



Instituto Politécnico Nacional

Unidad Profesional Interdisciplinaria en Ingeniería y
Tecnologías Avanzadas

SEPI-UPIITA

Tesis

“Análisis adiabático de guías de ondas cuánticas”

Que para obtener el grado de

“Maestra en Tecnología Avanzada”

Presenta:

Ing. Samantha Ana Cristina Loredó Ramírez

Directores de tesis:

Dr. Vladimir Rabinovich Likhtman
Dr. Víctor Barrera Figueroa



Barrio la Laguna Ticomán, CDMX., a 11 de Enero de 2019.



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 13 de Septiembre del 2018

El Colegio de Profesores de Estudios de Posgrado e Investigación de UPIITA en su sesión ordinaria No. 9 celebrada el día 20 del mes de septiembre conoció la solicitud presentada por el(la) alumno(a):

Loredo	Ramírez	Samantha Ana Cristina
Apellido paterno	Apellido materno	Nombre (s)
Con registro:		
A	1	7
0	1	3
8		

Aspirante de:

1.- Se designa al aspirante el tema de tesis titulado:
Análisis adiabático de guías de ondas cuánticas.

De manera general el tema abarcará los siguientes aspectos:

Propagación de ondas cuánticas en una guía de ondas con irregularidades en su estructura.

Estimaciones asintóticas de las soluciones de la ecuación de Schrödinger al problema de la guía de ondas.

Simulaciones numéricas empleando el método de las series de potencias del parámetro espectral (SPPS por su abreviación en inglés) y el método Wentzel-Kramers-Brillouin (WKB).

2.- Se designan como Directores de Tesis a los Profesores:
Dr. Vladimir Rabinovich Likhtman, Dr. Víctor Barrera Figueroa.

3.- El trabajo de investigación base para el desarrollo de la tesina será elaborado por el alumno en:
UPIITA y ESIME ZACATENCO.

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



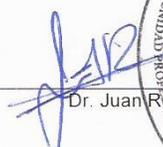
 Dr. Vladimir Rabinovich Likhtman
 Aspirante



 Samantha Ana Cristina Loredo Ramirez



 Dr. Victor Barrera Figueroa
 Presidente del Colegio



 Dr. Juan Rosas Hernandez





INSTITUTO POLITÉCNICO NACIONAL SECRETARÍA DE INVESTIGACIÓN Y POSGRADO

ACTA DE REVISIÓN DE TESIS

En la Ciudad de México siendo las 9:00 horas del día 14 del mes de diciembre del 2018 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:
Análisis adiabático de guías de ondas cuánticas

Presentada por el alumno:

LOREDO

Apellido paterno

RAMÍREZ

Apellido materno

SAMANTHA ANA CRISTINA

Nombre(s)

Con registro:

A	1	7	0	1	3	8
---	---	---	---	---	---	---

aspirante de:

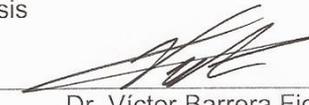
MAESTRÍA EN TECNOLOGÍA AVANZADA

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

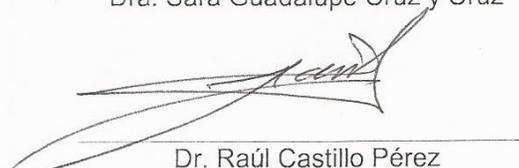
Directores de tesis


Dr. Vladimir Rabinovitch Likhtman


Dr. Victor Barrera Figueroa


Dra. Sara Guadalupe Cruz y Cruz


Dr. José Nicolás Fernández García


Dr. Raúl Castillo Pérez

PRESIDENTE DEL COLEGIO DE PROFESORES


Dr. Juan Hernández Rosas





Instituto Politécnico Nacional

SECRETARÍA DE INVESTIGACIÓN Y POSGRADO

CARTA DE CESIÓN DE DERECHOS

En la Ciudad de México el día 11 del mes de enero del año 2019, la que suscribe Samantha Ana Cristina Loredo Ramírez alumna del Programa de Maestría en Tecnología Avanzada con número de registro A170138, adscrita a la Sección de Estudios y Posgrado e Investigación de UPIITA, manifiesta que es autora intelectual del presente trabajo de Tesis bajo la dirección de los doctores Vladimir Rabinovich Likhtman y Víctor Barrera Figueroa, y cede los derechos del trabajo intitulado «*Análisis adiabático de guías de ondas cuánticas*», 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 de la autora y/o directores del trabajo. Este puede ser obtenido escribiendo a la siguiente dirección sloredor1000@alumno.ipn.mx. Si el permiso se otorga, el usuario deberá dar el agradecimiento correspondiente y citar la fuente del mismo.

Samantha Ana Cristina Loredo Ramírez

Nombre y firma

Agradecimientos

Me gustaría dar las gracias principalmente a mis asesores el Dr. Vladimir Rabinovich Likhtman y el Dr. Víctor Barrera Figueroa por su dedicación e interés en este trabajo de investigación, así como su apoyo, confianza, orientación y solidaridad a lo largo de este desarrollo de formación académica y de investigación.

De igual manera, al Instituto Politécnico Nacional por permitirme estudiar en UPIITA donde agradezco a todos los miembros de esta institución por enseñarme a trabajar con pasión y dedicación en todo momento.

Quiero agradecer al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT) por su constante apoyo económico a alumnos de posgrado.

A mis compañeros y amigos que me han brindado su afecto y apoyo cuando lo he necesitado. Especialmente, al profesor José de Jesús Pablo Martínez Servín por ser una inspiración para mi de dedicación, esfuerzo y constancia para el aprendizaje del conocimiento científico.

Así como a José Luis por su cariño, aprecio, amor y apoyo incondicional para este proceso de desarrollo personal y de investigación.

A mi madre, Clara, a mi abuela Eloisa, por su amor y apoyo incondicional en todo momento, al igual que a todos los miembros de mi familia por su comprensión, cariño y amistad.

Índice general

Agradecimientos	6
Abstract	9
Resumen	10
Objetivos	11
1. Introducción	1
1.1. Antecedentes teóricos de la mecánica cuántica	1
1.1.1. Ecuación de Schrödinger estacionaria	4
1.2. Heteroestructuras semiconductoras	5
1.3. Guía de ondas cuántica	8
1.4. Alambre cuántico semiconductor	9
1.4.1. Ecuación de Schrödinger para alambres cuánticos	10
1.5. Guías de ondas cuánticas con perturbaciones	11
1.6. Estado del Arte	12
1.7. Motivación del problema	14
1.8. Planteamiento del problema	15
1.9. Notaciones importantes	17
1.9.1. Espacio lineal	17
1.9.1.1. Dependencia e independencia lineal de vectores	18
1.9.1.2. Bases y dimensión de un espacio	18
1.9.1.3. Subespacios del espacio lineal X	19
1.9.2. Espacios de Hilbert H	19
1.9.2.1. Espacio de funciones $\mathcal{L}_2(G)$	21
1.9.3. Operadores lineales	22
1.9.3.1. Espectro de operadores lineales	23
1.9.3.2. Operador auto-adjunto y Hermitiano	23
1.10. Contenido de la tesis	24

2. Propagación de ondas cuánticas en guías de ondas estratificadas	26
2.1. Propiedades del operador de Sturm-Liouville	26
2.2. Propiedades espectrales del operador de Schrödinger unidimensional en el eje real . .	29
2.3. Problema espectral unidimensional	30
2.4. Ejemplo del pozo de potencial rectangular	42
3. Series de potencias del parámetro espectral para la ecuación de Schrödinger unidimensional	46
3.1. Series de potencias del parámetro espectral para la ecuación de Sturm-Liouville . . .	46
3.2. Solución SPPS de la ecuación de Schrödinger unidimensional para el caso de los estados ligados	48
3.3. Ejemplos numéricos de la solución de la ecuación de dispersión para diferentes potenciales	51
3.3.0.1. Pozo de potencial constante	53
3.3.0.2. Pozo de potencial cosenoidal	54
3.3.0.3. Pozo de potencial exponencial	54
4. Aproximación WKB	59
4.1. Soluciones WKB de la ecuación de Schrödinger	59
5. Función de Green para una guía de ondas cuántica estratificada	66
5.1. Construcción de la función de Green para una guía de ondas con perturbaciones en sus interfaces	66
5.1.1. Comportamiento asintótico de la función de Green	70
5.2. Solución de la ecuación de Schrödinger bidimensional a partir de la función de Green	71
5.3. Determinación computacional de los modos en guías de ondas cuánticas con perturbaciones	72
6. Conclusiones generales	82
7. Productos desarrollados en esta tesis	84
8. Trabajo a futuro	88

Abstract

A layered quantum waveguide is a type of structure that finds practical applications in the field of semiconductors, including quantum wires and other semiconductor heterostructures. This work is based on the solution of the stationary bi-dimensional Schrödinger equation for the propagation of quantum waves in a layered structure built by a core and a cladding, whose boundaries present slow variations with respect to spacial coordinate. The slow variation is expressed in terms of a small parameter, these variations make the core of the quantum waveguide to shrink or expand along the longitudinal direction of the waveguide. The analysis is based on the formulation a spectral problem of the Sturm-Liouville type associated with the free of units uni-dimensional Schrödinger equation, and certain boundary conditions that depend on the above mentioned small parameter, where the quantum waves interact with a potencial well located in the core of the quantum waveguide. With this analysis is introduce the bound states, and is characterized by the discrete spectrum that represents the allowed energies of the system and the corresponding dispersion equation is obtained. In the same way, is introduces the scattering states and the families of generalised eigenfunctions. The solution of the stationary bi-dimensional Schrödinger equation is obtained from the Green´s function technique, wich requires the calculation of normalized eigenfunctions of the Sturm-Liouville spectral problem. Using SPPS (by its acronym: Spectral Parameter Power Series) method are expressed the normalized eigenfunctions and the dispersion equation like potencial series of spectral parameters as analytic function in terms of spectral parameter given by Taylor´s series. Finally, the WKB (Wentzel-Kramers-Brillouin) aproximation is used for obtaining a modal representation inside the guide when propagating quantum waves. In this way, the numeric implementation of the SPPS method, as well as Green´s function technique is approached with some examples.

Keywords: Schrödinger equation, Bound states, Discrete spectrum, Dispersion equation, Scattering states, Green´s function, SPPS method, and WKB aproximation.

Resumen

Una guía de ondas cuántica estratificada es un tipo de estructura que encuentra aplicaciones prácticas en el ámbito de los semiconductores, que incluyen a los alambres cuánticos y otras heteroestructuras semiconductoras. Este trabajo está basado en la solución de la ecuación de Schrödinger bidimensional independiente del tiempo para la propagación de ondas cuánticas en una estructura estratificada formada por un núcleo y un revestimiento, que presenta una variación lenta con respecto a una coordenada espacial. La variación lenta está expresada en términos de un parámetro pequeño, el cual hace que el núcleo de la guía de ondas cuántica se estreche o se amplíe a lo largo de la dirección longitudinal de la guía. El análisis se basa en la formulación de un problema espectral del tipo Sturm-Liouville asociado a la ecuación de Schrödinger unidimensional libre de unidades, y ciertas condiciones de frontera que dependen del parámetro mencionado, donde las ondas cuánticas interactúan con un pozo de potencial atractivo localizado en el núcleo de la guía de ondas cuántica. Se presentan los estados ligados, y se caracteriza el espectro discreto que representa a las energías permitidas del sistema y se obtiene la ecuación de dispersión correspondiente. De igual manera, se presentan los estados de dispersión y se obtienen las dos familias de funciones propias generalizadas. La solución de la ecuación de Schrödinger bidimensional se obtiene a partir de la técnica de la función de Green, que requiere el cálculo de las funciones propias normalizadas del problema espectral de Sturm-Liouville. Usando el método SPPS (por sus siglas en inglés: Spectral Parameter Power Series) se expresan las funciones propias normalizadas y la ecuación de dispersión como series de potencias del parámetro espectral dadas por su serie de Taylor. Por último, se emplea la aproximación WKB (Wentzel-Kramers-Brillouin) para obtener una representación modal de las ondas cuánticas que se propagan en el interior de la guía. De esta manera se aborda la implementación numérica del método SPPS, así como la técnica de la función de Green con ejemplos de estudio.

Palabras clave: Ecuación de Schrödinger, Estados ligados, Espectro discreto, Ecuación de dispersión, Estados de dispersión, Función de Green, Método SPPS, Aproximación WKB.

Objetivos

Objetivo general

A partir de la aproximación adiabática determinar los modos de la ecuación de Schrödinger bidimensional estacionaria libre de unidades, que describe la propagación de ondas cuánticas en las guías de ondas con variaciones lentas en sus interfaces. Realizar la implementación numérica de los modos de la propagación de ondas cuánticas en diferentes ejemplos de estudio de guías de ondas con perturbaciones.

Objetivos particulares

- Analizar la propagación de ondas cuánticas en guías de ondas estratificadas a partir de un problema vertical de tipo Sturm-Liouville asociado a una ecuación de Schrödinger unidimensional libre de unidades con ciertas condiciones de frontera.
- Caracterizar los estados ligados para obtener sus correspondientes valores propios y funciones propias normalizadas, así como la ecuación de dispersión en forma cerrada. De igual manera, caracterizar los estados de dispersión para obtener las dos familias de funciones propias generalizadas normalizadas.
- Abordar el método SPPS para obtener la solución general del núcleo de la guía de ondas, así como la ecuación de dispersión como funciones analíticas en términos del parámetro espectral.
- Desarrollar la implementación numérica del método SPPS para abordar problemas verticales tipo Sturm-Liouville para diferentes potenciales, ya sean reales o variables.
- Abordar la guía de ondas cuántica con perturbaciones a partir de la ecuación de Schrödinger bidimensional, y así obtener soluciones asintóticas con la aproximación WKB.
- Obtener la expresión en forma explícita de la función de Green para la guía de ondas cuántica con perturbaciones en sus interfaces. También obtener el comportamiento asintótico de la función de Green para despreciar las ondas laterales en el campo lejano.
- Obtener los modos de la propagación de ondas cuánticas en diferentes ejemplos de estudio de guías de ondas con perturbaciones. Realizar su implementación numérica.

Capítulo 1

Introducción

En el presente capítulo se expondrá en forma breve un panorama histórico de la mecánica cuántica, abordando sus antecedentes y principios, así como una introducción de algunas nociones importantes del análisis matemático tales como espacio lineal, producto interno, norma y espacio de Hilbert, junto con los operadores lineales en estos espacios. De esta manera, se verá la influencia de la mecánica cuántica en el desarrollo de heteroestructuras semiconductoras, las cuales pueden ser modeladas como guías de ondas cuánticas. El fenómeno físico que sucede en la guía de ondas cuántica está descrito por principios y leyes dinámicas que se escriben en lenguaje matemático preciso, como la ecuación de Schrödinger estacionaria. Para analizar este fenómeno se requiere herramientas matemáticas adecuadas que permitan abordar tales problemas, las cuales se expondrán a lo largo de esta tesis.

1.1. Antecedentes teóricos de la mecánica cuántica

La física moderna incluye una teoría que surgió a principios del siglo XX, conocida como *mecánica cuántica*. Esta teoría surge por la necesidad de describir procesos de la naturaleza que ocurren en el ámbito de los átomos, las moléculas, los compuestos químicos, las grandes cadenas moleculares como el ADN; en los transistores, láseres, microchips, entre otras muchas cosas [34, 50].

El nombre de *mecánica cuántica* se debe al físico alemán Max Born, quien contribuyó a dar una interpretación probabilística de la teoría. Originalmente se escribió en alemán como *Quantenmechanik*, y en su sentido más general significa *sistema de funcionamiento de porciones o cantidades* [56, 67]. La mecánica cuántica ha explicado conceptos nuevos sobre procesos, representaciones u objetos que no percibimos con nuestros sentidos, y donde algunos conceptos físicos que son explicados objetivamente en la mecánica de Newton pierden su sentido en el ámbito cuántico, tales como la posición y velocidad exacta de los objetos.

Los antecedentes de la mecánica cuántica se encuentran en los trabajos científicos de Max Planck, Albert Einstein y Niels Bohr, quienes propusieron soluciones para describir algunos fenómenos de la interacción entre la materia y la radiación electromagnética que no encontraban explicación con el formalismo basado en las leyes de Newton y las ecuaciones de Maxwell, con base en las ideas

mecanicistas de Descartes. Estos fenómenos incluyen la radiación del cuerpo negro, la catástrofe del ultravioleta, el efecto fotoeléctrico, y la emisión espectral de los elementos químicos.

El fenómeno de la radiación del cuerpo negro fue abordado por los físicos Ludwig Boltzman y J. Stefan quienes se basaron en la teoría cinética de los gases de Maxwell y en la termodinámica, para analizar la potencia de emisión del cuerpo negro en función de la frecuencia. Los resultados de la teoría sólo concordaba con el experimento en la parte de las altas frecuencias del espectro. Por otra parte, los físicos ingleses Lord Rayleigh y Sir James Jeans recurrieron a las mismas hipótesis que Maxwell para la radiación térmica de los cuerpos y obtuvieron una ley conocida como ley de Rayleigh-Jeans, la cual era válida sólo para las bajas frecuencias del espectro. Esta ley predecía que la potencia de emisión se incrementaba conforme la longitud de onda se reducía, en otras palabras, predecía la existencia de una intensidad siempre creciente para la región del espectro por arriba del ultravioleta. Sin embargo, no existe evidencia de algo semejante en la práctica, por esta razón esta descripción fue llamada la *catástrofe ultravioleta* en el ámbito de la física clásica.

Max Planck era un experto en termodinámica y se dedicó a estudiar el problema de la radiación del cuerpo negro utilizando la hipótesis de que la emisión de radiación se realizaba en forma de unidades discretas de energía. A partir de esto Planck llegó a una fórmula completamente nueva que es válida para todo el espectro de frecuencias. Con esta fórmula era posible deducir las leyes de Stefan-Boltzman y de Wien-Golitzin. Max Planck dio a conocer su hipótesis sobre la cuantización de la energía del cuerpo negro el día 17 de diciembre de 1900 en la sesión de la Sociedad de Física de la Academia de Ciencias de Berlín. Los resultados expuestos concluyen que la interacción de la radiación electromagnética con la materia ocurre por procesos elementales discretos llamados *cuantos*, nombre introducido por Planck a partir de la palabra *quantum* que en latín significa *cantidad*. Matemáticamente, la hipótesis de Planck expresa que un cuanto de radiación electromagnética tiene una energía E proporcional a su frecuencia lineal ν

$$E = h\nu = \hbar\omega, \tag{1.1.1a}$$

donde h es una constante de proporcionalidad conocida como constante de Planck, $\hbar = h/(2\pi)$ se conoce como la constante de Planck reducida, y $\omega = 2\pi\nu$ es la frecuencia angular [20]. A partir de los experimentos de Compton fue posible asignar un momentum lineal a los cuantos de la radiación electromagnética de un proceso de dispersión de rayos X contra un blanco de grafito. El momentum \mathbf{p} de un cuanto de radiación, conocido como fotón, se calcula a partir de su número de onda $|\mathbf{k}| = 2\pi/\lambda$ en términos de la constante de Planck como sigue $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$.

Las leyes de la mecánica cuántica son leyes estadísticas porque las predicciones que la mecánica cuántica produce están basadas en probabilidades. La razón fundamental de esta conclusión se da por el principio de incertidumbre, propuesto en 1927 por el físico alemán Werner Heisenberg, el cual se expresa matemáticamente de la siguiente manera

$$\Delta x \Delta p \sim \hbar, \tag{1.1.2}$$

donde Δx es la incertidumbre con que se mide la posición de una partícula y Δp es la incertidumbre con que se mide el momentum lineal. Este principio pone de manifiesto que la posición y velocidad no pueden determinarse simultáneamente con total precisión, ya que al disminuir la incertidumbre en la medición de una medida, se aumenta la incertidumbre de la otra, es decir, existe un límite natural en la exactitud con que se puedan medir las cantidades físicas.

Estos importantes descubrimientos sirvieron como base para que en 1905 Albert Einstein publicara una teoría sobre el efecto fotoeléctrico, en donde los fotones toman el papel de partículas que dispersan los electrones de un metal a través de un proceso de choques elásticos. Por último, el físico danés Niels Bohr propuso un modelo de átomo simple basado en la emisión de fotones por parte de los electrones para desarrollar una teoría que permitiera explicar el espectro de emisión de las sustancias químicas. Los resultados de Bohr permitieron predecir algunos de los espectros de emisión con lo cual se confirmó la hipótesis de Planck. En 1924 se presenta un artículo en la revista *Philosophical Magazine* escrito por el físico Louis De Broglie, el cual expone la posible existencia de las ondas de materia que son generadas por el movimiento de los cuerpos materiales. Las ondas de materia tienen asociada una longitud de onda definida en términos del momentum \mathbf{p} como

$$\lambda = \frac{2\pi}{|\mathbf{k}|} = \frac{h}{|\mathbf{p}|}, \quad (1.1.3)$$

donde λ se le conoce como longitud de onda de De Broglie. En 1927 la teoría de De Broglie se comprobó en un experimento por parte de los científicos norteamericanos Davisson y Germer, y el científico soviético P. S. Tartakovski, en donde hacen experimentos de difracción de electrones en un cristal. De esta manera la dualidad onda-partícula queda demostrada, donde las partículas subatómicas ponen de manifiesto sus propiedades corpusculares y ondulatorias.

Todo lo anterior llevó a una revolución que culminó con una nueva teoría física llamada mecánica cuántica, la cual continuó con un ulterior desarrollo por Heisenberg, Schrödinger, Dirac, Born, entre otros físicos [67]. En 1925 Erwin Schrödinger introduce una ecuación para representar las propiedades ondulatorias de la materia. La ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo se describe de la siguiente manera

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m} \Delta + U(\mathbf{r}, t) \right) \Psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t}, \quad (\mathbf{r}, t) \in \Omega \times (0, T) \subset \mathbb{R}^{n+1}, \quad (1.1.4)$$

donde $\Psi(\mathbf{r}, t)$ se conoce como función de onda, $U(\mathbf{r}, t)$ es el potencial al que está sometida una partícula cuántica de masa m [22]. Esta ecuación es la ley dinámica que gobierna la evolución del sistema cuántico. En 1926, el físico alemán Max Born desarrolló una idea en un artículo sobre los fenómenos de colisión en el que incorpora probabilidades mecánico-cuánticas y expone que $\Psi(\mathbf{r}, t)$ debe interpretarse como la amplitud de probabilidades de que una partícula en un estado cuántico se encuentre en la posición \mathbf{r} . Al elevar el módulo de esta función al cuadrado $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$, se obtiene una probabilidad física de la partícula considerada [50]. En otras palabras, la función de onda $\Psi(\mathbf{r}, t)$ llamada amplitud de probabilidad representa el estado de un sistema cuántico y está directamente relacionada con la densidad de probabilidad $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$. La probabilidad de encontrar a la partícula en

un volumen $d\mathbf{r}$ en el momento t es $d\mathcal{P}(\mathbf{r}, t) = |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 d\mathbf{r}$, de modo que la densidad de probabilidad debe satisfacer la propiedad

$$\int_{\Omega} |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 d\mathbf{r} = 1.$$

Esta explicación establecida en la mecánica cuántica se conoce como *la interpretación probabilística de Born*. En la teoría cuántica la función de onda $\Psi(\mathbf{r}, t)$ describe el conjunto de todos los posibles estados de un sistema, cada uno con su respectiva probabilidad de manifestarse cuando sobre el sistema se hace una medición [34].

1.1.1. Ecuación de Schrödinger estacionaria

Obtener soluciones de la ecuación (1.1.4) podría ser complejo incluso para los casos donde el potencial U se representa por funciones simples, digamos como funciones continuas a trozos, por ejemplo. Sin embargo, existe un gran número de fenómenos cuánticos que presentan cierta periodicidad en el tiempo, o que presentan energías constantes; estos son los problemas estacionarios. En el análisis de los estados cuánticos de un sistema es de interés considerar los estados estacionarios de energía constante E , los cuales tienen una variación armónica en el tiempo definida por $e^{-iEt/\hbar}$. Busquemos soluciones de energía constante

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) e^{-iEt/\hbar}$$

para la ecuación de Schrödinger (1.1.4). Después de realizar operaciones se obtiene una ecuación que describe la dinámica de la amplitud compleja ψ de las soluciones buscadas

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m} \Delta + U(\mathbf{r}) \right) \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}), \quad \mathbf{r} \in \Omega \subset \mathbb{R}^3. \quad (1.1.5)$$

Esta ecuación se conoce como la *ecuación de Schrödinger estacionaria*, la cual es una ecuación en derivadas parciales de tipo elíptico.

Esta ecuación puede interpretarse como un problema de valores propios del operador de Schrödinger estacionario

$$\mathcal{H} := -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\mathbf{r}),$$

sometido a condiciones de frontera que resultan de considerar las condiciones de regularidad

$$\psi \in \mathcal{C}(\Omega), \quad \nabla\psi \in \mathcal{C}(\Omega),$$

de modo que las soluciones $\psi_n(\mathbf{r})$ de la ecuación (1.1.5) representan las funciones propias del operador \mathcal{H} , y los correspondientes valores propios E_n representan las energías permitidas del sistema. Físicamente, el operador \mathcal{H} representa el *operador Hamiltoniano* del sistema el cual es un operador diferencial lineal [1], es decir, si λ_1, λ_2 son escalares, y si ψ_1, ψ_2 representan estados propios del sistema, entonces $\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2$ es otro estado del sistema, matemáticamente

$$\mathcal{H}[\lambda_1\psi_1(\mathbf{r}) + \lambda_2\psi_2(\mathbf{r})] = \lambda_1\mathcal{H}\psi_1(\mathbf{r}) + \lambda_2\mathcal{H}\psi_2(\mathbf{r}).$$

Para que $\psi(\mathbf{r})$ sea una solución físicamente admisible se deben satisfacer ciertas condiciones generales [21], a saber:

1. Para que sea una solución clásica se necesita que ψ tenga cierto grado de suavidad. Más precisamente, $\psi \in \mathcal{C}^2(\Omega)$.
2. La función de onda ψ debe ser univaluada en cada punto.
3. La función de onda ψ debe ser acotada en todo punto, y ser cuadrado-integrable, es decir,

$$\int_{\Omega} |\psi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} < \infty.$$

4. La función de onda ψ debe satisfacer las condiciones a la frontera impuestas por el problema.

Gracias a estos postulados la mecánica cuántica ha desarrollado grandes avances a partir de la segunda mitad del siglo XX, los cuales han generado una revolución tecnológica, principalmente el área de la electrónica del estado sólido, en la física de los semiconductores, en el estudio de *superlattices* semiconductoras, en el análisis de los pozos cuánticos semiconductores, y más recientemente en la nanotecnología.

Las *superlattices* semiconductoras (ver Figura 1.2.4) son consideradas teóricamente como un potencial periódico unidimensional en semiconductores monocristalinos. El potencial de *superlattice* se obtiene por la densidad de impurezas introducidas durante el crecimiento epitaxial [28]. Las investigaciones de L. Esaki y R. Tsu [28, 35] avanzaron en el estudio de estas estructuras cuánticas, que derivan en estructuras para el confinamiento cuántico. Más aún, el confinamiento cuántico se ha extendido a las heteroestructuras semiconductoras con pozos cuánticos que encuentran amplias aplicaciones en dispositivos semiconductores eléctricos, dispositivos ópticos, todas ellas áreas en desarrollo en la física del estado sólido, y la física mesoscópica, entre otras.

1.2. Heteroestructuras semiconductoras

Las *heteroestructuras semiconductoras* son sólidos cristalinos que consisten de varias interfaces entre semiconductores diferentes. Las heteroestructuras son sistemas de baja dimensionalidad, es decir, sistemas que están confinados en una, dos o tres dimensiones espaciales, las cuales suelen modelarse como pozos cuánticos, alambres cuánticos, o puntos cuánticos [44, 63]. Las heteroestructuras semiconductoras están formadas a partir de múltiples heterouniones. Una *heterounión* se forma cuando dos materiales con diferentes bandas prohibidas se unen metalúrgicamente [35]. Las heterouniones se caracterizan por un cambio abrupto en el potencial de la interfaz, como se ve en la Figura 1.2.1, y ofrecen ciertos grados de libertad a los portadores de carga tal como lo hacen las impurezas.

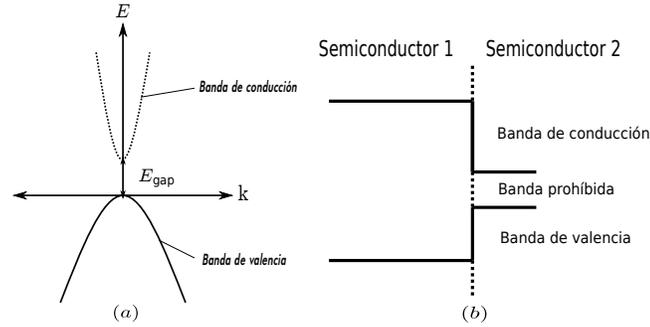


Figura 1.2.1. (a) Diagrama k-E de las bandas de energía del GaAs [35, 7 p.]. (b) Potenciales unidimensionales U en las bandas de energía de una heterounión de dos materiales semiconductores diferentes (línea punteada) [35, 9 p.].

En física del estado sólido cuando se confina un portador de carga en una heteroestructura semiconductor se habla del *diámetro de Bohr del excitón*. Este parámetro es usado como una referencia de tamaño para considerar el efecto del confinamiento cuántico [47]. Otra forma de considerar el comportamiento cuántico en las heteroestructuras semiconductoras es cuando la dimensión del confinamiento espacial de los portadores de carga en al menos una dirección es comparable con *la longitud de onda de De Broglie del electrón*, que es del orden de unas decenas de nanómetros [44].

La fabricación de estas heteroestructuras se lleva a cabo a partir de técnicas como el crecimiento epitaxial; litografía o nanolitografía de haz de electrones; fotolitografía de haz de electrones; y V-grooved; estas técnicas tienen el fin de optimizar el control del tamaño de las regiones y sistemas de confinamiento, y garantizar una regularidad espacial de los portadores de carga [35, 44].

Existen dos tipos de heteroestructuras semiconductoras: las del tipo I y las del tipo II. Las heteroestructuras semiconductoras del tipo I tienen como característica que la banda prohibida más angosta de un material se encuentre completamente dentro de la banda prohibida más amplia del otro material, dando como resultado que los portadores de carga estén dentro del mismo estrato del material, generando una recombinación más rápida y eficiente. En las heteroestructuras del tipo I se pueden encontrar los siguientes casos:

1. Un estrato delgado C de un material con banda prohibida E_{gap}^C que se encuentra en medio de dos estratos de otro material B de banda prohibida E_{gap}^B , donde $E_{gap}^C < E_{gap}^B$. Esto da lugar a una heterounión como la mostrada en la Figura 1.2.2-(a). Si el estrato C es lo suficientemente delgado para que se presenten las propiedades cuánticas, entonces esta alineación de bandas C y B se llama *pozo cuántico simple*, que conduce a formación de estados ligados discretos dentro del pozo. Si existen portadores de carga en el sistema que sean producidos por el dopaje de los materiales, entonces los portadores de carga ocuparán las regiones de más baja energía acumulándose en el pozo cuántico simple.
2. Se puede formar un pozo cuántico asimétrico al incluir una aleación entre los materiales C y B, ver Figura 1.2.2-(b).

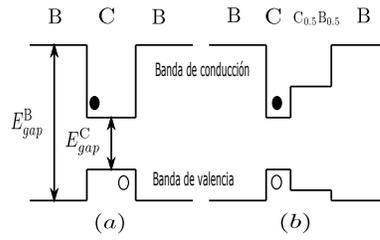


Figura 1.2.2. Diagrama de bandas de energía para un pozo cuántico simple (a) y un pozo cuántico escalonado o asimétrico (b). Los círculos negros representan a los electrones y los círculos blancos representan a los huecos; ambos son los portadores de carga dentro del mismo estrato del material [35, 9 p.].

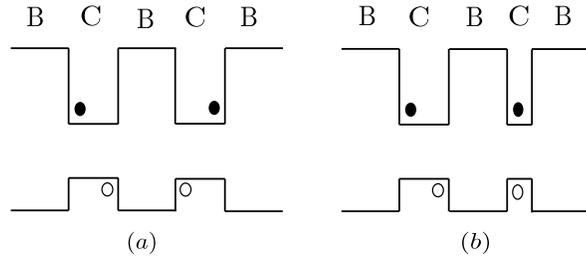


Figura 1.2.3. Diagrama de bandas de energía para pozos cuánticos dobles simétricos (a) y pozos cuánticos dobles asimétricos (b). Los círculos negros representan a los electrones y los círculos blancos representan a los huecos, ambos dentro de los mismos estratos del material [35, 10 p.].

3. Se forman estructuras más complejas que las anteriores, como pozos cuánticos dobles simétricos o asimétricos como se muestra en la Figura 1.2.3, y pozos cuánticos múltiples o *superlattices*, ver Figura 1.2.4.

Las heteroestructuras semiconductoras de tipo II tienen como característica que los portadores de carga estén confinados en diferentes estratos del semiconductor, generando que los tiempos de recombinación de los portadores de carga sean largos y menos eficientes. En estas estructuras se tiene el siguiente caso:

1. Las bandas prohibidas de los materiales C y D están alineadas de tal manera que los pozos

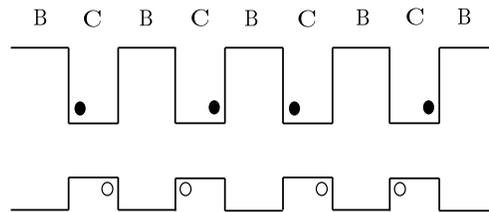


Figura 1.2.4. Diagrama de bandas de energía para pozos cuánticos múltiples o superlattices. Los círculos negros representan a los electrones y los círculos blancos representan a los huecos, ambos dentro de los mismos estratos del material [35, 10 p.].

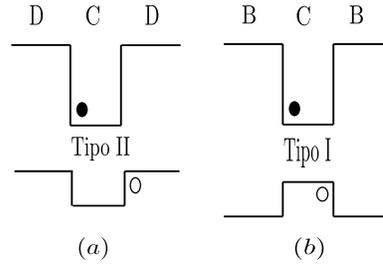


Figura 1.2.5. Diagrama de bandas de energía para un pozo cuántico del tipo II (a) y del tipo I (b). Los círculos negros representan a los electrones y los círculos blancos representan a los huecos [35, 11 p.].

cuánticos formados en las banda de valencia y en la banda de conducción se encuentren en diferentes estratos, ver Figura 1.2.5.

1.3. Guía de ondas cuántica

Las guías de ondas cuánticas son aplicaciones de las heteroestructuras semiconductoras que generalmente se consideran como sistemas ideales para el estudio del transporte cuántico o electrónico, donde se han observado efectos cuánticos en las interfaces semiconductoras debido al confinamiento cuántico. En la literatura de fenómenos electromagnéticos y acústicos se analizan guías de ondas que transportan o guían ondas electromagnéticas y acústicas, respectivamente, pero debido a las similitudes en el transporte de partículas cuánticas en heteroestructuras de dos dimensiones a éstas se le han denominado *guía de ondas cuántica* [30, 45].

Una *guía de ondas cuántica* es un dispositivo electrónico de dimensiones nanométricas, en el cual las partículas están confinadas en dos direcciones para que sea posible su transporte cuántico [29, 60]. Estos dispositivos encuentran aplicaciones prácticas en [12]:

1. *Alambres cuánticos semiconductoros*: Llamados también cables, tubos o hilos cuánticos semiconductoros, favorecen el movimiento de los portadores de carga en dos dimensiones. En estas estructuras con geometría cilíndrica o rectangular pueden existir un cierto número de energías discretas por debajo del umbral continuo.
2. *Películas delgadas de nanocompuestos o nanofilms*: Estas estructuras son guías de ondas para cuasi-partículas cargadas con espín, que se propagan en la película y cuyo movimiento se puede afectar por medio de un campo electromagnético externo. Estas películas tienen grosores del orden de 10 nm aproximadamente [12].
3. *Tubos delgados cuánticos o nanotubos*: Los nanotubos son largas moléculas formadas por una gran cantidad de átomos situados en superficies espaciales con forma de cilindro, con diámetros de aproximadamente 1 nm (10 Å). Los nanotubos matemáticamente se analizan considerando que sus superficies pueden ser simuladas por paredes rígidas o blandas [12]. Un ejemplo se encuentra en los *nanotubos de carbono*, que son una clase interesante de nanoestructuras que

pueden obtenerse de una capa de grafito o una lámina de grafeno para formar un cilindro hueco compuesto por hexágonos de carbono [4]. Muchas veces a los nanotubos se les llama alambres cuánticos cuando tienen formas cilíndricas [25, 46]. Las aplicaciones de los nanotubos semiconductores se estudian como bloques de construcción de plataformas fotónicas y electrónicas integradas [44].

Las características generales de las guías de ondas cuánticas [23] son:

1. Dimensiones nanométricas, típicamente del orden de decenas a cientos de nanómetros, aproximadamente [58].
2. Están hechos de varias capas diferentes de materiales semiconductores de modo que el transporte cuántico se limita a pequeños canales o guías de onda.
3. Tienen una estructura cristalina, lo que implica que son aproximadamente periódicos.
4. Son de alta pureza, para indicar que en el cristal el nivel de contaminación sea suficientemente bajo como para que el transporte libre medio de electrones sea de algunos micrómetros o mayor.
5. Los límites de las guías de ondas cuánticas consisten generalmente en una interfaz entre dos materiales semiconductores diferentes.
6. El comportamiento de una partícula cuántica en estas estructuras está gobernado por la ecuación de Schrödinger.

Con base en los tipos de guías cuánticas que existen, prestaremos atención a los alambres cuánticos semiconductores, en los cuales se verá más a fondo sus propiedades, porque son de interés en este trabajo.

1.4. Alambre cuántico semiconductor

Los *alambres cuánticos semiconductores* se definen como un material semiconductor al que dos de sus dimensiones tienen escalas nanométricas, mientras que la otra dimensión tiene escala microscópica. El confinamiento de los portadores de carga se debe a un potencial localizado en una región finita [45, 53]. A lo largo de investigaciones y experimentos se ha llegado a observar que los materiales cuando se reducen a partir de los 10nm presentan cambios notables en sus propiedades.

Las dimensiones de un material se refieren al número de grados de libertad en el momentum de los portadores de carga. En la Figura 1.4.1 se observa un esquema de un alambre cuántico compuesto de dos semiconductores, arseniuro de galio, GaAs, en el estrato de en medio, y arseniuro de galio-aluminio, $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$, en los estratos externos. El subíndice x indica la concentración entre el GaAs y el AlAs, que es un número entre 0 y 1, que dependerá de la aplicación que se le dé al alambre cuántico. La mayoría de los experimentos con alambres cuánticos involucran sistemas de GaAs/AlGaAs.

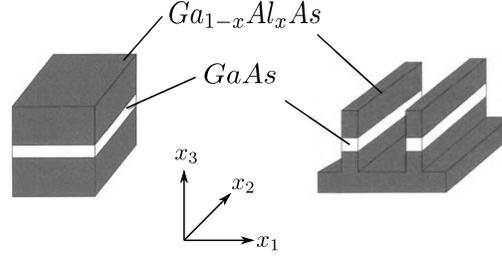


Figura 1.4.1. Esquema de un alambre cuántico semiconductor [35, 244 p.].

Para la fabricación de un alambre cuántico se parte de un estrato de semiconductor estándar con un pozo cuántico y se trabaja la muestra para hacer un estrato independiente del material del pozo cuántico, el cual se puede llenar con un crecimiento excesivo del material de barrera, por ejemplo, $Ga_{1-x}Al_xAs$. Esto genera que todos los portadores de carga estén confinados todavía a lo largo del eje de crecimiento de la heteroestructura, pero ahora están también confinados en otra dirección adicional siempre y cuando el estrato sea lo suficientemente estrecho [35].

1.4.1. Ecuación de Schrödinger para alambres cuánticos

Para obtener la ecuación dinámica que describe el movimiento de portadores con masa efectiva m^* se utiliza la ecuación de Schrödinger tridimensional estacionaria

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m^*} \Delta + U(\mathbf{r}) \right) \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}), \quad \mathbf{r} \in \mathbb{R}^3, \quad (1.4.1)$$

donde Δ representa el Laplaciano. Cuando se trabaja con alambres cuánticos el potencial $U(\mathbf{r})$ se puede escribir como la suma de potenciales, uno de confinamiento bidimensional $U_0(x_2, x_3)$ y otro potencial unidimensional $U_1(x_1)$, es decir, [35, 246 p.]

$$U(\mathbf{r}) = U_1(x_1) + U_0(x_2, x_3). \quad (1.4.2)$$

El potencial unidimensional U_1 , que depende de la coordenada longitudinal x_1 , se debe a los estratos de semiconductores delgados que se encuentran apilados, mientras que el potencial U_0 depende de las coordenadas transversales x_2 y x_3 . Cabe resaltar que se está trabajando con heteroestructuras semiconductoras del tipo I, con potenciales simétricos, como se muestra en la Figura 1.4.1.

Ahora bien, la función de onda puede ser escrita como un producto de dos componentes

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi_1(x_1) \psi_0(x_2, x_3), \quad (1.4.3)$$

a partir de esto la ecuación de Schrödinger (1.4.1) toma la forma

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m^*} \Delta + U_1(x_1) + U_0(x_2, x_3) \right) \psi_1(x_1) \psi_0(x_2, x_3) = E\psi_1(x_1) \psi_0(x_2, x_3).$$

De igual manera asumamos que la energía se puede representar como una suma de términos asociados con las componentes longitudinal (E_1) y transversal (E_0), es decir,

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m^*} \Delta + U_1(x_1) + U_0(x_2, x_3) \right) \psi_1(x_1) \psi_0(x_2, x_3) = (E_1 + E_0) \psi_1(x_1) \psi_0(x_2, x_3),$$

de esta forma se puede separar la ecuación anterior en dos partes

$$\frac{-\hbar^2}{2m^*} \psi_0(x_2, x_3) \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} \psi_1(x_1) + \psi_0(x_2, x_3) U_1(x_1) \psi_1(x_1) = \psi_0(x_2, x_3) E_1 \psi_1(x_1), \quad (1.4.4)$$

$$\frac{-\hbar^2}{2m^*} \psi_1(x_1) \left[\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_3^2} \right] \psi_0(x_2, x_3) + \psi_1(x_1) U_0(x_2, x_3) \psi_0(x_2, x_3) = \psi_1(x_1) E_0 \psi_0(x_2, x_3). \quad (1.4.5)$$

Al dividir la ecuación (1.4.4) por ψ_0 se obtiene una ecuación con ψ_1 únicamente como incógnita, mientras que al dividir la ecuación (1.4.5) por ψ_1 resulta una ecuación con ψ_0 únicamente como incógnita, más precisamente

$$\frac{-\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} \psi_1(x_1) + U_1(x_1) \psi_1(x_1) = E_1 \psi_1(x_1), \quad (1.4.6)$$

$$\frac{-\hbar^2}{2m^*} \left[\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_3^2} \right] \psi_0(x_2, x_3) + U_0(x_2, x_3) \psi_0(x_2, x_3) = E_0 \psi_0(x_2, x_3). \quad (1.4.7)$$

Si $U_1 \equiv 0$ las soluciones de la ecuación (1.4.6) representan ondas planas de la forma $\exp(ik_1 x_1)$, de modo que la componente de la energía se representa como $E_1 = \hbar^2 k_1^2 / (2m^*)$. Por otra parte, la ecuación (1.4.7) es la ecuación dinámica que representa a los alambres cuánticos semiconductores con un potencial de confinamiento bidimensional $U_0(x_2, x_3)$. Para conseguir los estados confinados de los portadores de carga se necesita que $E_0 < U_0$, [35].

1.5. Guías de ondas cuánticas con perturbaciones

La mayoría de las guías de ondas están formadas por heterouniones que son planas u homogéneas, sin embargo pueden existir variaciones que se hacen significativas en la escala atómica [63]. Estas variaciones corresponden a las imperfecciones intrínsecas o extrínsecas de la estructura del material de la guía de ondas, las cuales ocurren durante su fabricación. Si asumimos que las variaciones se dan únicamente en la coordenada longitudinal, a lo largo de la cual se establece la propagación de las ondas, entonces es posible analizar tales variaciones a partir de la aproximación adiabática. Esta aproximación consiste en dividir el problema en una parte que cambia rápidamente y otra parte que cambia lentamente mediante el “freezing” [12]. El “freezing” consiste en hacer que las variaciones longitudinales lo hagan muy lentamente. Esto se consigue al introducir un parámetro pequeño ε , que describe la lentitud del cambio, el cual se hace tender a cero. En el límite, desde el punto de vista de la coordenada longitudinal no existirán más variaciones y el problema se verá localmente plano,

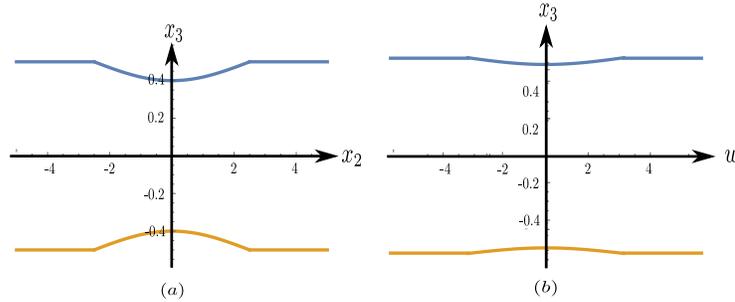


Figura 1.5.1. (a) Guía de ondas cuántica con perturbaciones en la dirección longitudinal x_2 , y (b) guía de ondas con perturbaciones alisadas en la dirección $w = \varepsilon x_2$.

como se ve en la Figura 1.5.1.

1.6. Estado del Arte

La propagación guiada de partículas confinadas a un espacio de dimensiones finitas fue considerada en la segunda mitad del siglo XX. La motivación de una dinámica cuántica proviene de los desarrollos de la física del estado sólido [35]. Pero este desarrollo no sería capaz sin la base que establece la mecánica cuántica como una nueva teoría dialéctica del siglo XX [56].

La fabricación de nuevos dispositivos de naturaleza cuántica hace necesario un entendimiento físico y matemático para la explicación de nuevas propiedades a escala nanométrica. A lo largo de los años se han construido estructuras semiconductoras y dispositivos donde la naturaleza cuántica de los electrones se pone de manifiesto y las leyes de la física clásica dejan de cumplirse [58].

Las guías de ondas cuánticas se encuentran en aplicaciones prácticas semiconductoras como los alambres cuánticos, donde dos de sus dimensiones son reducidas a escala nanométrica. Estos alambres cuánticos suelen construirse a partir de heteroestructuras, que son la unión de dos o más semiconductores diferentes [53]. Existen guías de ondas cuántica que consisten de tres estratos donde el confinamiento del electrón está restringido en el eje longitudinal que sirve como un transporte cuántico. Estas estructuras semiconductoras utilizan impurezas químicas para lograr el objetivo de guiado cuántico. De esta manera dos estratos externos, que suelen ser del mismo semiconductor, se comportan como barreras de potencial haciendo que el portador de carga sea confinado hacia el núcleo en la dirección longitudinal, que consiste de un estrato central de la heteroestructura, el cual se comporta como un pozo de potencial que presenta una naturaleza atractiva hacia los portadores de carga [29].

Los primeros artículos que han trabajado sobre la propagación de ondas cuánticas se remontan a calcular los estados ligados de una partícula cuántica libre en estructuras perturbadas, como en películas delgadas o alambres cuánticos, que funcionan como guías de ondas cuánticas en aplicaciones de la microelectrónica, ver, *e.g.* [23, 30, 69]. En esta estructura se establecen las condiciones de frontera apropiadas y la ecuación que aborda el comportamiento de los portadores de carga es la ecuación

de Schrödinger. Sin embargo, el objetivo de estos artículos es resolver el problema a partir del análisis funcional, métodos de la física matemática, la relación con la geometría del confinamiento o geometría espectral, la probabilidad y otras áreas afines como herramientas matemáticas en la formulación del problema.

Las guías de ondas cuánticas tienen análogos en la acústica y el electromagnetismo porque las ecuaciones diferenciales que las describen son análogas y han sido objeto de estudio por parte de la física matemática. Estas ecuaciones frecuentemente se presentan como ecuaciones diferenciales de segundo orden que describen la dinámica del fenómeno físico que representa. Por lo tanto, existen artículos importantes de ondas acústicas en el océano que están vinculados en cómo abordar matemáticamente guías de ondas cuánticas con perturbaciones con el método de modos verticales y rayos horizontales, que es una combinación de la descomposición espectral y el método WKB, como por ejemplo [16, 52]. La solución de cada uno de estos problemas físicos ocupa herramientas matemáticas muy poderosas como las ya comentadas, pero que están contenidas en la así llamada aproximación adiabática.

Un gran conjunto de problemas lineales que surgen en la física-matemática se pueden abordar utilizando la aproximación adiabática, que se tratan como esquemas generalizados de los métodos de Born-Oppenheimer y Maslov, entre otros. La aproximación adiabática permite construir soluciones en la mecánica ondulatoria y mecánica cuántica, así como en problemas particulares en la física molecular, física del estado sólido, la hidrodinámica, problemas relacionados con ondas de electrones en cristales, ondas internas y superficiales en fluidos, interacción electrón-fonón, ondas electromagnéticas y partículas cuánticas que se propagan en guías de ondas, entre muchos otros. Por tanto, desde un punto de vista matemático todos estos problemas tienen la misma estructura y por esta razón es posible tratarlos con técnicas comunes [12, 48].

De igual manera, en otros artículos se han trabajado en las soluciones numéricas a partir de nuevos métodos para resolver problemas de valores propios unidimensionales que involucran al operador de Schrödinger. Un ejemplo muy relevante es el método SPPS, el cual proporciona soluciones exactas en forma de una serie de potencias del parámetro espectral, las cuales fácilmente conducen a representaciones numéricas. El análisis de algunos ejemplos prácticos de guías de ondas cuánticas semiconductoras con simetrías rectangular y cilíndrica ha sido abordado en los trabajos [18, 19].

Similarmente, en los artículos [7, 8, 9, 10] se han analizado guías de ondas electromagnéticas conformadas por estratos planos isotrópicos, con un núcleo no-homogéneo entre dos revestimientos homogéneos, utilizando las ecuaciones de Maxwell. Estos artículos son muy importantes en el desarrollo de esta tesis porque trabajan con ecuaciones de onda escalares que conducen a un problema auxiliar de tipo Sturm-Liouville, y emplean el método SPPS antes mencionado para obtener soluciones exactas, así mismo se obtiene una interpretación física clara de la propagación de ondas en la guía. En estos artículos se emplea la transformada de Fourier con respecto a ciertas coordenadas espaciales con lo cual resulta un problema espectral unidimensional. El objetivo de estos artículos consiste en determinar la función de Green que satisfaga el principio de absorción al límite en la dirección longitudinal. La función de Green se construye utilizando el método de expansión en fun-

ciones propias, que involucra las funciones propias normalizadas de un operador de Sturm-Liouville auxiliar. Este problema espectral elíptico tiene un espectro discreto y continuo, en el espectro discreto se calculan los valores propios a partir de los ceros de una ecuación de dispersión, la cual se expresa matemáticamente por una serie de Taylor cuyos coeficientes son generados por el método SPPS. Los modos obtenidos se expresan en términos de series de potencia del parámetro espectral, lo cual facilita su implementación numérica.

1.7. Motivación del problema

En diferentes áreas científicas y tecnológicas como física del estado sólido, microelectrónica, nanotecnología, y física mesoscópica se requieren dispositivos electrónicos y optoelectrónicos de alto rendimiento que estén basados en heteroestructuras de semiconductores para diferentes aplicaciones [44].

Gracias a esto se han desarrollado heteroestructuras semiconductoras para el transporte cuántico, las cuales han resultado de múltiples investigaciones teóricas y experimentales que han dado lugar a una gran cantidad de literatura en libros, artículos y congresos. El interés de este trabajo es sobre heteroestructuras en dos dimensiones, llamados alambres cuánticos semiconductores, donde el transporte de portadores de carga a lo largo del eje longitudinal es a partir de un confinamiento cuántico [31, 45]. Por esta razón se usará el término “*guía de ondas cuántica*” como sinónimo de “*alambre cuántico semiconductor*” a lo largo de esta tesis.

Los sistemas de GaAs/AlGaAs son las heteroestructuras más estudiadas, y han dado lugar a una gran cantidad de trabajos (ver por ejemplo [26, 27, 29, 35, 59, 61], y referencias ahí incluidas). De igual manera existen heteroestructuras basadas en los semiconductores InAs que utilizan materiales como AlSb y GaSb, con el fin de fabricar transistores de película fina de alto rendimiento [66] o como heteroestructuras de Si/SiGe que también se implementan para transistores de efecto de campo basado en nanoalambres [15]. Con base en esto, tomaremos de ejemplos los sistemas de GaAs/AlGaAs como en la Figura 1.4.1.

Las guías de ondas cuánticas tienen varias aplicaciones prácticas importantes, algunas son:

1. Proporcionan una base material para una serie de dispositivos novedosos, y abren el camino para mejorar las características de funcionamiento de componentes microelectrónicos y optoelectrónicos tradicionales [11, 37].
2. Las guías de ondas cuánticas se estudian para usarlas en microcircuitos para un transporte electrónico más rápido [36].
3. Se ha demostrado que las perturbaciones en una guía de ondas cuántica conducen a los estados ligados que representan el transporte cuántico requerido para los portadores de carga [17]. Las propiedades físicas de estos sistemas poseen amplias aplicaciones en muchas áreas de la física y la química [69].

4. La tecnología en el área de la microfabricación ha tenido un gran desarrollo al poder diseñar dispositivos semiconductores y circuitos semiconductores de alto nivel, tales como las guías de ondas cuánticas con dimensiones típicamente del orden de 10 nm [58].
5. Los avances en nanotecnología buscan satisfacer las necesidades para conseguir una mayor capacidad de almacenamiento de información y que su transporte sea más rápido a través de las redes de comunicación [53].

1.8. Planteamiento del problema

En este trabajo se abordará el análisis de la propagación de ondas cuánticas en una guía de ondas cuántica con perturbaciones. El problema se describe por la ecuación de Schrödinger estacionaria bidimensional, y ciertas condiciones de frontera que representan las perturbaciones indicadas. Así mismo se consideran los métodos de construcción de soluciones para obtener una descripción modal en estas estructuras [2, 64].

Se considerará la siguiente estructura bidimensional que representa la sección longitudinal de la guía de ondas cuántica considerada, como se ve en la Figura 1.8.1. La sección longitudinal consiste de tres regiones

$$\Pi_\varepsilon = \Pi_\varepsilon^- \cup \Pi_0 \cup \Pi_\varepsilon^+ \subseteq \mathbb{R}^2, \quad (1.8.1)$$

que definen un núcleo Π_0 y un revestimiento Π_ε^\pm , donde

$$\begin{aligned} \Pi_\varepsilon^- &= \{(x_2, x_3) \in \mathbb{R}^2 : -\infty < x_3 < \phi_-(\varepsilon x_2)\}, \\ \Pi_0 &= \{(x_2, x_3) \in \mathbb{R}^2 : \phi_-(\varepsilon x_2) < x_3 < \phi_+(\varepsilon x_2)\}, \\ \Pi_\varepsilon^+ &= \{(x_2, x_3) \in \mathbb{R}^2 : \phi_+(\varepsilon x_2) < x_3 < \infty\}, \end{aligned}$$

son regiones del plano, y $\phi_-(\varepsilon x_2)$, $\phi_+(\varepsilon x_2)$ son las curvas que definen las interfaces entre las regiones, respectivamente, que satisfacen

$$\inf_{x_2 \in \mathbb{R}} (\phi_+(\varepsilon x_2) - \phi_-(\varepsilon x_2)) > 0,$$

es decir, las interfaces no se cruzan de manera que siempre existe un canal en donde la onda cuántica se puede propagar en la dirección longitudinal x_2 . En las interfaces, $\varepsilon > 0$ representa un parámetro pequeño que describe la lentitud del cambio de las perturbaciones de la guía de ondas en la dirección x_2 . La función de onda ψ_0 interactuando con la estructura de la guía de ondas considerada es descrita por la ecuación de Schrödinger bidimensional correspondiente al alambre cuántico,

$$\frac{-\hbar^2}{2m^*} \left[\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_3^2} \right] \psi_0(x_2, x_3) + U_0(x_2, x_3) \psi_0(x_2, x_3) = E_0 \psi_0(x_2, x_3),$$

además de las condiciones de frontera

$$[\psi_0(x_2, x_3)]_{x_3=\phi_{\pm}(\varepsilon x_2)} = 0, \quad \left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{n}} \psi_0(x_2, x_3) \right]_{x_3=\phi_{\pm}(\varepsilon x_2)} = 0,$$

donde \mathbf{n} es un vector normal a las interfaces, donde la notación

$$[f(z)]_{z=z_0} := f(z_0 + 0) - f(z_0 - 0)$$

indica la magnitud del salto de una función f en el punto $z = z_0$. Este problema con valores en la frontera describe los procesos ondulatorios estacionarios de energía constante E_0 en esta guía de ondas cuántica. Las soluciones de la ecuación de Schrödinger bidimensional con unidades (1.8.3) dependerán del parámetro ε , el cual puede hacerse arbitrariamente pequeño, de acuerdo con la aproximación adiabática planteada.

Consideremos el siguiente cambio de variable

$$w := \varepsilon x_2, \tag{1.8.2}$$

donde w es una coordenada espacial que contiene los cambios lentos de las interfaces. A partir de este cambio de variable introducimos las siguientes funciones

$$\begin{aligned} \psi_{\varepsilon}(w, x_3) &:= \psi\left(\frac{w}{\varepsilon}, x_3\right) = \psi(x_2, x_3), \\ U_{\varepsilon}(w, x_3) &:= U\left(\frac{w}{\varepsilon}, x_3\right) = U(x_2, x_3). \end{aligned}$$

De esta manera el problema con valores en la frontera se transforma en el siguiente

$$\frac{-\hbar^2}{2m^*} \left[\varepsilon^2 \frac{\partial^2}{\partial w^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_3^2} \right] \psi_{\varepsilon}(w, x_3) + U_{\varepsilon}(w, x_3) \psi_{\varepsilon}(w, x_3) = E_0 \psi_{\varepsilon}(w, x_3), \tag{1.8.3}$$

$$[\psi_{\varepsilon}(w, x_3)]_{x_3=\phi_{\pm}(w)} = 0, \quad \left[\frac{\partial}{\partial x_3} \psi_{\varepsilon}(w, x_3) \right]_{x_3=\phi_{\pm}(w)} = 0. \tag{1.8.4}$$

Para resolver este problema se considera el siguiente esquema:

1. Establecer un problema vertical de tipo Sturm-Liouville para una guía de ondas estratificada uniforme sin perturbaciones en las interfaces de los materiales, como se ve en la Figura 1.8.2. El estudio de este sistema será útil para abordar a la guía de ondas con perturbaciones.
2. Utilizar el método SPPS, para obtener soluciones del problema vertical de Sturm-Liouville.
3. Abordar la guía de ondas cuántica con perturbaciones y obtener soluciones asintóticas con la aplicación del método WKB.
4. Emplear los resultados anteriores para calcular la función de Green de la guía de ondas perturbada, la cual se representará como una superposición de modos guiados en su análisis asintótico.

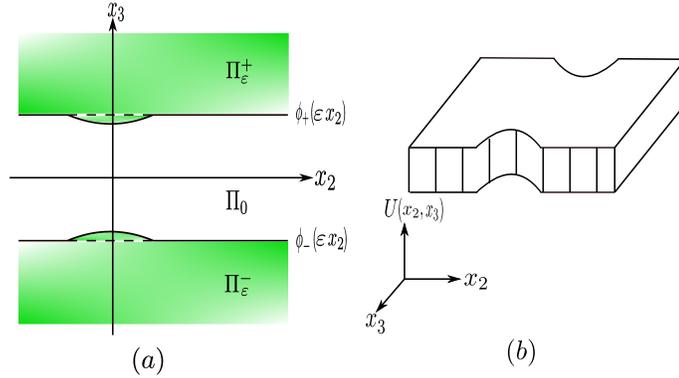


Figura 1.8.1. Vista lateral de la Fig. 1.8.2 y perspectivas de la guía de ondas.

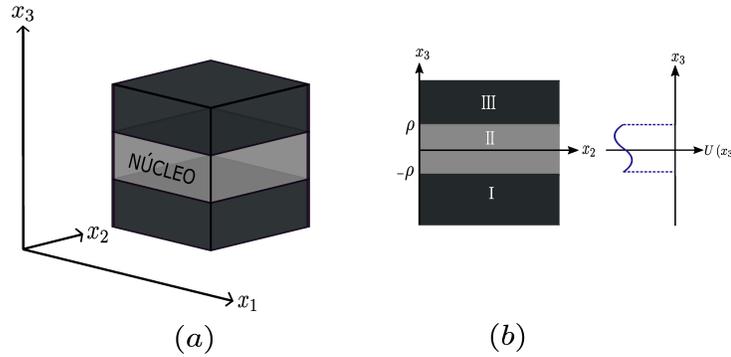


Figura 1.8.2. (a) Representación esquemática en coordenadas rectangulares de una guía de ondas cuántica y (b) configuración de los estratos de una guía de ondas cuántica con ancho del pozo igual a 2ρ .

5. Obtener soluciones numéricas a partir de la representación modal de las soluciones.

1.9. Notaciones importantes

La estructura matemática de la mecánica cuántica se desarrolla en el espacio de Hilbert, ya que se requiere de la descripción del estado de un sistema cuántico por medio de vectores en este espacio. Al igual que el estudio de operadores definidos en este espacio con la relación de magnitudes físicas como la energía. En base a esto, comencemos con las siguientes definiciones sobre espacio lineal para abordar el espacio de funciones \mathcal{L}_2 que se requiere por las funciones de onda que son cuadrado integrables.

1.9.1. Espacio lineal

Definición 1 ([38, p. 130]). Un conjunto no-vacío $X = \{R, \mathbb{F}\}$ de elementos o vectores $R = \{x, y, z, \dots\}$ y el campo \mathbb{F} , se llama *espacio lineal o vectorial* cuando satisface las siguientes condiciones, también llamadas *axiomas del espacio lineal X*:

1. Para cualquiera dos elementos $x, y \in R$ está definido unívocamente un tercer elemento $z \in R$, llamado suma de ellos y denotado $x + y$, tal que
 - a) Conmutatividad: $x + y = y + x$.
 - b) Asociatividad: $x + (y + z) = (x + y) + z$.
 - c) Existencia del cero o elemento neutro: En R existe un elemento 0 tal que $x + 0 = x$ para todo $x \in R$.
 - d) Existencia del elemento inverso: Para todo $x \in R$ existe un elemento $-x$ tal que $x + (-x) = 0$.

2. Producto por escalar: Para cualquier número $\alpha \in \mathbb{F}$ y cualquier elemento $x \in R$ está definido el elemento $\alpha x \in R$, de manera que:
 - a) $\alpha(\beta x) = (\alpha\beta)x$ donde $\alpha, \beta \in \mathbb{F}$.
 - b) $1 \cdot x = x$.

3. Las operaciones de adición y producto por escalar están relacionadas entre sí mediante leyes distributivas:
 - a) $(\alpha + \beta)x = \alpha x + \beta x$, $x \in R, \alpha, \beta \in \mathbb{F}$.
 - b) $\alpha(x + y) = \alpha x + \alpha y$, $x, y \in R, \alpha, \beta \in \mathbb{F}$.

Dependiendo del campo \mathbb{F} se distinguen los espacios lineales complejos, reales y racionales.

1.9.1.1. Dependencia e independencia lineal de vectores

Ahora, definiremos los conceptos de dependencia e independencia lineal de vectores.

Los elementos $x, y, \dots, w \in R$ de un espacio lineal X se llaman *linealmente dependientes*, cuando existen unos escalares $\alpha, \beta, \dots, \lambda \in \mathbb{F}$, no todos iguales a 0 , tales que $\alpha x + \beta y + \dots + \lambda w = 0$. En caso contrario, si $\alpha = \beta = \dots = \lambda = 0$ estos elementos se llaman *linealmente independientes*, [38, 132 p.].

1.9.1.2. Bases y dimensión de un espacio

En un espacio lineal X tiene *dimensión finita* o *n-dimensional* si existen n vectores linealmente independientes y si cada conjunto de $n + 1$ vectores es dependiente. Por otra parte, si por cada $k \in \mathbb{N}$ se pueden encontrar k vectores linealmente independientes se dice que X es de *dimensión infinita* [3, 71 p.]. El concepto de *base* de un espacio lineal X se define como un conjunto de vectores linealmente independientes tal que todo vector del espacio es formado por una combinación lineal de los vectores de dicho conjunto [3, 72 p.].

Una identidad de propiedades entre dos conjuntos de objetos en relación con un sistema de operaciones o con otro sistema arbitrario de relaciones entre sus elementos es llamado un *isomorfismo*. De acuerdo con esto, se concluye que todos los espacios lineales n -dimensionales son isomorfos entre sí independientemente de la naturaleza de sus elementos.

1.9.1.3. Subespacios del espacio lineal X

Un conjunto no-vacío de vectores de un espacio lineal X_n , se llama *subespacio* de X si toda combinación lineal de vectores de dicho conjunto también pertenece a él [3, 74 p.]. En otras palabras, $X_n < X$ es un subespacio, cuando $x \in X_n, y \in X_n$ se deduce que $\alpha x + \beta x \in X_n$, para cualesquiera que sean $\alpha, \beta \in \mathbb{F}$ [38, 133 p.].

1.9.2. Espacios de Hilbert H

En un espacio lineal X se define una operación llamada producto interno $\langle \cdot, \cdot \rangle$ que cumple las siguientes propiedades:

1. $\langle x, y \rangle = \overline{\langle y, x \rangle}$.
2. $\langle \alpha x, y \rangle = \alpha \langle x, y \rangle$, $\alpha \in \mathbb{F}$.
3. $\langle x + y, z \rangle = \langle x, z \rangle + \langle y, z \rangle$.
4. $\langle x, x \rangle > 0$ si $x \neq 0$.

La barra superior del inciso 1) indica el complejo conjugado. Un espacio lineal con la operación de producto interno así definida se conoce como *espacio lineal con producto interno*.

Definición 2 ([24, p. 10]). En un espacio lineal X se introduce una operación llamada norma que a cada vector $x \in X$ le asigna un único número real $\|x\| \in \mathbb{R}$ que cumple con las siguientes reglas:

1. $\|x\| \geq 0$, con la igualdad si y sólo si $x = 0$.
2. $\|\alpha x\| = |\alpha| \|x\|$, $\alpha \in \mathbb{F}$.
3. Desigualdad del triángulo: $\|x_1 + x_2\| \leq \|x_1\| + \|x_2\|$.

Un espacio lineal con la operación de norma así definida se conoce como *espacio lineal normado*. Una forma de introducir una norma en un espacio lineal X con producto interno es como sigue

$$\|x\| = \sqrt{\langle x, x \rangle}.$$

Definición 3. Un espacio lineal normado X se dice *completo* si cada secuencia de Cauchy en el espacio X converge a un vector en el espacio X . Un espacio lineal completo normado se llama *espacio de Banach*.

Recordemos que una sucesión fundamental o secuencia de Cauchy es una secuencia de números $\{x_n\} \in X$ que verifica el criterio de Cauchy, es decir, para cualquier $\epsilon > 0$ existe un número N tal que

$$\|x_n - x_m\| < \epsilon, \text{ mín}(m, n) > N.$$

Definición 4 ([38, p. 165]). Un espacio lineal completo H con producto interno se llama *espacio de Hilbert*.

Un sistema de vectores $\{x_n\} \subset R$ diferentes de cero de un espacio lineal X se llama *ortogonal* cuando

$$\langle x_n, x_m \rangle = 0 \text{ para cualquier } n \neq m.$$

Si los vectores $\{x_n\}$ forman un sistema ortogonal, entonces son linealmente independientes, es decir, para cualquier $n \in \mathbb{N}$ la combinación lineal

$$a_1x_1 + a_2x_2 + \dots + a_nx_n = 0,$$

implica que

$$\langle a_1x_1 + \dots + a_nx_n, x_m \rangle = a_m \langle x_m, x_m \rangle = 0,$$

con lo cual resulta que $a_m = 0$ para cualquier $m = 1, 2, \dots, n$.

Un sistema ortogonal $\{x_n\}$ completo se llama *base ortogonal*. Además, si la norma de cada elemento es 1, el sistema $\{x_n\}$ se llama *base ortonormal*, es decir,

$$\langle x_n, x_m \rangle = \begin{cases} 0 & \text{para } n \neq m, \\ 1 & \text{para } n = m. \end{cases}$$

La introducción de los espacios de dimensión infinita generó un gran avance en el estudio de problemas de la física-matemática. Esto permitió generalizar algunas propiedades de los espacios Euclídeos de dimensión finita. Un espacio de Hilbert es una especie de espacio Euclídeo de dimensión infinita [3, 39].

De esta manera, dados $x \in H$ y los números $c_k = \langle x, h_k \rangle$, donde $\{h_k\}$ es un sistema ortonormal completo, entonces la serie $\sum_k c_k^2 = \langle x, x \rangle$ es convergente para cualquier $x \in H$. Para cualquier secuencia de números $\{c_k\}$ que satisfacen

$$\sum_k c_k^2 < \infty,$$

existe un elemento $x \in H$ tal que

$$\begin{aligned} c_k &= \langle x, h_k \rangle, \\ \sum_k c_k^2 &= \langle x, x \rangle. \end{aligned}$$

Un ejemplo de espacio de Hilbert es el espacio $\mathcal{L}_2(G)$, como se muestra a continuación.

1.9.2.1. Espacio de funciones $\mathcal{L}_2(G)$

El espacio de funciones \mathcal{L}_2 se considera en la mecánica cuántica porque las funciones de onda que son cuadrado integrables tienen una interpretación física en términos de probabilidades. Además este espacio es un ejemplo de un espacio de Hilbert, por lo cual se pueden ocupar las propiedades del espacio lineal y de completitud para representar estados cuánticos. Sea $G \subseteq \mathbb{R}^n$ una región abierta, entonces el espacio de funciones $\mathcal{L}_2(G)$ se define como el conjunto de todas las funciones f , para las cuales $|f(x)|^2$ es integrable en la región G .

La siguiente propiedad demuestra que el espacio $\mathcal{L}_2(G)$ es un espacio lineal [64, p. 12]:

- Sean $f, g \in \mathcal{L}_2(G)$ y sean $\mu, \lambda \in \mathbb{F}$, entonces

$$|\lambda f + \mu g|^2 \leq 2|\lambda|^2 |f|^2 + 2|\mu|^2 |g|^2,$$

por lo tanto cualquier combinación lineal de f y g pertenece a $\mathcal{L}_2(G)$. Esto da pie a establecer la desigualdad de Cauchy-Buniakowski [64, p. 12], la cual establece que si $f, g \in \mathcal{L}_2(G)$, entonces

$$\left| \int_G f(x) g(x) dx \right| \leq \left(\int_G |f(x)|^2 dx \right)^{\frac{1}{2}} \left(\int_G |g(x)|^2 dx \right)^{\frac{1}{2}}.$$

Sean $f, g \in \mathcal{L}_2(G)$, y $\lambda \in \mathbb{F}$, por lo cual resulta que $|f| + \lambda|g| \in \mathcal{L}_2(G)$, entonces

$$\begin{aligned} 0 &\leq \int_G (|f(x)| + \lambda|g(x)|)^2 dx \\ &= \int_G |f(x)|^2 dx + 2\lambda \int_G |f(x)g(x)| dx + \lambda^2 \int_G |g(x)|^2 dx, \end{aligned}$$

para que la desigualdad se cumpla el discriminante de esta forma cuadrática tiene que satisfacer

$$\left[\int_G |f(x)g(x)| dx \right]^2 - \int_G |f(x)|^2 dx \int_G |g(x)|^2 dx \leq 0,$$

de donde se demuestra la desigualdad.

Si $f \in \mathcal{L}_2(G)$ y G es una región con frontera, entonces la función f es integrable en G . Esto se demuestra a partir de la desigualdad de Cauchy-Buniakowski tomando $g \equiv 1$, es decir,

$$\left| \int_G f(x) dx \right| \leq \left(\int_G |f(x)|^2 dx \right)^{\frac{1}{2}} \left(\int_G dx \right)^{\frac{1}{2}} < \infty,$$

con lo cual se concluye que $\int_G f(x) dx < \infty$, como se quería demostrar.

Dotemos al espacio $\mathcal{L}_2(G)$ con un producto interno definido por $\langle f, g \rangle := \int_G f(x) \overline{g(x)} dx$. Con base en este producto inducimos una norma

$$\|f\|^2 := \langle f, f \rangle = \int_G |f(x)|^2 dx,$$

con la cual el espacio $\mathcal{L}_2(G)$ se convierte en un espacio lineal normado.

En términos de la norma y el producto interno, la desigualdad de Cauchy-Buniakowski se puede expresar como

$$|\langle f, g \rangle| \leq \|f\| \|g\|, \quad f, g \in \mathcal{L}_2(G),$$

de esta desigualdad resulta la desigualdad de Minkowski [64, p. 13] que viene dada por la siguiente expresión

$$\|f + g\| \leq \|f\| + \|g\|, \quad f, g \in \mathcal{L}_2(G).$$

Para expresar la completitud en el espacio $\mathcal{L}_2(G)$ se utiliza el teorema de Riesz-Fischer, el cual establece que si la secuencia de funciones $f_k \in \mathcal{L}_2(G)$, $k = 1, 2, 3, \dots$, es una secuencia de Cauchy en $\mathcal{L}_2(G)$, entonces existe una función $f \in \mathcal{L}_2(G)$ tal que $\|f_k - f\| \rightarrow 0$ conforme $k \rightarrow \infty$.

1.9.3. Operadores lineales

En cierto momento del desarrollo del análisis funcional fue necesario abordar los problemas físicos con la teoría general de operadores lineales, donde en mecánica cuántica los operadores autoadjuntos desempeñan una gran importancia.

Un *operador lineal* es un mapeo entre dos espacios lineales X e Y , es decir,

$$A : X \rightarrow Y,$$

el cual satisface las siguientes condiciones

1. Sea $A(x + y) = Ax + Ay$, donde $x, y \in X$.
2. $A(\alpha x) = \alpha Ax$, donde $\alpha \in \mathbb{F}$ es un escalar.

El conjunto $\text{Dom}(A)$ se llama *dominio de definición del operador* A . El elemento $y = Ax$ se denomina *imagen del elemento* x . De igual manera, la totalidad de todas las imágenes se llama la imagen del operador, denotado por $\text{Im}A$, [65].

Un operador $A : X \rightarrow Y$ se dice continuo cuando toda secuencia convergente $X \ni x_k \rightarrow x \in X$ tiene imágenes $Ax_k \rightarrow Ax$ conforme $k \rightarrow \infty$ tal que $Ax \in Y$.

Sean X y Y espacios lineales normados con las normas $\|\cdot\|_X$ y $\|\cdot\|_Y$. Un operador $A : X \rightarrow Y$ se dice que es acotado si existe un número $c > 0$, tal que la desigualdad

$$\|Ax\|_Y \leq c \|x\|_X$$

se cumple para cada $x \in \text{Dom}(A) \subseteq X$, [64].

1.9.3.1. Espectro de operadores lineales

En la teoría y aplicaciones de operadores es esencial abordar el concepto de espectro de un operador. Se dice que λ es un punto regular cuando $A - \lambda I$ es invertible, donde I es el operador unidad. Y el operador $(A - \lambda I)^{-1}$ no es acotado para el caso de dimensión infinita. Un operador A se llama invertible cuando para cualquier $y \in Y$ la ecuación $Ax = y$ tiene solución $x \in \text{Dom}(A)$ única [38]. Sea λ un punto regular del operador A , entonces el operador $(A - \lambda I)^{-1}$ se llama resolvente del operador de A .

Sea $A : X \rightarrow Y$ un operador lineal con dominio $\text{Dom}(A) \subseteq X$. Un número $\lambda \in \mathbb{C}$ se llama valor propio del operador A y x es la función propia correspondiente cuando la ecuación

$$Ax = \lambda x, \quad x \in \text{Dom}(A)$$

se satisface. El conjunto de todos los valores propios se llama espectro puntual del operador A . El espectro discreto es parte de un conjunto de números λ conocido como el espectro de un operador, el cual se divide en los siguientes conjuntos disjuntos (ver *e.g.*, [38],[55]):

1. *Espectro puntual*, $\sigma_p(A)$: Es el conjunto de todos los valores propios de A .
2. *Espectro continuo*, $\sigma_c(A)$: Es el conjunto de valores de λ para los cuales $(A - \lambda I)^{-1}$ existe y es acotado, y su dominio es denso.
3. *Espectro residual*, $\sigma_r(A)$: Aquellos valores de λ para los cuales el operador $(A - \lambda I)^{-1}$ existe y su dominio no es denso.

Por tanto, el espectro de A denotado por $\sigma(A)$, está conformado por:

$$\sigma(A) = \sigma_p(A) \cup \sigma_c(A) \cup \sigma_r(A).$$

Otra subclasificación del espectro [43], se basa en la multiplicidad $m_A(\lambda)$ de sus valores propios:

1. *Espectro discreto*, $\sigma_d(A)$: El cual se define como $\sigma_d(A) := \{\lambda \in \sigma_p(A) : \lambda \text{ es punto aislado de } \sigma(A) \text{ y } m_A(\lambda) < \infty\}$.
2. *Espectro esencial*, $\sigma_{ess}(A)$: Este se construye como $\sigma_{ess}(A) := \sigma(A) \setminus \sigma_d(A)$.

La teoría espectral encuentra la mayor parte de sus aplicaciones en los operadores auto-adjuntos, los cuales se describen a continuación.

1.9.3.2. Operador auto-adjunto y Hermitiano

Definición 5 ([57, p. 142]). Dado un operador lineal $A : \text{Dom}(A) \subset H \rightarrow H$ con $\overline{\text{Dom}(A)} = H$, se define su operador adjunto A^* como el operador lineal $A^* : \text{Dom}(A^*) \subset H \rightarrow H$ tal que:

- $\text{Dom}(A^*) = \{x \in H : \exists g \in H \text{ de modo que } (x, Ay) = (g, y), \forall y \in \text{Dom}(A)\} \neq \emptyset$.
- $A^*x = g, \forall x \in \text{Dom}(A^*)$.

Definición 6 ([57, p. 143]). Dado un operador lineal $A : \text{Dom}(A) \subset H \rightarrow H$ con $\overline{\text{Dom}(A)} = H$, se dice que es un operador Hermitiano o simétrico si se cumple

$$(Ax, y) = (x, Ay), \quad \forall x, y \in \text{Dom}(A) \iff A \subseteq A^*.$$

Definición 7 ([57, p. 143]). Dado un operador lineal A , se define como operador autoadjunto si $A = A^*$.

Proposición 8 ([57, p. 143]). *Todo operador autoadjunto es Hermitiano y cerrado.*

Proposición 9 ([57, p. 143]). *Un operador autoadjunto A es acotado si $\text{Dom}(A) = H$.*

Teorema 10 ([64, p. 26]). *Si el operador A es Hermitiano, todos sus valores propios son reales (no-negativos) y sus funciones propias, correspondientes a diferentes valores propios son ortogonales.*

Teorema 11 ([64, p. 26]). *Las funciones propias del operador A se pueden escoger siempre como reales.*

Por las definiciones anteriores los operadores de Schrödinger actuando en funciones del espacio funciones $\mathcal{L}_2(G)$ pueden considerarse auto-adjuntos considerando las condiciones de frontera apropiadas y un subespacio de funciones apropiado.

1.10. Contenido de la tesis

En el Capítulo 1 se aborda una pequeña introducción sobre la mecánica cuántica para trabajar con guías de ondas cuánticas, las cuales se muestra su desarrollo en el estado del arte y su representación física en materiales semiconductores. Se puede ver también la ecuación que aborda estas guías, que es la ecuación de Schrödinger, para esto se requiere de notaciones importantes del análisis funcional que sirvan de fundamento matemático. Por último, se muestra la motivación y el planteamiento del problema para el análisis adiabático de guías de ondas cuánticas.

En el Capítulo 2 se aborda el problema de Sturm-Liouville, así como las propiedades espectrales del operador de Schrödinger unidimensional que se trabajará a lo largo de esta tesis para tener un conocimiento preciso de las propiedades de este operador. Se trabaja con la solución de la ecuación de Schrödinger unidimensional independiente del tiempo para la propagación de ondas cuánticas donde el núcleo de la guía de ondas será representado por un pozo de potencial para obtener los estados ligados y los estados de dispersión. Para los estados ligados se obtiene la ecuación de dispersión, así como los valores propios y las funciones propias correspondientes. Este problema unidimensional, con sus respectivos resultados nos da el fundamento para trabajar en el Capítulo 3 el método numérico SPPS y representar la solución general de la ecuación de Sturm-Liouville asociada al problema unidimensional, así como la ecuación de dispersión en expresiones analíticas en forma de series de potencias del parámetro espectral.

En el Capítulo 3 se aborda el método SPPS, que es un método exacto para resolver problemas de Sturm-Liouville con valores en la frontera. En este caso, sin embargo, se trata de la ecuación de

Schrödinger unidimensional sometida a condiciones de frontera de continuidad, dando como resultado dos soluciones linealmente independientes en términos del parámetro espectral λ y de las potencias formales que están definidas en forma recursiva a través de un procedimiento de integración. De esta manera se presenta la implementación numérica del método SPPS en Mathematica 11.0 con ejemplos de estudio, donde la serie se trunca sin problemas gracias a su convergencia uniforme que se demuestra, y el error resultante de la serie truncada se estima.

En el Capítulo 4 se aborda una guía de ondas cuántica en la cual su estructura varía lentamente en la dirección longitudinal. Esta variación modifica al núcleo de la guía de ondas cuántica lentamente, y esta variación se puede modelar en forma cosenoidal o polinomial. Este análisis parte de un problema espectral del tipo Sturm-Liouville asociado a la ecuación de Schrödinger unidimensional, estableciendo las condiciones de frontera a partir de este fenómeno físico que depende de un parámetro que representa la variación lenta. Se utiliza la técnica de la función de Green, utilizando los resultados obtenidos de los capítulos previos, y se emplea la aproximación WKB para obtener una representación modal de las soluciones en el interior de la guía.

En el Capítulo 5 se buscan soluciones de la ecuación no-homogénea de Schrödinger bidimensional libre de unidades para una estructura tipo guía de ondas cuyo núcleo tiene un grosor que cambia lentamente de acuerdo con un par de funciones expresadas en términos de un pequeño parámetro, las cuales describen las fronteras del núcleo de la guía. En estas fronteras se establecen condiciones de continuidad de la solución de la ecuación de Schrödinger y de su derivada normal. La solución se reduce a la formulación de un problema espectral auxiliar y que incluye las características verticales de la guía de ondas, el cual se expresa en términos de una ecuación tipo Sturm-Liouville con condiciones en la frontera apropiadas. Con base en las funciones propias normalizadas del problema espectral auxiliar y de sus correspondientes valores propios, se obtiene una representación para las soluciones de la ecuación de Schrödinger bidimensional cuyas fronteras cambian lentamente. Finalmente, se muestra la aplicación de estas soluciones a algunos ejemplos de estudio.

En el Capítulo 6, se aborda las conclusiones generales de este trabajo, abarcando las conclusiones particulares de cada capítulo, así como su relación para obtener la propagación de ondas cuánticas en guías de ondas.

En el Capítulo 7 se muestran los congresos nacionales a los que se asistieron a lo largo del desarrollo de esta tesis, así como la redacción de un artículo para un congreso nacional.

Por último, en el Capítulo 8 se aborda una propuesta de trabajo a futuro de ésta tesis.

Capítulo 2

Propagación de ondas cuánticas en guías de ondas estratificadas

2.1. Propiedades del operador de Sturm-Liouville

Entre 1836 y 1837 los matemáticos franceses Jacques Charles Francois Sturm y Joseph Liouville publicaron una serie de documentos sobre ecuaciones diferenciales lineales ordinarias de segundo orden con problemas de valores en la frontera, generando un gran impacto en las matemáticas del siglo XIX, debido a esto su trabajo recibe su nombre el cual se conoce desde entonces como *teoría de Sturm-Liouville* [68].

La teoría de Sturm-Liouville es requerible para trabajar con problemas con valores en la frontera, ya que para abordar un problema físico es necesaria la ecuación que describe este proceso y las condiciones de frontera que especifican el comportamiento en el límite de la región donde éste se desarrolla. El operador elíptico $-\nabla \cdot p \nabla + q$ en \mathbb{R}^n , donde ∇ representa el operador gradiente, aparece frecuentemente en los problemas de la física matemática que están relacionados con la electrodinámica y la mecánica cuántica, donde la versión unidimensional de este operador se conoce como el *operador de Sturm-Liouville*, expresado de la siguiente manera

$$S := -\frac{d}{dx}p\frac{d}{dx} + q, \quad a < x < b, \quad (2.1.1)$$

donde los coeficientes p y q deben satisfacer ciertas condiciones de suavidad, las cuales en el caso regular son

$$p \in \mathcal{C}^1([a, b]), \quad p(x) > 0 \text{ en } [a, b], \quad (2.1.2a)$$

$$q \in \mathcal{C}([a, b]), \quad q(x) \geq 0 \text{ en } [a, b]. \quad (2.1.2b)$$

Asociadas a los puntos extremos del intervalo (a, b) se especifican condiciones en la frontera de la

manera siguiente

$$h_1 u(a) - h_2 u'(a) = 0, \quad H_1 u(b) + H_2 u'(b) = 0, \quad (2.1.3a)$$

$$h_1 \geq 0, h_2 \geq 0, \quad h_1 + h_2 > 0, \quad H_1 \geq 0, H_2 \geq 0, \quad H_1 + H_2 > 0. \quad (2.1.3b)$$

El dominio del operador S , denotado por $\text{Dom}(S)$, consiste de funciones $u \in \mathcal{C}^2(a, b) \cap \mathcal{C}^1([a, b])$ tales que $Su \in \mathcal{L}^2(a, b)$, las cuales satisfacen las condiciones de frontera (2.1.3), [6].

Consideremos el siguiente problema

$$Su = \lambda u, \quad (2.1.4)$$

donde λ representa un parámetro, en general, complejo. Aquellas soluciones no triviales $u \in \text{Dom}(S)$ se les conocen como funciones propias del operador S , y los valores de λ asociados con tales soluciones se llaman valores propios del operador S . Algunas propiedades de las funciones propias y valores propios del operador S son [64, p. 270-274]:

1. El operador S es real, es decir, $\overline{Su} = S\bar{u}$, para $u \in \text{Dom}(S)$, donde \bar{u} representa el complejo conjugado de la función u .
2. El conjunto de valores propios del problema (2.1.3)-(2.1.4) es a lo más contable y no tiene puntos límite finitos.
3. Los valores propios del problema (2.1.3)-(2.1.4) son no-negativos y las funciones propias correspondientes para diferentes valores propios son ortogonales en $\mathcal{L}^2(a, b)$.
4. Las funciones propias del problema(2.1.3)-(2.1.4) se pueden elegir siempre como reales.
5. El sistema de funciones propias del problema(2.1.3)-(2.1.4) es completo en $\mathcal{L}^2(a, b)$.
6. Cada función $v \in \text{Dom}(S)$ se puede expandir como una serie de Fourier regularmente convergente que involucra las funciones propias normalizadas $u_k(x)$ del problema (2.1.3)-(2.1.4), es decir,

$$v(x) = \sum_{k=1}^{\infty} (v, u_k) u_k(x).$$

7. Si $v \in \text{Dom}(S)$, entonces la serie anterior se puede diferenciar una vez término a término, lo cual da la serie

$$\sum_{k=1}^{\infty} (v, u_k) \frac{du_k(x)}{dx}$$

que converge a $v'(x)$ en $\mathcal{L}^2(a, b)$.

Un caso particular del operador S es cuando el coeficiente $p \equiv 1$ en $[a, b]$, lo cual conduce al operador unidimensional estacionario de Schrödinger, el cual tiene amplias aplicaciones en la mecánica

cuántica. En este caso, el operador S toma el papel del operador de energía y el coeficiente q está asociado con una función potencial V definida como

$$V(x) = \begin{cases} q(x), & x \in [a, b], \\ +\infty, & x \notin [a, b]. \end{cases}$$

Las propiedades anteriores del operador de Sturm-Liouville son heredadas directamente de las propiedades del operador elíptico $L := -\nabla \cdot p \nabla + q$ en \mathbb{R}^n . Estas propiedades se desprenden de considerar el siguiente problema con valores en la frontera

$$Lu = \lambda u, \quad \text{en } \Omega, \tag{2.1.5a}$$

$$\alpha u + \beta \frac{\partial u}{\partial \mathbf{n}} = v, \quad \text{en } \partial\Omega, \tag{2.1.5b}$$

donde λ es un parámetro, y $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ es una región del espacio. Los coeficientes p y q del operador L satisfacen las propiedades

$$\begin{aligned} p &\in \mathcal{C}^1(\overline{\Omega}), \quad p(x) > 0 \text{ en } \overline{\Omega}, \\ q &\in \mathcal{C}(\overline{\Omega}), \quad q(x) \geq 0 \text{ en } \overline{\Omega}, \end{aligned}$$

similares a las propiedades del operador de Sturm-Liouville, mientras que los coeficientes de la condición en la frontera $\alpha, \beta, v \in \mathcal{C}(\partial\Omega)$ satisfacen $\alpha(x) \geq 0, \beta(x) \geq 0$, de modo que $\alpha(x) + \beta(x) > 0, x \in \partial\Omega$, por lo cual α y β no se anulan simultáneamente en la frontera $\partial\Omega$ de la región $\Omega \subset \mathbb{R}^n$. Definamos el dominio $\text{Dom}(L)$ del operador L como el conjunto de funciones $u \in \mathcal{C}^2(\Omega) \cap \mathcal{C}^1(\overline{\Omega})$ tal que $Lu \in \mathcal{L}^2(\Omega)$, las cuales satisfacen las condiciones en frontera (2.1.5b). Problemas elípticos de la forma (2.1.5) permiten analizar la propagación de ondas en medios limitados, así como en medios guiados; la vibración de membranas que delimitan volúmenes en el espacio; entre otras muchas aplicaciones [14].

Cabe mencionar que para el caso general en \mathbb{R}^n , los valores propios del problema (2.1.5a) pueden ser numerados de acuerdo con el orden de sus magnitudes

$$0 \leq \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots, \quad \lambda_k \rightarrow \infty, k \rightarrow \infty,$$

repetiendo λ_k en esta sucesión tantas veces como su multiplicidad. Sin embargo, en el caso unidimensional los valores propios del problema regular de Sturm-Liouville (2.1.3)-(2.1.4) son simples y se pueden enumerar de la siguiente manera

$$0 < \lambda_1 < \lambda_2 < \dots, \quad \lambda_k \rightarrow \infty, k \rightarrow \infty.$$

Esta propiedad es consecuencia del siguiente teorema.

Teorema 12 ([64, p. 277]). *Cada valor propio del problema (2.1.3)-(2.1.4) es simple.*

En particular, es posible que $\lambda = 0$ sea un valor propio asociado a una función propia no trivial. El siguiente resultado muestra las condiciones necesarias y suficientes para que esto ocurra.

Lema 13 ([64, p. 260]). *Para que $\lambda = 0$ sea un valor propio del problema (2.1.5) es necesario y suficiente que $q \equiv 0$ y $\alpha \equiv 0$. Entonces $u_0 = \text{const}$ es la función propia correspondiente.*

En el problema regular de Sturm-Liouville para que $\lambda = 0$ sea un valor propio es necesario y suficiente que $q \equiv 0$, y $h_1 = 0$ y $H_1 = 0$.

Corolario 14 ([64, p. 260]). *Sea $u \in \text{Dom}(L)$ y $f \in C(\Omega) \cap \mathcal{L}^2(\Omega)$. La solución clásica del problema con valores en la frontera*

$$Lu = f, \quad \text{en } \Omega,$$

es única en la clase $C^2(\Omega) \cap C^1(\overline{\Omega})$ si y sólo si $q \neq 0$ ó $\alpha \neq 0$.

2.2. Propiedades espectrales del operador de Schrödinger unidimensional en el eje real

Los resultados anteriores se desprenden de operadores considerados en regiones acotadas del espacio o de la recta real, sin embargo algunos operadores pueden estar definidos en regiones no acotadas. En este caso, es necesario desarrollar la teoría espectral de tales operadores, en particular para el operador estacionario de Schrödinger definido en el eje real, el cual será ampliamente utilizado en este trabajo. Para empezar con este estudio se considerará el operador de Schrödinger unidimensional [13, p. 50] dado de la siguiente manera

$$\mathcal{H}y := -y'' + v(x)y,$$

donde \mathcal{H} es el operador de energía de una partícula con un grado de libertad sometida a un potencial $v(x)$, el cual se representa por una función real-valuada, medible y acotada localmente; en este operador $y \in C_0^\infty(\mathbb{R})$ representa la función de onda. A continuación, se anunciarán algunos teoremas y proposiciones que especifican las propiedades espectrales del operador de Schrödinger \mathcal{H} .

Teorema 15 ([13, p. 50]). *Asuma que v satisface*

$$v(x) \geq -Q(x), \quad x \in \mathbb{R},$$

donde Q es una función par positiva y continua en \mathbb{R} que es no decreciente para $x \geq 0$ y que satisface

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{Q(2x)}} = \infty,$$

entonces \mathcal{H} es esencialmente auto-adjunto.

Es bien sabido que los operadores auto-adjuntos tienen espectros reales, los cuales pueden asociarse directamente con algunas propiedades físicas de los sistemas. Por ejemplo, para el operador de energía \mathcal{H} el espectro representa los valores de energía que puede tener una partícula cuántica, que para los estados ligados y de dispersión se espera que la energía sea real. Al considerar el operador de Schrödinger con un potencial creciente, se deriva la discretitud de su espectro. El comportamiento asintótico de las funciones propias conforme $x \rightarrow \infty$, y algunos teoremas de los ceros de las funciones propias se muestran en los siguientes resultados.

Teorema 16 ([13, p. 57]). *Asuma que $v(x) \rightarrow +\infty$ conforme $|x| \rightarrow +\infty$, entonces \mathcal{H} tiene un espectro discreto o más precisamente, hay un sistema ortonormal, completo en $\mathcal{L}_2(\mathbb{R})$, de funciones propias f_k , ($k = 1, 2, 3, \dots$) de \mathcal{H} cuyos valores propios λ_k tienden a $+\infty$ conforme $k \rightarrow \infty$.*

Corolario 17 ([13, p. 60]). *Si $v(x) \geq 0$ para $x \in [a, b]$, entonces cualquier solución y no-nula de la ecuación $-y'' + v(x)y = 0$ tiene a lo más un cero en $[a, b]$.*

Corolario 18 ([13, p. 64]). *Si $v(x) \rightarrow +\infty$ conforme $x \rightarrow +\infty$, entonces cualquier función propia generalizada del operador $\mathcal{H} = -\frac{d^2}{dx^2} + v(x)$ pertenece a $\mathcal{L}_2(\mathbb{R})$.*

Proposición 19 ([13, p. 64]). *Si y es una solución no trivial de $-y'' + v(x)y = 0$, donde v satisface $v(x) \rightarrow +\infty$ conforme $|x| \rightarrow +\infty$, entonces $y(x)$ tiene un número finito de ceros (posiblemente ninguno en absoluto).*

Corolario 20 ([13, p. 64]). *Cada función propia de \mathcal{H} tiene un número finito de ceros.*

Proposición 21 ([13, p. 64]). *Si y_1, y_2 son funciones propias con los valores propios λ_1, λ_2 , respectivamente, y si n_1, n_2 representan el número de ceros de y_1, y_2 , respectivamente, entonces $\lambda_2 > \lambda_1$ implica que $n_2 > n_1$.*

Proposición 22 ([13, p. 65]). *Si λ es un valor propio de \mathcal{H} entonces precisamente una función propia le corresponde (hasta por un factor constante).*

Teorema 23 ([13, p. 66]). *Organice las funciones propias $-y'' + v(x)y = 0$ de tal forma que las desigualdades*

$$\begin{aligned} n_0 &< n_1 < \dots < n_k < \dots, \\ \lambda_0 &< \lambda_1 < \dots < \lambda_k < \dots, \end{aligned}$$

se cumplan. Entonces y_k tiene precisamente k ceros, es decir, en la desigualdad $n_0 < n_1 < \dots < n_k < \dots$ tenemos $n_k = k$.

2.3. Problema espectral unidimensional

El problema de propagación de ondas cuánticas en una guía de ondas estratificada con variaciones lentas en su estructura se describe en términos de una ecuación de Schrödinger estacionaria

tridimensional y de un parámetro pequeño, pero su análisis se basa en una ecuación tipo Schrödinger unidimensional escrita en términos de tal parámetro. Para su análisis, primero consideramos una guía de ondas sin variaciones en su estructura en un sistema rectangular de coordenadas $(x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{R}^3$, la cual se compone de tres estratos apilados a lo largo del eje x_3 y estos estratos dividen la guía de ondas en tres regiones denotadas como I = $(-\infty, -a)$, II = $(-a, a)$ y III = (a, ∞) como se observa en la Figura 1.8.2.

En esta guía de ondas cuántica la dirección de propagación de los modos guiados corresponde con el eje x_2 , mientras que en el eje x_3 se tienen los estratos que establecen las condiciones de frontera que hacen que las ondas se propaguen en el núcleo, representado por la región II de la figura anterior.

Consideremos la ecuación unidimensional de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx_3^2} \psi(x_3) + U(x_3) \psi(x_3) = E \psi(x_3), \quad x_3 \in \mathbb{R}, \quad (2.3.1)$$

donde \hbar es la constante de Planck reducida, E es la energía en el estado estacionario de una partícula cuántica de masa m interactuando con un campo de fuerzas representado por la función potencial U , que se asume real-valuada, y ψ representa la amplitud de probabilidad de tal partícula. Cuando se considera la propagación en los medios cristalinos, tales como los semiconductores, se debe tomar $m = m^*$, donde m^* representa la masa efectiva del portador de carga propagándose en el cristal. Esta ecuación puede surgir después de aplicar el método de separación de variables o la transformada de Fourier con respecto a algunas coordenadas espaciales a un problema tipo Schrödinger en varias dimensiones. Note que la ecuación considera las unidades físicas del problema, sin embargo conviene considerar una ecuación de Schrödinger libre de unidades a partir del siguiente cambio de variable

$$z := \frac{\sqrt{2m}}{\hbar} x_3. \quad (2.3.2)$$

Cabe mencionar que este cambio de variable permite escalar las dimensiones del sistema cuántico original para su mejor representación numérica. Sin embargo, después de analizar los problemas y de obtener los resultados buscados es necesario regresar a las coordenadas originales empleando la relación inversa.

Con la nueva variable z la ecuación de Schrödinger toma la forma libre de unidades siguiente

$$S u(z) := -\frac{d^2}{dz^2} u(z) + V(z) u(z) = E u(z), \quad z \in \mathbb{R}, \quad (2.3.3)$$

donde S es un operador diferencial, E es el parámetro espectral, y

$$u(z) := \psi \left(\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} z \right).$$

En esta ecuación la función potencial V en el nuevo sistema de coordenadas se define como una

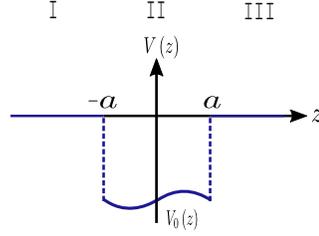


Figura 2.3.1. Representación del pozo de potencial de la ecuación de Schrödinger (2.3.3).

función real-valuada de la siguiente manera

$$V(z) := U\left(\frac{\hbar}{\sqrt{2m}}z\right).$$

Asumamos que el potencial V define un pozo de potencial regular de acuerdo con los tres estratos de la estructura de la guía de ondas, ver Figura 2.3.1, como sigue

$$V(z) = \begin{cases} 0, & -\infty < z < -a, \\ V_0(z), & -a < z < a, \\ 0, & a < z < \infty, \end{cases} \quad (2.3.4)$$

donde $V_0 \in \mathcal{L}^\infty(-a, a)$ es una función real-valuada tal que $V_0(z) \leq 0$ para $x \in (-a, a)$, y $2a$ representa el ancho del pozo de potencial. En el sistema de coordenadas original el ancho del pozo es 2ρ , donde ρ y a se relacionan de la siguiente manera: $a = \sqrt{2m\rho}/\hbar$.

Como la función $V(z)$ de la ecuación (2.3.3) tiene singularidades de salto en $z = \pm a$, entonces las expresiones

$$[u(z)]_{z=\pm a} = 0, \quad [u'(z)]_{z=\pm a} = 0, \quad (2.3.5)$$

son las condiciones de frontera que gobiernan a la amplitud de probabilidad en las discontinuidades del potencial.

El dominio del operador S como un operador no acotado en el espacio de Hilbert $H = \mathcal{L}^2(\mathbb{R})$, denotado por $\text{Dom}(S)$, se define como

$$\text{Dom}(S) = \{u \in H : u \in \mathcal{C}^2(\mathbb{R} \setminus \{-a, a\}) \cap \mathcal{C}^1(\mathbb{R}), Su \in H, u \text{ satisface (2.3.5)}\}.$$

Si $u \in \text{Dom}(S)$, entonces u satisface las condiciones asintóticas en el infinito

$$\lim_{|z| \rightarrow \infty} u(z) = 0.$$

El espacio de Hilbert $H = \mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ está dotado de la norma

$$\|u(z)\|_H := \left(\int_{-\infty}^{\infty} |u(z)|^2 dz \right)^{\frac{1}{2}}.$$

Como V es real-valuado, entonces S es auto-adjunto en el espacio de Hilbert H , lo cual implica que el espectro del operador S es real, el cual consiste de valores propios negativos en el intervalo de la recta real de $(\inf V_0, 0)$ y una parte continua del espectro en $[0, \infty)$, [13].

Por tanto, consideremos el siguiente problema espectral unidimensional

$$Su(z) := \left(-\frac{d^2}{dz^2} + V(z) \right) u(z) = Eu(z), \quad -\infty < z < \infty, \quad (2.3.6)$$

donde S es el operador diferencial definido anteriormente, y el parámetro de la energía E se toma como un parámetro espectral real representado en la forma $E = -\beta^2$, donde $\beta > 0$ es un parámetro. El problema espectral (2.3.6) será un *problema auxiliar* para el análisis adiabático de la guía de ondas considerada.

Para obtener las funciones propias del operador S obtendremos las soluciones $\varphi_I(z)$, $\varphi_{II}(z)$ y $\varphi_{III}(z)$ de la ecuación diferencial $Su = Eu$ en los estratos I, II y III de la guía de ondas, los cuales deben acoplarse en $z = a$ y $z = -a$ de acuerdo con las condiciones de frontera (2.3.5), y finalmente se aplican las condiciones asintóticas en el infinito a las soluciones resultantes. En este proceso resultará una ecuación de dispersión que definirá los valores propios del operador S .

De acuerdo con lo anterior, en la región I = $(-\infty, -a)$ la ecuación de Schrödinger se convierte en

$$-\frac{d^2}{dz^2} \varphi_I(z) = -\beta^2 \varphi_I(z), \quad -\infty < z < -a, \quad (2.3.7)$$

de modo que un sistema fundamental de soluciones de esta ecuación diferencial es el siguiente

$$\left\{ e^{\beta(z+a)}, e^{-\beta(z+a)} \right\}.$$

Se puede ver que el Wronskiano de estas soluciones es diferente de cero debido a la independencia lineal

$$W = \begin{vmatrix} e^{\beta(z+a)} & e^{-\beta(z+a)} \\ \beta e^{\beta(z+a)} & -\beta e^{-\beta(z+a)} \end{vmatrix} = -2\beta \neq 0.$$

Por tanto, una solución general en la región I es

$$\varphi_I(z) = C_1 e^{\beta(z+a)} + C_2 e^{-\beta(z+a)}, \quad (2.3.8)$$

donde C_1 y C_2 son constantes arbitrarias.

En la región II = $(-a, a)$ la ecuación de Schrödinger se convierte en

$$\left(-\frac{d^2}{dz^2} + V_0(z)\right) \varphi_{\text{II}}(z) = -\beta^2 \varphi_{\text{II}}(z), \quad -a < z < a. \quad (2.3.9)$$

Denotemos un par de soluciones linealmente independientes de esta ecuación como

$$\varphi_1(z; \beta), \varphi_2(z; \beta).$$

Su correspondiente Wronskiano debe satisfacer la siguiente relación

$$W[\varphi_1, \varphi_2](z; \beta) = \begin{vmatrix} \varphi_1(z; \beta) & \varphi_2(z; \beta) \\ \varphi_1'(z; \beta) & \varphi_2'(z; \beta) \end{vmatrix} \neq 0,$$

en al menos un punto $z \in (-a, a)$. Note que el valor del Wronskiano también dependerá del parámetro β , por lo que en algunos valores de β la independencia lineal se perderá. Estos valores corresponderán a los valores propios del operador S . Por tanto, una solución general en la región II es

$$\varphi_{\text{II}}(z) = D_1 \varphi_1(z) + D_2 \varphi_2(z), \quad (2.3.10)$$

donde D_1, D_2 son constantes arbitrarias.

Por último, en la región III = (a, ∞) la ecuación de Schrödinger se convierte en

$$-\frac{d^2}{dz^2} \varphi_{\text{III}}(z) = -\beta^2 \varphi_{\text{III}}(z), \quad a < z < \infty, \quad (2.3.11)$$

de modo que un sistema fundamental de soluciones de esta ecuación diferencial es el siguiente

$$\left\{ e^{\beta(z-a)}, e^{-\beta(z-a)} \right\}.$$

Por tanto, una solución general en la región III es

$$\varphi_{\text{III}}(z) = C_3 e^{\beta(z-a)} + C_4 e^{-\beta(z-a)}, \quad (2.3.12)$$

donde C_3 y C_4 son constantes arbitrarias.

Ahora al aplicar las condiciones de continuidad en el punto $z = -a$

$$\begin{aligned} \varphi_{\text{I}}(-a) &= \varphi_{\text{II}}(-a), \\ \varphi_{\text{I}}'(-a) &= \varphi_{\text{II}}'(-a), \end{aligned}$$

se obtiene un sistema de ecuaciones lineales con C_1 y C_2 como incógnitas

$$\begin{aligned} C_1 + C_2 &= \varphi_{\text{II}}(-a), \\ \beta C_1 - \beta C_2 &= \varphi_{\text{II}}'(-a). \end{aligned}$$

La solución del sistema de ecuaciones es

$$C_1 = \frac{1}{2} \left(\varphi_{\text{II}}(-a) + \frac{1}{\beta} \varphi'_{\text{II}}(-a) \right), \quad (2.3.13)$$

$$C_2 = \frac{1}{2} \left(\varphi_{\text{II}}(-a) - \frac{1}{\beta} \varphi'_{\text{II}}(-a) \right). \quad (2.3.14)$$

Al aplicar las condiciones de continuidad en el punto $z = a$

$$\begin{aligned} \varphi_{\text{II}}(a) &= \varphi_{\text{III}}(a), \\ \varphi'_{\text{II}}(a) &= \varphi'_{\text{III}}(a), \end{aligned}$$

se obtiene un sistema de ecuaciones lineales con C_3 y C_4 como incógnitas

$$\begin{aligned} C_3 + C_4 &= \varphi_{\text{II}}(a), \\ \beta C_3 - \beta C_4 &= \varphi'_{\text{II}}(a). \end{aligned}$$

La solución del sistema de ecuaciones es

$$C_3 = \frac{1}{2} \left(\varphi_{\text{II}}(a) + \frac{1}{\beta} \varphi'_{\text{II}}(a) \right), \quad (2.3.15)$$

$$C_4 = \frac{1}{2} \left(\varphi_{\text{II}}(a) - \frac{1}{\beta} \varphi'_{\text{II}}(a) \right). \quad (2.3.16)$$

Como buscamos soluciones en $\text{Dom}(S)$ es necesario que las restricciones en las regiones I y III de la solución general satisfagan las condiciones asintóticas en el infinito. En la región I la condición asintótica en $z \rightarrow -\infty$ implica que $C_2 = 0$, es decir,

$$\varphi_{\text{II}}(-a) = \frac{1}{\beta} \varphi'_{\text{II}}(-a),$$

por lo tanto el coeficiente C_1 se escribe como $C_1 = \varphi_{\text{II}}(-a)$. De esta manera, la solución de la región I que satisface la condición asintótica $z \rightarrow -\infty$ es

$$\varphi_{\text{I}}(z) = \varphi_{\text{II}}(-a) e^{\beta(z+a)}. \quad (2.3.17)$$

Note que el valor de $\varphi_{\text{II}}(-a)$ puede elegirse arbitrariamente, por lo cual hacemos que $\varphi_{\text{II}}(-a) = 1$.

En la región III la condición asintótica en $z \rightarrow \infty$ implica que $C_3 = 0$, es decir,

$$\varphi_{\text{II}}(a; \beta) + \frac{1}{\beta} \varphi'_{\text{II}}(a; \beta) = 0, \quad (2.3.18)$$

donde se ha escrito explícitamente la dependencia con el parámetro β . A partir de este resultado se obtiene que $C_4 = \varphi_{\text{II}}(a)$. La condición (2.3.18) representa la **ecuación de dispersión** del problema espectral considerado, que es una ecuación que define los valores de β que hacen que las soluciones obtenidas pertenezcan a $\text{Dom}(S)$. Si $\beta_j > 0$ es un cero de la ecuación de dispersión, entonces

$$E_j = -\beta_j^2$$

representa un valor propio del operador S , el cual corresponde con un valor permitido de energía del sistema cuántico. Si la ecuación de dispersión tiene N ceros, estos pueden ordenarse de acuerdo con sus magnitudes como

$$0 < \beta_N < \dots < \beta_1,$$

de modo que las energías negativas del sistema se ordenan de la forma siguiente

$$\inf V_0(z) < E_1 < \dots < E_N < 0,$$

donde E_1 representa la energía del estado base, y E_n ($n = 2, \dots, N$) representan las energías de los estados excitados.

Si $\beta_j > 0$ es un cero de la ecuación de dispersión, la función propia correspondiente al valor propio $E_j = -\beta_j^2$ es

$$u_j(z) = \begin{cases} e^{\beta_j(z+a)}, & -\infty < z < -a, \\ \varphi_{\text{II}}(z; \beta_j), & -a < z < a, \\ \varphi_{\text{II}}(a; \beta_j) e^{-\beta_j(z-a)}, & a < z < \infty. \end{cases} \quad (2.3.19)$$

Entonces, la función propia normalizada se expresa como

$$\varphi_j(z) = \frac{u(z)}{\|u(z)\|_H}, \quad (2.3.20)$$

donde la norma $\|u(z)\|_H$ se calcula de acuerdo con

$$\|u(z)\|_H = \left(\int_{-a}^a |\varphi_{\text{II}}(z)|^2 dz + \frac{1}{2\beta_j} (1 + \varphi_{\text{II}}^2(a; \beta_j)) \right)^{1/2}.$$

El sistema de funciones propias $\{\varphi_j\}_{j=1}^N$ es un sistema ortonormal en H , es decir

$$(\varphi_j(z), \varphi_k(z)) = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_j(z) \overline{\varphi_k(z)} dz = \begin{cases} 1, & j = k, \\ 0, & j \neq k. \end{cases}$$

El sistema de funciones propias normalizadas $\{\varphi_j\}_{j=1}^N$ no es un sistema completo en $H = \mathcal{L}^2(\mathbb{R})$.

Para la completitud de este sistema es necesario considerar las soluciones acotadas de la ecuación de Schrödinger correspondientes al parámetro

$$E = \alpha^2, \quad \alpha > 0,$$

que satisfagan las condiciones de continuidad (2.3.5). Estas soluciones representan las funciones propias generalizadas del problema. Para obtenerlas procedemos de la misma forma en que obtuvimos las funciones propias del operador S , es decir, consideramos las soluciones acotadas en las tres regiones que define el potencial y aplicamos las condiciones de frontera correspondientes.

En la región I = $(-\infty, -a)$ la ecuación de Schrödinger se convierte en

$$-\frac{d^2}{dz^2}\phi_I(z) = \alpha^2\phi_I(z), \quad (2.3.21)$$

de modo que un sistema fundamental de soluciones de esta ecuación diferencial es el siguiente

$$\left\{ e^{i\alpha(z+a)}, e^{-i\alpha(z+a)} \right\}.$$

Se puede ver que el Wronskiano de estas dos soluciones es diferente de cero debido a la independencia lineal,

$$W = \begin{vmatrix} e^{i\alpha(z+a)} & e^{-i\alpha(z+a)} \\ i\alpha e^{i\alpha(z+a)} & -i\alpha e^{-i\alpha(z+a)} \end{vmatrix} = -2i\alpha \neq 0.$$

Por tanto, una solución general en la región I es

$$\phi_I(z) = A_1 e^{i\alpha(z+a)} + A_2 e^{-i\alpha(z+a)}, \quad (2.3.22)$$

donde A_1 y A_2 son constantes arbitrarias.

En la región II = $(-a, a)$ la ecuación de Schrödinger se convierte en

$$\left(-\frac{d^2}{dz^2} + V_0(z) \right) \phi_{II}(z) = \alpha^2 \phi_{II}(z). \quad (2.3.23)$$

Denotemos las soluciones linealmente independientes de esta ecuación como

$$\phi_1(z; \alpha), \phi_2(z; \alpha).$$

El Wronskiano debe satisfacer la siguiente relación

$$W[\phi_1, \phi_2](z; \alpha) = \begin{vmatrix} \phi_1(z; \alpha) & \phi_2(z; \alpha) \\ \phi_1'(z; \alpha) & \phi_2'(z; \alpha) \end{vmatrix} \neq 0,$$

en al menos un punto del segmento $[-a, a]$. Por tanto, una solución general en la región II es

$$\phi_{II}(z) = B_1 \phi_1(z; \alpha) + B_2 \phi_2(z; \alpha), \quad (2.3.24)$$

donde B_1, B_2 son constantes arbitrarias.

Por último, en la región III = (a, ∞) la ecuación de Schrödinger se convierte en

$$-\frac{d^2}{dz^2}\phi_{\text{III}}(z) = \alpha^2\phi_{\text{III}}(z), \quad (2.3.25)$$

de modo que un sistema fundamental de soluciones de esta ecuación diferencial es el siguiente

$$\left\{ e^{i\alpha(z-a)}, e^{-i\alpha(z-a)} \right\}.$$

Por tanto, una solución general en la región III es

$$\phi_{\text{III}}(z) = A_3 e^{i\alpha(z-a)} + A_4 e^{-i\alpha(z-a)}, \quad (2.3.26)$$

donde A_3 y A_4 son constantes arbitrarias.

Ahora, se aplican las condiciones de continuidad en el punto $z = -a$

$$\begin{aligned} \phi_{\text{I}}(-a) &= \phi_{\text{II}}(-a), \\ \phi'_{\text{I}}(-a) &= \phi'_{\text{II}}(-a), \end{aligned}$$

que conduce a un sistema de ecuaciones lineales con A_1 y A_2 como incógnitas

$$\begin{aligned} A_1 + A_2 &= \phi_{\text{II}}(-a), \\ i\alpha A_1 - i\alpha A_2 &= \phi'_{\text{II}}(-a), \end{aligned}$$

resolviendo este sistema de ecuaciones, obtenemos los valores de A_1 y A_2

$$A_1 = \frac{1}{2} \left(\phi_{\text{II}}(-a) - \frac{i}{\alpha} \phi'_{\text{II}}(-a) \right), \quad (2.3.27)$$

$$A_2 = \frac{1}{2} \left(\phi_{\text{II}}(-a) + \frac{i}{\alpha} \phi'_{\text{II}}(-a) \right). \quad (2.3.28)$$

Ahora, se aplican las condiciones de continuidad en el punto $z = a$

$$\begin{aligned} \phi_{\text{II}}(a) &= \phi_{\text{III}}(a), \\ \phi'_{\text{II}}(a) &= \phi'_{\text{III}}(a). \end{aligned}$$

Tenemos un sistema de ecuaciones lineales con A_3 y A_4 como incógnitas

$$\begin{aligned} A_3 + A_4 &= \phi_{\text{II}}(a), \\ i\alpha A_3 - i\alpha A_4 &= \phi'_{\text{II}}(a), \end{aligned}$$

cuya solución está dada como

$$A_3 = \frac{1}{2} \left(\phi_{\text{II}}(a) - \frac{i}{\alpha} \phi'_{\text{II}}(a) \right), \quad (2.3.29)$$

$$A_4 = \frac{1}{2} \left(\phi_{\text{II}}(a) + \frac{i}{\alpha} \phi'_{\text{II}}(a) \right). \quad (2.3.30)$$

La solución obtenida por trozos que satisface las condiciones de continuidad en $z = \pm a$ representa una superposición de dos ondas planas que se propagan en direcciones opuestas y que interactúan con el potencial V_0 en la región de interacción. Debido a la linealidad del problema este proceso se puede estudiar como la superposición de una onda que viene de izquierda a derecha y que interactúa con el potencial, y de una onda que viene de derecha a izquierda y que interactúa con el mismo potencial. Estos dos casos individuales se analizan a continuación.

Supongamos que existe una única fuente de ondas a la izquierda de la región de interacción, es decir, $A_4 = 0$ ya que no existen fuentes del lado derecho. La condición $A_4 = 0$ implica que

$$\phi_{\text{II}}(a) = -\frac{i}{\alpha} \phi'_{\text{II}}(a).$$

Entonces el coeficiente A_3 , que corresponde con la amplitud de la onda transmitida, es

$$A_3 = \frac{1}{2} \left(\phi_{\text{II}}(a) - \frac{i}{\alpha} \phi'_{\text{II}}(a) \right) = \phi_{\text{II}}(a) = 1,$$

donde hemos asignado arbitrariamente el valor de 1 a este coeficiente. A la izquierda de la región de interacción la superposición de las ondas incidente y reflejada se expresa como

$$\begin{aligned} \phi_{\text{I}}(z) &= \frac{1}{2} \left(\phi_{\text{II}}(-a) - \frac{i}{\alpha} \phi'_{\text{II}}(-a) \right) e^{i\alpha(z+a)} + \frac{1}{2} \left(\phi_{\text{II}}(-a) + \frac{i}{\alpha} \phi'_{\text{II}}(-a) \right) e^{-i\alpha(z+a)} \\ &= \phi_{\text{II}}(-a) \cos(\alpha(z+a)) + \frac{1}{\alpha} \phi'_{\text{II}}(-a) \sin(\alpha(z+a)). \end{aligned} \quad (2.3.31)$$

Por tanto, la solución de la ecuación de Schrödinger para el proceso de transmisión de izquierda a derecha es

$$u_{01}(z; \alpha) = \begin{cases} \phi_{\text{II}}(-a; \alpha) \cos(\alpha(z+a)) + \frac{1}{\alpha} \phi'_{\text{II}}(-a; \alpha) \sin(\alpha(z+a)), & -\infty < z < -a, \\ \phi_{\text{II}}(z; \alpha), & -a < z < a, \\ e^{i\alpha(z-a)}, & a < z < \infty. \end{cases}$$

Como esta solución se mantiene acotada para cualquier valor de $\alpha \geq 0$, entonces define una primera familia de funciones propias generalizadas, las cuales evidentemente no pertenecen al espacio de Hilbert $H = \mathcal{L}^2(\mathbb{R})$. Por tanto, la primer familia de funciones propias generalizadas normalizadas se expresa de la siguiente manera [13, 126 p.]

$$\phi_{01}(z; \alpha) = \frac{1}{M_\alpha^-} \begin{cases} \phi_{\text{II}}(-a; \alpha) \cos(\alpha(z+a)) + \frac{1}{\alpha} \phi'_{\text{II}}(-a; \alpha) \sin(\alpha(z+a)), & -\infty < z < -a, \\ \phi_{\text{II}}(z; \alpha), & -a < z < a, \\ e^{i\alpha(z-a)}, & a < z < \infty, \end{cases} \quad (2.3.32)$$

$$M_\alpha^- = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \sqrt{\phi_{\text{II}}^2(-a; \alpha) + \left(\frac{1}{\alpha} \phi'_{\text{II}}(-a; \alpha)\right)^2}. \quad (2.3.33)$$

Supongamos ahora, que existe una única fuente de ondas a la derecha de la región de interacción. En este caso el coeficiente $A_1 = 0$ ya que no existen otras fuentes del lado izquierdo de la región de interacción. La condición $A_1 = 0$ implica que

$$\phi_{\text{II}}(-a) = \frac{i}{\alpha} \phi'_{\text{II}}(-a).$$

Por lo tanto, la amplitud de la onda transmitida es

$$A_2 = \frac{1}{2} \left(\phi_{\text{II}}(-a) + \frac{i}{\alpha} \phi'_{\text{II}}(-a) \right) = \phi_{\text{II}}(-a) = 1,$$

donde arbitrariamente hemos asignado una amplitud de 1 para este coeficiente. A la derecha de la región de interacción las amplitudes de las ondas incidente y reflejada son

$$\begin{aligned} \phi_{\text{III}}(z) &= \frac{1}{2} \left(\phi_{\text{II}}(a) - \frac{i}{\alpha} \phi'_{\text{II}}(a) \right) e^{i\alpha(z-a)} + \frac{1}{2} \left(\phi_{\text{II}}(a) + \frac{i}{\alpha} \phi'_{\text{II}}(a) \right) e^{-i\alpha(z-a)}, \\ &= \phi_{\text{II}}(a) \cos(\alpha(z-a)) + \frac{1}{\alpha} \phi'_{\text{II}}(a) \sin(\alpha(z-a)). \end{aligned} \quad (2.3.34)$$

Por tanto, la solución de la ecuación de Schrödinger para el proceso de transmisión de derecha a izquierda

$$u_{02}(z; \alpha) = \begin{cases} e^{-i\alpha(z+a)}, & -\infty < z < -a, \\ \phi_{\text{II}}(z; \alpha), & -a < z < a, \\ \phi_{\text{II}}(a; \alpha) \cos(\alpha(z-a)) + \frac{1}{\alpha} \phi'_{\text{II}}(a; \alpha) \sin(\alpha(z-a)), & a < z < \infty. \end{cases}$$

Como esta solución se mantiene acotada para cualquier valor de $\alpha \geq 0$, entonces ésta define una segunda familia de funciones propias generalizadas, las cuales tampoco pertenecen al espacio de Hil-

bert $H = \mathcal{L}^2(\mathbb{R})$. Por lo tanto, la segunda familia de funciones propias generalizadas normalizadas se expresa de la siguiente manera [13, 126 p.]

$$\phi_{02}(z; \alpha) = \frac{1}{M_\alpha^+} \begin{cases} e^{-i\alpha(z+a)}, & -\infty < z < -a, \\ \phi_{\text{II}}(z; \alpha), & -a < z < a, \\ \phi_{\text{II}}(a; \alpha) \cos(\alpha(z-a)) + \frac{1}{\alpha} \phi'_{\text{II}}(a; \alpha) \sin(\alpha(z-a)), & a < z < \infty, \end{cases} \quad (2.3.35)$$

$$M_\alpha^+ = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \sqrt{\phi_{\text{II}}^2(a; \alpha) + \left(\frac{1}{\alpha} \phi'_{\text{II}}(a; \alpha)\right)^2}. \quad (2.3.36)$$

Las funciones propias generalizadas de esta manera definidas están asociadas con el espectro continuo del operador S , mientras que las funciones propias normalizadas están asociadas con el espectro discreto del operador S . A partir de las familias de funciones propias definidas introducimos el siguiente importante resultado.

Teorema 24 ([7, p. 737]). *Sea $\{\varphi_j(z; \beta_j)\}_{j=1}^N$ una familia de funciones propias normalizadas y sea $\{\phi_{01}(z; \alpha)\}_{\alpha \in \mathbb{R}_+}$ y $\{\phi_{02}(z; \alpha)\}_{\alpha \in \mathbb{R}_+}$ dos familias de funciones propias generalizadas normalizadas del operador S . Entonces, cualquier $f \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ admite la expansión*

$$f(z) = \sum_{j=1}^N f_j \varphi_j(z) + \int_0^\infty f_{01}(\alpha) \phi_{01}(z; \alpha) d\alpha + \int_0^\infty f_{02}(\alpha) \phi_{02}(z; \alpha) d\alpha$$

con los coeficientes dados por las siguientes fórmulas

$$\begin{aligned} f_j &= \int_{-\infty}^\infty f(z) \overline{\varphi_j(z)} dz, & j = 1, \dots, N; \\ f_{01}(\alpha) &= \int_{-\infty}^\infty f(z) \overline{\phi_{01}(z; \alpha)} dz, \\ f_{02}(\alpha) &= \int_{-\infty}^\infty f(z) \overline{\phi_{02}(z; \alpha)} dz. \end{aligned}$$

Además, la identidad de Parseval se cumple

$$\|f\|_H^2 = \sum_{j=1}^N |f_j|^2 + \int_0^\infty |f_{01}(\alpha)|^2 d\alpha + \int_0^\infty |f_{02}(\alpha)|^2 d\alpha.$$

Corolario 25. [7] *La distribución de Dirac $\delta(z - z')$ puede ser escrita formalmente por la expansión*

$$\delta(z - z') = \sum_{j=1}^N \varphi_j(z) \overline{\varphi_j(z')} + \int_0^\infty \phi_{01}(z; \alpha) \overline{\phi_{01}(z'; \alpha)} d\alpha + \int_0^\infty \phi_{02}(z; \alpha) \overline{\phi_{02}(z'; \alpha)} d\alpha.$$

Tanto las funciones propias normalizadas $\varphi_j(z)$ del espectro discreto, así como las funciones propias generalizadas normalizadas $\phi_{0m}(z; \alpha)$, $m = 1, 2$ del espectro continuo serán utilizadas para

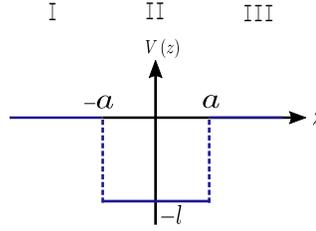


Figura 2.4.1. Representación de un pozo de potencial finito de profundidad $-l$, y anchura $2a$.

desarrollar la teoría básica que se utilizará en los capítulos posteriores. A continuación presentamos un ejemplo simple para calcular las funciones propias y los valores propios asociados con un pozo de potencial rectangular.

2.4. Ejemplo del pozo de potencial rectangular

Como ejemplo consideremos el problema del cálculo del espectro discreto del operador de Schrödinger S correspondiente a un pozo de potencial $V(z)$ definido como

$$V(z) = \begin{cases} 0, & -\infty < z < -a, \\ -l, & -a \leq z \leq a, \\ 0, & a < z < \infty, \end{cases} \quad (2.4.1)$$

donde $l > 0$, como se muestra en la Figura 2.4.1

Para este problema se puede mostrar que

$$\varphi_{\text{II}}(z; \beta) = \cos\left((z+a)\sqrt{l-\beta^2}\right) + \frac{\beta}{\sqrt{l-\beta^2}} \sin\left((z+a)\sqrt{l-\beta^2}\right)$$

satisface la ecuación de Schrödinger en la región de interacción, y además cumple con la condición $\varphi_{\text{II}}(-a, \beta) = 1$. A partir de esta solución se llega a la ecuación de dispersión del problema

$$\cot\left(2a\sqrt{l-\beta^2}\right) = \frac{l-2\beta^2}{2\beta\sqrt{l-\beta^2}}. \quad (2.4.2)$$

Si $\beta_j > 0$ es un cero de la ecuación de dispersión, entonces $E_j = -\beta_j^2$ es un valor propio del operador S , el cual satisface la siguiente condición

$$-l < E_j < 0,$$

es decir, $0 < \beta_j^2 < l$. Las funciones propias normalizadas correspondientes a $E_j = -\beta_j^2$ tienen la

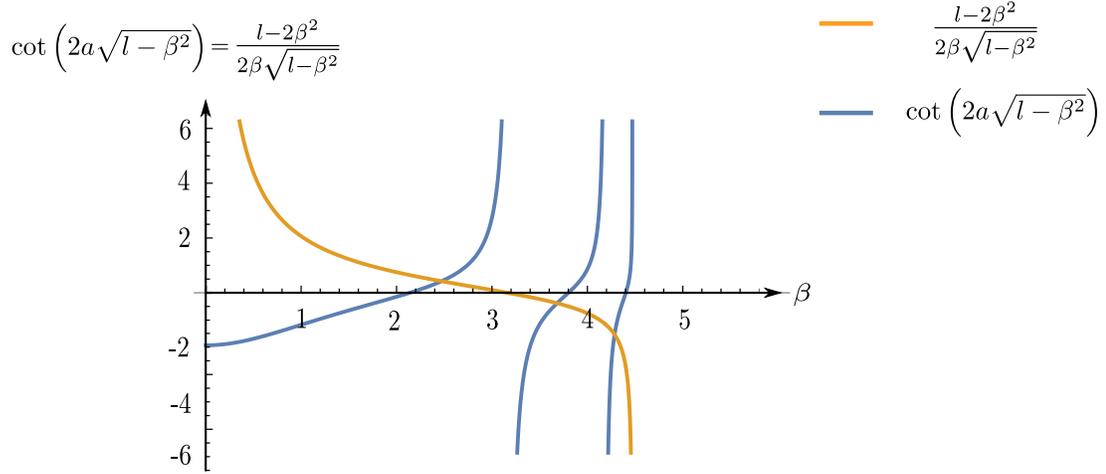


Figura 2.4.2. Ejemplo numérico de la ecuación de dispersión calculado para $-l = -20$ y $a = 1$.

forma

$$\varphi_j(z) = \frac{1}{M_j} \begin{cases} e^{\beta_j(z+a)}, & -\infty < z < -a, \\ \varphi_{\text{II}}(z; \beta_j), & -a \leq z \leq a, \\ \varphi_{\text{II}}(a; \beta_j) e^{-\beta_j(z-a)}, & a < z < \infty, \end{cases} \quad (2.4.3)$$

donde la constante de normalización se calcula de la siguiente manera

$$M_j = \left(\int_{-a}^a |\varphi_{\text{II}}(z)|^2 dz + \frac{1}{2\beta_j} (1 + \varphi_{\text{II}}^2(a; \beta_j)) \right)^{1/2},$$

y además

$$\varphi_{\text{II}}(a; \beta_j) = \cos\left(2a\sqrt{l-\beta_j^2}\right) + \frac{\beta_j}{\sqrt{l-\beta_j^2}} \sin\left(2a\sqrt{l-\beta_j^2}\right).$$

En la Figura 2.4.2 se muestra la solución gráfica de la ecuación de dispersión donde se han graficado los miembros izquierdo y derecho de esta ecuación como funciones de β , de modo que las abscisas de las intersecciones de las dos gráficas corresponden a soluciones de esta ecuación.

Se observa en la Tabla 2.1 los ceros de la ecuación de dispersión β_j , y las energías permitidas a este pozo de potencial E_j . Cada uno de estos niveles de energía tiene su propio valor del número cuántico j y los valores de M_j de la constante de normalización correspondiente. En este ejemplo se consideró una profundidad del pozo de potencial igual a $l = 20$ y un ancho del pozo de potencial igual a $2a = 2$. Para estos valores se obtuvieron tres niveles de energía permitidos que se encuentran en orden creciente en la Tabla 2.1, donde $j = 1$ corresponde con la energía del estado base, mientras que $j = 3$ es la energía permitida del segundo estado excitado.

En las Figuras 2.4.3, 2.4.4 y 2.4.5 del inciso (a) se muestran las tres funciones propias normalizadas correspondientes a los valores propios de la Tabla 2.1 que fueron graficadas utilizando la

j	β_j	$E_j = -\beta_j^2$	M_j
1	4.284917718284301	-18.360519852466737	3.948868773985219
2	3.6821352559107354	-13.558120042820818	2.017492185914087
3	2.471531310250313	-6.108467017547629	1.3732970966280877

Cuadro 2.1. Ceros de la relación de dispersión β_j , energías discretas E_j , y valores de M_j de las constantes de normalización.

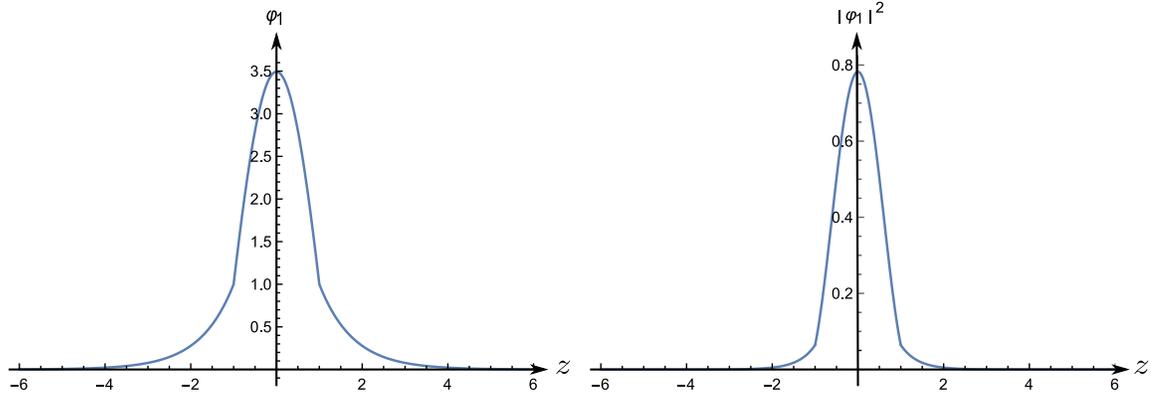


Figura 2.4.3. (a) Función propia normalizada para el estado base ($j = 1$) y (b) la función de distribución de probabilidad $|\varphi_1(z)|^2$ con la constante de normalización M_1 .

instrucción Plot de Mathematica 11.0. La probabilidad de que la partícula se encuentre dentro de un intervalo pequeño dz en torno al eje z es igual a $|\varphi_j(z)|^2 dz$, [67]. Si analizamos las gráficas de las Figuras 2.4.3, 2.4.4 y 2.4.5 del inciso (b), la interacción de la partícula cuántica con los tres estratos da lugar a regiones de alta probabilidad en las interfaces de los estratos, y regiones de baja probabilidad lejos del estrato central. Cabe destacar que para cada energía permitida E_j existe una función de onda normalizada $\varphi_j(z)$, que tiene una distribución de probabilidad bien definida.

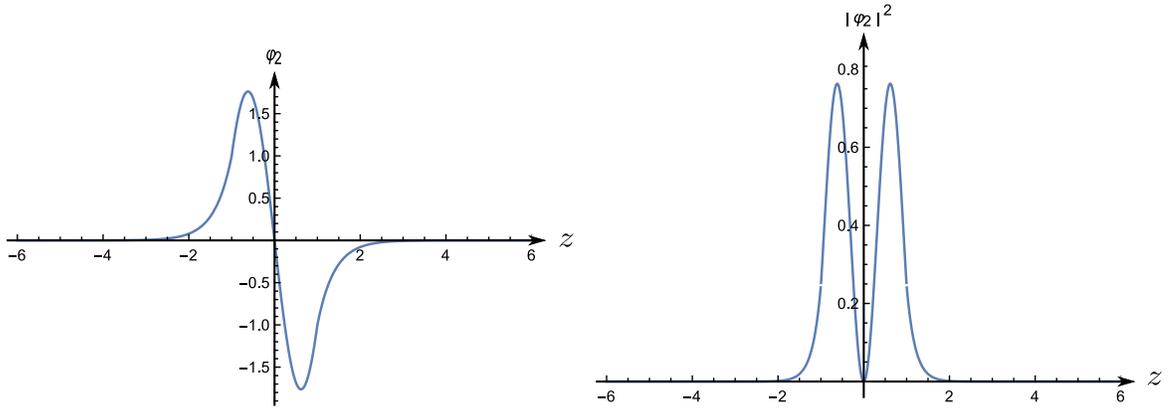


Figura 2.4.4. (a) Función propia normalizada para el primer estado excitado ($j = 2$) y (b) la función de distribución de probabilidad $|\varphi_2(z)|^2$ con la constante de normalización M_2 .

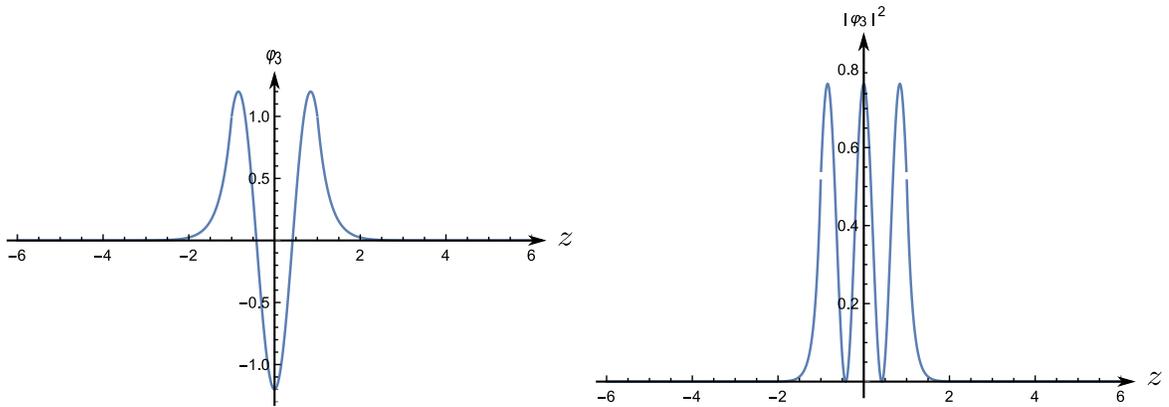


Figura 2.4.5. (a) Función propia normalizada para el segundo estado excitado ($j = 3$) y (b) la función de distribución de probabilidad $|\varphi_3(z)|^2$ con la constante de normalización M_3 .

Capítulo 3

Series de potencias del parámetro espectral para la ecuación de Schrödinger unidimensional

El método SPPS (Spectral Parameter Power Series) es un método exacto para resolver problemas de Sturm-Liouville con valores en la frontera o valores iniciales como series de potencias del parámetro espectral, fue desarrollado por Vladislav V. Kravchenko [40, 41, 42].

En este capítulo se trabajará con la ecuación de Schrödinger unidimensional (3.2.1) que está sometida a condiciones de frontera, de la cual obtendremos dos soluciones linealmente independientes en términos del parámetro espectral λ y de las potencias formales construidas a partir de un procedimiento de integración recursivo. Para la implementación numérica, las series de potencias se truncan y debido a su convergencia uniforme el error que resulta del truncamiento no depende de la variable independiente, y disminuye al aumentar el número de términos de las series.

3.1. Series de potencias del parámetro espectral para la ecuación de Sturm-Liouville

Consideramos el método SPPS del artículo [42] para obtener soluciones de la ecuación de Sturm-Liouville

$$(pu')' + qu = \lambda ru, \quad x_0 < x < x_1, \quad (3.1.1)$$

donde p, q y r son funciones complejo-valuadas de la variable real x , u es una función que satisface ciertas condiciones de suavidad, y λ es un parámetro complejo. Asumamos que existe una solución particular u_0 de la ecuación homogénea

$$(pu'_0)' + qu_0 = 0, \quad (3.1.2)$$

que cumple con las condiciones de regularidad

$$u_0^2 r, \frac{1}{u_0^2 p} \in \mathcal{C}([x_0, x_1]).$$

Una solución general de la ecuación (3.1.1) en $[x_0, x_1]$ tiene la forma

$$u(x) = C_1 u_1(x) + C_2 u_2(x), \quad (3.1.3)$$

donde C_1, C_2 son coeficientes arbitrarios,

$$u_1(x) = u_0(x) \sum_{k=0}^{\infty} \lambda^k \tilde{X}^{(2k)}(x), \quad (3.1.4)$$

$$u_2(x) = u_0(x) \sum_{k=0}^{\infty} \lambda^k X^{(2k+1)}(x), \quad (3.1.5)$$

y observamos que estas soluciones dependen fuertemente de la solución particular u_0 . Las funciones $\tilde{X}^{(n)}$ y $X^{(n)}$ se calculan recursivamente de acuerdo con el siguiente procedimiento de integración

$$\tilde{X}^{(n)}(x) = \begin{cases} \int_{x'}^x \tilde{X}^{(n-1)}(s) u_0^2(s) r(s) ds, & n \text{ impar,} \\ \int_{x'}^x \tilde{X}^{(n-1)}(s) \frac{1}{u_0^2(s)p(s)} ds, & n \text{ par,} \end{cases} \quad (3.1.6)$$

$$X^{(n)}(x) = \begin{cases} \int_{x'}^x X^{(n-1)}(s) \frac{1}{u_0^2(s)p(s)} ds, & n \text{ impar,} \\ \int_{x'}^x X^{(n-1)}(s) u_0^2(s) r(s) ds, & n \text{ par,} \end{cases} \quad (3.1.7)$$

con las semillas

$$\tilde{X}^{(0)} \equiv 1, \quad X^{(0)} \equiv 1, \quad (3.1.8)$$

donde x' es un punto arbitrario en $[x_0, x_1]$, tal que $p(x') \neq 0$ y p es continuo en x' .

Las funciones $u_1(x)$ y $u_2(x)$ satisfacen las siguientes condiciones de frontera en el punto x'

$$u_1(x') = u_0(x'), \quad u_1'(x') = u_0'(x'), \quad (3.1.9)$$

$$u_2(x') = 0, \quad u_2'(x') = \frac{1}{u_0(x')p(x')}. \quad (3.1.10)$$

Se puede demostrar que u_1 y u_2 son linealmente independientes a partir de su Wronskiano

$$W[u_1, u_2](x') = \begin{vmatrix} u_1(x') & u_2(x') \\ u_1'(x') & u_2'(x') \end{vmatrix} = \frac{1}{p(x')},$$

el cual es diferente de cero en al menos un punto.

Para demostrar la convergencia uniforme de las series φ_1 y φ_2 se utiliza la prueba M de Weierstrass, el cual se formula de la siguiente manera.

Teorema 26 (Kravchenko 2009). [41] Sea $\{u_n(x)\}_{n=1}^{\infty}$ una sucesión de funciones definidas en un conjunto cerrado E , y considere la serie

$$S = \sum_{n=1}^{\infty} u_n(x), \quad x \in E.$$

Si existe una serie convergente de números no-negativos $\sum_{n=1}^{\infty} M_n$, tal que para todo $n = 1, 2, \dots$ se cumple que $|u_n(x)| \leq M_n$, $x \in E$, entonces la serie S converge absoluta y uniformemente en E .

Al aplicar la prueba M de Weiertrass para la serie de potencias u_1 se puede demostrar que existe una serie convergente tal que [42]

$$|u_1(x)| \leq |u_0(x)| \sum_{k=1}^{\infty} \frac{c^{2k}}{(2k)!} < \infty,$$

donde $c := \left(|\lambda| \sup |ru_0^2| \sup \left| \frac{1}{pu_0^2} \right| \right)^{1/2} |x - x'| < \infty$. Como la serie u_1 es mayorizada por una serie convergente que converge a $\cosh(c)$ hasta una constante multiplicativa en el intervalo $[x_0, x_1]$, entonces la serie u_1 converge absoluta y uniformemente en el mismo intervalo. De igual manera, al aplicar la prueba M de Weiertrass para la serie de potencias u_2 se puede demostrar que existe una serie convergente tal que

$$|u_2(x)| \leq \frac{|u_0(x)| \sqrt{\sup \left| \frac{1}{pu_0^2} \right|}}{\sqrt{\lambda} \sqrt{\sup |ru_0^2|}} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{c^{2k+1}}{(2k+1)!} < \infty.$$

Como la serie u_2 es mayorizada por una serie convergente que converge a $\sinh(c)$ hasta una constante multiplicativa en el intervalo $[x_0, x_1]$, entonces la serie u_2 converge absoluta y uniformemente en el mismo intervalo.

3.2. Solución SPPS de la ecuación de Schrödinger unidimensional para el caso de los estados ligados

Retomemos el problema espectral del operador de Schrödinger unidimensional para el caso de los estados ligados

$$Su(z) = \left(-\frac{d^2}{dz^2} + V(z) \right) u(z) = -\beta^2 u(z), \quad -\infty < z < \infty, \quad (3.2.1)$$

$$[u(z)]_{z=\pm a} = 0, \quad [u'(z)]_{z=\pm a} = 0, \quad (3.2.2)$$

donde $-\beta^2 = E$ representa los valores de energía negativa del sistema cuántico. Entonces, la ecuación (3.2.1) en el intervalo $[-a, a]$ tiene la forma

$$\left(-\frac{d^2}{dz^2} + V_0(z)\right) \varphi_{\text{II}}(z) = -\beta^2 \varphi_{\text{II}}(z), \quad -a < z < a, \quad (3.2.3)$$

la cual se puede identificar con una ecuación de Sturm-Liouville

$$(p\varphi'_{\text{II}}(z))' + q\varphi_{\text{II}}(z) = \lambda r\varphi_{\text{II}}(z), \quad -a < z < a, \quad (3.2.4)$$

con las siguientes correspondencias $p \Rightarrow -1$, $q \Rightarrow V_0(z)$, $r \Rightarrow 1$, $\lambda \Rightarrow -\beta^2$, $x_0 = -a$, $x_1 = a$, y $x \Rightarrow z$. Para poder aplicar el método SPPS asumamos que existe una solución particular φ_0 de la ecuación homogénea

$$\left(-\frac{d^2}{dz^2} + V_0(z)\right) \varphi_0(z) = 0, \quad -a < z < a \quad (3.2.5)$$

que cumple las condiciones de regularidad

$$\varphi_0^2, -\varphi_0^{-2} \in \mathcal{C}([-a, a]). \quad (3.2.6)$$

De esta manera una solución general $\varphi_{\text{II}}(z) = C_1\varphi_1(z) + C_2\varphi_2(z)$ de la ecuación (3.2.3), donde

$$\varphi_1(z) = \varphi_0(z) \sum_{k=0}^{\infty} \lambda^k \tilde{X}^{(2k)}(z), \quad (3.2.7)$$

$$\varphi_2(z) = \varphi_0(z) \sum_{k=0}^{\infty} \lambda^k X^{(2k+1)}(z), \quad (3.2.8)$$

se escribe como

$$\varphi_{\text{II}}(z; \beta) = C_1 \varphi_0(z) \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \beta^{2k} \tilde{X}^{(2k)}(z) + C_2 \varphi_0(z) \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \beta^{2k} X^{(2k+1)}(z), \quad (3.2.9)$$

donde las potencias formales $X^{(n)}$ y $\tilde{X}^{(n)}$ se calculan de acuerdo con el procedimiento recursivo anterior tomando la siguiente correspondencia $x' \Rightarrow z'$, con el punto inicial de integración z' como $-a$. Los coeficientes C_1 y C_2 se calculan a partir de las condiciones en frontera (3.2.2). Esto da como resultado

$$C_1(\beta) = \frac{1}{\varphi_0(-a)}, \quad C_2(\beta) = \beta \varphi_0(-a) - \varphi_0'(-a). \quad (3.2.10)$$

Las funciones $\tilde{X}^{(n)}$ y $X^{(n)}$ se calculan recursivamente de acuerdo con (3.1.6) y (3.1.7). A partir de la representación SPPS es posible obtener una representación para la derivada de φ_{II} como sigue

$$\varphi'_{\text{II}}(z; \beta) = \frac{-1}{\varphi_0(z)} \left[C_1(\beta) \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \beta^{2k} \tilde{X}^{(2k-1)}(z) + C_2(\beta) \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \beta^{2k} X^{(2k)}(z) \right] + \frac{\varphi'_0(z)}{\varphi_0(z)} \varphi_{\text{II}}(z).$$

Con las expresiones anteriores la ecuación de dispersión del problema

$$\beta \varphi_{\text{II}}(a; \beta) + \varphi'_{\text{II}}(a; \beta) = 0, \quad (3.2.11)$$

se puede expresar en términos de series de potencias como sigue

$$\begin{aligned} & \beta \varphi_0(a) \left[C_1(\beta) \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \beta^{2k} \tilde{X}^{(2k)}(a) + C_2(\beta) \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \beta^{2k} X^{(2k+1)}(a) \right] - \\ & \frac{1}{\varphi_0(a)} \left[C_1(\beta) \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \beta^{2k} \tilde{X}^{(2k-1)}(a) + C_2(\beta) \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \beta^{2k} X^{(2k)}(a) \right] \\ & + \frac{\varphi'_0(a)}{\varphi_0(a)} \varphi_{\text{II}}(a) = 0, \end{aligned} \quad (3.2.12)$$

donde C_1 y C_2 se definieron en (3.2.10). Por tanto, si $\beta_j > 0$ es un cero de la ecuación de dispersión, entonces $E_j = -\beta_j^2$ es un valor propio del problema espectral, y la función propia correspondiente es

$$u_j(z) = \begin{cases} e^{\beta_j(z+a)}, & -\infty < z < -a, \\ \varphi_{\text{II}}(z; \beta_j), & -a < z < a, \\ \varphi_{\text{II}}(a; \beta_j) e^{-\beta_j(z-a)}, & a < z < \infty. \end{cases} \quad (3.2.13)$$

La correspondiente función propia se puede normalizar de acuerdo con

$$\varphi_j(z) = \frac{u_j(z)}{\|u_j(z)\|}. \quad (3.2.14)$$

Cálculo de la solución particular φ_0

Para obtener una solución $\varphi_0(z)$ de la ecuación (3.2.5) se puede aplicar nuevamente el método SPPS. Al reescribir la ecuación homogénea (3.2.5) en la forma de una ecuación de Sturm-Liouville

$$(\tilde{p}\varphi'_0(z))' + \tilde{q}\varphi_0(z) = \tilde{\lambda}\tilde{r}\varphi_0, \quad (3.2.15)$$

se tienen las siguientes correspondencias $\tilde{p} \Rightarrow -1$, $\tilde{q} \Rightarrow 0$, $\tilde{r} \Rightarrow V_0(z)$ y $\tilde{\lambda} \Rightarrow 1$.

Nuevamente, para obtener soluciones de la ecuación (3.2.15) en forma de series de potencias

formales necesitamos una solución particular ϕ_0 de la ecuación homogénea

$$(\tilde{p}\phi'_0(z))' + \tilde{q}\phi_0(z) = 0, \quad (3.2.16)$$

es decir, se necesita una solución particular de

$$(-\phi'_0(z))' = 0. \quad (3.2.17)$$

De todas las soluciones particulares se elije por simplicidad $\phi_0(z) \equiv 1$.

La solución φ_0 se expresa como series de potencias formales $\tilde{Y}^{(n)}$, $Y^{(n)}$ de la siguiente manera

$$\varphi_0(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \tilde{Y}^{(2k)}(z) + i \sum_{k=0}^{\infty} Y^{(2k+1)}(z),$$

donde

$$\tilde{Y}^{(n)}(z) = \begin{cases} \int_{z'}^z \tilde{Y}^{(n-1)}(s) V_0(s) ds, & n \text{ impar,} \\ -\int_{z'}^z \tilde{Y}^{(n-1)}(s) ds, & n \text{ par,} \end{cases} \quad (3.2.18)$$

$$Y^{(n)}(z) = \begin{cases} -\int_{z'}^z Y^{(n-1)}(s) ds, & n \text{ impar,} \\ \int_{z'}^z Y^{(n-1)}(s) V_0(s) ds, & n \text{ par,} \end{cases} \quad (3.2.19)$$

con las semillas

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

donde z' es un punto arbitrario en $[-a, a]$, el cual por simplicidad se elige como $z' = -a$. De esta manera garantizamos que la solución φ_0 así construida no se anula en el intervalo de $[-a, a]$. A partir de esta solución es posible encontrar una expresión en series de potencias formales para su derivada

$$\varphi'_0(z) = -\sum_{k=1}^{\infty} \tilde{Y}^{(2k-1)}(z) - i \sum_{k=0}^{\infty} Y^{(2k)}(z). \quad (3.2.20)$$

3.3. Ejemplos numéricos de la solución de la ecuación de dispersión para diferentes potenciales

Para utilizar el método SPPS en la solución numérica de la ecuación de Schrödinger unidimensional, se utilizó el software Mathematica 11.0 con las siguientes consideraciones, [41]:

1. Los principales parámetros al obtener una solución numérica de (3.2.9) que se pueden controlar son el número M de subintervalos en los que se divide el intervalo $[-a, a]$ cuando se calculan las integrales recursivas (3.1.6)-(3.1.7), y el número N de potencias formales de las series truncadas como aproximaciones de (3.2.7)-(3.2.8). Cabe señalar que la exactitud del método numérico depende principalmente del número N de términos de la serie. Por ejemplo, una cota para el

error del truncamiento de la serie φ_1 es la siguiente

$$\begin{aligned} |\varphi_1 - \varphi_{1,N}| &= |\varphi_0| \left| \sum_{k=N+1}^{\infty} \lambda^k \tilde{X}^{(2k)} \right| \leq \text{máx} |\varphi_0| \sum_{k=N+1}^{\infty} \frac{c^{2k}}{(2k)!} \\ &= \text{máx} |\varphi_0| \left| \cosh(c) - \sum_{k=0}^N \frac{c^{2k}}{(2k)!} \right|, \end{aligned}$$

que depende de la cola de la serie de Taylor truncada de la función $\cosh(c)$. De igual manera, una cota para el error de la serie φ_2 depende de la cola de la serie de Taylor de la función $\sinh(c)$ hasta una constante multiplicativa. El número de subintervalos M también influye en la precisión numérica del método numérico, y su influencia en el error del cálculo de las integrales es bien conocida en el análisis numérico.

2. En la implementación numérica del método SPPS las integrales recursivas pueden resolverse de forma numérica o utilizando cálculo simbólico. El cálculo simbólico, aunque produce expresiones exactas, no siempre puede usarse para un integrando arbitrario, por otra parte el cálculo simbólico suele ser muy lento. En el cálculo numérico de las integrales se utiliza la instrucción `Interpolate` [49], para producir una función aproximada \tilde{f} del integrando f a partir de un conjunto de puntos discretos de éste. Note que f toma el papel del integrando de una potencia formal en el procedimiento de integración recursiva.
3. La instrucción `Interpolate` permite elegir el método `Spline`, con la cual la función aproximada \tilde{f} se obtiene como una función continua a trozos, donde en cada segmento se define un polinomio de orden n , como se ve en la Figura 3.3.1. El método `Spline` garantiza la continuidad de la función aproximada \tilde{f} y de sus derivadas hasta de orden $n - 1$. Esto conduce a una curva suave que pasa exactamente por los puntos discretos de f . Con el problema que se está trabajando, se utiliza el método `Spline` de orden $n = 3$, el cual produce funciones aproximadas \tilde{f} de clase $\mathcal{C}^2([-a, a])$. El uso de polinomios de tercer grado es el que se presenta por defecto en Mathematica.
4. Una vez calculada la función interpolante \tilde{f} , se construyen las potencias formales en cada uno de los puntos discretos en que el intervalo $[-a, a]$ se segmentó usando integración exacta. Esto es posible ya que en cada segmento de longitud

$$\Delta = \frac{x_1 - x_0}{M}$$

la función interpolante es un polinomio, con lo cual se reduce el error. En la Tabla 3.1 se observa el proceso de integración para el cálculo de una potencia formal en todos los segmentos de longitud Δ que forman el intervalo $[-a, x_i]$.

5. A partir de los valores $\{I_0, I_1, \dots, I_M\}$ se construye una función interpolante \tilde{f} que representa a la potencia formal considerada, y el proceso se repite desde el Punto 1 para calcular la

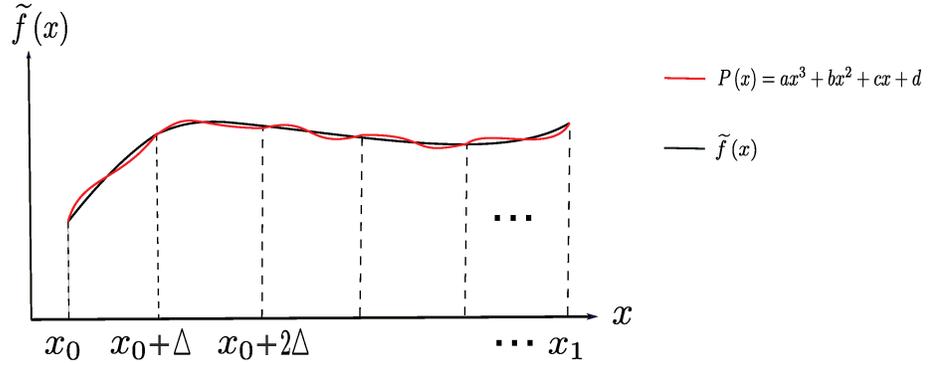


Figura 3.3.1. Segmentos que forman a la función aproximada $\tilde{f}(x)$.

i	$x_i = x_0 + i\Delta$	$\int_{x_0}^{x_i} \tilde{f}(s) ds$
0	x_0	$\int_{x_0}^{x_0} \tilde{f}(s) ds = 0 = I_0$
1	$x_0 + \Delta$	$\int_{x_0}^{x_0 + \Delta} \tilde{f}(s) ds = I_1$
2	$x_0 + 2\Delta$	$\int_{x_0}^{x_0 + 2\Delta} \tilde{f}(s) ds = I_1 + \int_{x_0 + \Delta}^{x_0 + 2\Delta} \tilde{f}(s) ds = I_2$
3	$x_0 + 3\Delta$	$\int_{x_0}^{x_0 + 3\Delta} \tilde{f}(s) ds = I_2 + \int_{x_0 + 2\Delta}^{x_0 + 3\Delta} \tilde{f}(s) ds = I_3$
\vdots	\vdots	\vdots
M	$x_0 + M\Delta$	$\int_{x_0}^{x_0 + M\Delta} \tilde{f}(s) ds = I_{M-1} + \int_{x_0 + (M-1)\Delta}^{x_0 + M\Delta} \tilde{f}(s) ds = I_M$

Cuadro 3.1. Esquema del cálculo numérico de las integrales recursivas.

siguiente potencia formal. Este procedimiento se realiza hasta $2N + 1$ veces par obtener las potencias formales necesarias para construir las series truncadas.

3.3.0.1. Pozo de potencial constante

En la subsección 2.4 se analizó el caso de un pozo de potencial constante de profundidad $|l|$ y de ancho $2a$. En este caso fue posible obtener en forma cerrada la ecuación de dispersión que define los estados de energía negativa. La ecuación de dispersión obtenida es la siguiente

$$\cot\left(2a\sqrt{l - \beta^2}\right) = \frac{l - 2\beta^2}{2\beta\sqrt{l - \beta^2}}. \quad (3.3.1)$$

Con el fin de ejemplificar la aplicación del enfoque SPPS en la solución del mismo problema se consideran los siguientes parámetros

- Soporte de la función $V_0(z)$ en el segmento $[-0.5, 0.5]$.
- Ancho del pozo $2a = 1$, y profundidad del pozo $l = 105$.
- Número de términos en que se truncan las series $N = 100$.

j	$E_j = -\beta_j^2$ (NSolve[])	$E_j = -\beta_j^2$ (Roots[]) SPPS
1	-98.1160605756289	-98.11606057642814
2	-77.80123881048429	-77.80123881291132
3	-45.42114107952649	-45.42114108190518
4	-6.46711990604026	-6.467119903185034

Cuadro 3.2. Energías discretas E_j de un pozo de potencial constante del Ejemplo 3.3.0.1.

j	$E_j = -\beta_j^2$ (Roots[]) SPPS
1	-64.627214835999370
2	-17.49429884306529

Cuadro 3.3. Energías discretas E_j de un pozo de potencial cosenoidal del Ejemplo 3.3.0.2

- Número de divisiones del segmento $[-0.5, 0.5]$ es $M = 1000$.

A continuación, en la Tabla 3.2 se muestran los resultados de calcular los valores propios $E_j = -\beta_j^2$ a partir de la ecuación de dispersión (3.3.1) usando la instrucción `NSolve[]`, y a partir de la ecuación de dispersión en su forma SPPS usando la instrucción `Roots[]`. Esta tabla permite hacer una comparación de los resultados obtenidos con el fin de establecer la validez del método SPPS en este problema. Las funciones propias de este problema calculadas a partir de las soluciones exactas y de la representación SPPS se muestran en la Figura 3.3.2.

3.3.0.2. Pozo de potencial cosenoidal

A continuación se considera un pozo de potencial cosenoidal (ver Figura 3.3.3) de la forma

$$V_0(z) = 46(\cos(2\pi z) - 1), \quad 0 \leq z \leq 1,$$

para obtener una representación del enfoque SPPS vamos a considerar los siguientes parámetros:

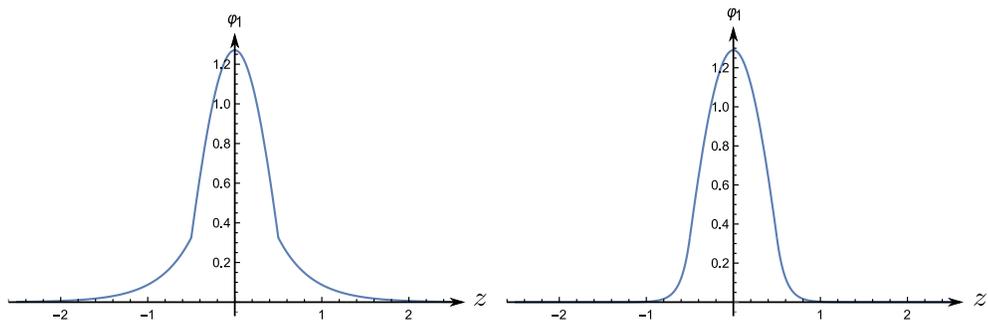
- Soporte de la función $V_0(z)$ en el segmento $[0, 1]$.
- Ancho del pozo $a = 1$, y profundidad del pozo $l = 92$.
- Número de términos en que se truncan las series $N = 50$.
- Número de divisiones del segmento $[0, 1]$ es $M = 100$.

En la Tabla 3.3 se muestran los resultados de calcular los valores propios $E_j = -\beta_j^2$ a partir de la ecuación de dispersión en su forma SPPS usando la instrucción `Roots[]`. Las funciones propias de este problema con la representación SPPS se muestran en la Figura 3.3.4.

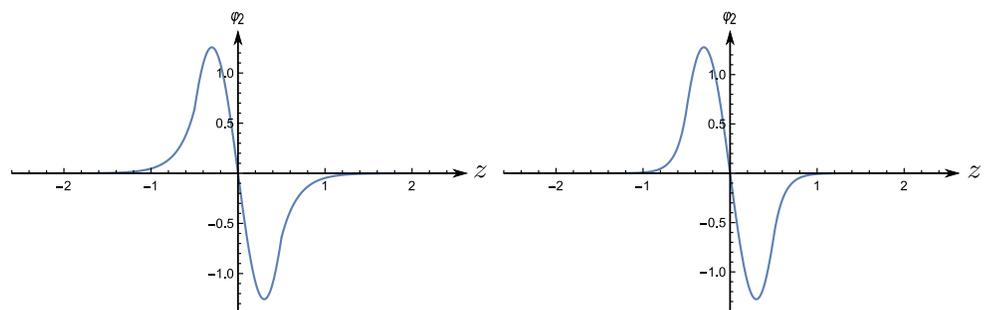
3.3.0.3. Pozo de potencial exponencial

Por último, se considera un pozo de potencial exponencial [62] (ver Figura 3.3.5) de la forma

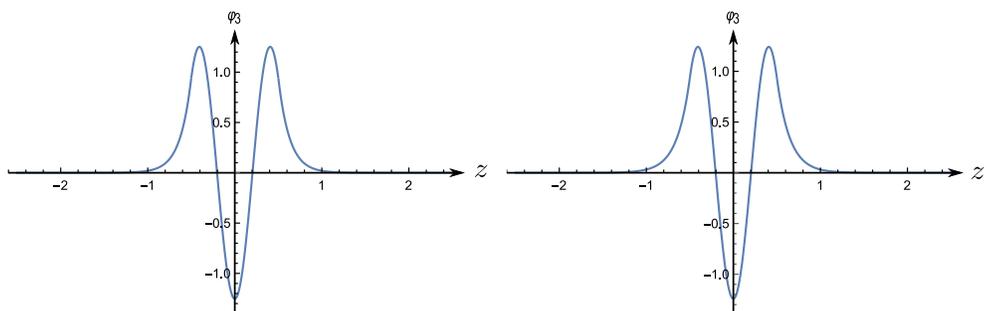
$$V_0(z) = 40(\exp(-2\pi z) - 1), \quad 0 \leq z \leq 1,$$



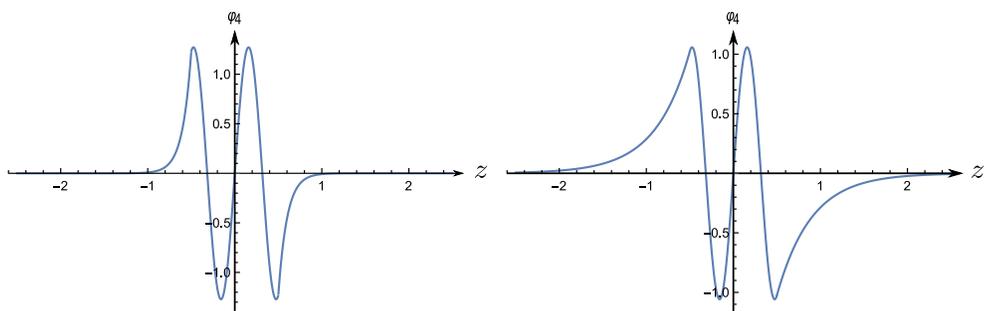
(a) Funciones propias normalizadas para $j = 1$.



(b) Funciones propias normalizadas para $j = 2$.



(c) Funciones propias normalizadas para $j = 3$.



(d) Funciones propias normalizadas para $j = 4$.

Figura 3.3.2. Comparación de funciones propias normalizadas del Ejemplo 3.3.0.1: del lado izquierdo (*NSolve[]*) y del lado derecho (*Roots[]*) SPPS.

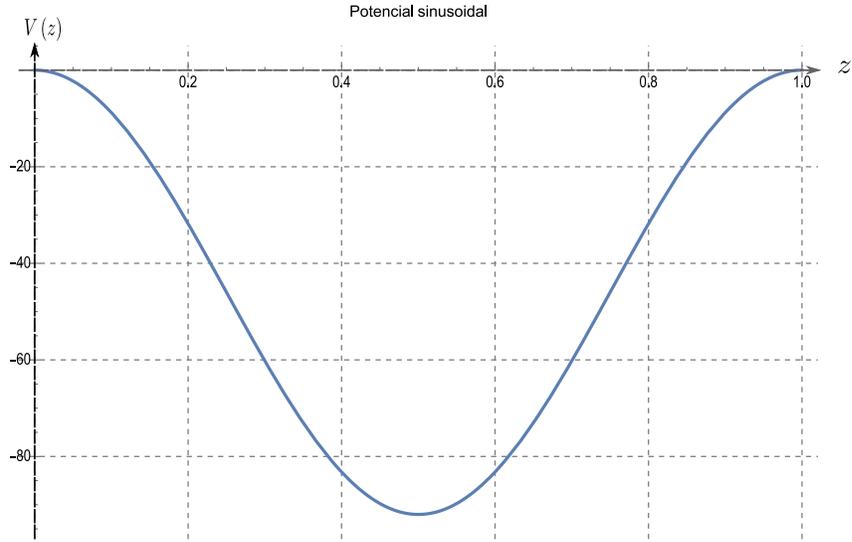


Figura 3.3.3. Potencial cosenoidal.

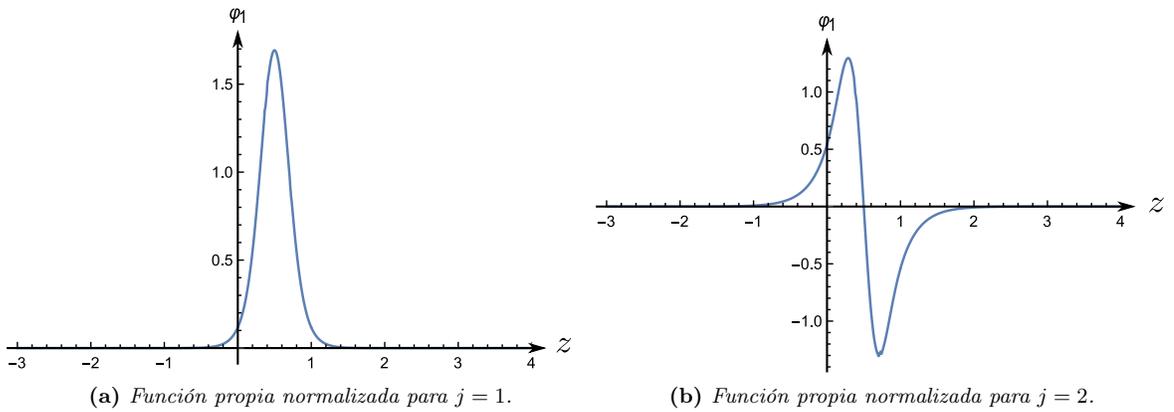


Figura 3.3.4. Funciones propias normalizadas para el potencial cosenoidal con SPPS (`Roots[]`) del Ejemplo 3.3.0.2.

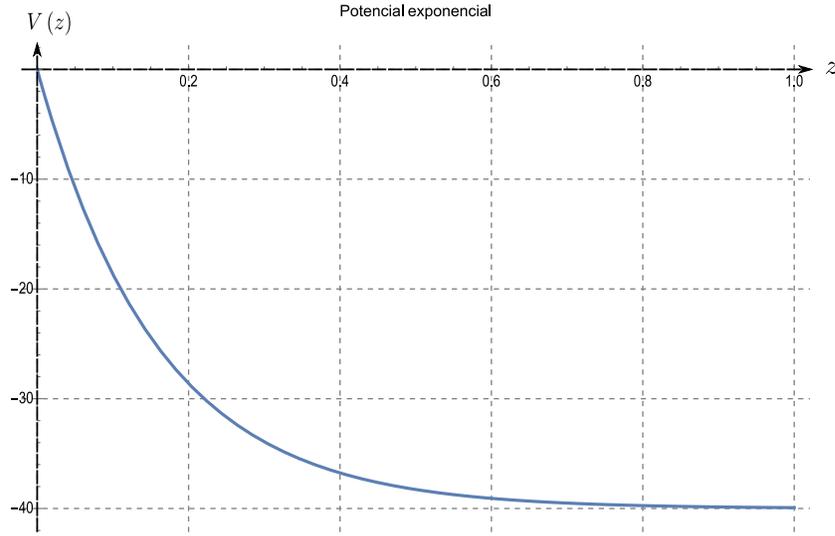


Figura 3.3.5. *Potencial exponencial.*

j	$E_j = -\beta_j^2$ (Roots[]) SPPS
1	-31.29115104962435
2	-12.36417239118836

Cuadro 3.4. *Energías discretas E_j de un pozo de potencial exponencial del Ejemplo 3.3.0.3.*

para obtener una representación del enfoque SPPS vamos a considerar los siguientes parámetros:

- Soporte de la función $V_0(z)$ en el segmento $[0, 1]$.
- Ancho del pozo $a = 1$, y profundidad del pozo $l = 40$.
- Número de términos en que se truncan las series $N = 50$.
- Número de divisiones del segmento $[0, 1]$ es $M = 100$.

A continuación, en la Tabla 3.4 se muestran los resultados de calcular los valores propios $E_j = -\beta_j^2$ a partir de la ecuación de dispersión en su forma SPPS usando la instrucción `Roots[]`. Las funciones propias de este problema con la representación SPPS se muestran en la Figura 3.3.6.

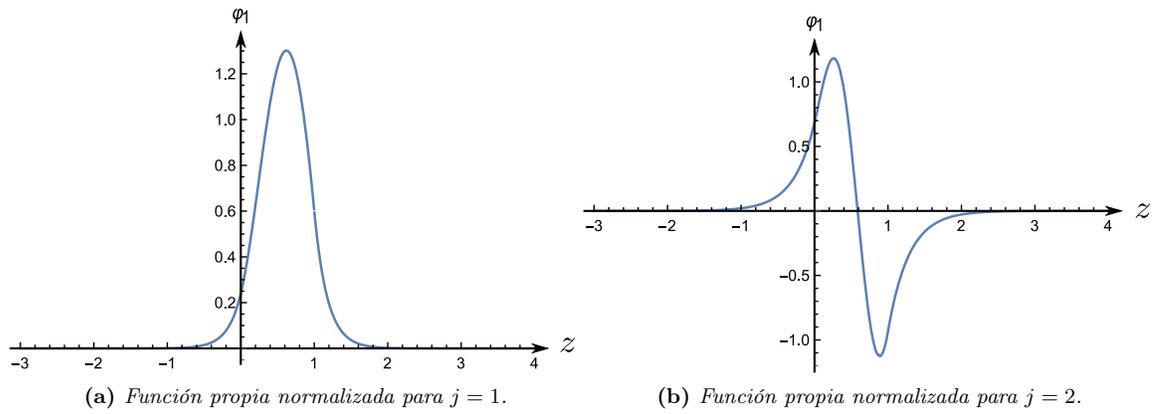


Figura 3.3.6. *Funciones propias normalizadas para el potencial exponencial con SPPS (`Roots[]`) del Ejemplo 3.3.0.3.*

Capítulo 4

Aproximación WKB

En algunos problemas de la física matemática se involucran ecuaciones diferenciales parciales que dependen de un pequeño parámetro. Existen técnicas para construir soluciones aproximadas de estas ecuaciones utilizando métodos asintóticos [32]. Uno de estos métodos es la llamada *aproximación WKB*, que obtiene su nombre de las iniciales de los investigadores G. Wentzel, H. A. Kramers y L. Brillouin, quienes trabajando de forma independiente pero simultánea propusieron a partir de 1926 un método de resolución aproximada de la ecuación de Schrödinger basada en técnicas matemáticas desarrolladas por H. Jeffreys. Este método también es conocido como *aproximación semiclásica*, *aproximación de onda corta* y *aproximación de altas frecuencias* [33]. La aproximación WKB es un procedimiento de cálculo aproximado de niveles y funciones de onda que no construyen soluciones exactas ya que conduce a aproximaciones suficientemente buenas para estudiar el comportamiento de los sistemas cuánticos [21].

En este capítulo se va a considerar una solución asintótica WKB para resolver la ecuación de Schrödinger bidimensional libre de unidades para abordar el análisis de la guía de ondas con perturbaciones en las interfaces entre el núcleo y el revestimiento, que dependen de un parámetro ε el cual se asume como suficientemente pequeño de tal forma que conforme ε tiende a cero, la guía de ondas es localmente plana.

4.1. Soluciones WKB de la ecuación de Schrödinger

Recordemos que en el Capítulo 1 el problema de la propagación de ondas cuánticas en la guía de ondas considerada se escribía de la siguiente manera

$$\frac{-\hbar^2}{2m^*} \left[\varepsilon^2 \frac{\partial^2}{\partial w^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_3^2} \right] \psi_\varepsilon(w, x_3) + U_\varepsilon(w, x_3) \psi_\varepsilon(w, x_3) = E_0 \psi_\varepsilon(w, x_3),$$
$$[\psi_\varepsilon(w, x_3)]_{x_3=\phi_\pm(w)} = 0, \quad \left[\frac{\partial}{\partial x_3} \psi_\varepsilon(w, x_3) \right]_{x_3=\phi_\pm(w)} = 0,$$

el cual básicamente es la ecuación de Schrödinger bidimensional con una perturbación en la dirección longitudinal w , con las transformaciones definidas por

$$\begin{aligned} w &:= \varepsilon x_2, \\ \psi_\varepsilon(w, x_3) &:= \psi\left(\frac{w}{\varepsilon}, x_3\right) = \psi(x_2, x_3), \\ U_\varepsilon(w, x_3) &:= U\left(\frac{w}{\varepsilon}, x_3\right) = U(x_2, x_3). \end{aligned}$$

Con el objeto de analizar el problema libre de unidades introducimos el siguiente cambio de variables

$$z := \frac{\sqrt{2m^*}}{\hbar} x_3, \quad y := \frac{\sqrt{2m^*}}{\hbar} w, \quad (4.1.1)$$

a partir del cual se obtiene el siguiente problema con valores en la frontera

$$\begin{aligned} \left(-\varepsilon^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_\varepsilon(y, z) - E_0\right) \Psi_\varepsilon(y, z) &= 0, \quad (y, z) \in \mathbb{R}^2, \\ [\Psi_\varepsilon(y, z)]_{z=\Phi_\pm(y)} &= 0, \quad \left[\frac{\partial}{\partial z} \Psi_\varepsilon(y, z)\right]_{z=\Phi_\pm(y)} = 0, \end{aligned} \quad (4.1.2)$$

donde se consideran las siguientes transformaciones

$$\begin{aligned} \Psi_\varepsilon(y, z) &:= \psi_\varepsilon\left(\frac{\hbar}{\sqrt{2m^*}} y, \frac{\hbar}{\sqrt{2m^*}} z\right) = \psi_\varepsilon(w, x_3), \\ V_\varepsilon(y, z) &:= U_\varepsilon\left(\frac{\hbar}{\sqrt{2m^*}} y, \frac{\hbar}{\sqrt{2m^*}} z\right) = U_\varepsilon(w, x_3). \\ \Phi_\pm(y) &:= \frac{\sqrt{2m^*}}{\hbar} \phi_\pm\left(\frac{\hbar}{\sqrt{2m^*}} y\right) = \frac{\sqrt{2m^*}}{\hbar} \phi_\pm(w). \end{aligned}$$

Se identifica al operador de Schrödinger vertical

$$\mathcal{L}\left(y, z, \frac{\partial}{\partial z}\right) := -\frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_\varepsilon(y, z), \quad (4.1.3)$$

donde V_ε está definido como una función potencial definida a trozos

$$V_\varepsilon(y, z) = \begin{cases} 0, & -\infty < z < \Phi_-(y), \\ V_0(y), & \Phi_-(y) < z < \Phi_+(y), \\ 0, & \Phi_+(y) < z < \infty, \end{cases} \quad (4.1.4)$$

tal como se consideró en el problema auxiliar de la Sección 2.3. En términos de este operador vertical la ecuación de Schrödinger (4.1.2) toma la siguiente forma

$$\left(-\varepsilon^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \mathcal{L}\left(y, z, \frac{\partial}{\partial z}\right) - E_0\right) \Psi_\varepsilon(y, z) = 0, \quad (y, z) \in \mathbb{R}^2. \quad (4.1.5)$$

Si el potencial $V_\varepsilon(y, z)$ es real-valuado y si éste toma valores negativos en la región $(\Phi_-(y), \Phi_+(y))$, entonces el operador de Schrödinger vertical $\mathcal{L}(y, z, \frac{\partial}{\partial z})$ tiene un conjunto de valores propios negativos

$$\lambda_j = -\beta_j^2(y) \in \mathbb{R},$$

que dependen de y como parámetro. Asociado con los valores propios $-\beta_j^2(y)$ se tienen las funciones propias $\varphi_j(y, z)$, es decir,

$$\mathcal{L}\left(y, z, \frac{\partial}{\partial z}\right) \varphi_j(y, z) = -\beta_j^2(y) \varphi_j(y, z), \quad z \in \mathbb{R},$$

donde y actúa como parámetro. Se aplicará el método asintótico WKB para buscar soluciones de la ecuación de Schrödinger (4.1.5) en la forma

$$\Psi_\varepsilon(y, z) = \sum_{j=1}^{N(y)} b_j(y, z) e^{\frac{i}{\varepsilon} S_j(y)} + \mathcal{O}(\varepsilon^2), \quad (4.1.6)$$

conforme $\varepsilon \rightarrow 0$. Esta solución representa una superposición de ondas planas con fases reales $S_j(y)$ y amplitudes $b_j(y, z)$. Observar que la solución propuesta se motiva por el hecho de que en una guía de ondas existen simultáneamente varios modos guiados que se superponen. Este Ansatz ha sido considerado en varios trabajos sobre la aproximación adiabática de la propagación de ondas en estructuras con cambios lentos, ver, *e.g.* [16, 32, 48]. El problema consiste, entonces en determinar las fases y las amplitudes de tales modos.

Realizando las operaciones indicadas en la ecuación (4.1.5), obtenemos la siguiente relación (4.1.7)

$$\begin{aligned} & \left(-\varepsilon^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \mathcal{L}\left(y, z, \frac{\partial}{\partial z}\right) - E_0\right) \Psi_\varepsilon(y, z) \sim \\ & \sum_{j=1}^{N(y)} \left[b_j(y, z) (S_j'(y))^2 + \mathcal{L}\left(y, z, \frac{\partial}{\partial z}\right) b_j(y, z) - E_0 b_j(y, z) \right] e^{\frac{i}{\varepsilon} S_j(y)} \\ & - i\varepsilon \sum_{j=1}^{N(y)} \left[2(b_j)'_y(y, z) S_j'(y) + b_j(y, z) S_j''(y) \right] e^{\frac{i}{\varepsilon} S_j(y)} \\ & - \varepsilon^2 \sum_{j=1}^{N(y)} (b_j)''_{yy}(y, z) e^{\frac{i}{\varepsilon} S_j(y)} = 0, \end{aligned} \quad (4.1.7)$$

la cual se puede separar en tres partes dependiendo el valor de ε , es decir, se tiene un término principal $\mathcal{O}(\varepsilon^0)$ que corresponde al primer término, y dos términos secundarios $\mathcal{O}(\varepsilon^1)$ que corresponde al segundo término y $\mathcal{O}(\varepsilon^2)$ que corresponde al tercer término. Ahora, observamos que conforme $\varepsilon \rightarrow 0$, los términos $\mathcal{O}(\varepsilon^1)$ y $\mathcal{O}(\varepsilon^2)$ son despreciables, por lo que

$$2(b_j)'_y(y, z) S_j'(y) + b_j(y, z) S_j''(y) = 0, \quad (4.1.8)$$

$$(b_j)''_{yy}(y, z) = 0. \quad (4.1.9)$$

La ecuación (4.1.8) da lugar a las derivadas logarítmicas

$$-\frac{S_j''(y)}{S_j'(y)} = 2 \frac{(b_j)'_y(y, z)}{b_j(y, z)},$$

cuya solución se expresa de la siguiente forma

$$S_j'(y) = \frac{B_j}{b_j^2(y, z)}, \quad (4.1.10)$$

donde B_j es una constante de integración. El término que involucra a $S_j'(y)$ en la ecuación (4.1.8) se puede expresar entonces en términos de la función b_j como sigue

$$b_j(y, z) (S_j'(y))^2 = \frac{B_j^2}{b_j^3(y, z)}. \quad (4.1.11)$$

De esta forma el término principal de la asintótica de la solución de la ecuación (4.1.7) toma la forma

$$\begin{aligned} & \left(-\varepsilon^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \mathcal{L} \left(y, z, \frac{\partial}{\partial z} \right) - E_0 \right) \Psi_\varepsilon(y, z) \sim \\ & \sum_{j=1}^{N(y)} \left[\frac{B_j^2}{b_j^3(y, z)} + \mathcal{L} \left(y, z, \frac{\partial}{\partial z} \right) b_j(y, z) - E_0 b_j(y, z) \right] e^{\frac{i}{\varepsilon} S_j(y)}. \end{aligned} \quad (4.1.12)$$

Supongamos que las amplitudes b_j se expresan en términos de las funciones propias del problema vertical como sigue

$$b_j(y, z) = \gamma_j(y) \varphi_j(y, z), \quad (4.1.13)$$

donde $\gamma_j(y)$ son coeficientes a determinar y $\varphi_j(y, z)$ son las funciones propias del problema vertical que van a depender del parámetro y . Se puede demostrar que las funciones $b_j(y, z)$ también satisfacen la ecuación de valores propios

$$\mathcal{L} \left(y, z, \frac{\partial}{\partial z} \right) b_j(y, z) = -\beta_j^2(y) b_j(y, z).$$

Esto implica que la expresión (4.1.12) se escriba como

$$\begin{aligned} & \left(-\varepsilon^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \mathcal{L} \left(y, z, \frac{\partial}{\partial z} \right) - E_0 \right) \Psi_\varepsilon(y, z) \\ & \sim \sum_{j=1}^{N(y)} \left[\frac{B_j^2}{b_j^3(y, z)} - \kappa_j^2(y) b_j(y, z) \right] e^{\frac{i}{\varepsilon} S_j(y)} = 0, \end{aligned}$$

donde se han definido las correcciones cuánticas [33] a este problema de acuerdo con la expresión

$$\kappa_j^2(y) := \beta_j^2(y) + E_0. \quad (4.1.14)$$

La relación asintótica anterior implica que

$$\frac{B_j^2}{b_j^3(y, z)} - \kappa_j^2(y) b_j(y, z) = 0,$$

de modo que a partir de la relación (4.1.10) se obtienen los términos de fase

$$S_j(y) = \pm \int_{y'}^y \kappa_j(\sigma) d\sigma, \quad (4.1.15)$$

donde y_0 es un punto arbitrario. Observamos que los términos de fase dependen de los valores propios del problema vertical y de la energía E_0 del sistema. Si las fases son reales, las soluciones asintóticas son oscilatorias en la dirección longitudinal y , mientras que si las fases son imaginarias las soluciones serán exponenciales (crecientes o decrecientes) y no representarán modos propagantes.

Queda por determinar los coeficientes $\gamma_j(y)$. En la ecuación (4.1.8) se sustituyen las expresiones (4.1.13) y (4.1.15) con lo cual se obtiene la siguiente ecuación

$$2 \left(\gamma_j'(y) \varphi_j(y, z) + (\varphi_j)_y'(y, z) \gamma_j(y) \right) \kappa_j(y) + \gamma_j(y) \varphi_j(y, z) \kappa_j'(y) = 0. \quad (4.1.16)$$

Multiplicando esta ecuación por φ_j e integrando con respecto a z resulta

$$2\gamma_j'(y) \kappa_j(y) \int_{\mathbb{R}} \varphi_j(y, z) \varphi_j(y, z) dz + \gamma_j(y) \kappa_j(y) \int_{\mathbb{R}} (\varphi_j)_y'(y, z) + \gamma_j(y) \kappa_j'(y) \int_{\mathbb{R}} \varphi_j(y, z) \varphi_j(y, z) dz = 0. \quad (4.1.17)$$

Para simplificar esta expresión consideremos que las funciones propias del operador vertical están normalizadas, es decir,

$$\int_{\mathbb{R}} \varphi_j(y, z) \varphi_j(y, z) dz = \int_{\mathbb{R}} \varphi_j^2(y, z) dz = 1, \quad (4.1.18)$$

entonces al derivar ambos lados de esta igualdad con respecto a y se obtiene la expresión

$$\frac{\partial}{\partial y} \int_{\mathbb{R}} \varphi_j^2(y, z) dz = \int_{\mathbb{R}} \frac{\partial}{\partial y} \varphi_j^2(y, z) dz = \int_{\mathbb{R}} 2\varphi_j(y, z) (\varphi_j)'_y(y, z) dz = 0,$$

por lo tanto

$$\int_{\mathbb{R}} \varphi_j(y, z) (\varphi_j)'_y(y, z) dz = 0. \quad (4.1.19)$$

Finalmente, al utilizar las igualdades (4.1.18) y (4.1.19) en la ecuación (4.1.17) obtenemos una ecuación de transporte

$$2\gamma'_j(y) \kappa_j(y) + \gamma_j(y) \kappa'_j(y) = 0, \quad (4.1.20)$$

la cual nos sirve para la definición de $\gamma_j(y)$.

La ecuación (4.1.20) se escribe también como derivadas logarítmicas

$$2 \frac{\gamma'_j(y)}{\gamma_j(y)} = - \frac{\kappa'_j(y)}{\kappa_j(y)},$$

cuya solución es

$$\gamma_j(y) = \frac{C_j}{\sqrt{\kappa_j(y)}}, \quad (4.1.21)$$

donde C_j son otras constantes de integración. Sustituimos la ecuación (4.1.21) en la ecuación (4.1.13), obteniendo la amplitud

$$b_j(y, z) = C_j \frac{\varphi_j(y, z)}{\sqrt{\kappa_j(y)}}. \quad (4.1.22)$$

Con esto, la solución WKB de la ecuación de Schrödinger bidimensional homogénea libre de unidades, cuando las fronteras cambian lentamente, es

$$\Psi_\varepsilon(y, z) = \sum_{j=1}^{N(y)} C_j(y) \frac{\varphi_j(y, z)}{\sqrt{\kappa_j(y)}} e^{\pm \frac{i}{\varepsilon} \int_{y'}^y \kappa_j(\sigma) d\sigma} + \mathcal{O}(\varepsilon^2), \quad (4.1.23)$$

en esta ecuación los únicos términos que se desconocen son las constantes C_j , para determinarlas empleamos la técnica de la función de Green que será vista en el siguiente capítulo.

A partir de la lentitud con la que cambian las interfaces es posible abordar numéricamente el problema del cálculo de las funciones propias $\varphi_j(y, z)$ y las correcciones espectrales $\kappa_j(y)$, con y como un parámetro, al asumir una representación escalonada de las interfaces como se muestra en la figura 4.1.1. En cada escalón se establece una anchura del pozo que depende del parámetro y , y a partir de esta anchura se determinan los datos especificados. La longitud del escalón se considera

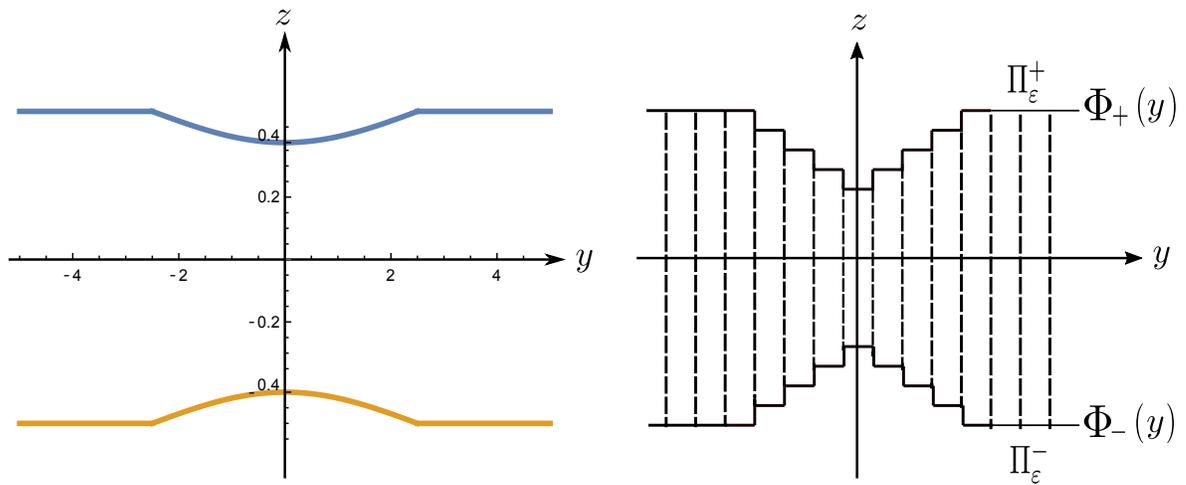


Figura 4.1.1. Guía de ondas con estrechamiento tipo cosenoidal y guía de ondas cuántica segmentada verticalmente.

tal que los datos espectrales no cambian significativamente a lo largo de éste. De esta manera, desde un punto de vista numérico, el problema es equivalente a tener varias guías de onda de diferentes espesores colocadas una después de la otra.

Capítulo 5

Función de Green para una guía de ondas cuántica estratificada

El término de *función de Green* hace referencia a una función asociada a los problemas con valores en la frontera, la cual actúa como un kernel integral para una representación integral de una solución particular del problema abordado [54]. Esta función fue introducida por primera vez por el físico matemático George Green en 1828. Desde su introducción, la función de Green ha encontrado amplias aplicaciones en áreas como la mecánica cuántica, la física del estado sólido, las matemáticas aplicadas, la física-matemática, entre muchas otras [13, 64].

En este último capítulo calcularemos la función de Green de la guía de ondas cuántica considerada en esta tesis para poder determinar la constante de integración C_j del análisis asintótico realizado en el Capítulo 4 para la propagación de las ondas en una estructura con perturbaciones. El término principal de la asintótica de la función de Green se va a construir como una expansión de las funciones propias del problema vertical auxiliar.

5.1. Construcción de la función de Green para una guía de ondas con perturbaciones en sus interfaces

Consideremos el siguiente problema con una fuente puntual

$$\begin{aligned} \left(-\varepsilon^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \mathcal{L} \left(y', z, \frac{\partial}{\partial z} \right) - E_0 \right) g_\varepsilon (y, z; y', z') &= -\varepsilon \delta (y - y') \delta (z - z'), \\ [g_\varepsilon (y, z; y', z')]_{z=\Phi_\pm(y')} &= 0, \quad [(g_\varepsilon)'_z (y, z; y', z')]_{z=\Phi_\pm(y')} = 0, \end{aligned} \quad (5.1.1)$$

donde $\mathcal{L} (y', z, \frac{\partial}{\partial z}) := -\frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_\varepsilon (y', z)$ es el operador vertical de Schrödinger, y $g_\varepsilon (y, z; y', z')$ es la función de Green de la guía de ondas cuántica con perturbaciones en sus fronteras. Matemáticamente esta función es la solución de la ecuación de Schrödinger bidimensional debida a una fuente puntual localizada en el punto (y', z') , sometida a las condiciones en la frontera especificadas en las interfaces

entre el núcleo y el revestimiento de la guía, las cuales dependen del parámetro pequeño $\varepsilon > 0$. Note que lejos de la fuente puntual el lado derecho de la ecuación diferencial (5.1.1) se anula, resultando una ecuación homogénea que representa la ecuación de Schrödinger bidimensional con la perturbación. El potencial V_ε que se considera depende de la posición de la fuente puntual, y lo que resulta es una función de la variable z . El considerar un potencial de esta forma es una consecuencia de la aproximación asintótica que se está realizando basada de la teoría de rayos.

Para obtener la función de Green utilizamos la transformada de Fourier con respecto a y , y después aplicamos los resultados del problema auxiliar vertical para expresar la solución resultante en términos de las funciones propias del operador $\mathcal{L}(y', z, \frac{\partial}{\partial z})$. Introducimos el par de transformadas de Fourier con respecto a y de la siguiente forma

$$\widehat{u}(\xi) := \int_{\mathbb{R}} u(y) e^{iy\xi} dy, \quad u(y) := \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} \widehat{u}(\xi) e^{-iy\xi} d\xi.$$

Aplicemos la transformada directa al problema anterior, del cual resulta el siguiente

$$\begin{aligned} \left(\varepsilon^2 \xi^2 + \mathcal{L}\left(y', z, \frac{\partial}{\partial z}\right) - E_0 \right) \widehat{g}_\varepsilon(\xi, z; y', z') &= -\varepsilon e^{-i\xi y'} \delta(z - z'), \\ [\widehat{g}_\varepsilon(\xi, z; y', z')]_{z=\Phi_\pm(y')} &= 0, \quad [(\widehat{g}_\varepsilon)'_z(\xi, z; y', z')]_{z=\Phi_\pm(y')} = 0. \end{aligned} \quad (5.1.2)$$

Note que el operador $\mathcal{L}(y', z, \frac{\partial}{\partial z})$ tiene un conjunto de valores propios negativos $-\beta_j^2(y') \in \mathbb{R}$ a condición de que el potencial $W(z) := V_\varepsilon(y', z)$ sea negativo en la región $(\Phi_-(y'), \Phi_+(y'))$. Las funciones propias $\varphi_j(y', z)$ correspondientes a estos valores propios satisfacen la ecuación

$$\mathcal{L}\left(y', z, \frac{\partial}{\partial z}\right) \varphi_j(y', z) = -\beta_j^2(y') \varphi_j(y', z), \quad z \in \mathbb{R}.$$

Similarmente el operador $\mathcal{L}(y', z, \frac{\partial}{\partial z})$ tiene un par de familias de funciones propias generalizadas $\phi_{0m}(y', z; \alpha)$, $m = 1, 2$, asociadas al espectro continuo en $[0, \infty)$ que satisfacen la ecuación

$$\mathcal{L}\left(y', z, \frac{\partial}{\partial z}\right) \phi_{0m}(y', z; \alpha) = \alpha^2 \phi_{0m}(y', z; \alpha), \quad z \in \mathbb{R},$$

donde α es el parámetro del espectro continuo.

Asumamos que la función \widehat{g}_ε se puede expandir en términos de las funciones propias del operador $\mathcal{L}(y', z, \frac{\partial}{\partial z})$ como sigue

$$\begin{aligned} \widehat{g}_\varepsilon(\xi, z; y', z') &:= \sum_{j=1}^{N(y')} A_j(\xi; y', z') \varphi_j(y', z) + \int_0^\infty B_\alpha(\xi; y', z') \phi_{01}(y', z; \alpha) d\alpha \\ &\quad + \int_0^\infty C_\alpha(\xi; y', z') \phi_{02}(y', z; \alpha) d\alpha, \end{aligned} \quad (5.1.3)$$

donde $A_j(\xi; y', z')$, $B_\alpha(\xi; y', z')$ y $C_\alpha(\xi; y', z')$ son coeficientes a determinar. Al sustituir la expansión

(5.1.3) en (5.1.2) y realizar operaciones formales se obtiene lo siguiente

$$\begin{aligned}
 \left(\mathcal{L} \left(y', z, \frac{\partial}{\partial z} \right) + (\varepsilon^2 \xi^2 - E_0) \right) \widehat{g}_\varepsilon (\xi, z; y', z') &= \sum_{j=1}^{N(y')} A_j (\xi; y', z') (-\beta_j^2 (y') + \varepsilon^2 \xi^2 - E_0) \varphi_j (y', z) \\
 &+ \int_0^\infty B_\alpha (\xi; y', z') (-\alpha_j^2 + \varepsilon^2 \xi^2 - E_0) \phi_{01} (y', z; \alpha) d\alpha \\
 &+ \int_0^\infty C_\alpha (\xi; y', z') (-\alpha_j^2 + \varepsilon^2 \xi^2 - E_0) \phi_{02} (y', z; \alpha) d\alpha.
 \end{aligned} \tag{5.1.4}$$

Definamos a continuación las siguientes constantes de propagación asociadas con el espectro discreto y continuo

$$\begin{aligned}
 \kappa_j^2 (y') &:= E_0 + \beta_j^2 (y'), \quad j = 1, \dots, N (y'), \\
 \tilde{\kappa}^2 (\alpha) &:= E_0 - \alpha^2.
 \end{aligned}$$

Por tanto, la expansión (5.1.4) queda como

$$\begin{aligned}
 &\sum_{j=1}^{N(y')} A_j (\xi; y', z') (\varepsilon^2 \xi^2 - \kappa_j^2 (y')) \varphi_j (y', z) \\
 &+ \int_0^\infty B_\alpha (\xi; y', z') (\varepsilon^2 \xi^2 - \tilde{\kappa}^2 (\alpha)) \phi_{01} (y', z; \alpha) d\alpha \\
 &+ \int_0^\infty C_\alpha (\xi; y', z') (\varepsilon^2 \xi^2 - \tilde{\kappa}^2 (\alpha)) \phi_{02} (y', z; \alpha) d\alpha = -\varepsilon e^{-i\xi y'} \delta (z - z')
 \end{aligned}$$

Luego, recordemos que la distribución de Dirac $\delta (z - z')$ se escribe formalmente en términos de las funciones propias del operador $\mathcal{L} (y', z, \frac{\partial}{\partial z})$ de la siguiente manera

$$\delta (z - z') = \sum_{j=1}^{N(y')} \varphi_j (y', z) \overline{\varphi_j (y', z')} + \int_0^\infty \phi_{01} (y', z; \alpha) \overline{\phi_{01} (y', z'; \alpha)} d\alpha + \int_0^\infty \phi_{02} (y', z; \alpha) \overline{\phi_{02} (y', z'; \alpha)} d\alpha,$$

por lo tanto al igualar términos correspondientes

$$\begin{aligned}
 \sum_{j=1}^{N(y')} A_j(\xi; y', z') (\varepsilon^2 \xi^2 - \kappa_j^2(y')) \varphi_j(y', z) &= -\varepsilon e^{-i\xi y'} \sum_{j=1}^{N(y')} \varphi_j(y', z) \overline{\varphi_j(y', z')}, \\
 \int_0^\infty B_\alpha(\xi; y', z') (\varepsilon^2 \xi^2 - \tilde{\kappa}^2(\alpha)) \phi_{01}(y', z; \alpha) d\alpha &= -\varepsilon e^{-i\xi y'} \int_0^\infty \phi_{01}(y', z; \alpha) \overline{\phi_{01}(y', z'; \alpha)} d\alpha, \\
 \int_0^\infty C_\alpha(\xi; y', z') (\varepsilon^2 \xi^2 - \tilde{\kappa}^2(\alpha)) \phi_{02}(y', z; \alpha) d\alpha &= -\varepsilon e^{-i\xi y'} \int_0^\infty \phi_{02}(y', z; \alpha) \overline{\phi_{02}(y', z'; \alpha)} d\alpha,
 \end{aligned}$$

se obtienen los siguientes coeficientes

$$\begin{aligned}
 A_j(\xi; y', z') &= \frac{-\varepsilon e^{-i\xi y'} \overline{\varphi_j(y', z')}}{\varepsilon^2 \xi^2 - \kappa_j^2(y')}, \\
 B_\alpha(\xi; y', z') &= \frac{-\varepsilon e^{-i\xi y'} \overline{\phi_{01}(y', z'; \alpha)}}{\varepsilon^2 \xi^2 - \tilde{\kappa}^2(\alpha)}, \\
 C_\alpha(\xi; y', z') &= \frac{-\varepsilon e^{-i\xi y'} \overline{\phi_{02}(y', z'; \alpha)}}{\varepsilon^2 \xi^2 - \tilde{\kappa}^2(\alpha)}.
 \end{aligned}$$

Aplicando la transformada inversa de Fourier a (5.1.3) y el principio de absorción al límite con respecto a y se obtiene [64, Sec. 10.9]

$$\begin{aligned}
 g_\varepsilon(y, z; y', z') &= - \sum_{j=1}^{N(y')} \left(\frac{\varepsilon}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} \frac{e^{-i\xi|y-y'|}}{\varepsilon^2 \xi^2 - i0 - \kappa_j^2(y')} d\xi \right) \varphi_j(y', z) \overline{\varphi_j(y', z')} \\
 &\quad - \int_0^\infty \left(\frac{\varepsilon}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} \frac{e^{-i\xi|y-y'|}}{\varepsilon^2 \xi^2 - i0 - \tilde{\kappa}^2(\alpha)} \right) \phi_{01}(y', z; \alpha) \overline{\phi_{01}(y', z'; \alpha)} d\alpha \\
 &\quad - \int_0^\infty \left(\frac{\varepsilon}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} \frac{e^{-i\xi|y-y'|}}{\varepsilon^2 \xi^2 - i0 - \tilde{\kappa}^2(\alpha)} \right) \phi_{02}(y', z; \alpha) \overline{\phi_{02}(y', z'; \alpha)} d\alpha.
 \end{aligned}$$

Entonces la expansión de $g_\varepsilon(y, z; y', z')$ es de la forma

$$\begin{aligned}
 g_\varepsilon(y, z; y', z') &= -\frac{\varepsilon}{2i} \sum_{j=1}^{N(y')} \frac{e^{-\frac{i}{\varepsilon} \kappa_j(y') |y-y'|}}{\kappa_j(y')} \varphi_j(y', z) \overline{\varphi_j(y', z')} \\
 &\quad - \frac{\varepsilon}{2i} \int_0^\infty \frac{e^{\frac{i}{\varepsilon} \tilde{\kappa}(\alpha) |y-y'|}}{\tilde{\kappa}(\alpha)} \phi_{01}(y', z; \alpha) \overline{\phi_{01}(y', z'; \alpha)} d\alpha \\
 &\quad - \frac{\varepsilon}{2i} \int_0^\infty \frac{e^{\frac{i}{\varepsilon} \tilde{\kappa}(\alpha) |y-y'|}}{\tilde{\kappa}(\alpha)} \phi_{02}(y', z; \alpha) \overline{\phi_{02}(y', z'; \alpha)} d\alpha.
 \end{aligned}$$

Las expresiones

$$g_{\varepsilon j}(y, z; y', z') := -\frac{\varepsilon}{2i} \frac{e^{-\frac{i}{\varepsilon} \kappa_j(y') |y-y'|}}{\kappa_j(y')} \varphi_j(y', z) \overline{\varphi_j(y', z')}, \quad (5.1.5)$$

$$g_{\varepsilon m}^0(y, z; y', z') := -\frac{\varepsilon}{2i} \int_0^\infty \frac{e^{\frac{i}{\varepsilon} \tilde{\kappa}(\alpha) |y-y'|}}{\tilde{\kappa}(\alpha)} \phi_{0m}(y', z; \alpha) \overline{\phi_{0m}(y', z'; \alpha)} d\alpha, \quad m = 1, 2, \quad (5.1.6)$$

representan a los modos guiados y las ondas laterales, respectivamente. Los modos guiados son exponencialmente decrecientes en $|z| \rightarrow \infty$, mientras que las ondas laterales son oscilantes si $|z| \rightarrow \infty$, de esta forma los modos guiados quedan confinados en el núcleo de la guía de ondas.

5.1.1. Comportamiento asintótico de la función de Green

Para obtener el comportamiento asintótico de la función de Green se consideran los términos principales de la asintótica de las ondas laterales de la ecuación (5.1.6) conforme $|y - y'| \rightarrow \infty$, los cuales están dados por las siguientes expresiones (ver [4, 9])

$$\begin{aligned}
 g_{\varepsilon 1}^0(y, z; y', z') &\sim -\varepsilon \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{E_0 e^{i\frac{3\pi}{4}} \phi_{01}(y', z; 0) \overline{\phi_{01}(y', z'; 0)}}{((\phi_{01})'_z(\Phi_+(y'), z'; 0))^2} \frac{e^{\frac{i}{\varepsilon} \sqrt{E_0} |y-y'|}}{(\sqrt{E_0} |y-y'|)^{3/2}} d\alpha, \quad m = 1, 2, \\
 g_{\varepsilon 2}^0(y, z; y', z') &\sim -\varepsilon \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{E_0 e^{i\frac{3\pi}{4}} \phi_{02}(y', z; 0) \overline{\phi_{02}(y', z'; 0)}}{((\phi_{02})'_z(\Phi_-(y'), z'; 0))^2} \frac{e^{\frac{i}{\varepsilon} \sqrt{E_0} |y-y'|}}{(\sqrt{E_0} |y-y'|)^{3/2}} d\alpha, \quad m = 1, 2.
 \end{aligned}$$

Estas expresiones se calcularon a partir del método de fase estacionaria, donde se demostró que las fases $\frac{i}{\varepsilon} \tilde{\kappa}(\alpha) |y - y'|$ tienen un único punto estacionario que es $\alpha = 0$. Los resultados anteriores muestran que las ondas laterales son del orden

$$g_{\varepsilon m}^0(y, z; y', z') = \mathcal{O}\left(\left(\sqrt{E_0} |y - y'|\right)^{-3/2}\right), \quad m = 1, 2,$$

conforme $|y - y'| \rightarrow \infty$, por lo cual pueden ser despreciables a grandes distancias de la fuente. Por lo tanto, obtenemos el siguiente resultado.

Teorema 27 ([9, p. 443]). Sea $g_\varepsilon \in \mathcal{D}'(\mathbb{R}_{(y,z)}^2)$ una solución generalizada del problema (5.1.1) que satisface el principio de absorción al límite con respecto a $y \in \mathbb{R}$. Entonces, el término principal de las asintóticas de g_ε está dado por la expansión

$$g_\varepsilon(y, z; y', z') \sim -\frac{\varepsilon}{2i} \sum_{j=1}^{N(y')} \frac{e^{-\frac{i}{\varepsilon} \kappa_j(y') |y-y'|}}{\kappa_j(y')} \varphi_j(y', z) \overline{\varphi_j(y', z')},$$

conforme $|y - y'| \rightarrow \infty$.

5.2. Solución de la ecuación de Schrödinger bidimensional a partir de la función de Green

Se demostró en la sección anterior que lejos de la fuente puntual el término principal de la asintótica de la función de Green está dado únicamente por modos guiados y las ondas laterales son despreciables en el campo lejano. Por tanto, nos quedamos con el siguiente término principal de la asintótica de la función de Green

$$g_\varepsilon(y, z; y', z') \sim -\frac{\varepsilon}{2i} \sum_{j=1}^{N(y')} \frac{e^{-\frac{i}{\varepsilon} \kappa_j(y') |y-y'|}}{\kappa_j(y')} \varphi_j(y', z) \overline{\varphi_j(y', z')}. \quad (5.2.1)$$

Note que lejos de la fuente la ecuación diferencial que define a la función de Green corresponde con la ecuación homogénea. Por lo tanto el término principal de la asintótica de la ecuación de Schrödinger bidimensional también está dado por la expresión anterior. Por otra parte, en el Capítulo 4 la solución de la ecuación de Schrödinger se obtuvo asintóticamente a partir del método WKB

$$\Psi_\varepsilon(y, z) \sim \sum_{j=1}^{N(y')} C_j \frac{\varphi_j(y, z)}{\sqrt{\kappa_j(y)}} e^{\pm \frac{i}{\varepsilon} \int_y^z \kappa_j(\sigma) d\sigma}, \quad (5.2.2)$$

y quedaron por determinar ciertas constantes C_j que resultaron del proceso de integración. Como ambas soluciones asintóticas corresponden a la misma ecuación diferencial es posible obtener las constantes C_j a partir de la comparación de ambas soluciones. Comparando la ecuación (4.1.23) evaluada en el punto y' y (5.2.1) nos da la expresión para C_j

$$C_j(y', z') = -\frac{\varepsilon \overline{\varphi_j(y', z')}}{2i \sqrt{\kappa_j(y')}}. \quad (5.2.3)$$

Sustituyendo (5.2.3) en la ecuación (5.2.2) se tiene la solución de la propagación de modos en la ecuación de Schrödinger bidimensional lejos del punto de la fuente (y', z')

$$\Psi_\varepsilon(y, z; y', z') = -\frac{\varepsilon}{2i} \sum_{j=1}^{N(y')} \frac{\varphi_j(y, z) \overline{\varphi_j(y', z')} e^{\pm \frac{i}{\varepsilon} \int_{y'}^y \kappa_j(\sigma) d\sigma}}{\sqrt{\kappa_j(y')} \sqrt{\kappa_j(y)}} + \mathcal{O}(\varepsilon^2). \quad (5.2.4)$$

5.3. Determinación computacional de los modos en guías de ondas cuánticas con perturbaciones

Las simulaciones por computadora son una herramienta para la investigación de las propiedades cuánticas de ciertos procesos que no pueden ser observados en el laboratorio. Al considerar las dimensiones nanométricas de las guías de ondas cuánticas se realizan simulaciones en tres ejemplos diferentes en los cuales se determina la configuración modal en el interior de las guías de ondas. Estas simulaciones se realizan usando el software Wolfram Mathematica 11.0. A continuación se presentan los parámetros de simulación que tienen en común los tres ejemplos considerados.

- Parámetros de simulación para el método SPPS aplicado al problema vertical en el eje z :
 - Con la instrucción `SetPrecision` se establece una precisión numérica de 60 cifras decimales en los resultados numéricos. Cabe mencionar, que esta precisión es superior a la precisión de máquina del punto flotante. También con respecto al eje z las interfaces $[\Phi_-, \Phi_+]$ se dividen en el número $M = 1000$ de subintervalos verticales, los cuales tienen una longitud Δz dada por la siguiente fórmula

$$\Delta z = \frac{\Phi_+ - \Phi_-}{M}.$$

- De igual manera, el número de términos con que se truncan las series de potencias formales es $N = 50$, que conduce a calcular hasta las potencias formales $\tilde{X}^{(100)}$ y $X^{(101)}$.
- Para cada simulación de los tres ejemplos de guías de ondas se va a considerar un pozo de potencial de profundidad constante $V_0(y', z) = -47$, $\Phi_-(y') \leq z \leq \Phi_+(y')$. Este pozo de potencial V_0 está definido con respecto a las unidades $z := \frac{\sqrt{2m^*}}{\hbar} x_3$.
- Parámetros de la simulación en la dirección horizontal y :
 - Con la instrucción `SetPrecision` se establece una precisión numérica también de 60 cifras decimales en los resultados numéricos. Con respecto al eje y se va a considerar una región de la guía de onda en la cual se van a calcular los modos de propagación lejos de la fuente puntual. La región de la ventana está definida por las esquinas (a, Φ_-) y (b, Φ_+) , $a < b$, la cual estará lejos de la fuente puntual localizada en el origen $(y', z') = (0, 0)$. Horizontalmente, esta ventana se va a dividir en $P = 70$ subintervalos, cuya longitud Δy se calcula con la siguiente fórmula

$$\Delta y = \frac{b - a}{P}.$$

En las simulaciones que siguen se toma $a = 97.5$ y $b = 102.5$, considerando que las unidades están dadas de acuerdo con $y := \frac{\sqrt{2m^*}}{\hbar} w$.

Como se verá más adelante, se obtuvieron tres modos guiados cuyos módulos se calcularon a partir de las expresiones

$$|\Psi_{\varepsilon,j}(y, z; y', z')| = \left| \frac{\varepsilon}{2i} \frac{\varphi_j(y, z) \overline{\varphi_j(y', z')} e^{\pm \frac{i}{\varepsilon} \int_{y'}^y \kappa_j(\sigma) d\sigma}}{\sqrt{\kappa_j(y')} \sqrt{\kappa_j(y)}} \right|, \quad j = 1, 2, 3,$$

la gráfica de cada modo se obtuvo con la instrucción `Plot3D`. Así mismo, también se consideró la superposición de estos tres modos, es decir,

$$|\Psi_{\varepsilon}(y, z; y', z')| = \left| \frac{\varepsilon}{2i} \sum_{j=1}^3 \frac{\varphi_j(y, z) \overline{\varphi_j(y', z')} e^{\pm \frac{i}{\varepsilon} \int_{y'}^y \kappa_j(\sigma) d\sigma}}{\sqrt{\kappa_j(y')} \sqrt{\kappa_j(y)}} \right|.$$

La gráfica bidimensional de los modos se realiza con la instrucción `DensityPlot`, la cual genera una gráfica cuyos colores se determinan a partir de los valores de densidad (intensidad) de la función considerada.

Ejemplo 28 (Guía de ondas cuántica sin perturbaciones). En este primer ejemplo se va a considerar una guía de ondas sin perturbaciones, en la cual sus fronteras Φ_- y Φ_+ son uniformes, ver Figura 5.3.1. En este caso se asume que $\Phi_- = -0.5$ y $\Phi_+ = 0.5$. Después de realizar los cálculos y aplicar el método numérico se obtuvieron tres modos. En la Figura 5.3.2 se muestra el módulo de los modos individuales en 3D correspondientes a: a) el primer modo, b) el segundo modo y c) el tercer modo. Por último, en la Figura 5.3.3 se muestra el módulo de la superposición de estos tres modos. En la Figura 5.3.3 se observa la propagación de la onda cuántica a lo largo del eje y , donde se muestra la interpretación probabilística de encontrar a la partícula, es decir, $\|\varphi_j(y', z')\|^2$. Se puede ver que la probabilidad más alta de encontrar a la partícula es donde hay mayor intensidad. Se puede observar que los puntos de mayor probabilidad se distribuyen periódicamente a lo largo del eje de la guía cuántica. La intensidad va a depender de la cantidad de partículas, por ejemplo, portadores de carga transportándose en esta guía de ondas cuántica.

Ejemplo 29 (Estrechamiento del núcleo de la guía de ondas). En este segundo ejemplo se va a considerar que las fronteras de la guía de ondas están perturbadas de tal forma que el núcleo se estreche, ver Figura 5.3.4. Más precisamente, consideramos que las interfaces se definen por las fórmulas

$$\Phi_-(y) = \begin{cases} -0.5, & 96.5 \leq y < 97.5, \\ 0.03 \cos(0.2\pi y) - 0.5, & 97.5 \leq y \leq 102.5, \\ -0.5, & 102.5 < y \leq 103.5, \end{cases}$$

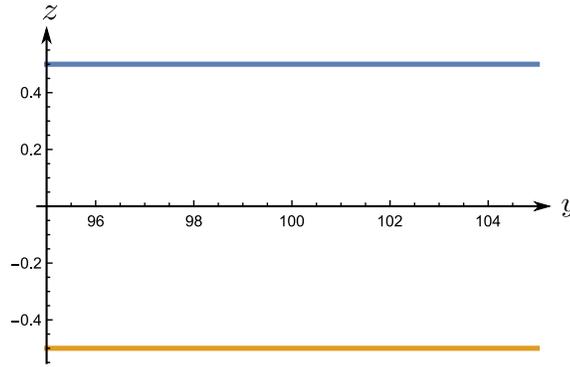


Figura 5.3.1. Ejemplo de una guía de ondas sin perturbaciones del Ejemplo 28.

$$\Phi_+(y) = \begin{cases} 0.5, & 96.5 \leq y < 97.5, \\ -0.03 \cos(0.2\pi y) + 0.5, & 97.5 \leq y \leq 102.5, \\ 0.5, & 102.5 < y \leq 103.5. \end{cases}$$

En la Figura 5.3.5 se muestra el módulo de los modos individuales correspondientes a: a) el primer modo, b) el segundo modo y c) el tercer modo. Por último, en la Figura 5.3.6 se muestra el módulo de la superposición de estos tres modos. En la Figura 5.3.6 se observa la propagación de la onda cuántica a lo largo del eje y , donde se muestra la interpretación probabilística de encontrar a la partícula, es decir, $\|\varphi_j(y', z')\|^2$. Se puede ver que la probabilidad más alta de encontrar a la partícula es donde hay mayor intensidad, y esta interpretación probabilística va a depender de la sección de la guía cuántica, ya que en la sección del núcleo donde la guía se estrecha se observa la incertidumbre de Heisenberg (1.1.2), es decir, si se estrecha la guía en la dirección de z , donde Δz es la indeterminación en la posición de la partícula, entonces la indeterminación en el momento de la partícula, Δp , aumentará y dará como resultado el efecto túnel en la guía de ondas cuántica en los estratos externos. La intensidad también va a depender de la cantidad de partículas, por ejemplo, portadores de carga transportándose en esta guía de ondas cuántica.

Ejemplo 30 (Ensanchamiento del núcleo de la guía de ondas). En este tercer ejemplo se va a considerar que las fronteras de la guía de ondas están perturbadas de tal forma que el núcleo se ensancha, ver Figura 5.3.7. Más precisamente, consideramos que las interfaces se definen por las fórmulas

$$\Phi_-(y) = \begin{cases} -0.5, & 96.5 \leq y < 97.5, \\ -0.03 \cos(0.2\pi y) - 0.5, & 97.5 \leq y \leq 102.5, \\ -0.5, & 102.5 < y \leq 103.5, \end{cases}$$

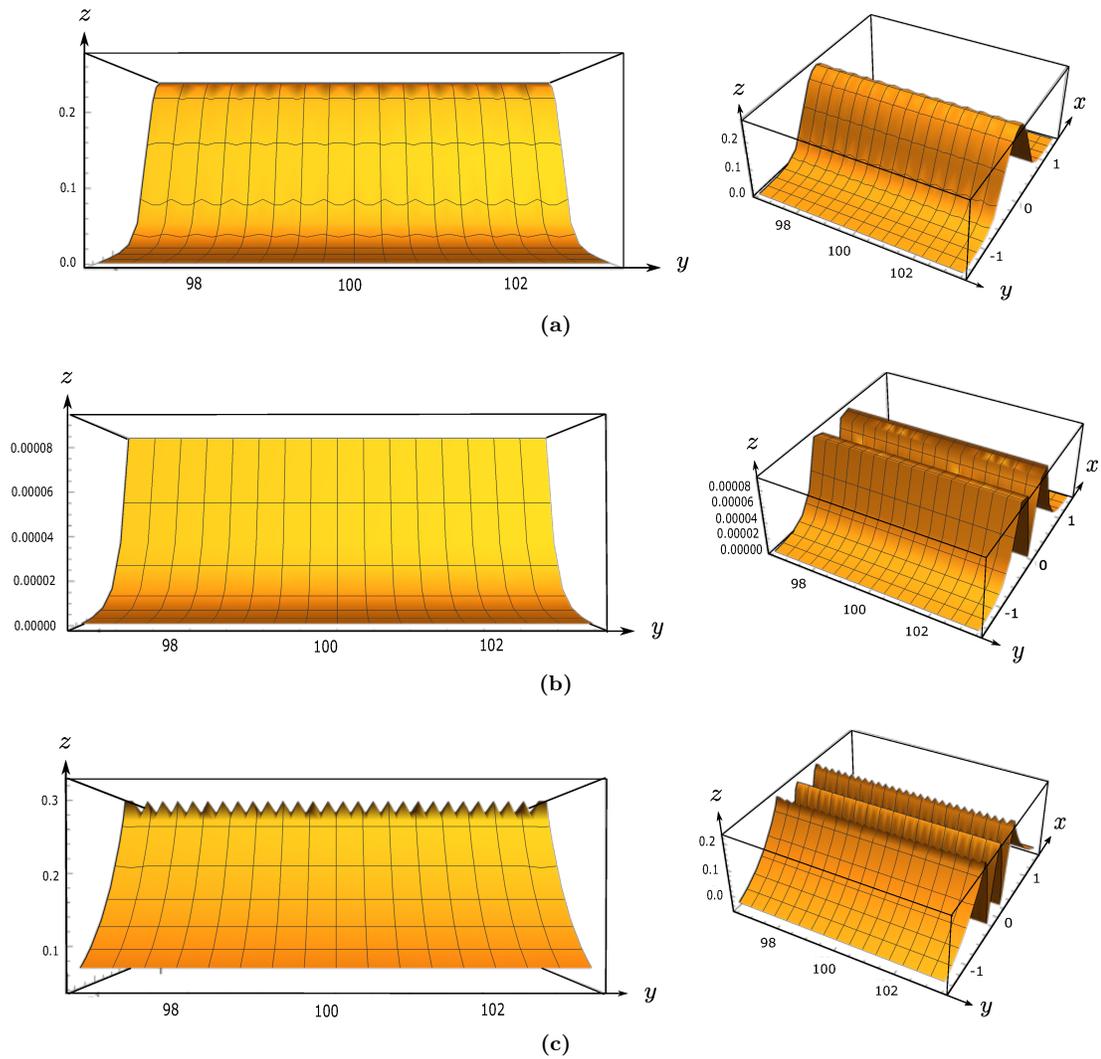


Figura 5.3.2. Vista frontal y vista predeterminada de los módulos de los modos de la guía de ondas del Ejemplo 28: a) Primer modo; b) segundo modo; y c) tercer modo.

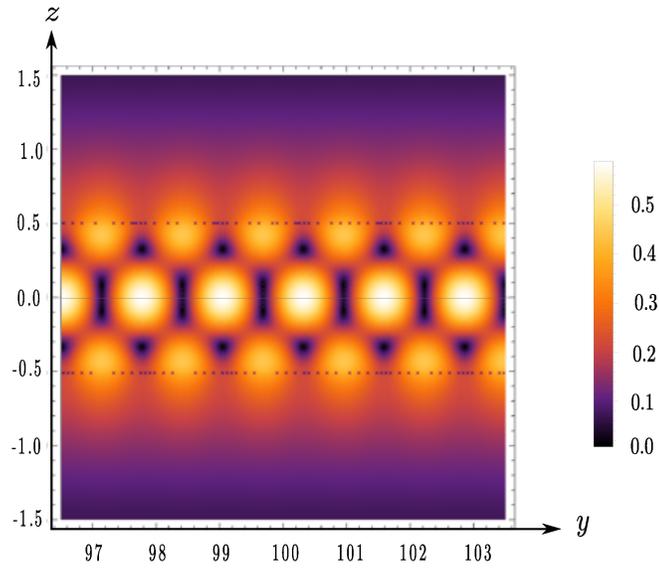


Figura 5.3.3. Módulo de los modos en la guía de ondas cuántica sin perturbaciones del Ejemplo 28.

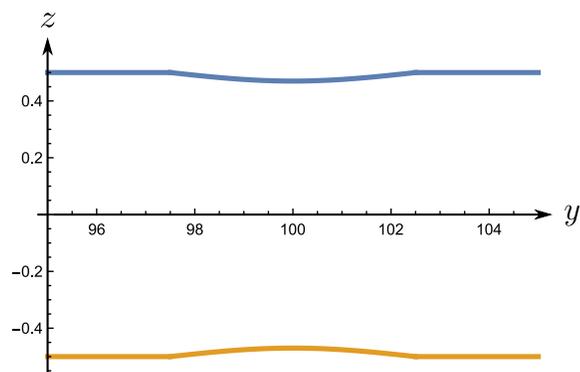


Figura 5.3.4. Ejemplo de una guía de ondas con perturbación estrecha del Ejemplo 29.

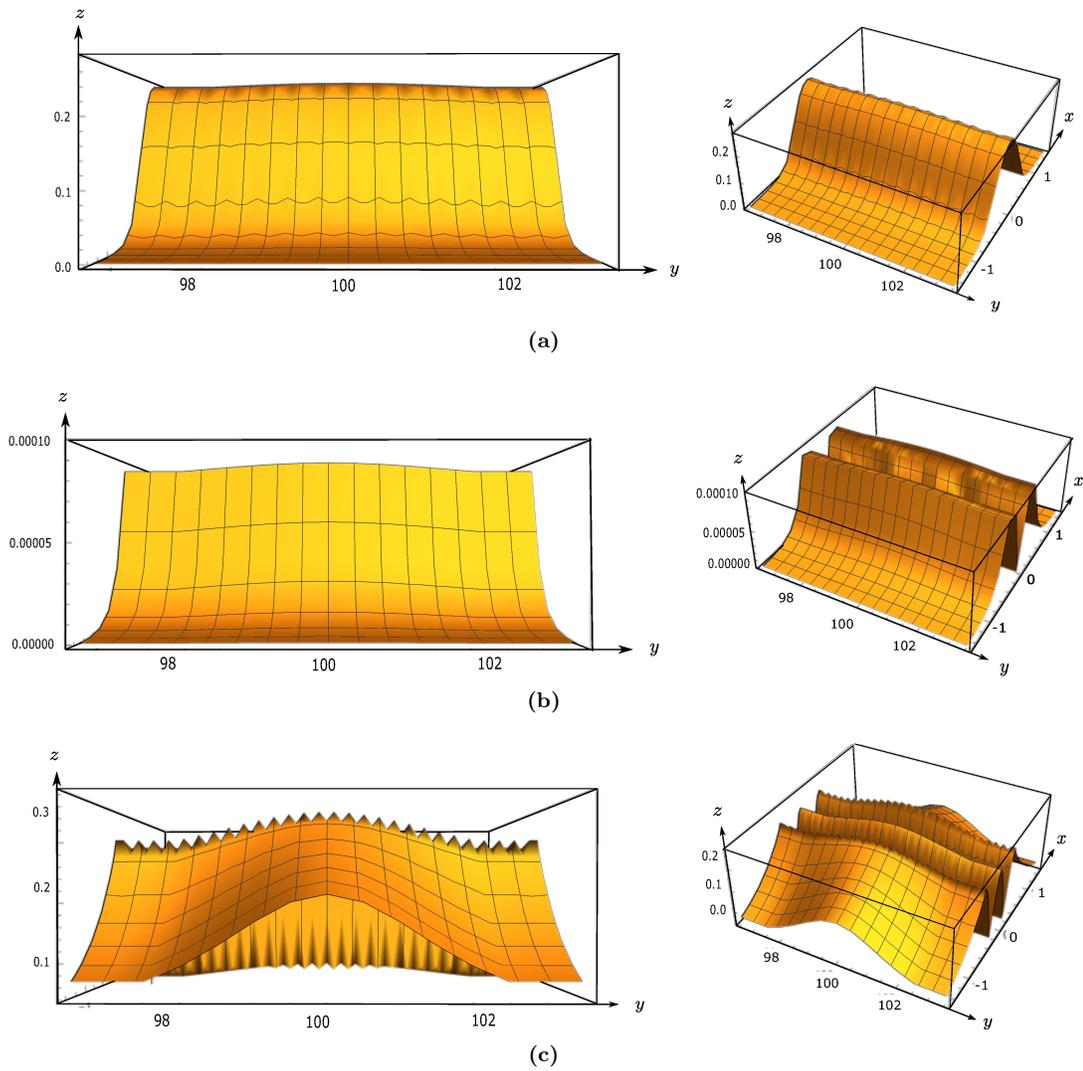


Figura 5.3.5. Vista frontal y vista predeterminada de los módulos de los modos de la guía de ondas del Ejemplo 29: a) Primer modo; b) segundo modo; y c) tercer modo.

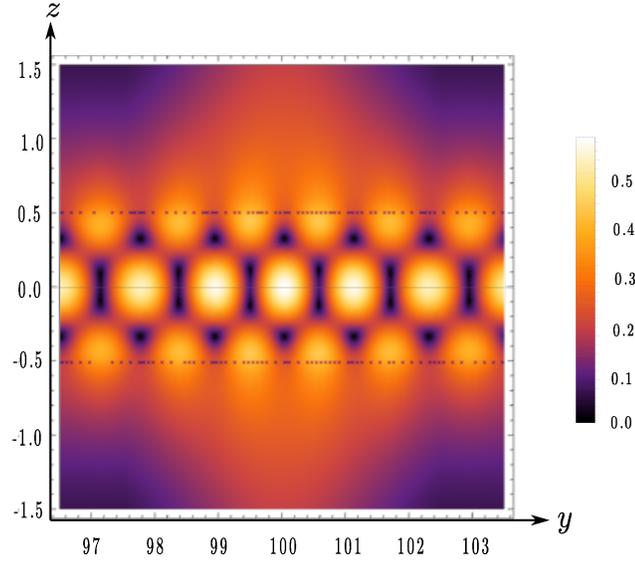


Figura 5.3.6. Módulo de los modos en la guía de ondas cuántica con perturbación estrecha del Ejemplo 29.

$$\Phi_+(y) = \begin{cases} 0.5, & 96.5 \leq y < 97.5, \\ 0.03 \cos(0.2\pi y) + 0.5, & 97.5 \leq y \leq 102.5, \\ 0.5, & 102.5 < y \leq 103.5. \end{cases}$$

En la Figura 5.3.8 se muestra el módulo de los modos individuales correspondientes a: a) el primer modo, b) el segundo modo y c) el tercer modo. Por último, en la Figura 5.3.9 se muestra el módulo de la superposición de estos tres modos. Por último, en la Figura 5.3.9 se observa la propagación de la onda cuántica a lo largo del eje y , donde se muestra la interpretación probabilística de encontrar a la partícula, es decir, $\|\varphi_j(y', z')\|^2$. Se puede ver que la probabilidad más alta de encontrar a la partícula es donde hay mayor intensidad, y esta interpretación probabilística va a depender de la sección de la guía cuántica, como en el Ejemplo 29, ya que en la sección del núcleo donde la guía se amplía se observa la incertidumbre de Heisenberg (1.1.2) nuevamente, es decir, si se amplía la guía en la dirección z , entonces la indeterminación en el momento de la partícula decrece. La intensidad también va a depender de la cantidad de partículas, por ejemplo, portadores de carga transportándose en esta guía de ondas cuántica.

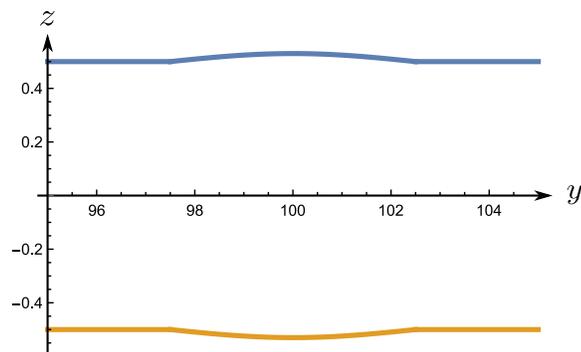


Figura 5.3.7. *Ejemplo de una guía de ondas con perturbación ensanchada del Ejemplo 30.*

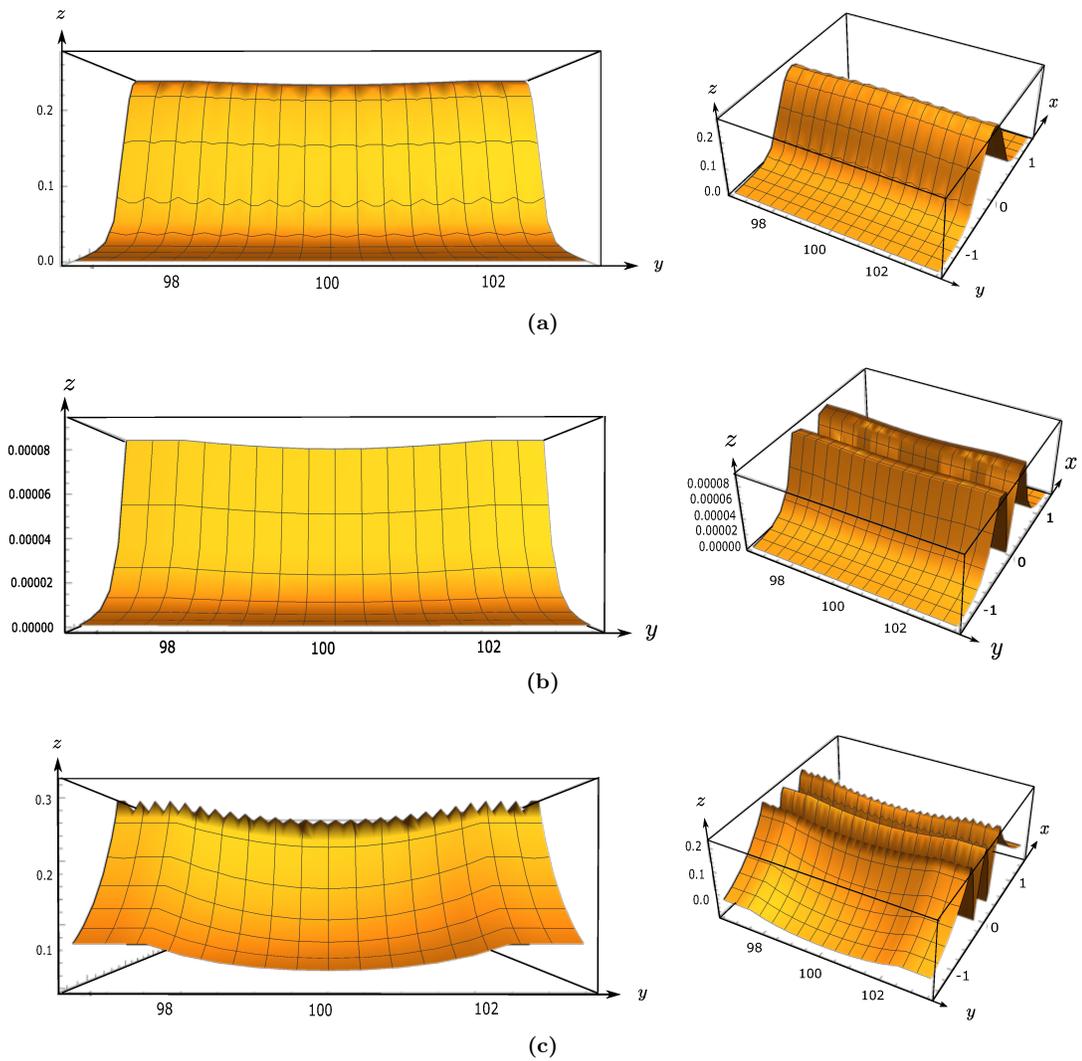


Figura 5.3.8. Vista frontal y vista predeterminada de los módulos de los modos de la guía de ondas del Ejemplo 30: a) Primer modo; b) segundo modo; y c) tercer modo.

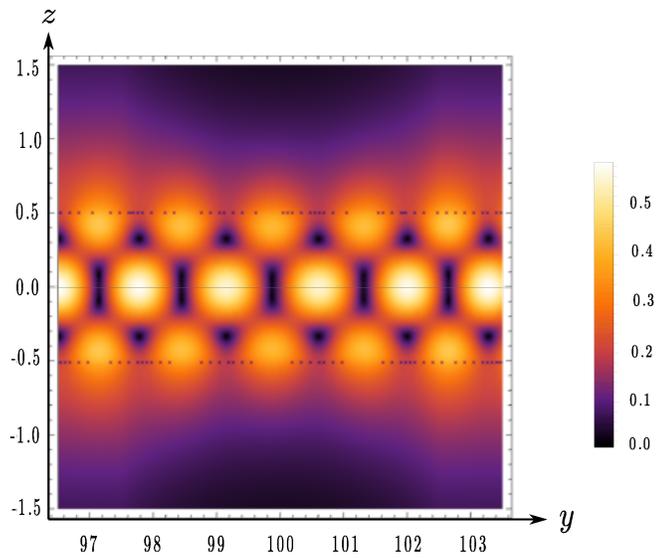


Figura 5.3.9. Módulo de los modos en la guía de ondas cuántica con perturbación ensanchada del Ejemplo 30.

Capítulo 6

Conclusiones generales

En los últimos años, las heteroestructuras semiconductoras se han convertido en el modelo de sistemas cuánticos para investigaciones gracias a la disponibilidad de materiales cristalinos a los cuales se les puede dopar de cierta manera para generar impurezas, con la finalidad de confinar portadores de carga para un transporte cuántico. El descubrimiento de este transporte proporciona el desarrollo de dispositivos innovadores para el futuro. De hecho, la electrónica de estado sólido y la optoelectrónica están experimentando cambios de desarrollo en el diseño y en la nanofabricación de guías de ondas cuánticas.

En las guías de ondas cuánticas existen variaciones en sus interfaces generadas por las imperfecciones intrínsecas o extrínsecas de la estructura del material cuando se forma la heterounión. El análisis de este tipo de guías de ondas para una propagación de ondas cuánticas en el eje longitudinal de la guía se hace a partir de la aproximación adiabática, donde se va a introducir un parámetro pequeño ε , que describe la lentitud del cambio en estas interfaces.

Sin embargo, al abordar la propagación de ondas cuánticas en una guía de ondas estratificada con variaciones lentas en sus interfaces descrita por una ecuación de Schrödinger estacionaria tridimensional, se necesitó su análisis en una guía de ondas en un sistema rectangular de coordenadas, sin variaciones en sus interfaces y descrita por una ecuación tipo Schrödinger unidimensional. Este análisis nos permitió abordar un problema vertical de tipo Sturm-Liouville que esta asociado a una ecuación de Schrödinger unidimensional libre de unidades con ciertas condiciones de frontera para caracterizar el espectro discreto, y así obtener las energías permitidas y las funciones propias normalizadas. De igual manera, se obtuvo una ecuación de dispersión en forma cerrada que relaciona los tres estratos para establecer las condiciones de frontera que hacen que las ondas cuánticas se propaguen en el núcleo. Por último, se caracterizó los estados de dispersión y se obtuvieron las dos familias de funciones propias generalizadas normalizadas correspondientes.

Actualmente, se han desarrollado técnicas modernas como el método SPPS para abordar problemas de Sturm-Liouville con valores en la frontera, así como la ecuación de Schrödinger unidimensional en forma de series de potencias del parámetro espectral. Al abordar este método exacto SPPS, se logró expresar la solución general del núcleo de la guía de ondas y la ecuación de dispersión como funciones analíticas en términos del parámetro espectral, dadas por su serie de Taylor. De esta ma-

nera, se realizó una comparación de los ceros de la ecuación de dispersión en forma cerrada con la ecuación de dispersión obtenida en series de potencias del parámetro espectral, para establecer la validez del método SPPS y abordar también potenciales variables que no se podrían realizar con el análisis con ecuaciones trascendentales. Los resultados del método SPPS en la solución numérica de la ecuación de Schrödinger unidimensional fueron de gran utilidad para abordar el método WKB, que requiere las funciones propias de este problema espectral.

Por tanto, el estudio de la ecuación de Schrödinger unidimensional es útil para abordar la guía de ondas con perturbaciones y así obtener soluciones asintóticas con la aplicación del método WKB. Este método construye soluciones aproximadas suficientemente buenas de funciones de onda para estudiar el comportamiento de estos problemas cuánticos. Es decir, nos interesa el comportamiento asintótico no para una solución exacta, porque en la práctica es imposible conseguirlas, pero sí se puede extraer información del comportamiento asintótico y que resulta sumamente valiosa. También la aproximación WKB es útil para abordar problemas de ecuaciones diferenciales con un pequeño parámetro, como es el caso de la guía de ondas con perturbaciones lentas en sus interfaces, donde su comportamiento es descrito por la ecuación de Schrödinger bidimensional; además se buscaron soluciones para esta ecuación a partir de una solución propuesta como un Ansatz. Este Ansatz representa una superposición de ondas planas con fases reales y amplitudes, las amplitudes van a estar descritas por las funciones propias normalizadas del problema vertical de tipo Sturm-Liouville abordado por el método SPPS, ya que se conoce este comportamiento en el eje vertical. De igual manera, este Ansatz ha sido estudiado en propagación de ondas electromagnéticas y acústicas.

Sin embargo, al obtener la solución asintótica WKB faltó por determinar unas constantes de integración C_j , así que se emplearon los resultados anteriores para calcular la función de Green de la guía de ondas perturbada. Con lo cual el término principal de la asintótica de la función de Green dado únicamente por modos guiados, se construyó como una expansión de las funciones propias del problema vertical auxiliar. Cabe destacar que las ondas laterales son oscilantes conforme $|z| \rightarrow \infty$, por lo tanto se usó el método de fase estacionaria, ya que estas integrales físicamente representan una superposición de ondas cuánticas, y a grandes distancias de la fuente pueden ser despreciables.

Obteniendo ambas soluciones asintóticas la solución WKB y la solución de la función de Green, éstas corresponden a la misma ecuación de Schrödinger bidimensional homogénea libre de unidades, y fue posible obtener las constantes C_j a partir de la comparación de ambas soluciones, y así sustituirlas en la solución WKB cuando las fronteras cambian lentamente para determinar los modos de este problema cuántico.

Por último, se hizo la implementación numérica de los modos de la propagación de ondas cuánticas en diferentes ejemplos de estudio de guías de ondas con perturbaciones.

Capítulo 7

Productos desarrollados en esta tesis

1. Se asistió como ponente al Congreso Nacional de Ingeniería Electromecánica y de Sistemas (XVI CNIES 2017) impartido por el Comité Organizador a través de la Sección de Estudios de Posgrado e Investigación Escuela Superior de Ingeniería Mecánica y Eléctrica Unidad Profesional Adolfo López Mateos, Zacatenco, y fue realizado los días 13-17 de Noviembre del 2017.
2. Se produjo un artículo en la memoria del Congreso Nacional de Ingeniería Electromecánica y de Sistemas (XVI CNIES 2017) impartido por el Comité Organizador a través de la Sección de Estudios de Posgrado e Investigación Escuela Superior de Ingeniería Mecánica y Eléctrica Unidad Profesional Adolfo López Mateos, Zacatenco.
3. Se asistió como ponente al 51 Congreso Nacional de la Sociedad Matemática Mexicana (51 CNSMM 2018) impartido por la Universidad Juárez Autónoma de Tabasco, Zona de la Cultura, Villahermosa, Tabasco. Realizado los días 21-26 de Octubre del 2018.



Figura 7.0.1. Diploma XVI Congreso Nacional de Ingeniería Electromecánica y de Sistemas 2017.

Análisis de los estados cuánticos de un sistema unidimensional a partir de las soluciones de la ecuación de Schrödinger

Samantha A. C. Loreda Ramírez¹, Vladimir S. Rabinovich^{1,2}, Víctor Barrera-Figueroa¹.

¹Instituto Politécnico Nacional, Sección de Estudios de Posgrado e Investigación UPIITA, Av. Instituto Politécnico Nacional No. 2580, Col Barrio la Laguna Ticomán, México, CDMX, C.P. 07340

²Instituto Politécnico Nacional, Av. Luis Enrique Erro S/N, Unidad Profesional Adolfo López Mateos, Zacatenco, C.P. 07738, México, CDMX.

e-mail: sloredor1000@alumno.ipn.mx, vladimir.rabinovich@gmail.com, vbarreraf@ipn.mx

Resumen—En este trabajo se aborda el operador de Schrödinger unidimensional estacionario para el estudio de los estados ligados que resultan de la interacción de partículas cuánticas masivas con un pozo de potencial. Se presenta el análisis del espectro de energías del sistema, el cual se calcula a partir de una ecuación de dispersión que se obtiene explícitamente en el siguiente trabajo.

Palabras Clave—Ecuación de dispersión, heteroestructuras, estados ligados, operador de Schrödinger estacionario.

Abstract—This paper considers the one-dimensional stationary Schrödinger operator for the study of the bound states resulting from the interaction of massive quantum particles with a potential well. The energy spectrum of the system is calculated from a dispersion equation, which is explicitly obtained in this article.

Keywords— Dispersion equation, heterostructures, bound states, stationary Schrödinger operator.

I. INTRODUCCIÓN

Consideremos la estructura de la Figura 1 que representa una guía de ondas cuántica estratificada en un sistema de coordenadas rectangulares.

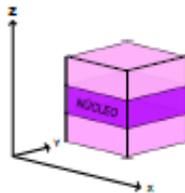


Figura 1.- Representación esquemática de un guía de ondas cuánticas.

Este tipo de estructuras se encuentran en aplicaciones prácticas que incluyen a los alambres cuánticos y otras heteroestructuras semiconductoras [1], como la estructura de un alambre cuántico, que se define como la reducción del tamaño de un material de dos de sus dimensiones a tamaño nanométrico y

manteniendo la tercera dimensión sin reducir, la estructura resultante se llama alambre o hilo cuántico [2] que se muestra en la Figura 2

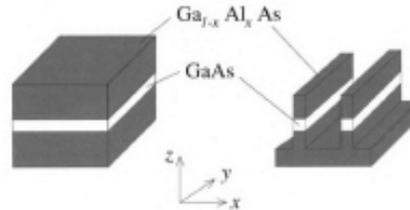


Figura 2.- Alambre cuántico formada por tres heteroestructuras semiconductoras [3].

La ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo [4] en la región $\Omega \subset \mathbb{R}^3 \times (0, T)$ se expresa de la siguiente manera

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m} \Delta + V(x) \right) \Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} \quad (1)$$

donde $V(x)$ representa la función potencial, $\Psi(x, t)$ es la función de onda dependiente del tiempo, \hbar es la constante de Planck reducida, y m es la masa de la partícula cuántica.

Esta es una ecuación en derivadas parciales de tipo parabólico, sin embargo, en el análisis de los estados cuánticos es de interés considerar los estados estacionarios de energía constante E definidos por

$$\Psi(x, t) = \psi(x) e^{-\frac{Et}{\hbar}}. \quad (2)$$

El parámetro E que representa la energía de la partícula está relacionada con la frecuencia lineal ν de acuerdo con la relación de Planck.

$$E = h\nu. \quad (3)$$



Figura 7.0.2. Diploma 51 Congreso Nacional de la Sociedad Matemática Mexicana 2018.

Capítulo 8

Trabajo a futuro

Al trabajar con la solución de la ecuación de Schrödinger bidimensional para obtener una representación modal de las ondas cuánticas que se propagan en el interior de la guía de ondas a partir de la aproximación WKB usando el método SPPS para una implementación numérica, y la técnica de la función de Green para obtener las constantes de integración se puede considerar como trabajo a futuro una fuente cuántica en movimiento.

El movimiento de una fuente cuántica a lo largo del eje longitudinal y de la guía de onda nos puede llevar a la descripción de la radiación Vavilov–Cherenkov [9] (ver referencias ahí incluidas), la cual es muy conocida a nivel electromagnético y a nivel acústico. Sin embargo, la radiación Vavilov–Cherenkov es poca conocida a nivel cuántico. En el caso cuántico la radiación se puede considerar también cónica porque se describe por una ecuación de onda. Lo interesante será saber qué pasa por ejemplo, en la punta del cono, ya que ésta es singular, y se tendría que trabajar con la aproximación asintótica desde este punto de vista.

Bibliografía

- [1] Acosta V, Cowan C L, Graham B J. Curso de Física Moderna. HARLA: México, 1973.
- [2] Aleksandrov A D, Kolmogorov A N, Laurentiev M A. La Matemática 2: Su Contenido, Métodos y Significado. 2nd ed. Alianza Universidad: España, 1976.
- [3] Aleksandrov A D, Kolmogorov A N, Laurentiev M A. La Matemática 3: Su Contenido, Métodos y Significado. 2nd ed. Alianza Universidad: España, 1976.
- [4] Avouris P, Hertel T, Martel R, Schmidt T, Shea H R, Walkup R E. Carbon nanotubes: nanomechanics, manipulation, and electronic devices. *Appl. Surf. Sci.* **141**: 201–209, 1999.
- [5] Avramidi I. Lecture Notes on Asymptotic Expansion, 2000. (Available in https://www.researchgate.net/publication/255595457_Lecture_Notes_on_Asymptotic_Expansion).
- [6] Barrera-Figueroa V. Series de Potencias del Parámetro Espectral Para Problemas Elípticos con Fuentes. Disertación Doctoral. CINVESTAV-Zacatenco. Departamento de Matemáticas. México, D.F., 2013.
- [7] Barrera-Figueroa V, Kravchenko V V, Rabinovich V S. Spectral parameter power series analysis of isotropic planarly layered waveguides. *Appl. Anal.* **93**: 729-755, 2014.
- [8] Barrera-Figueroa V, Rabinovich V S. Asymptotics of the far field generated by a modulated point source in a planarly layered electromagnetic waveguide. *Math. Method Appl. Sci.* **38**: 1970-1989, 2014.
- [9] Barrera-Figueroa V, Rabinovich V S. Cherenkov radiation in a planarly layered waveguide in the case of polarized waves. *Bol. Soc. Mat. Mex.* **22**: 431-459, 2016.
- [10] Barrera-Figueroa V, Rabinovich V S. Electromagnetic field generated by a modulated moving point source in a planarly layered waveguide. *Russian J. Math. Phys.* **23**: 139-163, 2016.
- [11] Beenakker C W J, Van Houten H. Quantum transport in semiconductor nanostructures. *Física del estado sólido*. Elsevier, **44**: 1-228, 1991.
- [12] Belov V V, Dobrokhotov S Y, Tudorovskiy T Y. Operator separation of variables for adiabatic problems in quantum and wave mechanics. *J. Engineering Math.* **55**: 183–237, 2006.

- [13] Berezin F A, Shubin M A. The Schrödinger Equation. Kluwer Academic Publishers: Netherlands, 1991.
- [14] Boyce W E, DiPrima R C. Ecuaciones Diferenciales y Problemas con Valores en la Frontera. 4ta ed. Limusa-Wiley: México, 2000.
- [15] Bryllert T, Wernersson L, Löwgren T, Samuelson L. Vertical wrap-gated nanowire transistors. *Nanotechnology*, **17**: S227–S230, 2006.
- [16] Burridge R, Weinberg G. Horizontal Rays and Vertical Modes. *Lecture Notes in Physics* 70. Wave Propagation and Underwater Acoustics. Springer: Berlín: 86–152, 1977.
- [17] Carini J P, Londergan J T, Murdock D P, Trinkle D, Yung C S. Bound states in waveguides and bent quantum wires. I. Applications to waveguide systems. *Phys. Rev.* **55**: 9842-9851, 1997.
- [18] 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.* **52**:1-10, 2011.
- [19] Castillo-Pérez R, Rabinovitch V S, Urbano-Altamirano F. Cálculo de eigenvalores para guías de onda cuántica por medio de series de potencias de parámetro espectral. XIII CNIES, No. 139-264-1, 2012.
- [20] Cohen-Tannoudji C, Diu B, Laloe F. Quantum Mechanics. Volume 1. Wiley-VCH: New York, 1996.
- [21] De la Peña L. Introducción a la Mecánica Cuántica. 3ra ed. Científicas universitarias. Fondo de cultura económica: México. 2006.
- [22] De Llano M. Mecánica Cuántica. 1er reimpression. Facultad de ciencias UNAM: México, 2006.
- [23] Duclos P, Exner P. Curvature-induced bound states in quantum waveguides in two and three dimensions. *Rev. Math. Phys.* **07**: 73-102, 1995.
- [24] Dudley D G. Mathematical Foundations for Electromagnetic Theory. IEEE PRESS: New York, 1994.
- [25] Entin M V, Magarill L I. Electrons in a twisted quantum wire. *Phys. Rev.* **66**: 205308, 2002.
- [26] Esaki L, Chang L L. Effects of quantum states on the photocurrent in a "superlattice". *Phys. Rev. Lett.* **34**: 1509-1512, 1975.
- [27] Esaki L, Chang L L. New transport phenomenon in a semiconductor "superlattice". *Phy. Rev. Lett.* **33**: 495-498, 1974.
- [28] Esaki L, Tsu R. Superlattice and Negative Differential Conductivity in Semiconductors. *IBM J. Research Dev.* **14**: 61-65, 1970.

- [29] Exner P, Kovarík H. Quantum Waveguides. Springer: Czech Rep. 2015.
- [30] Exner P, Seba P. Bound states in curved quantum waveguides. *J. Math. Phys.* **30**: 2574-2580, 1989.
- [31] Ferry D K, Goodnick S M, Bir J. Transport in Nanostructures. Cambridge University Press: New York, 2009.
- [32] Fedoryuk M V. Asymptotic Analysis. Linear Ordinary Differential Equations. Springer-Verlag: Moscow, 1983.
- [33] Galindo A, Pascual P. Quantum Mechanics II. Springer-Verlag: Germany, 1991.
- [34] Hacyan S. Mecánica Cuántica para Principiantes. 1er ed. La ciencia para todos 239. Divulgación científica: México, 2016.
- [35] Harrison P. Quantum Wires and Dots. Theoretical and Computational Physics of Semiconductor Nanostructures. 2nd ed. John Wiley & Sons: England, 2005.
- [36] Jian-Bai X, Duan-Yang L, Wei-Dong S. Quantum waveguide microcircuits. Pan Stanford Publish.: U.S.A. 2018.
- [37] Kamefuchi S. Proceedings of the International Symposium. Foundations of Quantum Mechanics in the Light of New Technology. Central Research Laboratory Hitachi. Phys. Soc.: Tokyo Japan, 1984.
- [38] Kolmogorov A N, Fomín S V. Elementos de la Teoría de Funciones y del Análisis Funcional. 2nd ed. URSS, Editorial MIR: Moscú, 1975.
- [39] Kolmogorov A N, Fomin S V. Measure, Lebesgue Integrals, and Hilbert Space. Academic Press: New York, 1960.
- [40] Kravchenko V V. A representation for solutions of the Sturm–Liouville equation. Complex variables and elliptic equations: *International J.* **53**: 775-789 , 2008.
- [41] Kravchenko V V. Applied Pseudoanalytic Function Theory. Front. Math. Birkhäuser-Verlag: Basel, 2009.
- [42] Kravchenko V V, Porter R M. Spectral parameter power series for Sturm–Liouville problems. *Math. Method App. Sci.* **33**: 459-468, 2010.
- [43] Kreyszig E. Introductory Functional Analysis with Applications. John-Wiley&Sons: New York, 1978.
- [44] Lamberti C, Agostini G. Characterization of Semiconductor Heterostructures and Nanostructures. 2nd ed. ELSEVIER: Amsterdam, 2013.

- [45] Londergan J T, Carini J P, Murdock D P. Binding and Scattering in Two-Dimensional Systems. Applications to Quantum Wires, Waveguides and Photonic Crystals. Springer: New York, 1999.
- [46] Magarill L I, Entin M V. Electrons in curvilinear quantum wire. J. Experimental Theor. Phys. **96**: 766–774, 2003.
- [47] Mandal A, Chakrabarti S. Impact of Ion Implantation on Quantum Dot Heterostructures and Devices. Springer: Singapore, 2017.
- [48] Maslov V P, Fedoriuk M V. Semi-Classical approximation in quantum mechanics. Math. Phys. Appl. Math. **7**, 1981.
- [49] Mathematica 11.0. Documentation center. Wolfram Language & System. User´s guide; 2014.
- [50] McEvoy J P, Zárate O. Teoría Cuántica para Principiantes. Sexta reimpresión. Era naciente, Documentales Ilustrados: Buenos Aires, 2013.
- [51] Mello P A, Kumar N. Quantum Transport in Mesoscopic System. Complexity and Statistical Fluctuations. Oxford University Press: New York, 2004.
- [52] Pérez R M, Rabinovich V S., Sánchez I M. Adiabatic approximation of the Green function of the Helmholtz operator in almost stratified medias. Russian J. Math. Phys. **14**: 201–212, 2007.
- [53] Poole C P, Owens F J. Introduction to Nanotechnology. Wiley-Interscience, John Wiley & Sons: New Jersey, 2003.
- [54] Qing-Hua Q. Green´s Function and Boundary Elements of Multifield Materials. 1st edn. ELSEVIER: Amsterdam, 2007.
- [55] Richtmyer R D. Principles of Advanced Mathematical Physics, Volume I. Springer-Verlag: New York, 1978.
- [56] Rídnik V I. ¿Qué es la Mecánica Cuántica?. URSS, Editorial MIR: Moscú, 1977.
- [57] Romera G E, Boscá Díaz-Pintado, Arias S A, Gálvez C F, Porras S J. Métodos matemáticos: Problemas de espacios de Hilbert, operadores lineales y espectros. Paraninfo: España, 2013.
- [58] Sakaki H. Advances in microfabrication and microstructure physics. Proceedings of the international symposium. Foundations of quantum mechanics in the light of new technology. Edited by Kamefuchi S. Phys. Soc. Japan: Tokyo Japan, 1983.
- [59] Sakaki H, Noge H. Nanostructures and Quantum Effects. Proceedings of the JRDC International Symposium Tsukuba. Springer-Verlag: Berlin, 1994.
- [60] 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. **79**: 7021-7028, 1996.

- [61] Tsu R, Esaki L. Tunneling in a finite superlattice. *Appl. Phys. Lett.* **22**: 562-564, 1973.
- [62] Urbano-Altamirano F E. Investigación del Problema de Dispersión de Guías de Ondas Cuánticas por Medio del Método de Series de Potencias del Parámetro Espectral. Disertación Doctoral. Instituto Politécnico Nacional. Unidad Profesional Interdisciplinaria en Ingeniería y Tecnologías Avanzadas, UPIITA. México, CDMX, 2017.
- [63] Vasko F T, Kuznetsov A V. *Electronic States and Optical Transitions in Semiconductor Heterostructures*. Springer: New York, 1999.
- [64] Vladimirov V S, Dekker M. *Equations of Mathematical Physics*. Marcel Dekker: New York, 1971.
- [65] Voevodin V V. *Álgebra Lineal*. URSS, Editorial MIR: Moscú, 1986.
- [66] Xiangfeng D, Chunming N, Vijendra S, Jian C, Wallace P, Stephen E, Jay L G. High-performance thin-film transistors using semiconductor nanowires and nanoribbons. *Letters to Nature*, **425**: 74-278, 2003.
- [67] Young H D, Freedman R A. *Física Universitaria con Física Moderna*. Decimosegunda edn. Vol. 2. Pearson Educación: México, 2009.
- [68] Zettl A. *Sturm-Liouville Theory*. *Mathematical Surveys and Monographs*. Vol. 121. American Math. Soc. U.S.A., 2005.
- [69] Zhi-Ming B, Xu C, Xing-Tao. Electron transport through curved two-dimensional quantum waveguide. *Physica B: Condensed Matter*, **407**: 4293-4297, 2012.