

**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE BAJA CALIFORNIA**

**FACULTAD DE CIENCIAS**



**DESCRIPCIÓN DE LA FUNCIÓN DE ONDA MEDIANTE  
UN DESARROLLO EN ESTADOS RESONANTES PARA EL  
POTENCIAL DOBLE DELTA DE DIRAC**

**TESIS**

**Que para obtener el título de**

**Licenciado en Matemáticas Aplicadas**

**Presenta**

**Julio Román Durán Camacho**

**Ensenada, Baja California.**

**Enero del 2000.**

**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE BAJA CALIFORNIA**

**FACULTAD DE CIENCIAS**

**DESCRIPCIÓN DE LA FUNCIÓN DE ONDA MEDIANTE  
UN DESARROLLO EN ESTADOS RESONANTES PARA EL  
POTENCIAL DOBLE DELTA DE DIRAC**

**TESIS PROFESIONAL**

**QUE PRESENTA**

**JULIO ROMÁN DURÁN CAMACHO**

**APROBADO POR:**



**Dr. ROBERTO ROMO MARTÍNEZ**  
**Presidente del jurado**



**M. C. JORGE ALBERTO VILLAVICENCIO AGUILAR**  
**Secretario**



**M. C. ALBERTO HERNÁNDEZ MALDONADO**  
**1er Vocal**

# DEDICATORIA

A mis padres Evaristo y Tere,...

Dios los bendiga ahora y siempre...

## AGRADECIMIENTOS

Agradezco al Dr. Alberto Rubio, que en paz descansa, quien inició este proyecto de tesis. Al Dr. Roberto Romo y al M. en C. Jorge Villavicencio, por dedicarle parte de su valioso tiempo a la continuación y conclusión de este trabajo. Gracias al M. en C. Alberto Hernández por la revisión del trabajo.

A los profesores y personal administrativo de la Facultad de Ciencias que contribuyeron en mi formación, a todos ellos gracias.

Gracias a todos mis compañeros que me apoyaron sin interés alguno durante la carrera, y por hacer de esta etapa universitaria la mejor de mi vida. En especial: a mis amigos de Reltop.Org, you know how much I love you; a toda la raza de la carrera de Física; y a mis compañeros de la carrera, Yee y Siero.

El deporte es parte importante en la formación completa de todo ser, gracias a los surfers de la Facultad de Ciencias: Eri, Sinue y Gamal. A los surfers de “ayer, hoy y siempre” de Bahía Tortugas: Beko, Curry, Pay y Peter. A los surfers “Generation Next”, también de Bahía Tortugas: Jonnas, Carlitos, Tato, Christopher, Cristian.

Gracias a toda mi familia por su apoyo no condicional. A mis hermanos: Rigo, Rubén y Jonnas; a mi hermana Eva; a mis cuñadas Elena y Oralia, y a mi cuñado Chito. A mis sobrinos: Rubencito, Omarcito, Evaristo, Francisco, Mariana, Teresita, Emilia, Alejandra y Draisi.

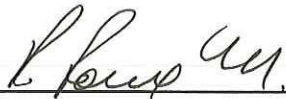
Dios,... tu me conoces y entiendes... GRACIAS.

Julio Román Durán Camacho  
“ Surfing Forever “

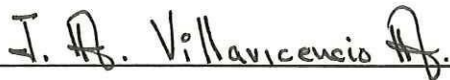
RESUMEN de la tesis de **JULIO ROMÁN DURÁN CAMACHO** presentada como requisito parcial para la obtención de la Licenciatura en **MATEMÁTICAS APLICADAS**. Ensenada, Baja California, México. Enero del 2000.

**DESCRIPCIÓN DE LA FUNCIÓN DE ONDA MEDIANTE UN  
DESARROLLO EN ESTADOS RESONANTES PARA EL  
POTENCIAL DOBLE DELTA DE DIRAC**

Resumen aprobado por:



**Dr. ROBERTO ROMO MARTÍNEZ**



**M. C. JORGE ALBERTO VILLAVICENCIO AGUILAR**

Se presenta un estudio del desarrollo de la función de onda en términos de los estados resonantes para la región interna del potencial doble delta de Dirac. Se propone un criterio de comparación, el cual nos permite describir cuantitativamente el grado de proximidad entre el cálculo exacto y el basado en el desarrollo en estados resonantes. Con base en dicho criterio se realiza un estudio sistemático para diferentes configuraciones del potencial, considerando casos con energías de incidencia, tanto en resonancia como fuera de ella. Se encuentran regularidades en algunas cantidades relevantes que dependen de los parámetros del sistema. Tales regularidades proveen criterios que pueden ser útiles en otros tipos de estudios, y en general, contribuyen al conocimiento de los aspectos básicos de la física en estructuras cuánticas resonantes.

## LISTA DE FIGURAS

Figura 3.1.....	12
Gráfica del coeficiente de transmisión $T(E)$ como función de la energía, para el potencial doble delta con parámetros $(\lambda, L) = (50, 50)$ .	
Figura 3.2.....	13
Gráfica del coeficiente de transmisión $T(E)$ como función de la energía, para el potencial doble delta con parámetros $(\lambda, L) = (1, 50)$ .	
Figura 3.3.....	16
Esquema del potencial doble delta de Dirac simétrico.	
Figura 4.1.....	25
Gráfica del cálculo exacto (línea continua) y cálculo aproximado mediante el desarrollo en estados resonantes con sólo un término (línea discontinua), para el potencial con parámetros $(10, 30)$ con incidencia en resonancia $E = \epsilon_1 = 0.3492$ eV, con 97.7% de proximidad.	
Figura 4.2.....	25
Gráfica del cálculo exacto (línea continua) y cálculo aproximado mediante el desarrollo en estados resonantes con sólo un término (línea discontinua), para el potencial con parámetros $(5, 60)$ con incidencia en resonancia $E = \epsilon_1 = 0.0873$ eV, con 97.7% de proximidad.	
Figura 4.3.....	27
Gráfica del cálculo exacto (línea continua) y cálculo aproximado mediante el desarrollo en estados resonantes con sólo un término (línea discontinua), para el potencial con parámetros $(3, 100)$ con incidencia en resonancia $E = \epsilon_1 = 0.314$ eV, con 97.7% de proximidad.	
Figura 4.4.....	27
Gráfica de la amplitud de las deltas $\lambda$ como función de la separación $L$ , en donde se muestra una frontera hiperbólica que delimita la región con los porcentajes de proximidad mayor o menor al 97.7%.	

Figura 4.5.....	29
Gráfica del cálculo exacto (línea continua) y cálculo aproximado mediante el desarrollo en estados resonantes con 4 términos (línea discontinua), para el potencial con parámetros (10,30) bajando la energía de incidencia en 0.05 unidades de eV, $E = \epsilon_1 - 0.05 = 0.2992$ eV, con 97.9% de proximidad.	
Figura 4.6.....	30
Gráfica del cálculo exacto (línea continua) y cálculo aproximado mediante el desarrollo en estados resonantes con 19 términos (línea discontinua), para el potencial con parámetros (5,60) bajando la energía de incidencia en 0.05 unidades de eV, $E = \epsilon_1 - 0.05 = 0.0373$ eV, con 97.7% de proximidad.	
Figura 4.7.....	33
Gráfica del cálculo exacto (línea continua) y cálculo aproximado mediante el desarrollo en estados resonantes con 13 términos (línea discontinua), para el potencial con parámetros (10,30) bajando la energía de incidencia en una unidad de $\Gamma$ , $E = \epsilon_1 - \Gamma_1 = 0.2036$ eV, con 97.8% de proximidad.	
Figura 4.8.....	33
Gráfica del cálculo exacto (línea continua) y cálculo aproximado mediante el desarrollo en estados resonantes con 13 términos (línea discontinua), para el potencial con parámetros (5,60) bajando la energía de incidencia en una unidad de $\Gamma$ , $E = \epsilon_1 - \Gamma_1 = 0.0509$ eV, con 97.8% de proximidad.	
Figura 4.9.....	34
Gráfica del cálculo exacto (línea continua) y cálculo aproximado mediante el desarrollo en estados resonantes con 22 términos (línea discontinua), para el potencial con parámetros (10,30) bajando la energía de incidencia en dos unidades de $\Gamma$ , $E = \epsilon_1 - 2\Gamma_1 = 0.058$ eV, con 97.7% de proximidad.	
Figura 4.10.....	34
Gráfica del cálculo exacto (línea continua) y cálculo aproximado mediante el desarrollo en estados resonantes con 22 términos (línea discontinua), para el potencial con parámetros (5,60) bajando la energía de incidencia en dos unidades de $\Gamma$ , $E = \epsilon_1 - 2\Gamma_1 = 0.0145$ eV, con 97.8% de proximidad.	

Figura 4.11.....	35
Gráfica del cálculo exacto (línea continua) y cálculo aproximado mediante el desarrollo en estados resonantes con 50 términos (línea discontinua), para el potencial con parámetros (10,30) bajando la energía de incidencia en una unidad de $\Gamma$ , $E = \epsilon_1 - \Gamma_1 = 0.058$ eV, con 99.2% de proximidad.	
Figura 4.12.....	35
Gráfica del cálculo exacto (línea continua) y cálculo aproximado mediante el desarrollo en estados resonantes con 100 términos (línea discontinua), para el potencial con parámetros (10,30) disminuyendo la energía de incidencia en dos unidades de $\Gamma$ , $E = \epsilon_1 - 2\Gamma_1 = 0.058$ eV, con 99.2% de proximidad.	
Figura 6.1.....	41
Esquema del potencial doble delta de Dirac simétrico.	

## Contenido

I	INTRODUCCIÓN	2
II	FORMALISMO DE ESTADOS RESONANTES	5
III	CÁLCULO DE LOS ESTADOS RESONANTES MEDIANTE EL MÉTODO DE LA MATRIZ DE TRANSFERENCIA	9
	Cálculo de los polos complejos de la amplitud de transmisión .....	10
	Cálculo de las eigenfunciones resonantes $u_n(x)$ .....	13
IV	ESTUDIO NUMÉRICO DE LA FUNCIÓN DE ONDA EN TÉRMINOS DE LOS ESTADOS RESONANTES	19
	Criterio de proximidad entre funciones .....	20
	Energía de incidencia en resonancia .....	21
	Energía de incidencia fuera de resonancia .....	27
V	CONCLUSIONES	36
VI	APÉNDICES	39
VII	LITERATURA CITADA	45

# I

## INTRODUCCIÓN

En años recientes, el uso de estados resonantes para describir soluciones de la ecuación de Schrödinger del continuo, ha resultado ser una herramienta teórica valiosa. Este enfoque alternativo de la mecánica cuántica, ha permitido estudiar sin ambigüedades, aspectos básicos del tunelaje cuántico [García Calderón, 1993] en estructuras artificiales [Weisbuch C. y B. Vinter, 1991]. Más aún, estas técnicas han sido incorporadas exitosamente al campo de los fenómenos transitorios para estudiar las propiedades dinámicas del tunelaje cuántico [García Calderón y Rubio, 1997; García Calderón, Rubio y Villavicencio, 1999].

Los estados resonantes fueron introducidos por vez primera a finales de los años veinte por Gamow en un trabajo sobre decaimiento  $\alpha$  [Gamow, 1928]. Posteriormente, en 1976, García Calderón presentó un desarrollo de la función de onda, usando estados resonantes para estudios de potenciales arbitrarios en tres dimensiones [García Calderón, 1976]; años después, dicho desarrollo sería aplicado en el caso de potenciales particulares [García Calderón y Rubio, 1986]. En 1987, García Calderón y Rubio desarrollaron un formalismo análogo en una dimensión para potenciales arbitrarios de alcance finito [García Calderón y Rubio, 1987]. Tal formalismo permite expresar la función de onda  $\Psi(x, k)$  en la región interna del potencial como función del propagador  $G^+(x, x'; k)$ , mediante la relación  $\Psi(x, k) = 2ikG^+(0, x; k)$  [García

Calderón, 1987]. Un aspecto digno de destacarse de este formalismo, es que permite desarrollar la función de onda  $\Psi(x, k)$  en términos de los estados resonantes  $u_n(x)$  y los polos complejos  $k_n$  del propagador del sistema. Los estados resonantes que aparecen es estos desarrollos son soluciones de la ecuación de Schrödinger con condiciones de frontera de onda saliente.

En el presente trabajo se realiza un estudio numérico del desarrollo de la función de onda en términos de los estados resonantes para la región interna del potencial doble delta de Dirac simétrico. La sencillez matemática del potencial doble delta de Dirac, nos permite obtener información relevante acerca de las propiedades del tunelaje resonante en perfiles de potencial más complicados. Tal es el caso de la estructura de doble barrera, ampliamente utilizada en diversos estudios de tunelaje cuántico estacionario [García Calderón y Rubio, 1987; García Calderón, 1991; García Calderón, Rubio y Romo, 1991] y dinámico [García Calderón y Rubio, 1987; Romo y Villavicencio, 1999]. Es importante mencionar que con base en el formalismo de estados resonantes, sólo han sido explorados las propiedades del coeficiente de transmisión del potencial doble delta. Debido a que en dichos estudios sólo es necesario conocer la función en las fronteras del sistema, la región interna del potencial ha sido poco explorada. Aún cuando es posible calcular la función de onda exacta del problema de dispersión para el potencial doble delta, es importante estudiar la solución mediante el desarrollo en estados resonantes, porque es la base de otro formalismo de efectos transitorios. Más aún, la descripción que se logre con el formalismo de transitorios depende en gran parte de la buena descripción que se tenga en el formalismo de estados resonantes.

La distribución del trabajo es la siguiente: En el capítulo II se presenta el for-

malismo de García Calderón y Rubio [García Calderón y Rubio, 1987] mediante el cual es posible desarrollar la función de onda en estados resonantes. El capítulo III contiene los detalles del cálculo de los estados resonantes  $u_n(x)$  y polos complejos  $k_n$  de la amplitud de transmisión. En el capítulo IV se realiza un estudio numérico del desarrollo de la función de onda en términos de los estados resonantes. Dentro de este capítulo se propone un criterio para medir el grado de aproximación entre funciones. En el capítulo V se discuten los resultados obtenidos y se plantean las conclusiones del trabajo.

## II

# FORMALISMO DE ESTADOS RESONANTES

Con la finalidad de que este trabajo sea autocontenido, en este capítulo se presenta el formalismo de estados resonantes desarrollado por García Calderón y Rubio [García Calderón y Rubio, 1987] para un potencial arbitrario  $V(x)$  de alcance finito, capaz de mantener resonancias. Las expresiones utilizadas para los cálculos numéricos que se realizan en los siguientes capítulos y el desarrollo en general de este trabajo están basados en dicho formalismo.

A continuación presentaremos la conexión entre el problema típico de dispersión y el problema de eigenvalores complejos. Consideremos la dispersión de un electrón de energía  $E$  y masa  $m$ , incidiendo por la izquierda,  $x < 0$ , sobre un potencial unidimensional  $V(x)$ ; el potencial es real, finito y univaluado. Tal potencial tiene forma arbitraria en el intervalo  $[0, L]$  y se anula fuera de éste. La ecuación de Schrödinger del sistema es,

$$\frac{d^2\Psi(x, k)}{dx^2} + [k^2 - V(x)] \Psi(x, k) = 0, \quad (2.1)$$

cuyas soluciones para la región externa al potencial (donde  $V(x) = 0$ ) son

$$\Psi(x, k) = \begin{cases} e^{ikx} + r(k)e^{-ikx}, & x \leq 0, \\ t(k)e^{ikx}, & x \geq L, \end{cases} \quad (2.2)$$

donde  $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ . Las cantidades  $t(k)$  y  $r(k)$  son las amplitudes de transmisión y reflexión, respectivamente.

A continuación hacemos uso del propagador  $G^+(x, x'; k)$ , el cual obedece la siguiente ecuación diferencial

$$\frac{d^2 G^+(x, x'; k)}{dx^2} + [k^2 - V(x)] G^+(x, x'; k) = \delta(x - x'), \quad (2.3)$$

donde el símbolo "+" en  $G^+$  es una notación la cual nos indica que las condiciones de frontera para el propagador son las llamadas *Condiciones de Frontera de Onda Saliente* (CFOS)

$$\left[ \frac{dG^+(x, x'; k)}{dx} = -ikG^+(x, x'; k) \right]_{x=0}, \quad \left[ \frac{dG^+(x, x'; k)}{dx} = ikG^+(x, x'; k) \right]_{x=L}. \quad (2.4)$$

El objetivo es obtener la función de onda  $\Psi(x, k)$  en la región interna del potencial como función del propagador  $G^+(x, x'; k)$ . Esta relación se obtiene multiplicando la ecuación (2.1) por  $G^+(x, x'; k)$ , y la ecuación (2.3) por  $\Psi(x, k)$ , e integrando la diferencia sobre la región interna del potencial

$$\int_0^L \left\{ \Psi(x, k) \frac{d^2 G^+(x, x'; k)}{dx^2} - G^+(x, x'; k) \frac{d^2 \Psi(x, k)}{dx^2} \right\} dx = \int_0^L \Psi(x, k) \delta(x - x') dx,$$

$$\int_0^L \frac{d}{dx} \left\{ \Psi(x, k) \frac{dG^+(x, x'; k)}{dx} - G^+(x, x'; k) \frac{d\Psi(x, k)}{dx} \right\} dx = \Psi(x', k),$$

$$\Psi(x, k) \frac{dG^+(x, x'; k)}{dx} \Big|_0^L - G^+(x, x'; k) \frac{d\Psi(x, k)}{dx} \Big|_0^L = \Psi(x', k). \quad (2.5)$$

Finalmente, sustituimos en la ecuación (2.5), la función  $\Psi(x, k)$  evaluada en las fronteras del sistema, así como las CFOS (Ec. (2.4)). Esto nos permite escribir

$$\Psi(x, k) = 2ikG^+(0, x; k), \quad 0 \leq x \leq L, \quad (2.6)$$

donde  $\Psi(x, k)$  es la solución en la región interna del potencial.

Por otro lado, observamos que evaluando la ecuación (2.6) en  $x = L$  y sustituyendo el valor de  $\Psi(x = L)$  dado por la ecuación (2.2), obtenemos la relación entre la amplitud de transmisión y el propagador,

$$t(k) = 2ikG^+(0, L; k)e^{-ikL}. \quad (2.7)$$

La importancia de las expresiones (2.6) y (2.7) es que el propagador del sistema puede ser desarrollado en términos de sus polos complejos  $k_n = a_n - ib_n$ , mediante la aplicación del teorema del residuo de Cauchy [García Calderón, 1991]. En particular, el desarrollo puede escribirse como,

$$G^+(x, x'; k) = \sum_n \frac{u_n(x)u_n(x')}{k_n(k - k_n)} + B(E), \quad (2.8)$$

donde  $B(E)$  representa un término de fondo, cuya contribución es despreciable en la mayoría de los potenciales típicos de interés [García Calderón, 1991].

Las funciones  $u_n(x)$  que aparecen en el desarrollo de  $G^+$ , son las soluciones de la ecuación de Schrödinger con CFOS,

$$\left. \frac{du_n(x)}{dx} \right|_{x=0} = -ik_n u_n(0), \quad \left. \frac{du_n(x)}{dx} \right|_{x=L} = +ik_n u_n(L), \quad (2.9)$$

cuyos eigenvalores de la energía son necesariamente complejos,  $E_n = \hbar^2 k_n^2 / 2m = \epsilon_n - i\Gamma_n/2$ . Esta energía compleja describe la  $n$ -ésima resonancia, en donde  $\epsilon_n$  es la posición y  $\Gamma_n$  su anchura. Dichas funciones  $u_n(x)$  son conocidas como *estados resonantes*.

Finalmente, sustituyendo el desarrollo (2.8) en (2.6), tenemos que la función de onda en la región interna del potencial puede escribirse como un desarrollo en términos de las eigenfunciones resonantes  $u_n(x)$  y polos complejos  $k_n$ ,

$$\Psi(x, k) = 2ik \sum_n \frac{u_n(0)u_n(x)}{k_n(k - k_n)}. \quad (2.10)$$

Este desarrollo es objeto de estudio en el capítulo IV. Las cantidades relevantes que se requieren son los estados resonantes  $u_n(x)$  y polos complejos  $k_n$ , cuyos cálculos son presentados en el siguiente capítulo.

### III

# CÁLCULO DE LOS ESTADOS RESONANTES MEDIANTE EL MÉTODO DE LA MATRIZ DE TRANSFERENCIA

En este capítulo se presenta el cálculo de dos cantidades muy importantes: los polos complejos  $k_n$  y los estados resonantes  $u_n(x)$ .

En el capítulo II presentamos un formalismo, con el cual es posible la descripción de la función de onda en términos de los estados resonantes  $u_n(x)$  y los polos complejos  $k_n$ . Por esto, el problema se reduce al conocimiento de estas cantidades para el sistema del potencial doble delta de Dirac simétrico.

El capítulo se divide en dos partes; en la primera sección, se calculan los polos complejos  $k_n$  de la amplitud de transmisión para nuestro potencial de estudio; la segunda sección contiene la solución al problema de eigenvalores complejos para los estados resonantes  $u_n(x)$ .

## 1 Cálculo de los polos complejos de la amplitud de transmisión

Para calcular los polos complejos, utilizamos la ecuación (2.7), ya que ella nos indica que los polos de  $G^+$  corresponden a los polos de la amplitud de transmisión  $t(k)$ . Con ayuda de la matriz de transferencia  $M$  del sistema (ver apéndice A) podemos expresar la amplitud de transmisión como  $t(k) = 1/M_{22}$ . Es claro de lo anterior, que calculando los ceros de  $M_{22}$  obtendremos los polos de  $t(k)$  [García Calderón, A. Rubio y R. Romo, 1991]. Concretamente tenemos que la ecuación de los ceros de  $M_{22}$  es,

$$m^2 \lambda^2 e^{2ikL} - (ik\hbar^2 - m\lambda)^2 = 0. \quad (3.1)$$

Utilizaremos el método de Newton-Raphson para resolver la ecuación (3.1). Para realizar esta tarea es necesario contar con los valores iniciales adecuados para aplicar este método numérico. Una manera de obtener los valores iniciales de la parte real e imaginaria del polo es con la ayuda de la gráfica del coeficiente de transmisión como función de la energía. La posición de los máximos o resonancias de la transmisión nos dan el valor aproximado de la parte real del polo. La parte imaginaria corresponde aproximadamente a la anchura de la resonancia, la cual resulta ser una cantidad pequeña. Sin embargo, como se verá más adelante, existen ciertas configuraciones del potencial para los cuales las resonancias no nos ayudan como aproximación al polo. Por ello, surge la necesidad de tener un buen generador de valores iniciales, el cual nos garantice convergencia en el método de Newton-Raphson. La idea fundamental para la construcción del generador de valores iniciales es la siguiente: dada una

cierta configuración del potencial, se propone un valor inicial al primer polo. Con el conocimiento del primer polo, los restantes se calculan dando como valor inicial el polo anterior, más un cierto número complejo (constante) al que llamamos "salto"; el salto nos indica la medida en que se incrementan los polos en su parte real e imaginaria. El procedimiento que se siguió para conocer el valor inicial del primer polo y el salto fue el siguiente: observamos la distribución de polos (en el plano complejo- $K$ ) en los casos que nos resulta fácil calcular polos (deltas intensas) y gradualmente disminuimos la intensidad de las deltas para verificar como varía el primer polo y el salto de ellos. Después de llevar a cabo lo antes mencionado, concluimos que conforme disminuye la intensidad de las deltas y la separación entre ellas, el primer polo se acerca más al origen (su parte real es más pequeña), y el salto aumenta en su parte imaginaria. Esto nos sugirió un generador de valores iniciales para implementar una subrutina de cómputo, en función de los parámetros del potencial; es decir, dados  $\lambda$  y  $L$  proponer el valor inicial para el primer polo y el salto entre ellos. Una vez calculado el primer polo, el resto de ellos se calculan dando como valor inicial el polo que le precede, más el salto.

Las figuras 3.1 y 3.2 muestran gráficas del coeficiente de transmisión como función de la energía. Las unidades utilizadas son de  $eV\text{\AA}$  para la intensidad de las deltas y de  $\text{\AA}$  para la separación entre ellas, las cuales se muestran en la parte superior de las gráficas. La tabla I muestra los tres primeros valores de los polos y de la posición de las resonancias que corresponden a las gráficas del coeficiente de transmisión.

El objetivo de mostrar estas dos situaciones, es ilustrar como para los casos con resonancias altas y delgadas, que se presentan en deltas intensas, como el de la Fig. 3.1, no tenemos ningún problema en utilizar la posición de la resonancia como valor

inicial para la parte real del polo. Por otro lado, para deltas débiles las resonancias casi desaparecen, como lo muestra la Fig. 3.2; en estos casos la posición de las resonancias no es útil como valor inicial.

Consideremos el caso de la delta con intensidad  $\lambda = 50 \text{ eV\AA}$ ; tomando la posición de las resonancias como valor inicial para la parte real del polo y  $-0.05 \text{ eV}$  para la parte imaginaria, tenemos convergencia en muy pocas iteraciones. Por otro lado, cuando calculamos el primer polo para la delta de amplitud  $\lambda = 1 \text{ eV\AA}$ , utilizando la posición de la resonancia, al cual corresponde un valor inicial de  $0.075 \text{ eV}$ , la convergencia fue a  $-1.6713e-011 + 1.8529e-011i$ , lo cual evidentemente es erróneo. Obsérvese en la Tabla I, la discrepancia que existe entre la parte real del polo y la posición de la resonancia con la delta de intensidad de  $1 \text{ eV\AA}$ , mientras que para la delta de intensidad  $50 \text{ eV\AA}$  estos prácticamente coinciden.

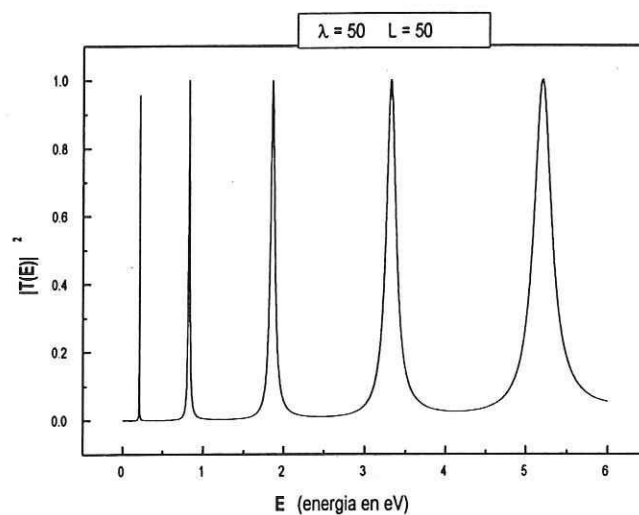


Fig. 3.1 Gráfica del coeficiente de transmisión como función de la energía para el potencial doble delta.

n	$\lambda = 50 \text{ eV\AA}, L = 50 \text{ \AA}$		$\lambda = 1 \text{ eV\AA}, L = 50 \text{ \AA}$	
	$E_n$	$E_{\text{pico}}$	$E_n$	$E_{\text{pico}}$
1	0.20573 -0.00122i	0.20207	0.00237 -0.04996i	0.075
2	0.8241 -0.00952i	0.82383	0.29088 -0.46335i	0.53
3	1.85835 -0.03097i	1.86528	1.10388 -0.99374i	1.43

(Tabla I. Polos y posición de resonancias para dos configuraciones del potencial doble delta.)

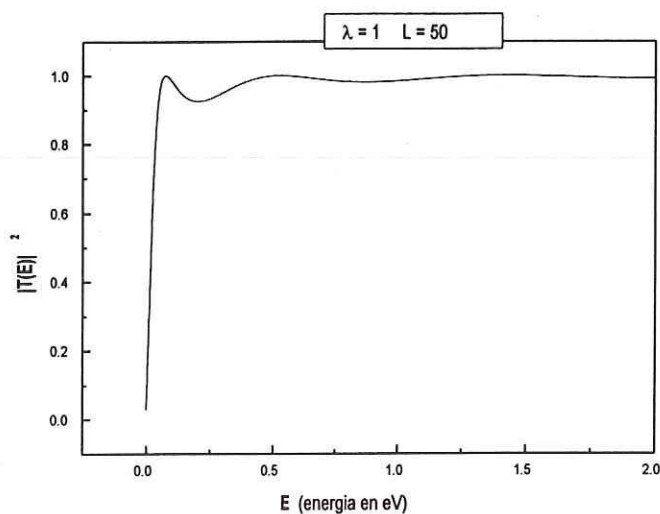


Fig. 3.2 Gráfica del coeficiente de transmisión como función de la energía para el potencial doble delta.

## 2 Cálculo de las eigenfunciones resonantes $u_n(x)$

Para resolver el problema de eigenvalores complejos para las funciones  $u_n(x)$  que satisfacen la ecuación de Schrödinger (2.1), utilizamos el método de la matriz de

transferencia. El método consiste en conectar las amplitudes de las funciones de onda evaluadas a la izquierda ( $x < 0$ ) y derecha ( $x > L$ ) del potencial mediante una relación de la forma  $\begin{pmatrix} A \\ 0 \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} 0 \\ B \end{pmatrix}$ , donde  $M$  es una matriz de  $2 \times 2$ . Esta matriz contiene la información del potencial  $V(x)$ , y se construye imponiendo las condiciones de acoplamiento de la función de onda y su derivada en las fronteras del sistema (ver apéndice B). Cabe mencionar que en este caso el método difiere del utilizado usualmente para el cálculo del coeficiente de transmisión, o de  $\Psi(x)$ , como se hizo en el apéndice A y B, respectivamente; en este último caso las condiciones de frontera del problema corresponden al problema típico de dispersión: incidencia por un extremo del sistema, una amplitud de transmisión y otra de reflexión de la función de onda; para las  $u_n(x)$ , las condiciones de frontera son las CFOS (2.8), no hay incidencia por los extremos del sistema, sólo ondas salientes.

La solución a la ecuación de Schrödinger (2.1) tiene la forma general,

$$u_n(x) = Ae^{ik_nx} + Be^{-ik_nx}, \quad (3.2)$$

donde  $k_n = \sqrt{2mE_n}/\hbar$  y  $A, B$  son coeficientes en general complejos.

Sean  $A_0, B_0, A_1, B_1, A_L, B_L$ , los coeficientes en cada región, como se muestra en la figura 3.1. Las soluciones para cada región son,

$$u_n(x \leq 0) = A_0e^{ik_nx} + B_0e^{-ik_nx}, \quad (3.3a)$$

$$u_n(0 < x < L) = A_1 e^{ik_n x} + B_1 e^{-ik_n x}, \quad (3.3b)$$

$$u_n(x \geq L) = A_L e^{ik_n x} + B_L e^{-ik_n x}. \quad (3.3c)$$

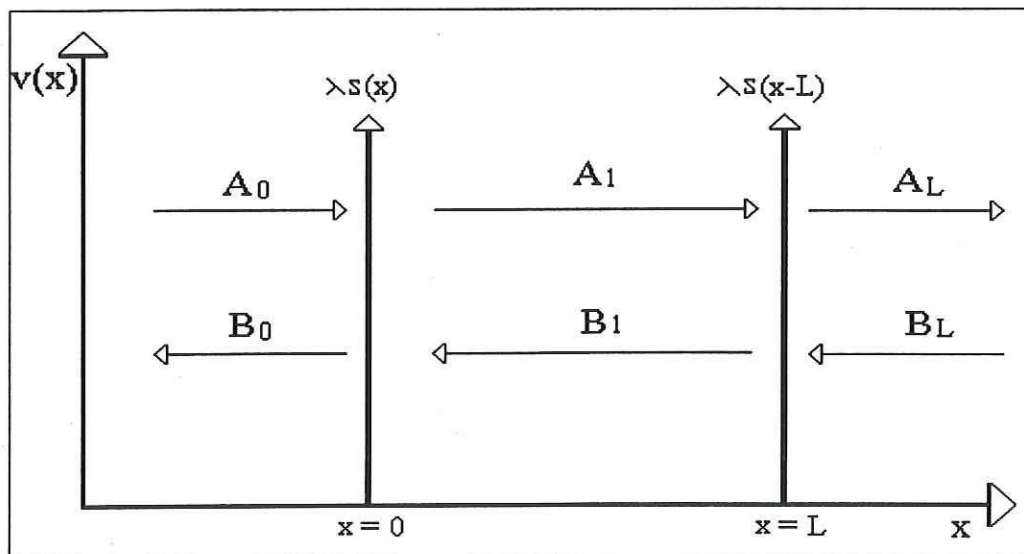


Fig. 3.1 Potencial doble delta de Dirac simétrico.

Los coeficientes se relacionan a través de las siguientes ecuaciones matriciales

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = M^0 \begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix}, \quad (3.4a)$$

$$\begin{pmatrix} A_L \\ B_L \end{pmatrix} = M^L \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix}, \quad (3.4b)$$

donde  $M^0$ ,  $M^L$  son matrices que se obtienen de aplicar las condiciones de acoplamiento

a  $\Psi(x)$ , para  $x = 0$  y  $x = L$ , respectivamente. Sustituyendo la expresión (3.4a) para  $A_1$  y  $B_1$  en (3.4b) obtenemos,

$$\begin{pmatrix} A_L \\ B_L \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix}, \quad (3.5)$$

donde  $M = M^L M^0$  es la matriz de transferencia.

Al aplicar las CFOS, nos conduce necesariamente a que:  $A_0 = B_L = 0$ . Así que las relaciones entre los coeficientes (después de algunas manipulaciones algebraicas) pueden escribirse como,

$$A_1 = M_{12}^0 B_0, \quad B_1 = M_{22}^0 B_0, \quad A_L = M_{12} B_0, \quad M_{22} = 0. \quad (3.6)$$

Es importante señalar que la expresión  $M_{22} = 0$  nos conduce a la ecuación de los polos del propagador  $G^+$ , tal como se vió en la sección anterior.

De las ecuaciones (3.6) notamos que sólo nos falta conocer el valor de  $B_0$  para determinar la función  $u_n(x)$ . Para esto, consideremos una nueva ecuación, que corresponde a la condición de normalización de  $u_n(x)$ . La normalización proviene de los residuos en los polos complejos de  $G^+$  [Romo, 1989] y se expresa como

$$\int_0^L u_n^2(x) dx + \frac{i}{2k_n} [u_n^2(0) + u_n^2(L)] = 1. \quad (3.7)$$

En nuestro caso la integral que aparece en la condición de normalización puede

fácilmente evaluarse analíticamente, ya que  $u_n(x)$  es una combinación de exponenciales. El valor de la integral es,

$$\int_0^L u_n^2(x) dx = \frac{B_0^2}{2ik_n} \left\{ (M_{12}^0)^2 (e^{2ik_n L} - 1) - (M_{22}^0)^2 (e^{-2ik_n L} - 1) + 4ik_n L M_{12}^0 M_{22}^0 \right\}. \quad (3.8)$$

Sustituyendo en la condición de normalización (3.7), y las expresiones para la  $u_n(x)$  en los extremos del sistema,  $u_n^2(0) = B_0^2$  y  $u_n^2(L) = (M_{12}^0)^2 B_0^2 e^{2ik_n L}$ , por lo que obtenemos

$$B_0 = \left[ \frac{2ik_n}{(M_{12}^0)^2 (e^{2ik_n L} - 1) - (M_{22}^0)^2 (e^{-2ik_n L} - 1) - M_{12}^2 e^{2ik_n L} + 4ik_n L M_{12}^0 M_{22}^0 - 1} \right]^{1/2}. \quad (3.9)$$

Finalmente las soluciones para cada región son,

$$u_n(x) = B_0 e^{-ik_n x}, \quad x \leq 0, \quad (3.10a)$$

$$u_n(x) = B_0 [M_{12}^0 e^{ik_n x} + M_{22}^0 e^{-ik_n x}], \quad 0 < x < L, \quad (3.10b)$$

$$u_n(x) = B_0 M_{12}^0 e^{ik_n x}, \quad x \geq L. \quad (3.10c)$$

Nótese que todas las cantidades que aparecen tanto en  $B_0$  (ecuación (3.9)) como

en  $u_n$  (ecuación (3.10)) están escritas en función de los elementos de la matriz de transferencia  $M$ , la matriz  $M^0$  y los polos  $k_n$ . Por lo tanto estas cantidades pueden ser fácilmente evaluadas numéricamente.

# IV

## ESTUDIO NUMÉRICO DE LA FUNCIÓN DE ONDA EN TÉRMINOS DE LOS ESTADOS RESONANTES

En el capítulo II se presentó un formalismo mediante el cual es posible describir la función de onda en la región interna del potencial como un desarrollo en estados resonantes  $u_n(x)$  y los polos complejos  $k_n$  del propagador  $G^+(x, x'; k)$ ; el método de cálculo de dichas cantidades se expuso en el capítulo III. En el presente capítulo se hace un estudio sistemático de dicho desarrollo, aplicado al sistema doble delta de Dirac simétrico para diferentes configuraciones del potencial. El propósito es reproducir el cálculo exacto con la precisión deseada, encontrando la combinación adecuada de valores de los parámetros  $\lambda$  y  $L$  del potencial. Ésto involucra introducir un criterio matemático que nos permita describir cuantitativamente el grado de proximidad entre el cálculo exacto y el basado en el desarrollo en estados resonantes, los cuales denotaremos por  $\Psi_\epsilon(x)$  y  $\Psi_a(x)$ , respectivamente. Dicho criterio se introduce en la primera sección de este capítulo y constituye una de las aportaciones importantes de este trabajo de tesis. El estudio sistemático del desarrollo de la función de onda en estados resonantes se expone en la segunda sección con el caso

de incidencia en resonancia. En la tercera y última sección consideramos algunos casos con energías de incidencia fuera de resonancia.

## 1 Criterio de proximidad entre funciones

Para poder describir cuantitativamente el grado de aproximación del desarrollo en estados resonantes  $\Psi_a(x)$  a la función de onda exacta  $\Psi_e(x)$ , es necesario introducir formalmente un criterio que nos permita expresar analíticamente dicho grado de aproximación. En el estudio sistemático que se pretende realizar es necesario comparar gráficas de un cálculo con gráficas de otro, esto involucra comparar distintos conjuntos de valores. Un procedimiento cualitativo útil para determinar el parecido de dos funciones en un intervalo dado, es la simple comparación visual de sus correspondientes gráficas. Sin embargo, estudios que involucran tratamientos analíticos requieren un criterio cuantitativo. El criterio que introduciremos es muy simple y está inspirado en un método analítico utilizado ya en el contexto del cálculo variacional [Elsigoltz, 1977].

Partimos de la siguiente definición: Sean  $F(x, \{p\})$  y  $H(x, \{p\})$  funciones complejas de variable real  $x$ , donde  $\{p\}$  es un conjunto de parámetros; ambas funciones definidas para  $x$  en un intervalo  $[a, b]$ . Se define la cantidad

$$\xi = \frac{\overline{|F(x, \{p\})|^2 - |H(x, \{p\})|^2}}{\max(|F(x, \{p\})|^2)} \quad a \leq x \leq b \quad (4.1)$$

donde la barra superior indica la media de las cantidades  $||F(x, \{p\})|^2 - |H(x, \{p\})|^2|$

y  $max$  es el máximo de  $|F(x, \{p\})|^2$ . El número  $\xi$  es el parámetro que mide el grado de deformación entre  $|F|^2$  y  $|H|^2$ , en otras palabras, podemos decir que la función  $H$  es próxima a  $F$  en un  $100 * (1 - \xi)\%$ . Nótese que si  $\xi$  tiende a cero, entonces  $|F|^2$  y  $|H|^2$  tienden a ser iguales, en cambio, si  $\xi$  es cercano a uno, entonces  $|F|^2$  y  $|H|^2$  son muy diferentes, en cuyo caso el porcentaje de proximidad entre  $|F|^2$  y  $|H|^2$  tiende a cero. Básicamente, el criterio que proponemos califica en la escala del 0 al 100 el grado de aproximación que existe entre dos funciones.

Una vez escogido un valor específico  $\xi$  para un par de funciones, éste nos permite decir que al cambiar a otro conjunto de parámetros  $\{\tilde{p}\}$  con una  $\tilde{\xi} < \xi$ , tendremos un mayor porcentaje de proximidad (mejor aproximación); en el caso contrario tendremos un menor porcentaje de proximidad.

Implementando este criterio en nuestro estudio, tendremos que las funciones  $\Psi_e(x)$  y  $\Psi_a(x)$  corresponden a  $F$  y  $H$ , respectivamente. El conjunto de parámetros  $\{p\}$  corresponde a los valores  $\lambda$  y  $L$  del potencial doble delta. Los valores  $a$  y  $b$  del intervalo, corresponden respectivamente a la posición 0 y  $L$  de las deltas.

## 2 Energía de incidencia en resonancia

Si en el desarrollo infinito de la función de onda en estados resonantes (ecuación (2.9)) tomamos un subconjunto finito de términos del desarrollo, tendremos una descripción aproximada de la función de onda, esto es,

$$\Psi_a(x, k) \approx 2ik \sum_{n=1}^N \frac{u_n(0)u_n(x)}{k_n(k - k_n)}. \quad (4.2)$$

La elección de distintos valores de  $N$  proporciona diferentes grados de aproximación para la función de onda. Estudios realizados en estructuras cuánticas de multibarreras en los que se ha aplicado (4.2) para describir la función de onda, han mostrado que con una elección apropiada del número  $N$  de términos se pueden obtener excelentes descripciones [García Calderón y A. Rubio, 1987; García Calderón, A. Rubio y R. Romo, 1991]. En particular, en sistemas con resonancias estrechas y aisladas, la aproximación de un solo término ( $N = 1$ ) ha dado buenos resultados. La aproximación de un término de la ecuación (4.2) es,

$$\Psi_a(x) \approx 2ik \frac{u_n(0)u_n(x)}{k_n(k - k_n)}. \quad (4.3)$$

Para ilustrar el uso del criterio veamos un caso particular: el potencial doble delta de Dirac simétrico. Los parámetros son:  $(\lambda, L) = (10 \text{ eV}\text{\AA}, 30 \text{ \AA})$  donde  $\lambda$  es la intensidad de las deltas y  $L$  su separación; la energía de incidencia en resonancia es  $E = \epsilon_1 = 0.3492 \text{ eV}$ . Mediante un programa de cómputo evaluamos numéricamente en el intervalo  $[0, L]$ , con un paso de 0.001 las expresiones correspondientes al cálculo exacto  $\Psi_e(x)$  de la ecuación (B.1) y el cálculo aproximado  $\Psi_a(x)$  de la ecuación (4.3). Al mismo tiempo evaluando la expresión (4.1) para calcular el parámetro  $\xi$ , obtenemos que el porcentaje de proximidad entre  $|\Psi_e(x)|^2$  y  $|\Psi_a(x)|^2$  es de 97.7 % ( $\xi = 0.023$ ). Las gráficas correspondientes a estos cálculos se muestran en la Fig. 4.1, donde la línea continua corresponde al cálculo exacto  $\Psi_e(x)$  y la discontinua al desarrollo en estados resonantes  $\Psi_a(x)$ . Los parámetros del potencial y la energía de incidencia se muestran en dicha gráfica. Nótese el grado de simetría de la función de onda exacta  $|\Psi_e(x)|^2$  en este caso de incidencia en resonancia. Esto es ventajoso, ya que en general las funciones asimétricas requieren mayor número de términos cuando

se describen mediante desarrollos en serie.

Tomando como punto de referencia al sistema (10 eVÅ, 30 Å), se realizó una búsqueda sistemática de otras configuraciones de potencial ( $\lambda, L$ ) que exhiban el mismo grado de proximidad (97.7%) entre  $|\Psi_e(x)|^2$  y  $|\Psi_a(x)|^2$ . Los resultados de tales potenciales se muestran en la tabla II. En las primeras dos columnas se muestran los parámetros  $\lambda$  y  $L$  de los potenciales, la tercera columna contiene los valores del primer polo  $E_1 = \epsilon_1 - i\Gamma_1/2$  con el fin de mostrar la energía de incidencia  $E = \epsilon_1$  en cada sistema.

En las figuras 4.2 y 4.3 se ilustran dos casos tomados de la tabla II, que corresponden respectivamente a los potenciales (5,60) y (3,100). Notar que este par de gráficas también presentan una simetría bien definida, además, hay que observar el enorme parecido entre las figuras 4.1, 4.2 y 4.3. Los tres casos son prácticamente indistinguibles entre sí, no obstante que corresponden a sistemas con diferente geometría. Esto nos ilustra la confiabilidad del criterio *cuantitativo* que hemos introducido para comparar funciones, ya que es congruente con el criterio *cualitativo* que consiste en la simple comparación visual de las curvas.

Resulta interesante el hecho de que en todos los casos considerados en la tabla II, el producto  $\lambda L$  resultó ser una cantidad invariante; su valor se mantiene prácticamente constante en  $300 \text{ eVÅ}^2$ , tal como lo muestra la columna 4. Ésto nos sugirió un mecanismo para obtener los potenciales con el mismo porcentaje de proximidad en términos de  $\lambda$  y  $L$  de la siguiente manera: una vez elegido un porcentaje de proximidad, i.e., un sistema  $(\lambda, L)$ , se calcula  $q = \lambda L$  y entonces el resto de los potenciales con el mismo porcentaje de proximidad corresponderán a  $\lambda = L/q$ ; de

hecho,  $\lambda$  de la tabla II lo encontramos con la relación  $\lambda = 300/L$ . Considerando a  $\lambda$  como función de  $L$ , tenemos que define una familia de hipérbolas. Si graficamos  $\lambda$  contra  $L$  para los potenciales de la tabla II, identificamos una frontera hiperbólica que delimita la región con porcentajes de proximidad mayores o menores al 97.7 %. Tal gráfica se muestra en la fig. 4.4 y resulta muy ilustrativa para tener una idea de como será la aproximación al cálculo exacto con sólo conocer los parámetros  $\lambda$  y  $L$  del potencial doble delta. Otro resultado interesante de los potenciales que presentan un mismo porcentaje de proximidad, se muestra en la última columna de la tabla II; el cociente  $(\epsilon_2 - \epsilon_1)/\Gamma_1$  resultó ser también una cantidad invariante, cantidad que involucra los parámetros de resonancia del sistema.

Finalmente, queremos enfatizar la simetría que presenta la función de onda exacta en resonancia y la similitud de los pares de gráficas para los potenciales con el mismo porcentaje de proximidad; de hecho, todas las gráficas de la tabla II tienen la misma forma, como lo muestran las figuras 4.1 a 4.3 en los ejemplos de esta sección.

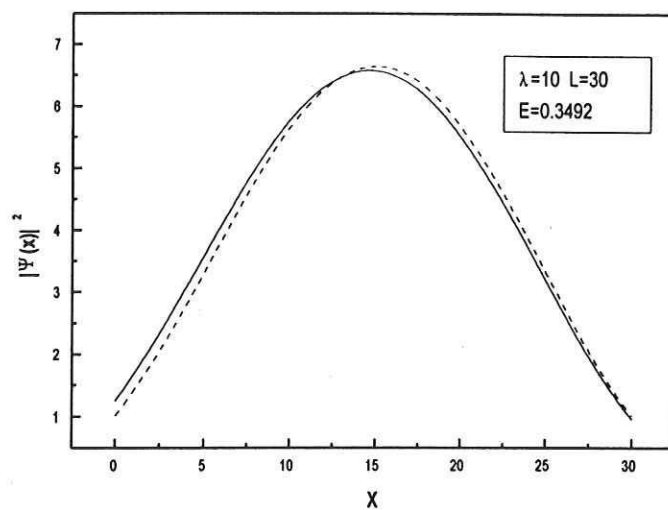


Fig. 4.1 Sistema (10,30) con aproximación del 97.7 %.

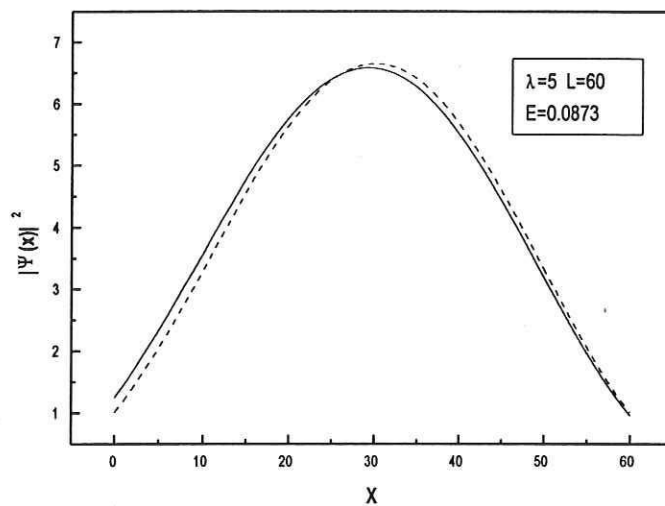


Fig. 4.2 Sistema (5,60) con aproximación del 97.7 %.

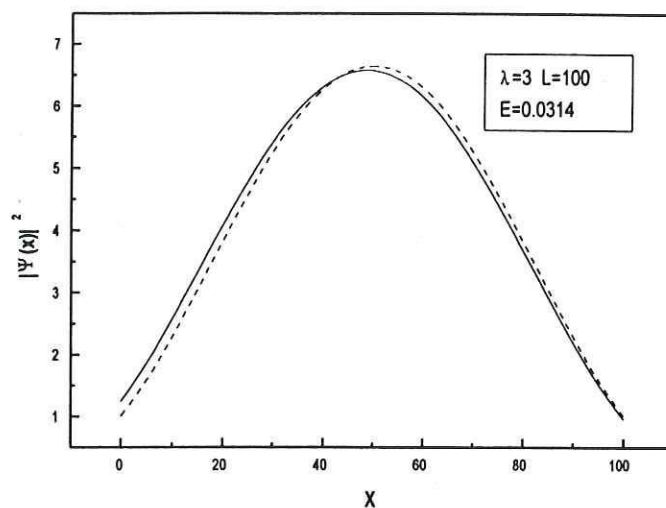


Fig. 4.3 Sistema (3,100) con aproximación del 97.7 %.

$\lambda$	$L$	$E_1$	$\lambda L$	$(\epsilon_2 - \epsilon_1)/\Gamma_1$
10	30	0.3492-0.0728i	300	8.5565
7.5	40	0.1964-0.04095i	300	8.5565
6	50	0.1257-0.0262i	300	8.5565
5	60	0.0873-0.0182i	300	8.5565
4.3	70	0.0642-0.0321i	301	8.5888
3.75	80	0.0491-0.02455i	300	8.5565
3.3	90	0.0387-0.01935i	297	8.5468
3	100	0.0314-0.0157i	300	8.5565

(Tabla II. Potenciales con un 97.7 % de proximidad entre funciones.)

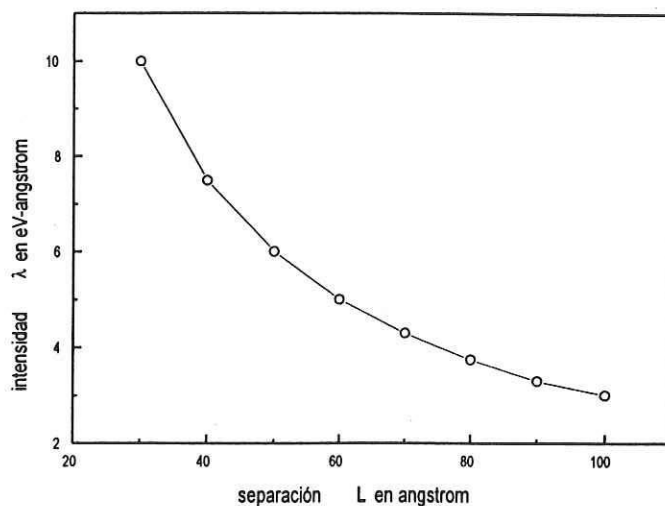


Fig. 4.4 Frontera que delimita la región con los porcentajes de proximidad mayor (hacia arriba) o menor (hacia abajo) al 97.7 %

### 3 Energía de incidencia fuera de resonancia

En la sección anterior se mostró cómo al considerar energías de incidencia en resonancia  $E = \epsilon_1$ , la utilización de sólo un término en el desarrollo de estados resonantes nos condujo a una excelente aproximación a la función de onda exacta. Considerando ahora incidencia a energías fuera de resonancia, no podemos esperar que la aproximación de un término funcione con la misma eficacia. Esto se debe a que se introduce una asimetría en la función de onda exacta, por lo cual se hace necesario incluir más términos en el desarrollo (4.2) para obtener la precisión deseada. El estudio en esta sección involucra considerar energías de incidencia fuera de resonancia. El caso más simple corresponde a energías menores a la de la primera resonancia e investigar

cuantos términos necesitamos sumar en el desarrollo (4.2) para obtener los porcentajes de proximidad deseados.

Consideremos el ejemplo del potencial doble delta de Dirac con parámetros (10 eVÅ, 30 Å), el cual como vimos en la sección anterior le corresponde una primera resonancia en  $E_1 = 0.3492 - 0.0728i$ . A continuación disminuimos la energía de incidencia en 0.05 eV, esto es,  $E = \epsilon_1 - 0.05 = 0.2992$  eV. Al igual que en el caso resonante, mediante un programa de cómputo se evalúa numéricamente las expresiones correspondientes al desarrollo (4.2), el cálculo exacto a través de (B.1) y el cálculo del parámetro  $\xi$  mediante (4.1). Después de evaluar el desarrollo (4.2) para distintos números de estados, obtenemos que se requieren 4 estados para tener un 97.9% de proximidad ( $\xi = 0.0204$ ). La figura 4.5 muestra la gráfica para este caso, en donde se puede observar una ligera pérdida de simetría de la función de onda. Cabe mencionar que con 3 estados se tiene un porcentaje de proximidad del 97.2%.

Consideremos ahora otro ejemplo con parámetros distintos (5 eVÅ, 60 Å) en donde disminuimos la energía de incidencia por debajo de la resonancia en la misma cantidad que en el ejemplo anterior. Para este sistema la resonancia es  $E_1 = 0.0873 - 0.0182i$ . Al utilizar la energía de incidencia  $E = \epsilon_1 - 0.05 = 0.0373$  eV, encontramos que se requiere ahora de 19 estados para tener el mismo grado de precisión que el potencial anterior (97.7 %). La figura 4.6 muestra la gráfica para este ejemplo, en la cual se observa que la función de onda exacta es asimétrica; en consecuencia, se necesitó de más estados para tener el porcentaje de proximidad deseado. Nótese también de esta gráfica cómo en las vecindades de  $x = 0$  resulta más difícil reproducir el cálculo exacto, mientras que para  $x \geq 20$  los valores para ambos cálculos casi

coinciden.

Los resultados obtenidos en estos dos ejemplos se resumen en lo siguiente: *podemos decir, en general, que la cantidad  $N$  de términos del desarrollo necesarios para obtener una determinada precisión depende de los parámetros del potencial, esto es, si modificamos  $\lambda$  o  $L$ , en general  $N$  cambiará. Lo anterior parece sugerir que es complicado obtener alguna regla simple que nos permita caracterizar la situación fuera de resonancia, como lo hicimos en el caso resonante. Afortunadamente como veremos enseguida, este no es el caso. A continuación mostraremos que existe una interesante regularidad que nos permite establecer una relación entre el número  $N$  de estados que necesitamos y el porcentaje de proximidad escogido.*

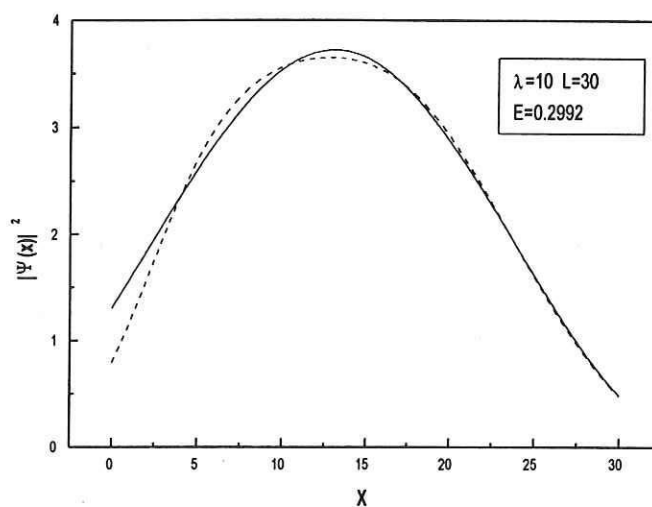


Fig. 4.5 Aproximación del 97.9 % con 4 estados, bajando la energía de incidencia en 0.05 unidades de eV.

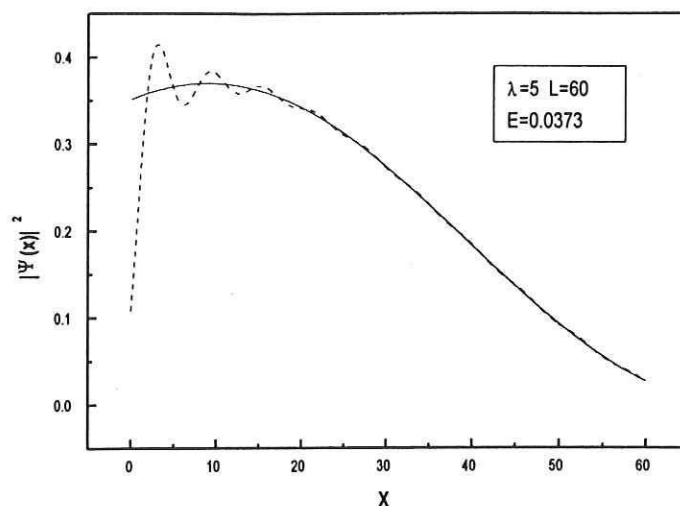


Fig. 4.6 Aproximación del 97.7 % con 19 estados, bajando la energía de incidencia en 0.05 unidades de eV.

En los dos ejemplos anteriores se disminuyó la energía de incidencia en 0.05 unidades de eV, o sea,  $E = \epsilon_1 - 0.05$  eV. Consideremos ahora bajar la energía de incidencia en múltiplos de  $\Gamma$ , esto es,  $E = \epsilon_1 - n\Gamma_1$ . Siguiendo con los ejemplos anteriores y tomando el potencial  $(\lambda, L) = (10 \text{ eV\AA}, 30 \text{ \AA})$  pero ahora con una energía de incidencia de  $E = \epsilon_1 - \Gamma_1 = 0.2036$  eV (que corresponde a  $n = 1$ ) obtenemos que necesitamos sumar 13 estados para tener el 97.8 % de proximidad. La fig. 4.7 muestra este caso. Tomando ahora el ejemplo  $(5 \text{ eV\AA}, 60 \text{ \AA})$  cuya gráfica se muestra en la figura 4.8 con la energía de incidencia  $E = \epsilon_1 - \Gamma_1 = 0.0509$  eV, encontramos que para obtener el 97.8% de proximidad necesitamos también 13 estados, de hecho, el resto de los potenciales de la tabla II requieren todos ellos de 13 estados para tener el mismo porcentaje de proximidad (97.8 %). Al igual que sucedió en el caso

resonante, todas las gráficas para estos potenciales tienen la misma forma que el de la fig. 4.7 y 4.8 presentados.

A lo largo de estas líneas, disminuyendo la primera resonancia en dos múltiplos de  $\Gamma$ , i.e.  $E = \epsilon_1 - 2\Gamma_1$ , nos conduce a que se requieren 22 estados para obtener un 97.7 % de proximidad para *todos los potenciales de la tabla II*. Las figuras 4.9 y 4.10 corresponden respectivamente a los casos (10 eVÅ, 30 Å) y (5 eVÅ, 60 Å), donde la energía de incidencia se indica en la figura correspondiente. Nótese como la función de onda exacta  $\Psi_e(x)$  es prácticamente una recta, por lo que se necesitó de más estados para tener las aproximaciones deseadas de 97.7 %. Un aspecto digno de destacarse de este estudio es la siguiente regla: se requiere siempre el mismo número de estados para describir la función de onda para un valor fijo de  $\xi$ , siempre que la diferencia  $\Delta E = \epsilon_1 - E$  sea expresada en unidades de  $\Gamma_n$ . Esto no sucedió al disminuir la energía de incidencia en unidades arbitrarias en eV, como se mostró en los dos primeros ejemplos presentados al inicio de esta sección. En virtud de la invariancia observada incluso para distintos potenciales, podemos decir que el ancho total de resonancia  $\Gamma_n$  define una especie de “unidades naturales” para estos sistemas.

El considerar más estados en el desarrollo (4.2), nos conduce obviamente a mejores aproximaciones. Las figuras 4.11 y 4.12 muestran esta situación para los ejemplos particulares de las figuras 4.7 y 4.9, respectivamente, en donde se obtiene una mejor aproximación. Para el ejemplo del potencial (10 eVÅ, 30 Å) en donde se disminuyó la energía de incidencia en una unidad de  $\Gamma$ , la aproximación mejoró de un 97.8 % con 13 estados (fig. 4.7), a un 99.2 % con 50 estados (fig. 4.11). En el segundo ejemplo, correspondiente al mismo potencial, disminuimos la energía de incidencia en dos unidades de  $\Gamma$ ; se mejoró de un 97.7 % (fig. 4.9), a un 99.2 % (fig. 4.12), con

22 y 100 estados, respectivamente. Esta mejora de la aproximación al aumentar el número de estados también se aprecia “visualmente” en las gráficas.

Un fenómeno curioso que se presenta al tratar de reproducir el cálculo exacto mediante el desarrollo en estados resonantes es el “pico” que aparece en las vecindades de  $x = 0$ , el cual sigue apareciendo aún cuando se sigan sumando más y más estados en el desarrollo en estados resonantes, como se ilustra en las gráficas 4.9 a 4.12. Ello nos indica una dificultad para reproducir el cálculo exacto en esa zona. Esto es similar al fenómeno de Gibbs que se presenta en el contexto de las aproximaciones a funciones por series de Fourier.

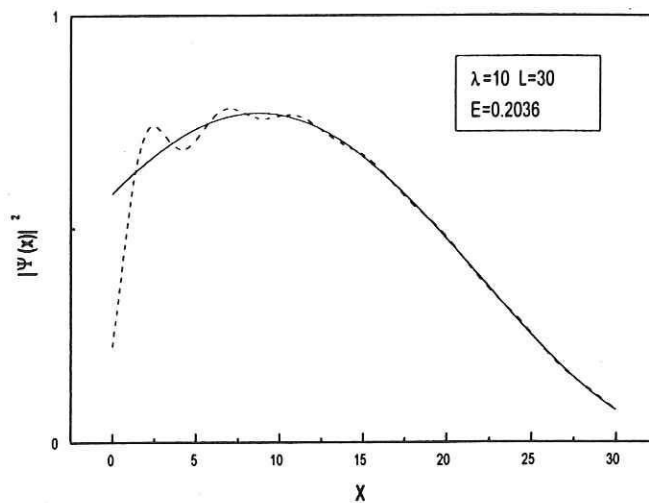


Fig. 4.7 Aproximación del 97.8 % con 13 estados, bajando la energía de incidencia en una unidad de gama.

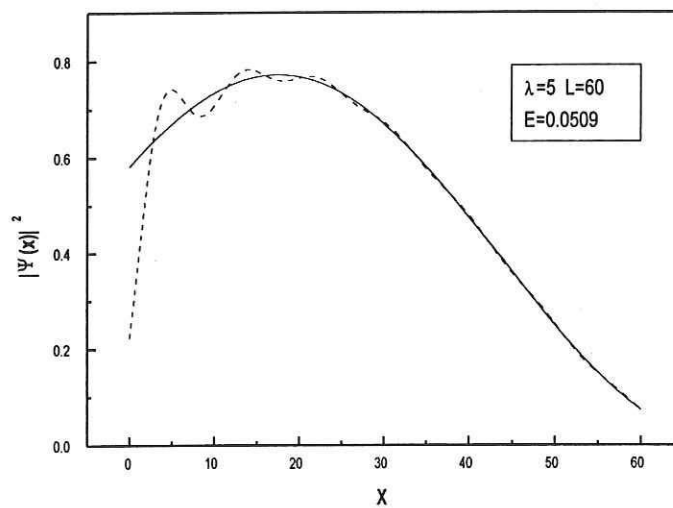


Fig. 4.8 Aproximación del 97.8 % con 13 estados, bajando la energía de incidencia en una unidad de gama.

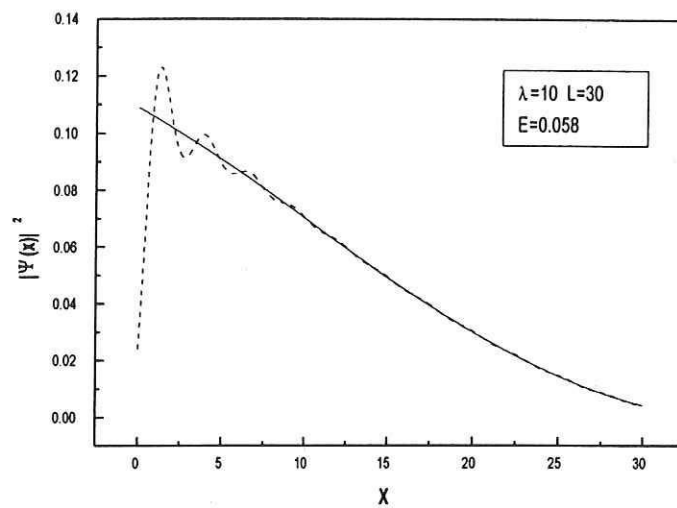


Fig. 4.9 Aproximación del 97.7 % con 22 estados, bajando la energía de incidencia en dos unidades de gama.

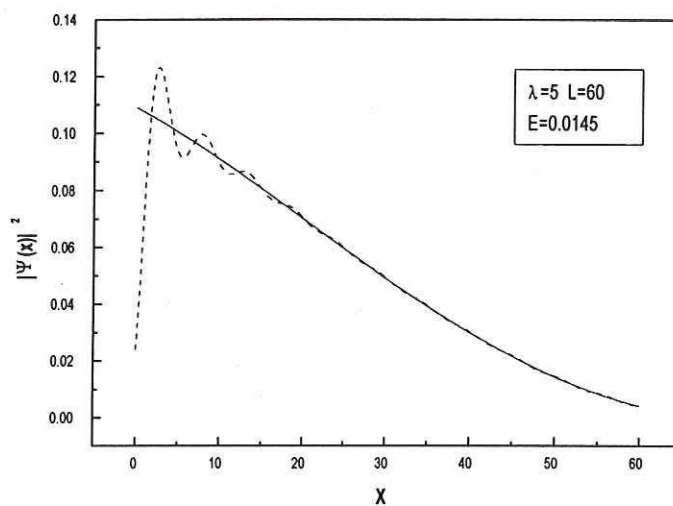


Fig. 4.10 Aproximación del 97.8 % con 22 estados, bajando la energía de incidencia en dos unidades de gama.

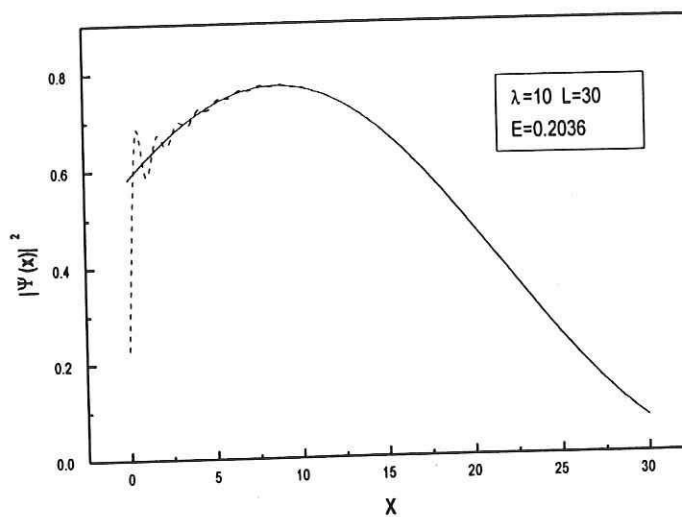


Fig. 4.11 Aproximación del 99.2% con 50 estados, con los mismos parámetros que el ejemplo de la figura 4.7

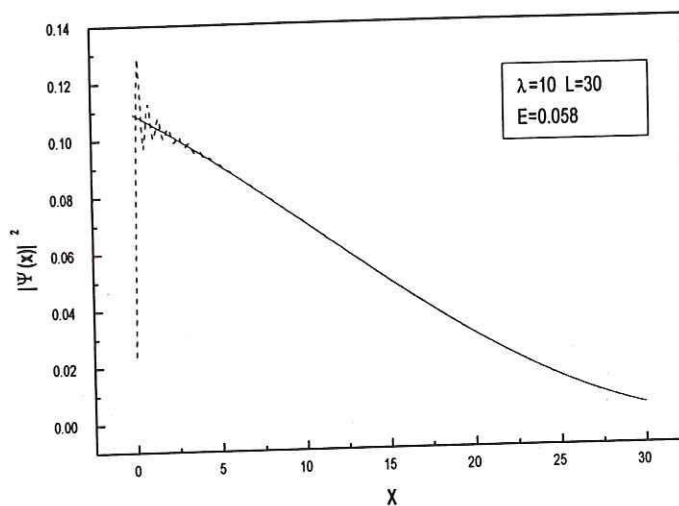


Fig. 4.12 Aproximación del 99.2 % con 100 estados, con los mismos parámetros que el ejemplo de la figura 4.9

## V

# CONCLUSIONES

Con base en el formalismo de García Calderón y Rubio, el cual nos permite desarrollar la función de onda en términos de los estados resonantes y los polos complejos del propagador del sistema, se realizó un estudio sistemático de la función de onda en la región interna de un potencial doble delta de Dirac.

Una de las aportaciones importantes del presente trabajo, fue de establecer un criterio cuantitativo para determinar el grado de proximidad entre la función de onda exacta y el desarrollo en estados resonantes. Más aún, con base en tal criterio, se realizó un estudio sistemático, del cual surgieron resultados interesantes, los cuales discutiremos a continuación.

El estudio sistemático de la aproximación del desarrollo en estados resonantes a la función de onda exacta fue dividido en dos casos: (i) energías de incidencia en resonancia y (ii) energías menores a la primera resonancia.

En el caso de energías de incidencia en resonancia se mostró como la función de onda exacta presenta una simetría bien definida, por lo que la aproximación de un término en el desarrollo fue suficiente para describir el cálculo exacto. Se encontró que para distintas configuraciones de potencial, con el mismo porcentaje de proximidad entre el cálculo exacto y el aproximado, presentan dos regularidades importantes:

las cantidades  $\lambda L$  y  $(\epsilon_2 - \epsilon_1)/\Gamma_1$  son invariantes. La primera de ellas es el producto de los parámetros del potencial; la segunda involucra los parámetros de resonancia del sistema. El hecho de que el producto  $\lambda L$  sea constante, nos da la pauta para encontrar los potenciales que tienen el mismo porcentaje de proximidad; una vez que se fija un cierto porcentaje, la relación  $q = \lambda L$  permite obtener los potenciales con dicha característica.

En el caso de energías de incidencia por debajo de la primera resonancia, se ilustró cómo se introduce una asimetría en la función de onda exacta; ésto nos llevó a utilizar varios estados en el desarrollo para tener buenas descripciones de ella. Encontramos que al alejarnos de resonancia en múltiplos de  $\Gamma$ ,  $E = \epsilon_1 - n\Gamma_1$ , nos condujo al siguiente resultado: distintas configuraciones de potencial requieren del mismo número de estados en el desarrollo, para tener el mismo porcentaje de proximidad entre el cálculo exacto y el aproximado.

En resumen, se propuso un criterio cuantitativo que mide el grado de proximidad entre la función de onda exacta y el desarrollo en estados resonantes; además, se obtuvieron resultados interesantes que pueden ser útiles en otros tipos de estudios, que en general, contribuyen al conocimiento de los aspectos básicos de la física en estructuras cuánticas resonantes.

Finalmente, algunas de las secuelas importantes de este trabajo involucra el estudio de los fenómenos transitorios para el potencial doble delta. Para estos estudios se ha venido utilizando exitosamente un formalismo dependiente del tiempo, en el cual los ingredientes principales en el desarrollo de la función de onda en la región interna del potencial son: solución estacionaria del problema, polos complejos, es-

tados resonantes y funciones de Moshinsky. Las tres primeras cantidades fueron ya calculadas en este trabajo. En concreto, se tienen todos los ingredientes necesarios para iniciar estudios dependientes del tiempo.

# VI APÉNDICES

## A. LA MATRIZ DE TRANSFERENCIA Y EL COEFICIENTE DE TRANSMISIÓN.

La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para un potencial doble delta de Dirac simétrico está dada por,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + [\lambda\delta(x) + \lambda\delta(x-L)]\Psi(x) = E\Psi(x), \quad (\text{A.1})$$

donde  $L$  es la distancia entre los centros dispersores y  $\lambda$  la intensidad de las deltas, tal como se muestra en la figura 6.1.

La solución a la ecuación A.1 para cada una de las regiones son,

$$\Psi_{\text{I}}(x \leq 0) = qe^{ikx} + re^{-ikx}, \quad (\text{A.2a})$$

$$\Psi_{\text{II}}(0 < x < L) = \alpha e^{ikx} + \beta e^{-ikx}, \quad (\text{A.2b})$$

$$\Psi_{\text{III}}(x \geq L) = te^{ikx} + se^{-ikx}, \quad (\text{A.2c})$$

donde  $k = \sqrt{2mE}/\hbar$  y los coeficientes  $q$ ,  $r$ ,  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $t$  y  $s$  se determinan a partir de las siguientes condiciones de acoplamiento,

$$\Psi_{\text{I}}(0) = \Psi_{\text{II}}(0), \quad (\text{A.3a})$$

$$\frac{d\Psi_{\text{II}}(0)}{dx} - \frac{d\Psi_{\text{I}}(0)}{dx} = \frac{2m\lambda}{\hbar^2} \Psi_{\text{I}}(0), \quad (\text{A.3b})$$

$$\Psi_{\text{II}}(L) = \Psi_{\text{III}}(L), \quad (\text{A.3c})$$

$$\frac{d\Psi_{\text{III}}(L)}{dx} - \frac{d\Psi_{\text{II}}(L)}{dx} = \frac{2m\lambda}{\hbar^2} \Psi_{\text{II}}(L). \quad (\text{A.3d})$$

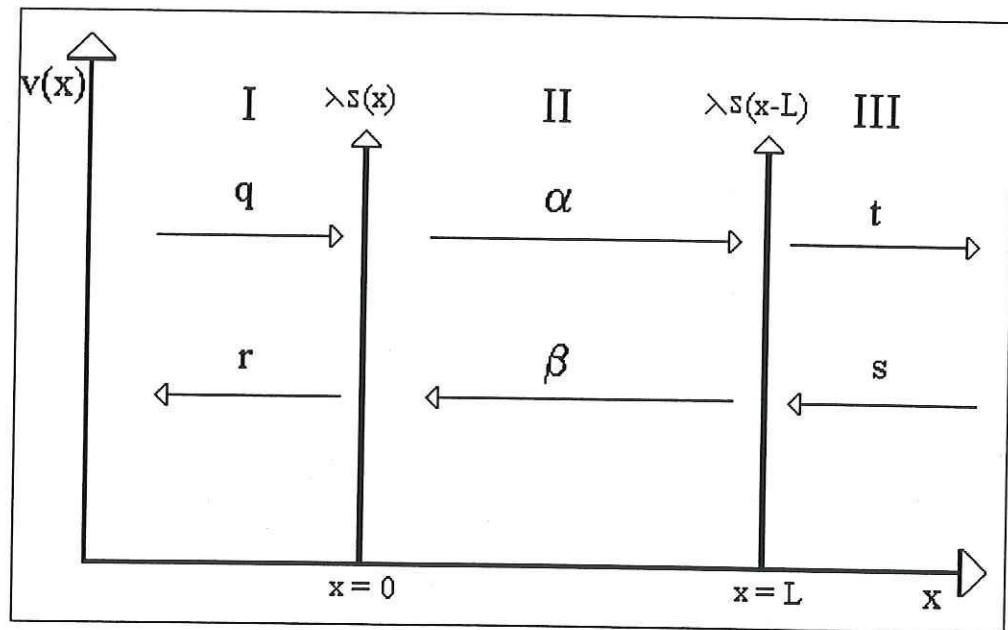


Fig. 6.1 Potencial doble delta de Dirac simétrico.

Aplicando las condiciones de frontera para  $x = 0$ , es decir, ecuaciones (A.3a) y (A.3b) se obtienen las siguientes relaciones entre los coeficientes  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $q$  y  $r$ ,

$$\alpha = \left[ 1 + \frac{m\lambda}{ik\hbar^2} \right] q + \left[ \frac{m\lambda}{ik\hbar^2} \right] r, \quad (\text{A.4a})$$

$$\beta = \left[ -\frac{m\lambda}{ik\hbar^2} \right] q + \left[ 1 - \frac{m\lambda}{ik\hbar^2} \right] r, \quad (\text{A.4b})$$

las cuales podemos escribir en forma matricial como,

$$\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = M^0 \begin{pmatrix} q \\ r \end{pmatrix} \text{ donde } M^0 = \begin{pmatrix} 1 + \frac{m\lambda}{ik\hbar^2} & \frac{m\lambda}{ik\hbar^2} \\ -\frac{m\lambda}{ik\hbar^2} & 1 - \frac{m\lambda}{ik\hbar^2} \end{pmatrix}. \quad (\text{A.5})$$

Igualmente para  $x = L$ , de las ecuaciones (A.3c) y (A.3d) se obtienen las relaciones para los coeficientes  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $t$  y  $s$ ,

$$t = \left[ 1 + \frac{m\lambda}{ik\hbar^2} \right] \alpha + \left[ \frac{m\lambda}{ik\hbar^2} e^{-2ikL} \right] \beta, \quad (\text{A.6a})$$

$$s = \left[ -\frac{m\lambda}{ik\hbar^2} e^{2ikL} \right] \alpha + \left[ 1 - \frac{m\lambda}{ik\hbar^2} \right] \beta, \quad (\text{A.6b})$$

y escrito en forma de matrices,

$$\begin{pmatrix} t \\ s \end{pmatrix} = M^L \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \text{ donde } M^L = \begin{pmatrix} 1 + \frac{m\lambda}{ik\hbar^2} & \frac{m\lambda}{ik\hbar^2} e^{-2ikL} \\ -\frac{m\lambda}{ik\hbar^2} e^{2ikL} & 1 - \frac{m\lambda}{ik\hbar^2} \end{pmatrix}. \quad (\text{A.7})$$

Podemos relacionar las amplitudes  $q$ ,  $r$ ,  $t$  y  $s$  mediante las ecuaciones (A.5) y (A.7) para obtener,

$$\begin{pmatrix} t \\ s \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} q \\ r \end{pmatrix}, \quad (\text{A.8})$$

donde  $M = M^L M^0$  es la matriz de transferencia del sistema. Explícitamente tenemos,

$$M = \begin{pmatrix} (1 + \gamma)^2 - \gamma^2 e^{-2ikL} & \gamma \left[ (1 + \gamma) + (1 - \gamma) e^{-2ikL} \right] \\ -\gamma \left[ (1 - \gamma) + (1 + \gamma) e^{2ikL} \right] & (1 - \gamma)^2 + \gamma^2 e^{2ikL} \end{pmatrix}, \quad (\text{A.9})$$

donde  $\gamma = M_{12}^0 = m\lambda/ik\hbar^2$ . Finalmente, sabemos que la amplitud de transmisión viene dada por el inverso del elemento  $M_{22}$ ,

$$t = \frac{k^2\hbar^4}{m^2\lambda^2 e^{2ikL} - (ik\hbar^2 - m\lambda)^2}, \quad (\text{A.10})$$

y el coeficiente de transmisión por  $T = |t|^2 = 1/|M_{22}|^2$ .

## B. LA FUNCIÓN DE ONDA EXACTA.

Aquí presentaremos la solución exacta a la ecuación de Schrödinger en la región interna del potencial, en el caso estacionario.

Éste es el problema típico de dispersión, en el cual tenemos incidencia por un extremo del sistema, con una cierta amplitud de transmisión y otra de reflexión de la función de onda. Nos apoyaremos fuertemente en el método de la matriz de transferencia para resolver el problema.

Como discutimos en el apéndice A, la solución a la ecuación de Schrödinger en la región interna del potencial,  $0 < x < L$ , es,

$$\Psi(x) = \alpha e^{ikx} + \beta e^{-ikx}, \quad (\text{B.1})$$

donde  $k = \sqrt{2mE}/\hbar$  y  $\alpha, \beta$  son coeficientes por determinar. De las ecuaciones matriciales (A.5) y (A.8) del apéndice A y haciendo  $q = 1$  obtenemos,

$$\alpha = M_{11}^0 + M_{12}^0 r, \quad (\text{B.2})$$

$$\beta = M_{21}^0 + M_{22}^0 r, \quad (\text{B.3})$$

$$t = M_{11} + M_{12} r, \quad (\text{B.4})$$

en donde ya conocemos la amplitud de transmisión  $t$  y los elementos de matriz. La ecuación B.4 nos dice que podemos conocer  $r$ , en consecuencia también los coeficientes  $\alpha$  y  $\beta$ , y por tanto la función de onda (B.1).

## VII

# LITERATURA CITADA

- [1] Gamow, G. 1928. *Zur Quantentheorie des Atomkernes*. *Z. Phys.* **51**: 204-212.
- [2] García-Calderón, G. 1987. *The Effect of Asimetry on Resonant Tunneling in one Dimension*. *Solid State Commun.* **62**: 441.
- [3] García-Calderón, G. 1991. *Tunneling Times for Resonant Structures*. En: *Resonant Tunneling in Semiconductors*. (L. L. Chang, E. E. Mendez y C. J. Tejedor), ed. Plenum Press, New York. pp. 297-306.
- [4] García-Calderón, G. 1993. *Tunneling in Semiconductor Resonant Structures*. En: *The Physics of Low-Dimensional Semiconductor Structures*. (Butcher et al.), ed. Plenum Press, New York. pp. 267-297.
- [5] García-Calderón, G. y A. Rubio. 1987. *Characteristic Times for Resonant Tunneling in one Dimension*. *Phys. Rev. B* **36**: R4462-R4464.
- [6] García-Calderón, G. y A. Rubio. 1997. *Transient Effects and Delay Time in the Dynamics of Resonant Tunneling*. *Phys. Rev. A* **55**: 3361-3670.
- [7] García-Calderón, G.; A. Rubio y Roberto Romo. 1991. *Decay Widths for Double Barrier Resonant Tunneling*. *J. Appl. Phys.* **36**: 3612-3615.

- [8] García-Calderón, G.; A. Rubio y J. Villavicencio. 1999. *Low-Energy Relativistic Effects and Nonlocality in Time-Dependent Tunneling*. Phys. Rev. A **59**: 1758-1761.
  
- [9] L. Elsgoltz. 1977. *Ecuaciones Diferenciales y Cálculo Variacional*. Ed. Mir. 292-294 pp.
  
- [10] Romo Martínez, Roberto. 1989. *Tiempos Característicos para Tunelaje Resonante en una Dimensión*. Tesis de Licenciatura. UABC. Ensenada, B. C. México.
  
- [11] Romo Martínez, Roberto y J. Villavicencio. 1999. *Dynamical Description of the Buildup Process in Resonant Tunneling: Evidence of Exponential and Nonexponential Contributions*. Phys. Rev. B Rapid Communications **60**: R2142 -R2145.
  
- [12] Weisbuch C. y B. Vinter. 1991. *Quantum Semiconductor Structures: Fundamentals and Applications*. Academic Press, Inc. San Diego, pp 189-215.