



# **INSTITUTO POLITÉCNICO NACIONAL**

---

---

**UNIDAD PROFESIONAL INTERDISCIPLINARIA EN  
INGENIERÍA Y TECNOLOGÍAS AVANZADAS**

**SECCIÓN DE ESTUDIOS DE POSGRADO E INVESTIGACIÓN**

**“Investigación del problema de dispersión en guías de ondas  
cuánticas por medio del método de series de potencia de  
parámetro espectral”**

**Tesis que para obtener el grado de**

**DOCTOR EN TECNOLOGÍA AVANZADA**

**PRESENTA:**

**MTA. FRANCISCO EDUARDO URBANO ALTAMIRANO**

**ASESORES:**

**Dr. Vladimir Rabinovitch Likhtman**

**Dr. Raúl Castillo Pérez**

**MÉXICO, 2017**





# INSTITUTO POLITÉCNICO NACIONAL SECRETARIA DE INVESTIGACIÓN Y POSGRADO

## ACTA DE REGISTRO DE TEMA DE TESIS Y DESIGNACIÓN DE DIRECTORES DE TESIS

México, D.F. a 17 de Marzo del 2016

El Colegio de Profesores de Estudios de Posgrado e Investigación de UPIITA en su sesión Ordinaria No. 3 celebrada el día 17 del mes de Marzo conoció la solicitud presentada por el(la) alumno(a):

|                  |                  |                   |
|------------------|------------------|-------------------|
| Urbano           | Altamirano       | Francisco Eduardo |
| Apellido paterno | Apellido materno | Nombre (s)        |

Con registro: 

|   |   |   |   |   |   |   |
|---|---|---|---|---|---|---|
| B | 1 | 3 | 0 | 0 | 6 | 2 |
|---|---|---|---|---|---|---|

Aspirante de: Doctorado en Tecnología Avanzada

1.- Se designa al aspirante el tema de tesis titulado:  
Investigación del problema de dispersión en guías de ondas cuánticas por medio del método de series de potencia de parámetro espectral.

De manera general el tema abarcará los siguientes aspectos:  
Investigar analíticamente las propiedades espectrales de las guías de ondas cuánticas, tales como su espectro esencial y su espectro discreto, así como obtener expresiones generales para el espectro de guías de onda estratificadas horizontalmente; investigar analíticamente y numéricamente el problema de dispersión para una barrera de potencial en una dimensión. Obtener expresiones generales para los coeficientes de transmisión y reflexión en términos de las soluciones de la ecuación de Schrödinger obtenidas a través del método SPPS; investigar analíticamente y numéricamente el problema de dispersión en una guía de onda cuántica con una impureza en su dirección de propagación. Obtener expresiones generales para la matriz de transición de dicha guía de onda. Investigar el caso de un potencial de impureza en forma  $W(x,z) = W_0(x,z) + \epsilon W_1(x,z)$  donde  $\epsilon > 0$  es una perturbación pequeña adimensional.

2.- Se designan como Directores de Tesis a los Profesores:  
Vladimir Rabinovitch Likhtman y Raúl Castillo Pérez

3.- El trabajo de investigación base para el desarrollo de la tesina será elaborado por el alumno en:  
UPIITA y ESIME  
que cuenta con los recursos e infraestructura necesarios.

4.- El interesado deberá asistir a los seminarios desarrollados en el área de adscripción del trabajo desde la fecha en que se suscribe la presente hasta la aceptación de la tesis por la Comisión Revisora correspondiente:

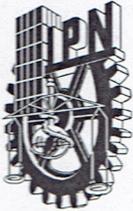
Directores de Tesis

\_\_\_\_\_  
Dr. Vladimir Rabinovitch Likhtman

Aspirante

\_\_\_\_\_  
Francisco Eduardo Urbano Altamirano

\_\_\_\_\_  
Dr. Raúl Castillo Pérez  
Presidente del Colegio



# INSTITUTO POLITÉCNICO NACIONAL SECRETARÍA DE INVESTIGACIÓN Y POSGRADO

## ACTA DE REVISIÓN DE TESIS

En la Ciudad de México siendo las 18:00 horas del día 22 del mes de noviembre del 2017 se reunieron los miembros de la Comisión Revisora de la Tesis, designada por el Colegio de Profesores de Estudios de Posgrado e Investigación de UPIITA para examinar la tesis titulada:

Investigación del problema de dispersión en guías de ondas cuánticas por medio del método de series de potencia de parámetro espectral

Presentada por el alumno:

|                  |                   |                          |   |   |   |   |   |   |   |
|------------------|-------------------|--------------------------|---|---|---|---|---|---|---|
| <u>Urbano</u>    | <u>Altamirano</u> | <u>Francisco Eduardo</u> |   |   |   |   |   |   |   |
| Apellido paterno | Apellido materno  | Nombre(s)                |   |   |   |   |   |   |   |
|                  |                   | Con registro:            | B | 1 | 3 | 0 | 0 | 6 | 2 |

aspirante de:

Doctorado en Tecnología Avanzada

Después de intercambiar opiniones los miembros de la Comisión manifestaron **APROBAR LA TESIS**, en virtud de que satisface los requisitos señalados por las disposiciones reglamentarias vigentes.

### LA COMISIÓN REVISORA

Directores de tesis

Dr. Vladimir Rabinovitch Likhtman

Dr. Raúl Castillo Pérez

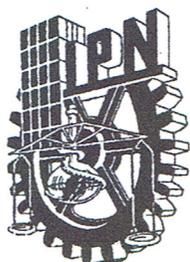
Dra. Sara Guadalupe Cruz y Cruz

Dr. Vladimir Kazakov

Dr. Víctor Cabrera Arenas

PRESIDENTE DEL COLEGIO DE PROFESORES

Dr. Juan Hernández Rosas



**INSTITUTO POLITÉCNICO NACIONAL**  
**SECRETARÍA DE INVESTIGACIÓN Y POSGRADO**

*CARTA CESION DE DERECHOS*

En la Ciudad de México el día 23 del mes Noviembre del año 2017, el (la) que suscribe Francisco Eduardo Urbano Altamirano alumno (a) del Programa de Doctorado en Tecnología Avanzada con número de registro B130062, adscrito a Doctorado en Tecnología Avanzada, manifiesta que es autor (a) intelectual del presente trabajo de Tesis bajo la dirección de Vladimir Rabinovitch Likhtman y cede los derechos del trabajo intitulado “Investigación del problema de dispersión en guías de ondas cuánticas por medio del método de series de potencia de parámetro espectral”, al Instituto Politécnico Nacional para su difusión, con fines académicos y de investigación.

Los usuarios de la información no deben reproducir el contenido textual, gráficas o datos del trabajo sin el permiso expreso del autor y/o director del trabajo. Este puede ser obtenido escribiendo a la siguiente dirección [edurbano06@gmail.com](mailto:edurbano06@gmail.com). Si el permiso se otorga, el usuario deberá dar el agradecimiento correspondiente y citar la fuente del mismo.

Francisco Eduardo Urbano Altamirano

---

Nombre y firma

# Contenido

|            |   |           |
|------------|---|-----------|
| <b>I</b>   | <b>Objetivo</b>   | <b>1</b>  |
| <b>II</b>  | <b>Resumen</b>  | <b>3</b>  |
| <b>III</b> | <b>Abstract</b>   | <b>5</b>  |
| <b>IV</b>  | <b>Introducción</b>   | <b>7</b>  |
| <b>1</b>   | <b>Antecedentes Teóricos</b>  | <b>11</b> |
| 1.1        | Introducción a la mecánica cuántica . . . . .                                     | 11        |
| 1.1.1      | Ecuación de Schrödinger . . . . .   | 14        |
| 1.2        | Elementos de análisis funcional . . . . .   | 17        |
| 1.2.1      | Espacios de Hilbert . . . . .   | 19        |
| 1.2.2      | Operadores y funcionales lineales . . . . .                                       | 22        |
| 1.3        | Postulados de la Mecánica Cuántica . . . . .                                      | 26        |
| 1.4        | Propagación de partícula libre y normalización de Born . . . . .                  | 27        |
| 1.4.1      | Normalización de Born . . . . .   | 29        |
| 1.5        | Guías de onda cuánticas . . . . .   | 30        |
| 1.5.1      | Heterouniones y heteroestructuras . . . . .                                       | 30        |
| 1.5.2      | Alambres cuánticos . . . . .  | 33        |
| <b>2</b>   | <b>Teoría espectral de guías de ondas cuánticas</b>                               | <b>35</b> |
| 2.1        | Espectro esencial y operadores límite . . . . .                                   | 35        |
| 2.2        | Guías de ondas cuánticas cilíndricas . . . . .                                    | 39        |
| 2.3        | Guías de ondas cuánticas estratificadas horizontalmente . . . . .                 | 42        |
| <b>3</b>   | <b>Investigación del problema de dispersión unidimensional por el método SPPS</b> | <b>43</b> |
| 3.1        | Problema de dispersión unidimensional . . . . .                                   | 43        |
| 3.1.1      | Potencial rectangular . . . . .   | 46        |
| 3.1.2      | Potencial Posch-Teller . . . . .  | 46        |
| 3.1.3      | Potencial exponencial . . . . .   | 48        |
| 3.2        | Series de potencia de parámetro espectral . . . . .                               | 49        |
| 3.2.1      | Problema de Sturm Liouville . . . . .   | 49        |

---

|            |  |           |
|------------|--|-----------|
| 3.2.2      | Introducción al método de series de potencias de parámetro es-<br>pectral (SPPS) . . . . . | 52        |
| 3.3        | Resultados . . . . .   | 54        |
| <b>4</b>   | <b>Dispersión en guías de ondas cuánticas con impurezas</b>                                | <b>60</b> |
| 4.1        | Expresiones analíticas para matriz de transición . . . . .                                 | 60        |
| 4.2        | Potenciales con soporte compacto . . . . .   | 65        |
| 4.3        | Potenciales simétricos . . . . .   | 67        |
| 4.4        | Matrices de transición para potenciales simétricos perturbados. . . . .                    | 69        |
| 4.5        | Implementación Numérica . . . . .  | 71        |
| 4.5.1      | Método de Series de Potencia de Parámetro Espectral (SPPS)                                 | 71        |
| 4.5.2      | Cálculos numéricos para potenciales simétricos . . . . .                                   | 71        |
| 4.5.3      | Implementación numérica para potenciales simétricos perturbados                            | 72        |
| <b>V</b>   | <b>Conclusiones</b>  | <b>78</b> |
| <b>VI</b>  | <b>Bibliografía</b>  | <b>80</b> |
| <b>VII</b> | <b>Artículos publicados y congresos</b>  | <b>87</b> |

# List of Figures

|      |  |    |
|------|--|----|
| 1.1  | Experimento de la doble rendija para partículas clásicas [34]. . . . .   | 12 |
| 1.2  | Experimento de la doble rendija para partículas cuánticas [34]. . . . .  | 13 |
| 1.3  | Banda de conducción, de valencia y prohibida para un material semiconductor en bulto [22]. . . . .   | 31 |
| 1.4  | Discontinuidad de los potenciales unidimensionales $V(x)$ en la banda de conducción y la banda de valencia de una heterounión [30]. . . . .  | 31 |
| 1.5  | Pozos cuánticos simétrico y asimétrico [24]. . . . .   | 32 |
| 1.6  | Heteroestructura de tipo II [13]. . . . .  | 32 |
| 1.7  | Alambre cuántico producto de la heterounión de $Ga_{1-x}Al_xAs$ y $GaAs$ [24]. . . . .   | 33 |
| 3.1  | Potencial unidimensional y funciones de onda de entrada y salida . . .   | 44 |
| 3.2  | Gráfica del potencial $V(x) = \frac{U_0}{\cosh^2(\alpha x)}$ con $U_0 = 1 \text{ eV}$ y $\alpha = 1 \times 10^9 \text{ nm}^{-1}$ en el intervalo $x \in [-5, 5] \text{ nm}$ . . . . .  | 47 |
| 3.3  | Gráfica del potencial $V(x) = \frac{U_0}{1+e^{-\alpha x}}$ con $U_0 = 1 \text{ eV}$ y $\alpha = 1 \times 10^9 \text{ nm}^{-1}$ en el intervalo $x \in [-10, 10] \text{ nm}$ . . . . .  | 48 |
| 3.4  | Gráficas de los coeficientes de transmisión $T$ y reflexión $R$ para un potencial constante ( $V_0 = 5 \text{ eV}$ y $b = 2 \text{ nm}$ ) obtenidos analíticamente y por medio de SPPS. . . . .  | 54 |
| 3.5  | Error absoluto para los coeficientes de transmisión $T$ y reflexión $R$ en un potencial constante ( $V_0 = 5 \text{ eV}$ y $b = 2 \text{ nm}$ ). . . . .   | 55 |
| 3.6  | Gráfica del coeficiente de Transmisión $T$ para el potencial $V_0(x) = \frac{U_0}{\cosh^2(\alpha x)}$ donde $U_0 = 1 \text{ eV}$ y $\alpha = 1 \times 10^9 \text{ nm}^{-1}$ obtenido analíticamente y por medio de SPPS. . . . .         | 56 |
| 3.7  | Error absoluto del coeficiente de transmisión $T$ obtenido analíticamente y por medio de SPPS para el potencial $V_0(x) = \frac{U_0}{\cosh^2(\alpha x)}$ donde $U_0 = 1 \text{ eV}$ y $\alpha = 1 \times 10^9 \text{ nm}^{-1}$ . . . . . | 56 |
| 3.8  | Gráfica del coeficiente de reflexión $R$ para el potencial $V_0(x) = \frac{U_0}{1+e^{-\alpha x}}$ donde $U_0 = 1 \text{ eV}$ y $\alpha = 1 \times 10^9 \text{ nm}^{-1}$ obtenido analíticamente y por medio de SPPS. . . . .             | 57 |
| 3.9  | Error absoluto para el coeficiente de reflexión $R$ obtenido analíticamente y por medio de SPPS para el potencial $V_0(x) = \frac{U_0}{1+e^{-\alpha x}}$ donde $U_0 = 1 \text{ eV}$ y $\alpha = 1 \times 10^9 \text{ nm}^{-1}$ . . . . . | 57 |
| 3.10 | Gráfica de una doble barrera con altura $V_0 = 5 \text{ eV}$ y ancho $b = 2 \text{ nm}$ . . . . .  | 58 |

---

|      |  |    |
|------|--|----|
| 3.11 | Coefficiente de transmisión $T$ para un doble potencial constante obtenido por medio de SPPS. . . . .                | 59 |
| 4.1  | Gráfica de las partes reales e imaginarias de $a_r^{(j)}(\lambda)$ , $j = 1, 2$ . . . . .                            | 73 |
| 4.2  | Gráfica de las partes reales e imaginarias de $b_r^{(j)}(\lambda)$ , $j = 1, 2$ . . . . .                            | 74 |
| 4.3  | Gráfica de las partes reales de las entradas de $y_-(z, \lambda)$ . . . . .  | 75 |
| 4.4  | Gráfica de las partes imaginarias de las entradas de $y_-(z, \lambda)$ . . . . .                                     | 75 |
| 4.5  | Gráficas de las partes reales de las entradas de la matriz de transición $(a_r)^\varepsilon(\lambda)$ . . . . .      | 76 |
| 4.6  | Gráficas de las partes imaginarias de las entradas de la matriz de transición $(a_r)^\varepsilon(\lambda)$ . . . . . | 76 |
| 4.7  | Gráficas de las partes reales de las entradas de $(b_r)^\varepsilon(\lambda)$ . . . . .                              | 77 |
| 4.8  | Gráficas de las partes imaginarias de las entradas de $(b_r)^\varepsilon(\lambda)$ . . . . .                         | 77 |

# List of Tables

|     |  |    |
|-----|--|----|
| 1.1 | Sistemas de dimensionalidad básica . . . . . | 33 |
| 3.1 | Errores Absolutos . . . . .                  | 56 |

**Parte I**

**Objetivo**

- Investigar analíticamente las propiedades espectrales de las guías de ondas cuánticas, tales como su espectro esencial y su espectro discreto, así como obtener expresiones generales para el espectro de guías de onda estratificadas horizontalmente.
- Investigar analíticamente y numéricamente el problema de dispersión para una barrera de potencial en una dimensión. Obtener expresiones generales para los coeficientes de transmisión y reflexión en términos de las soluciones de la ecuación de Schrödinger obtenidas a través del método de series de potencia de parámetro espectral.
- Investigar analíticamente y numéricamente el problema de dispersión en una guía de onda cuántica con una impureza en su dirección de propagación. Obtener expresiones generales para la matriz de transición de dicha guía de onda. Investigar el caso de un potencial de impureza  $W(x, z) = W_0(z) + \varepsilon W_1(x, z)$  donde  $\varepsilon > 0$  es una perturbación pequeña adimensional,  $W_0(z) \in L^\infty([0, H])$ ,  $W_1(x, z) \in L^\infty(D \times [0, H])$ ,  $[0, H] \in z$  donde  $z$  es la dirección de propagación de la partícula.

**Parte II**

**Resumen**

En la presente tesis se estudia el problema de dispersión en guías de ondas cuánticas unidimensionales y en tres dimensiones, para lo cual primero se estudiaron los espectros esenciales de los operadores electromagnéticos de Schrödinger con potenciales variables en el dominio  $\Pi = \Omega \times \mathbb{R}$ , donde  $\Omega \subset \mathbb{R}^n$  es un dominio acotado con una frontera suave provista con condiciones de frontera admisible. Aplicando el método de operador límite, se obtienen estimados explícitos de los espectros esenciales para una amplia clase de guías de ondas cuánticas. Posteriormente se estudia el problema de dispersión en una guía de onda unidimensional; los coeficientes de transmisión y reflexión para la dispersión de una partícula en potenciales en una dimensión son calculados por medio de series de potencia de parámetro espectral. Los resultados son comparados con resultados conocidos. Finalmente se considera la propagación del electrón en una guía de onda cilíndrica en tres dimensiones  $\Pi = D \times \mathbb{R}$  donde  $D$  es un dominio acotado en  $\mathbb{R}^2$  descrito por el problema de Dirichlet para el operador de Schrödinger

$$Hu(x, z) = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \Delta_x + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(x) + W(x, z) \right] u(x, z) = 0, u|_{\partial\Pi} = 0, (x, z) \in \Pi$$

donde  $x = (x_1, x_2)$ ,  $\Delta_x = \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2}$ ,  $V(x)$  es el potencial de confinamiento transversal, y  $W(x, z)$  es el potencial impureza. Se construyeron las matrices de transición izquierda y derecha y se da un algoritmo numérico para los cálculos basado en el método de serie de potencia de parámetro espectral.

## **Parte III**

# **Abstract**

In the present thesis we study the dispersion problem in one-dimensional and three-dimensional quantum waveguides, for which, in first place we study the essential spectra of Schrödinger operators with variable potentials in cylindrical domains  $\Pi = \Omega \times \mathbb{R}$ , where  $\Omega \subset \mathbb{R}^n$  is a bounded domain with a smooth boundary provided by admissible boundary conditions. Applying the limit operators method, we obtain explicit estimates of the essential spectrum for a wide class of quantum waveguides. Later we study the dispersion problem in a quantum one-dimensional waveguide; the transmission and reflection coefficients for the scattering of a particle on one-dimensional potential are calculated by means of Spectral Parameter Power Series (SPPS). The results were compared with known results. Finally we consider the electron propagation in a cylindrical three-dimensional quantum waveguide  $\Pi = D \times \mathbb{R}$  where  $D$  is a bounded domain in  $\mathbb{R}^2$  described by the Dirichlet problem for the Schrödinger operator

$$Hu(x, z) = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \Delta_x + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(x) + W(x, z) \right] u(x, z) = 0, u|_{\partial\Pi} = 0, (x, z) \in \Pi$$

where  $x = (x_1, x_2)$ ,  $\Delta_x = \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2}$ ,  $V(x)$  is the transversal confinement potential, and  $W(x, z)$  is the impurity potential. We construct the left and right transition matrices and give a numerical algorithm for their calculations based on the spectral parameter power series method.

## **Parte IV**

# **Introducción**

En esta tesis se trata el problema de propagación y dispersión de las ondas de materia (cuánticas) dentro de una guía de onda. Las guías de ondas cuánticas son estructuras de tamaño nanométrico con un solo grado de libertad para el movimiento de las partículas [21]. Un ejemplo físico de dicho modelo teórico son los alambres cuánticos [29]. La importancia de estas estructuras radica en sus potenciales aplicaciones en la Nanoelectrónica. Algunas son como filtros pasabandas [63], y como interruptores electrónicos que trabajan a partir de las interferencias de las ondas cuánticas [62]. Propuestas teóricas más recientes incluyen el uso de guías de ondas cuánticas como interruptores electrónicos que operan en interacción con radiación de muy altas frecuencias [68], o en la fabricación de nanotransistores [9].

La presencia de un defecto impureza en la estructura de la guía de onda es el caso que se estudia en la presente tesis. Dicha impureza puede ser resultado de los procesos de fabricación de la guía de onda entre los que se encuentran la fotolitografía o litografía de haces de electrones, o el método V-grooved [29], o pueden ser generados de manera controlada [66]. En cualquier caso la consecuencia más importante es una modificación en el comportamiento de la conductancia electrónica de dicha estructura (para mayores referencias se pueden consultar [4], [33], [34], [35], [32], [44], así como las referencias ahí citadas).

En la presente tesis se analizó el problema de dispersión cuántico en una y tres dimensiones. Para el caso unidimensional se trabajó principalmente sobre el cálculo de los coeficientes de transmisión y reflexión. Dichos cálculos para algunos potenciales unidimensionales como el potencial constante [67], Posch Teller [43], exponencial [43], han sido calculados analíticamente, pero para la mayoría de los casos se usan métodos de aproximación numéricos como: WKB, aproximación por funciones de Airy [47] escalones múltiples [3], matriz de transferencia y el método numérico Runge-Kutta [6], [56]. Para dicho problema se usó en esta tesis el método de Series de Potencia de Parámetro Espectral (SPPS). Dicho método fue introducido por V. Kravchenko [39] y es un método que resuelve numéricamente ecuaciones diferenciales, entre las que se encuentra la ecuación de Sturm-Liouville. El método SPPS ha sido aplicado exitosamente a diferentes problemas de la Física Matemática que se reducen al problema de Sturm Liouville (ver [13], [14], [36], [40]).

Para el caso de la dispersión en guías de onda cuántica en tres dimensiones se consideró que dicha guía puede ser representada por un dominio  $\Pi = D_x \times \mathbb{R}$  en  $\mathbb{R}^3$  donde  $D_x$  es un dominio acotado en  $\mathbb{R}^2$ ,  $x = (x_1, x_2) \in \Omega$ ,  $z \in \mathbb{R}$ . El Hamiltoniano  $H$  que corresponde al problema de dispersión en una guía de onda cuántica es  $H = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \Delta_x + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(x) + W(x, z)$ , en donde  $x$  corresponde a las coordenadas del plano transversal de la guía, y  $z$  a la dirección de propagación de las partículas dentro de la guía. El término  $V(x)$  es el potencial de confinamiento de la guía, y  $W(x, z)$  es el

---

potencial impureza que modela la interacción de un defecto con una partícula que se propaga dentro de la estructura. La investigación de la dispersión de los electrones por las impurezas en las guías de onda cuánticas es uno de los problemas teóricos más importantes en dicha área (ver para mayores referencias [4],[33],[34],[35],[44],[32],[29],[66] y las referencias citadas en dichos artículos). En esta tesis se consideraron algunos métodos analíticos y numéricos de construcción de matrices de transición generados por potenciales impurezas.

A continuación se presenta una descripción de los Capítulos que conforman la presente tesis

- En el Capítulo 1 se toma el contenido del capítulo 1 de [59] donde se hace una breve introducción de la Mecánica Cuántica hasta la ecuación de Schrödinger. Se da una introducción al análisis funcional, en la cual se presentan conceptos matemáticos que son de utilidad para el subsecuente desarrollo de la tesis. Se aborda de forma breve el problema de propagación de una partícula libre y se concluye con una introducción a las guías de ondas cuánticas.
- En el Capítulo 2 se toma el contenido del capítulo 2 de [59] donde se investiga sobre las propiedades espectrales de los operadores de Schrödinger en una guía de onda cuántica. El estudio de dicho problema ha atraído mucha atención debido a sus interesantes propiedades matemáticas, así como sus aplicaciones (ver para mayores referencias [48], [46], [19], [20], [21], [22], [23], [27], [41]). Se estudió el espectro esencial de los problemas con valor en la frontera uniformemente elípticos en dominios cilíndricos para operadores diferenciales de segundo orden. Para el estudio de dicho espectro se usó el método de operador límite (para mayor referencia sobre dicho método consultar [53]). Después se consideró el caso del operador electromagnético de Schrödinger con potenciales lentamente oscilantes y coeficientes lentamente oscilantes en la condición de frontera, y del cual se obtiene una descripción explícita de su espectro. A partir de dicho resultado se obtuvieron estimaciones del espectro discreto y esencial para los operadores de Schrödinger en una guía de onda estratificada horizontalmente.
- En el Capítulo 3 se trata el problema de dispersión cuántico unidimensional. Se obtienen expresiones generales por medio del método SPPS para los coeficientes de transmisión  $T(\lambda)$  y reflexión  $R(\lambda)$ . Se presentan resultados de simulaciones numéricas y se hacen las respectivas comparaciones con resultados reportados en la literatura [67] y [43].
- En el Capítulo 4 se aborda el problema de dispersión de una guía de onda cuántica definida en un dominio cilíndrico. Se obtuvieron expresiones analíticas para las

---

entradas de las matrices de transición derecha  $T_r(\lambda)$  e izquierda  $T_l(\lambda)$  para un potencial compacto

$$W(x, z) = \begin{cases} W_0(x, z), z \in [0, H] \\ 0, z \notin [0, H]. \end{cases} \quad (1)$$

Para el caso simétrico

$$W(x, z) = \begin{cases} W_0(z), z \in [0, H] \\ 0, z \notin [0, H]. \end{cases} \quad (2)$$

se han obtenido resultados analíticos y numéricos para los coeficientes de transición derecha  $T_r(\lambda)$  e izquierda  $T_l(\lambda)$  aplicando el método SPPS. Finalmente se analiza un potencial perturbado  $W(x, z) = W_0(x, z) + \varepsilon W_1(x, z)$  donde  $\varepsilon > 0$  es una perturbación pequeña adimensional,  $W_0(x, z)$  tiene la forma (1) y  $W_1(x, z)$  la forma (2). Para este caso se aplican el método SPPS y de perturbación.

# Capítulo 1

## Antecedentes Teóricos

En el presente Capítulo se hará una presentación básica de algunos de los conceptos más importantes tanto físicos como matemáticos que se usarán en el resto del trabajo. El contenido del presente capítulo se toma del primer capítulo de [59]. A su vez, el presente contenido toma como base la introducción a la Mecánica Cuántica presentada en los libros [67] y [18], aunque también se refuerza el presente trabajo con los contenidos de los libros [5] y [43]. Respecto a la introducción a las guías de onda cuántica que se hace también este capítulo se toma como base la explicación que sobre alambres cuánticos se hace en el libro [29].

### 1.1 Introducción a la mecánica cuántica

La mecánica cuántica surge como una respuesta a los diversos problemas que presentaba la física a finales del siglo XIX y principios del siglo XX, y que no podían ser explicados satisfactoriamente por las teorías entonces existentes. El primero de dichos problemas fue la radiación del cuerpo negro que es tratado a fondo en [67]. Las distribuciones de energía predichas en forma teórica no se correspondían con los resultados experimentales. Para resolver dicho problema, Max Planck propone su postulado: "Los osciladores armónicos que constituyen al cuerpo negro sólo pueden emitir o absorber energía en múltiplos enteros de  $h\nu$ ". Matemáticamente se expresa así:

$$E = nh\nu \quad n \in \mathbb{N} \quad (1.1)$$

donde  $E$  es la energía de los osciladores,  $n = 1, 2, 3, \dots$ ,  $\nu$  es la frecuencia de oscilación del sistema y  $h$  es la constante de Planck

$$h = 6.626 \times 10^{-34} J \cdot s. \quad (1.2)$$

En la ecuación (1.2),  $J$  (Joules) representa las unidades de energía y  $s$  (segundos) las unidades de tiempo. Otro problema que estaba fuera del alcance de las teorías clásicas en esos años era el efecto fotoeléctrico [67]. Para solventarlo, Albert Einstein generalizó los resultados obtenidos por Max Planck, y aseguró que la razón del comportamiento discreto de la energía en la radiación del cuerpo negro no se debe a los osciladores en las paredes del cuerpo negro, sino al campo de radiación, el cual se encuentra cuantizado por paquetes de energía de valor  $\hbar\omega$  (donde  $\hbar = \frac{h}{2\pi}$  y  $\omega = 2\pi\nu$ ) llamados fotones. Cada oscilador interactúa con el campo absorbiendo o emitiendo  $n$  fotones.

En el año de 1923, Louis De Broglie propone que toda la materia tiene asociada una onda [67]. Por lo tanto una partícula con momento  $p$  tiene asociada una onda cuya longitud  $\lambda$  y vector  $\vec{k}$  están definidos por las siguientes ecuaciones:

$$\lambda = \frac{h}{p} \qquad \vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}. \qquad (1.3)$$

Al conjunto de ecuaciones (1.3) se les conoce como relaciones de De Broglie.

Un experimento que muestra la diferencia en el comportamiento entre partículas clásicas y cuánticas es el experimento de la doble rendija. Éste consiste en una fuente de partículas (clásicas o cuánticas), las cuales son lanzadas hacia una pantalla que registra su arribo. En medio de la trayectoria se encuentra una barrera con un par de rendijas  $A$  y  $B$ . Las diferencias en las distribuciones de las partículas tanto en el caso clásico, como cuántico se muestran en las Figuras 1.1 y 1.2.

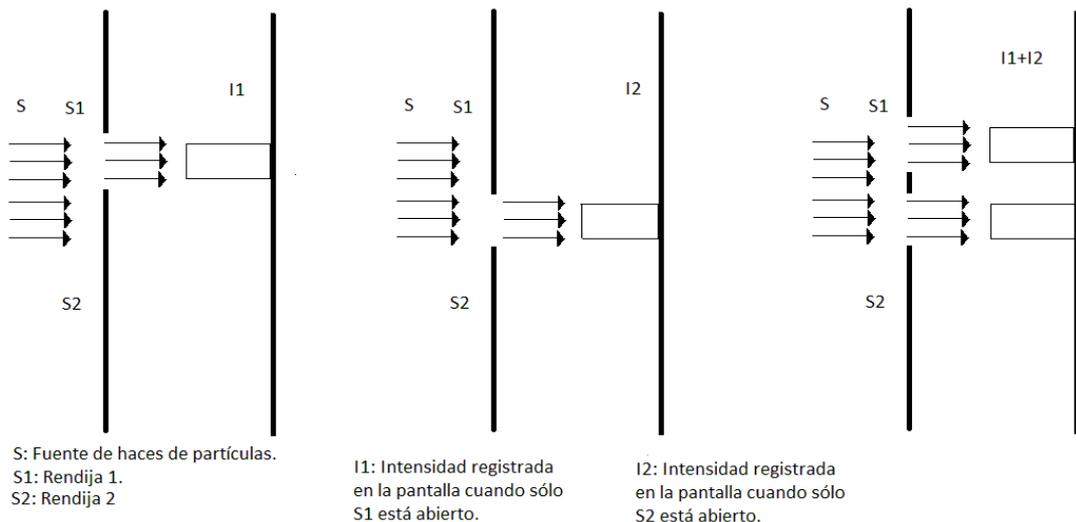


Figura 1.1: Experimento de la doble rendija para partículas clásicas [34].

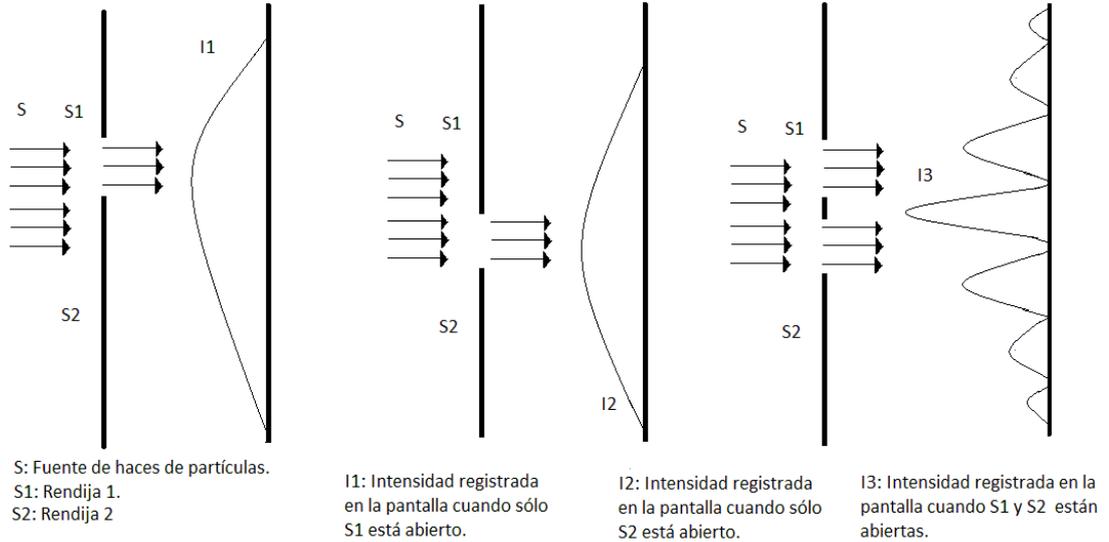


Figura 1.2: Experimento de la doble rendija para partículas cuánticas [34].

Las diferencias en el comportamiento de la distribución de las partículas se deben a la dualidad onda-partícula en el régimen cuántico, la cual produce el comportamiento oscilatorio de dicha intensidad [18], [67]. En la Figura 1.2, la intensidad  $I3 \neq I1 + I2$  [67]. Para determinar el número de partículas que participan en el experimento de la Figura 1.2 se usa la siguiente expresión:

$$dn = \rho(\mathbf{r}) dv \quad (1.4)$$

donde  $\mathbf{r} = (r_1, r_2, r_3)$  son las tres coordenadas ortogonales generalizadas,  $dn$  es el número promedio de partículas en un elemento de volumen  $dv$ , y  $\rho(\mathbf{r})$  es la densidad volumétrica de las partículas. El número total  $N$  de partículas en el experimento, en el dominio  $\Omega \subset \mathbb{R}^3$  es igual a

$$N = \int_{\Omega} \rho(\mathbf{r}) dv. \quad (1.5)$$

Por medio de un análisis clásico se relaciona la densidad de carga  $\rho(\mathbf{r})$  con la densidad de flujo  $\vec{j}$  a través de la ecuación de continuidad (para mayores detalles, consultar [18]). Sin embargo, la ecuación de continuidad no proporciona información acerca de los patrones de interferencia que aparecen en la pantalla (Figura 1.2). Para resolver dicho problema, un primer paso es relacionar a la densidad de carga  $\rho$  con la intensidad  $\psi$  del haz electrónico. Esto significa que  $\rho(\mathbf{r}) \sim |\psi|^2 = \psi^* \psi$  (donde  $\psi^*$  es el conjugado complejo de  $\psi$ ). Por otra parte, la relación que guarda  $\psi$  con el número total de partículas  $N$  se puede establecer por medio de un factor  $A$  de la siguiente

manera:

$$N = \int_{\Omega} \rho(\mathbf{r}) dv = A \int_{\Omega} |\psi|^2 dv \quad (1.6)$$

donde  $A$  es un factor de proporcionalidad. Sin embargo, de manera usual se acostumbra establecer la relación  $N = A$ , por lo tanto la función  $\psi$  está normalizada

$$\int_{\Omega} |\psi|^2 dv = \int_{\Omega} \psi^* \psi dv = 1. \quad (1.7)$$

Dicho resultado fue interpretado por Born como la probabilidad de encontrar a una partícula en el espacio [67]. Por lo tanto  $|\psi|^2$  se puede considerar como una densidad de probabilidad.

### 1.1.1 Ecuación de Schrödinger

Para la construcción de una ecuación de onda que se acople a la física cuántica se propone una onda monocromática  $A(\mathbf{r}, t) = A_0 e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)}$  donde  $\mathbf{k}$  es el vector de onda en un sistema de coordenadas ortogonales arbitrario. La ecuación de onda electromagnética es igual a

$$\nabla^2 A = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 A}{\partial t^2}, \quad (1.8)$$

donde  $\nabla^2$  es el operador laplaciano y  $c = 3 \times 10^8 m/s$  es la velocidad de la luz en el vacío. A partir de la anterior ecuación se obtiene la siguiente expresión

$$-k^2 A(\mathbf{r}, t) = -\frac{\omega^2}{c^2} A(\mathbf{r}, t). \quad (1.9)$$

donde  $k^2 = \|\mathbf{k}\|^2$ . A partir la ecuación (1.9) se obtiene la relación

$$\omega = kc. \quad (1.10)$$

Recordando el postulado de Planck (1.1) bajo la forma  $E = \frac{2\pi}{2\pi} h\nu = \hbar\omega$ , y la relación de De Broglie (1.3) se obtiene el siguiente resultado

$$E = \hbar\omega = \hbar kc = pc. \quad (1.11)$$

La ecuación (1.11) está en contradicción con la expresión en mecánica clásica de la energía cinética  $E = \frac{p^2}{2m}$ . Es claro, entonces, que las ondas monocromáticas que cumplen la ecuación de onda (3.1), no son las mismas que cumplen con la relación de De Broglie. Para solventar dicho problema se reduce en una unidad el orden de la derivada parcial respecto al tiempo.

$$\nabla^2 \Psi(\mathbf{r}, t) = \alpha \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (1.12)$$

En la ecuación (1.12),  $\alpha$  es un parámetro por calcular. Aplicando las derivadas parciales en ambos lados de la igualdad, se obtiene la siguiente expresión:

$$-k^2 \Psi(\mathbf{r}, t) = \alpha (-i\omega) \Psi(\mathbf{r}, t). \quad (1.13)$$

Por lo tanto el valor de  $k^2$  es igual a

$$k^2 = i\omega\alpha. \quad (1.14)$$

Despejando el valor de  $\omega$  de la anterior expresión y sustituyendo en (1.11) se obtiene

$$E = \frac{k^2 \hbar}{i\alpha} = \frac{\hbar^2 k^2}{i\hbar\alpha}. \quad (1.15)$$

Si se iguala (1.15) con  $E = \frac{p^2}{2m}$ , y se sustituye  $p$  por la relación de De Broglie (1.3) se obtiene

$$\frac{1}{i\hbar\alpha} = \frac{1}{2m}. \quad (1.16)$$

Despejando  $\alpha$  de (1.16) se obtiene la expresión

$$\alpha = \frac{2m}{i\hbar} = -\frac{i2m}{\hbar}. \quad (1.17)$$

Sustituyendo el nuevo valor de  $\alpha$  en la ecuación (1.12) se obtiene la expresión

$$\begin{aligned} \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}, t) &= -\frac{i2m}{\hbar} \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}, t) &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (1.18)$$

La ecuación (1.18) es la ecuación de Schrödinger para una onda libre, en donde la energía potencial  $V(\mathbf{r}, t) = 0$ . En otro caso, la ecuación de Schrödinger toma la forma

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t). \quad (1.19)$$

La ecuación (1.19) puede ser reescrita en términos del hamiltoniano  $H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}, t)$  obteniéndose lo siguiente:

$$H\Psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t). \quad (1.20)$$

En coordenadas rectangulares, la ecuación (1.19) adopta la siguiente forma

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(\mathbf{r}, t) \right] \Psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t). \quad (1.21)$$

Entre las condiciones que debe cumplir la función de onda  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  se encuentran:

- $\Psi(\mathbf{r}, t)$ , debe ser derivable y sus dos primeras derivadas deben ser funciones continuas ya que la ecuación (1.21) implica derivadas de segundo orden.
- $\Psi(\mathbf{r}, t)$  debe ser univaluada, ya que al ser función a cada argumento le corresponde uno y solo un valor de la función.
- En lo general,  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  debe ser de cuadrado integrable. La cantidad  $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^3 dv$  representa la probabilidad de encontrar en el tiempo  $t$  a la la partícula en un volumen  $dv$  centrado en un punto  $\mathbf{r} = r_0$ . La probabilidad de encontrar la partícula en cualquier parte del espacio debe ser igual a uno, razón por la cual  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  es cuadrado integrable [67].
- $\Psi(\mathbf{r}, t)$  debe de cumplir las condiciones de frontera del sistema, ya que esto permite que de entre una familia de soluciones se seleccione la que es físicamente admisible.

Para el resto del trabajo sólo se considera el caso donde  $V(\mathbf{r}, t) = V(\mathbf{r})$ .

Si  $V(\mathbf{r}, t) = V(\mathbf{r})$ , la ecuación (1.19) puede ser resuelta mediante la técnica de separación de variables. Se propone como función solución  $\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) \chi(t)$ . Sustituyendo dicha función en la ecuación antes referida se obtiene

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \chi(t) \nabla^2 \psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) \chi(t) = i\hbar \psi(\mathbf{r}) \frac{d\chi(t)}{dt}. \quad (1.22)$$

Dividiendo ambos lados de la ecuación (1.22) entre  $\psi(\mathbf{r}) \chi(t)$  se obtiene la siguiente expresión

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi(\mathbf{r})} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}) = i\hbar \frac{1}{\chi(t)} \frac{d\chi(t)}{dt}. \quad (1.23)$$

La ecuación (1.23) se puede descomponer en las siguientes dos ecuaciones

$$i\hbar \frac{1}{\chi(t)} \frac{d\chi(t)}{dt} = E \quad (1.24)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi(\mathbf{r})} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}) = E. \quad (1.25)$$

En ambas ecuaciones,  $E$  es una constante. La solución de la ecuación (1.24) se obtiene así

$$\begin{aligned}\frac{d\chi(t)}{\chi(t)} &= -\frac{i}{\hbar} E dt \\ \ln \chi(t) &= -\frac{iE}{\hbar} t \\ \chi(t) &= e^{-\frac{iE}{\hbar} t}.\end{aligned}\tag{1.26}$$

Dado que la magnitud de  $|\chi(t)| = 1$  el proceso se considera estacionario. Por otra parte la ecuación (1.25) adquiere la forma

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r})\tag{1.27}$$

que es conocida como ecuación de Schrödinger estacionaria. Para el caso de una variable  $x$  de posición unidimensional la ecuación (1.27) toma la forma

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V(x) \psi(x) = E \psi(x).\tag{1.28}$$

## 1.2 Elementos de análisis funcional

Para el estudio de la mecánica cuántica, es necesario conocer algunos conceptos e ideas propias del análisis funcional. El contenido de la presente sección esta mayormente basado en el material de los libros [2], [60] y [37].

Un conjunto  $R$  de elementos  $\mathbf{f}, \mathbf{g}, \mathbf{h}, \dots$  llamados vectores, es un **espacio lineal (o vectorial)** si:

1. Hay una operación llamada adición, la cual está denotada por el símbolo  $+$ , con respecto a la cual  $R$  forma un grupo abeliano [2]. El elemento cero es denotado por  $0$ .
2. La multiplicación de los elementos  $\mathbf{f}, \mathbf{g} \in R$  por los elementos  $\alpha, \beta, \gamma, \dots \in \mathbb{C}$  está definida de manera que

$$\alpha(\mathbf{f} + \mathbf{g}) = \alpha\mathbf{f} + \alpha\mathbf{g}\tag{1.29}$$

$$(\alpha + \beta)\mathbf{f} = \alpha\mathbf{f} + \beta\mathbf{f}\tag{1.30}$$

$$\alpha(\beta\mathbf{f}) = (\alpha\beta)\mathbf{f}\tag{1.31}$$

$$1\cdot\mathbf{f} = \mathbf{f}, \quad 0\cdot\mathbf{f} = 0.\tag{1.32}$$

Dado un espacio complejo lineal  $R$ , el **producto interno** es un mapeo binario que asocia un par de vectores  $\mathbf{f}, \mathbf{g} \in R$  con un número complejo denotado con  $(\mathbf{x}, \mathbf{y})$  que satisface lo siguiente:

1. Simetría  $(\mathbf{f}, \mathbf{g}) = (\mathbf{g}, \mathbf{f})^*$
2. Aditividad  $(\mathbf{f} + \mathbf{g}, \mathbf{h}) = (\mathbf{f}, \mathbf{h}) + (\mathbf{g}, \mathbf{h})$
3. Homogeneidad  $(\alpha\mathbf{f}, \mathbf{g}) = \alpha(\mathbf{f}, \mathbf{g})$
4. Positividad  $(\mathbf{f}, \mathbf{f}) > 0$  para toda  $\mathbf{f} \neq 0$ .

El espacio complejo lineal  $R$  sobre el que está definido el producto interno recibe el nombre de espacio con producto interno.

Los vectores  $\mathbf{f}, \mathbf{g} \in R$  son **ortogonales** si  $(\mathbf{f}, \mathbf{g}) = 0$ .

Por otra parte, un conjunto de vectores  $\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2, \dots, \mathbf{g}_n \in R$  es linealmente independiente si la combinación lineal

$$a_1\mathbf{g}_1 + a_2\mathbf{g}_2 + \dots + a_n\mathbf{g}_n = 0 \quad (1.33)$$

con  $a_1, a_2, \dots, a_n \in \mathbb{C}$  implica necesariamente que  $a_1 = a_2 = \dots = a_n = 0$ .

Un espacio lineal  $R$  es **finito dimensional** (o de dimensión  $n$ ) si  $R$  contiene  $n$  elementos linealmente independientes. Si el espacio  $R$  tiene un número infinito de elementos linealmente independientes, se dice que es de **dimensión infinita**.

El espacio lineal  $R$  con campo  $\mathbb{C}$  es un **espacio normado**, si a cada elemento  $\mathbf{g} \in R$  corresponde un elemento no negativo  $\|\mathbf{g}\|$  llamado norma de  $\mathbf{g}$  y que cumple las siguientes condiciones:

1.  $\|\mathbf{g}\| = 0$  si y sólo si  $\mathbf{g} = 0$ .
2. Si  $\alpha \in \mathbb{C}$ ,  $\|\alpha\mathbf{g}\| = |\alpha| \|\mathbf{g}\|$  donde  $|\alpha|$  es el módulo de  $\alpha$ .
3.  $\|\mathbf{g} + \mathbf{h}\| \leq \|\mathbf{g}\| + \|\mathbf{h}\|$ .

La **norma** de un vector  $\mathbf{g} \in R$  definida en base al producto interno es igual a

$$\|\mathbf{g}\| = \sqrt{(\mathbf{g}, \mathbf{g})}. \quad (1.34)$$

Con base a la anterior definición se puede establecer el siguiente hecho: cada espacio normado es un **espacio métrico** con la métrica  $d(\mathbf{g}, \mathbf{h})$  definida de la siguiente manera. Dado  $\mathbf{g}, \mathbf{h} \in R$ ,  $d(\mathbf{g}, \mathbf{h}) = \|\mathbf{g} - \mathbf{h}\|$  [37].

Un conjunto que contiene todos sus puntos límite se dice que es un **conjunto cerrado** [60].

Si el espacio métrico  $R$  es la cerradura de un subconjunto contable  $Q \subset R$ , entonces  $R$  es un **espacio separable** ([2]).

Una secuencia  $\{\mathbf{g}_n \in R \mid n \in \mathbb{N}\}$  es conocida como secuencia de Cauchy si para  $n, m \geq N_\epsilon$  se cumple  $d(\mathbf{g}_n, \mathbf{g}_m) < \epsilon$ , en donde los números  $N_\epsilon, \epsilon \in \mathbb{N}$ .

Un espacio  $R$  con métrica es completo si cada secuencia de Cauchy converge a un punto  $x \in R$ . Un espacio normado completo  $S$  se conoce como **espacio de Banach** [37].

### 1.2.1 Espacios de Hilbert

Un espacio de Hilbert  $H$  es un espacio de producto interno de dimensión infinita y completo con respecto a la métrica generada por un producto interno [2]. La métrica  $d(\mathbf{g}, \mathbf{h})$  en un espacio de Hilbert está definida de la siguiente manera:

$$d(\mathbf{g}, \mathbf{h}) = \|\mathbf{g} - \mathbf{h}\| = (g - h, g - h)^{\frac{1}{2}} \quad (1.35)$$

Si los elementos  $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \dots, \mathbf{e}_n$  de un conjunto  $M \subset H$  son vectores ortogonales, y si cada uno de ellos está **normalizado (norma igual a uno)**, entonces  $M$  es un sistema ortonormal. Si  $M$  es un conjunto contable, entonces se le conoce como secuencia ortonormal. Dada una secuencia de vectores independientes  $\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2, \dots, \mathbf{g}_n, \dots$  pertenecientes a un espacio de Hilbert  $H$ , se puede construir una secuencia equivalente ortonormal de vectores  $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \dots, \mathbf{e}_n, \dots$ . El proceso por medio del cual se consigue lo anterior es conocido como ortogonalización y se puede resumir a lo siguiente: se calcula el vector  $\mathbf{k}_{n+1}$  con la siguiente fórmula:

$$\mathbf{k}_{n+1} = \mathbf{g}_{n+1} - \sum_{k=1}^n (\mathbf{g}_{n+1}, \mathbf{e}_k) \mathbf{e}_k. \quad (1.36)$$

La obtención del vector  $\mathbf{e}_n$  se consigue por medio de la fórmula:

$$\mathbf{e}_{n+1} = \frac{\mathbf{k}_{n+1}}{\|\mathbf{k}_{n+1}\|}. \quad (1.37)$$

Un sistema ortonormal  $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \dots, \mathbf{e}_n, \dots \in H$  es cerrado si y sólo si para toda  $\mathbf{g} \in H$  se cumple:

$$\|\mathbf{g}\|^2 = \sum_{k=1}^{\infty} |(\mathbf{g}, \mathbf{e}_k)|^2. \quad (1.38)$$

La ecuación (1.38) también se conoce como relación de cerradura. Si la relación de cerradura se cumple, entonces los vectores  $\mathbf{g}, \mathbf{h} \in H$  cumplen con la relación general de Parseval [2]:

$$(\mathbf{g}, \mathbf{h}) = \sum_{k=1}^{\infty} (\mathbf{g}, \mathbf{e}_k) (\mathbf{e}_k, \mathbf{h}). \quad (1.39)$$

Una secuencia ortonormal infinita  $e_1, e_2, \dots, e_n, \dots \in H$  es completa en  $H$  si, y sólo si dicha secuencia es cerrada en  $H$  [2].

Cada sistema ortonormal completo en un espacio separable es necesariamente una secuencia infinita, también llamada **base ortonormal** del espacio  $H$  [2]. El producto interno de los elementos  $\{e_i\}_{i=0}^{\infty}$  de la base ortonormal del espacio  $H$  es igual a la delta de Kronecker

$$(e_i, e_k) = \delta_{ik} \quad \delta_{ik} = \begin{cases} 1 & i = k \\ 0 & i \neq k. \end{cases} \quad (1.40)$$

Un ejemplo de espacio de Hilbert  $H$  es el espacio  $L^2$ . Dado un intervalo (finito o infinito)  $(a, b)$  sobre el eje de los números reales, se denota por  $L^2(a, b)$  (o  $L^2$ ) al conjunto de funciones  $f$  medibles en el sentido de Lebesgue [60], definidas en el intervalo  $(a, b)$ , y evaluadas en los complejos  $\mathbb{C}$ , tal que  $|f|^2$  es integrable en el sentido de Lebesgue (para mayor información sobre las integrales de Lebesgue, consúltese [60]). Además,  $f + g \in L^2$  siempre que  $f, g \in L^2$ ; y  $\lambda f \in L^2$  donde  $\lambda \in \mathbb{C}$  y  $f \in L^2$ . Por lo tanto  $L^2$  es un espacio lineal, donde el elemento cero es la función  $h = 0$  en casi todo el intervalo  $(a, b)$ . El espacio  $L^2$  tiene definido su producto interno de la siguiente forma:

$$(f, g) = \int_a^b f(t) g^*(t) dt. \quad (1.41)$$

La prueba de la completez de dicho espacio en el sentido de Cauchy es ofrecida por Akhiezer y Glazman [2]. La convergencia de la función  $f$  en el espacio  $L^2$  está dada por la siguiente ecuación:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int_a^b |f(t) - f_n(t)|^2 dt = 0. \quad (1.42)$$

En la ecuación (1.42)  $f_n(t)$  es una secuencia de funciones que convergen a  $f(t)$  en el intervalo  $(a, b)$ . Existen varias secuencias ortonormales completas para el espacio  $L^2$ . Un ejemplo de dichas secuencias son las funciones:  $\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikt}$  ( $\pm k = 1, 2, \dots$ ) también conocido como sistema trigonométrico, y cuya prueba de completez está dada en las referencias [60], [2].

Un ejemplo del anterior espacio es el conjunto de eigenfunciones  $\psi(x) \in L^2$  de la ecuación de Schrödinger (1.28) las cuales forman un conjunto completo tal como se puede deducir de los siguientes desarrollos.

Sea  $f(x)$  una función bien comportada (que en este caso significa integrable en el sentido de Lebesgue)

$$f(x) = \sum_n a_n \varphi_n(x) \quad (1.43)$$

que está en términos del conjunto de funciones ortonormales  $\{\varphi_n(x)\}$ . Para calcular los coeficientes  $a_n$  se multiplican ambos lados de la ecuación por  $\varphi_m^*$ , y se integra obteniéndose:

$$\int \varphi_m^*(x) f(x) dx = \sum_n a_n \int \varphi_m^* \varphi_n dx$$

$$a_m = \int f(x) \varphi_m^*(x) dx. \quad (1.44)$$

El producto interno  $(f(x), \varphi_m(x))$  en  $L^2$  es igual a

$$(f(x), \varphi_m(x)) = \int f(x) \varphi_m^*(x) dx. \quad (1.45)$$

El producto interno de las funciones  $f(x) = \sum_n a_n \varphi_n(x)$  y  $g(x) = \sum_n b_n \varphi_n(x)$  es igual a

$$(g(x), f(x)) = \int g(x) f^*(x) dx = \sum_{n,n'} b_{n'} a_n^* \int \varphi_{n'} \varphi_n^* dx = \sum_{n,n'} b_{n'} a_n^* \delta_{n,n'}. \quad (1.46)$$

Desarrollando el último término de la ecuación (1.46) se obtiene:

$$(g(x), f(x)) = \sum_{n,n'} b_{n'} a_n^*. \quad (1.47)$$

La última expresión es una forma alternativa de la relación de Parserval. Para recuperar la ecuación (1.39) se reescribe la ecuación (1.44) como  $b_{n'} = (g, \varphi_n)$  y  $a_n^* = (f, \varphi_n)^* = (\varphi_n, f)$ . Sustituyendo en la ecuación (1.47) se obtiene lo siguiente

$$(g, f) = \sum_n (g, \varphi_n) (\varphi_n, f). \quad (1.48)$$

A partir de (1.48), se puede concluir que el conjunto  $\{\varphi_n\}$  es completo. El conjunto  $\{\varphi_n\}$  conforma una base del espacio  $L^2$ .

Un caso especial se presenta cuando  $f(x) = g(x) = \psi(x)$ , donde  $\psi(x)$  es la intensidad del haz electrónico que aparece en la Figura 1.2 y en las ecuaciones (1.6) y (1.7). Sustituyendo en (1.46) se obtiene lo siguiente:

$$\int |\psi|^2 dx = \sum_n |a_n|^2. \quad (1.49)$$

De la condición de normalización de la función de onda (1.7) se obtiene:

$$\sum_n |a_n|^2 = 1. \quad (1.50)$$

Por lo tanto, si la función de onda  $\psi(x)$  está formada por la superposición de funciones  $\varphi_n$  con coeficiente  $a_n$ , a partir del resultado (1.50) se puede interpretar a  $|a_n|$  como la contribución de cada función  $\varphi_n$  a la función de onda (densidad de probabilidad)  $\psi(x)$ .

### 1.2.2 Operadores y funcionales lineales

Sean  $M$  y  $N$  dos espacios lineales. El operador  $L$  transforma los elementos del conjunto  $M$  a elementos del conjunto  $N$ . Un **operador lineal** es aquél que para los elementos  $f$  y  $g \in M$ , y los números complejos  $\lambda$  y  $\mu$  cumple la ecuación

$$L(\lambda f + \mu g) = \lambda Lf + \mu Lg. \quad (1.51)$$

donde  $D(L) = M$  es el **dominio** de definición del operador  $L$ . Si para toda  $f \in M$  se cumple  $Lf = f$ , entonces  $L$  es conocido como el operador identidad y se denota por  $I$ .

Dado un operador lineal  $L$ , con su dominio  $D(L)$ , que es un espacio de Hilbert, se define como **kernel**  $\ker(L)$  al conjunto de elementos  $f \in D(L)$  tal que  $Lf = 0$ . La **imagen** del operador  $L$  es el conjunto de elementos  $g \in N$  tal que

$$\text{Im}(L) = \{g \in N : g = Lf, f \in D_L\}. \quad (1.52)$$

El operador lineal  $L$ , que mapea de  $M$  a  $N$  es un **operador continuo** si de la convergencia  $f_k \rightarrow f$  cuando  $k \rightarrow \infty$  en  $M$ , se obtiene  $Lf_k \rightarrow Lf$  cuando  $k \rightarrow \infty$  en  $N$ .

El operador lineal  $L$ , que mapea los espacios lineales normados de  $M$  a  $N$ , es un **operador acotado** si existe un número  $C > 0$ , tal que se cumple la siguiente desigualdad:

$$\|Lf\|_N \leq C \|f\|_M \quad (1.53)$$

para toda  $f \in M$ ; donde  $\|\cdot\|_N$  y  $\|\cdot\|_M$  son las normas de los espacios lineales normados  $N$  y  $M$  respectivamente.

Dado un operador lineal  $L$  con dominio  $M$ , la ecuación

$$Lu = F \quad (1.54)$$

es conocida como ecuación lineal no homogénea. Si  $F$  toma como valor

$$Lu = \lambda u \quad (1.55)$$

y  $u \neq 0$ , al parámetro complejo  $\lambda$  se le conoce como **eigenvalor** del operador  $L$ . Por su parte al conjunto de soluciones no triviales  $u \in M$  se les conoce como **eigenfunciones** del operador  $L$ .

Un funcional lineal  $l$  es un operador lineal que transforma un elemento  $f \in M$  en un elemento del campo de los complejos  $\mathbb{C}$ . La acción del operador  $l$  sobre  $f$  se denota por medio del producto interno  $(l, f)$ .

La continuidad de un funcional lineal significa que si  $f_k \rightarrow f$  cuando  $k \rightarrow \infty$  en  $M$ , entonces la secuencia de números complejos  $(l, f_k) \rightarrow (l, f)$ .

### Operadores adjuntos y autoadjuntos

Se tiene un operador lineal, continuo, no acotado  $A$ , que define la acción  $y = Ax$ , mapeando de un espacio lineal  $D(A) = M$  (dominio del operador  $A$ ) a un espacio  $N$ . Además, hay un funcional continuo  $g$  definido sobre  $N$ , esto significa que  $g \in N^*$  (espacio dual). Al aplicarse el funcional  $g$  sobre  $y = Ax$ , se puede comprobar que  $g(Ax)$  es también un funcional definido en el espacio  $M$ . Al nuevo funcional se le puede denotar con  $f \in M^*$ . Un operador adjunto  $A^\dagger$  es aquel operador que mapea un funcional lineal continuo  $g \in N^*$  a un funcional lineal continuo  $f \in M^*$ . Denotando la acción del funcional  $f$  como  $(f, x)$  se obtiene

$$(g, Ax) = (A^\dagger g, x) = (f, x). \quad (1.56)$$

A los operadores adjuntos también se les conoce como operadores conjugados [37]. Un operador adjunto tiene las siguientes propiedades

- El operador  $A^\dagger$  es lineal.
- $(A^\dagger)^\dagger = A$
- $(A + B)^\dagger = A^\dagger + B^\dagger$ .
- Si  $k \in \mathbb{C}$ ,  $(kA)^\dagger = k^* A^\dagger$ .

Un operador autoadjunto es un operador lineal acotado  $A = A^\dagger$ . Por lo tanto

$$(Ax, z) = (x, Az) \quad (1.57)$$

y además el dominio de  $A$  ( $D(A)$ ) es igual al dominio de  $A^\dagger$  ( $D(A^\dagger)$ ). En la ecuación (1.57)  $x, z \in M$ .

Si la ecuación (1.57) se cumple, pero  $D(A) \neq D(A^\dagger)$  entonces  $A$  es un operador hermitiano [5].

La expresión  $(Ax, x)$  es la forma cuadrática del operador  $A$ . La forma cuadrática de los operadores hermitianos sólo toma valores reales ya que

$$(Ax, x) = (x, Ax)^* = (Ax, x)^*, \quad x \in M. \quad (1.58)$$

Si el operador  $A$  es hermitiano, todos sus eigenvalores son reales, y sus eigenfunciones correspondientes a diferentes eigenvalores son ortogonales [60].

### Operador de Schrödinger

A partir de la ecuación (1.28) se obtiene la expresión

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(x)\right)\psi(x) = E\psi(x) \quad (1.59)$$

donde

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(x) \quad (1.60)$$

es el operador de Schrödinger multidimensional. Para el caso de la ecuación (1.28) el operador  $H$  toma la forma

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x) \quad (1.61)$$

y dicho operador se conoce como operador unidimensional de Schrödinger. A partir de la ecuación (1.7), se sabe que las funciones  $\psi(x) \in L^2(\mathbb{R})$ . En la ecuación (1.59)  $\psi(x)$  son las eigenfunciones del operador  $H$ , y  $E$  los eigenvalores. El operador  $H$  es autodajunto solo si  $V(x)$  es real. Como es de esperarse, para operadores hermitianos las eigenfunciones  $\psi(x)$  correspondientes a diferentes eigenvalores  $E$  son ortogonales entre sí.

### Notación de Dirac

Además de los trabajos de Schrödinger, Heisenberg presentó una formulación de la mecánica cuántica basada en matrices (mecánica matricial) [18], [67]. Cabe señalar que tanto la formulación de Schrödinger como la de Heisenberg son equivalentes y conducen a las mismas relaciones físicas. Existe además una formulación de la mecánica cuántica aún más general realizada por Dirac [18], [67].

Se introduce la notación de Dirac para representar a un conjunto de vectores en el espacio de Hilbert. Un vector  $\Psi \in H$  se denota por el símbolo  $|\Psi\rangle$  conocido como ket. Por otra parte, se define para cada vector ket un funcional lineal llamado vector bra y denotado por  $\langle\Psi|$

$$(|\Psi\rangle)^\dagger = \langle\Psi|. \quad (1.62)$$

Dados dos kets  $|\Psi\rangle$  y  $|\varphi\rangle$  se define el producto interno de la siguiente manera

$$\langle\varphi|\Psi\rangle = c \quad (1.63)$$

en donde  $c \in \mathbb{C}$ . Por lo tanto los vectores bra mapean kets al campo de los complejos. El módulo al cuadrado del ket  $|\Psi\rangle$  es

$$\langle\Psi|\Psi\rangle = \|\Psi\|^2. \quad (1.64)$$

La base de un espacio de Hilbert  $H$  en términos de la notación de Dirac es un conjunto de kets  $\{|a_i\rangle\}$ , tal que su producto interno da como resultado [18]

$$\langle a_j | a_i \rangle = \delta_{ij} \quad (1.65)$$

mientras que para el caso continuo la expresión es igual a [18] :

$$\langle x | x' \rangle = \delta(x - x'). \quad (1.66)$$

Un ket  $|\Psi\rangle$  puede ser expresado en términos de la base  $\{|a_i\rangle\}$  de la siguiente forma [18] :

$$|\Psi\rangle = \sum_i c_i |a_i\rangle. \quad (1.67)$$

El valor de un coeficiente  $c_k$  se obtiene del producto interno de los kets  $|\Psi\rangle$  y  $|a_k\rangle$

$$\langle a_k | \Psi \rangle = \sum_i c_i \langle a_k | a_i \rangle = \sum_i c_i \delta_{ki} = c_k. \quad (1.68)$$

Por lo tanto, la ecuación (1.67) se puede escribir así:

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle &= \sum_i c_i |a_i\rangle = |a_i\rangle \langle a_i | \Psi \rangle \\ &\Rightarrow \sum_i |a_i\rangle \langle a_i | = I. \end{aligned} \quad (1.69)$$

En la ecuación (1.69)  $I$  es la matriz identidad. La anterior ecuación es la relación de completez para variables discretas en notación de Dirac. En el caso de las variables continuas, la relación es igual a [18] :

$$\int |x\rangle \langle x| dx = 1. \quad (1.70)$$

El anterior resultado es introducido en la expresión (1.68)

$$c_k = \langle a_k | \Psi \rangle = \int \langle a_k | x \rangle \langle x | \Psi \rangle dx. \quad (1.71)$$

Pero de la ecuación (1.44) se sabe que  $c_k = \int \varphi_k^*(x) \Psi(x) dx$ . Por lo tanto se puede establecer la siguiente relación

$$\langle x | \Psi \rangle = \Psi(x). \quad (1.72)$$

La ecuación (1.72) también es conocida como Teorema de Riesz [5]. Estos resultados muestran la relación que existe entre la notación de Dirac y la función de onda  $\Psi$ . Sustituyendo estos resultados en la ecuación (1.20), se obtiene la ecuación de Schrödinger en notación de Dirac

$$H |\Psi\rangle = i\hbar \frac{\partial |\Psi\rangle}{\partial t}. \quad (1.73)$$

### 1.3 Postulados de la Mecánica Cuántica

Los postulados de la Mecánica Cuántica son el conjunto mínimo de reglas a partir de las cuales se desarrolla toda la teoría cuántica, y las cuales resultan de las observaciones experimentales. John Von Neumann fue el primero en formular dichos postulados en [61]. Dichos postulados gobiernan a todos los sistemas cuánticos. La forma en que se presentan dichos postulados en el presente trabajo está basada en la forma en que son expuestos en [67]. Para poderlos enunciar es necesario definir previamente algunos conceptos:

- Sistema físico.- Una porción del universo que es aislable o sometible a manipulación experimental.
- Observables.- Cantidades físicas, o atributos y propiedades de un sistema físico.
- Estado del sistema.- La información física de un cierto sistema.
- Medición.- Proceso de interacción entre objetos clásicos y cuánticos.

Los postulados son generalmente expresados en notación de Dirac y son los siguientes:

1. Una cantidad física medible  $\alpha$ , llamada observable o variable dinámica, está representada por un operador hermitiano  $A$  cuyas eigenfunciones forman una base completa.
2. Toda la información física accesible del sistema está concentrada en el ket  $|\Psi(t)\rangle \in H$  donde  $t$  es un parámetro y  $H$  un espacio de Hilbert.
3. El resultado de medir  $\alpha$  sólo puede ser alguno de los eigenvalores del operador correspondiente  $A$ . Es importante notar que si el operador  $A$  es hermitiano, los eigenvalores correspondientes sólo serán números reales, lo cual se corresponde con la naturaleza de las cantidades físicas medibles. Si el resultado de medir  $\alpha$  en el estado  $|\Psi(t)\rangle$  es  $a_n$  el estado del sistema inmediatamente después de la medición cambia a  $|\Psi_n\rangle$ . Lo anterior se representa matemáticamente así

$$A|\Psi(t)\rangle = a_n|\Psi_n\rangle. \quad (1.74)$$

En la ecuación (1.74)  $a_n = \langle\Psi_n|\Psi(t)\rangle$ .

4. Sea  $|\Psi\rangle \in H$  el vector de estado del sistema. La probabilidad de encontrar el eigenvalor  $\lambda_1$  como resultado de medir  $\alpha$  es el módulo al cuadrado del coeficiente

de  $|a_1\rangle$  en la expansión de  $|\Psi\rangle$  en la base de eigenvalores de  $A$ . Para el caso de espectro discreto (el cual se definirá en el Capítulo 2), de acuerdo a [67] la probabilidad  $P_n(a_n)$  de obtener el eigenvalor  $a_n$  cuando no es degenerado (degenerado significa que a dos o más eigenvectores distintos les corresponde el mismo eigenvalor) es igual a :

$$P_n(a_n) = \frac{|\langle \Psi_n | \Psi \rangle|^2}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = \frac{|a_n|^2}{\langle \Psi | \Psi \rangle}. \quad (1.75)$$

Si  $a_n$  es  $m$ - degenerada, la probabilidad  $P_n$  es

$$P_n(a_n) = \frac{\sum_{j=1}^m |\langle \Psi_n^j | \Psi \rangle|^2}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = \frac{\sum_{j=1}^m |a_n^{(j)}|^2}{\langle \Psi | \Psi \rangle}. \quad (1.76)$$

La expresión (1.75) puede ser extendida al caso continuo, para determinar la densidad de probabilidad que una medición de  $A$  entregue un valor entre  $a$  y  $a + da$  en un sistema cuyo estado inicial es  $|\Psi\rangle$  es

$$\frac{dP(a)}{da} = \frac{|\Psi(a)|^2}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = \frac{|\Psi(a)|^2}{\int |\Psi(a)|^2 da}. \quad (1.77)$$

5. La evolución temporal del vector de estado  $|\Psi(t)\rangle$  está gobernada por la ecuación de Schrödinger

$$i\hbar \frac{d|\Psi\rangle}{dt} = H|\Psi\rangle. \quad (1.78)$$

Los postulados de la mecánica cuántica se pueden dividir en dos categorías: los primeros cuatro describen el sistema en un tiempo determinado, mientras que el quinto describe la evolución en el tiempo del sistema.

## 1.4 Propagación de partícula libre y normalización de Born

El caso de propagación más simple corresponde a  $V(x) = 0$ ,  $x \in \mathbb{R}$ . En tal caso la ecuación de Schrödinger toma la forma

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \varphi(x) = E\varphi(x) \quad (1.79)$$

la cual se puede reescribir como

$$\left( \frac{d^2}{dx^2} + k^2 \right) \varphi(x) = 0 \quad (1.80)$$

donde  $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ , a  $k$  se le conoce como número de onda. La solución más general para la ecuación (1.80) es una combinación lineal de ondas planas linealmente independientes ( $\varphi_+(x) = e^{ikx}$ ,  $\varphi_-(x) = e^{-ikx}$ )

$$\varphi_k(x) = A_+ e^{ikx} + A_- e^{-ikx}. \quad (1.81)$$

La función de onda completa en términos de  $x$  y el tiempo  $t$  es igual a

$$\Psi_k(x, t) = A_+ e^{i(kx - \omega t)} + A_- e^{-i(kx + \omega t)}. \quad (1.82)$$

Dado que  $E = \hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$  se puede expresar la anterior solución como

$$\Psi_k(x, t) = A_+ e^{i(kx - \hbar k^2 t / 2m)} + A_- e^{-i(kx + \hbar k^2 t / 2m)}. \quad (1.83)$$

El primer término del lado derecho de la igualdad representa a una onda plana que se propaga a la derecha, mientras el segundo término representa una onda que se propaga a la izquierda. Las intensidades de dichas ondas son iguales a  $|A|^2$  y  $|B|^2$ . Dichas ondas están asociadas a partículas libres que se propagan con energía y momentos definidos. Estas soluciones sin embargo presentan varios inconvenientes físicos entre los que se encuentran

- Las densidades de probabilidades  $|\Psi_{\pm}(x, t)|^2 = |A_{\pm}|^2$  son constantes, no dependen de  $x$ , ni de  $t$ .
- La velocidad de la onda plana  $v_{wave} = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar k}{2m}$  es menor a la velocidad de la partícula  $v = \frac{p}{m} = \frac{\hbar k}{m}$ .

- La función no es normalizable  $\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_{\pm}^*(x, t) \Psi_{\pm}(x, t) dx = |A_{\pm}|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx \rightarrow \infty$ .

La última condición hace que la solución no sea aceptable desde el punto de vista físico. De lo anterior llegamos a la conclusión que la partícula libre no puede tener un momento y una energía definidas de manera tan precisa.

Para solucionar los anteriores inconvenientes, se recurre a la superposición lineal de ondas planas por medio de un paquete de ondas. Un paquete de ondas es una función de onda localizada, esto es, con una amplitud grande en una región definida en el espacio y cero fuera de ella. El paquete de ondas consiste de un grupo de ondas con diferentes longitudes de ondas, y con fases y amplitudes escogidas de tal manera que las ondas interfieren constructivamente dentro de una región y destructivamente fuera de ella. Lo anterior se puede hacer de la siguiente forma. Supóngase que el momento

$p = \hbar k$  de las partículas se distribuye en un intervalo  $(k_1, k_2)$  con amplitud  $A(k)$ . El paquete de ondas es igual a

$$\Psi(x, t) = \int_{k_1}^{k_2} A(k) e^{i(kx - \frac{\hbar k^2}{2m} t)} dk \quad (1.84)$$

donde  $A(k)$  es la amplitud con la que una onda plana de momento  $\hbar k$  y energía  $\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$  contribuyen al paquete. Por tanto

$$\int |\Psi(x, t)|^2 dx = |A(k)|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx. \quad (1.85)$$

Por esto si se elige bien el valor de  $A(k)$  se puede evitar la divergencia.

#### 1.4.1 Normalización de Born

La idea básica del método consiste en considerar que el espacio donde se propaga la onda plana es periódico ( $x = x + L$ ), por lo cual  $\varphi(x) = \varphi(x + L)$ , lo cual conduce a la expresión  $Ae^{ikx} = Ae^{ik(x+L)}$ , con lo cual se llega a la igualdad

$$e^{ikL} = 1,$$

por lo cual  $kL = 2n\pi$ . Se integra en el segmento de normalización  $(-\frac{L}{2}, \frac{L}{2})$  la densidad de probabilidad de la función de onda

$$\int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} |\Psi|^2 dx = |A|^2 \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} dx = |A|^2 L = 1 \quad (1.86)$$

de donde se determina que  $A = \frac{1}{\sqrt{L}}$ . Con dicha condición se obtiene

$$\varphi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i\frac{2\pi n}{L} x} \quad (1.87)$$

Volviendo a aplicar la integral de normalización sobre  $\varphi_n(x)$  y su conjugado  $\varphi_n^*(x)$  se obtiene

$$\int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \varphi_n^*(x) \varphi_{n'}(x) dx = \frac{\sin[\pi(n - n')]}{\pi(n - n')} \quad (1.88)$$

con lo cual se logra construir una función de cuadrado integrable. Para el caso  $L \rightarrow \infty$ , notar que la parte derecha de la ecuación de (1.88) no depende de  $L$  por lo que dicho resultado sigue siendo válido.

## 1.5 Guías de onda cuánticas

El contenido de esta sección está basado en la presentación que sobre alambres cuánticos hace el libro [29], así como los artículos [34] y [57].

Una **guía de onda cuántica** es una estructura en tres dimensiones que tiene confinamiento en dos dimensiones y cuyo diámetro es lo suficientemente pequeño para que el comportamiento cuántico sea el dominante. El transporte electrónico dentro de dicha estructura es esencialmente balístico, y análogo a la propagación de ondas electromagnéticas en guías de onda clásicas [34]. Debido a que existe un fuerte confinamiento en dos direcciones, el movimiento en la dirección longitudinal es el de mayor interés.

Entre las características más importantes de dicha estructura están

- Tamaños pequeños, típicamente de decenas a cientos de  $nm$ .
- Alta pureza; la trayectoria media libre del electrón puede estar en el orden de  $\mu m$ .
- Estructura cristalina
- Las funciones de onda están usualmente suprimidas en las fronteras entre distintos materiales.

La dirección longitudinal debe ser de una longitud mucho mayor a la que se tiene en las direcciones con confinamiento. Los alambres cuánticos son modelados como guías de onda cuánticas. Entre las aplicaciones propuestas a las guías de ondas cuánticas destacan los sintonizadores de rama y sus superlátices, filtros pasabanda e interruptores cuánticos de interferencia [57].

### 1.5.1 Heterouniones y heteroestructuras

Para poder definir y estudiar lo que es un alambre cuántico es necesario conocer lo que son las heterouniones y heteroestructuras. Las heterouniones se forman a partir de la unión de dos materiales con diferentes bandas prohibidas. Una banda prohibida  $E_{gap}$  es la diferencia de energía que existe entre la banda de conducción y la banda de valencia de un material, tal como aparece en la Figura 1.3 [29].

La discontinuidad en las bandas de conducción y valencia en una heterounión puede ser representada por medio de un término constante. En [33] la ecuación de Schrödinger para ambas bandas a lo largo de la estructura es igual a

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V(x) \psi(x) = E \psi(x). \quad (1.89)$$

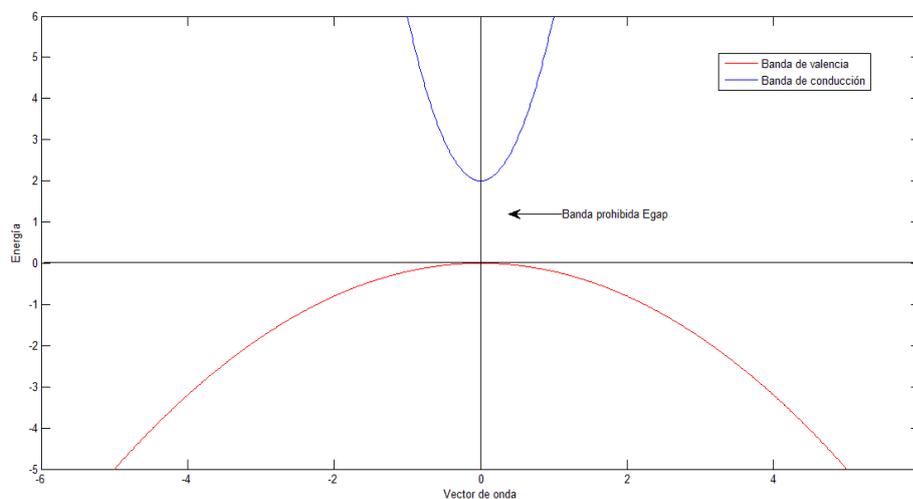


Figura 1.3: Banda de conducción, de valencia y prohibida para un material semiconductor en bulto [22].

En la anterior ecuación  $m^*$  es la masa efectiva de la aleación de materiales. En la Figura 1.4 se muestra la gráfica de potenciales unidimensionales  $V(x)$  en las bandas de conducción y valencia de una heterounión.

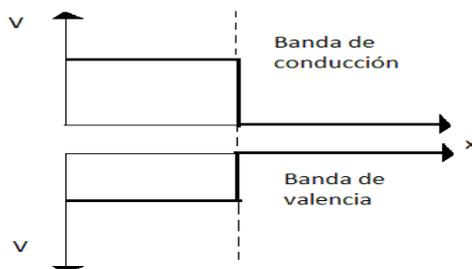


Figura 1.4: Discontinuidad de los potenciales unidimensionales  $V(x)$  en la banda de conducción y la banda de valencia de una heterounión [30].

Una heteroestructura está formada por múltiples heterouniones. Si una estructura  $A$  queda en medio de dos capas de material  $B$ ,  $E_{gapA} < E_{gapB}$ , y además la capa  $A$  es lo suficientemente pequeña para que el régimen cuántico sea el dominante, entonces tal combinación de materiales recibe el nombre de pozo cuántico simple [29]. Cualquier electrón tiende a su estado base, por lo cual los electrones quedan concentrados en dicho pozo de la banda de conducción. La misma situación ocurre con los huecos en

la banda de valencia.

Variaciones a los pozos cuánticos simples son los pozos cuánticos asimétricos, los cuales se pueden formar a partir de la inclusión de una aleación entre los materiales  $A$  y  $B$ . En la Figura 1.5 se muestran paredes cuánticas simples y asimétricas.

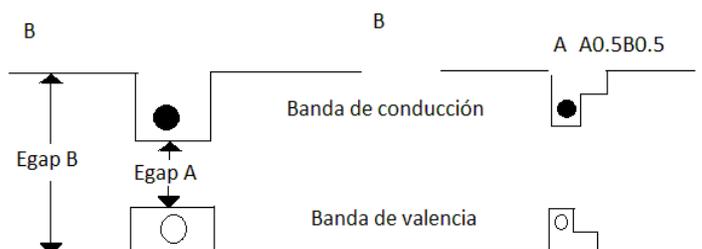


Figura 1.5: Pozos cuánticos simétrico y asimétrico [24].

La combinación de más de dos heterouniones da lugar a los pozos múltiples y los superlátices. La diferencia entre ambos consiste en que mientras en los primeros los pozos no interactúan entre sí, en los segundos sí. Cuando los pozos cuánticos de las bandas de conducción y valencia están alineados (como en la Figura 1.5) el sistema es de tipo I. Cuando los materiales  $A$  y  $B$  están alineados de tal manera que los pozos en ambas bandas no coinciden en la misma región espacial el sistema es de tipo II. Un ejemplo de estructura tipo II se muestra en la Figura 1.6.

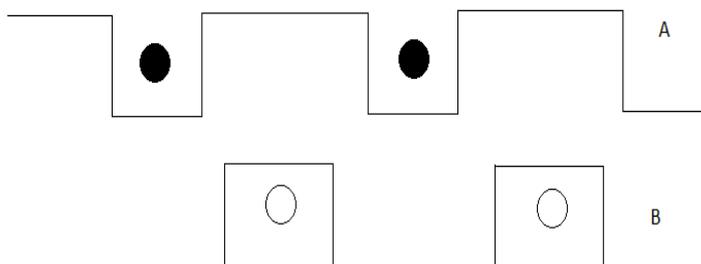


Figura 1.6: Heteroestructura de tipo II [13].

### 1.5.2 Alambres cuánticos

En la física de semiconductores se conoce como dimensionalidad a los grados de libertad que tiene el movimiento de una partícula dentro de un sistema. Los cuatro sistemas de dimensionalidad básica se enlistan en la Tabla 1.1

Tabla 1.1: Sistemas de dimensionalidad básica

| Sistema           | Grados de confinamiento ( $D_c$ ) | Grados de libertad ( $D_f$ ) |
|-------------------|-----------------------------------|------------------------------|
| Material en bulto | 0                                 | 3                            |
| Pozo cuántico     | 1                                 | 2                            |
| Alambre cuántico  | 2                                 | 1                            |
| Punto cuántico    | 3                                 | 0                            |

La fabricación de alambres cuánticos se logra por medio de fotolitografía o litografía de haces de electrones [29]. Con dichos procesos es posible crear una pequeña oblea de los materiales que contienen pozos cuánticos. Las partículas confinadas no sólo presentan confinamiento a lo largo del eje donde está el pozo cuántico, sino también en un eje adicional dependiendo del proceso de litografía al que hayan sido sometidas. En la Figura 1.7 se muestra un ejemplo de alambre cuántico. Otro proceso para la producción de alambres cuánticos es el V-grooved [29].

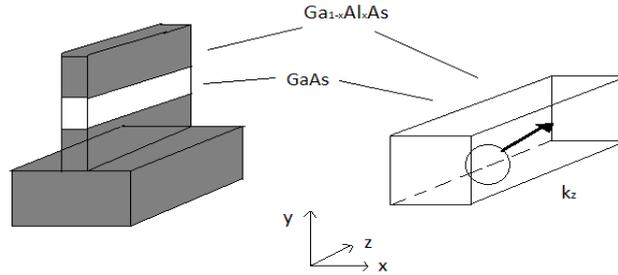


Figura 1.7: Alambre cuántico producto de la heterounión de  $Ga_{1-x}Al_xAs$  y  $GaAs$  [24].

La ecuación de Schrödinger que modela el comportamiento de un alambre cuántico en coordenadas rectangulares es

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 u(x, y, z) + V(x, y, z) u(x, y, z) = E u(x, y, z). \quad (1.90)$$

El potencial  $V(x, y, z)$  se puede expresar como una suma de los potenciales en el eje  $x$ , que es el eje en el cual viajan las partículas dentro de la guía de onda, más el potencial en el plano  $(y, z)$ , esto es  $V(x, y, z) = V(x) + V(y, z)$  [29].

En la parte interior de los alambres cuánticos  $V(y, z) = 0$ ,  $V(x) \neq 0$ . Por lo tanto,  $V(x, y, z) = V(x)$  adentro de dicha estructura. Las eigenfunciones también se pueden expresar como el producto de dos componentes  $u(x, y, z) = \psi(x) \phi(y, z)$ . A partir de las anteriores consideraciones, y de que la energía se puede expresar como la suma de dos componentes  $E = E_x + E_{yz}$ , se obtienen las siguientes dos ecuaciones

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x) \psi(x) = E_x \psi(x) \quad (1.91)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left( \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \phi(y, z) = E_{y,z} \phi(y, z). \quad (1.92)$$

## Capítulo 2

# Teoría espectral de guías de ondas cuánticas

En el presente capítulo se presenta el análisis del espectro del operador de Schrödinger para guías de onda cuánticas utilizando el método de operador límite. El contenido del presente capítulo se toma del capítulo 2 del trabajo de tesis de Maestría [59], y los resultados están publicados en el artículo [51].

El espacio de Sobolev  $H^s(\Omega)$  consiste de los elementos  $u \in L^2(\Omega)$ , tales que  $D^\alpha u(x) \in L^2(\Omega)$  para  $|\alpha| \leq s$  en el dominio  $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ . La derivada es en el sentido de distribuciones [60], [8]. El producto interno está definido como

$$(u, v)_{H^s} = \sum_{|\alpha| \leq s} (D^\alpha u, D^\alpha v). \quad (2.1)$$

La norma de un elemento  $u \in H^s(\Omega)$  es igual a

$$\|u\|_{H^s} = (u, u)_{H^s} = \left[ \sum_{|\alpha| \leq s} \int_{\Omega} |D^\alpha u(x)|^2 dx \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (2.2)$$

Las funciones de clase  $C^p(G)$  son el conjunto de funciones  $f$  que son continuas, junto con sus respectivas derivadas  $D^\alpha f(x)$ ,  $|\alpha| \leq p$  ( $0 \leq p < \infty$ ) en la región  $G$  donde el operador de diferenciación está dado por

$$D^\alpha f(x) = \frac{\partial^{|\alpha|} f(x_1, x_2, x_3, \dots)}{\partial x_1^{\alpha_1} \partial x_2^{\alpha_2} \dots \partial x_3^{\alpha_3}}. \quad (2.3)$$

El índice  $\alpha$  es un vector  $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \dots)$ , por lo tanto  $|\alpha| = \alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 + \dots$

### 2.1 Espectro esencial y operadores límite

Sea  $A$  un operador cerrado, no acotado en un espacio de Hilbert  $H$  con un dominio  $D_A$ . De acuerdo a [1] el operador  $A$  es un operador de Fredholm si  $\ker(A)$  es un

espacio de dimensión finita, y el espacio  $H/\text{Im}(A)$  también es de dimensión finita.

El número complejo  $\lambda$  es un punto resolvente de  $A$ , si  $(A - \lambda I)^{-1}$  existe y es acotado en  $H$ . Al conjunto de puntos resolventes se les denota como  $R(A) \subset \mathbb{C}$ . El espectro de  $A$  se define como  $sp(A) = \mathbb{C} \setminus R(A)$ . El **espectro discreto** de  $A$ , el cual se denota por  $sp_{dis}(A)$  es un subconjunto de  $sp(A)$  que consiste de eigenvalores aislados de multiplicidad finita. El **espectro esencial** de  $A$ , el cual se denota por  $sp_{ess}(A)$ , es el conjunto  $\lambda \in \mathbb{C}$ , tal que  $A - \lambda I$  no es un operador de Fredholm. Si  $A$  es autoadjunto  $sp(A) = sp_{dis}(A) \cup sp_{ess}(A)$ .

Sea  $x = (x', x_{n+1}) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}$ ,  $x' = (x_1, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n$ ,  $D_{x_j} = i \frac{\partial}{\partial x_j}$ . Ahora, se plantea el siguiente problema de valor en la frontera  $\Pi_\Omega = \Omega \times \mathbb{R}$

$$\mathcal{A}u(x) = \begin{cases} A(x, D)u(x) & x \in \Pi_\Omega \\ \gamma_{\partial\Pi_\Omega} B(x, D)u(x) = 0 & x \in \partial\Pi_\Omega = \partial\Omega \times \mathbb{R}. \end{cases} \quad (2.4)$$

donde

$$A(x, D)u(x) = \left( \sum_{1 \leq i, j \leq n+1} a_{ij}(x) D_{x_i} D_{x_j} + \sum_{j=1}^{n+1} b_j(x) D_{x_j} + c(x) \right) u(x) \quad x \in \Pi_\Omega \quad (2.5)$$

es un operador diferencial de segundo orden con coeficientes en el espacio  $C_b^\infty(\Pi_{\bar{\Omega}}) = C^\infty(\bar{\Omega}) \otimes C_b^\infty(\mathbb{R})$ , donde  $\bar{\Omega}$  es la cerradura del dominio  $\Omega$ ,  $\otimes$  representa un producto tensorial de espacios vectoriales y  $C_b^\infty(\mathbb{R})$  es el espacio de funciones infinitamente diferenciables en  $\mathbb{R}$ , con todas sus derivadas acotadas. Por su parte  $B(x, D)$  se define como

$$B(x, D) = \sum_{j=1}^{n+1} a_j(x) D_{x_j} + d(x), \quad (2.6)$$

donde  $a_j(x)$ ,  $d(x) \in C_b^\infty(\Pi_{\bar{\Omega}})$  y  $\gamma_{\partial\Pi_\Omega}$  es el operador estándar de restricción sobre la frontera  $\partial\Pi_\Omega$ .

Para el desarrollo posterior se supone que el problema (2.4) es uniformemente elíptico. Esto significa que el operador diferencial  $A(x, D)$  es uniformemente elíptico en  $\Pi_\Omega$ , esto es,

$$\inf_{x \in \Pi_{\bar{\Omega}}} \inf_{\xi \in S^{n-1}} \left| \sum_{1 \leq i, j \leq n+1} a_{ij}(x) \xi_i \xi_j \right| > 0, \quad (2.7)$$

y los operadores  $A(x, D)$  y  $B(x, D)$  están conectados por la condición de uniformidad de Lopatinsky-Shapiro (para mayor referencia consultar Capítulo 2 de [24]). La elipticidad uniforme del problema (2.4) implica el siguiente estimado a priori

$$\|u\|_{H^s(\Pi_\Omega)} \leq C \left( \|A(x, D)u\|_{H^{s-2}(\Pi_\Omega)} + \|u\|_{L^2(\Pi_\Omega)} \right), \quad s > 3/2 \quad (2.8)$$

con una constante  $C > 0$  e independiente de  $u \in H^S(\Pi_\Omega)$  (para mayor referencia consultar Teorema 2.50 de [24]).

Se considera a  $\mathcal{A}$  como un operador no acotado en el espacio de Hilbert  $L^2(\Omega)$  con dominio

$$D(\mathcal{A}) = \{u \in H^2(\Pi_\Omega) : \gamma_{\partial\Pi_\Omega} B(x, D)u = 0\} \quad (2.9)$$

y la acción:  $D(\mathcal{A}) \ni u \rightarrow A(x, D)u$ . El estimado a priori (2.8) implica que  $\mathcal{A}$  es un operador cerrado (para mayor información consultar el teorema 2.3.5 en la referencia [1]).

Para el análisis posterior se considera la propiedad de Fredholm de  $\mathcal{A}$  en términos de sus operadores límites. Con ese propósito, se introducen las siguientes definiciones y hechos que aparecen en las referencias [11] y [52].

Sea  $\varphi \in C_b^\infty(\Pi_{\overline{\Omega}})$  y  $h = (h_m)$  una secuencia de puntos  $h_m \in \mathbb{Z}$  que tiende a infinito. Entonces, el teorema de Arzelà-Ascoli implica que existe una subsecuencia  $g = (g^m)$  de  $h$ , y una función  $\varphi^g \in C_b^\infty(\Pi_{\overline{\Omega}})$  tal que  $\varphi(\cdot + g^m) \rightarrow \varphi^g$  en la topología de  $C^\infty(\Pi_{\overline{\Omega}})$ , esto es, para cada multi-índice  $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \dots)$ ,  $\alpha_j \in \{0\} \cup \mathbb{N}$ , y para cada conjunto compacto  $K \subset \mathbb{R}$

$$\partial_x^\alpha \varphi(x + g^m) \rightarrow \partial_x^\alpha \varphi^g(x) \quad (2.10)$$

uniformemente con respecto a cada  $x \in \overline{\Omega} \times K$ .

Sea  $g$  la secuencia definida arriba, tal que los siguientes límites:

$$a_{ij}^g(x) = \lim_{m \rightarrow \infty} a_{ij}(x + g^m), \quad (2.11)$$

$$b_j^g(x) = \lim_{m \rightarrow \infty} b_j(x + g^m), \quad (2.12)$$

$$c^g(x) = \lim_{m \rightarrow \infty} c(x + g^m), \quad (2.13)$$

$$a_j^g(x) = \lim_{m \rightarrow \infty} a_j(x + g^m), \quad (2.14)$$

$$d^g(x) = \lim_{m \rightarrow \infty} d(x + g^m), \quad (2.15)$$

existen en la topología de  $C^\infty(\Pi_{\overline{\Omega}})$ .

En consecuencia, se puede definir el operador

$$\mathcal{A}^g u(x) = \begin{cases} A^g(x, D)u(x) & x \in \Pi_\Omega \\ \gamma_{\partial\Pi_\Omega} B^g(x, D)u(x) = 0 & x \in \partial\Pi_\Omega \end{cases} \quad (2.16)$$

donde  $A^g(x, D)$  y  $B^g(x, D)$  se obtiene a partir de  $A(x, D)$  y  $B(x, D)$ , reemplazando los coeficientes por los límites (2.10)-(2.15). El operador  $\mathcal{A}^g$  tiene por nombre operador límite definido por la secuencia  $g$ . El conjunto de todos los operadores límites de  $A$  es denotado por  $Lim(\mathcal{A})$ .

**Teorema 1** *Sea el problema (2.4) uniformemente elíptico. Entonces, el operador  $\mathcal{A}$  es de Fredholm si y sólo si  $0 \notin sp(\mathcal{A}^g)$  para cada operador límite  $\mathcal{A}^g \in Lim(\mathcal{A})$ .*

El operador  $\mathcal{A}$  se puede tratar como un operador pseudo diferencial en  $\mathbb{R}$  con el operador evaluado en símbolo

$$\mathbb{R} \times \mathbb{R} \ni (t, \tau) \rightarrow \mathcal{A}'(t, \tau) \quad (2.17)$$

donde  $\mathcal{A}'(t, \tau)$  es el operador del problema con valor en la frontera en el dominio  $\Omega$ , definido por el operador diferencial  $A(x', t, D_{x'}, \tau)$ , donde  $D_{x'} = (D_{x_1}, \dots, D_{x_n})$ , y la condición de frontera

$$\gamma_{\partial\Pi\Omega} B'(x', t, D_{x'}, \tau) v(x') = 0 \quad x' \in \partial\Pi\Omega. \quad (2.18)$$

Notar que el operador  $\mathcal{A}$  del problema con valor en la frontera es un operador de Fredholm localmente (para mayor referencia consultar página 156 de [52], y página 61 de [11]) debido a que el problema (2.4) es uniformemente elíptico. Por lo tanto, Teorema 1 sigue del Teorema 4.11 de [11].

El Teorema 1 implica el siguiente resultado.

**Teorema 2** *Sea (2.4) un problema elíptico, entonces*

$$sp_{ess}(\mathcal{A}) = \bigcup_{\mathcal{A}^g \in Lim(\mathcal{A})} sp(\mathcal{A}^g). \quad (2.19)$$

**Definición 3** *Una función  $f \in C_b^\infty(\Pi_{\bar{\Omega}})$  es lentamente oscilante en el infinito y pertenece a la clase  $SO(\Pi_{\bar{\Omega}})$  si*

$$\lim_{x_{n+1} \rightarrow \infty} \frac{\partial f(x', x_{n+1})}{\partial x_{n+1}} = 0 \quad (2.20)$$

*uniformemente con respecto a  $x' \in \bar{\Omega}$ .*

Notar que si  $f \in SO(\Pi_{\bar{\Omega}})$  y  $\mathbb{Z} \ni g_m \rightarrow \infty$  son secuencias tales que el límite

$$\lim_{m \rightarrow \infty} f(\cdot + g_m) = f^g(\cdot)$$

existe en la topología de  $C^\infty(\Pi_{\bar{\Omega}})$ , entonces la función  $f^g$  es independiente de  $x_{n+1}$  y  $f^g \in C^\infty(\bar{\Omega})$ .

Sean los coeficientes  $a_{ij}$ ,  $b_j$  y  $c$  de  $A(x, D)$  y los coeficientes  $a_j$ ,  $d$  de  $B(x, D)$  pertenecientes al espacio  $SO(\Pi_{\overline{\Omega}})$ . Por consiguiente, todos los operadores límite  $\mathcal{A}^g = \left( A^g(x', D_{x'}), \gamma_{\partial\Pi_{\Omega}} B^g(x', D_{x'}) \right)$  tienen coeficientes que son independientes de  $x_{n+1} \in \mathbb{R}$ , y  $\mathcal{A}^g$  es unitariamente equivalente al operador de multiplicación por el operador evaluado en función  $\mathbb{R} \ni \tau \rightarrow \widehat{\mathcal{A}}^g(\tau)$ , donde

$$\widehat{\mathcal{A}}^g(\tau)v(x') = \begin{cases} A^g(x', D_{x'}, \tau)v(x'), & x' \in \Omega, \tau \in \mathbb{R} \\ \gamma_{\partial\Pi_{\Omega}} B^g(x', D_{x'}, \tau)v(x') = 0 & x' \in \partial\Pi_{\Omega}, \tau \in \mathbb{R}. \end{cases} \quad (2.21)$$

Notar que  $\widehat{\mathcal{A}}^g(\tau)$  es un problema elíptico en  $\overline{\Omega}$  para cualquier  $\tau \in \mathbb{R}$ . Entonces, el operador  $\widehat{\mathcal{A}}^g(\tau)$  tiene un espectro discreto  $\{\lambda_1^g(\tau), \lambda_2^g(\tau), \dots, \lambda_k^g(\tau), \dots\}$  para cada  $\tau \in \mathbb{R}$  (vea el Capítulo 2 de [24]). Sea  $\Gamma_j(\mathcal{A}^g) = \{\zeta \in \mathbb{C} : \zeta = \lambda_j^g(\tau), \tau \in \mathbb{R}\}$  que es la curva de dispersión del operador límite  $\mathcal{A}^g$ , entonces

$$sp(\mathcal{A}^g) = \overline{\bigcup_{j=1}^{\infty} \Gamma_j(\mathcal{A}^g)}. \quad (2.22)$$

Por lo tanto, el anterior Teorema da a lugar a

**Teorema 4** *Sea el operador  $\mathcal{A}$  uniformemente elíptico del problema de valor en la frontera (2.4), con coeficientes  $a_{ij}$ ,  $b_j$ ,  $a_j$  y  $d \in SO(\Pi_{\overline{\Omega}})$ , entonces*

$$sp_{ess}(\mathcal{A}) = \overline{\bigcup_{\mathcal{A}^g \in Lim(\mathcal{A})} \bigcup_{j=1}^{\infty} \Gamma_j(\mathcal{A}^g)}. \quad (2.23)$$

## 2.2 Guías de ondas cuánticas cilíndricas

Para el análisis se considera un operador electromagnético de Schrödinger en el dominio cilíndrico  $\Pi_{\Omega}$

$$L_{\Pi_{\Omega}}u(x) = (i\nabla - \phi(x))^2 u(x) + \Phi(x)u(x), \quad x \in \Pi_{\Omega} \quad (2.24)$$

donde  $\phi = (\phi_1, \dots, \phi_{n+1}) = (\phi', \phi_{n+1})$  es el potencial vectorial del campo magnético  $\mathbf{B} = \nabla \times \phi$  y  $\Phi$  es el potencial escalar del campo eléctrico  $\mathbf{E} = \nabla\Phi$ . Tanto  $\phi_j$ , como  $\Phi$  son funciones evaluadas en los reales y pertenecen al espacio  $SO(\Pi_{\overline{\Omega}})$ . Además se considera la siguiente condición de frontera para el operador  $L_{\Pi_{\Omega}}$

$$\gamma_{\partial\Pi_{\Omega}} \left( \alpha u + \beta \frac{\partial u}{\partial \nu} \right) (x) = 0, \quad x \in \partial\Pi_{\Omega}. \quad (2.25)$$

donde  $\alpha, \beta$  son funciones evaluadas en los reales en el espacio  $SO(\Pi_{\overline{\Omega}})$  tales que

$$\inf_{x \in \partial\Pi_{\Omega}} (\alpha^2(x) + \beta^2(x)) > 0.$$

Notar que el operador

$$\mathcal{L}_{\Pi\Omega} = \begin{cases} L_{\Pi\Omega} u(x) & x \in \Pi\Omega \\ \gamma_{\partial\Omega} (\alpha u + \beta \frac{\partial u}{\partial \nu})(x) = 0, & x \in \partial\Pi\Omega, \end{cases} \quad (2.26)$$

es uniformemente elíptico en  $\overline{\Pi\Omega}$  (consultar Capítulo 1.6 de [49]).

Se considerará el operador  $\mathcal{L}_{\Pi\Omega}$  como un operador no acotado en el espacio de Hilbert  $L^2(\Pi\Omega)$  con dominio

$$D(\mathcal{L}_{\Pi\Omega}) = \left\{ u \in H^2(\Pi\Omega) : \gamma_{\partial\Omega} \left( \alpha u + \beta \frac{\partial u}{\partial \nu} \right) (x) = 0, \quad x \in \partial\Pi\Omega \right\} \quad (2.27)$$

actuando en  $u \in D(\mathcal{L}_{\Pi\Omega})$  como  $u \rightarrow \mathcal{L}_{\Pi\Omega} u$ . Aplicando la fórmula de Green

$$\int_{\Pi\Omega} L u \bar{v} dx - \int_{\Pi\Omega} u \overline{L v} dx = \int_{\partial\Pi\Omega} \left( \frac{\partial u}{\partial \nu} \bar{v} - u \frac{\partial \bar{v}}{\partial \nu} \right) d\sigma,$$

donde  $d\sigma$  es la medida de Lebesgue de la superficie sobre  $\partial\Pi\Omega$  y  $u, v \in D(\mathcal{L}_{\Pi\Omega})$ , se obtiene que el operador  $\mathcal{L}_{\Pi\Omega}$  es simétrico. Esto implica que el operador  $\mathcal{L}_{\Pi\Omega}$  es autoadjunto (consultar Capítulo 2.4 de [55]).

Sea

$$\mathcal{L}_{\Pi\Omega}^g u(x) = \begin{cases} L_{\Pi\Omega}^g u(x) = \left( (i\nabla - \phi^g(x'))^2 + \Phi^g(x') \right) u(x) & x \in \Pi\Omega \\ \gamma_{\partial\Omega} (\alpha^g u + \beta^g \frac{\partial u}{\partial \nu})(x) = 0, & x \in \partial\Pi\Omega. \end{cases} \quad (2.28)$$

un operador límite de  $\mathcal{L}_{\Pi\Omega}$  definido por la secuencia  $g = (g^m)$ , donde  $\phi^g, \Phi^g, \alpha^g$ , y  $\beta^g$  dependen unicamente de  $x' \in \overline{\Omega}$ .

Como se mencionó anteriormente, se considera  $\mathcal{L}_{\Pi\Omega}^g$  como un operador autoadjunto no acotado en  $L^2(\Pi\Omega)$  con dominio

$$D(\mathcal{L}_{\Pi\Omega}^g) = \left\{ u \in H^2(\Pi\Omega) : \gamma_{\partial\Omega} \left( \alpha^g u + \beta^g \frac{\partial u}{\partial \nu} \right) (x) = 0, \quad x \in \partial\Pi\Omega \right\} \quad (2.29)$$

y la acción  $D(\mathcal{L}_{\Pi\Omega}^g) \ni u \rightarrow L^g u$ .

Por simplicidad se asume que  $\phi_{n+1}^g(x') = \phi_{n+1}^g = a$  donde  $a$  es una constante, para cualquier secuencia  $g$ . Entonces el operador  $\mathcal{L}_{\Pi\Omega}^g$  es unitariamente equivalente al operador de multiplicación por el operador evaluado en función  $\mathbb{R} \ni \tau \rightarrow \widehat{\mathcal{L}_{\Pi\Omega}^g}(\tau)$ , donde

$$\widehat{\mathcal{L}_{\Pi\Omega}^g}(\tau) v(x') = \begin{cases} \left[ (i\nabla_{x'} - \phi^g(x'))^2 + \Phi^g(x') + \tau^2 \right] v(x') & x' \in \Omega, \tau \in \mathbb{R} \\ \gamma_{\partial\Omega} (\alpha^g v + \beta^g \frac{\partial v}{\partial \nu})(x') = 0, & x' \in \partial\Omega, \tau \in \mathbb{R}. \end{cases} \quad (2.30)$$

Los operadores  $\widehat{\mathcal{L}}_{\Pi\Omega}^g(\tau)$  tienen un espectro discreto  $\{\lambda_1^g(\tau) < \lambda_2^g(\tau) < \dots < \lambda_k^g(\tau) < \dots\}$  para cada  $\tau \in \mathbb{R}$ , donde

$$\lambda_k^g(\tau) = \mu_k^g + \tau^2, \quad (2.31)$$

y  $\{\mu_k^g\}_{k=1}^\infty$  es la secuencia de eigenvalores del operador del problema con valor en la frontera en  $\Omega$

$$M_\Omega^g v(x') = \begin{cases} L_{\Pi\Omega}^g u(x) = \left[ (i\nabla_{x'} - \phi'^g(x'))^2 + \Phi^g(x') \right] v(x') & x' \in \Omega \\ \gamma_{\partial\Omega} (\alpha^g v + \beta^g \frac{\partial u}{\partial \nu})(x') = 0, & x' \in \partial\Omega. \end{cases} \quad (2.32)$$

Por consiguiente

$$\Gamma_m(\mathcal{L}_{\Pi\Omega}^g) = \{\lambda \in \mathbb{R} : \lambda = \mu_m^g + \tau^2, \tau \in \mathbb{R}\}. \quad (2.33)$$

La expresión (2.33) implica que

$$sp(\mathcal{L}_{\Pi\Omega}^g) = [\min sp(M_\Omega^g), +\infty) \quad (2.34)$$

Aplicando el Teorema 4 se obtiene

$$sp_{ess}(\mathcal{L}_{\Pi\Omega}) = [\varkappa(\mathcal{L}_{\Pi\Omega}), +\infty) \quad (2.35)$$

donde

$$\varkappa(\mathcal{L}_{\Pi\Omega}) = \inf_{\mathcal{L}_{\Pi\Omega}^g \in \text{Lim}(\mathcal{L}_{\Pi\Omega})} \min sp(\mathcal{L}_{\Pi\Omega}^g). \quad (2.36)$$

**Ejemplo 5** Sean los siguientes límites uniformes con respecto a  $x' \in \bar{\Omega}$

$$\begin{aligned} \lim_{x_{n+1} \rightarrow \infty} \phi(x', x_{n+1}) &= \phi^\pm(x') & \lim_{x_{n+1} \rightarrow \infty} \Phi(x', x_{n+1}) &= \Phi^\pm(x') \\ \lim_{x_{n+1} \rightarrow \infty} \alpha(x', x_{n+1}) &= \alpha^\pm(x') & \lim_{x_{n+1} \rightarrow \infty} \beta(x', x_{n+1}) &= \beta^\pm(x') \end{aligned}$$

Entonces, existen dos operadores límites  $\mathcal{L}_{\Pi\Omega}^\pm$  definidos por los potenciales  $\phi^\pm$  y  $\Phi^\pm$  y los coeficientes de la condición de frontera  $\alpha^\pm$  y  $\beta^\pm$ . Por lo tanto

$$\varkappa(\mathcal{L}_{\Pi\Omega}) = \inf [\mu, +\infty) \quad (2.37)$$

donde  $\mu = \min \{\mu_1^+, \mu_1^-\}$  y  $\mu_1^\pm$  son los eigenvalores mínimos de los operadores

$$M_\Omega^\pm v(x') = \begin{cases} \left[ (i\nabla_{x'} - \phi^\pm(x'))^2 + \Phi^\pm(x') \right] v(x'), & x' \in \Omega \\ \gamma_{\partial\Omega} (\alpha^\pm v + \beta^\pm \frac{\partial u}{\partial \nu})(x') = 0, & x' \in \partial\Omega. \end{cases} \quad (2.38)$$

**Ejemplo 6** Sea

$$\phi(x) = \phi_0(x) + \phi_\infty(x_{n+1}), \quad \Phi(x) = \Phi_0(x) + \Phi_\infty(x_{n+1}) \quad (2.39)$$

donde  $\phi_0, \Phi_0 \in C_b^\infty(\Pi_{\overline{\Omega}})$  y  $\lim_{x_{n+1} \rightarrow \infty} \phi_0(x', x_{n+1}) = \lim_{x_{n+1} \rightarrow \infty} \Psi_0(x', x_{n+1}) = 0$  uniformemente con respecto a  $x' \in \overline{\Omega}$ . Se considera el operador  $D_{\Pi_{\Omega}}$  del problema de Dirichlet para el operador de Schrödinger  $(i\nabla - \phi)^2 + \Phi$ . Los operadores límite para el operador  $D_{\Pi_{\Omega}}$  son equivalentemente unitarios a los operadores

$$D_{\Pi_{\Omega}}^g u(x) = (-\Delta + \Phi^g) u(x), \quad x \in \Pi_{\Omega}, \quad u|_{\partial\Pi_{\Omega}} = 0 \quad (2.40)$$

donde  $\Phi^g \in \mathbb{R}$ . Entonces,  $sp(D_{\Pi_{\Omega}}^g) = [\mu_{\min} + \Phi^g, +\infty)$ , donde  $\mu_{\min}$  es el eigenvalor mínimo del problema de Dirichlet para el operador  $-\Delta$  en el dominio  $\Omega$ . Esto implica que

$$sp_{ess}(D_{\Pi_{\Omega}}) = \left[ \mu_{\min} + \lim_{x_{n+1} \rightarrow \infty} \inf \Phi_{\infty}(x_{n+1}), +\infty \right). \quad (2.41)$$

### 2.3 Guías de ondas cuánticas estratificadas horizontalmente

Considérese el operador del problema de Dirichlet (para la definición de dicho problema, consultar [60])

$$D_{\Pi_{\Omega}} = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \Phi(x_{n+1}) \right) u(x), \quad x \in \Pi_{\Omega}, \quad u|_{\partial\Pi_{\Omega}} = 0 \quad (2.42)$$

donde  $\Phi \in SO(\mathbb{R})$ . Aplicando la expresión (2.41) se obtiene

$$sp_{ess}(D_{\Pi_{\Omega}}) = [\mu_{\min} + \Phi_{\lim \inf}, +\infty). \quad (2.43)$$

En la expresión (2.43)  $\Phi_{\lim \inf} = \lim_{x_{n+1} \rightarrow \infty} \inf \Phi_{\infty}(x_{n+1})$  y  $\mu_{\min}$  es un eigenvalor mínimo del operador del problema de Dirichlet  $D_{\Omega}$  para  $-\Delta$  en  $\Omega$ . En el caso particular donde  $\lim_{x_{n+1} \rightarrow \infty} \inf \Phi_{\infty}(x_{n+1}) = 0$ , se obtiene

$$sp_{ess}(D_{\Pi_{\Omega}}) = [\mu_{\min}, +\infty). \quad (2.44)$$

Por lo tanto el espectro discreto de  $D_{\Pi_{\Omega}}$  tiene valores menores a  $\mu_{\min}$ . El operador  $D_{\Pi_{\Omega}}$  tiene puntos espectrales de la forma  $\{\mu_j + \nu_k\}_{j,k=1}^{\infty}$ , donde  $\{\mu_j\}_{j=1}^{\infty} = sp(D_{\Omega})$  (donde  $D_{\Omega}$  es el operador  $D_{\Pi_{\Omega}}$  en el dominio  $\Omega$ ) y  $\nu_k$  es el espectro discreto del operador  $L = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dt^2} + \Phi$  en el espacio  $L^2(\mathbb{R})$ . Sea el potencial  $\Phi$  negativo e igual a cero fuera del segmento  $[a, b] \subset \mathbb{R}$ . Entonces el operador  $L$  puede tener un conjunto finito de puntos negativos del espectro discreto  $\{\nu_1 < \nu_2 < \dots < \nu_m < 0\}$ . En consecuencia, el espectro discreto de  $D_{\Pi_{\Omega}}$  es finito y consiste de los puntos  $\{\lambda_{kj} = \mu_j + \nu_k : \mu_j + \nu_k < \mu_{\min}\}$ . Los eigenvalores  $\mu_j + \nu_k \geq \mu_{\min}$  están embebidos en el espectro esencial  $[\mu_{\min}, +\infty)$  de  $D_{\Pi_{\Omega}}$ .

## Capítulo 3

# Investigación del problema de dispersión unidimensional por el método SPPS

En el presente capítulo se hará un análisis de la dispersión de ondas cuánticas debido a potenciales unidimensionales. El contenido del presente capítulo, incluidos los resultados numéricos y gráficas fueron publicados en [54].

### 3.1 Problema de dispersión unidimensional

El comportamiento dinámico en procesos cuánticos unidimensionales está descrito por la ecuación de Schrödinger en una dimensión con un potencial asociado  $V(x)$  que es un potencial acotado, real y diferente de cero en  $[a, b]$  como el que aparece en la Figura 3.1 y  $E$  es el eigenvalor del sistema (energía)

$$\mathcal{H}\psi(x) = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \psi(x) = Eu(x), \quad (3.1)$$

en donde  $\mathcal{H}$  es el operador de Schrödinger en una dimensión y  $\psi(x)$  es la función de onda en una dimensión. Sin pérdida de generalidad, en (3.1) el potencial  $V(x)$  es una función real continua a trozos tal que

$$V(x) = \begin{cases} V_1, x \in (-\infty, a), \\ V_0(x), x \in [a, b], \\ V_2, x \in (b, +\infty). \end{cases}$$

Por definición  $V_1 \leq V_2$ . El operador  $\mathcal{H}$  es un operador autoadjunto en  $L^2(\mathbb{R})$  con un dominio  $H^2(\mathbb{R})$  y con un espectro continuo  $[V_1, \infty)$ .

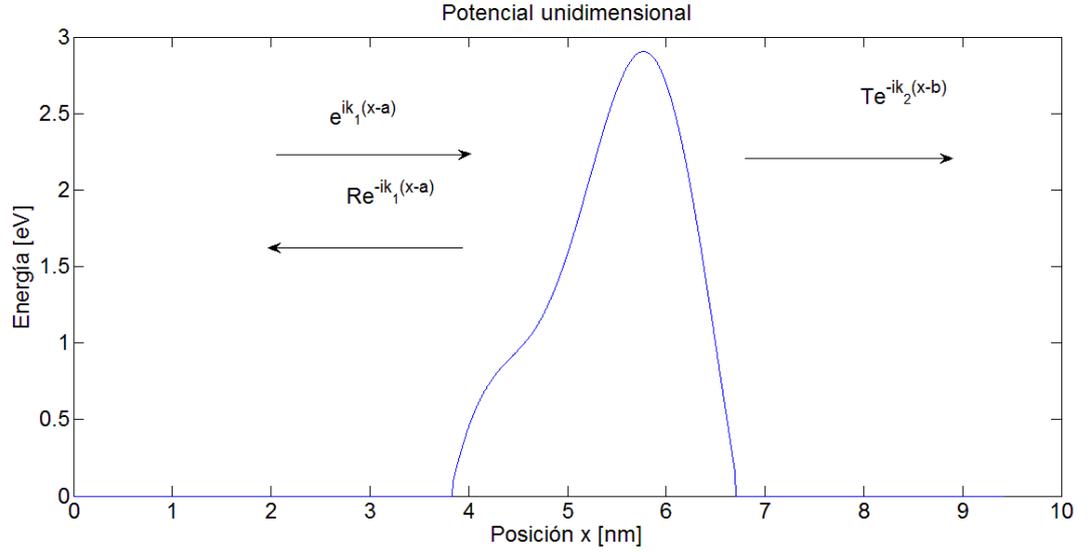


Figura 3.1: Potencial unidimensional y funciones de onda de entrada y salida

La ecuación (3.1) se puede reescribir como

$$\mathcal{H}_1\psi(x) = \left( -\frac{d^2}{dx^2} + q(x) \right) \psi(x) = \lambda\psi(x), \lambda \in \mathbb{R}, x \in \mathbb{R}, \quad (3.2)$$

donde

$$q(x) = \begin{cases} q_1, & x \in (-\infty, a), \\ q_0(x), & x \in [a, b], \\ q_2, & x \in (b, +\infty), \end{cases} \quad (3.3)$$

$$q_0(x) = \frac{2mV_0(x)}{\hbar^2}, q_j = \frac{2mV_j}{\hbar^2}, j = 1, 2, \lambda = \frac{2mE}{\hbar^2}.$$

Sea la energía total de la partícula  $E \in (V_2, \infty)$ . Esto implica que  $\lambda > q_2 \geq q_1$ . Se establece

$$k_j = \sqrt{\lambda - q_j} > 0, j = 1, 2.$$

Se definen las soluciones de (3.2) con la forma

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ik_1(x-a)} + Re^{-ik_1(x-a)}, & x < a \\ c_1\psi_1(x) + c_2\psi_2(x), & x \in (a, b) \\ Te^{ik_2(x-b)}, & x > b \end{cases}, \quad (3.4)$$

donde  $\psi_1(x), \psi_2(x)$  son soluciones linealmente independientes de (3.2) en  $(a, b)$ . La función de onda  $\psi(x)$  describe el proceso de dispersión de la partícula con energía  $E > V_2$  moviéndose de izquierda a derecha. Por definición el coeficiente de transmisión es igual

al módulo del cociente de la densidad de corriente de probabilidad de la onda transmitida entre la densidad de corriente de probabilidad de la onda incidente; mientras que el coeficiente de reflexión es el módulo del cociente de la densidad de corriente de probabilidad de la onda reflejada entre la densidad de corriente de probabilidad de la onda incidente [67]. A partir de las soluciones (3.4) dichos coeficientes son  $|R|^2$  y  $\frac{k_1}{k_2} |T|^2$

La suma de ambos coeficientes debe cumplir la ecuación

$$|R|^2 + \frac{k_1}{k_2} |T|^2 = 1. \quad (3.5)$$

Sean  $\psi_1, \psi_2$  soluciones linealmente independientes de (3.2) en  $[a, b]$  que satisfacen las condiciones de Cauchy

$$\psi_1(a) = 1, \psi_1'(a) = 0, \quad (3.6)$$

$$\psi_2(a) = 0, \psi_2'(a) = 1. \quad (3.7)$$

Aplicando a (3.4) las condiciones (3.6),(3.7) se obtienen las ecuaciones

$$1 + R = c_1, \quad (3.8)$$

$$ik_1(1 - R) = c_2,$$

$$T = c_1\psi_1(b) + c_2\psi_2(b),$$

$$ik_2T = c_1\psi_1'(b) + c_2\psi_2'(b).$$

Las ecuaciones (3.8) implican que

$$(1 + R)\psi_1(b) + ik_1(1 - R)\psi_2(b) = T, \quad (3.9)$$

$$(1 + R)\psi_1'(b) + ik_1(1 - R)\psi_2'(b) = ik_2T,$$

y

$$R = \frac{\psi_1'(b) + k_2k_1\psi_2(b) + i[k_1\psi_2'(b) - k_2\psi_1(b)]}{k_2k_1\psi_2(b) - \psi_1'(b) + i[k_2\psi_1(b) + k_1\psi_2'(b)]}, \quad (3.10)$$

$$T = [(1 + R)\psi_1(b) + ik_1(1 - R)\psi_2(b)]. \quad (3.11)$$

Es claro que  $k_j = k_j(\lambda) = \sqrt{\lambda - q_j} > 0, j = 1, 2, \psi_j(b) = \psi_j(b, \lambda), j = 1, 2$  y por lo tanto  $R = R(\lambda), T = T(\lambda)$  depende del parámetro espectral  $\lambda = \frac{2mE}{\hbar^2}$ , y por lo tanto de la energía  $E$  de la partícula.

Existe una extensa literatura sobre el cálculo numérico de los coeficientes de transmisión y reflexión (consultar para mayores detalles [3], [15], [17], [28], [47]).

Una implementación numérica de  $R$  y  $T$  está basada en las soluciones del problema de Cauchy para la ecuación (3.2) en el intervalo  $(a, b)$ . En este trabajo las soluciones la problema de Cauchy (3.6), (3.7) se buscan en la forma de series de potencia

$$\psi(z, \lambda) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k(z)\lambda^k \quad (3.12)$$

con respecto al parámetro espectral  $\lambda \in \mathbb{C}$  con coeficientes  $a_k$  los cuales son calculados por medio del método de Series de Potencia de Parámetro Espectral (SPPS) que será analizado en la sección 3.2.  $\in \mathbb{C}$  con coeficientes  $a_k$  los cuales son calculados por medio del método de Series de Potencia de Parámetro Espectral (SPPS) que será analizado en la Sección 3.2.

### 3.1.1 Potencial rectangular

Sea

$$V(x) = \begin{cases} U_0 > 0, x \in [0, b] \\ 0, x \notin [0, b] \end{cases},$$

y  $E > U_0$ . Sean

$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, k_2 = \frac{\sqrt{2m(E - U_0)}}{\hbar}.$$

En este caso la solución  $u(x)$  en dicho segmento es igual a

$$\psi(x) = A_2 e^{k_2 x} + B_2 e^{-k_2 x}, \quad x \in (0, b), \quad (3.13)$$

donde  $k_2 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$ . Aplicando las condiciones de continuidad entre las soluciones (3.4), (3.13) y sus primeras derivadas en los puntos  $x = 0$  y  $x = b$  se pueden obtener las siguientes expresiones para  $R$  y  $T$  (para mayor detalle consultar [67])

$$T = \left[ 1 + \frac{1}{4} \left( \frac{k_1^2 + k_2^2}{k_1 k_2} \right)^2 \sinh^2(k_2 b) \right]^{-1}, \quad (3.14)$$

$$R = \frac{1}{4} T \left( \frac{k_1^2 + k_2^2}{k_1 k_2} \right)^2 \sinh^2(k_2 b). \quad (3.15)$$

### 3.1.2 Potencial Posch-Teller

Un potencial Posch-Teller es  $V(x) = \frac{U_0}{\cosh^2(\alpha x)}$ , donde  $U_0 > 0, \alpha > 0$ . Una gráfica se muestra en la Figura 3.2.

Este potencial no es finito, pero  $V(x)$  decrece exponencialmente en infinito, esto es

$$V(x) \leq C e^{-2\alpha|x|}, C > 0.$$

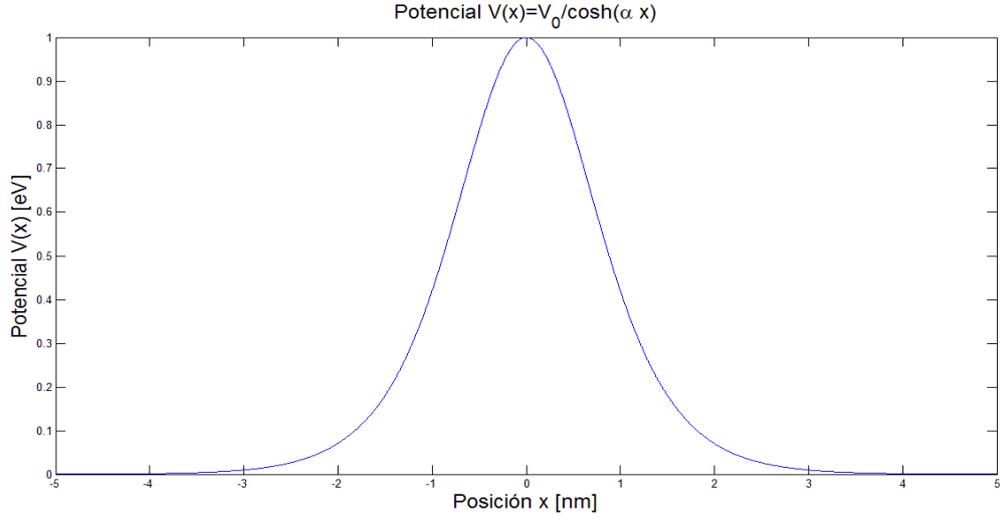


Figura 3.2: Gráfica del potencial  $V(x) = \frac{U_0}{\cosh^2(\alpha x)}$  con  $U_0 = 1 \text{ eV}$  y  $\alpha = 1 \times 10^9 \text{ nm}^{-1}$  en el intervalo  $x \in [-5, 5] \text{ nm}$ .

Se considera una solución  $\psi$  de la ecuación (3.2) con las asintotas

$$\psi(x) \sim \begin{cases} e^{ikx} + R e^{-ikx}, & x \rightarrow -\infty \\ T e^{ikx}, & x \rightarrow +\infty \end{cases}, \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}.$$

Aquí  $R$  y  $T$  son los coeficientes de transmisión y reflexión. En [43] la solución  $\psi(x)$  de la ecuación (3.2) con potencial  $\frac{U_0}{\cosh^2(\alpha x)}$  es obtenida como

$$\psi(x) = (1 - \xi^2)^{-ik/2\alpha} F \left[ (-ik/\alpha) - s, (-ik/\alpha) + s + 1, (-ik/\alpha) + 1, \frac{1}{2}(1 - \xi) \right], \quad (3.16)$$

donde  $F$  es una función hipergeométrica,  $\xi = \tanh(\alpha x)$ ,  $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ , y  $s = \frac{1}{2} \left( -1 + \sqrt{1 - \frac{8mU_0}{\alpha^2 \hbar^2}} \right)$ .

La asintota de  $\psi(x)$  para  $x \rightarrow -\infty$  es

$$\psi(x) \sim e^{-ikx} \frac{\Gamma(ik/\alpha) \Gamma(1 - (ik/\alpha))}{\Gamma(-s) \Gamma(1 + s)} + e^{ikx} \frac{\Gamma(-ik/\alpha) \Gamma(1 - (ik/\alpha))}{\Gamma((-ik/\alpha) - s) \Gamma((-ik/\alpha) + s + 1)}. \quad (3.17)$$

Considerando que  $\Gamma(x)\Gamma(1-x) = \frac{\pi}{\sin x\pi}$  se obtiene

$$|R|^2 = \frac{\cos^2 \left( \frac{1}{2} \pi \sqrt{1 - \frac{8mV_0}{\hbar^2 \alpha^2}} \right)}{\left[ \sinh^2(\pi k/\alpha) + \cos^2 \left( \frac{1}{2} \pi \sqrt{1 - \frac{8mV_0}{\hbar^2 \alpha^2}} \right) \right]}, \quad (3.18)$$

si  $\frac{8mV_0}{\hbar^2\alpha^2} < 1$ . En otro caso

$$|R|^2 = \frac{\cos^2\left(\frac{1}{2}\pi\sqrt{1 - \frac{8mV_0}{\hbar^2\alpha^2}}\right)}{\left[\sinh^2(\pi k/\alpha) + \cos^2\left(\frac{1}{2}\pi\sqrt{\frac{8mV_0}{\hbar^2\alpha^2} - 1}\right)\right]}. \quad (3.19)$$

Tomando en cuenta que  $|R|^2 + |T|^2 = 1$  se obtiene

$$|T|^2 = \frac{\sinh^2(\pi k/\alpha)}{\sinh^2(\pi k/\alpha) + \cos^2\left(\frac{1}{2}\pi\sqrt{1 - \frac{8mV_0}{\hbar^2\alpha^2}}\right)} \quad (3.20)$$

si  $\frac{8mV_0}{\hbar^2\alpha^2} < 1$ . En otro caso

$$|T|^2 = \frac{\sinh^2(\pi k/\alpha)}{\sinh^2(\pi k/\alpha) + \cos^2\left(\frac{1}{2}\pi\sqrt{\frac{8mV_0}{\hbar^2\alpha^2} - 1}\right)}. \quad (3.21)$$

### 3.1.3 Potencial exponencial

Sea  $V(x) = \frac{U_0}{1+e^{-\alpha x}}$  donde  $U_0 > 0$ ,  $\alpha > 0$  son constantes. Una gráfica de dicho potencial se muestra en la Figura 3.3

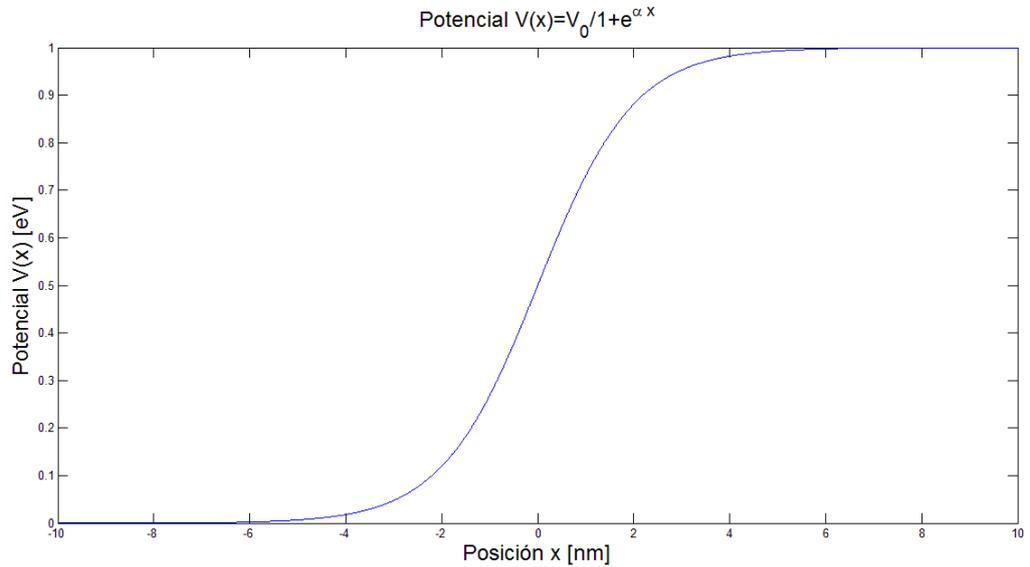


Figura 3.3: Gráfica del potencial  $V(x) = \frac{U_0}{1+e^{-\alpha x}}$  con  $U_0 = 1 \text{ eV}$  y  $\alpha = 1 \times 10^9 \text{ nm}^{-1}$  en el intervalo  $x \in [-10, 10] \text{ nm}$ .

Se observa de la gráfica que  $\lim_{x \rightarrow -\infty} V(x) = 0$  y  $\lim_{x \rightarrow +\infty} V(x) = U_0$ . El comportamiento asintótico de la solución  $\psi(x)$  está dado por

$$\psi(x) \sim \begin{cases} e^{ik_1x} + Re^{-ik_1x}, & x \rightarrow -\infty \\ A_2 e^{ik_2x}, & x \rightarrow +\infty \end{cases},$$

$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, k_2 = \frac{\sqrt{2m(E-U_0)}}{\hbar}, E > U_0.$$

En [43] la solución de la ecuación de Schrödinger (3.2) con potencial  $V(x) = \frac{U_0}{1+e^{-\alpha x}}$  es igual a

$$\psi(x) = F \left[ i[k_1 - k_2]/\alpha, -i[k_1 + k_2]/\alpha, \frac{-2ik_2}{\alpha} + 1, \xi \right],$$

donde  $\xi = -e^{-\alpha x}$ ,  $k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$  and  $k_2 = \frac{\sqrt{2m(E-U_0)}}{\hbar}$ . La forma asintótica de la solución ( $x \rightarrow -\infty$ ) es

$$u(x) \approx (-1)^{-ik_2/\alpha} \left[ C_1 e^{ik_1x} + C_2 e^{-ik_1x} \right],$$

donde

$$C_1 = \frac{\Gamma(-2ik_1/\alpha)\Gamma(-2ik_2/\alpha + 1)}{\Gamma(-i(k_1 + k_2)/\alpha)\Gamma(-i(k_1 + k_2)/\alpha + 1)},$$

$$C_2 = \frac{\Gamma(2ik_1/\alpha)\Gamma(-2ik_2/\alpha + 1)}{\Gamma(i(k_1 - k_2)/\alpha)\Gamma(i(k_1 - k_2)/\alpha + 1)},$$

y aplicando la fórmula  $\Gamma(x)\Gamma(1-x) = \pi/\sin(\pi x)$  se obtiene que el módulo de  $R$  es igual a

$$|R|^2 = \left| \frac{C_2}{C_1} \right|^2 = \frac{\sinh^2(\pi(k_1 - k_2)/\alpha)}{\sinh^2(\pi(k_1 + k_2)/\alpha)}, k_1 > k_2. \quad (3.22)$$

Aplicando la relación  $\frac{k_2}{k_1} |T|^2 + R$  se obtiene

$$|T|^2 = \frac{k_2}{k_1} (1 - |R|^2). \quad (3.23)$$

## 3.2 Series de potencia de parámetro espectral

### 3.2.1 Problema de Sturm Liouville

Se define como ecuación de Sturm Liouville a la ecuación

$$\left[ r(x) u(x)' \right]' + [q(x) + \lambda p(x)] u(x) = 0 \quad (3.24)$$

La ecuación (3.24) está definida en un intervalo  $[a, b] \in \mathbb{R}$ . Dentro de dicho intervalo, se suponen continuas  $p, q, r, r'$ , así como

$$p(x) > 0. \tag{3.25}$$

En los puntos  $a$  y  $b$  se imponen las condiciones de frontera

$$\begin{aligned} k_1 u(a) + k_2 u'(a) &= 0 \\ l_1 u(b) + l_2 u'(b) &= 0 \end{aligned} \tag{3.26}$$

con las constantes  $k_1$  y  $k_2$  sin ser ambas cero, y las constantes  $l_1$  y  $l_2$  sin ser ambas cero. Al problema con valores en la frontera conformado por las ecuaciones (3.24)-(3.26) se le conoce como **problema de Sturm Liouville**.

Las soluciones no triviales  $u(x)$  a la ecuación (3.24) que satisfacen las condiciones de frontera (3.26) son las eigenfunciones del problema, y al número  $\lambda$  se le conoce como eigenvalor del problema.

Los eigenvalores del problema de Sturm-Liouville, incluso en número indefinido, existen bajo condiciones bastantes generales sobre las funciones  $p, q, r$  de la ecuación (3.24). Las demostraciones son proporcionadas en las referencias [10], [30]. Además, si  $p, q, r$  y  $r'$  son funciones con valores reales y continuas en el intervalo  $a \leq x \leq b$  y  $p$  es positiva en ese intervalo, entonces todos los eigenvalores del problema de Sturm-Liouville son reales [42].

El producto interno en el espacio de las eigenfunciones del problema de Sturm-Liouville  $\{u_m\}$  definidas en  $[a, b] \in \mathbb{R}$ , con respecto a la función peso  $p(x) > 0$  es

$$(u_m, u_n) = \int_a^b p(x) u_m(x) u_n(x) dx. \tag{3.27}$$

Por lo tanto, la ortonormalidad de dichas eigenfunciones con respecto a la función peso  $p(x) > 0$  es

$$\int_a^b p(x) u_m(x) u_n(x) dx = (u_m, u_n) = \delta_{mn}. \tag{3.28}$$

La norma  $\|u_m\|$  de la función  $u_m$  se define por

$$\|u_m\| = \sqrt{\int_a^b p(x) u_m^2(x) dx}. \tag{3.29}$$

Aquí se supone que las funciones  $p, q, r$  y  $r'$  en la ecuación de Sturm-Liouville (3.24) tienen valores reales y son continuas en el intervalo  $[a, b]$ , y que  $p(x) > 0$ . Sean

$u_m(x)$  y  $u_n(x)$  eigenfunciones del problema de Sturm-Liouville (3.24) y (3.26) que corresponden a eigenvalores diferentes  $\lambda_n$  y  $\lambda_m$ , respectivamente. Entonces  $u_m(x)$  y  $u_n(x)$  son ortogonales en ese intervalo con respecto a la función peso  $p$  [42].

Si  $r(a) = 0$  entonces la ecuación superior del sistema (3.26) puede eliminarse del problema. Si  $r(b) = 0$ , entonces la ecuación inferior del sistema (3.26) puede eliminarse y entonces se requiere que  $u$  y  $u'$  permanezcan acotadas en tal punto. Cuando el problema de Sturm-Liouville tiene las anteriores condiciones se le conoce como singular [42]. Si  $r(a) = r(b)$ , entonces las condiciones de frontera (3.26) pueden sustituirse por las condiciones periódicas en la frontera

$$u(a) = u(b), \quad u'(a) = u'(b). \quad (3.30)$$

El problema de valor en la frontera compuesto por la ecuación (3.24), y las condiciones (3.30) se conoce como problema periódico de Sturm-Liouville.

Sean  $\{u_m\}$  un conjunto ortogonal con respecto al peso  $p(x)$  en un intervalo  $[a, b]$ . La serie de Fourier generalizada de la función  $f(x)$  en términos de  $u_m$  es igual a

$$f(x) = \sum_{m=0}^{\infty} a_m u_m(x). \quad (3.31)$$

En el desarrollo (3.31) a los términos  $a_m$  se les conoce como constantes de Fourier de  $f(x)$  respecto de  $u_m$ , cuya fórmula es

$$a_m = \frac{(f, u_m)}{\|u_m\|^2} = \frac{1}{\|u_m\|^2} \int_a^b p(x) f(x) u_m(x) dx. \quad (3.32)$$

El desarrollo (3.31) converge y representa a  $f$  si

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \int_a^b p(x) [s_k(x) - f(x)]^2 dx = 0. \quad (3.33)$$

En el límite (3.33), el término  $s_k(x)$  es la suma parcial de (3.31)

$$s_k(x) = \sum_{m=0}^k a_m u_m(x). \quad (3.34)$$

Desarrollando el límite (3.33), y considerando que el integrando de la izquierda no puede ser negativo [42], se obtiene la desigualdad

$$\sum_{m=0}^k a_m^2 \leq \|f\|^2 = \int_a^b p(x) f^2(x) dx. \quad (3.35)$$

Cuando  $\{u_m\}$  es un conjunto completo, en la ecuación (3.35) se cumple la igualdad a ambos lados.

Una importante cantidad de problemas físicos se reducen al problema de Sturm-Liouville. Uno de ellos es la ecuación de Schrödinger unidimensional. Supóngase que en (3.24)  $r(x) = -1$ ,  $p(x) = 1$ . Se obtiene por lo tanto la ecuación

$$-u(x)'' + q(x)u(x) = \lambda u(x) \quad (3.36)$$

que es similar a la ecuación de Schrödinger definida en (3.2) donde  $\psi(x) = u(x)$ .

### 3.2.2 Introducción al método de series de potencias de parámetro espectral (SPPS)

El método SPPS fue propuesto por V. Kravchenko [39] y es un método que resuelve numéricamente ecuaciones diferenciales, entre las que se encuentra la ecuación de Sturm-Liouville. El método SPPS ha sido aplicado exitosamente a diferentes problemas de la Física Matemática que se reducen al problema de Sturm Liouville (ver [13], [14], [36], [40]). En [7] el método SPPS fue aplicado al análisis de guías de onda electromagnéticas. Sea

$$-\psi(x)'' + q(x)\psi(x) = \lambda\psi(x), x \in (a, b) \quad (3.37)$$

una ecuación de Schrödinger en el intervalo  $(a, b)$  con un potencial continuo a trozos  $q(x)$  en  $[a, b]$ . Dado que  $q \in L^1([a, b])$  cada solución  $\psi$  de la ecuación (3.37) pertenece a  $C^{(1)}([a, b])$ . Siguiendo el método SPPS la solución general  $\psi$  de (3.37) es igual a

$$\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2, \quad (3.38)$$

donde  $c_1, c_2$  son constantes arbitrarias complejas y

$$\psi_1 = u_0 \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n \tilde{X}^{(2n)}, \quad (3.39)$$

$$\psi_2 = u_0 \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n X^{(2n+1)}, \quad (3.40)$$

donde  $u_0$  es una solución de la ecuación homogénea

$$-u_0''(x) + q(x)u_0(x) = 0, \quad x \in (a, b), \quad (3.41)$$

y  $u_0^{-1} \in C([a, b])$ .  $\tilde{X}^{(2n)}, X^{(2n+1)}$  son encontradas por las fórmulas recursivas

$$\tilde{X}^{(0)} \equiv 1, \quad X^{(0)} \equiv 1, \quad (3.42)$$

$$\tilde{X}^{(n)}(x) = \begin{cases} \int_0^x \tilde{X}^{(n-1)}(s) u_0^2(s) r(s) ds, & n \text{ impar} \\ \int_0^x \tilde{X}^{(n-1)}(s) \frac{1}{u_0^2(s)p(s)} ds, & n \text{ par} \end{cases} \quad (3.43)$$

$$X^{(n)}(x) = \begin{cases} \int_0^x X^{(n-1)}(s) \frac{1}{u_0^2(s)p(s)} ds, & n \text{ impar} \\ \int_0^x X^{(n-1)}(s) u_0^2(s) r(s) ds, & n \text{ par} \end{cases} \quad (3.44)$$

La solución  $u_0$  de (3.41) está dada por una combinación lineal de dos soluciones  $(y_1, y_2)$  linealmente independientes

$$u_0 = y_1 + iy_2. \quad (3.45)$$

donde  $y_1$  e  $y_2$  están dadas por

$$y_1 = \sum_{n=0}^{\infty} \tilde{Y}^{(2n)}, \quad y_2 = \sum_{n=0}^{\infty} Y^{(2n+1)}. \quad (3.46)$$

Por su parte  $Y^{(n)}$  y  $\tilde{Y}^{(n)}$  también son integrales recursivas

$$\tilde{Y}^{(0)} \equiv 1, \quad Y^{(0)} \equiv 1, \quad (3.47)$$

$$\tilde{Y}^{(n)}(x) = \begin{cases} -\int_{x_0}^x \tilde{Y}^{(n-1)}(s) q(s) ds & n \text{ impar}, \\ \int_{x_0}^x \tilde{Y}^{(n-1)}(s) \frac{1}{p(s)} ds, & n \text{ par}, \end{cases} \quad (3.48)$$

$$Y^{(n)}(x) = \begin{cases} \int_{x_0}^x Y^{(n-1)}(s) \frac{1}{p(s)} ds, & n \text{ impar} \\ -\int_{x_0}^x Y^{(n-1)}(s) q(s) ds, & n \text{ par}. \end{cases} \quad (3.49)$$

La prueba de la convergencia uniforme y de la independencia lineal de las soluciones  $\psi_1, \psi_2$  dadas por las series (3.39) y (3.40) se proporciona en [38]. Para la implementación numérica de este método es necesario conocer la exactitud que se puede obtener en términos del número de potencias  $N$  a las cuales se truncan las series (3.39) y (3.40). Dicha expresión aparece en [38] y es igual a

$$\begin{aligned} |\psi_1 - \psi_{1,N}| &= |u_0| \left| \sum_{k=N+1}^{\infty} \lambda^k \tilde{X}^{(2k)} \right| \leq \max |u_0| \sum_{k=N+1}^{\infty} \frac{c^k}{(2k)!} \\ &= \max |u_0| \left| \cosh \sqrt{c} - \sum_{k=0}^N \frac{c^k}{(2k)!} \right| \end{aligned} \quad (3.50)$$

donde  $\psi_{1,N} = u_0 \sum_{k=0}^N \lambda^k \tilde{X}^{(2k)}$  y en el presente trabajo el valor de  $c$  es igual a  $c = |\lambda| \left( \max |u_0^2| \right) \left( \max \left| -\frac{1}{u_0^2} \right| \right) |b - a|^2$ .

Aplicando las soluciones particulares  $\psi_1, \psi_2$  dadas por las series (3.39) y (3.40) de la ecuación (3.37) se obtiene de las expresiones para los coeficientes  $R$  y  $T$  dadas por (3.10), (3.11).

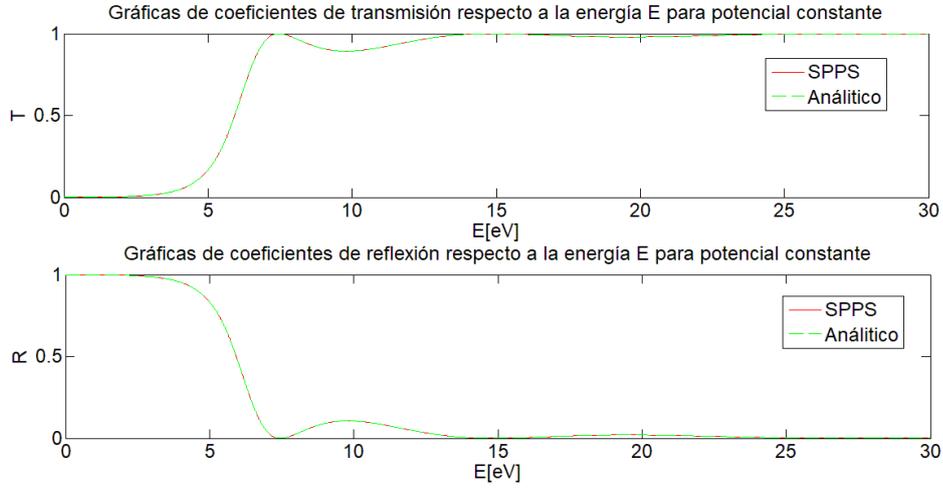


Figura 3.4: Gráficas de los coeficientes de transmisión  $T$  y reflexión  $R$  para un potencial constante ( $V_0 = 5 \text{ eV}$  y  $b = 2 \text{ nm}$ ) obtenidos analíticamente y por medio de SPPS.

### 3.3 Resultados

Se muestran los resultados obtenidos por el método SPPS. Para el cálculo numérico de  $R$  y  $T$  se trunca la serie 3.39 y 3.40, esto es

$$\begin{aligned} \psi_{1,N} &= \psi_0 \sum_{n=0}^N \lambda^n \tilde{X}^{(2n)}, \\ \psi_{2,N} &= \psi_0 \sum_{n=0}^N \lambda^n X^{(2n+1)}. \end{aligned} \quad (3.51)$$

Los cálculos fueron realizados en *MATLAB* <sup>®</sup> usando las rutinas *fnint* y *spapi* para el caso de las integrales (3.43), (3.44).

En la Figura 3.4 se presentan los resultados obtenidos para los coeficientes de reflexión  $R$  y transmisión  $T$  para un potencial constante obtenidos por medio de SPPS ( $N = 120$ ) y se compara con los resultados obtenidos analíticamente. Se considera una barrera de  $V_0 = 5 \text{ eV}$  y  $b = 2 \text{ nm}$ . La masa efectiva  $m$  del electrón utilizada es la reportada para el material *GaAs* ( $m = 0.067m_0 = 6.1030 \times 10^{-32} \text{ kg}$ ). Se usa ese material pues es ampliamente usado para fabricar alambres cuánticos [29]. El efecto túnel aparece en la parte de la gráfica correspondiente a  $E \in [0, 5] \text{ eV}$ .

En la Figura 3.5 se muestra la gráfica de error absoluto entre los valores calculados por medio de SPPS contra los valores analíticos para los coeficientes de transmisión y reflexión de la Fig.3.4.

En la Figura 3.6 se muestran los resultados para el coeficiente de transmisión  $T$

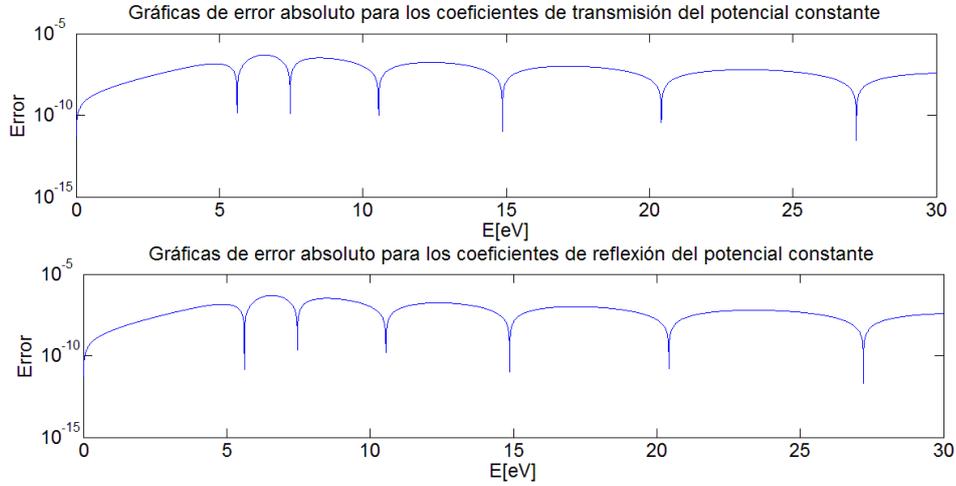


Figura 3.5: Error absoluto para los coeficientes de transmisión  $T$  y reflexión  $R$  en un potencial constante ( $V_0 = 5 \text{ eV}$  y  $b = 2 \text{ nm}$ ).

para el potencial  $\frac{U_0}{\cosh^2(\alpha x)}$  con valores  $U_0 = 1 \text{ eV}$  y  $\alpha = 1 \times 10^9 \text{ nm}^{-1}$  obtenidos analíticamente y por medio del método SPPS. Para la implementación del método se aplicó al potencial en cuestión un truncamiento en el segmento  $[-5, 5] \text{ nm}$ , porque  $\frac{U_0}{\cosh^2(\alpha x)} = 0$  para  $|x| > 5$  con la precisión que utiliza la máquina que realizó los cálculos. La comparación se llevó a cabo en el intervalo de energía  $[0, 1] \text{ eV}$ .

En la Figura 3.7 se muestra el error absoluto para el coeficiente de transmisión de la Figura 3.6.

En la Figura 3.8 los resultados del coeficiente de reflexión  $R$  del potencial  $\frac{U_0}{1+e^{-\alpha x}}$  con valores  $U_0 = 1 \text{ eV}$  y  $\alpha = 1 \times 10^9 \text{ nm}^{-1}$  obtenidos analíticamente y por medio de SPPS son comparados. Para la implementación del método SPPS se definen los siguientes valores para el potencial

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x < -10 \\ \frac{U_0}{1+e^{-\alpha x}}, & |x| \leq 10 \\ U_0, & x > 10 \end{cases},$$

esto debido a que fuera del segmento  $|x| \leq 10$ . la función  $V(x) = \frac{U_0}{1+e^{-\alpha x}} = 0$  con la precisión de la máquina usada para realizar los cálculos.

En la Figura 3.9 se muestra el error absoluto para el coeficiente de reflexión de la Figura 3.8.

En la Tabla 3.1 se presentan los errores absolutos máximos para los coeficientes de transmisión y reflexión que se mostrarán anteriormente.

Finalmente, se trabajó con una doble barrera con altura  $V_0 = 5 \text{ eV}$  y anchos

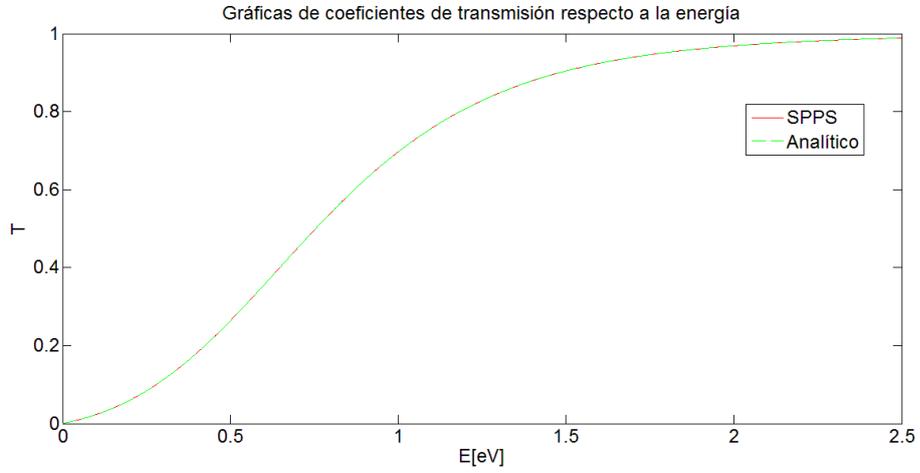


Figura 3.6: Gráfica del coeficiente de Transmisión  $T$  para el potencial  $V_0(x) = \frac{U_0}{\cosh^2(\alpha x)}$  donde  $U_0 = 1 \text{ eV}$  y  $\alpha = 1 \times 10^9 \text{ nm}^{-1}$  obtenido analíticamente y por medio de SPPS.

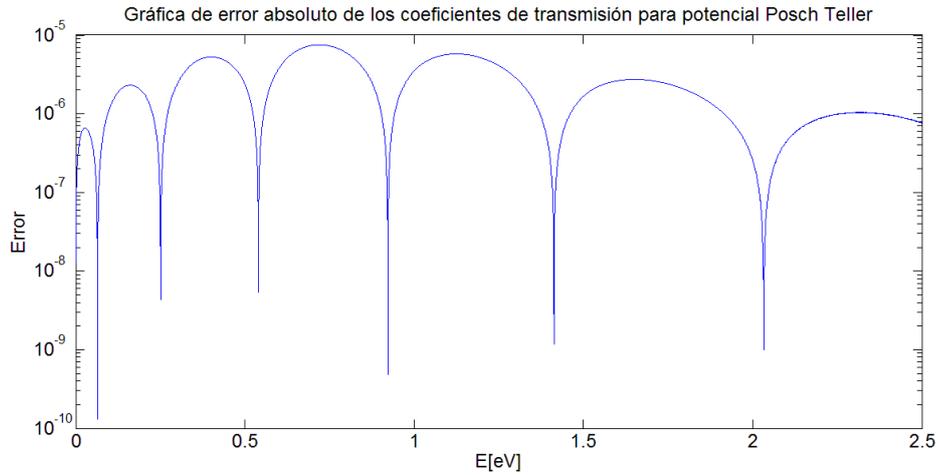


Figura 3.7: Error absoluto del coeficiente de transmisión  $T$  obtenido analíticamente y por medio de SPPS para el potencial  $V_0(x) = \frac{U_0}{\cosh^2(\alpha x)}$  donde  $U_0 = 1 \text{ eV}$  y  $\alpha = 1 \times 10^9 \text{ nm}^{-1}$ .

Tabla 3.1: Errores Absolutos

| $V(x)$                            | Error absoluto máximo   |
|-----------------------------------|-------------------------|
| 5 eV (Coeficiente de reflexión)   | $1.4451 \times 10^{-7}$ |
| 5 eV (Coeficiente de transmisión) | $1.4454 \times 10^{-7}$ |
| $\frac{U_0}{\cosh^2(\alpha x)}$   | $7.3972 \times 10^{-6}$ |
| $\frac{U_0}{1+e^{-\alpha x}}$     | $4.7137 \times 10^{-3}$ |

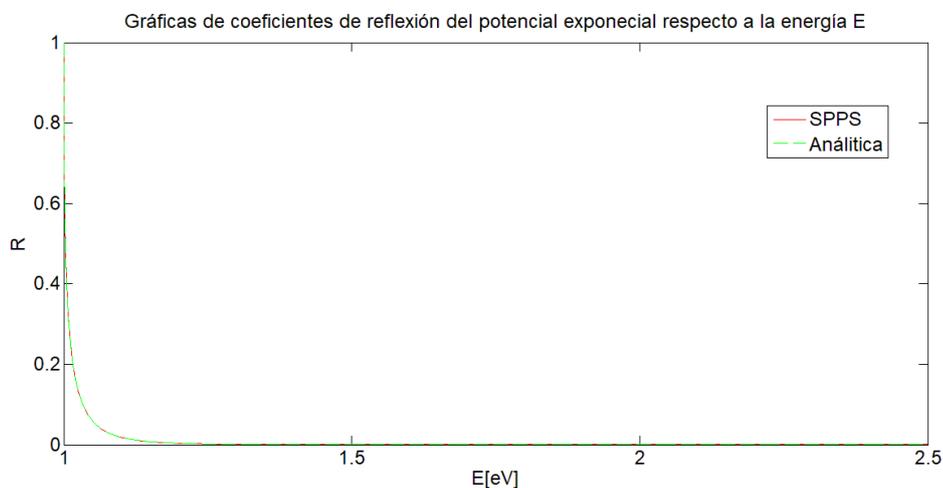


Figura 3.8: Gráfica del coeficiente de reflexión  $R$  para el potencial  $V_0(x) = \frac{U_0}{1+e^{-\alpha x}}$  donde  $U_0 = 1 \text{ eV}$  y  $\alpha = 1 \times 10^9 \text{ nm}^{-1}$  obtenido analíticamente y por medio de SPPS.

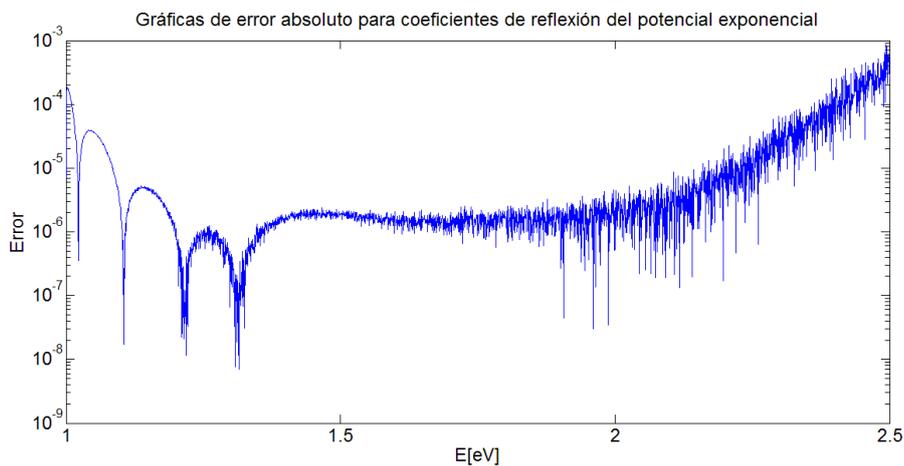


Figura 3.9: Error absoluto para el coeficiente de reflexión  $R$  obtenido analíticamente y por medio de SPPS para el potencial  $V_0(x) = \frac{U_0}{1+e^{-\alpha x}}$  donde  $U_0 = 1 \text{ eV}$  y  $\alpha = 1 \times 10^9 \text{ nm}^{-1}$ .

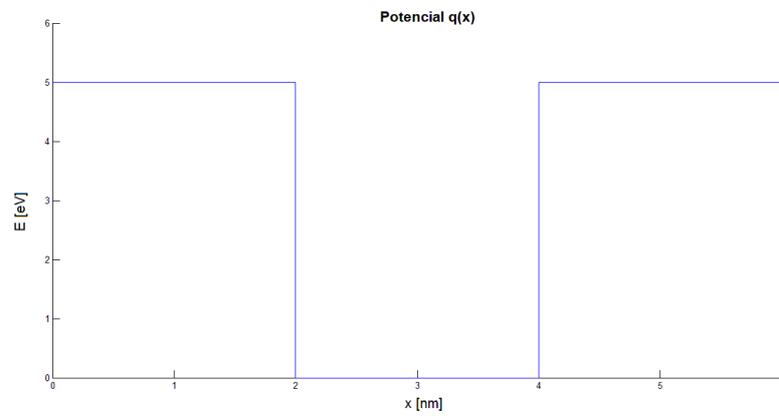


Figura 3.10: Gráfica de una doble barrera con altura  $V_0 = 5 \text{ eV}$  y ancho  $b = 2 \text{ nm}$ .

$b = 2 \text{ nm}$ . La gráfica del potencial se muestra en la Figura 3.10 y el coeficiente de transmisión obtenido con SPPS se muestra en la Fig 3.11.

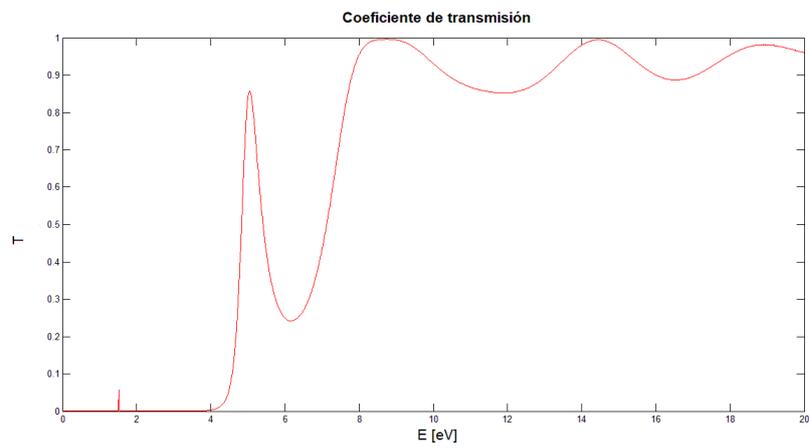


Figura 3.11: Coeficiente de transmisión  $T$  para un doble potencial constante obtenido por medio de SPSS.

## Capítulo 4

# Dispersión en guías de ondas cuánticas con impurezas

Ahora se analiza el problema de dispersión dentro de una guía de onda cuántica para lo cual se define un dominio  $\Pi = D_x \times \mathbb{R}$  en  $\mathbb{R}^3$  donde  $D_x$  es un dominio acotado en  $\mathbb{R}^2$ ,  $x = (x_1, x_2) \in \Omega$ ,  $z \in \mathbb{R}$ , en donde  $x$  es la sección transversal de la guía de onda, y  $z$  es la dirección de propagación de la partícula. Para el problema de dispersión se definen el potencial  $W(x, z)$  que es una función real y que describe la interacción entre una partícula que se propaga en el interior de la partícula y una impureza en la estructura de la guía de onda. Dicha impureza puede ser producto de los procesos de fabricación de los nanotubos referidos en el Capítulo 1 o pueden ser generados artificialmente como se explica en [66]. Cabe anotar que los resultados del presente capítulo han sido enviados para su publicación en la revista *Mathematical Methods in the applied sciences*.

### 4.1 Expresiones analíticas para matriz de transición

Sea

$$V(x) = \frac{2m}{\hbar^2} \mathcal{V}(x), W(x, z) = \frac{2m}{\hbar^2} \mathcal{W}(x, z), \lambda = \frac{2m}{\hbar^2} E.$$

La ecuación de Schrödinger correspondiente al sistema es

$$\begin{aligned} \mathcal{H}u(x, z) &= (-\Delta_x - \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(x) + W(x, z))u(x, z) = \lambda u(x, z), (x, z) \in \Pi, \\ u(x, z) &|_{\partial\Pi} = 0. \end{aligned} \quad (4.1)$$

Los potenciales  $V$  y  $W$  son funciones real-valuadas,  $V \in L^\infty(D)$ , y

$$M = \sup_{x \in D} \int_{\mathbb{R}} (1 + |z|) |W(x, z)| dz < \infty. \quad (4.2)$$

Se denota por  $\mathcal{A}$  un operador no acotado en el espacio de Hilbert  $L^2(D)$  definido por el operador diferencial  $-\Delta_x + V(x)$ ,  $x \in D$  con dominio  $\mathcal{D}_{\mathcal{A}} = \{\varphi \in H^2(D) : \varphi|_{\partial D} = 0\}$ . Notar que  $\mathcal{A}$  es un operador autoadjunto con espectro discreto  $\{\mu_1 \leq \mu_2 \leq \dots \leq \mu_m, \dots\}$  donde  $\mu_m \rightarrow +\infty$ . Se denota por  $\{\varphi_j\}_{j=1}^{\infty}$  el sistema normal de eigenfunciones de  $\mathcal{A}$  en el espacio  $L^2(D)$ .

El operador de Schrödinger  $\mathcal{H}$  con dominio  $\mathcal{D}_{\mathcal{H}} = \{\varphi \in H^2(D \times \mathbb{R}) : \varphi|_{\partial D \times \mathbb{R}} = 0\}$  es autoadjunto en  $L^2(\Pi)$ , y  $\mathcal{H}$  tiene el espectro esencial  $sp_{ess}\mathcal{H} = [\mu_1, +\infty)$ . Además, de acuerdo a los resultados de la Sección 2.3 el operador  $\mathcal{H}$  tiene el espectro discreto localizado en el conjunto  $[\inf_{D \times \mathbb{R}} W(x, z), \mu_1)$ , y si

$$\inf_{D \times [0, H]} W(x, z) \geq \mu_1 \quad (4.3)$$

el operador  $\mathcal{H}$  tiene espectro esencial únicamente.

Se buscan soluciones del problema espectral (4.1) en forma de series

$$u_{\lambda}(x, z) = \sum_{j=1}^{\infty} y_j(z, \lambda) \varphi_j(x), x \in D, z \in \mathbb{R}.$$

donde  $\{\varphi_j\}_{j=1}^{\infty}$  es un sistema completo y ortonormal de eigenfunciones de  $\mathcal{A}$ . Por lo tanto se obtiene un sistema infinito de ecuaciones diferenciales ordinarias para los coeficientes de Fourier  $y_j(z, \lambda)$  en  $\mathbb{R}$

$$-\frac{d^2 y_j(z, \lambda)}{dz^2} + (\mu_j - \lambda) y_j(z) + \sum_{k=1}^{\infty} L_{jk}(z) y_k(z) = 0, z \in \mathbb{R}, j = 1, \dots, \infty \quad (4.4)$$

donde

$$L_{jk}(z) = \int_D W(x, z) \varphi_j(x) \bar{\varphi}_k(x) dx, j, k = 1, \dots, \infty. \quad (4.5)$$

La condición (4.2) implica que para cada  $j, k = 1, \dots, N$

$$\int_{\mathbb{R}} L_{jk}(z) (1 + |z|) dz \leq M,$$

donde  $M$  está dado en (4.2)

Para el análisis posterior se considera que la dispersión de los modos cuánticos propagados  $\Phi_k^{\pm}(x, z, \lambda)$  con asíntotas

$$\Phi_k^{\pm}(x, z, \lambda) \sim e^{\pm i\nu_k(\lambda)z} \varphi_k(x), k \in \mathbb{N}, z \rightarrow \pm\infty$$

donde

$$\nu_k(\lambda) = \sqrt{\lambda - \mu_k^2} > 0, k \in \mathbb{N},$$

y la rama de la raíz cuadrada  $\sqrt{\lambda - \mu_k^2}$  es escogida de tal forma que  $\sqrt{\zeta} > 0$  si  $\zeta > 0$ .

Notar que debido a que  $\lim_{k \rightarrow \infty} \mu_k^2 = +\infty$  para cada eigenvalor  $\lambda > \mu_1^2$  existe un conjunto finito de modos de propagación cuánticos  $\Phi_k^\pm(x, z, \lambda)$ ,  $k = 1, \dots, N = N(\lambda)$  tal que  $\nu_k(\lambda) > 0$ . Por lo tanto, para el cálculo de los modos de propagación se tiene un sistema truncado (finito) de ecuaciones diferenciales ordinarias

$$-y_j''(z, \lambda) + (\mu_j - \lambda)y_j(z, \lambda) + \sum_{k=1}^N L_{j,k}(z)y_k(z, \lambda) = 0, z \in \mathbb{R}, j = 1, \dots, N, \quad (4.6)$$

$$\mu_j < \lambda, j = 1, \dots, N.$$

Sean

$$\Lambda_N(\lambda) = \text{diag}(\nu_1(\lambda), \dots, \nu_N(\lambda)),$$

$$E_+(z, \lambda) = \text{diag}(e^{i\nu_1(\lambda)z}, \dots, e^{i\nu_N(\lambda)z}), E_-(z, \lambda) = \text{diag}(e^{-i\nu_1(\lambda)z}, \dots, e^{-i\nu_N(\lambda)z})$$

matrices diagonales. Entonces el sistema (4.6) puede ser escrito de la forma

$$-\frac{d^2 y(z, \lambda)}{dz^2} + \Lambda_N(\lambda)y(z, \lambda) + L_N(z)y(z, \lambda) = 0, z \in \mathbb{R}, \quad (4.7)$$

$$L_N(z) = (L_{j,k}(z))_{j,k=1}^N.$$

Sean  $y_+(z, \lambda), y_-(z, \lambda)$  las soluciones de Jost matriciales de la ecuación (4.7), esto es las soluciones de (4.7) con asíntotas

$$y_+(z, \lambda) \sim E_+(z, \lambda), z \rightarrow +\infty, \quad (4.8)$$

$$y_-(z, \lambda) \sim E_-(z, \lambda), z \rightarrow -\infty.$$

Tales soluciones pueden ser expresados en la siguiente forma (ver para mayor referencia [12])

$$y_+(z, \nu) = E_+(z, \lambda) + \int_z^\infty \mathcal{S}(\lambda, t - z)L_N(t)y_+(t, \lambda)dt, z \in \mathbb{R} \quad (4.9)$$

$$y_-(z, \nu) = E_-(z, \lambda) + \int_{-\infty}^z \mathcal{S}(\lambda, t - z)L_N(t)y_-(t, \lambda)dt, z \in \mathbb{R} \quad (4.10)$$

donde  $\mathcal{S}(\lambda, t)$  es una matriz diagonal

$$\mathcal{S}(\lambda, t) = \text{diag} \left( \frac{\sin \nu_1(\lambda)z}{\nu_1(\lambda)}, \dots, \frac{\sin \nu_N(\lambda)z}{\nu_N(\lambda)} \right).$$

Las ecuaciones (3.19),(4.10) tienen soluciones únicas en la forma de ecuaciones de Volterra y sus soluciones pueden ser obtenidas por el método de aproximaciones sucesivas. Las soluciones  $y_+, y_-$  son conocidas como soluciones de Jost como análogos del caso en una dimensión. Notar que

$$\overline{y_+(z, \lambda)} \sim \overline{E_+(z, \lambda)}, \overline{y_-(z, \lambda)} \sim \overline{E_-(z, \lambda)},$$

y si  $\nu_k(\lambda) > 0$  entonces los pares  $\left\{y_+(z, \lambda), \overline{y_+(z, \lambda)}\right\}, \left\{y_-(z, \lambda), \overline{y_-(z, \lambda)}\right\}$  son matrices fundamentales del sistema (4.7).

Por lo tanto la solución matricial  $y_-(z, \lambda)$  deben ser una combinación lineal de las soluciones  $y_+(z, \lambda), \overline{y_+(z, \lambda)}$  con coeficientes matriciales, esto es

$$y_-(z, \lambda) = a_r(\lambda)\overline{y_+(z, \lambda)} + b_r(\lambda)y_+(z, \lambda). \quad (4.11)$$

Tomando el conjugado complejo se obtiene

$$\overline{y_-(z, \lambda)} = \overline{a_r(\lambda)}y_+(z, \lambda) + \overline{b_r(\lambda)}\overline{y_+(z, \lambda)}. \quad (4.12)$$

Sobre el significado físico de la igualdad (4.11). Nótese que las columnas

$$y_-^j(z, \lambda) = (0, \dots, e^{-i\nu_j(\lambda)z}, \dots, 0)^T, j = 1, \dots, N$$

de la matriz  $y_-(z, \lambda)$  corresponden al modo cuántico  $e^{-i\nu_j(\lambda)z}\varphi_j(x)$  de la partícula libre para  $z \rightarrow -\infty$ . El paso a través del potencial impureza  $W$  genera una función de onda que es una combinación lineal de los modos  $\overline{y_+^k(z, \lambda)}\varphi_k(x)$  reflejado desde  $W$  y el modo  $y_+^k(z, \lambda)\varphi_k(x)$  que pasa a través de  $W$ . Esto es

$$y_-^j(z, \lambda) = \sum_{k=1}^N a_{j,k}^r(\lambda)\overline{y_+^k(z, \lambda)} + \sum_{k=1}^N b_{j,k}^r(\lambda)y_+^k(z, \lambda), j = 1, \dots, N.$$

Por lo tanto, las matrices  $a_r(\lambda) = (a_{j,k}^r(\lambda))_{j,k=1}^N$  y  $b_r(\lambda) = (b_{j,k}^r(\lambda))_{j,k=1}^N$  de tamaño  $N \times N$  son las matrices de transmisión y reflexión.

En consecuencia se introduce la matriz de transición derecha  $T_r(\lambda)$

$$T_r(\lambda) = \begin{pmatrix} a_r(\lambda) & b_r(\lambda) \\ \overline{a_r(\lambda)} & \overline{b_r(\lambda)} \end{pmatrix}. \quad (4.13)$$

En modo similar se puede expresar  $y_+(z, \lambda)$  por medio de  $\overline{y_-(z, \lambda)}$  y  $y_-(z, \nu)$

$$y_+(z, \lambda) = a_l(\lambda)\overline{y_-(z, \lambda)} + b_l(\lambda)y_-(z, \lambda)$$

y se introduce la matriz de transición izquierda  $T_l(\nu)$

$$T_l(\lambda) = \begin{pmatrix} a_l(\lambda) & b_l(\lambda) \\ \overline{a_l(\lambda)} & \overline{b_l(\lambda)} \end{pmatrix}.$$

Sean

$$Y_+(z, \lambda) = \begin{pmatrix} \overline{y_+(z, \lambda)} \\ y_+(z, \lambda) \end{pmatrix}, Y_-(z, \nu) = \begin{pmatrix} y_-(z, \nu) \\ \overline{y_-(z, \lambda)} \end{pmatrix}$$

son matrices de tamaño  $2N \times N$  evaluadas en función. Entonces

$$Y_-(z, \lambda) = T_r(\lambda)Y_+(z, \lambda), \quad (4.14)$$

y

$$Y_+(z, \lambda) = T_l(\lambda)Y_-(z, \lambda). \quad (4.15)$$

Por medio de la derivación de (4.14) con respecto a  $z$  se obtiene que

$$Y'_-(z, \lambda) = T_r(\lambda)Y'_+(z, \lambda). \quad (4.16)$$

Se introducen las matrices  $\mathcal{Y}_+(z, \lambda) = (Y_+(z, \lambda), Y'_+(z, \lambda))$ ,  $\mathcal{Y}_-(z, \lambda) = (Y_-(z, \lambda), Y'_-(z, \lambda))$  de tamaño  $2N \times 2N$  tal que

$$\begin{aligned} \mathcal{Y}_-(z, \lambda) &= (Y_-(z, \lambda), Y'_-(z, \lambda)) = T_r(\lambda) (Y_+(z, \lambda), Y'_+(z, \lambda)) \\ &= T_r(\lambda)\mathcal{Y}_+(z, \lambda); \end{aligned} \quad (4.17)$$

De la expresión (4.17) se obtiene

$$\det \mathcal{Y}_-(z, \lambda) = \det T_r(\lambda) \det \mathcal{Y}_+(z, \lambda) \quad (4.18)$$

donde  $\det \mathcal{Y}_\pm(z, \lambda)$ ,  $j = 1, 2$  son los Wronskianos de las soluciones  $\{\overline{y_\pm(z, \lambda)}, y_\pm(z, \lambda)\}$  que son independientes de  $z$  y pueden ser calculadas aplicando las asíntotas (4.8)

$$\det \mathcal{Y}_\pm(z, \lambda) = (\mp 2i)^N \nu_1(\lambda) \cdot \dots \cdot \nu_N(\lambda). \quad (4.19)$$

Es claro que  $\det \mathcal{Y}_\pm(z, \lambda) \neq 0$  si toda  $\nu_j(\lambda) > 0$ .

Las igualdades (4.18) y (4.19) implican que  $|\det T_r(\lambda)| = 1$ . Por lo tanto la matriz  $T_r(\lambda)$  es invertible y

$$\begin{aligned} T_r(\lambda) &= \mathcal{Y}_+^{-1}(z, \lambda)\mathcal{Y}_-(z, \lambda), \\ T_r^{-1}(\lambda) &= \mathcal{Y}_-^{-1}(z, \lambda)\mathcal{Y}_+(z, \lambda) \end{aligned} \quad (4.20)$$

donde la parte derecha en (4.20) es independiente de  $z \in \mathbb{R}$ .

Para el cálculo de las entradas de las matrices  $a_r(\lambda)$  y  $b_r(\lambda)$  se usa el sistema de ecuaciones

$$\begin{aligned} y_-(z, \lambda) &= a_r(\lambda)\overline{y_+(z, \lambda)} + b_r(\lambda)y_+(z, \lambda), \\ y'_-(z, \lambda) &= a_r(\lambda)\overline{y'_+(z, \lambda)} + b_r(\lambda)y'_+(z, \lambda). \end{aligned} \quad (4.21)$$

Notar que el sistema (4.21) tiene la solución única  $(a_r(\lambda), b_r(\lambda))$  debido a que el Wronskiano

$$W(\overline{y_+}, y_+) = \det \begin{pmatrix} \overline{y_+(z, \lambda)} & y_+(z, \lambda) \\ \overline{y'_+(z, \lambda)} & y'_+(z, \lambda) \end{pmatrix} \neq 0.$$

Se denota por  $y_-^+(z, \lambda), y_-^{+'}(z, \lambda), j = 1, 2$  los términos principales de las asíntotas  $y_-(z, \nu), y_-'(z, \lambda)$  para  $z \rightarrow +\infty$ . Entonces el sistema (4.21) implica

$$\begin{aligned} y_-^+(z, \lambda) &= a_r(\lambda) \overline{E_+(z, \lambda)} + b_r(\lambda) E_+(z, \lambda), \\ y_-^{+'}(z, \nu) &= a_r(\lambda) \overline{E_+'(z, \lambda)} + b_r(\lambda) E_+'(z, \lambda). \end{aligned} \quad (4.22)$$

El determinante  $\mathbb{W}(\lambda)$  del sistema (4.22) es

$$\mathbb{W}(\lambda) = \det \begin{pmatrix} \overline{E_+(z, \lambda)} & E_+(z, \lambda) \\ \overline{E_+'(z, \lambda)} & E_+'(z, \lambda) \end{pmatrix} = (2i)^N \nu_1(\lambda) \cdot \dots \cdot \nu_N(\lambda) \neq 0.$$

Debido a que las matrices  $E_+(z, \lambda), E_+'(z, \lambda)$  son diagonales se obtiene que

$$a_r(\lambda) = \frac{y_-^{+'}(z, \lambda) E_+'(z, \lambda) - y_-^+(z, \nu) E_+(z, \lambda)}{(2i)^N \nu_1(\lambda) \cdot \dots \cdot \nu_N(\lambda)}, \quad (4.23)$$

$$b_r(\lambda) = \frac{y_-^+(z, \lambda) E_-(z, \lambda) - y_-^{+'}(z, \lambda) E_-'(z, \lambda)}{(2i)^N \nu_1(\lambda) \cdot \dots \cdot \nu_N(\lambda)}. \quad (4.24)$$

De la misma manera se puede encontrar  $a_l(\lambda)$  y  $b_l(\lambda)$  del sistema

$$\begin{aligned} y_+^-(z, \lambda) &= a_l(\lambda) \overline{E_-(z, \lambda)} + b_l(\lambda) E_-(z, \lambda), \\ y_+^{-'}(z, \lambda) &= a_l(\lambda) \overline{E_-'(z, \lambda)} + b_l(\lambda) E_-'(z, \lambda). \end{aligned} \quad (4.25)$$

$$a_l(\lambda) = \frac{y_+^{-'}(z, \lambda) E_-'(z, \lambda) - y_+^-(z, \lambda) E_-(z, \lambda)}{(-2i)^N \nu_1(\lambda) \cdot \dots \cdot \nu_N(\lambda)}, \quad (4.26)$$

$$b_l(\lambda) = \frac{y_+^-(z, \lambda) E_+(z, \lambda) - y_+^{-'}(z, \lambda) E_+'(z, \lambda)}{(-2i)^N \nu_1(\lambda) \cdot \dots \cdot \nu_N(\lambda)} \quad (4.27)$$

donde  $y_+^-(z, \lambda), y_+^{-'}(z, \lambda)$  son los términos principales de las asíntotas  $y_+(z, \lambda), y_+'(z, \lambda)$  para  $z \rightarrow -\infty$ .

## 4.2 Potenciales con soporte compacto

Sea

$$W(x, z) = \begin{cases} W_0(x, z), & 0 \leq z \leq H, x \in D \\ 0, & z \notin [0, H], x \in D \end{cases}$$

donde  $W_0 \in L^\infty(D \times [0, H])$ . Entonces la matriz  $L(z) = (L_{jk}(z))_{j,k=1}^N$  es de la forma

$$L_{jk}(z) = \int_D W(x, z) \varphi_j(x) \bar{\varphi}_k(x) dx$$

tal que  $L_{jk}(z) = 0$  si  $z \notin [0, H]$ .

Sean  $C(z, \lambda), S(z, \lambda)$  las soluciones matriciales de las ecuaciones (4.4) que satisfacen las condiciones iniciales

$$\begin{aligned} C(0, \lambda) &= I_N, C'(0, \lambda) = 0, \\ S(0, \lambda) &= 0, S'(0, \lambda) = I_N. \end{aligned} \quad (4.28)$$

Las funciones matriciales  $C(z, \lambda), S(z, \lambda)$  son soluciones de los sistemas de ecuaciones integrales de Volterra (ver para mayor referencia [12])

$$C_k(z, \lambda) = \cos \nu_k(\lambda)z + \frac{1}{\nu_k(\lambda)} \int_0^z [\sin \nu_k(\lambda)(z-t)] \sum_{j=1}^N L_{kj}(t)C_j(t, \lambda)dt, \quad (4.29)$$

$$z \in (0, H), k = 1, \dots, N \quad (4.30)$$

$$S_k(z, \lambda) = \left( \frac{1}{\nu_k} \sin \nu_k(\lambda)z \right) + \frac{1}{\nu_k(\lambda)} \int_0^z [\cos \nu_k(\lambda)(z-t)] \sum_{j=1}^N L_{kj}(t)C_j(t, \lambda)dt,$$

$$z \in (0, H), k = 1, \dots, N. \quad (4.31)$$

Las ecuaciones (4.29) tienen soluciones únicas en el espacio  $C^{(2)}(0, H), \mathbb{C}^{N \times N}$ ) y satisfacen las condiciones iniciales (4.28). Las soluciones  $C(z, \lambda), S(z, \lambda)$  son linealmente independientes, su Wronskiano existe y es igual a

$$W(C; S) = \det \begin{pmatrix} C(z, \lambda) & S(z, \lambda) \\ C'(z, \lambda) & S'(z, \lambda) \end{pmatrix} = 1. \quad (4.32)$$

Las soluciones de Jost están definidas por los valores

$$\begin{aligned} y_+(z, \lambda) &= E_+(z, \lambda), z \geq H, \\ y_-(z, \lambda) &= E_-(z, \lambda), z \leq 0. \end{aligned} \quad (4.33)$$

Se define  $y_+(z, \lambda), z \in \mathbb{R}$  por la extensión de  $E_+(z, \lambda)$  en el intervalo  $(-\infty, H)$  y  $y_-(z, \lambda), z \in \mathbb{R}$  por la extensión de  $E_-(z, \lambda)$  en el intervalo  $(0, +\infty)$  aplicando las soluciones  $C(z, \lambda), S(z, \lambda)$ . Entonces

$$y_+(z, \lambda) = C(z-H, \lambda)E_+(H, \lambda) + S(z-H, \lambda)E'_+(H, \lambda), \quad z < H,$$

y

$$y_-(z, \lambda) = C(z, \lambda)E_-(0, \lambda) + S(z, \lambda)E'_-(0, \lambda), \quad z > 0.$$

Para este caso el sistema (4.22) acepta la forma

$$\begin{aligned} y_-(H, \lambda) &= a_r(\lambda)\overline{E_+(H, \lambda)} + b_r(\lambda)E_+(H, \lambda), \\ y'_-(H, \lambda) &= a_r(\lambda)\overline{E'_+(H, \lambda)} + b_r(\lambda)E'_+(H, \lambda). \end{aligned} \quad (4.34)$$

con

$$\begin{aligned} E_+(H, \lambda) &= \text{diag} \left( e^{i\nu_1(\lambda)H}, \dots, e^{i\nu_N(\lambda)H} \right), \\ E'_+(H, \lambda) &= \text{diag} \left( i\nu_1(\lambda)e^{i\nu_1(\lambda)H}, \dots, i\nu_N(\lambda)e^{i\nu_N(\lambda)H} \right). \end{aligned}$$

Entonces se obtienen las siguientes fórmulas para las matrices de transmisión y reflexión derechas

$$a_r(\nu) = \frac{y_-(H, \lambda)E'_+(H, \lambda) - y'_-(H, \lambda)E_+(H, \lambda)}{(2i)^N \nu_1(\lambda) \cdot \dots \cdot \nu_N(\lambda)}; \quad (4.35)$$

$$b_r(\nu) = \frac{y'_-(H, \lambda)\overline{E_+(H, \lambda)} - y_-(0, \nu)\overline{E'_+(H, \lambda)}}{(2i)^N \nu_1(\lambda) \cdot \dots \cdot \nu_N(\lambda)}, \quad (4.36)$$

De la misma manera se obtiene las matrices de transmisión y reflexión izquierda  $a_l(\lambda), b_l(\lambda)$

$$a_l(\lambda) = \frac{y_+(0, \lambda)E'_-(0, \lambda) - y'_+(0, \lambda)E_-(0, \lambda)}{(-2i)^N \nu_1(\lambda) \cdot \dots \cdot \nu_N(\lambda)}, \quad (4.37)$$

$$b_l(\lambda) = \frac{y'_+(0, \lambda)\overline{E_-(0, \lambda)} - y_+(0, \lambda)\overline{E'_-(0, \lambda)}}{(-2i)^N \nu_1(\lambda) \cdot \dots \cdot \nu_N(\lambda)}, \quad (4.38)$$

con

$$E_-(0, \lambda) = \text{diag}(1, \dots, 1), E'_-(0, \lambda) = \text{diag}(-i\nu_1(\lambda), \dots, -i\nu_N(\lambda)).$$

En consecuencia para la construcción de las matrices de transmisión y reflexión se necesitan los valores de las soluciones de Jost  $y_+(0, \lambda), y'_+(0, \lambda), y_-(H, \lambda), y'_-(H, \lambda)$ , donde  $y_+(z, \lambda)$  es la solución matricial del problema de Cauchy para el sistema

$$-y''(z, \lambda) + \Lambda_N(\lambda)y(z, \lambda) + L^N(z)y(z, \lambda) = 0, z \in (0, H), j = 1, \dots, N, \quad (4.39)$$

$$y(H, \lambda) = \text{diag}(e^{i\nu_1(\lambda)H}, \dots, e^{i\nu_N(\lambda)H}), y'(H, \lambda) = \text{diag}(i\nu_1(\lambda)e^{i\nu_1(\lambda)H}, \dots, i\nu_N(\lambda)e^{i\nu_N(\lambda)H}), \quad (4.40)$$

y  $y_-(z, \lambda)$  es la solución matricial del problema de Cauchy (4.39) con los valores iniciales.

$$y(0, \lambda) = \text{diag}(1, \dots, 1), y'(0, \lambda) = \text{diag}(i\nu_1(\lambda), \dots, i\nu_N(\lambda)). \quad (4.41)$$

### 4.3 Potenciales simétricos

Se considera el potencial impureza independiente de la variable transversal  $x$  esto es

$$W(z) = \begin{cases} W_0(z), & 0 \leq z \leq H \\ 0, & z \notin [0, H] \end{cases},$$

donde  $W_0(z) \in L^\infty(D)$ . En este caso la matriz

$$L_N(z) = \begin{cases} W_0(z)I_N, z \in [0, H] \\ 0, z \notin [0, H] \end{cases} \quad (4.42)$$

es diagonal.

El proceso de dispersión ocurre por canales independientes, y las matrices de transmisión y reflexión son diagonales, esto es

$$\begin{aligned} a_r(\lambda) &= \text{diag}(a_r^1(\lambda), \dots, a_r^N(\lambda)), \\ b_r(\lambda) &= \text{diag}(b_r^1(\lambda), \dots, b_r^N(\lambda)). \end{aligned}$$

obtenidos de la siguiente forma. Sean  $y_+^j(z, \lambda), y_-^j(z, \lambda)$  las soluciones de Jost de la ecuación

$$\begin{aligned} -y_j''(z, \lambda) + (\mu_j - \lambda)y_j(z, \lambda) + W(z)y_j(z, \lambda) &= 0, z \in \mathbb{R}, j = 1, \dots, N, \\ \mu_j &< \lambda, j = 1, \dots, N. \end{aligned} \quad (4.43)$$

con asíntotas

$$\begin{aligned} y_+^j(z, \lambda) &\sim e^{i\nu_j(\lambda)z}, z > H, \\ y_-^j(z, \lambda) &\sim e^{-i\nu_j(\lambda)z}, z < 0. \end{aligned}$$

Entonces los elementos  $a_r^j(\lambda), b_r^j(\lambda)$  de las matrices de transmisión y reflexión  $a_r(\lambda), b_r(\lambda)$  son soluciones del sistema diagonal de ecuaciones

$$\begin{aligned} y_-^j(H, \lambda) &= a_r^j(\lambda)e^{-i\nu_j(\lambda)H} + b_r^j(\lambda)e^{i\nu_j(\lambda)H}, \\ \left(y_-^j\right)'(H, \lambda) &= -i\nu_j(\lambda)a_r^j(\lambda)e^{-i\nu_j(\lambda)H} + i\nu_j(\lambda)b_r^j(\lambda)e^{i\nu_j(\lambda)H}. \end{aligned} \quad (4.44)$$

Por lo tanto

$$\begin{aligned} a_r^j(\lambda) &= \frac{e^{i\nu_j(\lambda)H} \left( i\nu_j(\lambda)y_-^j(H, \lambda) - \left(y_-^j\right)'(H, \lambda) \right)}{2i\nu_j(\lambda)}, \\ b_r^j(\lambda) &= \frac{e^{-i\nu_j(\lambda)H} \left( \left(y_-^j\right)'(H, \lambda) + i\nu_j(\lambda)y_-^j(H, \lambda) \right)}{2i\nu_j(\lambda)}, \\ j &= 1, \dots, N. \end{aligned} \quad (4.45)$$

En consecuencia para el cálculo de  $a_r^j(\lambda), b_r^j(\lambda)$  se necesita resolver el problema de Cauchy para las ecuaciones diferenciales ordinarias

$$\begin{aligned} -\frac{d^2 y_-^j(z, \lambda)}{dz^2} + (\mu_j - \lambda)y_-^j(z, \lambda) + W_0(z)y_-^j(z, \lambda) &= 0, z \in (0, H) \\ y_-^j(0, \lambda) &= 1, \frac{dy_-^j(0, \lambda)}{dz} = i\sqrt{\lambda - \mu_j}. \end{aligned} \quad (4.46)$$

#### 4.4 Matrices de transición para potenciales simétricos perturbados.

Se considera un potencial impureza de la forma

$$W(x, z) = \begin{cases} W_0(z) + \varepsilon W_1(x, z), & 0 \leq z \leq H, \\ 0, & z \notin [0, H] \end{cases}$$

donde  $W_0(z) \in L^\infty([0, H])$ ,  $W_1(x, z) \in L^\infty(D \times [0, H])$ , y  $\varepsilon > 0$  es un pequeño parámetro adimensional.

Para la construcción de las matrices de transmisión y reflexión a la derecha  $a_r(\lambda)$  y  $b_r(\lambda)$  por las fórmulas (4.35),(4.36) se necesita una solución al problema de Cauchy

$$(Ay_-)(z, \lambda) = -y_-''(z, \lambda) + \Lambda_N(\lambda)y_-(z, \lambda) + W_0(z)I_N + \varepsilon L(z)y_-(z, \lambda) = 0, \quad z \in (0, H), \quad j = 1, \dots, N, \quad (4.47)$$

$$y_-(0, \lambda) = \text{diag}(1, \dots, 1), \quad y_-'(0, \lambda) = \text{diag}(-i\nu_1(\lambda), \dots, -i\nu_N(\lambda)),$$

donde  $L(z) = (L_{k,l}(z))_{k,l=1}^N$  y

$$L_{k,l}(z) = \int_D W_1(x, z)\varphi_k(x)\bar{\varphi}_l(x)dx, \quad k, l = 1, \dots, N. \quad (4.48)$$

El sistema (4.47) se puede escribir como

$$\begin{aligned} (Ay_-)(z, \lambda) &= A_0y_-(z, \lambda) + \varepsilon L(z)y_-(z, \lambda) = 0, \quad z \in (0, H), \\ y_-(0, \lambda) &= \text{diag}(1, \dots, 1), \quad y_-'(0, \lambda) = \text{diag}(-i\nu_1(\lambda), \dots, -i\nu_N(\lambda)) \end{aligned} \quad (4.49)$$

donde

$$\begin{aligned} (A_0y_-)(z, \lambda) &= -y_-''(z, \lambda) + \Lambda_N(\lambda)y_-(z, \lambda) + W_0(z)I_Ny_-(z, \lambda) = 0, \\ z &\in (0, H), \quad j = 1, \dots, N. \end{aligned} \quad (4.50)$$

Por medio del método de perturbaciones se busca una solución al problema de Cauchy (4.47), (4.48) con la siguiente forma

$$y_-^\varepsilon(z, \lambda) \sim \sum_{j=0}^{\infty} y_-^{(j)}(z, \lambda)\varepsilon^j, \quad (4.51)$$

donde  $y_-^{(0)}(z, \lambda) = \text{diag}(y_1^{(0)}(z, \lambda), y_2^{(0)}(z, \lambda), \dots, y_N^{(0)}(z, \lambda))$  es una solución del problema de Cauchy

$$\begin{aligned} (A_0y_-^{(0)})(z, \lambda) &= 0, \\ y_-^{(0)}(0, \lambda) &= \text{diag}(1, \dots, 1), \quad y_-^{(0)'}(0, \lambda) = \text{diag}(-i\nu_1(\lambda), \dots, -i\nu_N(\lambda)), \end{aligned} \quad (4.52)$$

y  $y^{(j)}(z, \lambda), j = 1, 2, \dots$  están definidas por un proceso iterativo para obtener las soluciones de los problemas de Cauchy

$$\begin{aligned} (A_0 y^{(j)}) (z, \lambda) &= -L(z)y^{(j-1)}(z, \lambda), j = 1, 2, \dots, \\ y^{(j)}(0, \lambda) &= 0, \left(y^{(j)}\right)'(0, \lambda) = 0. \end{aligned} \quad (4.53)$$

Sea  $A_0 = \text{diag}(A_0^1, A_0^2, \dots, A_0^N)$ , donde  $A_0^k u = -u'' + (\mu_k - \lambda)u + W_0 u$ , y  $y^{(j)}(z, \lambda) = \left(y_{k,l}^{(j)}(z, \lambda)\right)_{k,l=1}^N$ . Entonces la fórmula (4.53) puede ser escrita como

$$\begin{aligned} A_0^k y_{k,l}^{(j)}(z, \lambda) &= -\sum_{r=1}^N L_{k,r}(z)y_{r,l}^{(j-1)}(z, \lambda) := F_{k,l}^{(j-1)}(z, \lambda), k, l = 1, \dots, N, \\ y_{k,l}^{(j)}(0, \lambda) &= 0, \left(y_{k,l}^{(j)}\right)'(0, \lambda) = 0. \end{aligned} \quad (4.54)$$

Notar que el sistema (4.52) es diagonal con condiciones iniciales diagonales. Sean  $u_{1,k}(z, \lambda), u_{2,k}(z, \lambda)$  dos soluciones linealmente independientes de la ecuación

$$-u''(z, \lambda) + (\mu_k - \lambda)u(z, \lambda) + W_0(z)u(z, \lambda) = 0, z \in (0, H), k = 1, \dots, N. \quad (4.55)$$

Entonces se obtiene la solución del problema de Cauchy para cada ecuación del sistema (4.52) de la forma

$$y_k^{(0)}(z, \lambda) = \frac{\left(u'_{2,k}(0, \lambda) + i\nu_k(\lambda)u_{2,k}(0, \lambda)\right)u_{1,k}(z, \lambda) - \left(i\nu_k(\lambda)u_{1,k}(0, \lambda) + u'_{1,k}(0, \lambda)\right)u_{2,k}(z, \lambda)}{\mathbb{W}_k(\lambda)},$$

donde  $\mathbb{W}_k(\lambda)$  es el Wronskiano de las soluciones  $u_{1,k}(z, \lambda), u_{2,k}(z, \lambda)$ .

Para la solución del problema (4.53) se usa el método de Lagrange de variación de parámetros para ecuaciones diferenciales de segundo orden. Se buscan soluciones de las ecuación (4.54) de la forma

$$y_{k,l}^{(j)}(z, \lambda) = C_{k,l}^{1,j}(z, \lambda)u_{1,k}(z, \lambda) + C_{k,l}^{2,j}(z, \lambda)u_{2,k}(z, \lambda), k = 1, \dots, N, \quad (4.56)$$

donde

$$\begin{aligned} \left(C_{k,l}^{1,j}\right)'(z, \lambda)u_{1,k}(z, \lambda) + \left(C_{k,l}^{2,j}\right)'(z, \lambda)u_{2,k}(z, \lambda) &= 0, \\ \left(C_{k,l}^{1,j}\right)'(z, \lambda)u'_{1,k}(z, \lambda) + \left(C_{k,l}^{2,j}\right)'(z, \lambda)u'_{2,k}(z, \lambda) &= F_{k,l}^{(j-1)}(z, \lambda), k, l = 1, \dots, N. \end{aligned} \quad (4.57)$$

El sistema de ecuaciones (4.57) tiene una solución única

$$\left(C_{k,l}^{1,j}\right)'(z, \lambda) = -\frac{F_{k,l}^{(j-1)}(z, \lambda)u_{2,k}(z, \lambda)}{\mathbb{W}_k(\lambda)}, \left(C_{k,l}^{2,j}\right)'(z, \lambda) = \frac{F_{k,l}^{(j-1)}(z, \lambda)u'_{1,k}(z, \lambda)}{\mathbb{W}_k(\lambda)}.$$

Por lo tanto

$$y_{k,l}^{(j)}(z, \lambda) = \frac{1}{\mathbb{W}_k(\lambda)} \left( -u_{1,k}(z, \lambda) \int_0^z F_{k,l}^{(j-1)}(t, \lambda)u_{2,k}(t, \lambda)dt + u_{2,k}(z, \lambda) \int_0^z F_{k,l}^{(j-1)}(t, \lambda)u'_{1,k}(t, \lambda)dt \right). \quad (4.58)$$

## 4.5 Implementación Numérica

### 4.5.1 Método de Series de Potencia de Parámetro Espectral (SPPS)

Para los cálculos de las dos soluciones linealmente independientes de la ecuación (4.55) se usa el método SPPS. Se reescribe la ecuación (4.55) de la siguiente manera

$$\begin{aligned} -u''(z, \lambda) + W_0(z)u(z, \lambda) &= \nu_k^2 u(z, \lambda), \quad z \in (0, H), k = 1, \dots, N, \\ \nu_k^2 &= \lambda - \mu_k^2 > 0, \quad k = 1, \dots, N. \end{aligned} \quad (4.59)$$

Sea  $u_0(z) \in C^2([0, H])$  una solución diferente de cero ( $\inf_{z \in [0, h]} |u_0(z)| > 0$ ) de la ecuación homogénea

$$-u_0''(z) + W_0(z)u_0(z) = 0, \quad 0 < z < H. \quad (4.60)$$

De acuerdo al método SPPS dos soluciones  $u_{1,k}, u_{2,k}$  linealmente independientes de la ecuación (4.59) se buscan en la forma de las series

$$u_1(z, \lambda) = u_0(z) \sum_{n=0}^{\infty} \nu_k^{2n} \tilde{X}^{(2n)}(z), \quad u_2(z, \lambda) = u_0(z) \sum_{n=0}^{\infty} \nu_k^{2n} X^{(2n+1)}(z), \quad (4.61)$$

con  $\tilde{X}^{(n)}$  y  $X^{(n)}$  definidas por las fórmulas recursivas

$$\tilde{X}^{(0)} \equiv 1, \quad X^{(0)} \equiv 1,$$

$$\tilde{X}^{(n)}(z) = (-1)^{n-1} \int_0^z \tilde{X}^{(n-1)}(s) (u_0^2(s))^{(-1)^{n-1}} ds, \quad z \in [0, H]$$

$$X^{(n)}(z) = (-1)^n \int_0^z X^{(n-1)}(s) (u_0^2(s))^{(-1)^n} ds, \quad z \in [0, H],$$

y ambas series de (4.61) convergen para cada valor de  $\mu_k \in \mathbb{C}$  uniformemente con respecto a  $z \in [0, H]$  [38].

### 4.5.2 Cálculos numéricos para potenciales simétricos

Se considera una guía de onda  $\Pi = D \times \mathbb{R}$  con una sección transversal rectangular  $D = [0, d_1] nm \times [0, d_2] nm$ . ( $nm = nanometros$ ) El operador  $\mathcal{A}$  del problema de Dirichlet en la sección transversal  $D$  tiene un espectro discreto

$$\chi_{n_1, n_2}^2 = \left( \frac{n_1 \pi}{d_1} \right)^2 + \left( \frac{n_2 \pi}{d_2} \right)^2, \quad (n_1, n_2) \in \mathbb{N}^2. \quad (4.62)$$

El sistema ortonormal de eigenfunciones de  $\mathcal{A}$  asociado con  $\varkappa_{n_1, n_2}^2$  es

$$\varphi_{n_1, n_2}(x_1, x_2) = \frac{2}{\sqrt{d_1 d_2}} \sin\left(\frac{\pi n_1}{d_1} x_1\right) \sin\left(\frac{\pi n_2}{d_2} x_2\right), (x_1, x_2) \in [0, d_1] nm \times [0, d_2] nm, \\ (n_1, n_2) \in \mathbb{N}^2.$$

En lo posterior se enumerará el conjunto  $\mathbb{N} \times \mathbb{N}$  en orden lexicográfico.

Se considera el potencial simétrico  $W_0(z) \in L^\infty([0, H])$  que es igual a 0 fuera de  $[0, H]$ . Entonces para los cálculos de los elementos diagonales de las matrices  $a_r(\lambda), b_r(\lambda)$  se pueden usar las fórmulas (4.45), y para la solución del problema de Cauchy (4.46) se usa el método SPPS..

Como ejemplo se considerará un potencial parabólico modificado

$$W_0(z) = \frac{2m}{\hbar^2} \begin{cases} az + bz^2, & z \in [0, 2] nm \\ 0, & z \notin [0, 2] nm \end{cases}, \quad (4.63)$$

donde  $a = 2\frac{eV}{nm}$ ,  $b = -1\frac{eV}{nm^2}$ . Este potencial es usado para la simulación de barreras de potencial en nanoestructuras semiconductoras como (*GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As*) [3].

Sea  $\mu_1 = \varkappa_{1,1}^2$ ,  $\mu_2 = \varkappa_{1,2}^2$ ,  $\nu_j = \sqrt{\lambda - \mu_j^2}$ ,  $j = 1, 2$ . Entonces aplicando las fórmulas (4.45) y el método SPPS para el cálculo de  $y_-^{(j)}(z, \lambda)$ ,  $j = 1, 2$  se obtienen valores numéricos para  $a_r^j(\lambda)$  y  $b_r^j(\lambda)$ ,  $j = 1, 2$  donde  $\lambda = \frac{2m}{\hbar^2} E$ ,  $E$  es la energía del sistema.

En las Figuras 4.1 y 4.2 se muestran las gráficas para las partes reales e imaginarias de  $a_r^j(\lambda)$  y  $b_r^j(\lambda)$ ,  $j = 1, 2$  para el potencial  $W_0(z)$  dado por la expresión (4.63) en una guía de onda rectangular con dimensiones  $d_1 = 1 nm$  y  $d_2 = 1 nm$ .

### 4.5.3 Implementación numérica para potenciales simétricos perturbados

Se considera un potencial de la forma

$$W(x, z) = W_0(z) + \varepsilon W_1(x, z) = \frac{2m}{\hbar^2} (\mathcal{W}_0(z) + \varepsilon \mathcal{W}_1(x, z)). \quad (4.64)$$

Las dimensiones de  $W(x, z)$ ,  $W_0(z)$ ,  $W_1(x, z)$  son  $[nm^{-2}]$ , las dimensiones de  $\mathcal{W}_0(z)$ ,  $\mathcal{V}(z)$  son  $[eV]$ , y el parámetro pequeño en (4.64)  $\varepsilon = 0, 1$  es adimensional.

El potencial  $W_0(z) = \frac{2m}{\hbar^2} \mathcal{W}_0(z)$  está dado por (4.63), y  $W_1(x, z) = \mathcal{U}(x)\mathcal{V}(z)$  donde

$$\mathcal{U}(x) = x_1 x_2, \quad x = (x_1, x_2) \in [0, d_1] \times [0, d_2], \quad (4.65)$$

y

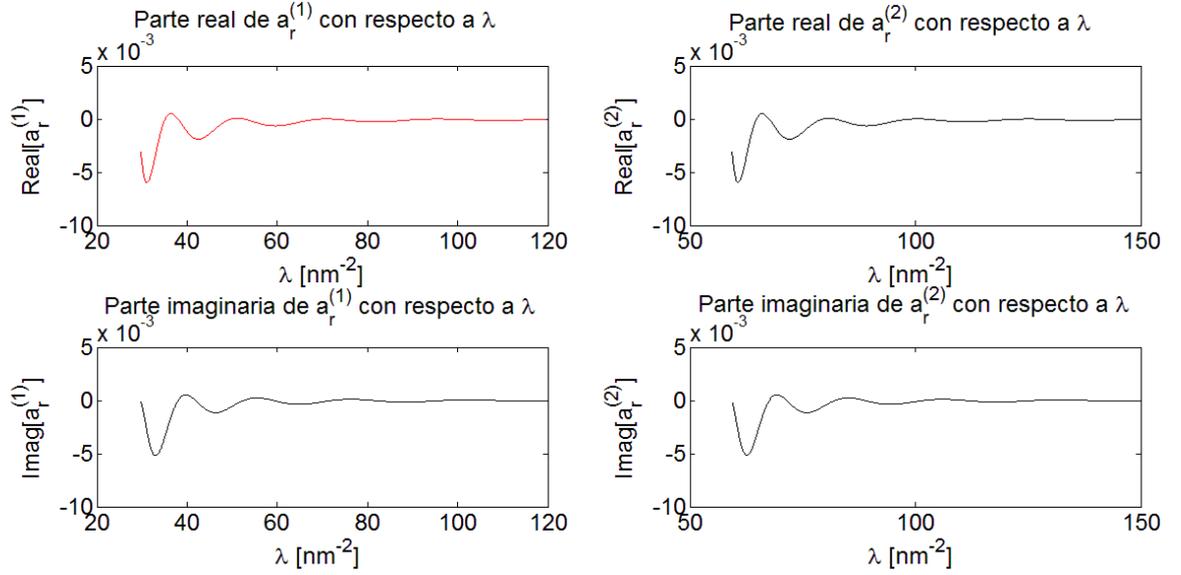


Figura 4.1: Gráfica de las partes reales e imaginarias de  $a_r^{(j)}(\lambda)$ ,  $j = 1, 2$ .

$$\mathcal{V}(z) = \begin{cases} U_0, & z \in [0, 2 \text{ nm}] \\ 0, & z \notin [0, 2 \text{ nm}], \end{cases} \quad (4.66)$$

donde  $U_0 = 0.1[\frac{eV}{nm^2}]$ .

Se restringió el cálculo numérico a solo dos modos de propagación y dos términos asintóticos para  $y_-^\varepsilon(z, \lambda)$ , esto es

$$y_-^\varepsilon(z, \lambda) = y^{(0)}(z, \lambda) + \varepsilon y^{(1)}(z, \lambda), \quad (4.67)$$

donde  $y_-^{(0)}(z, \lambda) = \text{diag}(y_1^0(z, \lambda), y_2^0(z, \lambda))$  y  $y_j^0(z, \lambda)$ ,  $j = 1, 2$  son soluciones de los problemas de Cauchy

$$-y_j''(z, \lambda) + (\lambda - \mu_j^2)y_1(z, \lambda) + W_0(z)y_j(z, \lambda) = 0, \quad z \in (0, H), \quad (4.68)$$

$$y_j(0, \lambda) = 1, \quad y_j'(0, \lambda) = -i\sqrt{\lambda - \mu_j^2}, \quad j = 1, 2.$$

Para el cálculo de la matriz  $y^{(1)}(z, \lambda) = \left( y_{k,l}^{(1)}(z, \lambda) \right)_{k,l=1}^2$  se aplican las fórmulas (4.58) y entonces se obtienen las siguientes entradas para la matriz  $y_-^\varepsilon(z, \lambda)$ :

$$y_-^\varepsilon(z, \lambda) = \begin{pmatrix} y_1(z, \lambda) + \varepsilon y_{1,1}^{(1)}(z, \lambda) & \varepsilon y_{1,2}^{(1)}(z, \lambda) \\ \varepsilon y_{2,1}^{(1)}(z, \lambda) & y_2(z, \lambda) + \varepsilon y_{2,2}^{(1)}(z, \lambda) \end{pmatrix} \quad (4.69)$$

En la Figuras 4.3 y 4.4 se muestran las gráficas de las partes reales e imaginaria de  $y_-(z, \lambda)$ , evaluadas en  $z = 2nm$  para el potencial simétrico impureza  $W_0(z)$  dado por la expresión (4.63).

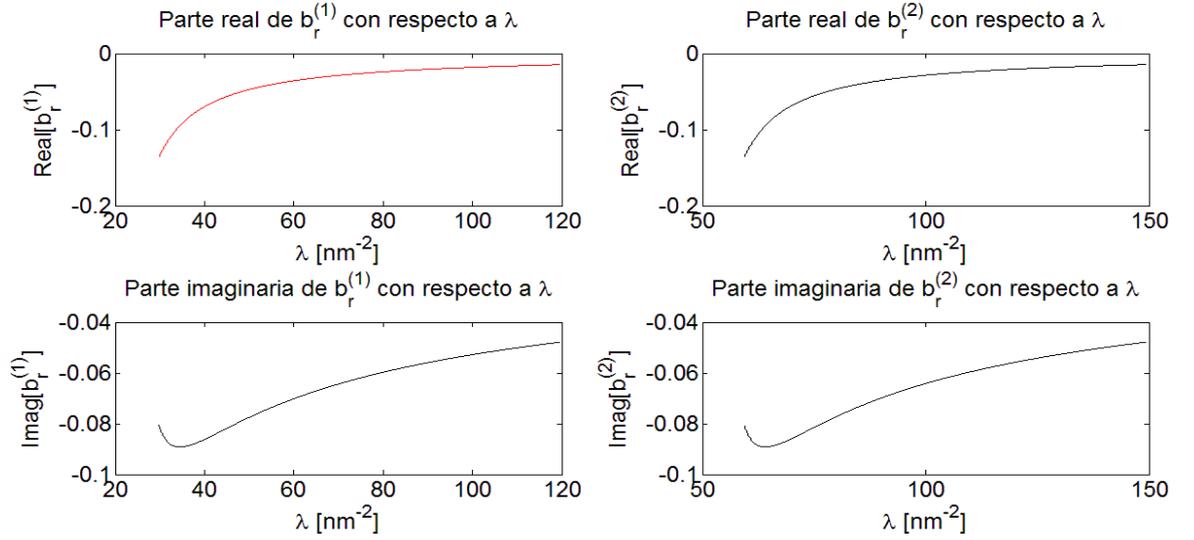


Figura 4.2: Gráfica de las partes reales e imaginarias de  $b_r^{(j)}(\lambda)$ ,  $j = 1, 2$ .

Aplicando las fórmulas (4.35),(4.36) se obtienen los valores aproximados para las matrices de transición

$$a_r^\varepsilon(\lambda) = \frac{y_-^\varepsilon(H, \lambda)E_+'(H, \lambda) - y_-^{\varepsilon'}(H, \lambda)E_+(H, \lambda)}{-4\nu_1(\lambda)\nu_2(\lambda)}, \quad (4.70)$$

$$E_+(H, \lambda) = \text{diag}(1, 1), E_+'(H, \lambda) = (\nu_1(\lambda), \nu_2(\lambda)), \quad (4.71)$$

y

$$b_r^\varepsilon(\lambda) = \frac{y_-^{\varepsilon'}(H, \lambda)\overline{E_+(H, \lambda)} - y_-^\varepsilon(0, \lambda)\overline{E_+'(H, \lambda)}}{-4\nu_1(\lambda)\nu_2(\lambda)}. \quad (4.72)$$

$$a_r^\varepsilon(\lambda) = \begin{pmatrix} (a_r^\varepsilon)_{1,1}(\lambda) & (a_r^\varepsilon)_{1,2}(\lambda) \\ (a_r^\varepsilon)_{2,1}(\lambda) & (a_r^\varepsilon)_{2,2}(\lambda) \end{pmatrix}, b_r^\varepsilon(\lambda) = \begin{pmatrix} (b_r^\varepsilon)_{1,1}(\lambda) & (b_r^\varepsilon)_{1,2}(\lambda) \\ (b_r^\varepsilon)_{2,1}(\lambda) & (b_r^\varepsilon)_{2,2}(\lambda) \end{pmatrix}.$$

En las Figuras 4.5 y 4.6 se muestran las gráficas de las partes real e imaginaria de las entradas de  $(a_r^\varepsilon)_{i,j}(\lambda)$ ,  $i, j = 1, 2$  para el potencial impureza simétrico  $W_0(z)$  dado por (4.63) y el potencial perturbado  $\varepsilon W_1(x, z) = \frac{2m}{\hbar^2} \mathcal{W}_1(x, z)$ ,  $\varepsilon = 0.1$ ,  $\mathcal{W}_1(x, z) = \mathcal{U}(x)\mathcal{V}(z)$  donde  $\mathcal{U}(x)$ ,  $\mathcal{V}(z)$  esta dado por (4.65) y (4.66) respectivamente. En las Figuras 4.7 y 4.8 se muestran las gráficas correspondientes a las partes real e imaginaria de  $(b_r^\varepsilon)_{i,j}(\lambda)$ ,  $i, j = 1, 2$ , para los mismos potenciales.

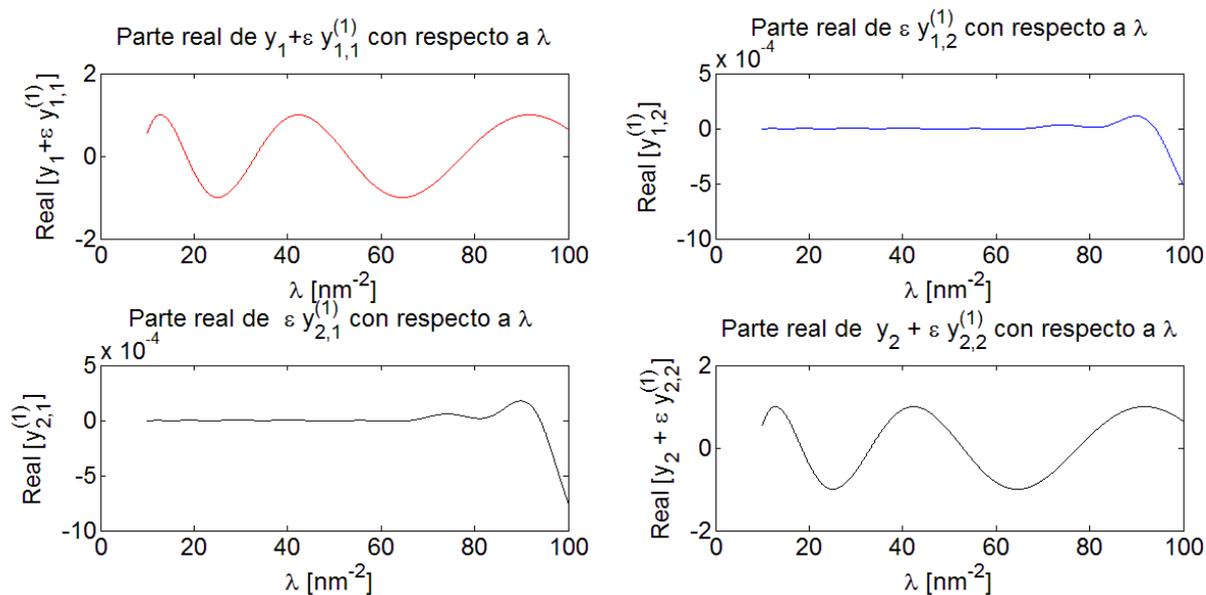


Figura 4.3: Gráfica de las partes reales de las entradas de  $y_-(z, \lambda)$ .

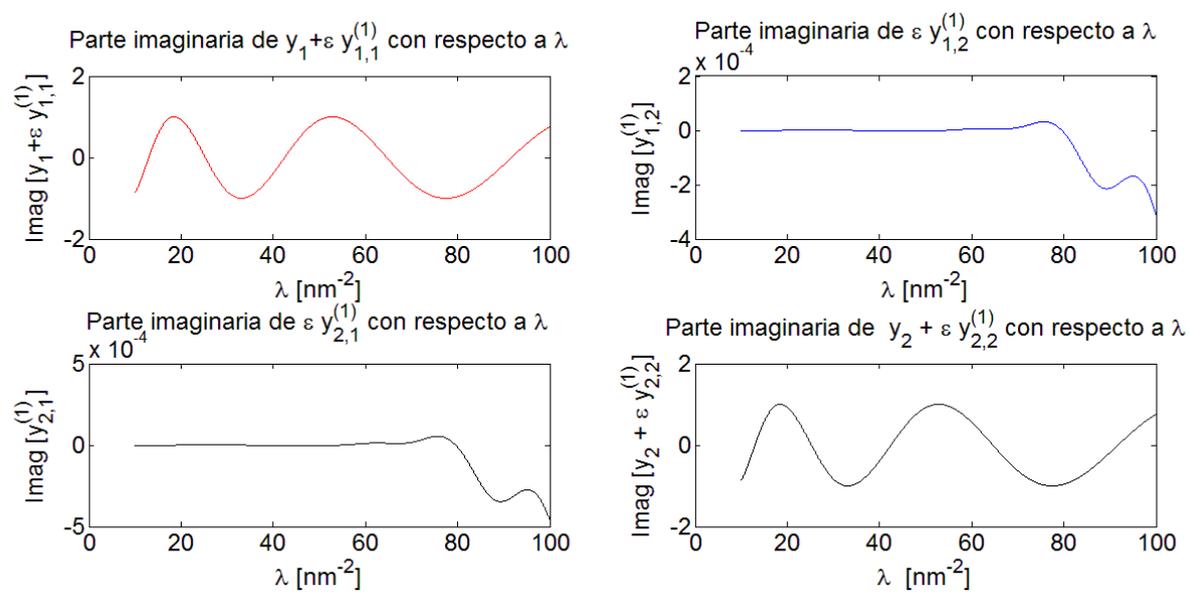


Figura 4.4: Gráfica de las partes imaginarias de las entradas de  $y_-(z, \lambda)$ .

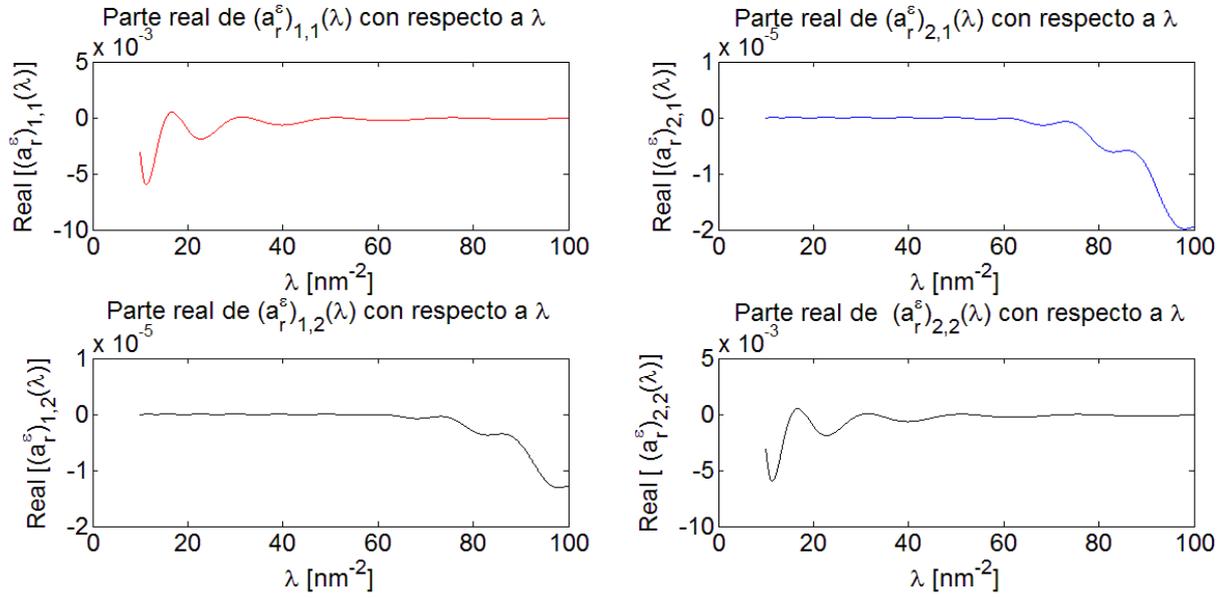


Figura 4.5: Gráficas de las partes reales de las entradas de la matriz de transición  $(a_r)^e(\lambda)$ .

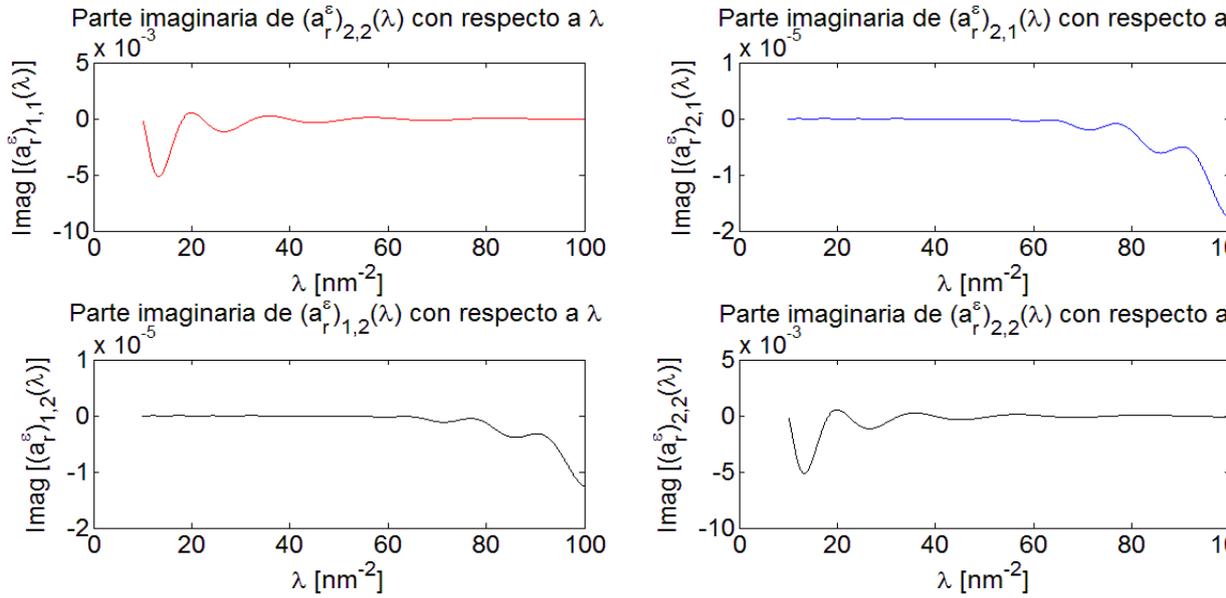


Figura 4.6: Gráficas de las partes imaginarias de las entradas de la matriz de transición  $(a_r)^e(\lambda)$ .

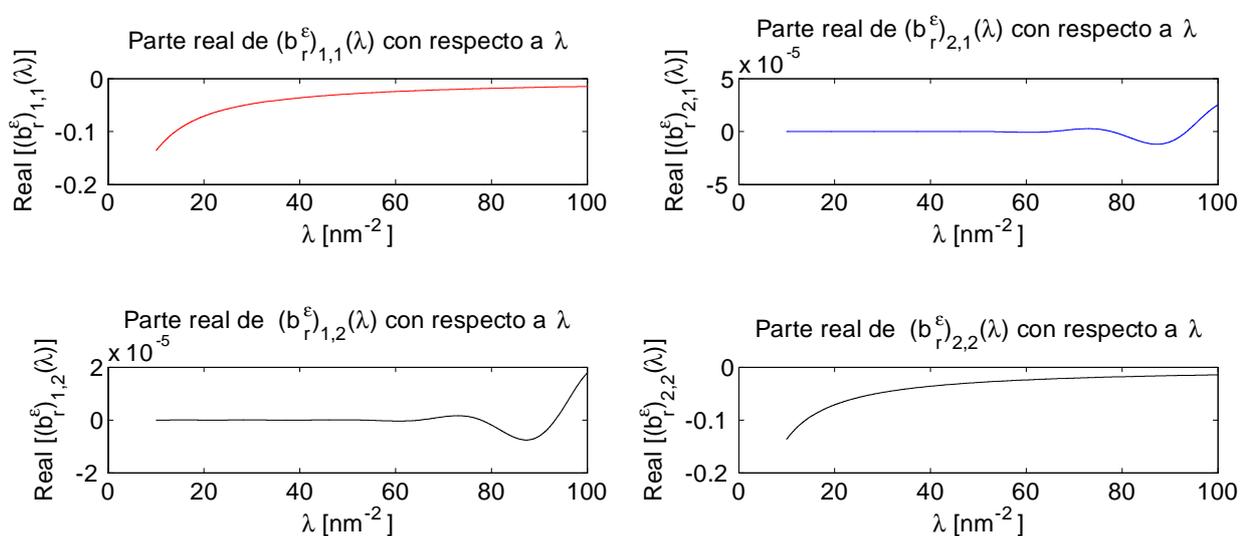


Figura 4.7: Gráficas de las partes reales de las entradas de  $(b_r)^\epsilon(\lambda)$ .

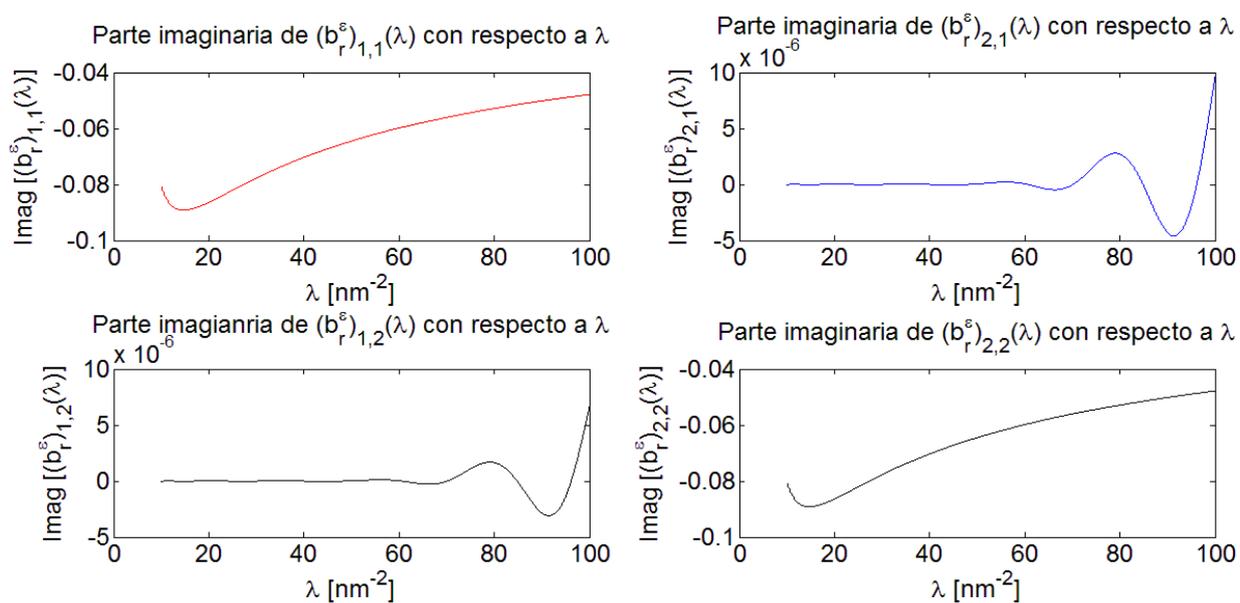


Figura 4.8: Gráficas de las partes imaginarias de las entradas de  $(b_r)^\epsilon(\lambda)$ .

**Parte V**

**Conclusiones**

Por medio del método del operador límite se obtuvieron estimaciones generales del espectro esencial y discreto de las guías de onda cuánticas. A saber, en las expresiones (2.43) y (2.44) se proporcionan fórmulas del espectro esencial para el caso de una guía de onda estratificada horizontalmente que tiene asociado un operador del problema de Dirichlet  $D_{\Pi_\Omega}$  dado en (2.42). En ambas expresiones el espectro esencial depende del espectro del operador  $-\Delta$  que aparece en (2.42)

Para el caso del problema de dispersión en guía de onda cuántica unidimensional se obtuvieron fórmulas generales de los coeficientes de transmisión y reflexión para la dispersión de una partícula en potencial unidimensional, las cuales son expresadas en (3.10) y (3.11). En dichas expresiones aparecen  $\psi_{1,2}$  las cuales son calculadas aplicando el método SPPS. Se hace una comparación numérica de los resultados obtenidos por el método SPPS con los resultados numéricos obtenidos de fórmulas analíticas bien conocidas. Las comparaciones revelan un rendimiento satisfactorio del método SPPS para dicho problema pues se obtuvieron errores absolutos tan bajos como en el orden de  $10^{-7}$  (Tabla 1).

Finalmente para el caso de dispersión para una guía de onda cuántica en tres dimensiones se implementó computacionalmente la solución matricial  $y_-(z, \lambda)$  de la ecuación (4.7) donde  $L_N(z)$  está dado por la expresión (4.42) y  $W_0(z)$  en dicha expresión es un potencial de soporte compacto y simétrico dado por la expresión (4.63) obteniéndose resultados numéricos de las entradas de las matrices de transmisión y reflexión  $a_r^j(\lambda)$ ,  $b_r^j(\lambda)$  para los dos primeros modos de propagación de la guía de onda, dichas gráficas son presentadas en las Figuras (4.1) y (4.2). También se implementó computacionalmente un algoritmo de cálculo para la solución matricial  $y_-(z, \lambda)$  de la ecuación (4.7) para un potencial simétrico perturbado ( $W(x, z) = W_0(z) + \varepsilon W_1(x, z)$ ), para lo cual se usó la expansión asintótica de  $y_-(z, \lambda)$  dada en la ecuación (4.51), calculándose la solución para los dos primeros términos asintóticos y los dos primeros modos de propagación. Dicha solución es representada por la matriz (4.69), las gráficas de las entradas de dicha matriz son mostradas en (4.3) y (4.4), también se graficaron las entradas de las matrices de transmisión y reflexión  $a_r^\varepsilon(\lambda)$ ,  $b_r^\varepsilon(\lambda)$  mostrándose las gráficas de las entradas en las Figuras 4.5 hasta 4.8. Por medio de dichas gráficas se validan los algoritmos de cálculo propuestos pues las gráficas de  $a_r^j(\lambda)$ ,  $b_r^j(\lambda)$  del caso no perturbado son muy similares a las gráficas de las entradas de la diagonal de  $a_r^\varepsilon(\lambda)$ ,  $b_r^\varepsilon(\lambda)$  para el caso perturbado, lo cual era lo que se esperaba, pues el término  $\varepsilon y_{j,j}^{(1)}(z, \lambda)$  que diferencia a dichas entradas es muy pequeño

Parte VI

**Bibliografía**

# Bibliography

- [1] Agranovich, M.S., *Elliptic Boundary Problems, Partial Differential Equations, IX, Encyclopedia Math. Sci.*, Vol. 79, Springer: Berlin, 1997.
- [2] Akhiezer, N.I, Glazman, I.M, *Theory of linear operators in Hilbert space*, Dover Publications, 1993.
- [3] Ando Y., Itoh T., Calculation of transmission tunneling current across arbitrary potential barriers, *J. Appl. Phys.*, Vol. 61, Num. 4, pp. 1497-1502, 1987.
- [4] Bagwell, P.F., Evanescent modes and scattering in quasi-one-dimensional wires, *Phys. Rev B* , Vol.41, pp. 10354-10371, 1990.
- [5] Ballentine, L. E., *Quantum Mechanics: a modern development.*, World Scientific Publishing Company Incorporated, 1998.
- [6] Ban S.L., Hasbun J.E., Liang X.X., A novel method for quantum transmission across arbitrary potential barriers, *J. Lumin.*, Vol. 87, pp. 369-371,2000.
- [7] Barrera-Figueroa,V., Kravchenko,V.V., Rabinovich,V.S., Spectral parameter power series analysis of isotropic planarly layered waveguides, *Appl Anal*, <http://dx.doi.org/10.1080/00036811.2013.794940>, 27 pages, 2013.
- [8] Berezin, F. A., Shubin, M. A., *The Schrödinger Equation*, Vol. 66, Springer, 1991
- [9] Bindal A., Hamed-Hagh S., *Silicon Nanowire Transistors, First Edition*, Springer International Publishing, 2016.
- [10] Birkhoff, G., Rota, G. C., *Ordinary differential equations*, Ginn & Co., 1969.
- [11] Burlak, G., Karlovich, Y., Rabinovich, V.S., Fredholm property and essential spectrum of pseudodifferential operators with operator-valued symbols, *Commun. Math. Anal.*, (Conference), pp. 50-65, 2011.
- [12] Carlson, R., Eigenvalue Estimates and Trace Formulas for the Matrix Hill's Equation, *J. Diff. Eqs.*, Vol. 167, pp. 211-244, 2000.

- [13] Castillo-Pérez R., Khmelnytskaya K.V., Kravchenko V.V., Oviedo-Galdeano H., Efficient calculation of the reflectance and transmittance of finite inhomogeneous layer. *J. Opt. A: Pure Appl. Opt.* , Vol. 11, pp 1-6, 2009.
- [14] Castillo-Pérez, R., Kravchenko, V. V., Oviedo-Galdeano, H., Rabinovich, V.S. Dispersion equation and eigenvalues for quantum wells using spectral parameter power series, *J. Math. Phys.*, Vol. 52, 043522, 2011.
- [15] Chandra A., Eastman L.F. Quantum mechanical reflection at triangular ‘planar-doped’ potential barriers for transistors., *J Appl. Phys.* , Vol. 53, pp. 9165-9169, 1982.
- [16] Cheng, D.K., *Fundamentals of electromagnetic engineering* Addison-Wesley, pp. 400-409, 1993.
- [17] Christodoulides D.N., Andreou A.G., Joseph R.I., Westgate C.R., Analytical calculation of the quantum-mechanical transmission coefficient for a triangular, planar-doped potential barrier, *Solid State Electron*, Vol. 28, Num.8, pp 821-822, 1985.
- [18] De la Peña, L., *Introducción a la mecánica cuántica*, Fondo De Cultura Económica, México, 2006.
- [19] Dittrich, J., Kriz, J., Bound states in straight quantum waveguides with combined boundary conditions, *J. Math. Phys*, Vol. 43, pp. 3892-3915, 2002.
- [20] Dittrich J, Kríž J. Curved planar quantum wires with Dirichlet and Neumann boundary conditions, *J. Phys. A* , Vol. 35, pp.269-275, 2002.
- [21] Duclos P, Exner P, Curvature induced bound states in quantum waveguides, *Rev. Math Phys*, Vol 07 , pp. 73-103, 1995.
- [22] Duclos P, Exner P, Meller B., Open quantum dots: Resonances from perturbed symmetry and bound states in strong magnetic fields, *Rep. Math. Phys*, Vol. 47, pp.253-267, 2001.
- [23] Ekholm T, Kovarik H. Stability of the magnetic Schrödinger operator in a waveguide. *Commun. Part. Diff. Eq.*, Vol. 30, pp. 539-565, 2005.
- [24] Egorov, Y. V., Shubin, M. A, *Partial differential equations I. Foundations of the classical theory. Encyclopedia of Math. Sciences*, Springer-Verlag, 1990.
- [25] Flügge, S., *Practical quantum mechanics*, Springer Verlag, 1994.

- [26] Gaponenko, S. V. . *Optical properties of semiconductor nanocrystals*, Cambridge university press, Vol. 23, 1998.
- [27] Goldstone J., Jaffe R.L., Bound states in twisting tubes. *ŽPhys. Rev. B*, Vol. 45, pp. 5750–5762, 1992
- [28] Gundlach K.H., Zur Berechnung des Tunnelstroms durch eine trapezförmige Potentialstufe, *Solid State Electron*, Vol. 9, Num.10, pp. 949-957, 1966
- [29] Harrison, P., *Quantum wells, wires and dots: theoretical and computational physics of semiconductor nanostructures*, Wiley-Interscience, 2005.
- [30] Ince, E. L., *Ordinary differential equations*, Dover, 1956.
- [31] Jin, G. J., Wang, Z. D., Hu, A., Jiang, S. S., Quantum waveguide theory of serial stub structures, *J. Appl. Phys* , Vol. 85, Num. 3, 1597-1608, 1999.
- [32] Joe Y. S., Cosby R. M. , Resonant tunneling in a quantum nanosystem with an attractive impurity. *J. Appl. Phys*, Vol. 81, pp. 6217-6220, 1997.
- [33] Kim C. S., Satanin A. M., Tunneling through a quantum channel with impurities, An exactly solvable model, *Physica E*, Vol. 4 , p. 211-219, 1999.
- [34] Kim C. S., Satanin A. M. , Joe Y. S., Cosby R. M. , Collapse of resonance in quasi-one-dimensional quantum channels. *JETP Lett*, Vol. 89, pp. 144-150, 1999.
- [35] Kim C. S., Satanin A. M., Rozanova, Stenberg, Interference of quantum states in electron waveguides with impurities, *J. Exp. Theor. Phys*, Vol. 94, No. 5, p. 992, May 2002.
- [36] Khmelnytskaya, K.V., Kravchenko, V.V., Eigenvalue problems, spectral parameter power series, and modern applications, *Appl.Math.Comput*, Vol. 219, pp. 3610-3624, 2012.
- [37] Kolmogorov, A. N., Fomin, S. V., *Elementos de la teoría de funciones y del análisis funcional*, Vol. 1, Editorial Mir, 1975.
- [38] Kravchenko, V. V., *Applied pseudoanalytic function theory*, Springer, 2009.
- [39] Kravchenko, V. V., A representation for solutions of the Sturm–Liouville equation, *Complex. Var. Elliptic*, Vol. 53, Num. 8, pp. 775-789, 2008
- [40] Kravchenko, V.V., Porter, R.M., Spectral parameter power series for Sturm–Liouville problems, *Math. Meth. Appl. Sci.*, Vol. 33, Num. 4, pp. 459-468, 2010

- 
- [41] Krejcirik, D., de Aldecoa, R. T., The nature of the essential spectrum in curved quantum waveguides, *J. Phys. A*, Vol. 37, Num. 20, pp. 5449, 2004
- [42] Kreyszig, E., *Advanced engineering mathematics*, John Wiley & Sons, 2007.
- [43] Landau L.D., Lifshitz E., *Quantum Mechanics: Non-relativistic theory* Pergamon Press, pp. 76-78, 1977.
- [44] Lesovik G.B., Sadovskyy I.A., Scattering matrix approach to the description of quantum electron transport, arXiv:1408.1966, 2015, [cond-mat.mes-hall] , *Uspekhi Fiz. Nauk.*, Vol. 181, pp. 1041-1096, 2011.
- [45] Levitan, B. M., Sargsjan, I. S., *Sturm-Liouville and Dirac Operators*, Kluwer Academic, 1991.
- [46] Londergan J.T., Carini J.P., Murdock D.P., *Binding and Scattering in Two-Dimensional Systems, Lecture Note In Physics*, Vol. 60, Springer, 1999.
- [47] Lui W.W., Fukuma M., Exact solution of the Schrödinger equation across an arbitrary one-dimensional piecewise-linear potential barrier, *J. Appl. Phys* , Vol. 60, pp.1555-1559, 1986.
- [48] Lin K, Jaffe R.L. Bound states and quantum resonances in quantum wires with circular bends, *Phys. Rev. B* , Vol. 54, pp. 5750–5762, 1996
- [49] Paneah, B. P., *The oblique derivative problem: the Poincaré-problem*, Wiley-VCH, 2000.
- [50] Rabinovich, V. S., Essential spectrum of perturbed pseudodifferential operators. Applications to the Schrödinger, Klein–Gordon, and Dirac operators, *Russian J. Math. Phys*, Vol. 12, Num.1, pp 62-80, 2005.
- [51] Rabinovich, V. S., Castillo-Pérez, R., Urbano-Altamirano, F., On the essential spectrum of quantum waveguides, *Math. Meth. Appl. Sci.*, Vol. 36, Num.7, pp. 761-772, 2013.
- [52] Rabinovich, V., Roch, S., Exponential estimates of solutions of pseudodifferential equations with operator-valued symbols: Applications to Schrödinger operators with operator-valued potentials, *Contemp. Math.*, Num. 554, pp. 147-163, 2011.
- [53] Rabinovich, V. S., Roch, S., Silbermann, B., *Limit operators and their applications in operator theory*, Vol. 150, Springer, 2004.

- [54] Rabinovich V. S., Urbano-Altamirano F, Application of the SPPS Method to the One-dimensional Quantum Scattering, *Commun. Math. Anal*, Vol. 17, pp. 295 - 310, 2014.
- [55] Rozenblum, G. V., Solomyak, M. Z., Shubin, M. A., *Spectral theory of differential operators. Itogi Nauki i Tekhniki. Seriya " Sovremennye Problemy Matematiki. Fundamental'nye Napravleniya "*, Vol. 64, pp. 5-242, 1989.
- [56] Su P, Cao Z, Chen K, Yin C, Shen Q. Explicit expression for the reflection and transmission probabilities through an arbitrary potential barrier., *J. Phys. A 1*, Vol. 4, pp. 1-7, 2008.
- [57] Tachibana, H., Totsuji, H., Characteristics of a quantum waveguide: Effects of finite confinement potential and geometrical deformations and comparison with simple theoretical approach, *J. Appl. Phys*, Vol. 79, Num.9, pp. 7021-7028, 1996.
- [58] Tikhonov, A. N., Samarsky, A. A., *Equations of Mathematical Physics*, Dover Publications, 1990.
- [59] Urbano Altamirano, Francisco Eduardo, *Investigación del problema espectral en guías de onda cuántica por medio de los métodos de operador límite y funciones pseudoanalíticas (Tesis de Maestría)*, UPIITA IPN, México, 2013.
- [60] Vladimirov, V. S., *Equations of mathematical physics*, Marcel Dekker, Inc, 1971.
- [61] Von Neumann J., *Mathematical Foundations of Quantum Mechanics* (translated from german), Princeton University Press, 1996.
- [62] Wang J., Guo H, Harris R., Electron waveguide coupler: A four-terminal device, *Appl. Phys. Lett*, Vol. 59, pp. 3075, 1991.
- [63] Wang Y., Chou S. Y, Quantum wave bandstop filters, *Appl. Phys. Lett*, Vol. 65, pp. 2072, 1994.
- [64] Weisshaar, A., Lary, J., Goodnick, S. M., Tripathi, V. K., Analysis and modeling of quantum waveguide structures and devices, *J. Appl. Phys.*, Vol. 70, Num. 1, pp. 355-366, 1991.
- [65] Wyld, H. W., *Mathematical Methods in Physics*, WA Benjamin, 1976.
- [66] Yamada S., Yamamoto M. , Small mesas and holes in splitgate quantum wires acting as "artificial impurities" fabricated with scanning tunneling microscope. *J. Appl. Phys*, , Vol. 79 ,pp. 8391-8396, 1996.

- 
- [67] Zettili N. *Quantum Mechanics: concepts and applications*, Second Edition. John Wiley&Son, LTD: Chichister, West Sussex, England, 2009.
- [68] Zhou G., Li Y., Cheng F., LiaoW., Electron transport of a quantum wire containing a finite-size impurity under terahertz electromagnetic-field illumination *J. Appl. Phys*, Vol. 97 , pp. 123521, 2005.

## Parte VII

# Artículos publicados y congresos