resonantes (García-Calderón y Rubio, 1987).

La función de Green G^+ a lo largo de la región interna de un potencial de rango finito $V(x)$ con forma arbitraria, que se extiende sobre un intervalo espacial, $0 \leq x \leq L$, puede ser descrito usando el desarrollo analítico que se muestra a continuación. Partamos de la integral de Cauchy en el *plano k*,

$$I = \frac{1}{2\pi i} \int_C \frac{G^+(x, x'; k)}{k' - k} dk'. \tag{1}$$

La función de Green $G^+(x, x'; k)$ es analítica en todo el plano complejo k, *i.e.* la función de Green es meromorfa y posee un número infinito de polos distribuidos en el plano k, como es descrito en la figura 1.

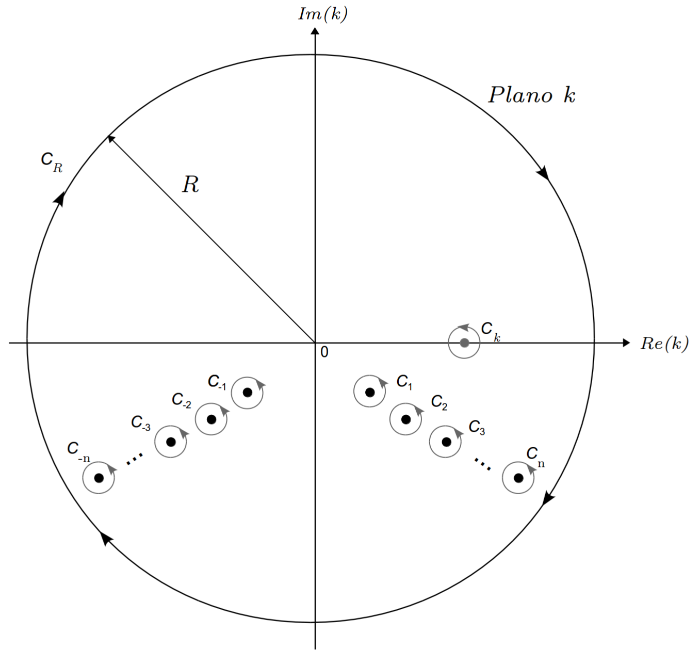


Figura 1: Contorno cerrado C en el plano complejo k utilizado para obtener el desarrollo en estados resonantes de $G^{+}(x,x';k)$. El contorno C está compuesto por el contorno C_R de radio R centrado en el origen, orientado en el sentido de las manecillas del reloj, los contornos C_n que encierran a los polos complejos k_n y C_k que encierra al polo $k'=k$, ambos orientados en dirección contraria a las manecillas del reloj.

En la figura 1 observamos el contorno de integración C, el cual está compuesto de un contorno cerrado C_R de radio R desde el origen, en el sentido de las manecillas del reloj, el cual excluye a todos los polos de la función, ya que estos últimos son encerrados por contornos circulares infinitesimalmente pequeños. Las resonancias están encerrados por los contornos C_n y el polo $k'=k$ por el contorno C_k, en donde los contornos de los polos siguen la dirección contraria a las manecillas del reloj. Usando el hecho de que el integrando es analítico en el interior de C, utilizamos el teorema de Cauchy, el cual establece $I=0$, y sustituimos $G^{+}(x,x';k)$ por $G^{+}(0,x;k)e^{-ik'x}$

por lo que de (1) obtenemos:

$$I = \frac{1}{2\pi i}\left[\int_{C_R} \frac{G^{+}(0,x;k)e^{-ik'x}}{k'-k}dk' - \sum_{n=-\infty}^{\infty}\int_{C_n} \frac{G^{+}(0,x;k)e^{-ik'x}}{k'-k}dk' \right. \qquad (2)$$
$$\left. - \int_{C_k} \frac{G^{+}(0,x;k)e^{-ik'x}}{k'-k}dk'\right] = 0.$$

Las integrales a lo largo de los contornos C_n y C_k se evalúan mediante el teorema del residuo. La primera integral de la ecuación (2) se anula en el límite cuando $R \to \infty$ debido a que en el límite $|k| \to \infty$, $G^{+}(0,x;k) \to \infty$ (Siero, 2000). La fórmula para el cálculo del residuo r en un polo simple $z = z_0$ de una función $F(z)$ es:

$$r = \lim_{z\to z_0}(z - z_0)F(z), \qquad (3)$$

por lo tanto, los residuos correspondientes a los polos k_n están dados por la expresión:

$$r = \lim_{k'\to k_n}(k' - k_n)\frac{G^{+}(0,x;k)e^{-ik'x}}{k'-k}, \qquad (4)$$

la cual podemos reescribir como:

$$r = \frac{e^{-ik_n x}}{k_n - k}\lim_{k'\to k_n}(k' - k_n)G^{+}(0,x;k). \qquad (5)$$

Una vez evaluado el límite en (5), la expresión para el residuo es:

$$r = \frac{r_n}{k_n - k} e^{-ik_n x}, \tag{6}$$

donde r_n corresponde a los residuos de $(k' - k_n)G^+(0, x; k)$ en cada uno de los polos complejos k_n.

De igual forma el residuo correspondiente al polo $k' = k$ es,

$$r = G^+(0, x; k)e^{-ikx}. \tag{7}$$

Una vez aplicado el teorema del residuo de Cauchy para evaluar las integrales a lo largo de los contornos C_n y C_k en la ecuación (2), obtenemos la siguiente expresión analítica para el propagador:

$$G^+(0, x; k) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{r_n e^{-ik_n x}}{k - k_n} e^{ikx}. \tag{8}$$

Como se mencionó anteriormente, las cantidades r_n corresponden a los residuos de $(k' - k_n)G^+(0, x; k)$, para las resonancias. Los residuos r_n se expresan en términos de los estados resonantes del sistema (García-Calderón et al., 1991), los cuales se definen más adelante. Los residuos r_n están dados explícitamente por:

$$r_n(x, x') = \frac{u_n(x)u_n(x')}{2k_n} \left\{ \int_0^L u_n^2(x)dx + \frac{i}{2k_n}[u_n^2(0) + u_n^2(L)] \right\}, \tag{9}$$

el procedimiento detallado para la obtención de los residuos r_n se muestra en el apéndice C. Aquí las funciones $u_n(x)$ son los estados resonantes del sistema (también llamadas funciones de Gamow). Dichos estados son soluciones de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo;

$$\frac{d^2u_n(x)}{dx^2} + \left[k_n^2 - \frac{2m}{\hbar^2}V\right]u_n(x) = 0, \tag{10}$$

con condiciones de frontera de onda saliente,

$$\begin{aligned} \left.\frac{du_n(x)}{dx}\right|_{x=0} &= -ik_nu_n(x)\Big|_{x=0}; \\ \left.\frac{du_n(x)}{dx}\right|_{x=L} &= ik_nu_n(x)\Big|_{x=L}. \end{aligned} \tag{11}$$

Dichas condiciones de frontera conducen necesariamente a considerar eigenvalores complejos de la energía, como fue demostrado por (Gamow, 1928). Estas eigenfunciones $u_n(x)$ tienen una condición de normalización diferente a la usual, esta es:

$$\int_0^L u_n^2(x)dx + \frac{i}{2k_n}[u_n^2(0) + u_n^2(L)] = 1. \tag{12}$$

Sustituyendo (9) en la ecuación (8) obtenemos el desarrollo en estados resonantes para la función de Green $G^+(0,x';k)$, dado por:

$$G^+(0,x;k) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{u_n(0)u_n(x)e^{-ik_nx}}{2k_n(k-k_n)}e^{ikx}. \tag{13}$$

Para obtener el desarrollo en estados resonantes u_n de la función de onda $\psi(x,k)$ a lo largo de la región interna del potencial, utilizamos la relación entre la función de onda $\psi(x,k)$ y la función de Green $G^+(0,x;k)$. El desarrollo para esta relación se muestra en el apéndice D y está dado por la ecuación (127). Combinando las ecuaciones (13) y (127) obtenemos el desarrollo de la función de onda en estados resonantes,

$$\psi(x,k) = ik \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{u_n(0)u_n(x)e^{-ik_n x}}{k_n(k-k_n)} e^{ikx}, \qquad 0 \leq x \leq L. \tag{14}$$

Finalmente, utilizando la relación (128) obtenemos el desarrollo para la amplitud de transmisión del sistema. En la práctica, se considera un número finito N de estados resonantes, entonces la amplitud de transmisión $t_N(k)$ es,

$$t_N(k) = ik \sum_{n=-N}^{N} \frac{u_n(0)u_n(L)e^{-ik_n L}}{k_n(k-k_n)}. \tag{15}$$

2.2. Desarrollo de la función de onda en estados resonantes, estados ligados y antiligados

El desarrollo en estados resonantes para la función de onda en el caso de un potencial en donde además de las resonancias existen estados ligados y estados antiligados requiere un análisis similar al presentado en la sección 2.1. El procedimiento analítico para la obtención del desarrollo en estados resonantes incluyendo la aportación de los estados ligados y los estados antiligados, parte de la integral de Cauchy en el plano k,

$$I = \frac{1}{2\pi i}\int_C \frac{G^+(x,x';k)}{k'-k}dk'. \tag{16}$$

La función de Green $G^+(x,x';k)$ posee un número infinito de polos distribuidos en el plano k, en este caso, además de las resonancias, existen estados ligados y antiligados, como se muestra en la figura 2. En esta figura observamos el contorno de integración C, el cual está compuesto de un contorno cerrado C_R de radio R desde el origen, recorrido en el sentido de las manecillas del reloj, el cual excluye a todos los polos de la función, ya que estos últimos son encerrados por contornos circulares infinitesimalmente pequeños. Las resonancias están encerradas por los contornos C_n, los estados ligados por C_l, los estados antiligados por C_m y el polo $k' = k$ por el contorno C_k, en donde los contornos de los polos siguen la dirección contraria a las manecillas del reloj.

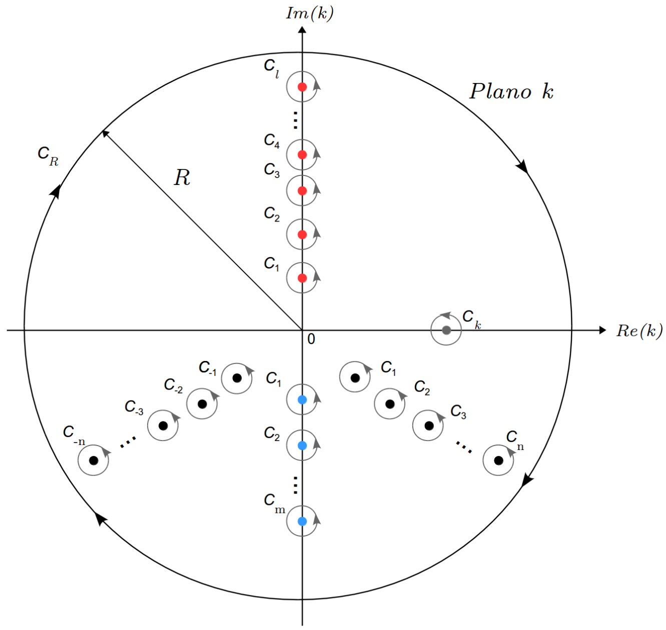


Figura 2: Contorno cerrado C en el plano complejo k, utilizado para obtener el desarrollo de estados resonantes, estados ligados y antiligados de $G^{+}(x, x'; k)$. El contorno C está compuesto por los siguientes contornos: C_R de radio R centrado en el origen, orientado en el sentido de las manecillas del reloj, los contornos C_n que encierran a los polos complejos k_n, C_l y C_m los contornos que encierran a los estados ligados k_l y antiligados k_m respectivamente y C_k encierra al polo $k' = k$.

Usando el hecho de que el integrando es analítico en el interior de C, utilizamos el teorema de Cauchy, el cual establece que $I = 0$, y sustituimos $G^{+}(x, x'; k)$ por $G^{+}(0, x; k)e^{-ik'x}$, entonces de (16) obtenemos:

$$
\begin{aligned}
I = \frac{1}{2\pi i}\Bigg[\int_{C_R} \frac{G^{+}(0,x;k)e^{-ik'x}}{k'-k}dk' - \sum_{n=-\infty}^{\infty}\int_{C_n} \frac{G^{+}(0,x;k)e^{-ik'x}}{k'-k}dk' \\
- \sum_{l=1}^{L}\int_{C_l} \frac{G^{+}(0,x;k)e^{-ik'x}}{k'-k}dk' - \sum_{m=1}^{M}\int_{C_m} \frac{G^{+}(0,x;k)e^{-ik'x}}{k'-k}dk' \\
- \int_{C_k} \frac{G^{+}(0,x;k)e^{-ik'x}}{k'-k}dk'\Bigg] = 0.
\end{aligned}
\tag{17}
$$

A continuación se aplica el teorema del residuo para evaluar las integrales a lo largo de los contornos C_n, C_l, C_m y C_k. La fórmula para el cálculo del residuo r en un polo simple $z = z_0$ de una función $F(z)$ está dada por la ecuación 3.

Como se vió en la sección 2.1, los residuos correspondientes a los polos k_n se calculan mediante las ecuaciones 4-6, lo que nos permite obtener los residuos que corresponden a los polos k_l y k_m:

$$r = \frac{r_l}{k_l - k} e^{-ik_l x}, \tag{18}$$

$$r = \frac{r_m}{k_m - k} e^{-ik_m x}; \tag{19}$$

de igual forma el residuo correspondiente al polo $k' = k$ es,

$$r = G^+(0, x; k) e^{-ikx}. \tag{20}$$

Una vez aplicado el teorema del residuo de Cauchy para evaluar las integrales a lo largo de los contornos C_n, C_l, C_m y C_k en la ecuación (17), obtenemos la siguiente expresión analítica para el propagador:

$$G^+(0, x; k) = \left[\sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{r_n e^{-ik_n x}}{k - k_n} + \sum_{l=1}^{L} \frac{r_l e^{-ik_l x}}{k - k_l} + \sum_{m=1}^{M} \frac{r_m e^{-ik_m x}}{k - k_m} \right] e^{ikx}. \tag{21}$$

Las cantidades r_n, r_l y r_m corresponden a los residuos de $G^+(0, x; k)$, en cada uno de los distintos polos. Los residuos r_n están dados por la ecuación (9) mostrada en la sección anterior. En el caso de los residuos $r_l(x, x')$ y $r_m(x, x')$, aún no existe una representación formal en términos de funciones que incluyan a los estados ligados y antiligados, por lo que llamaremos $v_l(x)$ y $w_m(x)$ a las funciones asociadas a éstos. Entonces, los residuos $r_l(x, x')$ y $r_m(x, x')$ quedan expresados:

$$r_l(x, x') = \frac{v_l(x)v_l(x')}{2k_l}\bigg\{\int_0^L v_l^2(x)dx + \frac{i}{2k_l}[v_l^2(0) + v_l^2(L)]\bigg\}, \tag{22}$$

$$r_m(x, x') = \frac{w_m(x)w_m(x')}{2k_m}\bigg\{\int_0^L w_m^2(x)dx + \frac{i}{2k_m}[w_m^2(0) + w_m^2(L)]\bigg\}. \tag{23}$$

El procedimiento para la obtención de $r_n(x, x')$, $r_l(x, x')$ y $r_m(x, x')$ es mostrado en el ápendice C. Estas nuevas funciones $v_l(x)$ y $w_m(x)$, tienen a los estados ligados y antiligados como eigenvalores complejos de la energía y son soluciones de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo con condiciones de frontera de onda saliente. Las funciones $v_l(x)$ y $w_m(x)$ poseen la misma normalización que las funciones $u_n(x)$,

$$\int_0^L v_l^2(x)dx + \frac{i}{2k_l}[v_l^2(0) + v_l^2(L)] = 1, \tag{24}$$

$$\int_0^L w_m^2(x)dx + \frac{i}{2k_m}[w_m^2(0) + w_m^2(L)] = 1. \tag{25}$$

Es necesario enfatizar en estas nuevas funciones, ya que son una aportación importante en este trabajo por el hecho de incluir los estados ligados y antiligados.

Finalmente, sustituyendo (9), (22) y (23) en la ecuación (21) obtenemos el desarrollo en serie para el propagador de Green $G^{+}(0,x;k)$ dado por:

$$G^{+}(0,x;k) = \left[\sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{u_n(0)u_n(x)e^{-ik_nx}}{2k_n(k-k_n)} + \sum_{l=1}^{L} \frac{v_l(0)v_l(x)e^{-ik_lx}}{2k_l(k-k_l)} + \sum_{m=1}^{M} \frac{w_m(0)w_m(x)e^{-ik_mx}}{2k_m(k-k_m)} \right] e^{ikx}. \tag{26}$$

Utilizando la relación entre la función de onda $\psi(x,k)$ y la función de Green $G^{+}(0,x;k)$ dada por (127), obtenemos el desarrollo en estados resonantes, estados ligados y antiligados para la función de onda $\psi(x,k)$,

$$\psi(x,k) = ik \left[\sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{u_n(0)u_n(x)e^{-ik_nx}}{k_n(k-k_n)} + \sum_{l=1}^{L} \frac{v_l(0)v_l(x)e^{-ik_lx}}{k_l(k-k_l)} + \sum_{m=1}^{M} \frac{w_m(0)w_m(x)e^{-ik_mx}}{k_m(k-k_m)} \right] e^{ikx}. \tag{27}$$

Por último, utilizando la relación (128) obtenemos el desarrollo para la amplitud de transmisión del sistema. En el cual, para fines prácticos, se considera un número finito N de resonancias, entonces la amplitud de transmisión $t_N(k)$ es:

$$t_N(k) = ik \left[\sum_{n=-N}^{N} \frac{u_n(0)u_n(L)e^{-ik_nL}}{k_n(k-k_n)} + \sum_{l=1}^{L} \frac{v_l(0)v_l(L)e^{-ik_lL}}{k_l(k-k_l)} + \sum_{m=1}^{M} \frac{w_m(0)w_m(L)e^{-ik_mL}}{k_m(k-k_m)} \right]. \tag{28}$$

Las relaciones anteriores son la primera representación del desarrollo en estados resonantes, estados ligados y antiligados en forma explícita de la función de onda $\Psi(x,k)$ y la amplitud de transmisión $t(k)$, para el caso de un pozo de potencial. El desarrollo anterior de la función de onda, es una de las aportaciones más importantes de este trabajo, al ser el primero en incluir explícitamente la aportación de los estados ligados y los estados antiligados. Este desarrollo puede ser utilizado para cualquier potencial de rango finito, en la región $0 \leq x \leq L$, que contenga estados resonantes, estados ligados y antiligados. Estos resultados son muy importantes porque nos permiten una representación alternativa para la funcion de onda $\Psi(x,k)$ y la amplitud de transmisión $t(k)$.

2.3. Polos de un pozo de potencial

Para estudiar los efectos de los estados ligados y antiligados es necesario analizar los polos de la amplitud de transmisión del pozo de potencial de profundidad finita. Para esto es necesario resolver la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo y obtener la expresión exacta para la amplitud de transmisión, mediante la cual, podemos estudiar el tipo de polos asociados y su respectivo comportamiento. La solución de la ecuación de Schrödinger se muestra en el apéndice A, en donde se obtiene la amplitud de transmisión dada por la ecuación (67). Los polos de la amplitud de transmisión, dependiendo de las caraterísticas del potencial utilizado, pueden ser de tres tipos: *resonancias, estados ligados y estados antiligados*. Cada uno de ellos esta distribuido en el *plano complejo* k de la siguiente manera: los estados ligados se encuentran ubicados en la parte positiva del eje imaginario, los estados antiligados en la parte negativa del eje imaginario, y las resonancias se encuentran en el tercero y cuarto cuadrantes del plano k (Taylor, 1972). La posición de los polos en el plano k está en función de los parámetros del potencial y dependiendo de la variación de estos parámetros, los polos seguirán ciertas trayectorias en el plano k.

El procedimiento mostrado a continuación fue desarrollado por Nussenzveig (Nussenzveig, 1959) para determinar el tipo de polos pertenecientes a una barrera y un pozo de potencial en 3-D. Este procedimiento es adaptado aquí para el pozo de potencial en una dimensión.

Partimos de la expresión para los polos de $t(k)$, la cual corresponde a los ceros de m_{11}, el cual es obtenido en el apéndice B al utilizar condiciones de frontera de onda saliente,

$$m_{11} = \frac{1}{4}\left(1+\frac{k}{q}\right)\left(1+\frac{q}{k}\right)e^{iL(k-q)} + \frac{1}{4}\left(1-\frac{q}{k}\right)\left(1-\frac{k}{q}\right)e^{iL(k+q)} = 0, \qquad (29)$$

donde $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$, $q = \sqrt{2m(E+V_0)/\hbar^2}$, donde L es la anchura del pozo. Desarrollando y factorizando algunos términos en la ecuación (29) obtenemos las siguientes ecuaciones,

$$e^{-iq\frac{L}{2}}(k+q) - e^{iq\frac{L}{2}}(k-q) = 0, \qquad (30)$$

$$e^{-iq\frac{L}{2}}(k+q) + e^{iq\frac{L}{2}}(k-q) = 0. \qquad (31)$$

Reescribimos las ecuaciones (30) y (31) respectivamente,

$$\cot\left(\frac{qL}{2}\right) = \frac{ik}{q},$$

$$\tan\left(\frac{qL}{2}\right) = -\frac{ik}{q}.$$

Definiendo las variables:

$$\alpha = \frac{qL}{2} = \frac{L}{2}\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E+V_0)},$$

$$\beta = \frac{kL}{2} = \frac{L}{2}\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E},$$

$$\gamma = \frac{L}{2}\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}V_0}, \tag{32}$$

podemos reescribir nuevamente la ecuación (30) en la forma,

$$\alpha \cot \alpha = i\beta \tag{33}$$

Similarmente, reescribimos la ecuación (31) como,

$$\alpha \tan \alpha = -i\beta. \tag{34}$$

Resulta conveniente reescribir las ecuaciones (33) y (34) como funciones sólo de α eliminando β. Tomando en cuenta la relación,

$$\beta = \pm(\alpha^2 - \gamma^2)^{\frac{1}{2}}, \tag{35}$$

obtenemos respectivamente,

$$\frac{1}{\alpha}\sin \alpha = \pm\frac{1}{\gamma}, \tag{36}$$

$$\frac{1}{\alpha}\sin(\alpha+\frac{\pi}{2}) = \pm\frac{1}{\gamma}. \tag{37}$$

Ahora procedemos a calcular las raíces de la ecuación (36). Primero sustituimos $\alpha = x + iy$ en dicha ecuación y separamos la parte real e imaginaria. Después de realizar algunas operaciones algebraicas simples obtenemos,

$$[x\sin x\cosh y + y\cos x\sinh y] - i[y\sin x\cosh y - x\cos x\sinh y] = \pm\frac{(x^2+y^2)}{\gamma}. \tag{38}$$

Por lo tanto, para la ecuación anterior encontramos los siguientes casos:

$$\begin{aligned} &\tfrac{1}{x}\tan x = \tfrac{1}{y}\tanh y && (I), \\ &y = \operatorname{arccosh}\left|\frac{x}{\gamma\sin x}\right| && (II), \end{aligned} \qquad (x\neq 0,\ y\neq 0) \tag{39}$$

$$\begin{aligned} y &= 0, \\ \sin x &= \pm\frac{x}{\gamma}, \end{aligned} \tag{40}$$

$$\begin{aligned} x &= 0, \\ \sinh y &= \frac{y}{\gamma} \qquad (0<\gamma<1). \end{aligned} \tag{41}$$

La ecuación (41), correspondiente al caso ($x = 0$), no tiene raíces para $\gamma > 1$. Para cada valor de γ en el intervalo de 0 a 1, (41) tiene una sola raíz; cuando γ aumenta de 0 a 1, el valor de y disminuye de ∞ a 0.

Las raíces de las ecuaciones (39) y (40), dadas en el caso ($x \neq 0,\ \ y \neq 0$) y ($y = 0$) respectivamente, pueden ser encontradas gráficamente o mediante un programa computacional. La ecuación (II) representa una familia de curvas que dependen del parámetro γ. Para cada valor de γ las raíces de (39) estan dadas por los puntos de intersección entre las curvas (I) y (II).

Ahora calculemos las raíces de la ecuación (37). De igual forma sustituimos $\alpha = x + iy$ y separamos la parte real e imaginaria de la ecuación, con lo cual obtenemos,

$$\begin{aligned} &[x\sin(x+\tfrac{\pi}{2})\cosh y + y\cos(x+\tfrac{\pi}{2})\sinh y] + \\ &+ i[x\cos(x+\tfrac{\pi}{2})\sinh y - y\sin(x+\tfrac{\pi}{2})\cosh y] = \pm\frac{(x^2+y^2)}{\gamma}. \end{aligned} \tag{42}$$

De lo anterior observamos que no hay solución para $x = 0$, por lo tanto tenemos:

$$\left.\begin{aligned} &\tfrac{1}{x}\tan(x+\tfrac{\pi}{2}) = \tfrac{1}{y}\tanh y && (I'), \\ &y = \operatorname{arccosh}\left|\frac{x}{\gamma\sin(x+\frac{\pi}{2})}\right| && (II'), \end{aligned}\right. \qquad (x \neq 0,\ y \neq 0) \tag{43}$$

$$\begin{aligned} y &= 0, \\ \cos x &= \pm\frac{x}{\gamma}. \end{aligned} \tag{44}$$

Las raíces de las ecuaciones (39), (40), (41) y las de (43) y (44) conforman todo el tipo de polos en este sistema. Las ecuaciones (39) y (43) contienen a las resonancias (también llamados polos complejos), los estados ligados y antiligados están contenidos en (40), (41) y (44), el número de estos últimos depende del valor de γ.

Cabe mencionar que este procedimiento fue utilizado tiempo despúes para una barrera de potencial en una dimensión (Villavicencio, 2000), pero hasta ahora no había sido utilizado para un pozo de potencial en una dimensión.

En el capítulo 3 se utilizarán las ecuaciones anteriores para analizar los diferentes tipos de polos y estudiar su comportamiento al variar los parámetros del potencial, enfatizando el análisis en la variación del valor de γ.

Capítulo 3

Resultados

En la primera sección de este capítulo analizamos el comportamiento de los polos en el plano complejo k al variar los parámetros del pozo de potencial, utilizando los resultados analíticos obtenidos en el capítulo 2. Veremos que las diferentes especies de polos presentes en este potencial siguen un comportamiento bien definido. Estudiamos los casos más relevantes explorando su evolución en el plano k. Consideraremos varios ejemplos que incluyan distintos números de estados ligados y antiligados en función del parámetro γ. Especificamente, realizaremos una variación de γ de tal forma LV_0 permanezca constante, lo que simplificará la visualización del comportamiento de aparición en el plano complejo, de cada uno de los estados ligados y antiligados.

En la segunda sección del capítulo se analiza la contribución de los polos del pozo de potencial en el desarrollo de estados resonantes, estados ligados y antiligados, para el coeficiente de transmisión. Se muestran comparaciones del coeficiente de transmisión del pozo de potencial, calculado por el método de matriz de transferencia, con el coeficiente de transmisión dado por el desarrollo de estados resonantes, estados ligados y antiligados obtenido en el capítulo 2. En particular se analiza la relevancia de los estados ligados y antiligados en el desarrollo para la correcta reproducción del coeficiente de transmisión exacto, destacando la importancia de cada especie de estado para diferentes valores de γ.

3.1. Polos de la amplitud de transmisión del pozo de potencial

Considerando un pozo de potencial con ancho $L = 500$ $\mathring{A}$ y profundidad $V_0 = 0.03$ eV utilizamos las ecuaciones (39) y (43) para obtener el valor de los polos complejos, las ecuaciones (40) y (44) para los estados ligados y antiligados respectivamente. Se obtiene la distribución de los polos en el plano k, que se ilustra en la figura 3, en donde para un valor dado de γ, existe una cantidad finita de estados ligados (círculos rojos) k_l y estados antiligados (círculos azules) k_m, los cuales se encuentran respectivamente en el eje imaginario positivo y negativo del plano k. En contraste, el número de resonancias es infinito, y se encuentran distribuidas simétricamente en el tercer y cuarto cuadrante del *plano k*. Las resonancias del tercer cuadrante (también llamadas anti-resonancias) están relacionados con las del cuarto cuadrante por $k_{-n} = -k_n^*$ $(n = 1, 2, 3, ...)$. En 3 se muestran 10 resonancias k_n y 10 anti-resonancias k_n.

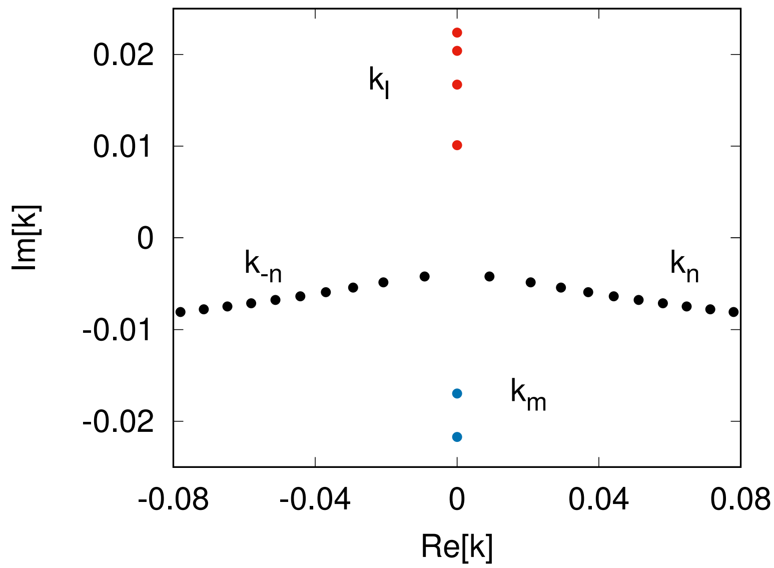
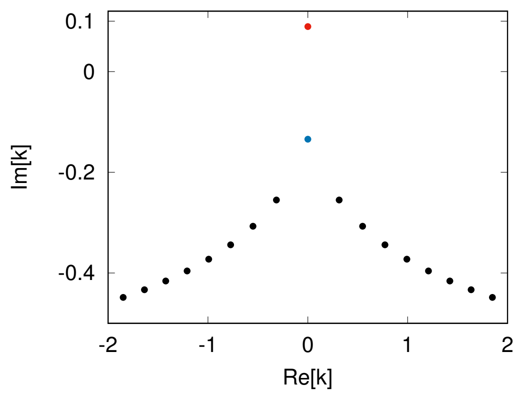


Figura 3: Distribución de los polos del sistema en el plano complejo k con parámetros: $L = 500\ \mathring{A}$, $V_0 = 0.03$ eV y $\gamma = 5.75$. En el tercer y cuarto cuadrante se encuentran las 10 primeras resonancias k_n y anti-resonancias k_{-n} respectivamente. Para este valor de γ se aprecian cuatro estados ligados k_l en la parte positiva del eje imaginario y dos antiligados k_m en la parte negativa del mismo.

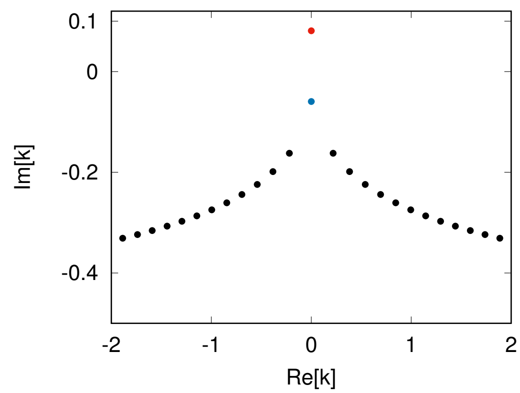
En la figura 3 observamos que para el valor $\gamma = 5.75$ existen solo cuatro estados ligados y dos antiligados, y se muestran varias resonancias y anti-resonancias. Esta distribución de polos depende del aumento o disminución del parámetro γ, como lo ilustraremos a continuación.

A medida que γ aumenta, las resonancias empiezan a aproximarse entre sí y a posicionarse más cercanas al eje real como se aprecia en la figura 4. En la figura 4 (a) donde $\gamma = 0.99$, aparecen cierto número de resonancias. Si aumentamos γ vemos que en la figura 4 (b), donde $\gamma = 1.19$, el número de resonancias en esa región aumenta. Si incrementamos más el valor de γ, como se muestra en la figura 4 (c) donde $\gamma = 1.4$ y en la figura 4 (d) donde $\gamma = 1.57$, la concentración de resonancias y anti-resonancias aumenta.

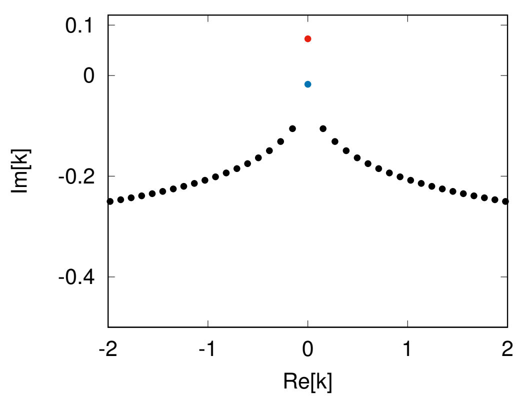
Los estados ligados y antiligados también siguen un comportamiento bien definido, el cual ilustraremos al realizar una variación de γ de 0 a ∞. Para un análisis más claro del comportamiento de estos polos, se varía γ tal que el área LV_0 del pozo se mantiene constante. En la figura 4 (a) donde $\gamma = 0.99$, aparecen un estado ligado y un estado antiligado. El estado ligado se obtiene de la ecuación (44) y el estado antiligado de la ecuación (41). El primer estado ligado en aparecer al aumentar γ desde 0, siempre va a estar asociado a la ecuación (44), dicho estado se muestra en la figura 4 (a), en la parte positiva del eje imaginario. Para $0 < \gamma < 1$, la solución de la ecuación (41) corresponde a un estado antiligado, el cual se mueve desde $-i\infty$ en el plano k, conforme γ aumenta desde 0 hasta 1. En la figura 4 (a) se observa la posición que toma el estado antiligado antes de que deje de ser solución de la ecuación (41). En la figura 4 (b), donde $\gamma = 1.19$, el estado antiligado es ahora solución de la ecuación (40), dado que $\gamma \geq 1$. Este estado antiligado se aproxima al eje real conforme γ aumenta. La primera solución que tenga la ecuación (40) al variar γ desde 0, siempre será un estado antiligado. Por otro lado, en la figura 4 (b) el estado ligado que sigue siendo raíz de la ecuación (44) comienza a acercarse al antiligado. En la figura 4 (c) el comportamiento de los polos continúa igual, esto es, el estado ligado y antiligado se van acercando entre sí. Si el valor de γ sigue incrementando, el estado antiligado asciende a la parte positiva del eje imaginario y se vuelve un estado ligado, como se muestra en la figura 4 (d). Este nuevo estado ligado aún es solución de la ecuación (40), y cambia de estado antiligado a estado ligado cuando $\gamma = 1.5707$.



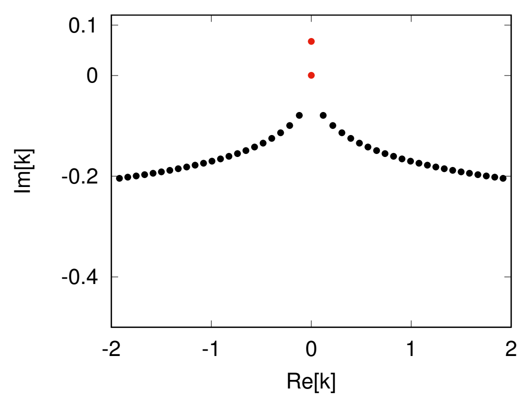
(a) $L = 15$ $\mathring{A}$, $V_0 = 1$ eV y $\gamma = 0.99$.



(b) $L = 21.42$ $\mathring{A}$, $V_0 = 0.7$ eV y $\gamma = 1.19$.



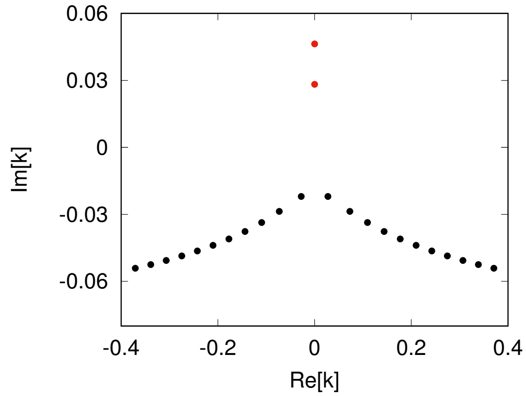
(c) $L = 30$ $\mathring{A}$, $V_0 = 0.5$ eV y $\gamma = 1.4$.



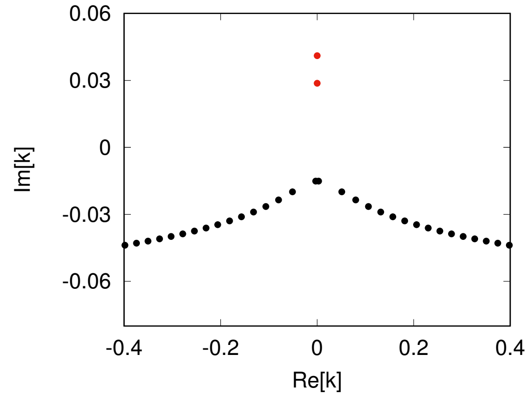
(d) $L = 37.5$ $\mathring{A}$, $V_0 = 0.4$ eV y $\gamma = 1.575$.

Figura 4: Comportamiento de los polos aumentando γ. A medida que γ aumenta, las resonancias se acercan al eje real y comienzan a aproximarse entre sí. Los estados ligado y antiligado también se acercan entre sí, de tal forma que en (d) el estado antiligado se vuelve un estado ligado.

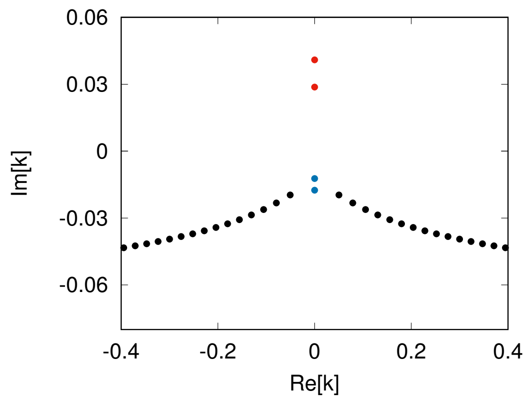
En la figura 5 (a) donde ahora $\gamma = 2.57$, las resonancias continúan subiendo y acercandose entre sí, al igual que los dos estados ligados. Al seguir incrementando γ, las resonancias siguen el mismo patrón, con la diferencia de que la primera resonancia y la primera anti-resonancia comienzan a aproximarse entre sí, como se puede observar en la figura 5 (b). Mientras γ siga incrementándose, la resonancia y anti-resonancia se fusionan y luego se separan en dos polos, que se mueven en direcciones opuestas en el eje imaginario. Esta transición la podemos apreciar claramente al ir de la 5 (b) a la 5 (c), en donde se observa el nacimiento de un par de estados antiligados como resultado de la fusión de una resonancia con una anti-resonancia. Estos dos nuevos polos en el eje imaginario son estados antiligados que están asociados a la ecuación (44), la cual para este valor de γ tiene tres soluciones: un estado ligado y dos estados antiligados. En la figura 5 (d) los dos nuevos estados antiligados siguen avanzando en direcciones opuestas en el eje imaginario, hasta que el que se mueve en dirección positiva, cruza el eje real y se vuelve un nuevo estado ligado. Este nuevo estado ligado asociado a la misma ecuación tiene su cambio de estado antiligado a ligado, cuando $\gamma = 3.1416$. Observamos que en la figura 5 (e) el comportamiento en las resonancias, los estados ligados y los estados antiligados se mantiene igual, vemos como el ciclo se repite y otro par resonancia con anti-resonancia se fusionan para dar lugar al nacimiento de dos nuevos estados antiligados. Dichos estados seguiran con su avance en direcciones opuestas y uno de ellos sera un nuevo estado ligado cuando cruce el eje real, como se observa en la figura 5 (f).



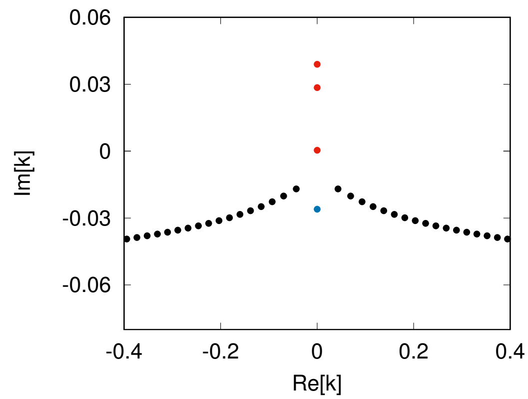
(a) $L = 100$ $\mathring{A}$, $V_0 = 0.15$ eV y $\gamma = 2.57$.



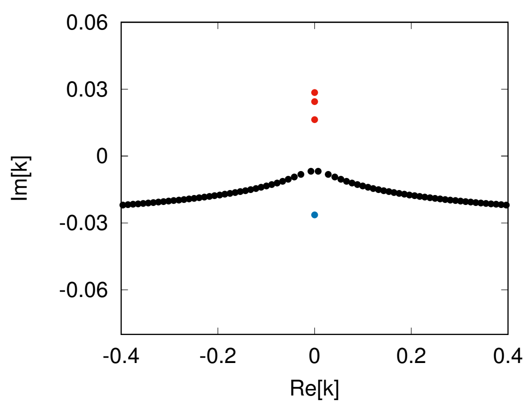
(b) $L = 132.74$ $\mathring{A}$, $V_0 = 0.113$ eV y $\gamma = 2.96$.



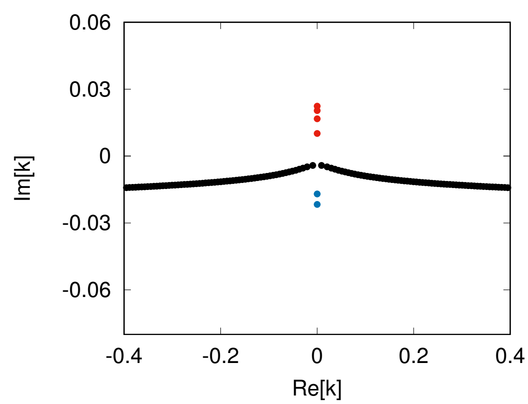
(c) $L = 133.92$ $\mathring{A}$, $V_0 = 0.112$ eV y $\gamma = 2.97$.



(d) $L = 150$ $\mathring{A}$, $V_0 = 0.1$ eV y $\gamma = 3.15$.



(e) $L = 300$ $\mathring{A}$, $V_0 = 0.05$ eV y $\gamma = 4.45$.



(f) $L = 500$ $\mathring{A}$, $V_0 = 0.03$ eV y $\gamma = 5.75$.

Figura 5: Comportamiento de los polos aumentando γ. Para valores más grandes de γ, mayor cantidad de estados ligados y antiligados aparecen en el plano k, en (b) los primeros estados resonantes se acercan hasta que en (c) se vuelven estados antiligados, en (d) estos estados siguen en movimiento hasta que uno de ellos sube a la parte positiva y pasa a ser un estado ligado. El movimiento de los polos comienza a seguir el mismo comportamiento en (e) y en (f).

Utilizando las ecuaciones (44), (40) y los resultados obtenidos al analizar el comportamiento de los polos, es posible encontrar una relación general para el número de estados ligados y antiligados respecto a γ. En la figura 4 (d) vimos que el estado antiligado de la ecuación (40) paso a ser un estado ligado en $\gamma = 1.5707 = \frac{\pi}{2}$, si analizamos el movimiento de polos hasta $\gamma = 4.712 = \frac{3\pi}{2}$, esto volverá a ocurrir. Por lo tanto, podemos escribir una relación para los $(n+1)$ estados ligados correspondientes a (40),

$$(n + \frac{1}{2})\pi \leq \gamma < (n + \frac{3}{2})\pi, \qquad n = 0, 1, 2, 3, ... \tag{45}$$

En la figura 5 (d), un estado antiligado solución de (44), se convirtió en un estado ligado en $\gamma = 3.1416 = \pi$. Si seguimos analizando valores mayores de γ, este cambio se repetirá, por lo que podemos escribir la siguiente relación para los $(n+1)$ estados ligados que son solución de (44):

$$n\pi \leq \gamma < (n + 1)\pi, \qquad n = 0, 1, 2, 3, ... \tag{46}$$

Con las relaciones anteriores podemos conocer cuando un estado antiligado pasa a la parte positiva del plano k y se vuelve un estado ligado, y el número de estados ligados para cualquier valor del parámetro γ. Al conocer el comportamiento de las resonancias y su transición a estados antiligados, también es posible conocer el número de estados antiligados con las relaciones previas.

3.2. El coeficiente de transmisión del pozo de potencial

En esta sección analizamos la convergencia del desarrollo de estados resonantes, estados ligados y antiligados dado por la ecuación (69). Para ejemplificar mejor los resultados obtenidos, se calculan gráficas del coeficiente de transmisión exacto *vs* k, para un pozo de potencial con diferentes parámetros, donde $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$, y se realizan comparaciones con el coeficiente de transmisión $T = |t(k)|^2$ con base en el desarrollo (28). Las comparaciones se realizan para distintos parámetros de un pozo de potencial, variando la cantidad de estados ligados y antiligados. Utilizando el parámetro γ podemos analizar las diferentes configuraciones de un pozo de potencial respecto a un solo parámetro y visualizar mejor la importancia de los estados ligados y antiligados en el desarrollo.

Como vimos en la sección anterior, para $0 < \gamma < \frac{\pi}{2}$, existe un estado ligado y un estado antiligado. Empecemos el análisis con casos de γ entre esta región. Consideremos un pozo de anchura $L = 15$ $\AA$ y profundidad $V_0 = 1$ eV, el cual corresponde a $\gamma = 0.99$. Para este valor de γ sólo hay un estado ligado y un estado antiligado en el pozo, como se muestra en la figura 6. En este ejemplo, el estado antiligado se encuentra en un dominio de γ en donde dicho estado es raíz de la ecuación (41), como vimos en la sección anterior.

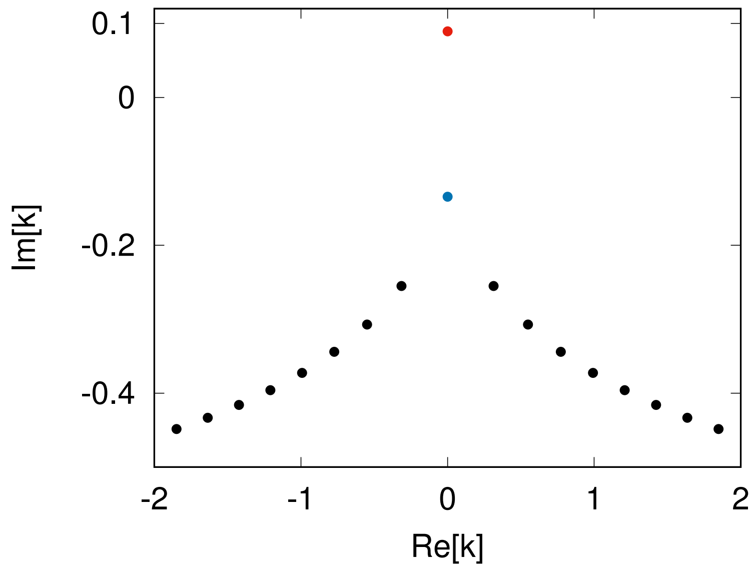


Figura 6: Distribución de los polos del pozo de potencial en el plano complejo k, con parámetros: anchura $L = 15$ $\mathring{A}$ y profundidad $V_0 = 1$ eV correspondiente a $\gamma = 0.99$. En el tercer y cuarto cuadrante se encuentran las primeras ocho resonancias k_n y k_{-n} respectivamente (círculos negros). En la parte negativa del eje imaginario aparece un estado antiligado k_m (círculo azul) y un estado ligado k_l (círculo rojo) en la parte positiva.

En la figura 7 se muestra la comparación del coeficiente de transmisión exacto (a), con el coeficiente de transmisión calculado mediante el desarrollo en estados resonantes (b) de la ecuación (15), donde se utilizó $N = 400$. Como podemos apreciar al comparar ambas gráficas, el desarrollo de estados resonantes (15) está muy lejos de reproducir el valor exacto del coeficiente de transmisión, no obstante de que se incluyó un buen número de resonancias. Como vimos en la figura 6, el pozo de potencial con estos parámetros, además de los estados resonantes, tiene un estado ligado y un estado antiligado, que no están en el cálculo de la figura 7 (b).

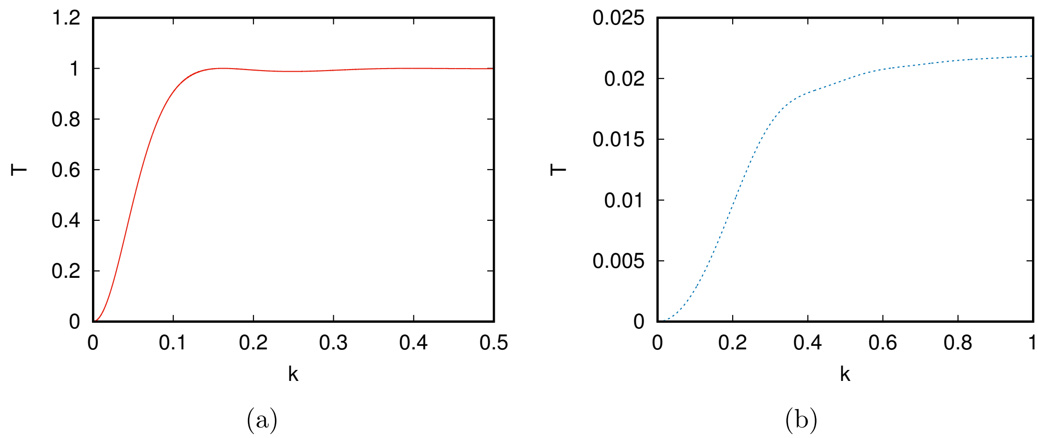
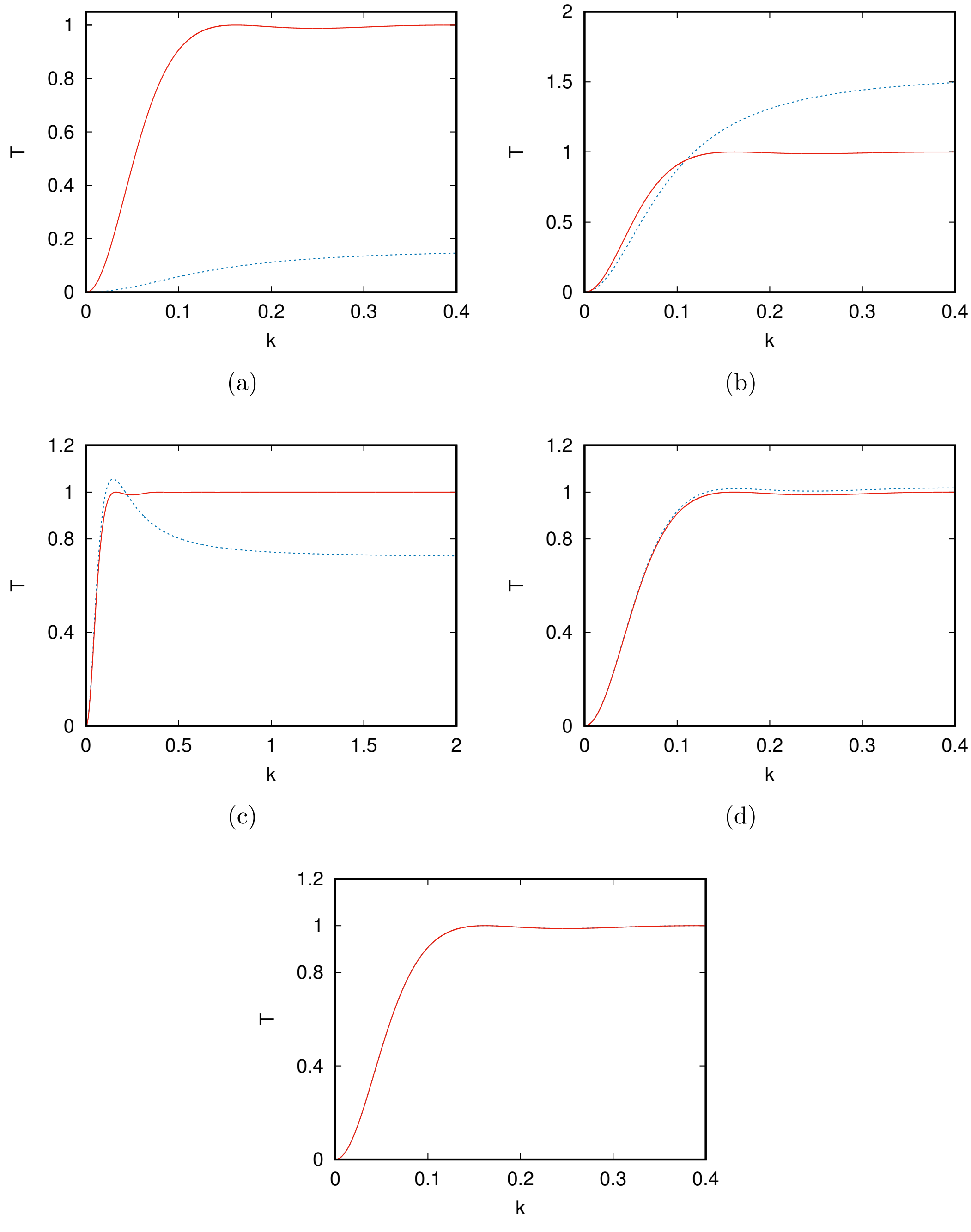


Figura 7: Comparación del coeficiente de transmisión exacto (a) dado por(69) (línea roja continua), con el coeficiente de transmisión utilizando el desarrollo de la ecuación (15) (línea azul punteada) (b), en el cual se utilizó $N = 400$. Parámetros del pozo de potencial: anchura $L = 15$ $\AA$ y profundidad $V_0 = 1$ eV correspondiente a $\gamma = 0.99$.

Con el propósito de analizar la importancia de los diferentes estados, en la figura 8 se muestran cinco casos de la comparación del coeficiente de transmisión exacto dado por la ecuación (69), con el coeficiente de transmisión producido por el desarrollo en serie de la ecuación (28). El primer caso es el inciso (a), donde se muestra el coeficiente de transmisión utilizando $N = 0$, $L = 0$ y $M = 1$. Como podemos apreciar, si solo se incluye el estado antiligado, el coeficiente de transmisión es un orden de magnitud mayor que en la figura 7 (b), pero aún está muy lejos de la curva exacta. En el inciso (b) se utilizó $N = 0$, $L = 1$ y $M = 0$ en el desarrollo, donde vemos que al incluir el estado ligado en vez del antiligado, el coeficiente de transmisión tiene un incremento considerable, a tal punto que la aportación del estado ligado en el desarrollo es tan grande que sobrepasa al coeficiente de transmisión exacto para valores de k aproximadamente mayores que 0.1. En el inciso (c) fue utilizado

$N = 0$, $L = 1$ y $M = 1$ en el desarrollo, lo que provoca que la gráfica adquiera un comportamiento diferente al del inciso (b), pero es aún más parecido al exacto. En (d) se utiliza $N = 20$, $L = 1$ y $M = 1$ y observamos que ambas gráficas coinciden casi por completo. En (e) se utilizó $N = 400$, $L = 1$ y $M = 1$, y las curvas resultan indistinguibles entre sí.



(a) (b) (c) (d) (e)

Figura 8: Comparación del coeficiente de transmisión usando el desarrollo de la ecuación (28) (línea azul punteada), con el cálculo exacto dado por (69) (línea roja continua), para un sistema de pozo de potencial con parámetros: anchura $L = 15$ Å y profundidad $V_0 = 1$ eV correspondiente a $\gamma = 0.99$, donde además de las resonancias existe un estado ligado y uno antiligado. El número de términos utilizados en el desarrollo de cada caso fueron: (a) $N = 0$, $L = 0$ y $M = 1$, (b) $N = 0$, $L = 1$ y $M = 0$, (c) $N = 0$, $L = 1$ y $M = 1$, (d) $N = 20$, $L = 1$ y $M = 1$, (e) $N = 400$, $L = 1$ y $M = 1$.

Como se mostró en la sección anterior, al seguir aumentando el valor de γ a valores mayores de 1, el estado antiligado que se encontraba en $\gamma < 1$ pasa de ser solución de la ecuación (41) a serlo de (40), este es un caso importante que debe ser analizado para determinar si este cambio afecta o no, a la descripción del coeficiente de transmisión.

En la figura 9 se muestra la distribución de los polos para $\gamma = 1.4$. Para este valor de γ, la configuración de polos es similar al de la figura 6 (correspondiente a $\gamma = 0.99$) excepto por el hecho de que el estado antiligado es solución de (40) y se encuentra muy cerca del eje real, y a punto de cruzarlo si γ se incrementa un poco más.

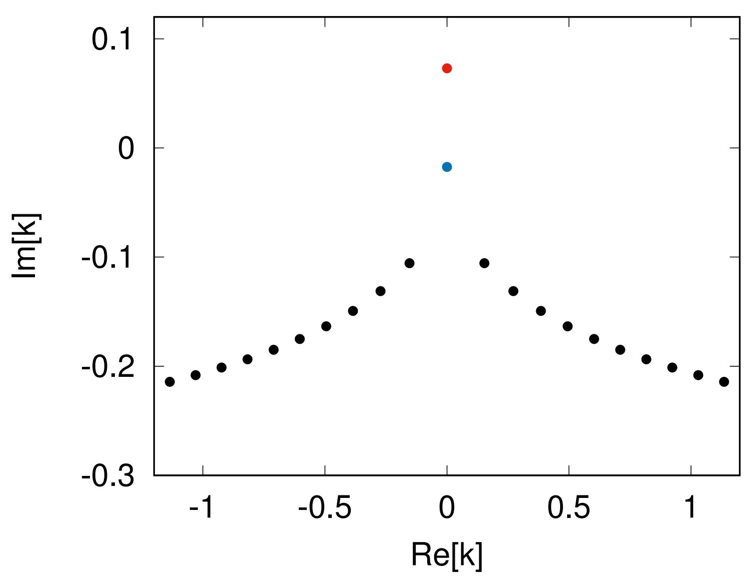
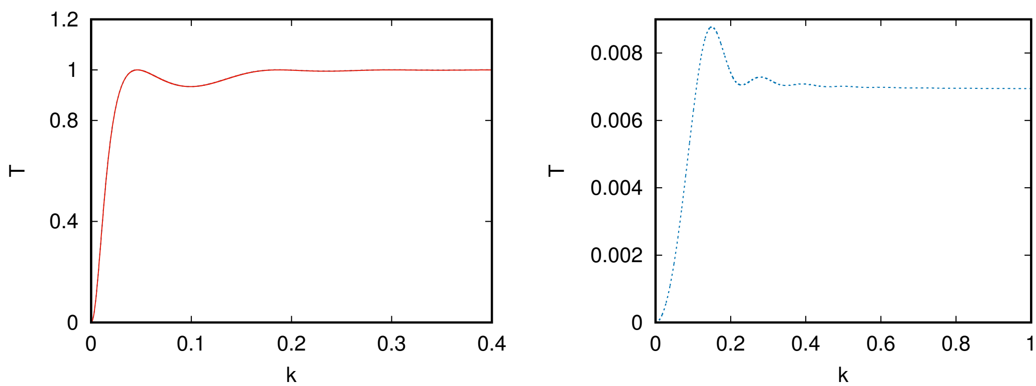


Figura 9: Distribución de los polos del pozo de potencial en el plano complejo, con parámetros: anchura $L = 30$ $\mathring{A}$ y profundidad $V_0 = 0.5$ eV correspondiente a $\gamma = 1.4$. En el tercer y cuarto cuadrante se encuentran las primeras diez resonancias k_n y k_{-n} (círculos negros) respectivamente. En la parte negativa del eje imaginario un estado antiligado k_m (círculo azul) y un estado ligado k_l (círculo rojo) en la parte positiva del mismo.

En la figura 10 se muestra la comparación del coeficiente de transmisión exacto (a), con el coeficiente de transmisión calculado mediante el desarrollo en estados resonantes (b) de la ecuación (15), donde se utilizó $N = 800$. Al comparar ambas gráficas, el desarrollo de estados resonantes no logra reproducir el valor exacto del coeficiente de transmisión, como ocurre también en la figura 7. Como vimos en la figura 9, este sistema tiene un estado ligado y un estado antiligado, los cuales no son utilizados en el calculo de la figura 10 (b).



(a) (b)

Figura 10: Comparación del coeficiente de transmisión usando el desarrollo de la ecuación (15) (línea azul punteada) (b), en el cual se utilizó $N = 800$, con el cálculo exacto (a) dado por(69) (línea roja continua). Para un sistema de pozo de potencial con parámetros: anchura $L = 30$ $\mathring{A}$, profundidad $V_0 = 0.5$ eV correspondiente a $\gamma = 1.4$.

En la figura 11 se muestran cinco casos de la comparación del coeficiente de transmisión exacto dado por la ecuación (69), con el coeficiente de transmisión producido por el desarrollo en serie de la ecuación (28). En (a) se muestra el coeficiente de transmisión utilizando en el desarrollo: $N = 0$, $L = 0$ y $M = 1$. En este caso, en comparación a la figura 8 (a), el estado antiligado tiene una aportación mayor al desarrollo. En el inciso (b) se utilizó $N = 0$, $L = 1$ y $M = 0$ en el desarrollo. Al igual que el estado antiligado, el estado ligado aporta una cantidad más grande al desarrollo que en la figura 8 (b). En el inciso (c) se utilizaron los estados ligado y antiligado, esto es $N = 0$, $L = 1$ y $M = 1$. En este caso la gráfica es muy parecida a la de la figura 8 (c), pero debido a que los estados ligado y antiligado cambiaron de posición, la gráfica cambia ligeramente. En (d) se utiliza $N = 20$, $L = 1$ y $M = 1$ y observamos que la comparación de ambas gráficas sigue siendo buena como en la figura 8 (d), pero al comparar los dos casos, notamos que en el de la gráfica en cuestión, el caso aproximado es menos parecido al exacto, que en la figura 8 (d). En (e) se utilizó $N = 800$, $L = 1$ y $M = 1$, lo que resultó en que ambas gráficas se traslapen, pero fueron necesarias el doble de resonancias que en el caso de la figura 8 (d) para obtener este resultado.

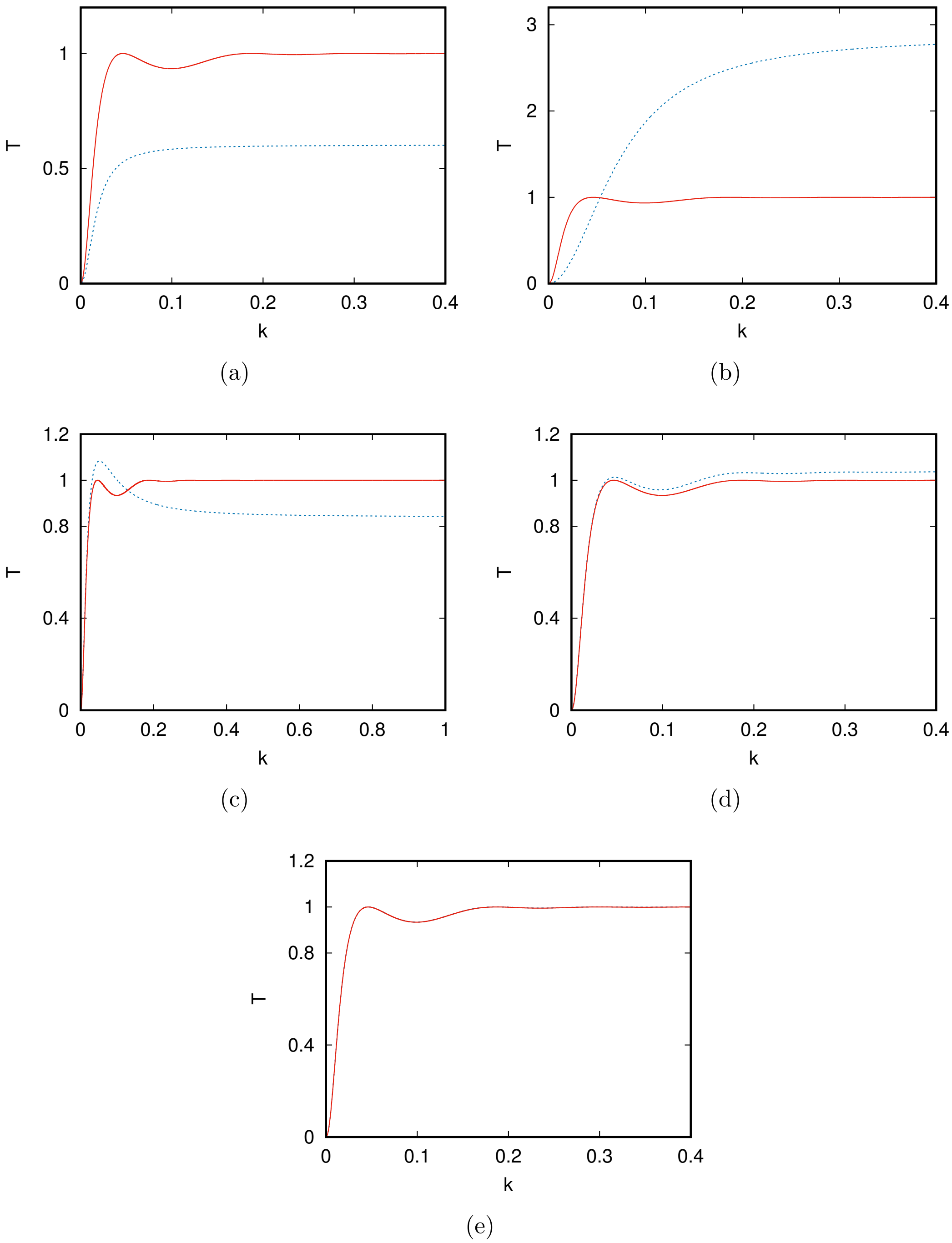


Figura 11: Comparación del coeficiente de transmisión usando la solución aproximada de la ecuación (28) (línea azul punteada), con el cálculo exacto dado por (69) (línea roja continua), para un sistema de pozo de potencial con parámetros: anchura $L = 30$ Å, profundidad $V_0 = 0.5$ eV, correspondientes a $\gamma = 1.4$, donde además de las resonancias existe un estado ligado y uno antiligado. El número de términos utilizados en el desarrollo de cada caso fueron: (a) $N = 0$, $L = 0$ y $M = 1$, (b) $N = 0$, $L = 1$ y $M = 0$, (c) $N = 0$, $L = 1$ y $M = 1$, (d) $N = 20$, $L = 1$ y $M = 1$, (e) $N = 800$, $L = 1$ y $M = 1$.

En las figuras 7 (b) y 10 (b) vemos que no es suficiente solo considerar las resonancias para describir adecuadamente el coeficiente de transmisión, aún considerando un gran número de estos estados. Por lo tanto, al utilizar el desarrollo de la ecuación (15), no es posible obtener una reproducción del coeficiente de transmisión, sin importar el número de resonancias que se incluyan en el desarrollo. Por otro lado, en las figuras 8 (e) y 11 (e), las gráficas del coeficiente de transmisión aproximado y el exacto coinciden entre sí, debido a que se utilizó el desarrollo de la ecuación (28), donde se incluyen los estados ligados y antiligados del sistema. En estos dos casos de un pozo de potencial, aparece un estado ligado y uno antiligado en su correspondiente distribución de polos, por lo que el comportamiento del desarrollo al incluir estos polos es similar. En las figuras 8 (a) y 11 (a), observamos que la aportación del estado antiligado en el desarrollo de (28) es menor que lo que aporta el estado ligado de las figuras 8 (b) y 11 (b), esto se debe a que el estado ligado se encuentra posicionado más arriba que el estado antiligado en el eje imaginario del plano k. Al incluir ambos estados en el desarrollo, como vemos en las figuras 8 (c) y 11 (c), en vez de que la gráfica se eleve más, ésta se ajusta a una forma más parecida a la del coeficiente de transmisión exacto. Esto se debe a que al calcular el modulo cuadrado del desarrollo para obtener el coeficiente de transmisión, el término de interferencia del estado ligado con el estado antiligado genera una contribución negativa que ocasiona que la gráfica no se eleve aún más, como se esperaría. Dado lo anterior, es necesario incluir muchas más resonancias que en los casos anteriores para tener una descripción correcta, pero el estado ligado y antiligado son indispensables.

En los dos casos anteriores vimos que es necesario utilizar todos los estados correspondientes a la configuración del pozo de potencial para obtener el resultado deseado, ahora veamos que pasa con valores de γ un poco mayores. En la sección anterior vimos que para $\gamma = \frac{\pi}{2}$ hay dos estados ligados, por lo que el estado antiligado de los casos anteriores cruza al lado positivo del eje imaginario k al aumentar un poco el valor de γ.

Al continuar aumentando el valor de γ, el estado antiligado que aparece en el ejemplo anterior para $\gamma = 1.4$, sube a la parte positiva del eje imaginario positivo y por lo tanto se vuelve un estado ligado. Con el proposito de estudiar si este cambio de estado antiligado a estado ligado tiene repercusión en el desarrollo, veremos el caso para $\gamma = 1.81$, donde este cambio ya ha ocurrido. En la figura 12 se muestra la distribución de los polos para $\gamma = 1.81$. El estado antiligado que está presente en la figura 9, sube por el eje imaginario hasta convertirse en un estado ligado, mientras que las resonancias continuan subiendo y acercandose más entre ellas como en los casos anteriores.

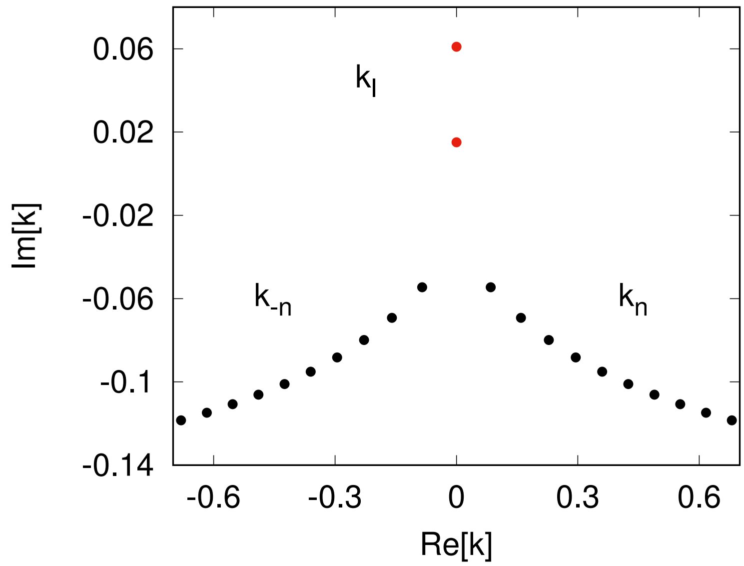
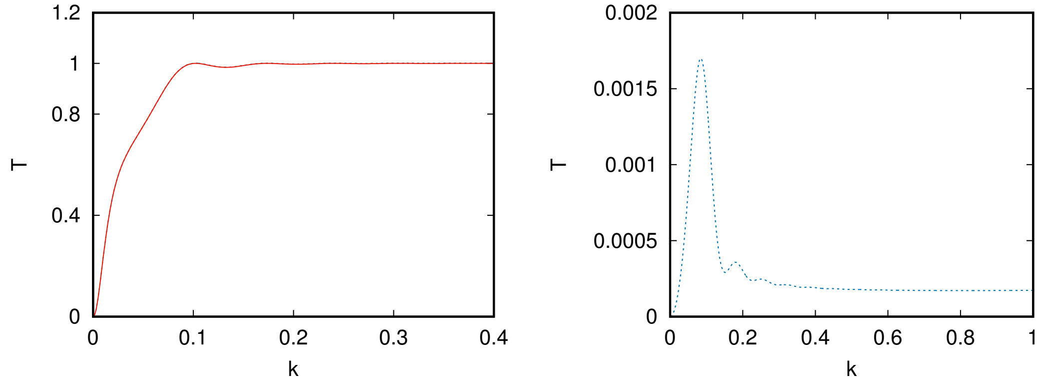


Figura 12: Distribución de los polos del pozo de potencial en el plano complejo k con parámetros: anchura $L = 50$ $\AA$, profundidad $V_0 = 0.3$ eV, correspondientes a $\gamma = 1.81$. En el tercer y cuarto cuadrante se encuentran las primeras diez resonancias k_n y k_{-n} (círculos negros) respectivamente. En la parte positiva del eje imaginario aparecen dos estados ligados k_l (círculos rojos), donde el estado ligado $l = 1$ es raíz de la ecuación (40) y el estado ligado $l = 2$ de la ecuación (44).

En la figura 13 se muestra la comparación del coeficiente de transmisión exacto (a), con el coeficiente de transmisión en el que se utiliza el desarrollo en estados resonantes (b) de la ecuación (15), donde se utilizó $N = 1500$. Como podemos apreciar al comparar ambas gráficas, de igual forma que en los casos anteriores, el desarrollo de estados resonantes (15) no logra reproducir el coeficiente de transmisión exacto. Como vimos en la figura 12, el pozo de potencial con estos parámetros además de los estados resonantes tiene dos estados ligados.



(a) (b)

Figura 13: Comparación del coeficiente de transmisión usando el desarrollo de la ecuación (15) (línea azul punteada)(b), en el cual se utilizó $N = 1500$, con el cálculo exacto (a) dado por (69) (línea roja continua). Para un sistema de pozo de potencial con parámetros: anchura $L = 50$ $\mathring{A}$, profundidad $V_0 = 0.3$ eV, correspondientes a $\gamma = 1.81$

Ahora veremos la influencia que tienen los estados ligados en el desarrollo de la ecuación (28) para la previa configuración de pozo de potencial. En la figura 14 se muestran cinco casos de la comparación del coeficiente de transmisión exacto dado por la ecuación (69), con el coeficiente de transmisión producido por el desarrollo en serie de la ecuación (28). El primer caso es el inciso (a), donde se muestra el coeficiente de transmisión utilizando los siguientes terminos en el desarrollo: $N = 0$, $L = 1$ y $M = 0$ donde se incluyó el estado ligado $l = 1$. En este caso, en comparación a la figura 8 (a) y la figura 11 (a), el estado ligado (estado antiligado en los casos anteriores) tiene una aportación aún mas grande en el desarrollo. Esto se debe a que el polo a incrementado de posición en el plano k y a que el valor de γ es mayor. En el inciso (b) se utilizó $N = 0$, $L = 1$ y $M = 0$ donde se incluyó el estado ligado $l = 2$. El estado ligado en este caso aporta una cantidad más grande a la gráfica que en la figura 8 (b) y la figura 11 (a). Aunque este estado haya disminuido de posición en el eje imaginario del plano k, su contribución al desarrollo ha ido aumentando, debido al incremento de γ. En el inciso (c) se utilizaron los dos estados ligados, esto es $N = 0$, $L = 2$ y $M = 0$. En este caso la gráfica es muy parecida a la del coeficiente de transmisón exacto, debido a que la aportación que le falta al desarrollo es la de los estados resonantes de la figura 13 (b), y esta aportación es muy pequeña, En (d) se utiliza $N = 20$, $L = 2$ y $M = 0$ y observamos que la compración de ambas gráficas sigue siendo buena como en las figuras 8 (d) y 11 (d), pero debido a que los estados resonantes tienen una aportación menor en el desarrollo conforme γ aumenta, es necesario agregar más de éstos. En (e) se utilizó $N = 1500$, $L = 2$ y $M = 0$, lo que resultó en que ambas gráficas coincidan, pero se incluyeron más resonancias al desarrollo.

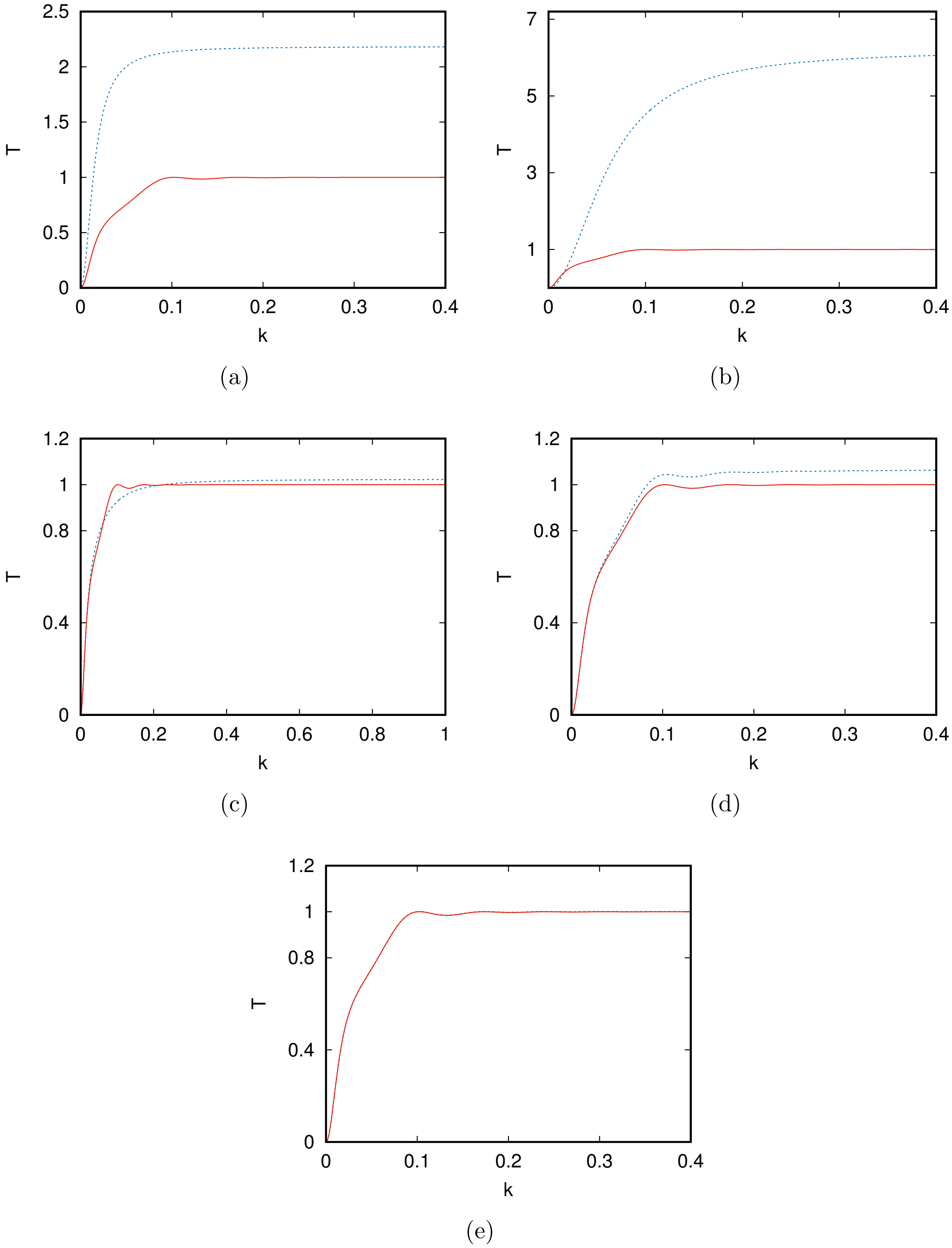


Figura 14: Comparación del coeficiente de transmisión usando la solución aproximada de la ecuación (28) (línea azul punteada), con el cálculo exacto dado por (69) (línea roja continua), para un sistema de pozo de potencial con parámetros: anchura $L = 50$ $\mathring{A}$, profundidad $V_0 = 0.3$ eV, correspondientes a $\gamma = 1.81$, donde además de las resonancias aparecen dos estados ligados. El número de términos utilizados en el desarrollo de cada caso fueron: (a) $N = 0$, $L = 1$ y $M = 0$ donde se incluyó el estado ligado $l = 1$, (b) $N = 0$, $L = 1$ y $M = 0$ donde se incluyó el estado ligado $l = 2$, (c) $N = 0$, $L = 2$ y $M = 0$, (d) $N = 20$, $L = 2$ y $M = 0$, (e) $N = 1500$, $L = 2$ y $M = 0$.

En la distribución de polos para el caso previo, la cual se muestra en la figura 12, vemos que a diferencia de los casos anteriores de las figuras 6 y 9, aparecen dos estados ligados. A pesar de este cambio, sigue siendo imposible aproximar el coeficiente de transmisión utilizando el desarrollo de estados resonantes (15), como se observa en la figura 13. El hecho de que ahora haya dos estados ligados en vez de un estado ligado y uno antiligado, no provoca un cambio relevante en la aportación que tienen en el desarrollo, lo que provoca un cambio, es la posición que el estado tiene en el eje imaginario del plano k, así como el valor γ del pozo. En la figura 14 (a) vemos que la aportación del primer estado ligado es mayor que el coeficiente de transmisión exacto, y en la figura 14 (b) vemos que la aportación del segundo estado ligado es mayor que la aportación del primer estado ligado, debido a que el segundo estado se encuentra más arriba en el plano k. En la figura 14 (c) ocurre lo mismo que en las figuras 8 (c) y 11 (c), el término de interferencia entre los estados ligados provoca que la gráfica se ajuste y tome una forma parecida al coeficiente exacto, por lo que solo es necesario incluir los estados resonantes en el desarrollo de la ecuación (28) para reproducir el coeficiente de transmisión, como es mostrado en la figura 14 (e).

El siguiente caso ocurre si aumentamos aún más el valor de γ a $\gamma = 3.15$, donde aparece un estado ligado y un estado antiligado más, los dos pertenecientes a la ecuación (44). En la figura 15 se muestra la distribución de los polos para el parámetro $\gamma = 3.15$, las primeras diez resonancias k_n y k_{-n}, los tres estados ligados k_l y el único estado antiligado k_m se muestran en la figura. Como vemos en la figura, este caso es completamente distinto a los anteriores y es importante analizarlo para observar si el comportamiento en el desarrollo de estados resonantes, estados ligados y antiligados sigue siendo similar.

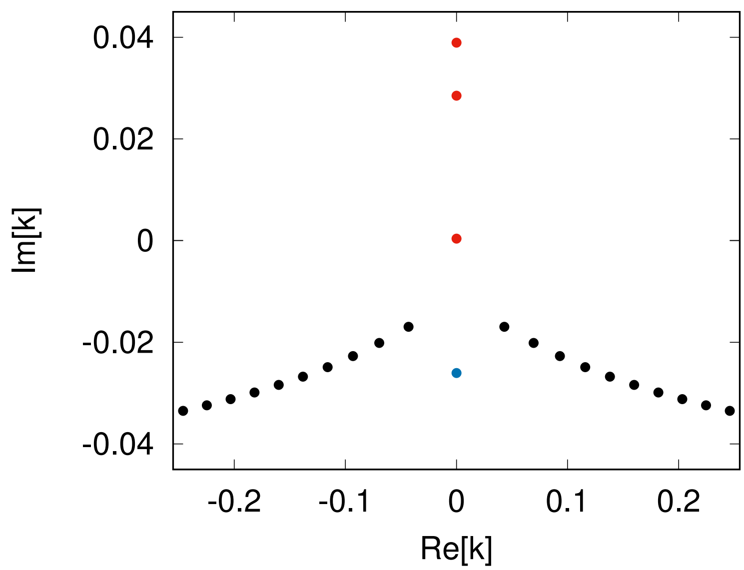
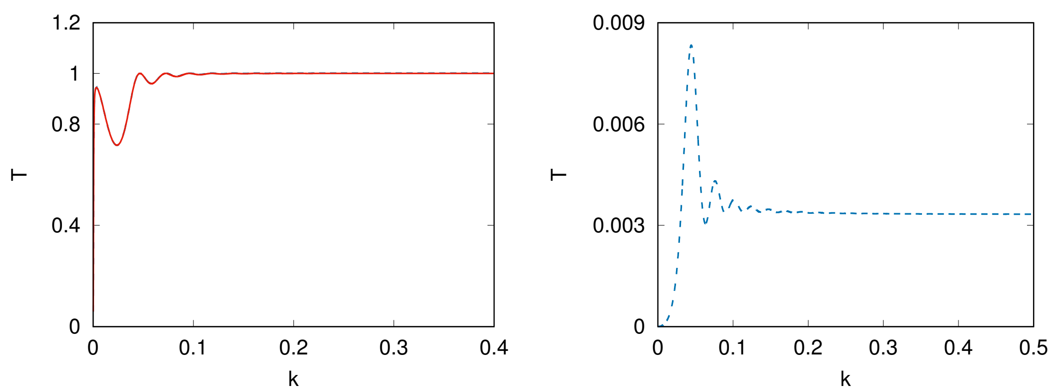


Figura 15: Distribución de los polos del pozo de potencial en el plano complejo k, con parámetros: anchura $L = 150$ Å, profundidad $V_0 = 0.1$ eV y $\gamma = 3.15$. En el tercer y cuarto cuadrante se encuentran las primeras diez resonancias (círculos negros) k_n y k_{-n} respectivamente. En la parte positiva del eje imaginario se encuentran 3 estados ligados (círculos rojos) k_l y en la negativa del mismo, un estado antiligado (círculo azul) k_m. Los estados ligados $l = 1$, $l = 3$ y el estado antiligado $m = 1$ son dados por la ecuación (44) y el estado ligado $l = 2$ por la ecuación (40).

Primeramente corroboramos si es posible reproducir el coeficiente de transmisión exacto al utilizar el desarrollo de estados resonantes (15). En la figura 16 se muestra la comparación del coeficiente de transmisión exacto (a), con el coeficiente de transmisión en el que se utiliza el desarrollo en estados resonantes (b) de la ecuación (15), donde se utilizó $N = 3000$. Como vimos en la figura 6, el pozo de potencial tiene tres estado ligados y un antiligado, además de los estados resonantes. Por lo tanto, al utilizar el desarrollo de la ecuación (15), no es posible reproducir correctamente el coeficiente de transmisión, porque es necesario incluir los estados ligados y antiligados, como ya se observó en los casos anteriores.



(a) (b)

Figura 16: Comparación del coeficiente de transmisión usando el desarrollo de la ecuación (15) (línea azul punteada) (b), en el cual se utilizó $N = 3000$, con el cálculo exacto (a) dado por (69) (línea roja continua). Para un sistema de pozo de potencial con parámetros: anchura $L = 150$ $\AA$, profundidad $V_0 = 0.1$ eV, correspondientes a $\gamma = 3.15$

Con la finalidad de comprobar la aportación de cada uno de los estados del caso de la figura 15 en el desarrollo, en la figura 17 se muestran cinco casos donde se compara el coeficiente de transmisión exacto (69) con el desarrollo de la ecuación (28). El primer caso es el inciso (a) donde se utilizó como término del desarrollo el único estado antiligado, $N = 0$, $L = 0$ y $M = 1$. En este caso vemos como la aportación del estado antiligado es muy pequeña, debido a que el estado antiligado se encuentra muy abajo en el eje imaginario del plano k, y conforme γ aumenta esto influye más en la contribución al desarrollo de (28). En (b) se utilizó el primer estado ligado $l = 1$ en el desarrollo, esto es $N = 0$, $L = 1$ y $M = 1$. En este caso el estado ligado aporta mucho más al desarrollo que el estado antiligado, debido a que se encuentra en una posición mayor del plano k. Por lo tanto en los incisos (c) y (d) donde se utilizó respectivamente $N = 0$, $L = 1$ y $M = 0$ incluyendo el estado ligado $l = 2$ y $N = 0$, $L = 1$ y $M = 0$ incluyendo el estado ligado $l = 3$, al tener un valor mayor en el plano k, su aportación es mucho más grande que la del estado ligado $l = 1$. En (e) se utilizaron los tres estados ligados y el estado antiligado. En esta figura vemos que al agregrar todos los estados, la gráfica del desarrollo se corrige hasta tener una forma parecida a la gráfica exacta, debido a los términos negativos que aparecen al calcular el modulo cuadrado de la amplitud de transmisión del desarrollo. En (e) se utilizó en el desarrollo $N = 3000$, $L = 3$ y $M = 1$, y observamos que la gráfica del desarrollo coincide con la gráfica del coeficiente de transmisión exacto, pero fue necesario agregar muchas más resonancias que en los ejemplos anteriores.

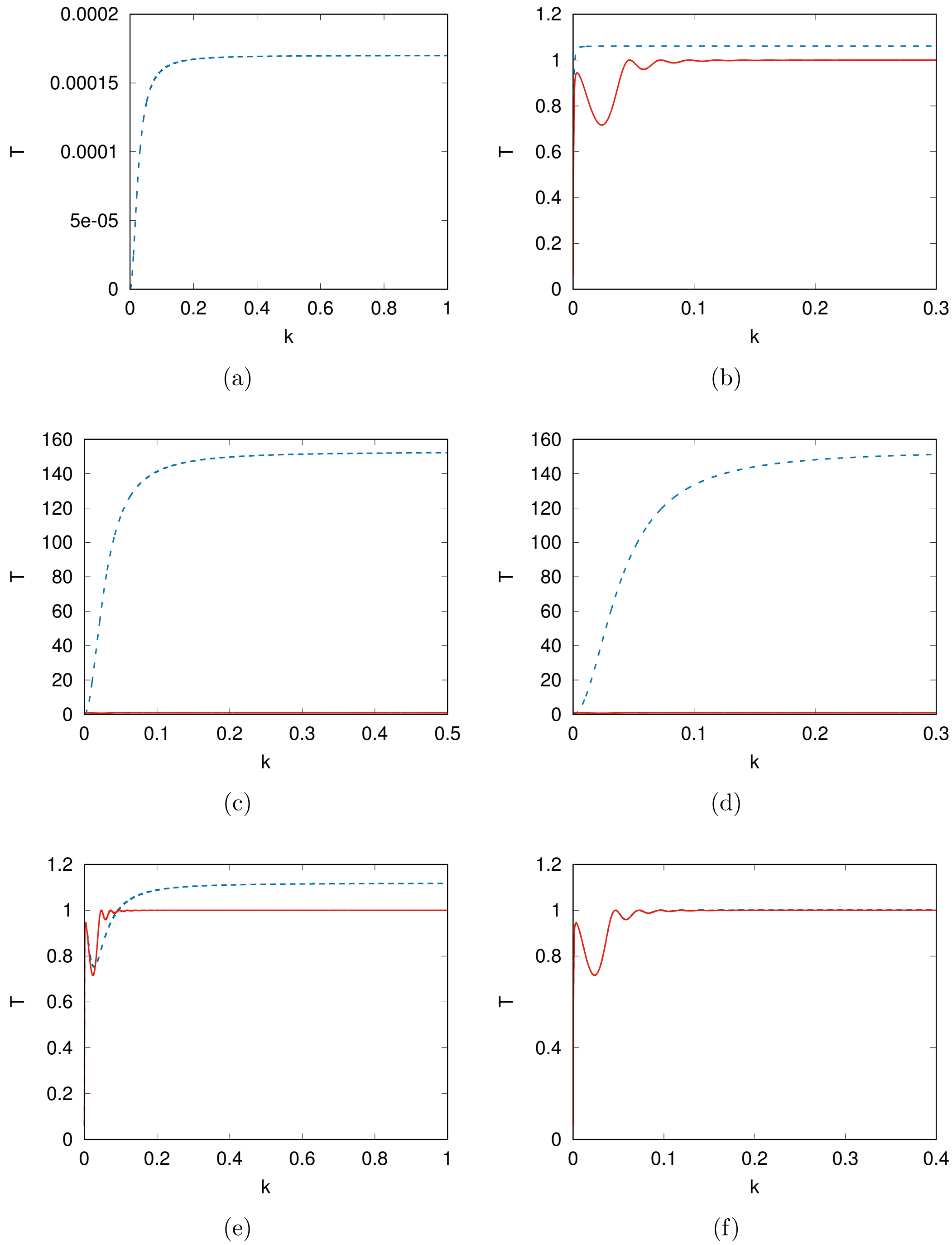
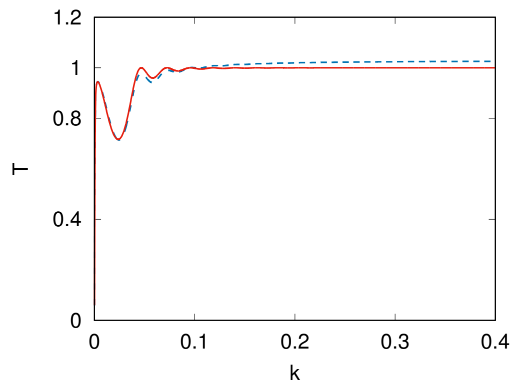


Figura 17: Comparación del coeficiente de transmisión usando el desarrollo de la ecuación (28) (línea azul punteada) y el cálculo exacto dado por (69) (línea roja continua), para un sistema de pozo de potencial con parámetros: anchura $L = 150$ $\mathring{A}$, profundidad $V_0 = 0.1$ eV y $\gamma = 3.15$, donde además de las resonancias existen tres estados ligados y uno antiligado. El número de términos utilizados en el desarrollo de cada caso fueron: (a) $N = 0$, $L = 0$ y $M = 1$, (b) $N = 0$, $L = 1$ y $M = 0$, con el estado ligado $l = 1$, (c) $N = 0$, $L = 1$ y $M = 0$, con el estado ligado $l = 2$, (d) $N = 0$, $L = 1$ y $M = 0$, con el estado ligado $l = 3$, (e) $N = 0$, $L = 3$ y $M = 1$ y (f) $N = 3000$, $L = 3$, y $M = 1$.

Como vimos en la figura 17 (a), el único estado antiligado del sistema tiene una aportación muy pequeña al desarrollo debido a su baja posición en el plano k, y conforme el valor de γ aumente los estados antiligados tendrán una menor relevancia. En la figura 18 vemos que si no incluimos el estado antiligado en el desarrollo de la ecuación (28) la gráfica del desarrollo aproximado es muy similar a la exacta pero aún es necesario incluir el estado antiligado para tener una buena aproximación, como se vio en la figura 17 (f).



(a)

Figura 18: Comparación del coeficiente de transmisión usando el desarrollo de la ecuación (15) (línea azul punteada), en el cual se utilizó $N = 3000$, $L = 3$, y $M = 0$, con el cálculo exacto dado por (69) (línea roja continua). Para un sistema de pozo de potencial con parámetros: anchura $L = 150$ $\mathring{A}$, profundidad $V_0 = 0.1$ eV, correspondientes a $\gamma = 3.15$

Para verificar qué ocurre con las aportaciones de los estados antiligados en valores de γ mayores a π, analizamos el caso de la figura 19, donde se muestra que para el valor de $\gamma = 5.75$ aparecen cuatro estados ligados y dos estados antiligados, además de las resonancias.

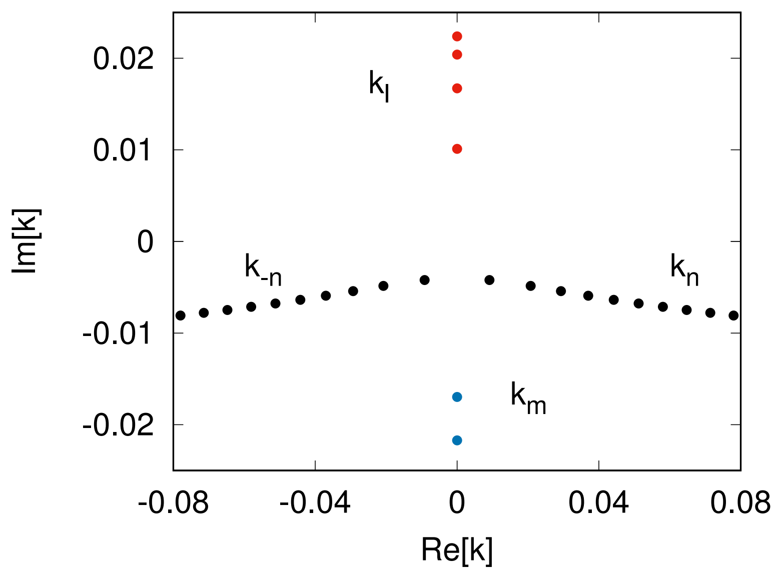
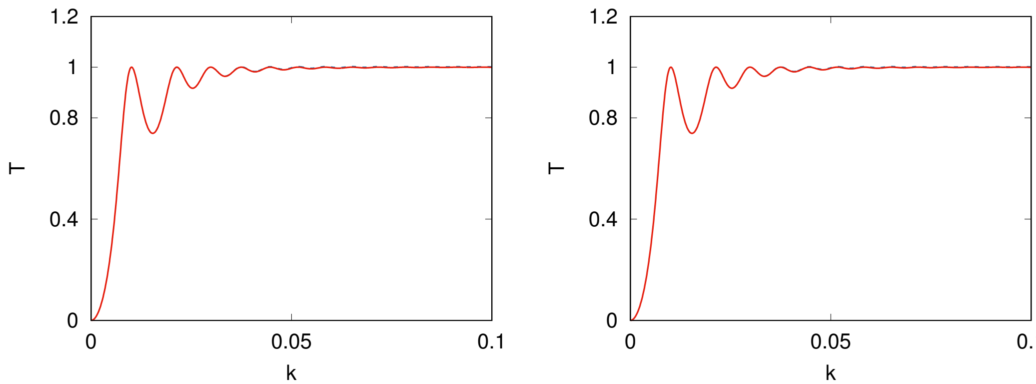


Figura 19: Distribución de los polos del sistema en el plano complejo k con parámetros: $L = 500$ $\mathring{A}$, $V_0 = 0.03$ eV y $\gamma = 5.75$. En el tercer y cuarto cuadrante se encuentran las 10 primeras resonancias (círculos negros) k_n y anti-resonancias k_{-n} respectivamente. Para este valor de γ aparecen cuatro estados ligados k_l (círculos rojos) en la parte positiva del eje imaginario y dos antiligados k_m (círculos azules) en la parte negativa del mismo.

Para poder observar las aportaciones de los estados ligados, nuevamente graficamos el desarrollo de la ecuación (28), como se observa en la figura 20. En el inciso (a) de la figura se compara el coeficiente de transmisión exacto con el coeficiente de transmisión aproximado, utilizando 6000 resonancias y los cuatro estados ligados. Como vemos las dos gráficas coinciden en la región gaficada. En el inciso (b) se comparan nuevamente los coeficientes de transmisión, pero esta vez se utilizo en el desarrollo 6000 resonancias, los cuatro estados ligados y los dos estados antiligados. Como es de esperarse las dos gráficas coinciden, ya que se utilizan todos los estados ligados y antiligados.



(a) (b)

Figura 20: Comparación del coeficiente de transmisión usando el desarrollo de la ecuación (28) (línea azul punteada) y el cálculo exacto dado por (69) (línea roja continua), para un sistema de pozo de potencial con parámetros: anchura $L = 500$ $\mathring{A}$, profundidad $V_0 = 0.03$ eV y $\gamma = 5.75$, donde además de las resonancias aparecen cuatro estados ligados y dos antiligados. El número de términos utilizados en el desarrollo de cada caso fueron: (a) $N = 6000$, $L = 4$ y $M = 0$, (b) $N = 6000$, $L = 4$ y $M = 2$.

En la figura 20 vemos que para el valor de γ correspondiente, los estados antiligados no fueron necesarios para lograr la reproducción del coeficiente de transmisión exacto del pozo de potencial. En base a lo observado en la figura 18, conforme γ aumenta, los estados antiligados aportan una menor cantidad en el desarrollo, hasta que dejan de ser necesarios para reproducir el coeficiente de transmisión. Por otro lado, como se observa en las figuras 17 (b), 17 (c) y 17 (d), los estados ligados tienen un valor mayor en el desarrollo mientras mayor sea su posición en el eje imaginario del plano k.

En general, la contribución de cada uno de los estados ligados y antiligados en el desarrollo de la ecuación (28), depende únicamente de la posición en la que se encuentre cada polo en el plano k, y de que tan grande es el valor del parámetro γ. Si γ aumenta, la aportación de cada polo en el desarrollo aumenta, y si el polo se mueve en dirección positiva del eje imaginario k, la aportación también aumenta. Por lo tanto, en valores grandes de γ donde hay varios estados ligados y antiligados, los estados ligados son los que tienen más importancia para reproducir el coeficiente de transmisión de un pozo de potencial. En las regiones de γ donde los estados antiligados se encuentran por debajo de las resonancias, éstos tienen una contribución muy pequeña en el desarrollo, debido a su posición tan baja en el eje imaginario del plano k. De igual forma, podemos decir que para $0 < \gamma \leq \pi$, los estados ligados y antiligados son cruciales para la correcta descripción del coeficiente de transmisión. En cambio para valores de γ mayores a π, los estados antiligados dejan de ser relevantes para la descripción de la transmisión conforme γ aumenta. No obstante, los estados ligados más cercanos al eje real del plano-k, conforme el valor de γ aumenta, también dejarán de ser relevantes. Resumiendo, los estados ligados y antiligados son fundamentales para la reproducción del coeficiente de transmisión, pero la importancia de cada uno de éstos radica en su posición en el plano k y el valor de γ asociado.

Capítulo 4

Conclusiones

En el presente trabajo se realizó un estudio de un formalismo no-hermitiano capaz de describir, mediante fórmulas analíticas, la amplitud de transmisión y cantidades relacionadas en sistemas que presentan un espectro de energías que consiste de estados resonantes, estados ligados y estados antiligados. Como punto de partida se tomó como base un formalismo de estados resonantes desarrollado por García-Calderón, el cual se extendió para potenciales que además de resonancias en su espectro, incluyen estados ligados y estados antiligados. Mediante este enfoque analítico, es posible representar la función de onda en la región interna del sistema por un desarrollo en términos de los polos complejos de la amplitud de transmisión (polos de la matriz S) y de los residuos en dichos polos. La extensión de este desarrollo es una de las principales aportaciones del trabajo de tesis. Las fórmulas analíticas desarrolladas, son de carácter general para potenciales unidimensionales de alcance finito. En este trabajo se aplicó el formalismo extendido al caso particular de un potencial atractivo dado por un pozo de potencial de profundidad y anchura finitas.

Para el cálculo de los polos complejos se implementó un método analítico inspirado en el trabajo de Nussenzveig (Nussenzveig, 1959) para un pozo tridimensional, mediante el cual fue posible obtener expresiones analíticas para cada una de las especies de polos del sistema: resonancias, estados ligados y estados antiligados. Para resolver dichas ecuaciones se implementó un algoritmo basado en el método de Newton-Rapshon para raíces complejas. Lo anterior nos permitió estudiar la evolución de los polos complejos en el plano k como función de los parámetros relevantes del sistema: la anchura y la profundidad del pozo.

En este trabajo se pone de manifiesto la importancia de la evolución de los polos en el estudio de la convergencia del desarrollo del coeficiente de transmisión. Se demuestra que la evolución de los polos en el plano complejo puede caracterizarse mediante un parámetro gamma ($\gamma = \frac{L}{2}\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}V_0}$), el cual es proporcional al producto de la anchura y de la profundidad del pozo. Dicho parámetro permite identificar dos regímenes importantes en la evolución de las distintas especies de polos. El primero de estos corresponde al régimen de valores de $0 < \gamma \leq \pi$, en donde se encuentra que los estados ligados y antiligados son cruciales para lograr una descripción correcta del coeficiente de transmisión. En otras palabras, en este régimen, una descripción de T(k) basada en un desarrollo que solo incluya resonancias, es insuficiente, sin importar el número de resonancias consideradas en éste. El segundo régimen corresponde a $\gamma > \pi$, en donde se encuentra los estados antiligados dejan de ser relevantes para la descripción de la transmisión conforme γ aumenta. No obstante, los estados ligados más cercanos al eje real del plano-k, conforme el valor de γ aumenta, también dejarán de ser relevantes en la descripción correcta de $T(k)$. Esto es, se demuestra que en este régimen, conforme γ aumenta, el coeficiente de transmisión es descrito adecuadamente con un desarrollo que incluye a los estados ligados que se encuentren más arriba en el eje imaginario del plano-k, es decir, no siempre serán necesarios todos los estados ligados para estos valores de γ. Sin embargo, es necesario considerar un número cada vez mayor de resonancias conforme γ aumenta.

En resumen, se obtiene un desarrollo que permite reproducir el coeficiente de transmisión exacto para potenciales que exhiban espectros con resonancias, estados ligados y antiligados. Los desarrollos presentados en este trabajo de tesis pueden ser utilizados para describir coeficientes de transmisión en sistemas de superredes finitas que incluyan un número arbitrario de pozos y barreras de potencial. Una secuela interesante de los desarrollos presentados en este trabajo, sería su aplicación en el campo de los fenómenos transitorios, en donde mediante el modelo de obturador cuántico sería posible describir la evolución temporal de ondas cuánticas en la región de transmisión de superredes finitas con pozos.

Apéndice A

Amplitud de transmisión para el pozo de potencial

En la siguiente sección resolveremos la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para el pozo de potencial mediante el método de la matriz de transferencia, para encontrar el coeficiente de transmisión.

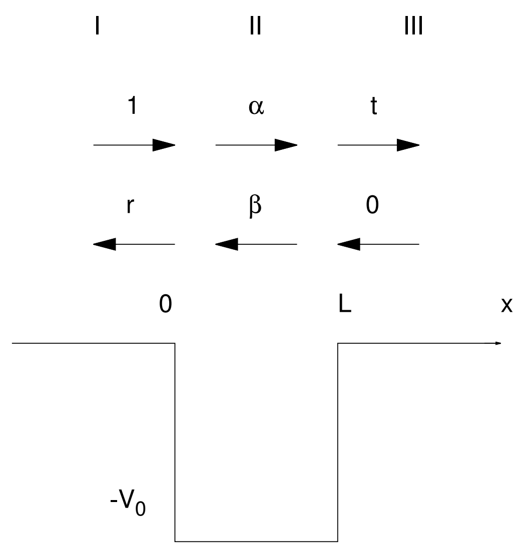


Figura 21: Pozo de potencial.

Partimos de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2}+V(x)\Psi(x)=E\Psi(x), \tag{47}$$

La solución de la ecuación (47) para las regiones I, II y III mostradas en la figura 21 están dadas por:

$$\Psi_I = e^{ikx} + re^{-ikx}; \qquad x \leq 0; \tag{48}$$

$$\Psi_{II} = \alpha e^{iqx} + \beta e^{-iqx}; \qquad 0 \leq x \geq L; \tag{49}$$

$$\Psi_{III} = te^{ikx}; \qquad x \geq L, \tag{50}$$

donde $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$, $q = \sqrt{2m(E+V_0)/\hbar^2}$ y r, α, β y t son coeficientes a determinar.

Aplicamos las condiciones de frontera entre las funciones de onda para cada región.

$$\Psi_I(0) = \Psi_{II}(0)$$

$$1 + r = \alpha + \beta \tag{51}$$

$$\Psi_I^{'}(0) = \Psi_{II}^{'}(0)$$

$$1 - r = \frac{q}{k}(\alpha - \beta) \tag{52}$$

$$\Psi_{II}(L) = \Psi_{III}(L)$$

$$\alpha e^{iqL} + \beta e^{-iqL} = te^{ikL} \tag{53}$$

$$\Psi_{II}^{'}(L) = \Psi_{III}^{'}(L)$$

$$\frac{k}{q}te^{ikL} = \alpha e^{iqL} - \beta e^{-iqL} \tag{54}$$

Sumamos y restamos las ecuaciones (53) y (54) y respectivamente obtenemos,

$$\alpha = \frac{t}{2}e^{iL(k-q)}\left(1 + \frac{k}{q}\right), \tag{55}$$

$$\beta = \frac{t}{2}e^{iL(k+q)}\left(1 - \frac{k}{q}\right). \tag{56}$$

Las ecuaciones (55) y (56) se pueden escribir en forma matricial como:

$$\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = M_1 \begin{pmatrix} t \\ 0 \end{pmatrix}, \tag{57}$$

donde,

$$M_1 = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(1+\frac{k}{q})e^{iL(k-q)} & 0 \\ \frac{1}{2}(1-\frac{k}{q})e^{iL(k+q)} & 0 \end{pmatrix}. \tag{58}$$

Ahora de igual forma con las ecuaciones (51) y (52) obtenemos,

$$1 = \frac{\alpha}{2}\left(1+\frac{q}{k}\right) + \frac{\beta}{2}\left(1-\frac{q}{k}\right), \tag{59}$$

$$r = \frac{\alpha}{2}\left(1-\frac{q}{k}\right) + \frac{\beta}{2}\left(1+\frac{q}{k}\right). \tag{60}$$

Las ecuaciones anteriores las podemos escribir de forma matricial como:

$$\begin{pmatrix} 1 \\ r \end{pmatrix} = M_2 \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}, \tag{61}$$

donde,

$$M_2 = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(1+\frac{q}{k}) & \frac{1}{2}(1-\frac{q}{k}) \\ \frac{1}{2}(1-\frac{q}{k}) & \frac{1}{2}(1+\frac{q}{k}) \end{pmatrix}. \tag{62}$$

Sustituyendo (57) en (61) resulta,

$$\begin{pmatrix} 1 \\ r \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} t \\ 0 \end{pmatrix}, \tag{63}$$

donde,

$$M = M_2 M_1, \tag{64}$$

es la matriz de transferencia.

De la ecuación (63) tenemos,

$$1 = m_{11} t, \tag{65}$$

$$r = m_{21} t. \tag{66}$$

En la ecuación (65) vemos que la amplitud de transmisión t es:

$$t = \frac{1}{m_{11}}, \tag{67}$$

donde m_{11} es,

$$m_{11} = \frac{1}{4}\left(1 + \frac{k}{q}\right)\left(1 + \frac{q}{k}\right)e^{iL(k-q)} + \frac{1}{4}\left(1 - \frac{q}{k}\right)\left(1 - \frac{k}{q}\right)e^{iL(q+k)}. \tag{68}$$

Finalmente el coeficiente de transmisión $T = |t|^2$ es:

$$T = \frac{1}{|\frac{1}{4}\left(1 + \frac{k}{q}\right)\left(1 + \frac{q}{k}\right)e^{iL(k-q)} + \frac{1}{4}\left(1 - \frac{q}{k}\right)\left(1 - \frac{k}{q}\right)e^{iL(q+k)}|^2}. \tag{69}$$

Apéndice B

Cálculo de las eigenfunciones $u_n(x)$, $v_l(x)$ y $w_m(x)$

Para calcular las eigenfunciones resonantes y las eigenfunciones correspondientes a los estados ligados y antiligados, resolveremos la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo con condiciones de frontera de onda saliente, utilizando el método de la matriz de transferencia.

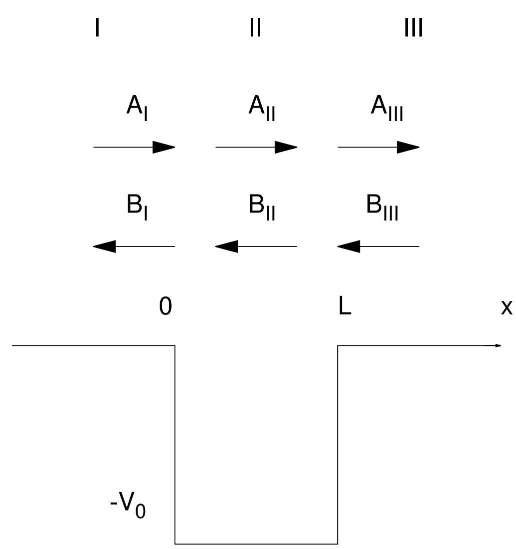


Figura 22: Pozo de potencial.

Nuestra ecuación a resolver es,

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2u(x)}{dx^2} + V(x)u(x) = Eu(x). \tag{70}$$

Las soluciones de la ecuacion (70) para las regiones I, II, III están dadas por:

$$u_I(x) = A_I e^{ik_n x} + B_I e^{-ik_n x}; \qquad x \leq 0; \tag{71}$$

$$u_{II}(x) = A_{II} e^{iq_n x} + B_{II} e^{-iq_n x}; \qquad 0 \leq x \geq L; \tag{72}$$

$$u_{III}(x) = A_{III} e^{ik_n x} + B_{III} e^{-ik_n x}; \qquad x \geq L, \tag{73}$$

donde $k_n = \sqrt{2mE_n/\hbar^2}$, $q_n = \sqrt{2m(E_n + V_0)/\hbar^2}$ y A_I, A_{II}, A_{III}, B_I, B_{II}, B_{III} son coeficientes a determinar. Las condiciones de frontera son,

$$u_I(0) = u_{II}(0); \tag{74}$$

$$u'_I(0) = u'_{II}(0); \tag{75}$$

$$u_{II}(L) = u_{III}(L); \tag{76}$$

$$u'_{II}(L) = u'_{III}(L). \tag{77}$$

Si $A_I = 0$ y $B_{III} = 0$, de las ecuaciones anteriores, se obtienen las siguientes relaciones matriciales,

$$\begin{pmatrix} A_{II} \\ B_{II} \end{pmatrix} = M_1 \begin{pmatrix} A_{III} \\ 0 \end{pmatrix} \tag{78}$$

dado M_1 como:

$$M_1 = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(1 + \frac{k}{q}) e^{iL(k-q)} & 0 \\ \frac{1}{2}(1 - \frac{k}{q}) e^{iL(k+q)} & 0 \end{pmatrix} \tag{79}$$

y

$$\begin{pmatrix} 0 \\ B_I \end{pmatrix} = M_2 \begin{pmatrix} A_{II} \\ B_{II} \end{pmatrix} \tag{80}$$

donde M_2 es:

$$M_2 = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(1+\frac{q}{k}) & \frac{1}{2}(1-\frac{q}{k}) \\ \frac{1}{2}(1-\frac{q}{k}) & \frac{1}{2}(1+\frac{q}{k}) \end{pmatrix}. \tag{81}$$

De las ecuaciones (78) y (80) tenemos,

$$\begin{pmatrix} 0 \\ B_I \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} A_{III} \\ 0 \end{pmatrix} \tag{82}$$

tal que,

$$M = M_2 M_1, \tag{83}$$

es la matriz de transferencia del sistema. De la ecuación (78) tenemos,

$$A_{II} = M_1^{11} A_{III} \tag{84}$$

y

$$B_{II} = M_1^{21} A_{III}, \tag{85}$$

mientras que de la ecuación (82) tenemos,

$$0 = m_{11} A_{III} \tag{86}$$

y

$$B_I = m_{21} A_{III}. \tag{87}$$

Para determinar los coeficientes A_{II}, A_{II} y B_I es necesario determinar A_{III} por lo que utilizamos la siguiente condición de normalización[],

$$\int_0^L u_n^2(x)dx + \frac{i}{2k_n}[u_n^2(0) + u_n^2(L)] = 1; \tag{88}$$

tomando la función de onda para la región interna tenemos:

$$I = \int_0^L u_n^2(x)dx = \int_0^L [A_{II}e^{iq_nx} + B_{II}e^{-iq_nx}]^2 dx, \tag{89}$$

de donde resulta:

$$I = \frac{A_{II}^2}{2iq_n}(e^{2iLq_n} - 1) + \frac{B_{II}^2}{2iq_n}(1 - e^{-2iLq_n}) + 2LA_{II}B_{II}, \tag{90}$$

de las ecuaciones (84) y (85) la ecuación (90) resulta:

$$I = \frac{A_{III}^2}{2iq_n}(M_1^{11})^2(e^{2iLq_n} - 1) + \frac{A_{III}^2}{2iq_n}(M_1^{21})^2(1 - e^{-2iLq_n}) + 2LA_{III}^2 M_1^{11} M_1^{21}, \tag{91}$$

como $A_I = 0$, de (71) obtenemos

$$u_n^2(0) = B_I^2 = (m_{21})^2 A_{III}^2. \tag{92}$$

Por otro lado de (73), como $B_{III} = 0$ tenemos,

$$u_n^2(L) = A_{III}^2 e^{2ik_nL}. \tag{93}$$

Sustituimos las ecuaciones (91), (92) y (93) en la ecuación (88) y obtenemos,

$$A_{III} = \left[\frac{1}{\frac{(M_1^{11})^2}{2iq_n}(e^{2iLq_n} - 1) + \frac{(M_1^{21})^2}{2iq_n}(1 - e^{-2iLq_n}) + 2LM_1^{11}M_1^{21} + \frac{i}{2k_n}[(m_{21})^2 + e^{2ik_nL}]} \right]^{\frac{1}{2}}. \tag{94}$$

Finalmente, tendremos que las eigenfunciones nos quedan como,

$$u_I(x) = m_{21}A_{III}e^{-ik_nx}; \qquad x \leq 0 \tag{95}$$

$$u_{II}(x) = M_1^{11}A_{III}e^{iq_nx} + M_1^{21}A_{III}e^{-iq_nx}; \qquad 0 \leq x \leq L \tag{96}$$

$$u_{III}(x) = A_{III}e^{ik_nx}; \qquad x \geq L. \tag{97}$$

Las cuales se expresan como función de algunos elementos de matriz y de A_{III}.

Apéndice C

Determinación de los residuos de la función de Green en los polos

En esta sección mostraremos la determinación de los residuos de la función de Green para los polos complejos k_n, los estados ligados k_l y los estados antiligados k_m. Estos residuos, originalmente calculados para los polos complejos k_n, fueron obtenidos por García-Calderón (García-Calderón y Rubio, 1997). La función de Green asociada al Hamiltoniano H satisface la ecuación

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}G^+(x,x';k)+[k^2-V(x)]G^+(x,x';k)=\delta(x-x'), \tag{98}$$

con condiciones de frontera $x=0$ y $x=L$ dadas, respectivamente por

$$\left[\frac{\partial}{\partial x}G^+(x,x';k)\right]_{x=0}=-ikG^+(0,x';k) \tag{99}$$

y

$$\left[\frac{\partial}{\partial x}G^+(x,x';k)\right]_{x=L}=ikG^+(L,x';k). \tag{100}$$

Para una resonancia k_n podemos escribir:

$$G^+(x,x';k)=\frac{r_n(x,x')}{k-k_n}+\chi(x,x';k), \tag{101}$$

donde $r_n(x, x'; k)$ es el residuo correspondiente al polo y $\chi(x, x'; k)$ es una función regular. Sustituyendo la ecuación (101) en (98), obtenemos

$$\begin{aligned} \frac{1}{k - k_n} \left\{ \frac{\partial^2 r_n(x, x')}{\partial x^2} + [k^2 - V(x)] r_n(x, x') \right\} \\ + \left\{ \frac{\partial^2 \chi(x, x'; k)}{\partial x^2} + [k^2 - V(x)] \chi(x, x'; k) \right\} \\ - \delta(x - x') = 0. \end{aligned} \tag{102}$$

Al sumar y restar $k_n^2 r_n(x, x')/(k - k_n)$ en la ecuación (102) y tomar el límite $k \to k_n$ obtenemos las siguientes dos ecuaciones:

$$\frac{\partial^2 r_n(x, x')}{\partial x^2} + [k_n^2 - V(x)] r_n(x, x') = 0 \tag{103}$$

y

$$\frac{\partial^2 \chi(x, x'; k_n)}{\partial x^2} + [k_n^2 - V(x)] \chi(x, x'; k_n) + 2 k_n r_n(x, x') = \delta(x - x'). \tag{104}$$

Ahora sustituyendo la ecuación (101) en las condiciones de frontera dadas por las ecuaciones (99) y (100), sumando y restando $i k_n r_n(x, x')/(k - k_n)$ y tomando el límite $k \to k_n$ obtenemos:

$$\left[\frac{\partial}{\partial x} r_n(x, x') \right]_{x=0} = -i k_n r_n(0, x'), \tag{105}$$

$$\left[\frac{\partial}{\partial x} \chi(x, x'; k_n) \right]_{x=0} = -i k_n \chi(0, x'; k_n) - i r_n(0, x'), \tag{106}$$

$$\left[\frac{\partial}{\partial x} r_n(x, x') \right]_{x=L} = -i k_n r_n(L, x'), \tag{107}$$

$$\left[\frac{\partial}{\partial x} \chi(x, x'; k_n) \right]_{x=L} = -i k_n \chi(L, x'; k_n) - i r_n(L, x'). \tag{108}$$

Observamos que la expresión $r_n(x,x')$ cumple las condiciones de frontera de onda saliente (99) y (100), por lo tanto, proponemos:

$$r_n(x,x') = u_n(x)P(x'). \tag{109}$$

Como $r_n(x,x')$ cumple con la ecuación (103) por tanto $u_n(x)$ la cumple también:

$$\frac{d^2u_n(x)}{dx^2} + [k_n^2 - V(x)]u_n(x) = 0. \tag{110}$$

Entonces $u_n(x)$ cumple también con las condiciones de frontera de onda saliente siguientes:

$$\left[\frac{d}{dx}u_n(x)\right]_{x=0} = -ik_nu_n(0) \tag{111}$$

y

$$\left[\frac{d}{dx}u_n(x)\right]_{x=L} = ik_nu_n(L). \tag{112}$$

Podemos obtener una expresión explícita para $P(x')$ multiplicando la ecuación (104) por $u_n(x)$ y la ecuación (110) por $\chi(x,x',k_n)$, restandolas e integrando desde $x=0$ a $x=L$:

$$\begin{aligned}\left[u_n(x)\frac{\partial}{\partial x}\chi(x,x';k_n) - \chi(x,x';k_n)\frac{d}{dx}u_n\right]_0^L& \\ +2k_n\int_0^L u_n(x)r_n(x,x')dx& \\ = \int_0^L u_n(x)\delta(x-x')dx.&\end{aligned} \tag{113}$$

Usando las ecuaciones (111), (112), (106), (108) y (109) en la ecuación (113) resulta:

$$P(x') = \frac{u_n(x')}{2k_n\left\{\int_0^L u_n^2(x)dx + i[u_n^2(0)+u_n^2(L)]/2k_n\right\}} \tag{114}$$

Entonces el residuo de la función de Green $G^{+}(x,x';k)$ para una resonancia k_n está dado por:

$$r_n(x,x') = \frac{u_n(x)u_n(x')}{2k_n}\left\{ \int_0^L u_n^2(x)dx + \frac{i}{2k_n}[u_n^2(0)+u_n^2(L)] \right\}, \tag{115}$$

donde las funciones $u_n(x)$ tienen la siguiente normalización:

$$\int_0^L u_n^2(x)dx + i\frac{u_n^2(0)+u_n^2(L)}{2k_n} = 1. \tag{116}$$

Realizando el procedimiento anterior para un estado ligado k_l y un estado antiligado k_m podemos obtener los residuos de la función de Green

$$r_l(x,x') = \frac{v_l(x)v_l(x')}{2k_l}\left\{ \int_0^L v_l^2(x)dx + \frac{i}{2k_l}[v_l^2(0)+v_l^2(L)] \right\}, \tag{117}$$

$$r_m(x,x') = \frac{v_m(x)v_m(x')}{2k_m}\left\{ \int_0^L v_m^2(x)dx + \frac{i}{2k_m}[v_m^2(0)+v_m^2(L)] \right\}, \tag{118}$$

donde las funciones $v_l(x)$ y $v_m(x)$ corresponden a un estado ligado y un estado antiligado respectivamente y siguen la misma normalización que las funciones $u_n(x)$.

Apéndice D

Relación de la función de onda con la función de Green

Podemos derivar una relación entre la función de onda $\Psi(x,k)$ y la función de Green $G^{+}(x,x';k)$ del sistema. Esto permite establecer una conexión entre los problemas de dispersión y el espectro del sistema para potenciales de alcance finito. Dicha relación fue obtenida por García-Calderón (García-Calderón, 1987), y surge como un resultado matemático después de manipular la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para un potencial arbitrario $V(x)$. En mecánica cuántica, el problema típico de dispersión en una dimensión de una partícula de momento k, involucra la solución de la ecuación de Schrodinger, la cual puede escribirse como:

$$\frac{d^2\Psi(x,k)}{dx^2} + [k^2 - V]\Psi(x,k) = 0, \tag{119}$$

perteneciente a una partícula que incide sobre el potencial por un lado, con una amplitud de transmisión $t(k)$ y una amplitud de reflexión $r(k)$, donde hemos definido $V = [2mV(x)/\hbar^2]$. Consideremos el pozo de potencial unidimensional de profundidad $V(x) = -V_0$ en $0 \leq x \leq L$. Fuera de la región del potencial, la solución es una combinación lineal de funciones e^{ikx} y e^{-ikx}, las cuales podemos escribir como:

$$\Psi(x,k) = e^{ikx} + re^{-ikx} \qquad\qquad x \leq 0, \tag{120}$$

$$\Psi(x,k) = te^{ikx} \qquad\qquad x \geq L. \tag{121}$$

Por otro lado, la función de Green satisface la siguiente ecuación diferencial,

$$\frac{d^2G^+(x,x';k)}{dx^2} + [k^2 - V]G^+(x,x';k) = \delta(x-x'). \tag{122}$$

La función $G^+(x,x';k)$ satisface las siguientes condiciones de frontera de onda saliente en $x=0$ y $x=L$,

$$\frac{dG^+(0,x';k)}{dx} = -ikG^+(0,x';k), \tag{123}$$

$$\frac{dG^+(L,x';k)}{dx} = ikG^+(L,x';k). \tag{124}$$

Multiplicamos (119) por $\Psi(x,k)$, (122) por $G^+(x,x';k)$, y las restamos para obtener:

$$\Psi(x,k)\frac{d^2G^+(x,x';k)}{dx^2} - G^+(x,x';k)\frac{d^2\Psi(x,k)}{dx^2} = \Psi(x,k)\delta(x-x'). \tag{125}$$

Integramos lo anterior en la región del potencial y obtenemos,

$$\begin{aligned} &\Psi(L,k)\frac{dG^+(L,x';k)}{dx} - G^+(L,x';k)\frac{d\Psi(L,k)}{dx} \\ &-\Psi(0,k)\frac{dG^+(0,x';k)}{dx} + G^+(0,x';k)\frac{d\Psi(0,k)}{dx} = \Psi(x',k). \end{aligned} \tag{126}$$

Aplicando las condiciones de $\Psi(x)$ y $\frac{d\Psi}{dx}$ en los extremos del sistema, y las condiciones de frontera de onda saliente para la función $G^+(x,x';k)$, después de algunas manipulaciones algebraicas obtenemos la expresión,

$$\Psi(x', k) = 2ikG^+(0, x'; k), \qquad 0 \leq x \leq L. \tag{127}$$

Esta relacion fue derivada por García-Calderón (García-Calderón, 1987) y su importancia radica en que es posible conectar el problema de dispersión y el de estados resonantes. Evaluamos $\Psi(x', k)$ y (121) en L para obtener la relación para la amplitud de transmisión,

$$t(k) = 2ike^{-ikL}G^+(0, L; k). \tag{128}$$

Utilizando el desarrollo en serie para el propagador de Green $G^+(x, x'; k)$ de la ecuación (21), y las relaciones (22), (23) y (9), podremos obtener los desarrollos en estados resonantes, estados ligados y antiligados para la función de onda $\psi(x, k)$ y la amplitud de transmisión $t(k)$.

Bibliografía

G. Gamow. Zur quantentherie des atomkernes. *Z. Phys.*, 51:204–212, 1928.

García-Calderón. The effect of asymetry on resonant tunneling. *Solid State Commun*, 62:441, 1987.

García-Calderón y R. E. Peierls. Resonant states and their uses. *Nucl. Phys.*, A 265:443, 1976.

García-Calderón, R. Romo, y A. Rubio. Description of overlapping resonances in multibarrier tunneling structures. *Phys. Rev.*, B 47:9572, 1993.

García-Calderón y A. Rubio. Characteristic times for resonant tunneling in one dimension. *Phys. Rev.*, B 36:4462, 1987.

García-Calderón y A. Rubio. Transient effects and delay time in the dynamics of resonant tunneling. *Phys. Rev.*, A 55:3361, 1997.

García-Calderón, A. Rubio, y R. Romo. Decay widths for double-barrier resonant tunneling. *J. Appl. Phys.*, 69:3612–3615, 1991.

García-Calderón y J. Villavicencio. Effect of antibound states in single barrier tunneling. *Phys. Rev.*, A 71:024103, 2005.

Nussenzveig. The poles of the s-matrix of a rectangular potential well or barrier. *Nuclear Physics*, 11:499–521, 1959.

R. Romo y J. Villavicencio. Dynamical description of the buildup process in resonant tunneling: evidence of exponential and non-exponential contributions. *Phys. Rev.*, B 60:R2142, 1999.

R. Romo, J. Villavicencio, y García-Calderón G. Transient tunneling effects of resonance doublets in triple barrier systems. *Phys. Rev.*, B 66:033108, 1999.

L. Siero. Estudios de convergencia de la función de green y desarrollo de la función de onda en una dimensión. 2000.

John R. Taylor. *Scattering Theory.* Dover Publications, 1972.

J. Villavicencio. *Fenómenos transitorios de la evolución temporal en estructuras cuánticas.* Tesis Doctoral, CICESE, 2000.

J. Villavicencio y R. Romo. Dynamical analysis of the buildup process near resonance. *Appl. Phys.*, Lett. 77:379, 2000.