



INSTITUTO POLITÉCNICO NACIONAL

ESCUELA SUPERIOR DE FÍSICA Y MATEMÁTICAS

**Método de solución multi-step
y su aplicación
en mecánica cuántica**

TESIS

Para obtener el título

Licenciado en Física-Matemáticas

PRESENTA

Jahir Moreno Acosta

DIRECTOR DE TESIS:

Dr. Jesús García Ravelo

México, Ciudad de México, marzo del 2019



CARTA CESIÓN DE DERECHOS AL IPN

Ciudad de México a 8 de agosto de 2019

El que suscribe:

C. Jahir Moreno Acosta con número de boleta **2013360196**

Egresado del Programa Académico **Licenciatura en Física Matemáticas** que se imparte en la Escuela Superior de Física y Matemáticas, manifiesta que es autor intelectual del presente trabajo de tesis titulado **Método de solución multi-step y su aplicación en mecánica cuántica**, el cual fue desarrollado bajo la dirección de **Dr. Jesús García Ravelo**.

Por lo anterior es mi interés manifestar que **SI** cedo los derechos del trabajo antes mencionado, al Instituto Politécnico Nacional, ello con el propósito de que lo ponga a disposición de la comunidad politécnica que requiera consultarlo con fines académicos y de investigación. Es importante aclarar que los usuarios de la información no deben reproducir el contenido textual, gráficas o datos del trabajo sin el permiso expreso del autor y/o director del trabajo.

Dicho permiso puede ser solicitado a la siguiente dirección de correo electrónico jahir.quantum8.3@gmail.com . Si el permiso se otorga, el usuario deberá dar el agradecimiento correspondiente y citar la fuente del mismo.

Atentamente


Moreno Acosta Jahir
Nombre y firma del alumno

Agradecimientos

A mi director de tesis el Dr. Jesús García Ravelo por su apoyo, la gran paciencia que me tuvo y confianza en mi para este trabajo, gracias.

A mi amada madre Elena Patricia por el apoyo incondicional y por el inmenso amor que me das todos los días a pesar de mi carácter que tengo, simplemente, Te amo.

A mi padre José Antelmo por el apoyo brindado y que a pesar de nuestras diferencias de pensamiento siempre estas ahí, apoyando mi desarrollo profesional, ¡gracias!

A mi hermana Iris Nabil, por tus consejos y el apoyo incondicional que me has dado, independientemente de nuestros choques ideológicos, Te amo hermana.

A mis tres amigos del alma Brenda Collado, Francisco Perez y Samuel Suaste que siempre han estado conmigo en las buenas y en las malas los considero mis hermanos, mi segunda familia, siempre han sido un soporte para no caer, un aliento para seguir mis sueños, sin personas soñadoras como ustedes qué sería de mí, Los quiero muchísimo.

A Norma Elia Chávez, por todo el aprendizaje que viví junto a ti, gracias por el cariño y amor otorgado, me diste el impulso que me faltaba para salir adelante, te convertiste en Mi Chica Cósmica, siempre estarás en mi corazón.

A todas la personas que directamente han tenido que ver en mi desarrollo como persona y como estudiante, al pueblo de México y al Instituto Politécnico Nacional por el apoyo en mis estudios profesionales y realización de esta tesis, les doy las gracias.

RESUMEN

Si se conoce el potencial de interacción de un sistema cuántico que no permite la resolución analítica de la ecuación de Schrödinger, algunas técnicas alternativas de solución, deben ser implementadas. En esta tesis se determina numéricamente el espectro de energía de algunos sistemas cuánticos con potenciales exactamente solubles. Con ello, el espectro numérico obtenido es comparado con el correspondiente espectro analítico.

El método consiste en aproximar el potencial del sistema, mediante una sucesión de escalones de potencial. Como resultado, se obtiene también una fórmula recursiva para los coeficientes de reflexión y transmisión correspondientes al potencial hecho de escalones [14]. Desde luego, a medida que el número de escalones aumenta, el potencial de escalones prácticamente coincide con el potencial del sistema. Asimismo, los coeficientes de reflexión y transmisión, se aproximan a los que corresponden al potencial que ha sido discretizado.

Con estos coeficientes y de acuerdo con propiedades de la matriz de dispersión (S matrix) [15], el espectro de energía de un sistema cuántico, puede ser obtenido a través de los polos del coeficiente de reflexión.

Se discute en particular esta técnica para un potencial que no es exactamente soluble, pero que ha sido resuelto con otras técnicas numéricas [1–13]. Más aún, se describe la forma en que el método incluye a potenciales que de antemano contienen discontinuidades finitas en algunos puntos. El caso de potenciales singulares también es considerado.

ABSTRACT

If the interaction potential of the classical system that does not allow the analytical resolution of the Schrödinger equation is known, some alternative solution techniques must be implemented. In this thesis the energy spectrum of some quantum systems with exactly soluble potentials is determined numerically. With this, the numerical spectrum obtained is compared with the corresponding analytical spectrum.

The method consists in approximating the potential of the system, through a succession of potential steps. As a result, a recursive formula is also obtained for the reflection and transmission coefficients corresponding to the potential made of steps potentials [14]. In fact, as the number of steps increases, the potential of steps practically merges with the potential of the system. Likewise, the reflection and transmission coefficients approximate to the corresponding potential that it has discretized.

With these coefficients and in accordance with the properties of the dispersion matrix (S matrix), the energy spectrum of a quantum system can be obtained through the poles of the reflection coefficient.

This technique is discussed in particular for a potential that is not exactly soluble, but that has been solved with other numerical techniques [1–13]. Furthermore, the way in which the method includes potentials that contain finite discontinuities at some points is described. The case of singular potentials is also considered.

Índice general

RESUMEN	1
ABSTRACT	2
INTRODUCCIÓN	9
I. ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER	11
I.1. Ecuación de Schrödinger Estacionaria	11
I.1.1. Obtención del coeficiente de Reflexión y Transmisión para un potencial escalón unidimensional	12
II. MATRIZ S	15
II.1. Construcción de la Matriz S	15
II.2. Matriz S para un pozo delta $\delta(x)$ de Dirac	17
II.2.1. Resonancias y polos de los coeficientes de la Matriz S para el pozo delta $\delta(x)$	20
II.3. Matriz S para un pozo rectangular finito	21
II.3.1. Resonancias y polos de los coeficientes de la Matriz S para el pozo rectangular	28
III. MÉTODO DE APROXIMACIÓN MULTI-ESCALÓN	31
III.1. Formulación	31
III.1.1. Obtención de R y T para dos fronteras de potencial $n = 2$	33
III.1.2. Obtención de R y T para tres fronteras de potencial $n = 3$	37
III.2. Forma generalizada de R y T para n fronteras	40
IV. APLICACIONES	42
IV.1. Potencial de Eckart	42
IV.2. Potencial de Ginocchio	46
IV.3. Potencial Oscilador armónico	50
IV.4. Doble pozo de potencial simétrico	53
IV.5. Doble barrera cuadrada	54
IV.6. Potencial de Wood-Saxon	55
IV.7. Potencial cuadrático no singular	58

IV.8. Potencial periódico	61
IV.9. Potencial analíticamente no soluble	62
Conclusiones	66
APÉNDICE	67
A. Programa desarrollado en python del método de aproximación Multi-escalón	68
A.1. Clase MultiStep	68
A.2. Métodos de la clase MultiStep	72
A.2.1. Método Barrido de la Energía	72
A.2.2. Método de la clase para la Obtención del coeficiente de reflexión	72
A.2.3. Método para la obtención de las energías de bonding del Coeficiente de reflexión	73
A.2.4. Método que grafica los polos del coeficiente de reflexión.	73
A.2.5. Método para obtener las energías de resonancia.	74
A.2.6. Método para graficar las resonancias del potencial	74
B. Implementación del programa para cada potencial	76
B.1. Potencial Eckart	76
B.2. Potencial Ginocchio	77
B.3. Potencial oscilador armónico cuántico	79
B.4. Potencial doble barrera cuadrada	79
B.5. Potencial Wood Saxon	81
B.6. Potencial Cuadrático no singular	81
B.7. Potencial periódico	83
B.8. Potencial Analíticamente no soluble	84
REFERENCIAS	86

Índice de figuras

I.1. <i>Ilustración del potencial escalón donde $V_0 \neq V_1$. Región I: V_0, Región II: V_1. Las flechas indican las ondas de partículas incidentes y reflejadas por la frontera en $x = 0$.</i>	13
II.1. <i>Potencial arbitrario localizado en la región central II y donde las partículas están representadas por flechas.</i>	16
II.2. <i>Pozo delta $\delta(x)$, centrado en $x = 0$ e intensidad de interacción α.</i>	18
II.3. <i>Pozo rectangular finito, con profundidad V_0 y ancho de $2a$</i>	23
III.1. <i>Distintas aproximaciones multi-escalón para un potencial suave arbitrario, donde n indica el número de escalones.</i>	32
III.2. <i>Doble potencial escalón, en las fronteras $x = 0$ y $x = \omega_1$ cambia el potencial, b_2 no aparece debido a que el haz incide de izquierda a derecha.</i>	33
III.3. <i>Tres fronteras de potencial, donde el potencial cambia cuando $x = 0$, $x = \omega_1$ y $x = \omega_2$, b_3 no aparece debido a que el haz incide de izquierda a derecha.</i>	37
IV.1. <i>Pozo de Potencial de Eckart (línea verde). a) Aproximación multi-escalón de 30 steps, b) Aproximación multi-escalón mucho más fina de 240 escalones (línea morada).</i>	43
IV.2. <i>Gráfica de los polos del coeficiente de reflexión R_c para el pozo de potencial Eckart, como función de la energía.</i>	44
IV.3. <i>Barrera de potencial de Eckart, con una aproximación multi-escalón de 240 escalones, con parámetros $V_0 = 4\text{fm}^{-2}$ y $\alpha = 0,7\text{fm}^{-1}$.</i>	45
IV.4. <i>Gráfica del coeficiente de reflexión R_c para la barrera de potencial de Eckart con un barrido de energías positivas $0 \leq E \leq 8$. (línea continua morada) gráfica de la ecuación (IV.1.3), (línea punteada verde) gráfica obtenida con el método multi-step</i>	45
IV.5. <i>Potencial Ginocchio en su forma atractiva para distintos valores de los parámetros λ y ν y profundidad fija en $x = 0$ de $V_{0D} = 8$.</i>	47

IV.6. Pozo de Potencial Ginocchio (línea verde). a) Aproximación multi-step de 30 steps, b) Aproximación multi-escalón mucho más fina de 240 escalones (línea morada).	48
IV.7. Gráfica de los polos del coeficiente de reflexión R_c para el pozo de potencial Ginocchio, como función de la energía.	49
IV.8. Barrera de potencial Ginocchio, con aproximación multi-escalón de 240 fronteras(línea morada).	50
IV.9. Gráfica del coeficiente de reflexión obtenido con el método de aproximación multi-escalón para el caso repulsivo del potencial de Ginocchio. La línea verde muestra el efecto de resonancia del potencial repulsivo Ginocchio.	51
IV.10. Potencial Oscilador acotado (línea verde) a) Aproximación multi-step de 20 steps (línea morada). b) Aproximación multi-step mucho más fina de 230 steps (línea morada).	52
IV.11. Polos del coeficiente de reflexión para el potencial tipo oscilador armónico (IV.3.2). La posición de los polos serán las energías de bonding para el oscilador	52
IV.12. Doble pozo de potencial simétrico (color verde). a) Aproximación multi-escalón con 20 escalones, b) Aproximación multi-escalón con 240 escalones (color morado).	54
IV.13. Espectro de energía para el doble pozo de potencial simétrico.	55
IV.14. Doble barrera de potencial de altura 1 fm^{-2} (morado). Figura interna, espectro de resonancias del coeficiente de reflexión (verde).	56
IV.15. Potencial Wood-Saxon (línea verde) a) Aproximación multi-escalón de 30 steps b) Aproximación multi-escalón mucho más fina de 250 steps (línea morada).	57
IV.16. Gráfica de los polos del coeficiente de reflexión del potencial generalizado de Wood-Saxon, como función de la energía.	57
IV.17. Potencial Cuadrático (línea verde) a) Aproximación multi-escalón de 30 escalones (línea morada). b) Aproximación multi-escalón mucho más fina de 240 escalones (línea morada).	59
IV.18. Gráfica de los polos del coeficiente de reflexión del potencial Cuadrático, como función de la energía.	60
IV.19. Distintos espectros de energía para distinto número de pozos en el potencial periódico. Figura superior izquierda: 2 pozos, superior derecha: 5 pozos. Figura inferior izquierda: 15 pozos, inferior derecha: 50 pozos . .	62
IV.20. Potencial No soluble (línea verde discontinua) a) Aproximación multi-step de 15 steps (línea morada). b) Aproximación multi-step mucho más fina de 240 steps (línea morada).	63
IV.21. Polos del coeficiente de reflexión para el potencial no soluble analíticamente.	64

IV.22. <i>Se aproxima el potencial completo por 300 escalones, para poder obtener las energías de resonancia para el potencial no soluble</i>	64
IV.23. <i>Gráfica de R_c, donde las resonancias son las posiciones de los mínimos del coeficiente.</i>	65

Índice de tablas

IV.1. Energías de enlace para el pozo de potencial de Eckart con parámetros $V_0 = -4fm^{-2}$ y $\alpha = 0,7fm^{-1}$. n , E_b^{exact} , E_b^{ms} y E_b^{RK} representan el número de estado, resultados de la ecuación (IV.6.2), resultados de aplicar el método de aproximación multi-escalón y resultados del método de Runge-Kutta, respectivamente.	44
IV.2. Energías de enlace para el potencial atractivo de Ginocchio para los parámetros $\lambda = 4$, $\nu = 5$ y $V_{0D} = 8fm^{-2}$. n , E_b^{exact} y E_b^{ms} representan el número de estado, resultados de la ecuación (IV.2.5) y resultados de aplicar el método multi-escalón, respectivamente.	49
IV.3. Energías de bonding para el potencial oscilador armónico cuántico adimensional (IV.3.2).	53
IV.4. Energías de enlace para el potencial generalizado Wood-Saxon para los parámetros $V_0 = -3fm^{-2}$, $V_1 = 40fm^{-2}$ y $a = 1fm$. n , E_b^{exact} y E_b^{ms} representan el número de estado, resultados de la ecuación (IV.6.2) y resultados de aplicar el método multi-escalón, respectivamente.	58
IV.5. Energías de enlace para el potencial Cuadrático para los parámetros $V_0 = 3fm^{-2}$, $a = 6$, $b = -4$, $c = 7$, $\alpha = 0,5fm^{-1}$. n , E_b^{exact} y E_b^{ms} representan el número de estado, resultados de la ecuación (IV.7.2) y resultados de aplicar el método multi-escalón, respectivamente.	60
IV.6. Energías de enlace y de resonancia para el potencial analíticamente no soluble con parámetros $J = 0,55eV$ y $\alpha = 0,5$. E_b^{ms} y E_r^{ms} representan los resultados de aplicar el método multi-step para energías de bonding y energías de resonancia, respectivamente.	64

INTRODUCCIÓN

La ecuación de Schrödinger como un modelo matemático es la base en muchos problemas tanto de mecánica cuántica, física teórica, química, electrónica y otros campos de la ciencia e ingeniería.

Esta puede ser escrita como

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\psi(x) = 0, \quad (.0.1)$$

y expresa el modelo para una partícula en interacción con un campo de potencial $V(x)$. Sin embargo, no siempre tiene una solución analítica, existen potenciales donde la ecuación de Schrödinger se vuelve complicada o imposible de resolver de forma analítica, la única manera de resolverla es de forma aproximada, durante los últimos 50 años se han desarrollado métodos numéricos para este propósito, tanto métodos que se distinguen para resolver ecuaciones diferenciales en general, como otros, que están exclusivamente desarrollados para resolver la ecuación de Schrödinger.

Ha habido una extensa investigación para el desarrollo de métodos numéricos para resolver la ecuación de Schrödinger y problemas relacionados a través de las últimas décadas (ver, por ejemplo [1–13]):

- En [1,6,7] se presentan alternativas de métodos numéricos para resolver ecuaciones diferenciales que tienen soluciones periódicas.
- En [2–4,11,12] se presentan los conocidos métodos de ajuste exponencial y trigonométrico. Métodos single-step y multi-step¹ de varios órdenes son desarrollados.
- En [5,9] se presentan métodos de Runge-Kutta modificados, basado en ajuste exponencial y trigonométrico.

¹No confundir los métodos de Euler multi-step y single-step con el de aproximación multi-step que cual es tratado en esta tesis, por ello, nos referiremos a él, como "método de aproximación multi-escalón".

- En [13] se obtienen expresiones analíticas recursivas solución de la ecuación de Schrödinger. Estas soluciones resultan bastante útiles para determinar las probabilidades de transmisión que a su vez permiten la obtención tanto de energías de enlace como de resonancia. Este es un camino alternativo al que se presenta en esta tesis.

La mayoría de estos métodos están enfocados a resolver ecuaciones diferenciales en general, debido a esto, en algunos casos muestran desventajas para resolver la ecuación de Schrödinger ya que no consideran complicaciones físicas que presentan algunos potenciales dentro de la ecuación. El propósito de esta tesis es mostrar la aplicación del programa realizado en el lenguaje Python del método llamado aproximación multi-escalón, método enfocado a resolver la ecuación de Schrödinger para obtener las eigen-energías del potencial [14] mostrando su limitación.

Por la forma en que se obtienen estas eigen-energías, éste método es parcialmente numérico y parcialmente analítico [18], está enfocado en aproximar cualquier potencial por un potencial multi-escalón, del cual se obtiene su coeficiente de reflexión, debido a su cualidad recursiva del coeficiente se programa en Python para ser evaluado y obtener sus polos. Estos polos muestran, con la teoría de la matriz de dispersión, que coinciden con las energías de enlace del potencial cuántico. La precisión para cualquier potencial de cualquier forma, sea analíticamente soluble o no, es lo más destacable de este método. Esta tesis está organizada como sigue:

- En el Capítulo I se da una breve introducción a la ecuación de Schrödinger y se obtienen los coeficientes de reflexión y transmisión para el potencial escalón.
- Se respalda la aplicación del método de aproximación multi-escalón por medio de la teoría de la matriz S dando dos ejemplos muy conocidos en el Capítulo II.
- En el Capítulo III es formulado el método de aproximación multi-escalón realizando la generalización de los coeficientes de reflexión y transmisión que fueron presentados en los capítulos anteriores.
- Se aplica el programa desarrollado del método para distintos tipos de potenciales conocidos donde se obtienen los eigen-valores, son comparados con los resultados exactos y en algunos casos con resultados de otros artículos y se discute cada caso particular en el Capítulo IV.
- Finalmente se presentan algunas conclusiones y apéndices donde se muestra el código hecho en python del método multi-escalón y el código de la aplicación para cada potencial.

Capítulo I

ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER

En este capítulo se introduce la ecuación de Schrödinger, tanto la forma estacionaria. Se aborda el tratamiento del potencial escalón base para el desarrollo posterior del metodo de aproximación multi-escalón.

I.1. Ecuación de Schrödinger Estacionaria

$$\nabla^2\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\psi = 0. \quad (\text{I.1.1})$$

La ecuación de arriba es la conocida ecuacion de Schrödinger independiente del tiempo en tres dimensiones espaciales, es una ecuación que determina los estados estacionarios ψ y energias E de una partícula en interacción con un potencial $V(x)$.

La ecuación (I.1.1), se puede reescribir en la ecuación de eigenvalores.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V(\mathbf{r})\psi = E\psi, \quad (\text{I.1.2})$$

y definir de esta ecuación el operador hamiltoniano H como

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r}), \quad (\text{I.1.3})$$

por lo tanto, la ecuación (I.1.1) toma una forma reducida

$$\boxed{H\psi = E\psi}. \quad (\text{I.1.4})$$

El enorme campo de aplicación de esta ecuación ha mostrado que ella describe correctamente cualquier problema cuántico estacionario caracterizado por un potencial

$V(\mathbf{r})$.

La ecuación de Schrödinger es lineal en ψ , por lo que si ψ_1 y ψ_2 son soluciones de la ecuación, entonces, la función $a\psi_1 + b\psi_2$ también es solución. Esta propiedad es precisamente la base de los fenómenos de interferencia. Debido a la linealidad de la ecuación de Schrödinger, la amplitud de probabilidad, satisface el *principio de superposición*.

I.1.1. Obtención del coeficiente de Reflexión y Transmisión para un potencial escalón unidimensional

Para ilustrar la aplicación de la ecuación de Schrödinger estacionaria en un problema que es relevante para el desarrollo del método de aproximación multi-escalón, resolvemos la ecuación (I.1.1) del pozo de potencial cuántico

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & , \quad x < 0 \\ V_1 & , \quad x > 0. \end{cases} \quad (\text{I.1.5})$$

La ecuación (I.1.1) puede escribirse como sigue

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} + k^2\varphi = 0 \quad \text{con} \quad k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V). \quad (\text{I.1.6})$$

Para este potencial, la solución de la ecuación (I.1.6) en cada una de las regiones de la Figura I.1 son las funciones de onda φ

$$\text{Región I} \quad \varphi_0(x) = a_0e^{ik_0x} + b_0e^{-ik_0x}, \quad (\text{I.1.7a})$$

$$\text{Región II} \quad \varphi_1(x) = a_1e^{ik_1x} + b_1e^{-ik_1x}. \quad (\text{I.1.7b})$$

Con k_0 y k_1 igual a $2m/\hbar^2(E - V_0)$ y $2m/\hbar^2(E - V_1)$, respectivamente.

Las ecuaciones (I.1.7a) y (I.1.7b) deben de cumplir las siguientes dos condiciones de frontera en $x = 0$,

$$\varphi_0(0) = \varphi_1(0), \quad (\text{I.1.8a})$$

$$\left. \frac{d\varphi_0(x)}{dx} \right|_{x=0} = \left. \frac{d\varphi_1(x)}{dx} \right|_{x=0}. \quad (\text{I.1.8b})$$

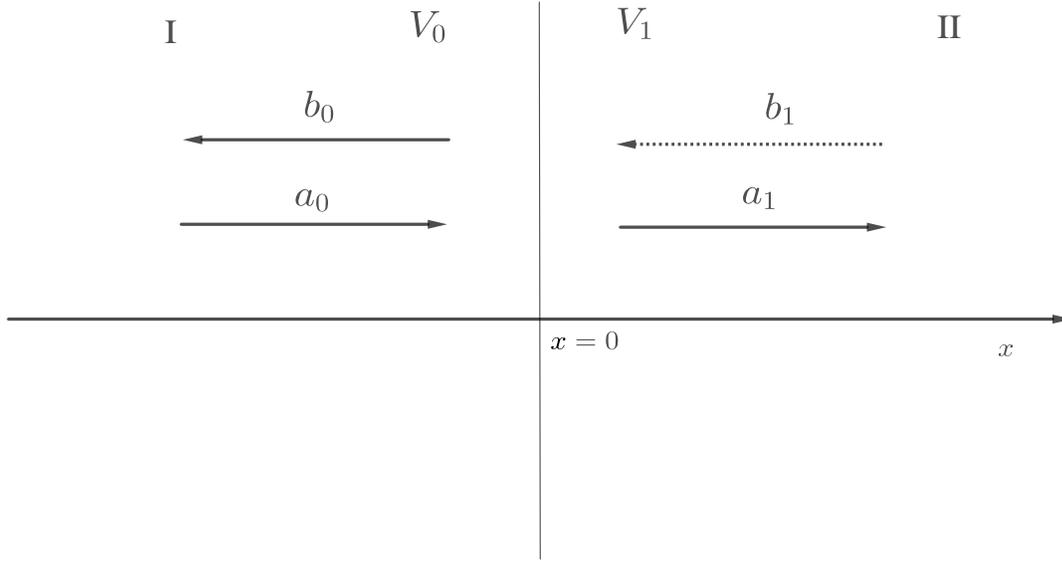


Figura I.1: *Ilustración del potencial escalón donde $V_0 \neq V_1$. Región I: V_0 , Región II: V_1 . Las flechas indican las ondas de partículas incidentes y reflejadas por la frontera en $x = 0$.*

Si suponemos que las partículas inciden de izquierda a derecha, necesariamente no puede haber onda incidente de derecha a izquierda, es decir, proveniente de la región II ver Figura I.1, por lo tanto $b_1 = 0$. Tomando esto en consideración y las condiciones de frontera (I.1.8a) y (I.1.8b), se obtiene el siguiente sistema de ecuaciones

$$a_0 + b_0 = a_1, \quad (\text{I.1.9a})$$

$$k_0 a_0 - k_0 b_0 = k_1 a_1. \quad (\text{I.1.9b})$$

Se define la amplitud de transmisión, o de reflexión, en mecánica cuántica como el cociente entre el coeficiente de la onda transmitida, o de la onda reflejada entre el coeficiente de la onda incidente, respectivamente.

$$R = \frac{b_0}{a_0}, \quad T = \frac{a_1}{a_0}. \quad (\text{I.1.10})$$

Por último, los coeficientes de reflexión y transmisión son la probabilidad de que la partícula sea reflejada o transmitida por la barrera de potencial. Esta probabilidad depende de la amplitud de la onda reflejada y transmitida (I.1.10). Los correspondientes coeficientes, son obtenidos por las expresiones

$$R_c = |R|^2, \quad T_c = |T|^2 \quad (\text{I.1.11})$$

Regresando al sistema de ecuaciones (I.1.9). Multiplicando (I.1.9a) por k_1 y restando (I.1.9b), se obtiene:

$$(k_1 - k_0)a_0 + (k_1 + k_0)b_0 = 0, \quad (\text{I.1.12})$$

por lo tanto, la amplitud de reflexión para el potencial (I.1.5) es

$$\boxed{R = \frac{b_0}{a_0} = \frac{k_0 - k_1}{k_0 + k_1}}. \quad (\text{I.1.13})$$

De la misma manera para encontrar la amplitud de transmisión, se busca una relación entre a_0 y a_1 , se multiplica a (I.1.9a) por k_0 y se suma a (I.1.9b), se obtiene

$$2k_0a_0 = (k_0 + k_1)a_1,$$

ahora, la amplitud de transmisión para el potencial (I.1.5) esta dada como

$$\boxed{T = \frac{a_1}{a_0} = \frac{2k_0}{k_0 + k_1}}. \quad (\text{I.1.14})$$

Una vez habiendo obtenido R y T es fácil notar que los coeficientes R_c y T_c se pueden obtener rápidamente sin dificultad y satisfacen $R_c + T_c = 1$.

En el Capítulo III veremos la pertinencia de este simple problema para la implementación de estos coeficientes de una manera general en el método de aproximación multi-escalón.

Capítulo II

MATRIZ S

En el capítulo previo se obtuvieron las amplitudes de reflexión y transmisión para el potencial escalón unidimensional. El presente capítulo desarrolla la teoría de la *matriz S* (Scattering), o de Dispersión, para el caso unidimensional, la cual tiene una relación muy sensible con las amplitudes de reflexión y transmisión para cualquier forma de potencial.

II.1. Construcción de la Matriz S

A menos que se diga lo contrario se considerarán energías $E > 0$ para la construcción de la matriz S [15]. Supongamos al espacio unidimensional dividido en tres regiones, en la primera y la tercera, el potencial de interacción es constante de modo que las funciones de onda se pueden escribir como una superposición de ondas planas

$$\psi_I(x) = a_0 e^{ikx} + b_0 e^{-ikx}, \quad (\text{II.1.1a})$$

$$\psi_{III}(x) = a_2 e^{ikx} + b_2 e^{-ikx}. \quad (\text{II.1.1b})$$

con $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$.

En la región central, la solución no puede ser conocida de manera explícita hasta que un potencial $V(x)$ sea propuesto, y la presentamos como

$$\psi_{II}(x) = a_1 f(x) + b_1 g(x). \quad (\text{II.1.1c})$$

Por lo tanto, se tendrán dos condiciones de frontera para las funciones de onda en cada una de las interfaces de las regiones I-II y II-III, como se ve en la Figura II.1. Podemos representar la onda entrante a la región II en términos de los coeficientes a_0 y b_2 , de manera cómoda como la matriz columna

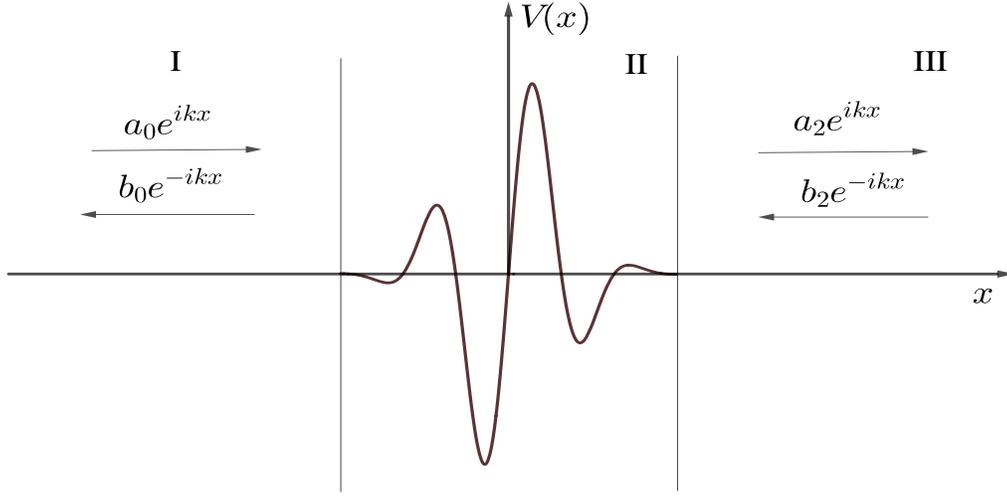


Figura II.1: *Potencial arbitrario localizado en la región central II y donde las partículas están representadas por flechas.*

$$\psi_{ent} = \begin{pmatrix} a_0 \\ b_2 \end{pmatrix}. \quad (\text{II.1.2})$$

Análogamente para la función de onda saliente de esta región II

$$\psi_{sal} = \begin{pmatrix} b_0 \\ a_2 \end{pmatrix}. \quad (\text{II.1.3})$$

Ya que los coeficientes a_i y b_i están relacionados, se puede establecer la relación lineal

$$\psi_{sal} = S\psi_{ent}, \quad (\text{II.1.4})$$

donde S es una matriz 2×2 , o de una manera más explícita,

$$\begin{pmatrix} b_0 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ b_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11}a_0 + S_{12}b_2 \\ S_{21}a_0 + S_{22}b_2 \end{pmatrix}. \quad (\text{II.1.5})$$

Esta matriz que transforma los coeficientes de la función de onda entrante en los coeficientes de la función de onda saliente, recibe el nombre de *Matriz S* o de *Dispersión*.

En un caso particular de dispersión para un haz de partículas provenientes de la izquierda, $b_2 = 0$, entonces la ecuación (II.1.5), se transforma en

$$\begin{pmatrix} b_0 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11}a_0 \\ S_{21}a_0 \end{pmatrix}, \quad (\text{II.1.6})$$

así que las amplitudes de reflexión y transmisión son, respectivamente

$$R_{izq} = \frac{b_0}{a_0} \Big|_{b_2=0} = S_{11}, \quad T_{izq} = \frac{a_2}{a_0} \Big|_{b_2=0} = S_{21}. \quad (\text{II.1.7})$$

Para el caso contrario, es decir, dispersión de un haz de partículas que inciden desde la derecha, $a_0 = 0$, se tiene

$$\begin{pmatrix} b_0 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{12}b_2 \\ S_{22}b_2 \end{pmatrix}, \quad (\text{II.1.8})$$

así que las amplitudes de reflexión y transmisión en este caso son

$$T_{der} = \frac{b_0}{b_2} \Big|_{a_0=0} = S_{12}, \quad R_{der} = \frac{a_2}{b_2} \Big|_{a_0=0} = S_{22}. \quad (\text{II.1.9})$$

La matriz S , tiene por entradas a las amplitudes de transmisión y de reflexión para haces de partículas incidentes a la región II

$$S = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R_{izq} & T_{der} \\ T_{izq} & R_{der} \end{pmatrix}. \quad (\text{II.1.10})$$

II.2. Matriz S para un pozo delta $\delta(x)$ de Dirac

Para ilustrar la sección anterior consideramos el pozo de potencial delta de Dirac, dado por $V(x) = -\alpha\delta(x)$, con α un parámetro de acoplamiento que define la interacción del pozo sobre la partícula. Las soluciones de la ecuación de Schrödinger para las regiones I y III están dadas por (II.1.1a) y (II.1.1b). En la región II la ecuación de Schrödinger toma la forma

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - \alpha\delta(x)\psi(x) = E\psi(x), \quad (\text{II.2.1})$$

Cuando (II.2.1) es integrada en el intervalo infinitesimal $(-\varepsilon, \varepsilon)$ donde se ha supuesto que estas funciones son continuas, surge la condición de salto para las derivadas de las funciones de onda en $x = 0$

$$\left(\frac{d\psi}{dx}\right)_{x=0^+} - \left(\frac{d\psi}{dx}\right)_{x=0^-} = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}\psi(0). \quad (\text{II.2.2})$$

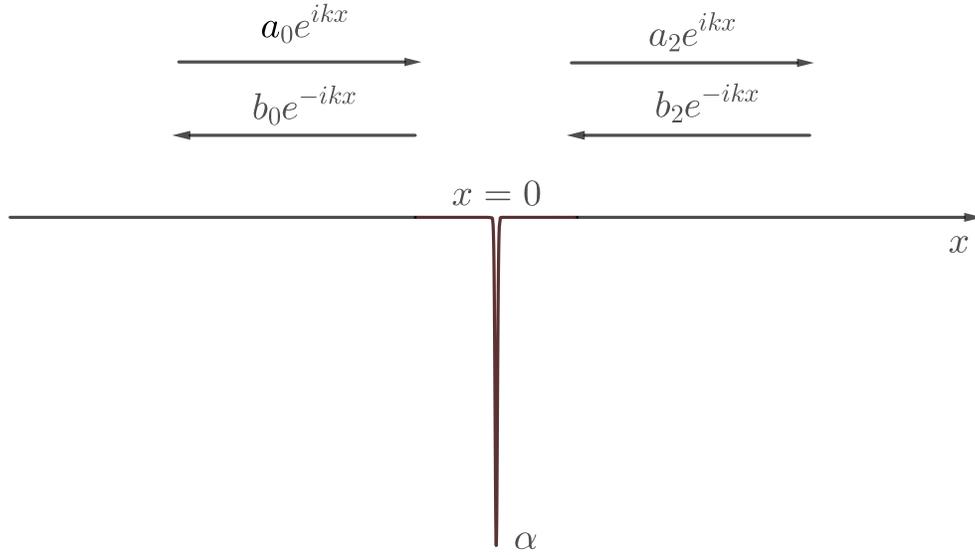


Figura II.2: Pozo delta $\delta(x)$, centrado en $x = 0$ e intensidad de interacción α .

Por lo anterior, obtenemos

- Primera condición de continuidad

$$\psi_I(0) = \psi_{III}(0) \longrightarrow a_0 + b_0 = a_2 + b_2, \quad (\text{II.2.3})$$

- Condición de salto

$$ik(a_2 - b_2) - ik(a_0 - b_0) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}(a_2 + b_2). \quad (\text{II.2.4})$$

Si consideramos el caso en el cual el haz de partículas solo incide desde la izquierda, necesariamente $b_2 = 0$, lo cual reduce las condiciones

$$a_0 + b_0 = a_2, \quad (\text{II.2.5a})$$

$$ika_2 - ik(a_0 - b_0) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}a_2. \quad (\text{II.2.5b})$$

Con este sistema de ecuaciones una relación entre a_2 con b_0 puede ser obtenida, y con ello, algunas de las entradas de la matriz S para este potencial.

De la ecuación (II.2.5b)

$$\left(ik + \frac{2m\alpha}{\hbar^2} \right) a_2 = ik(a_0 - b_0), \quad (\text{II.2.6})$$

sustituyendo a_2 de la ecuación (II.2.5a)

$$\left(ik + \frac{2m\alpha}{\hbar^2} \right) (a_0 + b_0) = ik(a_0 - b_0), \quad (\text{II.2.7})$$

factorizando cada coeficiente

$$\left(2ik + \frac{2m\alpha}{\hbar^2} \right) b_0 = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2} a_0, \quad (\text{II.2.8})$$

y despejando b_0 se tiene

$$b_0 = -\left(\frac{m\alpha}{m\alpha + ik\hbar^2} \right) a_0. \quad (\text{II.2.9})$$

Por último, haciendo $\beta = \frac{m\alpha}{\hbar^2 k}$, se obtiene la relación de b_0 con a_0

$$b_0 = \frac{i\beta}{1 - i\beta} a_0. \quad (\text{II.2.10})$$

De (II.1.7) podemos ver que

$$\boxed{R_{izq} = \frac{i\beta}{1 - i\beta} = S_{11}}, \quad (\text{II.2.11})$$

y de la relación de a_2 con a_0 , se tiene

$$\boxed{T_{izq} = \frac{1}{1 - i\beta} = S_{21}}. \quad (\text{II.2.12})$$

Hemos obtenido dos coeficientes de la *matriz S*, faltan obtener los otros dos suponiendo que ahora el haz de partículas incide sobre el potencial desde el lado derecho. Aprovechando la simetría del potencial, es fácil ver

$$a_2 = \frac{i\beta}{1 - i\beta} b_2, \quad (\text{II.2.13})$$

$$b_0 = \frac{1}{1 - i\beta} b_2, \quad (\text{II.2.14})$$

de las ecuaciones (II.1.8), (II.1.9)

$$\boxed{R_{der} = \frac{i\beta}{1 - i\beta} = S_{22}}. \quad (\text{II.2.15})$$

$$\boxed{T_{der} = \frac{1}{1 - i\beta} = S_{12}}. \quad (\text{II.2.16})$$

de esta manera (II.1.5) queda como

$$\begin{pmatrix} b_0 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{i\beta}{1-i\beta} & \frac{1}{1-i\beta} \\ \frac{1}{1-i\beta} & \frac{i\beta}{1-i\beta} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ b_2 \end{pmatrix}. \quad (\text{II.2.17})$$

Por lo tanto la *matriz S* para $V(x) = -\alpha\delta(x)$ es

$$\boxed{S = \frac{1}{1 - i\beta} \begin{pmatrix} i\beta & 1 \\ 1 & i\beta \end{pmatrix}; \quad \beta = \frac{m\alpha}{\hbar^2 k}}. \quad (\text{II.2.18})$$

II.2.1. Resonancias y polos de los coeficientes de la Matriz S para el pozo delta $\delta(x)$

Se ha dicho que las entradas de la matriz S corresponden a las amplitudes de reflexión o transmisión. Veamos el comportamiento de un coeficiente de amplitud de transmisión de la matriz S.

Para que haya transferencia total del haz de partículas incidente desde la izquierda, se tiene que cumplir que el coeficiente de transmisión $T_c = 1$,

$$T_c = |T_{izq}|^2 = \frac{1}{1 + \beta^2} = 1, \quad (\text{II.2.19})$$

lo que implica que $\beta = 0$, entonces por definición de β

$$\frac{m\alpha}{\hbar^2 k} = 0, \quad \text{o} \quad \frac{m\alpha^2}{E} = 0, \quad (\text{II.2.20})$$

por lo tanto la energía E debe ser mucho mayor al producto $m\alpha^2$, es decir, $E \gg m\alpha^2$ para que haya transmisión total de la onda.

Para este potencial no hay energías específicas o resonantes con las cuales la transmisión es total, tampoco hay energías específicas o particulares en las que la reflexión sea total

o tenga máximos (dispersión resonante).

Consideremos ahora E negativa, por lo tanto el coeficiente a_0 de las función de onda (II.1.1a) entrante, tiene que ser cero para poder hablar de un estado ligado en el interior, y esto se cumple debido a que los exponentes de las exponenciales de la función de onda se vuelven reales cuando $E < 0$, haciendo que estas decaigan en los extremos del potencial. Suponiendo que la partícula viene desde la izquierda, tomando la ecuación (II.2.11), y cuando a_0 se anula, R_{izq} se hace infinito

$$S_{11} = S_{22} = R = \frac{i\beta}{1 - i\beta}. \quad (\text{II.2.21})$$

Este coeficiente de la matriz S debe tener polos para los ceros del denominador, es decir, para las energías a las cuales se cumple que:

$$1 - i\beta = 0. \quad (\text{II.2.22})$$

Ahora vamos a resolver esta ecuación para encontrar la correspondiente energía

$$1 = i\beta \quad \text{o} \quad 1 = i \frac{m\alpha}{\hbar^2 k}, \quad (\text{II.2.23})$$

$$k = i \frac{m\alpha}{\hbar^2} \quad \text{o} \quad \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = i \frac{m\alpha}{\hbar^2}, \quad (\text{II.2.24})$$

despejando a E

$$E = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}. \quad (\text{II.2.25})$$

Nótese que esta energía corresponde al único estado ligado para un pozo delta. De esta manera, verificamos que la condición de resonancia (aparición de un polo en la amplitud de reflexión R) coincide con la única energía de enlace que tiene el pozo delta.

II.3. Matriz S para un pozo rectangular finito

En este segundo ejemplo de igual manera, se obtendrá la matriz S y los polos de sus coeficientes (amplitudes de reflexión), en este caso serán más claros los conceptos de resonancia, estados cuasi-ligados y polos.

Consideramos el siguiente pozo de potencial rectangular finito

$$V(x) = \begin{cases} -V_0, & -a < x < a \\ 0, & |x| > a, \end{cases} \quad (\text{II.3.1})$$

con V_0 una constante positiva, Figura II.3.

Al igual que el potencial delta, este potencial también admite tanto estados ligados ($E < 0$) como estados de dispersión ($E > 0$). De la misma manera que el caso anterior, primero se centra la atención en los estados de dispersión, para encontrar la matriz S y después se verá que las energías de los estados ligados ($E < 0$) pueden ser obtenidas por medio de los polos del coeficiente de reflexión el cual es extraído de la matriz S, un resultado que es generalizado y usado en el método de aproximación multi-escalón del Capítulo III para determinar espectros de energía.

Para $E > 0$, las funciones de onda soluciones de la ecuación de Schrödinger estacionaria en los límites donde $V(x) = 0$ son las ecuaciones (II.1.1a) y (II.1.1b).

En la región media, donde $V(x) = -V_0$, tenemos la ecuación de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - V_0\psi(x) = E\psi(x), \quad (\text{II.3.2})$$

acomodando los términos de la siguiente manera

$$-\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \frac{2m(V_0 + E)}{\hbar^2}\psi(x), \quad (\text{II.3.3})$$

y por simplicidad definimos

$$l = \frac{\sqrt{2m(V_0 + E)}}{\hbar}, \quad (\text{II.3.4})$$

por lo cual queda la ecuación de Schrödinger simplificada

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -l^2\psi(x). \quad (\text{II.3.5})$$

Por lo tanto, la función de onda solución de esta ecuación dentro del pozo, es

$$\psi_{II}(x) = a_1 \sin(lx) + b_1 \cos(lx) \quad (\text{II.3.6})$$

Nuevamente, pedimos continuidad de la solución en las fronteras. Entre la región izquierda y central se tiene que cumplir

$$\psi_I(-a) = \psi_{II}(-a), \quad \left. \frac{d\psi_I}{dx} \right|_{x=-a} = \left. \frac{d\psi_{II}}{dx} \right|_{x=-a}, \quad (\text{II.3.7})$$

y para la región central con la región derecha,

$$\psi_{II}(a) = \psi_{III}(a), \quad \left. \frac{d\psi_{II}}{dx} \right|_{x=a} = \left. \frac{d\psi_{III}}{dx} \right|_{x=a}. \quad (\text{II.3.8})$$

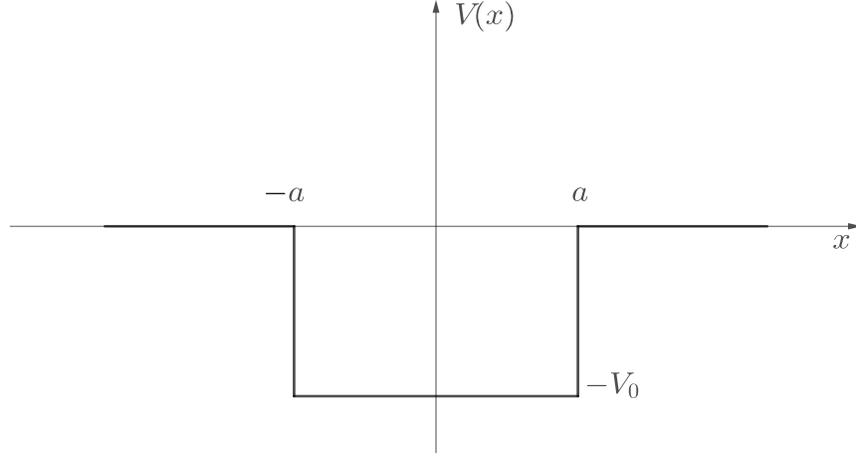


Figura II.3: *Pozo rectangular finito, con profundidad V_0 y ancho de $2a$*

Con estas condiciones, y suponiendo que la onda se mueve de izquierda a derecha, es decir, de la ecuación (II.1.1b) $b_2 = 0$, se obtiene el siguiente sistema de ecuaciones

$$-a_1 \sin(la) + b_1 \cos(la) = a_0 e^{-ika} + b_0 e^{ika}, \quad (\text{II.3.9a})$$

$$l(a_1 \cos(la) + b_1 \sin(la)) = ik(a_0 e^{-ika} - b_0 e^{ika}), \quad (\text{II.3.9b})$$

$$a_1 \sin(la) + b_1 \cos(la) = a_2 e^{ika}, \quad (\text{II.3.9c})$$

$$l(a_1 \cos(la) - b_1 \sin(la)) = ika_2 e^{ika}. \quad (\text{II.3.9d})$$

Para encontrar la matriz S del problema, necesitamos una relación entre los coeficientes a_0 con b_0 y a_2 .

Sumando las ecuaciones (II.3.9a) y (II.3.9c)

$$2b_1 \cos(la) = a_0 e^{-ika} + (a_2 + b_0) e^{ika}, \quad (\text{II.3.10})$$

despejando a b_1

$$b_1 = \frac{a_0 e^{-ika} + (a_2 + b_0) e^{ika}}{2 \cos(la)}, \quad (\text{II.3.11})$$

sustituyendo en (II.3.9c)

$$a_1 \sin(la) + \frac{1}{2} (a_0 e^{-ika} + (a_2 + b_0) e^{ika}) = a_2 e^{ika}, \quad (\text{II.3.12})$$

y despejando a a_1

$$a_1 = - \left(\frac{a_0 e^{-ika} + (b_0 - a_2) e^{ika}}{2 \sin(la)} \right). \quad (\text{II.3.13})$$

Por otra parte, sumando (II.3.9b) y (II.3.9d)

$$2la_1 \cos(la) = ik (a_0 e^{-ika} + (a_2 - b_1) e^{ika}), \quad (\text{II.3.14})$$

sustituyendo (II.3.13) en esta ecuación

$$-l (a_0 e^{-ika} + (b_0 - a_2) e^{ika}) \frac{\cos(la)}{\sin(la)} = ik (a_0 e^{-ika} + (a_2 - b_1) e^{ika}). \quad (\text{II.3.15})$$

Ahora es posible factorizar a_0 , b_0 y a_2

$$b_0 \left(ik - l \frac{\cos(la)}{\sin(la)} \right) e^{ika} = a_0 \left(ik + l \frac{\cos(la)}{\sin(la)} \right) e^{-ika} + a_2 \left(ik - l \frac{\cos(la)}{\sin(la)} \right) e^{ika}, \quad (\text{II.3.16})$$

acomodando los términos dentro de los paréntesis para poder simplificar

$$b_0 \frac{ik \sin(la) - l \cos(la)}{\sin(la)} = a_0 \frac{ik \sin(la) + l \cos(la)}{\sin(la)} e^{-2ika} + a_2 \frac{ik \sin(la) - l \cos(la)}{\sin(la)}.$$

Se pueden ver las similitudes que hay entre los términos que tiene cada coeficiente b_0 , a_0 y a_2 , por lo tanto se puede simplificar como sigue:

$$b_0 = -a_0 \left(\frac{l \cos(la) + ik \sin(la)}{l \cos(la) - ik \sin(la)} \right) e^{-2ika} + a_2. \quad (\text{II.3.17})$$

Se ha encontrado una relación entre los tres coeficientes a_0 , b_0 y a_2 , sin embargo, es necesario encontrar dos relaciones; a_0 con b_0 y a_0 con a_2 los cuales serán dos coeficientes de la matriz S. Siguiendo adelante para encontrarlas.

Procedimiento para encontrar la relación entre a_0 y a_2 .

Se sustituye (II.3.17) en (II.3.11), y también en (II.3.13), simplificando un poco se obtienen las dos siguientes ecuaciones

$$b_1 = \frac{a_0 \left(1 - \frac{l \cos(la) + ik \sin(la)}{l \cos(la) - ik \sin(la)} \right) e^{-ika} + 2a_2 e^{ika}}{2 \cos(la)}, \quad (\text{II.3.18})$$

$$a_1 = -\frac{a_0 \left(1 - \frac{l \cos(la) + ik \sin(la)}{l \cos(la) - ik \sin(la)} \right) e^{-ika}}{2 \sin(la)}. \quad (\text{II.3.19})$$

Sustituyendo estos valores para b_1 y a_1 en (II.3.9d)

$$-a_0 \left(1 - \frac{l \cos(la) + ik \sin(la)}{l \cos(la) - ik \sin(la)} \right) \frac{\cos(la)}{\sin(la)} e^{-ika} - \quad (\text{II.3.20})$$

$$\left[a_0 \left(1 - \frac{l \cos(la) + ik \sin(la)}{l \cos(la) - ik \sin(la)} \right) e^{-ika} + 2a_2 e^{ika} \right] \frac{\sin(la)}{\cos(la)} = \frac{2ik}{l} a_2 e^{ika}.$$

Esta ecuación ya solo está en términos de a_0 y a_2 , que es lo que se buscaba, ahora hay que simplificarla para obtener uno de los coeficientes de la matriz S.

Simplificación:

$$\begin{aligned} -a_0 \left(\frac{-2ik \sin(la)}{l \cos(la) - ik \sin(la)} \right) \frac{\cos(la)}{\sin(la)} e^{-2ika} - a_0 \left(\frac{-2ik \sin(la)}{l \cos(la) - ik \sin(la)} \right) \frac{\sin(la)}{\cos(la)} e^{-2ika} \\ = a_2 \left(\frac{2ik}{l} + \frac{2 \sin(la)}{\cos(la)} \right), \end{aligned} \quad (\text{II.3.21})$$

$$a_0 \frac{2ik \sin(la)}{l \cos(la) - ik \sin(la)} \left(\frac{\cos(la)}{\sin(la)} + \frac{\sin(la)}{\cos(la)} \right) e^{-2ika} = a_2 \frac{2ik \cos(la) + 2l \sin(la)}{l \cos(la)}, \quad (\text{II.3.22})$$

$$a_0 \frac{ik \sin(la)}{l \cos(la) - ik \sin(la)} \left(\frac{e^{-2ika}}{\sin(la) \cos(la)} \right) = a_2 \frac{ik \cos(la) + l \sin(la)}{l \cos(la)}, \quad (\text{II.3.23})$$

$$a_0 \frac{ikl e^{-2ika}}{l \cos(la) - ik \sin(la)} = a_2 (ik \cos(la) + l \sin(la)), \quad (\text{II.3.24})$$

$$a_2 = \frac{ikl e^{-2ika} a_0}{ikl \cos^2(la) + k^2 \sin(la) \cos(la) + l^2 \sin(la) \cos(la) - ikl \sin^2(la)}, \quad (\text{II.3.25})$$

$$a_2 = \frac{ikl e^{-2ika} a_0}{ikl (\cos^2(la) - \sin^2(la)) + (k^2 + l^2) \sin(la) \cos(la)}. \quad (\text{II.3.26})$$

Ocupando identidades trigonométricas de ángulo doble nos queda

$$a_2 = \frac{ikl e^{-2ika} a_0}{ikl \cos(2la) + \frac{k^2 + l^2}{2} \sin(2la)}. \quad (\text{II.3.27})$$

Acomodando los términos de manera más ordenada, se llega ya la relación entre a_0 y a_2 .

$$\boxed{a_2 = \frac{2ikl e^{-2ika}}{2ikl \cos(2la) + (k^2 + l^2) \sin(2la)} a_0}. \quad (\text{II.3.28})$$

Para encontrar el segundo coeficiente que relaciona a a_0 con b_0 , el procedimiento es

muy similar.

Despejando ahora a a_2 de la ecuación (II.3.17).

$$a_2 = b_0 + a_0 \left(\frac{l \cos(la) + ik \sin(la)}{l \cos(la) - ik \sin(la)} \right) e^{-2ika}. \quad (\text{II.3.29})$$

De igual manera que en el procedimiento anterior (II.3.29) se sustituye en (II.3.11), y también en (II.3.13), se obtienen las siguientes dos ecuaciones

$$b_1 = \frac{a_0 \left(1 + \frac{l \cos(la) + ik \sin(la)}{l \cos(la) - ik \sin(la)} \right) e^{-ika} + 2b_0 e^{ika}}{2 \cos(la)}, \quad (\text{II.3.30})$$

$$a_1 = -\frac{a_0 \left(1 - \frac{l \cos(la) + ik \sin(la)}{l \cos(la) - ik \sin(la)} \right) e^{-ika}}{2 \sin(la)}. \quad (\text{II.3.31})$$

Las tres ecuaciones anteriores, se sustituyen en la ecuación (II.3.9d)

$$\begin{aligned} & -a_0 \left(1 - \frac{l \cos(la) + ik \sin(la)}{l \cos(la) - ik \sin(la)} \right) \frac{\cos(la)}{\sin(la)} e^{-ika} \\ & - \left[a_0 \left(1 + \frac{l \cos(la) + ik \sin(la)}{l \cos(la) - ik \sin(la)} \right) e^{-ika} + 2b_0 e^{ika} \right] \frac{\sin(la)}{\cos(la)} \\ & = \frac{2ik}{l} \left(b_0 + a_0 \left(\frac{l \cos(la) + ik \sin(la)}{l \cos(la) - ik \sin(la)} \right) e^{-2ika} \right) e^{ika}. \end{aligned} \quad (\text{II.3.32})$$

Esta ecuación ya solo está en términos de a_0 y b_0 , de igual manera lo único que resta es simplificar para obtener el siguiente coeficiente de la matriz S.

Simplificación:

Agrupando las constantes a_0 y b_0

$$\begin{aligned} & -a_0 \left(1 - \frac{l \cos(la) + ik \sin(la)}{l \cos(la) - ik \sin(la)} \right) \frac{\cos(la)}{\sin(la)} e^{-ika} \\ & -a_0 \left(1 + \frac{l \cos(la) + ik \sin(la)}{l \cos(la) - ik \sin(la)} \right) \frac{\sin(la)}{\cos(la)} e^{-ika} \\ & -a_0 \frac{2ik}{l} \left(\frac{l \cos(la) + ik \sin(la)}{l \cos(la) - ik \sin(la)} \right) e^{-ika} = b_0 \left(\frac{2 \sin(la)}{\cos(la)} + \frac{2ik}{l} \right) e^{ika}. \end{aligned} \quad (\text{II.3.33})$$

Operando todos los términos dentro de los paréntesis

$$\left[-a_0 \left(\frac{-2ik \sin(la)}{l \cos(la) - ik \sin(la)} \right) \frac{\cos(la)}{\sin(la)} - a_0 \left(\frac{2l \cos(la)}{l \cos(la) - ik \sin(la)} \right) \frac{\sin(la)}{\cos(la)} \right. \\ \left. - a_0 \frac{2ik}{l} \left(\frac{l \cos(la) + ik \sin(la)}{l \cos(la) - ik \sin(la)} \right) \right] e^{-ika} = b_0 \left(\frac{2ik \cos(la) + 2l \sin(la)}{l \cos(la)} \right) e^{ika}. \quad (\text{II.3.34})$$

Eliminando términos semejantes

$$-a_0 \left(\frac{-ik \cos(la)}{l \cos(la) - ik \sin(la)} \right) e^{-2ika} - a_0 \left(\frac{l \sin(la)}{l \cos(la) - ik \sin(la)} \right) e^{-2ika} \\ - a_0 \frac{ik}{l} \left(\frac{l \cos(la) + ik \sin(la)}{l \cos(la) - ik \sin(la)} \right) e^{-2ika} = b_0 \left(\frac{ik \cos(la) + l \sin(la)}{l \cos(la)} \right). \quad (\text{II.3.35})$$

Factorizando los términos comunes

$$a_0 \left(\frac{ikl \cos(la)}{l \cos(la) - ik \sin(la)} - \frac{l^2 \sin(la)}{l \cos(la) - ik \sin(la)} - ik \frac{l \cos(la) + ik \sin(la)}{l \cos(la) - ik \sin(la)} \right) e^{-2ika} \\ = b_0 \left(\frac{ik \cos(la) + l \sin(la)}{\cos(la)} \right). \quad (\text{II.3.36})$$

Se suman todos los términos dentro del paréntesis izquierdo de la igualdad

$$a_0 \left(\frac{ikl \cos(la) - l^2 \sin(la) - ikl \cos(la) + k^2 \sin(la)}{l \cos(la) - ik \sin(la)} \right) e^{-2ika} \\ = b_0 \left(\frac{ik \cos(la) + l \sin(la)}{\cos(la)} \right). \quad (\text{II.3.37})$$

Eliminando términos semejantes y despejando a b_0

$$b_0 = \frac{(k^2 - l^2) \sin(la) \cos(la) e^{-2ika}}{(l \cos(la) - ik \sin(la))(ik \cos(la) + l \sin(la))} a_0. \quad (\text{II.3.38})$$

Simplificando para obtener la relación

$$b_0 = \frac{(k^2 - l^2) \sin(la) \cos(la) e^{-2ika}}{ikl \cos^2(la) + k^2 \sin(la) \cos(la) + l^2 \sin(la) \cos(la) - ikl \sin^2(la)} a_0 \quad (\text{II.3.39})$$

$$b_0 = \frac{(k^2 - l^2) \sin(la) \cos(la) e^{-2ika}}{ikl(\cos^2(la) - \sin^2(la)) + (k^2 + l^2) \sin(la) \cos(la)} a_0. \quad (\text{II.3.40})$$

Ocupando las mismas identidades trigonométricas anteriores, de ángulo doble, se obtiene

$$b_0 = \frac{(k^2 - l^2) \sin(2la) e^{-2ika}}{2ikl \cos(2la) + (k^2 + l^2) \sin(2la)} a_0. \quad (\text{II.3.41})$$

Se han obtenido dos coeficientes de la matriz S (II.3.28), (II.3.41), correspondientes a los de una onda incidente desde la izquierda. Por definición de amplitud de Transmisión y Reflexión tenemos que

$$T_{izq} = S_{21} = \frac{2ikl e^{-2ika}}{2ikl \cos(2la) + (k^2 + l^2) \sin(2la)}, \quad (\text{II.3.42})$$

$$R_{izq} = S_{11} = \frac{(k^2 - l^2) \sin(2la) e^{-2ika}}{2ikl \cos(2la) + (k^2 + l^2) \sin(2la)}. \quad (\text{II.3.43})$$

Es fácil obtener los otros dos coeficientes faltantes, ya que el potencial es simétrico, es decir, $V(x) = V(-x)$, entonces

$$T_{der} = S_{12} = \frac{2ikl e^{-2ika}}{2ikl \cos(2la) + (k^2 + l^2) \sin(2la)}, \quad (\text{II.3.44})$$

$$R_{der} = S_{22} = \frac{(k^2 - l^2) \sin(2la) e^{-2ika}}{2ikl \cos(2la) + (k^2 + l^2) \sin(2la)}. \quad (\text{II.3.45})$$

Por lo tanto, la matriz S para un pozo rectangular finito unidimensional, es

$$S = \frac{e^{-2ika}}{2ikl \cos(2la) + (k^2 + l^2) \sin(2la)} \begin{pmatrix} (k^2 - l^2) \sin(2la) & 2ikl \\ 2ikl & (k^2 - l^2) \sin(2la) \end{pmatrix}. \quad (\text{II.3.46})$$

II.3.1. Resonancias y polos de los coeficientes de la Matriz S para el pozo rectangular

Estudiando un poco el coeficiente de la matriz S de amplitud de transmisión T (II.3.42). Lo que tiene significado físico es el coeficiente de transmisión definido como $T_c = |T|^2$, entonces

$$T_c = TT^* = \frac{4k^2 l^2}{4k^2 l^2 \cos^2(2la) + (k^2 + l^2)^2 \sin^2(2la)}. \quad (\text{II.3.47})$$

En este sistema para que haya transmisión total de partículas a través de un potencial, es necesario que $T_c = 1$, es necesario encontrar la condición para que esto se cumpla.

$$\frac{4k^2l^2}{4k^2l^2 \cos^2(2la) + (k^2 + l^2)^2 \sin^2(2la)} = 1, \quad (\text{II.3.48})$$

la única manera de que esto suceda es que

$$\sin^2(2la) = 0, \quad \text{mientras} \quad \cos^2(2la) = 1, \quad (\text{II.3.49})$$

es decir $la = n\pi$, recordando la definición de l

$$\frac{\sqrt{2m(V_0 + E)}}{\hbar} a = n\pi; \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (\text{II.3.50})$$

$$2m(V_0 + E) = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{a^2}, \quad (\text{II.3.51})$$

despejando la energía

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma^2} - V_0. \quad (\text{II.3.52})$$

De esta forma, estas serán las energías bien definidas a las cuales el coeficiente de transmisión toma su valor máximo de 1. Las energías a las cuales sucede esto se les conoce como efecto de transmisión resonante. Otro fenómeno que emerge junto con éste es cuando el coeficiente de transmisión es mínimo, o por el contrario, cuando el coeficiente de reflexión toma un valor máximo, a este fenómeno se le conoce como de estados cuasi-ligados o de resonancia, por la forma que toma la energía (II.3.52).

Debido a que la condición de resonancia es similar a la condición que establece la energía de los estados ligados, las resonancias se interpretan como energías de estados ligados, pero inestables.

Si tomamos ahora $E < 0$ las ecuaciones (II.1.1a), (II.1.1b), ahora tienen exponentes reales, para el caso en el que hay estados cuasi-ligados. Entonces no puede haber onda reflejada creciente en la zona I, así que $a_0 = 0$, cuando esto sucede $R_c = |R|^2$ y $T_c = |T|^2$ se hacen infinitos debido a como están definidos, ver ecuación (II.1.7).

Tomando la entrada de amplitud de Reflexión de la matriz S(II.3.43). Este coeficiente tiene polos para los ceros del denominador en los cuales se hace infinito, es decir, para las energías en las cuales se cumple que

$$2ikl \cos(2la) + (k^2 + l^2) \sin(2la) = 0, \quad (\text{II.3.53})$$

Acomodando esta ecuación de la siguiente forma

$$\tan(2la) = -\frac{2ikl}{l^2 + k^2}, \quad (\text{II.3.54})$$

tomando en cuenta que la energía es negativa $k = i\kappa$, donde κ es real y positivo

$$\tan(2la) = \frac{2\kappa l}{l^2 - \kappa^2}. \quad (\text{II.3.55})$$

Considerando la identidad de ángulo doble

$$\frac{2 \tan(la)}{1 - \tan^2(la)} = \frac{2\kappa l}{l^2 - \kappa^2}, \quad (\text{II.3.56})$$

y ocupando relaciones trigonométricas para transformar el denominador del lado izquierdo tenemos

$$\frac{2 \tan(la) \cos^2(la)}{\cos^2(la) - \sin^2(la)} = \frac{2\kappa l}{l^2 - \kappa^2}. \quad (\text{II.3.57})$$

Por último queda

$$\frac{\sin(la) \cos(la)}{\cos^2(la) - \sin^2(la)} = \frac{\kappa l}{l^2 - \kappa^2}, \quad (\text{II.3.58})$$

donde es fácil ver que

$$\sin(la) = \kappa, \quad \cos(la) = l. \quad (\text{II.3.59})$$

Entonces

$$\boxed{l \tan(la) = \kappa} \quad (\text{II.3.60})$$

Se ha llegado a la ecuación que determina la energía de los estados permitidos dentro del pozo cuadrado finito [16], de energía negativa, que puede ser obtenida directamente resolviendo la ecuación de Shrödinger para $E < 0$.

Esto tiene una implicación mucho más general, que nos dice que los polos de los coeficientes de la matriz S nos arrojan las energías de los estados ligados en un potencial atractivo (considerando $E < 0$), siempre y cuando se pueda construir esta matriz S. Como vimos en este capítulo para construir esta matriz, es necesario que el potencial se vuelva constante o se anule en los extremos.

Capítulo III

MÉTODO DE APROXIMACIÓN MULTI-ESCALÓN

Las funciones de potencial las cuales son analíticamente solubles para la ecuación de Schrödinger son raras, es más raro todavía ejemplos de potenciales unidimensionales que admitan una forma sencilla del coeficiente de reflexión y transmisión [19, 22, 24].

Con el método de aproximación multi-escalón, un potencial suave arbitrario, se aproxima por n -potenciales escalón, con n lo suficientemente grande, convirtiendo al potencial en una cadena de potenciales escalón infinitesimalmente angostos, por lo que recibe el nombre de potencial multi-escalón [17]. Para este nuevo potencial las expresiones del coeficiente de reflexión y transmisión son una generalización del ejemplo mostrado en la sección I.1.1, ya que ahora tiene n -potenciales escalón con n -fronteras, ver Figura III.1.

III.1. Formulación

En esta sección, las expresiones analíticas de los coeficientes de reflexión R_c y transmisión T_c para el potencial multi escalón son obtenidas y presentadas.

Se resuelve la ecuación de Schrödinger para el caso de un potencial discreto con n escalones y n fronteras, el cual es presentado de forma general

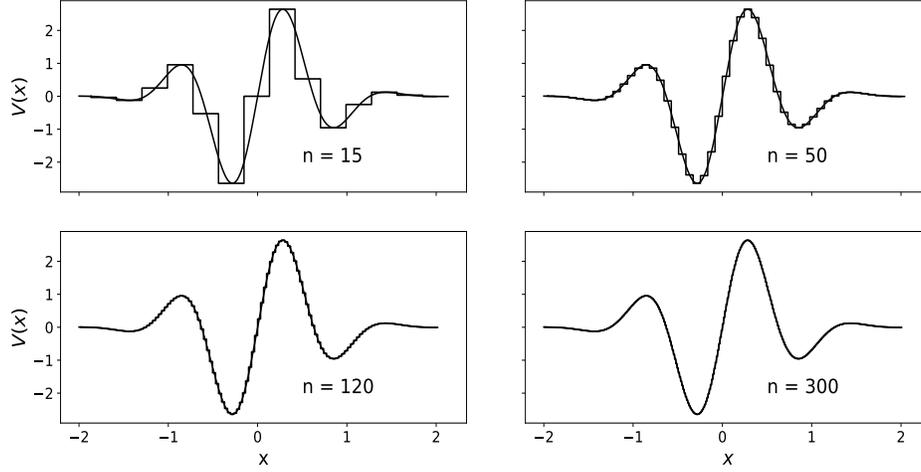


Figura III.1: Distintas aproximaciones multi-escalón para un potencial suave arbitrario, donde n indica el número de escalones.

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & x < 0, \\ V_1, & 0 \leq x < \omega_1, \\ V_2, & \omega_1 \leq x < \omega_1 + \omega_2, \\ \cdot & \\ \cdot & \\ \cdot & \\ V_j, & \sum_i^{j-1} \omega_i \leq x < \sum_i^j \omega_i, \\ \cdot & \\ \cdot & \\ \cdot & \\ V_n, & x \geq \sum_i^{n-1} \omega_i. \end{cases}, \quad (\text{III.1.1})$$

Donde en la región j -ésima, la magnitud y alcance del potencial esta denotada por V_j y ω_j , respectivamente. La solución de la ecuación de Schrödinger en ésta región es

$$\psi_j(x) = a_j e^{ik_j x} + b_j e^{-ik_j x}. \quad (\text{III.1.2})$$

Como se muestra en la sección 1.1.1. Aquí $j = 0, 1, 2, 3, \dots, n$. y $k_j = \sqrt{2m(E - V_j)}/\hbar$ para $\sum_i^{j-1} \omega_i \leq x < \sum_i^j \omega_i$.

La obtención de las amplitudes de reflexión y transmisión para una frontera ya han sido obtenidas en dicha sección

$$R = r_{01} = \frac{b_0}{a_0} = \frac{k_0 - k_1}{k_0 + k_1}, \quad (\text{III.1.3})$$

$$T = \frac{a_1}{a_0} = \frac{2k_0}{k_0 + k_1}. \quad (\text{III.1.4})$$

Definimos r_{01} , como la amplitud de reflexión debido a la frontera entre las regiones con V_0 y V_1 .

III.1.1. Obtención de R y T para dos fronteras de potencial $n = 2$

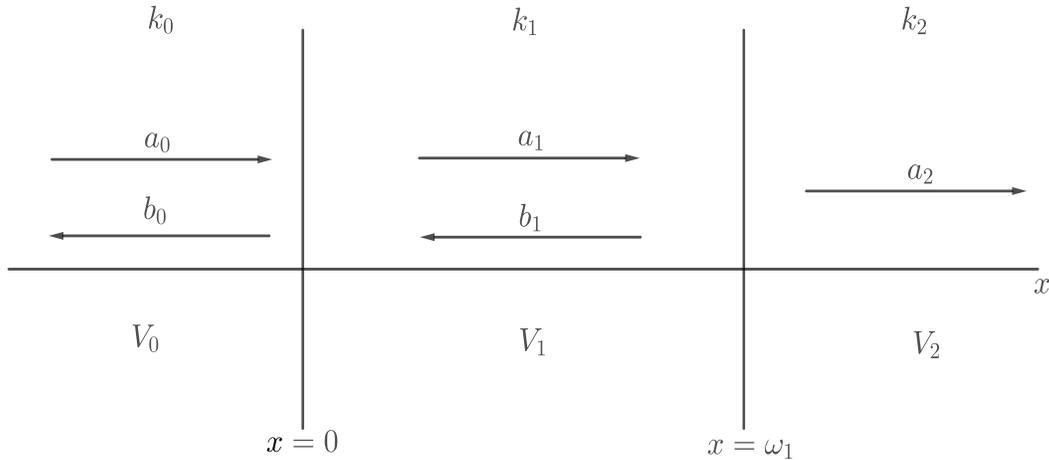


Figura III.2: Doble potencial escalón, en las fronteras $x = 0$ y $x = \omega_1$ cambia el potencial, b_2 no aparece debido a que el haz incide de izquierda a derecha.

En el caso de dos fronteras de potencial en $x = 0$ y $x = \omega_1$, las correspondientes condiciones de continuidad, nos arroja el siguiente conjunto de ecuaciones a resolver, ver Figura III.2

frontera $x = 0$

$$a_0 + b_0 = a_1 + b_1, \quad (\text{III.1.5a})$$

$$k_0 a_0 - k_0 b_0 = k_1 a_1 - k_1 b_1. \quad (\text{III.1.5b})$$

frontera $x = \omega_1$

$$a_1 e^{ik_1 \omega_1} + b_1 e^{-ik_1 \omega_1} = a_2 e^{ik_2 \omega_1}, \quad (\text{III.1.5c})$$

$$k_1 (a_1 e^{ik_1 \omega_1} - b_1 e^{-ik_1 \omega_1}) = k_2 a_2 e^{ik_2 \omega_1}. \quad (\text{III.1.5d})$$

Las amplitudes R y T , para este caso de dos fronteras, se definen como $R = r_{012} = b_0/a_0$ y $T = a_2/a_1$, ver Figura III.2. Por lo tanto, hay que obtener estos cocientes entre los coeficientes resolviendo el conjunto de ecuaciones (III.1.5).

Para encontrar a R , empezamos multiplicando a (III.1.5a) por k_1 y sumando/restando con (III.1.5b), se obtienen las siguientes dos ecuaciones

$$(k_0 + k_1)a_0 + (k_1 - k_0)b_0 = 2k_1 a_1, \quad (\text{III.1.6})$$

$$(k_1 - k_0)a_0 + (k_1 + k_0)b_0 = 2k_1 b_1. \quad (\text{III.1.7})$$

Por otra parte en la ecuación (III.1.5d) sustituimos $a_2 e^{ik_2 \omega_1}$, por la igualdad en la ecuación (III.1.5c)

$$k_1 (a_1 e^{ik_1 \omega_1} - b_1 e^{-ik_1 \omega_1}) = k_2 (a_1 e^{ik_1 \omega_1} + b_1 e^{-ik_1 \omega_1}), \quad (\text{III.1.8})$$

despejando a b_1 de esta ecuación, se tiene

$$b_1 = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} e^{2ik_1 \omega_1} a_1, \quad (\text{III.1.9})$$

sustituyendo este valor de b_1 en la ecuación (III.1.7)

$$(k_1 - k_0)a_0 + (k_1 + k_0)b_0 = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} e^{2ik_1 \omega_1} 2k_1 a_1, \quad (\text{III.1.10})$$

para que todo quede en términos de a_0 y b_0 . En esta última ecuación el término $2k_1 a_1$ los sustuiremos por la igualdad de la ecuación (III.1.6), por lo tanto

$$(k_1 - k_0)a_0 + (k_1 + k_0)b_0 = r_{12} e^{2ik_1 \omega_1} [(k_0 + k_1)a_0 + (k_1 - k_0)b_0], \quad (\text{III.1.11})$$

con $r_{12} = (k_1 - k_2)/(k_1 + k_2)$, como ocurrió en la ecuación (III.1.3).

Simplificación:

$$(k_1 - k_0) + (k_1 + k_0) \frac{b_0}{a_0} = r_{12} e^{2ik_1 \omega_1} \left[(k_0 + k_1) + (k_1 - k_0) \frac{b_0}{a_0} \right], \quad (\text{III.1.12})$$

dividimos a ambos lados por $k_0 + k_1$.

$$\frac{k_1 - k_0}{k_0 + k_1} + \frac{b_0}{a_0} = r_{12} e^{2ik_1\omega_1} \left[1 + \frac{k_1 - k_0}{k_0 + k_1} \frac{b_0}{a_0} \right], \quad (\text{III.1.13})$$

$$-r_{01} + \frac{b_0}{a_0} = r_{12} e^{2ik_1\omega_1} - r_{12} r_{01} e^{2ik_1\omega_1} \frac{b_0}{a_0}, \quad (\text{III.1.14})$$

$$(1 + r_{01} r_{12} e^{2ik_1\omega_1}) \frac{b_0}{a_0} = r_{01} + r_{12} e^{2ik_1\omega_1}. \quad (\text{III.1.15})$$

Por lo tanto R para dos fronteras de potencial es

$$\boxed{R = r_{012} = \frac{b_0}{a_0} = \frac{r_{01} + r_{12} e^{2ik_1\omega_1}}{1 + r_{01} r_{12} e^{2ik_1\omega_1}}}, \quad (\text{III.1.16})$$

donde r_{012} se define como R a través de las tres regiones con potenciales V_0 , V_1 y V_2 .

Ahora encontremos con el mismo sistema de ecuaciones (III.1.5) a T . Multiplicando a la ecuación (III.1.5a) por k_0 y sumando con la ecuación (III.1.5b), se obtiene

$$2k_0 a_0 = (k_0 + k_1) a_1 + (k_0 - k_1) b_1. \quad (\text{III.1.17})$$

Multiplicando a la ecuación (III.1.5c) por k_2 y restando a (III.1.5d), se tiene

$$(k_1 - k_2) a_1 e^{ik_1\omega_1} = (k_1 + k_2) b_1 e^{-ik_1\omega_1}, \quad (\text{III.1.18})$$

despejando a b_1 y sustituyendo en la ecuación (III.1.17):

$$2k_0 a_0 = (k_0 + k_1) a_1 + (k_0 - k_1) \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} a_1 e^{2ik_1\omega_1}, \quad (\text{III.1.19})$$

luego

$$2k_0 a_0 = \left((k_0 + k_1) + (k_0 - k_1) r_{12} e^{2ik_1\omega_1} \right) a_1. \quad (\text{III.1.20})$$

Multiplicando a la ecuación (III.1.5c) por k_1 y sumando a (III.1.5d), se tiene

$$2k_1 a_1 e^{ik_1\omega_1} = (k_1 + k_2) a_2 e^{ik_2\omega_1}, \quad (\text{III.1.21})$$

despejando a a_1 y sustituyendo en la ecuación (III.1.20)

$$2k_0a_0 = ((k_0 + k_1) + (k_0 - k_1)r_{12}e^{2ik_1\omega_1}) \frac{k_1 + k_2}{2k_1} a_2 e^{i(k_2 - k_1)\omega_1}. \quad (\text{III.1.22})$$

Esta última ecuación ya solo está en términos de a_0 y a_2 , con lo cual se obtiene a T , solo falta encontrar el cociente entre ellos.

Simplificación:

Dividiendo a esta última ecuación por $k_0 + k_1$

$$\frac{2k_0}{k_0 + k_1} a_0 = \left(1 + \frac{k_0 - k_1}{k_0 + k_1} r_{12} e^{2ik_1\omega_1}\right) \frac{k_1 + k_2}{2k_1} a_2 e^{i(k_2 - k_1)\omega_1}, \quad (\text{III.1.23})$$

$$\frac{2k_0}{k_0 + k_1} a_0 = (1 + r_{01} r_{12} e^{2ik_1\omega_1}) \frac{k_1 + k_2}{2k_1} a_2 e^{i(k_2 - k_1)\omega_1}, \quad (\text{III.1.24})$$

dividiendo todo por a_0

$$\left(\frac{2k_0}{k_0 + k_1}\right) \left(\frac{2k_1}{k_1 + k_2}\right) = (1 + r_{01} r_{12} e^{2ik_1\omega_1}) \frac{a_2}{a_0} e^{i(k_2 - k_1)\omega_1}, \quad (\text{III.1.25})$$

simplifiquemos el miembro izquierdo de esta ecuación, con el siguiente cambio

$$\left(\frac{2k_0}{k_0 + k_1}\right) \left(\frac{2k_1}{k_1 + k_2}\right) = \left(\frac{k_0 - k_1}{k_0 + k_1} + \frac{k_0 + k_1}{k_0 + k_1}\right) \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} + \frac{k_1 + k_2}{k_1 + k_2}\right), \quad (\text{III.1.26})$$

por lo tanto

$$\left(\frac{2k_0}{k_0 + k_1}\right) \left(\frac{2k_1}{k_1 + k_2}\right) = (r_{01} + 1)(r_{12} + 1). \quad (\text{III.1.27})$$

Regresando a la ecuación (III.1.25)

$$(r_{01} + 1)(r_{12} + 1) = (1 + r_{01} r_{12} e^{2ik_1\omega_1}) \frac{a_2}{a_0} e^{i(k_2 - k_1)\omega_1}, \quad (\text{III.1.28})$$

se obtiene T para dos fronteras

$$\boxed{T = \frac{a_2}{a_0} = \frac{(r_{01} + 1)(r_{12} + 1) e^{i(k_1 - k_2)\omega_1}}{(1 + r_{01} r_{12} e^{2ik_1\omega_1})}}. \quad (\text{III.1.29})$$

III.1.2. Obtención de R y T para tres fronteras de potencial $n = 3$

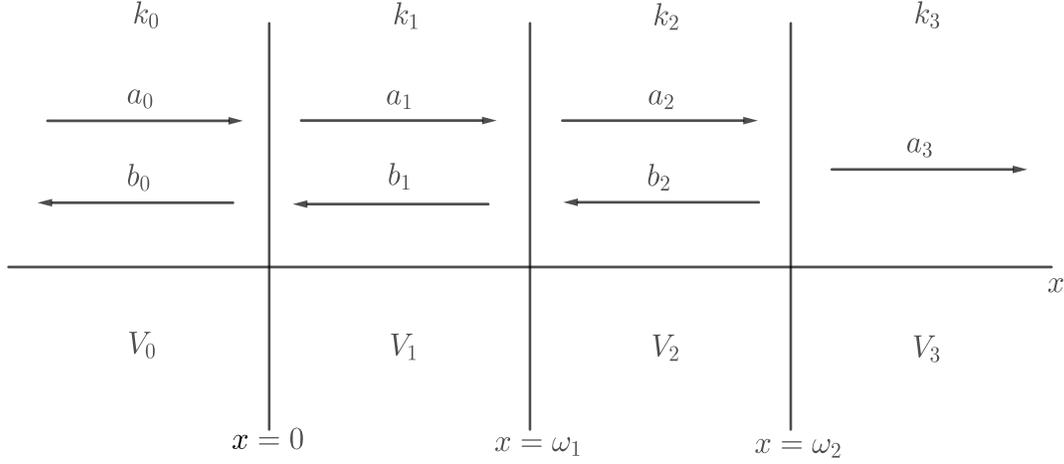


Figura III.3: Tres fronteras de potencial, donde el potencial cambia cuando $x = 0$, $x = \omega_1$ y $x = \omega_2$, b_3 no aparece debido a que el haz incide de izquierda a derecha.

En este caso, tendremos dos ecuaciones más que en el caso anterior debido a la frontera en $x = \omega_2$, Las ecuaciones son similares a las del caso de dos fronteras:

frontera $x = 0$

$$a_0 + b_0 = a_1 + b_1, \quad (\text{III.1.30a})$$

$$k_0 a_0 - k_0 b_0 = k_1 a_1 - k_1 b_1, \quad (\text{III.1.30b})$$

frontera $x = \omega_1$

$$a_1 e^{ik_1 \omega_1} + b_1 e^{-ik_1 \omega_1} = a_2 e^{ik_2 \omega_1} + b_2 e^{-ik_2 \omega_1}, \quad (\text{III.1.30c})$$

$$k_1 (a_1 e^{ik_1 \omega_1} - b_1 e^{-ik_1 \omega_1}) = k_2 (a_2 e^{ik_2 \omega_1} - b_2 e^{-ik_2 \omega_1}), \quad (\text{III.1.30d})$$

frontera $x = \omega_2$

$$a_2 e^{ik_2(\omega_1 + \omega_2)} + b_2 e^{-ik_2(\omega_1 + \omega_2)} = a_3 e^{ik_3(\omega_1 + \omega_2)}, \quad (\text{III.1.30e})$$

$$k_2 (a_2 e^{ik_2(\omega_1 + \omega_2)} - b_2 e^{-ik_2(\omega_1 + \omega_2)}) = k_3 a_3 e^{ik_3(\omega_1 + \omega_2)}. \quad (\text{III.1.30f})$$

Usando el conjunto de seis ecuaciones, hay que encontrar una relación entre a_0 y b_0 para R , y entre a_0 y a_3 para T .

Multiplicando a la ecuación (III.1.30c) por k_2 y sumando/restando a la ecuación (III.1.30d), tenemos las siguientes dos ecuaciones:

$$(k_1 + k_2)a_1e^{ik_1\omega_1} + (k_2 - k_1)b_1e^{-ik_1\omega_1} = 2k_2a_2e^{ik_2\omega_1}, \quad (\text{III.1.31})$$

$$(k_2 - k_1)a_1e^{ik_1\omega_1} + (k_2 + k_1)b_1e^{-ik_1\omega_1} = 2k_2b_2e^{-ik_2\omega_1}. \quad (\text{III.1.32})$$

Por otra parte multiplicando a la ecuación (III.1.30e) por k_3 y restando a la ecuación (III.1.30f), se obtiene:

$$(k_2 - k_3)a_2e^{ik_2(\omega_1+\omega_2)} = (k_2 + k_3)b_2e^{-ik_2(\omega_1+\omega_2)}, \quad (\text{III.1.33})$$

despejando b_2

$$b_2 = \frac{k_2 - k_3}{k_2 + k_3}a_2e^{2ik_2(\omega_1+\omega_2)} = r_{23}a_2e^{2ik_2(\omega_1+\omega_2)}, \quad (\text{III.1.34})$$

y sustituyendolo en la ecuación (III.1.32)

$$\begin{aligned} (k_2 - k_1)a_1e^{ik_1\omega_1} + (k_2 + k_1)b_1e^{ik_1\omega_1} &= 2k_2r_{23}a_2e^{2ik_2(\omega_1+\omega_2)}e^{-ik_2\omega_1} \\ (k_2 - k_1)a_1e^{ik_1\omega_1} + (k_2 + k_1)b_1e^{ik_1\omega_1} &= r_{23}e^{2ik_2\omega_2}2k_2a_2e^{ik_2\omega_1}. \end{aligned} \quad (\text{III.1.35})$$

Usando en esta última ecuación a $2k_2a_2e^{ik_2\omega_1}$ de la ecuación (III.1.31), se tiene

$$(k_2 - k_1)a_1e^{ik_1\omega_1} + (k_2 + k_1)b_1e^{ik_1\omega_1} = r_{23}e^{2ik_2\omega_2} \left((k_1 + k_2)a_1e^{ik_1\omega_1} + (k_2 - k_1)b_1e^{-ik_1\omega_1} \right). \quad (\text{III.1.36})$$

Agrupando los términos con factores a_1 y b_1 y factorizandolos

$$\left((k_2 - k_1) - (k_1 + k_2)r_{23}e^{2ik_2\omega_2} \right) a_1e^{ik_1\omega_1} = \left(-(k_2 + k_1) + r_{23}e^{2ik_2\omega_2}(k_2 - k_1) \right) b_1e^{-ik_1\omega_1}, \quad (\text{III.1.37})$$

dividiendo a toda la ecuación por $k_1 + k_2$

$$\left(\frac{k_2 - k_1}{k_1 + k_2} - r_{23}e^{2ik_2\omega_2} \right) a_1e^{ik_1\omega_1} = \left(-1 + r_{23} \frac{k_2 - k_1}{k_1 + k_2} e^{2ik_2\omega_2} \right) b_1e^{-ik_1\omega_1}, \quad (\text{III.1.38})$$

luego tomando las definiciones para r_{12}

$$(r_{12} + r_{23}e^{2ik_2\omega_2}) a_1e^{ik_1\omega_1} = (1 + r_{12}r_{23}e^{2ik_2\omega_2}) b_1e^{-ik_1\omega_1}, \quad (\text{III.1.39})$$

despejando a b_1

$$b_1 = \frac{r_{12} + r_{23}e^{2ik_2\omega_2}}{1 + r_{12}r_{23}e^{2ik_2\omega_2}} a_1e^{2ik_1\omega_1}. \quad (\text{III.1.40})$$

Podemos notar que la fracción en el miembro derecho de esta ecuación es idéntica a la reflexión encontrada para dos fronteras, ecuación (III.1.16), solo que con distintos subíndices, por lo tanto denotamos a esta fracción como r_{123} de modo que

$$b_1 = r_{123}a_1e^{2ik_1\omega_1}. \quad (\text{III.1.41})$$

Por otra parte, multiplicando la ecuación (III.1.30a) por k_1 y sumando/restando con la ecuación (III.1.30b) se obtiene las siguientes dos ecuaciones:

$$(k_0 + k_1)a_0 + (k_1 - k_0)b_0 = 2k_1a_1, \quad (\text{III.1.42})$$

$$(k_1 - k_0)a_0 + (k_1 + k_0)b_0 = 2k_1b_1. \quad (\text{III.1.43})$$

sustituyendo (III.1.41) en (III.1.43)

$$(k_1 - k_0)a_0 + (k_1 + k_0)b_0 = r_{123}e^{2ik_1\omega_1}2k_1a_1, \quad (\text{III.1.44})$$

y tomando $2k_1a_1$ de la ecuación (III.1.42)

$$(k_1 - k_0)a_0 + (k_1 + k_0)b_0 = r_{123}e^{2ik_1\omega_1}((k_0 + k_1)a_0 + (k_1 - k_0)b_0). \quad (\text{III.1.45})$$

Esta ecuación está en términos de a_0 y b_0 con los que se obtiene R , en este caso, para tres fronteras.

Simplificación:

Dividiendo la ecuación (III.1.45) por $(k_0 + k_1)a_0$.

$$\frac{k_1 - k_0}{k_0 + k_1} + \frac{b_0}{a_0} = r_{123}e^{2ik_1\omega_1} \left(1 + \frac{k_1 - k_0}{k_0 + k_1} \frac{b_0}{a_0} \right), \quad (\text{III.1.46})$$

$$-r_{01} + \frac{b_0}{a_0} = r_{123}e^{2ik_1\omega_1} \left(1 - r_{01} \frac{b_0}{a_0} \right) \quad (\text{III.1.47})$$

$$\frac{b_0}{a_0} (1 + r_{01}r_{123}e^{2ik_1\omega_1}) = r_{01} + r_{123}e^{2ik_1\omega_1}. \quad (\text{III.1.48})$$

Por lo tanto R para tres fronteras de potencial

$$\boxed{R = r_{0123} = \frac{b_0}{a_0} = \frac{r_{01} + r_{123}e^{2ik_1\omega_1}}{1 + r_{01}r_{123}e^{2ik_1\omega_1}}}. \quad (\text{III.1.49})$$

Para T los pasos a seguir son muy similares e igual de extensos y se omiten aquí, todo el procedimiento para tres fronteras conduce a

$$T = \frac{a_3}{a_0} = \frac{(r_{01} + 1)(r_{12} + 1)e^{i(k_1 - k_2)\omega_1}}{(1 + r_{01}r_{123}e^{2ik_1\omega_1})} \times \frac{(r_{23} + 1)e^{i(k_2 - k_3)(\omega_1 + \omega_2)}}{(1 + r_{12}r_{23}e^{2ik_2\omega_2})}. \quad (\text{III.1.50})$$

III.2. Forma generalizada de R y T para n fronteras

Por lo que se puede ver en los dos resultados anteriores para R (III.1.16), (III.1.41), y T (III.1.29), (III.1.50), tienen un caracter recursivo, por lo tanto siguiendo el mismo método para encontrar R y T para n fronteras, es fácil ver por inspección que, para el coeficiente de reflexión $R_c = |R|^2$, la amplitud R esta dada

$$R = r_{0123\dots n} = \frac{b_0}{a_0} = \frac{r_{01} + r_{123\dots n}e^{2ik_1\omega_1}}{1 + r_{01}r_{123\dots n}e^{2ik_1\omega_1}}. \quad (\text{III.2.1})$$

Para el coeficiente de transmisión $T_c = |T|^2$, la amplitud T está dada por:

$$\begin{aligned} T = \frac{a_n}{a_0} &= (r_{01} + 1) \times (r_{12} + 1)e^{i(k_1 - k_2)\omega_1} \times (r_{23} + 1)e^{i(k_2 - k_3)(\omega_1 + \omega_2)} \times \dots \\ &\times (r_{n-1,n} + 1)e^{i(k_{n-1} - k_n)(\omega_1 + \omega_2 + \dots + \omega_{n-1})} \\ &\times \frac{1}{1 + r_{10}r_{123\dots n}e^{2ik_1\omega_1}} \times \frac{1}{1 + r_{12}r_{23\dots n}e^{2ik_2\omega_2}} \times \dots \\ &\times \frac{1}{1 + r_{n-2,n-1}r_{n-1,n}e^{2ik_{n-1}\omega_{n-1}}}. \end{aligned} \quad (\text{III.2.2})$$

En estas ecuaciones (III.2.1), (III.2.2), podemos remarcar que:

$$\begin{aligned} r_{123\dots n} &= \frac{r_{12} + r_{23\dots n}e^{2ik_2\omega_2}}{1 + r_{12}r_{23\dots n}e^{2ik_2\omega_2}}, \\ &\vdots \\ r_{n-1,n} &= \frac{k_{n-1} - k_n}{k_{n-1} + k_n}. \end{aligned} \quad (\text{III.2.3})$$

El carácter recursivo de estas formulas es útil, ya que permite desarrollar un programa para la evaluación numérica de los coeficientes de reflexión R_c y transmisión T_c de un potencial multi-escalón.

El desarrollo de este programa puede ser visto en el Apéndice A. Para poder obtener las energías de los estados ligados generados por un potencial atractivo, el camino que se sigue aquí, es encontrar la posición de los máximos que se generan en una gráfica del coeficiente de reflexión $R_c = |r_{012\dots n}|^2$ como función de la energía incidente en la región $E < 0$. Estos picos, son generados por los polos del coeficiente de amplitud de reflexión visto en el Capítulo II. Las energías discretas corresponden a los eigen-valores que representan estados ligados del potencial. Por otra parte, para $E > 0$, los puntos donde la variación del coeficiente R_c es mínima representan ya sea estados cuasi-ligados o estados de transmisión resonante.

Capítulo IV

APLICACIONES

En este capítulo, se muestra la aplicación del método de aproximación potencial multi-escalón en potenciales suaves de cualquier forma los cuales pueden ser aproximados por un n número de pequeños escalones. Las ecuaciones (III.2.1) y (III.2.2) son usadas para el cálculo de los eigenvalores para dichos potenciales. En esta Tesis se muestra la gran precisión de los eigenvalores de energía que arroja la evaluación numérica de T_c y R_c , con aquellos obtenidos desde espectros de energía analíticos.

Los resultados para estados ligados y de resonancia generados por un potencial el cual no es soluble analíticamente, también son estimados numéricamente por este método. Para resaltar la precisión de método multi-escalón y sus ventajas, estos resultados son comparados, en algunos casos, con los obtenidos por el método de Runge-Kutta que resuelve la Ecuación de Schrödinger. En esta Tesis se usa únicamente la ecuación (III.2.1) para reportar los resultados.

En el Apéndice B se encuentra la implementación del programa desarrollado en el lenguaje de programación *Python* para cada potencial que es trabajado en este capítulo, el cual calcula el coeficiente de reflexión para n fronteras, grafica sus polos y resonancias, así como establece sus correspondientes valores de energía.

IV.1. Potencial de Eckart

El potencial de Eckart presentado por primera vez por Carl Eckart [19], como una función que tiene solución analítica para la ecuación de Schrödinger para mostrar el efecto tunel, está dado por la siguiente expresión, donde V_0 y α son la profundidad y el alcance del potencial, respectivamente.

$$V(x) = - \left(\frac{V_0}{\cosh^2(\alpha x)} \right) \quad (\text{IV.1.1})$$

Este potencial se muestra en la Figura IV.1 donde los parámetros $V_0 = 4fm^{-2}$ y $\alpha = 0,7fm^{-1}$, se considera $2m/\hbar = 1$ cuando se resuelve la ecuación de Schrödinger.

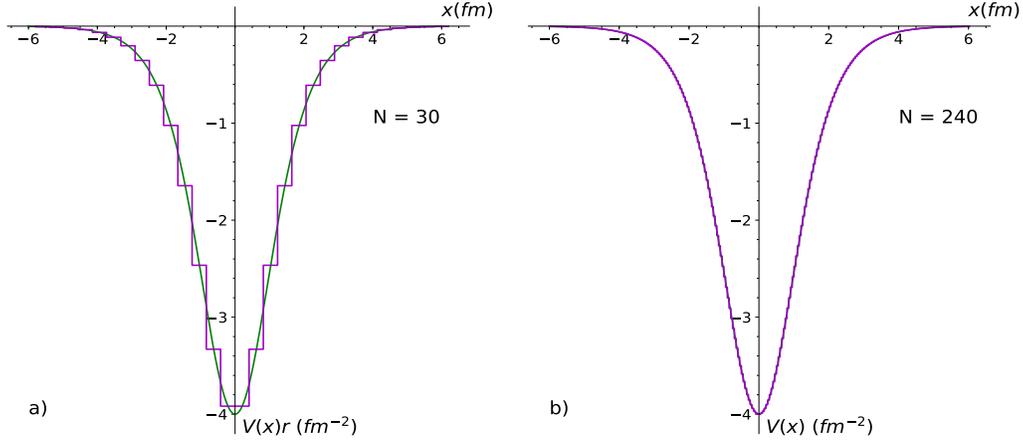


Figura IV.1: Pozo de Potencial de Eckart (línea verde). a) Aproximación multi-escalón de 30 steps, b) Aproximación multi-escalón mucho más fina de 240 escalones (línea morada).

Se realiza una aproximación de poco más de 200 escalones (ver código B.1), es suficiente para nuestro propósito, ya que es notable que la aproximación multi-escalón se funde con la forma de potencial. Debido a que el potencial es simétrico, y ya que el potencial es atractivo, la aproximación multi-step se realiza para todo el potencial para obtener las energías de enlace.

Para la obtención de las energías de enlace, lo importante, es elegir una buena aproximación de potencial multi-escalón, que no necesariamente, es aproximar el potencial completo como se verá en potenciales posteriores. Entonces, para éste potencial (IV.1.1), los pasos son los siguientes; primeramente se obtiene el coeficiente de reflexión R_c , después se grafica éste coeficiente como función de la energía, el rango de barrido de la energía dependerá de la profundidad del pozo, en este caso el rango que fue tomado es de $-4fm^{-2} \leq E \leq 0$. ver la Figura IV.2. Las energías obtenidas con el método de aproximación multi-escalón E_b^{ms} son tabuladas en la columna central de la Tabla IV.1.

El potencial de Eckart es como sabemos analíticamente soluble y su espectro de energía [20] es obtenido de la expresión analítica

$$E_n = -\frac{\alpha^2}{4} \left[-(1 + 2n) + \sqrt{1 + \frac{4V_0}{\alpha^2}} \right]^2 \quad (IV.1.2)$$

donde $n = 0, 1, 2, \dots$. Con los valores de los parámetros V_0 y α ya mencionados, los resultados son tabulados en la primer columna como E_b^{exact} en la Tabla IV.1. Podemos notar como el método de aproximación multi-escalón es una muy buena aproximación

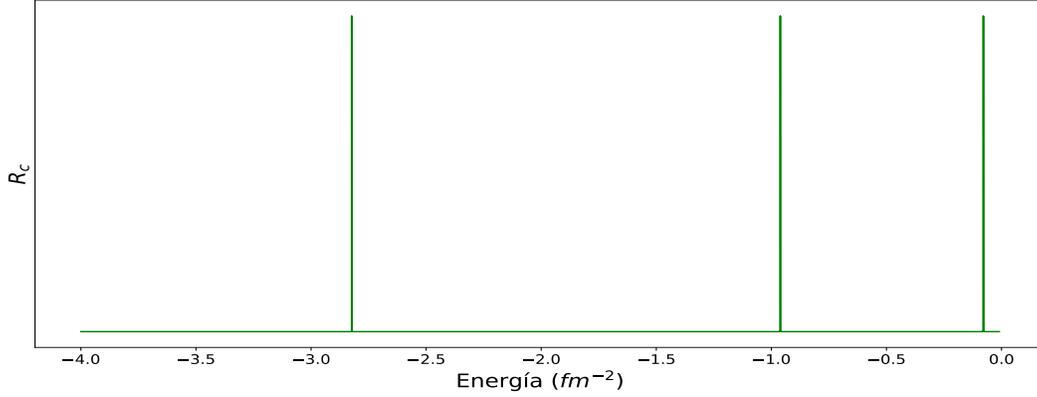


Figura IV.2: Gráfica de los polos del coeficiente de reflexión R_c para el pozo de potencial Eckart, como función de la energía.

a las energías de estados ligados, incluso mejor que el famoso y ampliamente usado método de Runge-Kutta que están tabulados en la última columna de la Tabla IV.1 como R_b^{RK} .

n	E_b^{exact} (fm^{-2})	E_b^{ms} (fm^{-2})	E_b^{RK} (fm^{-2})
0	-2.8237	-2.8237	-2.8240
1	-0.9611	-0.9611	-0.9620
2	-0.0782	-0.0789	-0.0800

Tabla IV.1: Energías de enlace para el pozo de potencial de Eckart con parámetros $V_0 = -4fm^{-2}$ y $\alpha = 0,7fm^{-1}$. n , E_b^{exact} , E_b^{ms} y E_b^{RK} representan el número de estado, resultados de la ecuación (IV.6.2), resultados de aplicar el método de aproximación multi-escalón y resultados del método de Runge-Kutta, respectivamente.

Mas allá de solo calcular las energías de enlace para este potencial, tomando el potencial de Eckart en su forma repulsiva, ver Figura IV.3, es posible comparar los resultados del coeficiente de reflexión R_c como función para energías positivas, con aquellos obtenidos usando la fórmula analítica exacta [21] de R_c dada por la ecuación (IV.1.3), con una altura de $V_0 = 4fm^{-2}$,

$$R_c = \frac{\cosh^2(\pi B/2)}{\sinh^2(\pi k/\alpha) + \cosh^2(\pi B/2)} \quad (IV.1.3)$$

con $B = \sqrt{(4V_0/\alpha^2) - 1}$ y $k = \sqrt{E}$.

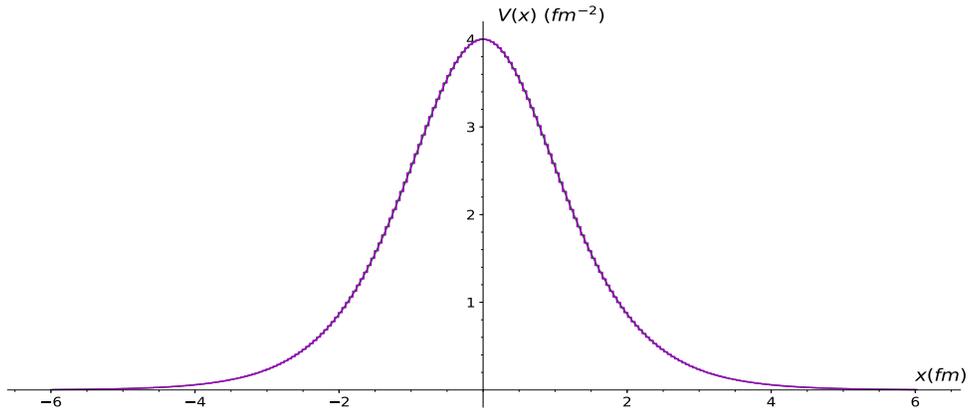


Figura IV.3: Barrera de potencial de Eckart, con una aproximación multi-escalón de 240 escalones, con parámetros $V_0 = 4\text{fm}^{-2}$ y $\alpha = 0,7\text{fm}^{-1}$.

La comparación realizada entre el coeficiente de reflexión R_c obtenido por medio del método multi-escalón aplicado a la barrera de potencial de Eckart y R_c obtenido por medio de la fórmula analítica (IV.1.3), es meramente gráfica, ver Figura IV.4.

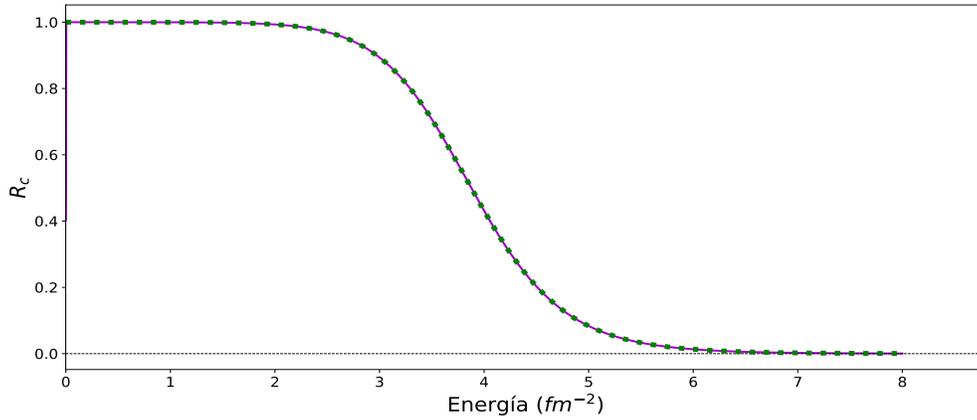


Figura IV.4: Gráfica del coeficiente de reflexión R_c para la barrera de potencial de Eckart con un barrido de energías positivas $0 \leq E \leq 8$. (línea continua morada) gráfica de la ecuación (IV.1.3), (línea punteada verde) gráfica obtenida con el método multi-step

IV.2. Potencial de Ginocchio

Otro potencial interesante, es el potencial expresado por Ginocchio [22] en forma atractiva (pozo) o en su forma repulsiva (barrera) [23], debido a su flexibilidad para producir potenciales de distintas formas. Este potencial puede ser resuelto analíticamente para sus eigen-funciones y sus eigen-valores, sin embargo, hay un problema que debido a su formulación analítica complicada, no es posible resolver directamente la ecuación de Schrödinger por métodos numéricos, como el conocido método de Runge-Kutta. Esto se debe a la propia naturaleza del potencial, ya que no puede ser expresado uniformemente en coordenadas espaciales en intervalos iguales. Como resultado, se pierde fiabilidad al construir cualquier potencial compuesto por diferentes combinaciones de este tipo de potencial por métodos numéricos.

Es interesante aplicar el método de aproximación multi-escalón que es semi-analítico y semi-numérico para analizar este potencial en una dimensión para encontrar el coeficiente de reflexión como función de la energía y obtener las energías propias para ambos casos, en su forma atractiva y repulsiva.

El potencial en el caso atractivo en una dimensión está dado por

$$V(x) = V_0 v(r) \quad (\text{IV.2.1})$$

$$v(r) = -\lambda^2 \nu (\nu + 1) (1 - y^2) + \frac{1 - \lambda^2}{4} [5(1 - \lambda^2)y^4 - (7 - \lambda^2)y^2 + 2] (1 - y^2). \quad (\text{IV.2.2})$$

V_0 es una constante de potencial en unidades de fm^{-2} y $r = bx$ es la variable de distancia adimensional con $b = \sqrt{V_0}$. Aquí λ y ν son dos parámetros adimensionales. El parámetro ν mide la profundidad de pozo de potencial, sin embargo, cuando la profundidad del pozo en $x = 0$ denotado por V_{0D} está fija, ν actúa como parámetro de rango y V_0 es expresado en términos de V_{0D} , α y ν , ecuación (IV.2.3). El parámetro λ cuenta como la planitud del potencial. En la Figura IV.5 se puede ver como los parámetros λ y ν cambian la forma del potencial de Ginocchio.

$$V_0 = \frac{-V_{0D}}{(-\lambda^2(\nu^2 + \nu + 1/2) + 1/2)} \quad (\text{IV.2.3})$$

La función $y(r)$ está relacionada con la variable r por

$$r = \frac{1}{\lambda^2} [\tanh^{-1}y + (\lambda^2 - 1)^{1/2} \tan^{-1}(\lambda^2 - 1)^{1/2}y], \quad (\text{IV.2.4})$$

para $\lambda \geq 1$.

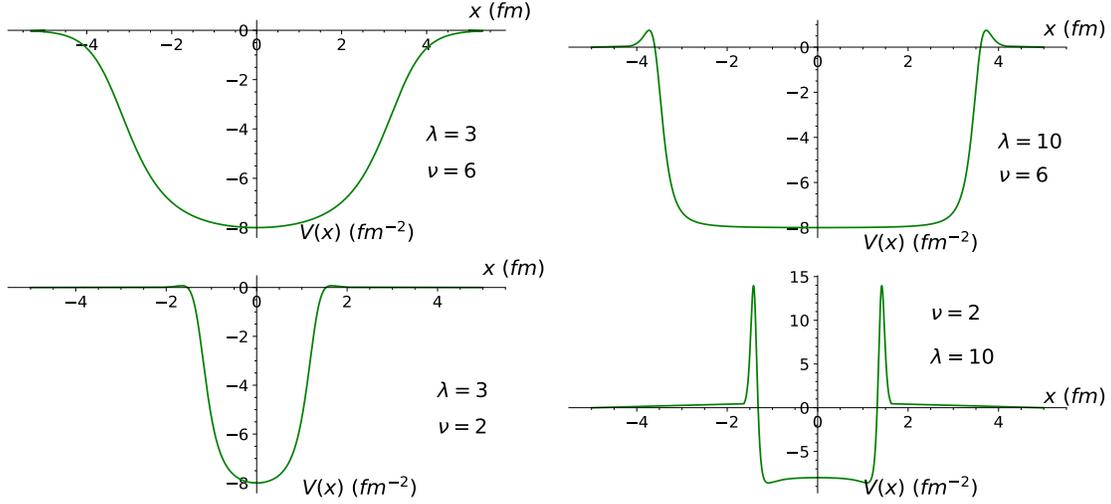


Figura IV.5: *Potencial Ginocchio en su forma atractiva para distintos valores de los parámetros λ y ν y profundidad fija en $x = 0$ de $V_{0D} = 8$.*

En esta tesis, consideraremos el potencial Ginocchio con los parámetros $\lambda = 4$, $\nu = 5$ y $V_{0D} = 8$, en la Figura IV.6 podemos ver la aproximación multi-step para este potencial, sin embargo, no hay duda de que el método multi-step es aplicable (ver código B.2) también para las formas mostradas en la Figura IV.5, ya que este potencial tiende a cero en los extremos.

La expresión analítica para el espectro de energía [22] está dada por la siguiente fórmula

$$E_n = V_0 \left\{ -\lambda^2 \left(\nu + \frac{1}{2} \right)^2 - (2 - \lambda^2) \left(n + \frac{1}{2} \right)^2 + (2n + 1) \left[\lambda^2 \left(\nu + \frac{1}{2} \right)^2 + (1 - \lambda^2) \left(n + \frac{1}{2} \right)^2 \right]^{1/2} \right\} \quad (\text{IV.2.5})$$

con $n = 0, 1, 2, \dots$

Con los parámetros de λ y ν ya establecidos y (IV.2.5), los resultados para las energías de enlace son tabuladas en la primer columna bajo "Energías de Enlace" de la Tabla IV.2, denotadas como E_b^{exact} . Con la aproximación multi-escalón hecha para el potencial en la Figura IV.6 para 240 fronteras se calculó el coeficiente de reflexión R_c y se graficó con respecto a la energía en el intervalo $-8fm^{-2} \leq E \leq 0$, ver Figura IV.7.

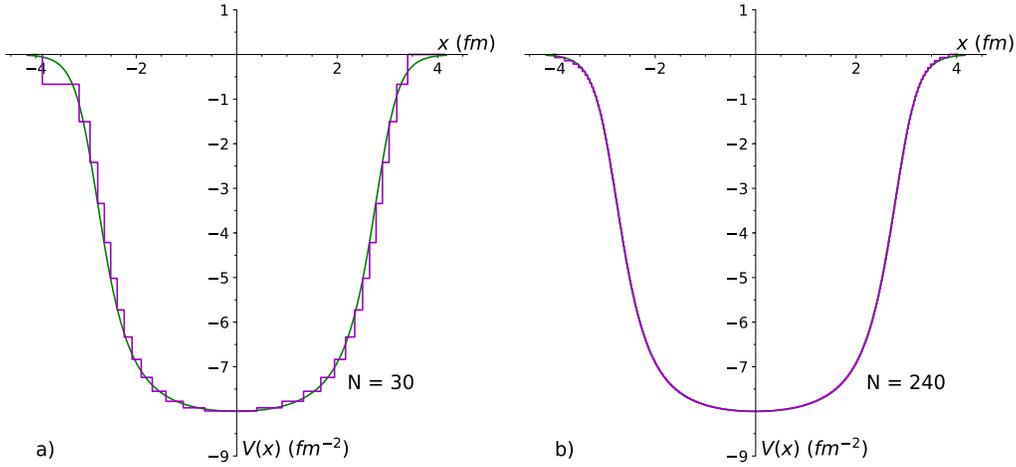


Figura IV.6: *Pozo de Potencial Ginocchio (línea verde). a) Aproximación multi-step de 30 steps, b) Aproximación multi-escalón mucho más fina de 240 escalones (línea morada).*

Las posiciones de estos picos del coeficiente de reflexión son tabuladas en la segunda columna bajo Energías de Enlace de la Tabla IV.2 denotadas como E_b^{ms} .

El potencial de Ginocchio dado en las expresiones (IV.2.1), (IV.2.2), se puede convertir a su forma repulsiva [23] donde la función $v(r)$ es escrita

$$v(r) = \lambda^2 \nu(\nu + 1)(1 - y^2) + \frac{1 - \lambda^2}{4} [5(1 - \lambda^2)y^4 - (7 - \lambda^2)y^2 + 2] (1 - y^2). \quad (\text{IV.2.6})$$

Con los mismos valores de los parámetros λ , ν y V_{0D} , este potencial repulsivo se muestra en la Figura IV.8.

Para un valor dado de $\lambda \geq 1,4$ con algún valor de ν , el potencial puede tener resonancias para energías mayores a la barrera de potencial. Estas energías son obtenidas en los ceros de la amplitud de reflexión que se obtiene analíticamente en [23] y son expresadas como

$$E_{nr}^{zero} = V_0 \left(\frac{\lambda^4}{\lambda^2 - 1} \right) \left\{ \left(n + \frac{1}{2} \right)^2 - \left(\frac{1}{4} - \nu^2 - \nu \right) \right\}. \quad (\text{IV.2.7})$$

Los valores discretos que se obtienen con esta fórmula denotados por E_{nr}^{zero} son tabulados en la primer columna bajo Energías de Resonancia en la Tabla IV.2.

Aplicando el método de aproximación multi-escalón para este caso repulsivo es obtenido el coeficiente de reflexión y graficado con respecto a energías mayores al del potencial $8 \leq E \leq 18$. Ver Figura IV.9.

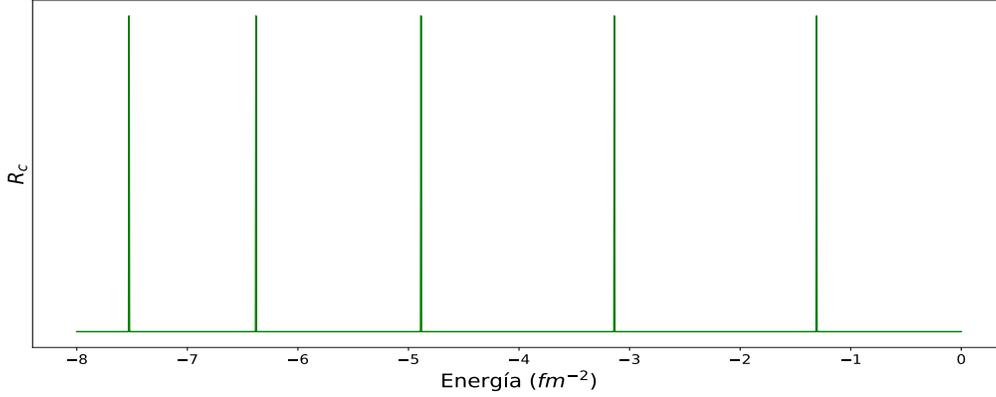


Figura IV.7: Gráfica de los polos del coeficiente de reflexión R_c para el pozo de potencial Ginocchio, como función de la energía.

La posición de los mínimos en la grafica de la Figura IV.9 son las energías de resonancia, es decir, a las cuales la transmisión es total, estas energías son tabuladas en la segunda columna debajo de Energías de Resonancia, denotadas como R_r^{ms} en la Tabla IV.2.

n	Energías de Enlace		Energías de Resonancia	
	E_b^{exact} (fm^{-2})	E_b^{ms} (fm^{-2})	E_{nr}^{zero} (fm^{-2})	E_r^{ms} (fm^{-2})
0	-7.5255	-7.5277	8.668	8.661
1	-6.3810	-6.3791	9.246	9.206
2	-4.8857	-4.8864	10.403	10.358
3	-3.1377	-3.1375	12.136	12.070
4	-1.3073	-1.3086	14.448	14.271

Tabla IV.2: Energías de enlace para el potencial atractivo de Ginocchio para los parámetros $\lambda = 4$, $\nu = 5$ y $V_{0D} = 8fm^{-2}$. n , E_b^{exact} y E_b^{ms} representan el número de estado, resultados de la ecuación (IV.2.5) y resultados de aplicar el método multi-escalón, respectivamente.

El cálculo tanto de las energías de enlace, como de las resonancias por medio del método multi-escalón es bastante preciso tanto para la forma atractiva como la repulsiva del potencial de Ginocchio. El éxito que tiene el método multi-step en reproducir casi exactamente los resultados analíticos logrados aquí, abre un nuevo camino cuando el método de Runge-Kutta entra en problemas al analizar éste potencial tan importante en la literatura.

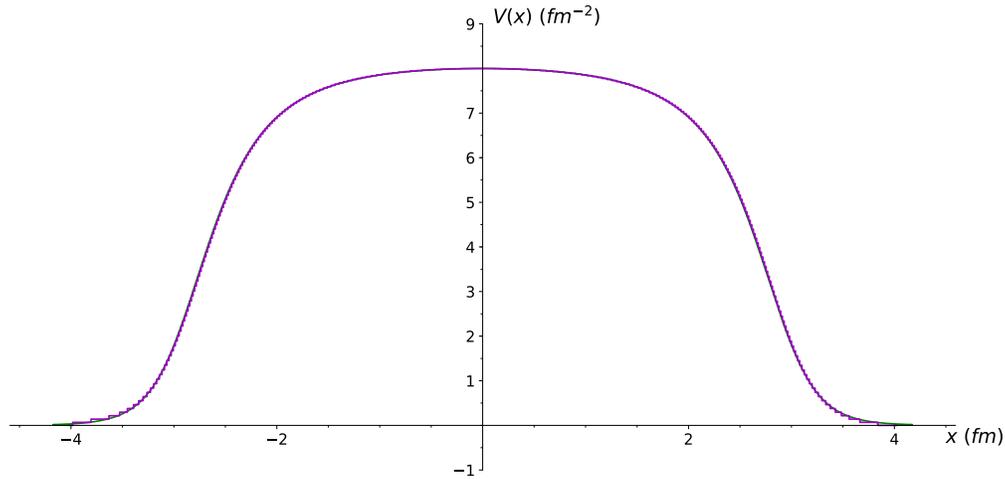


Figura IV.8: Barrera de potencial Ginocchio, con aproximación multi-escalón de 240 fronteras (línea morada).

IV.3. Potencial Oscilador armónico

Una de las limitantes del método se encuentra en aproximar potenciales singulares, es decir, potenciales que en sus extremos no tienden a una constante, y uno de ellos es el famoso potencial Oscilador armónico. Debido a que es un potencial ampliamente usado en mecánica cuántica y uno de los más importantes debido a su solución analítica simple y bastante usado para aproximar todo tipo de potenciales es sus puntos de estabilidad, es de interés mostrar cómo el método de aproximación multi-escalón puede superar esta limitante. La ecuación del potencial oscilador armónico es

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \tag{IV.3.1}$$

donde m es la masa de la partícula y ω es la frecuencia angular.

Podemos superar esta dificultad tomando el siguiente potencial transformado adimensional.

$$V(x) = \begin{cases} x^2, & |x| < 5 \\ 25, & 5 < |x| < 6 \\ 0, & |x| > 6 \end{cases} \tag{IV.3.2}$$

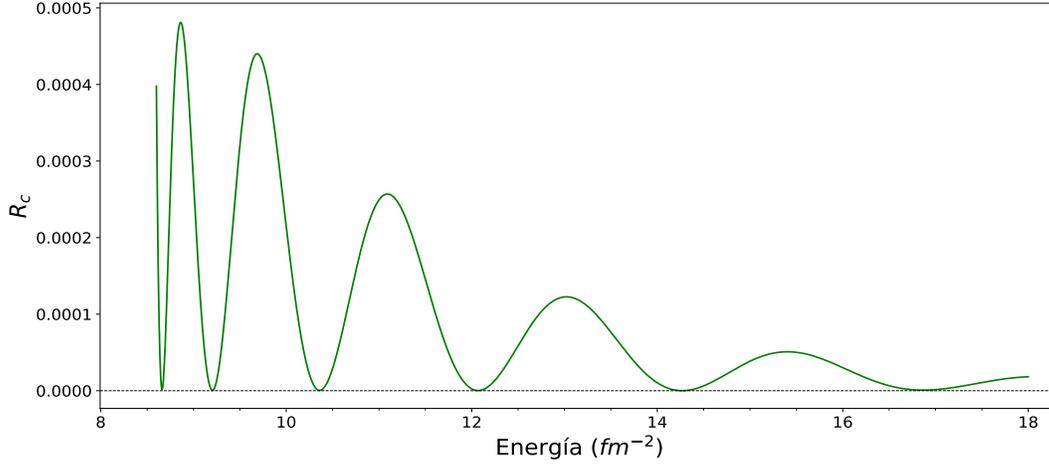


Figura IV.9: Gráfica del coeficiente de reflexión obtenido con el método de aproximación multi-escalón para el caso repulsivo del potencial de Ginocchio. La línea verde muestra el efecto de resonancia del potencial repulsivo Ginocchio.

En la siguiente Figura IV.10 se puede ver como se ha tomado el nuevo potencial para que en los extremos tome un valor constante o se vaya a cero para poder aplicar el método multi-escalón. Gracias a la flexibilidad del método que permite aproximar la parte del potencial que sea de interés en este caso solo aproximamos la parte que se comporta como oscilador armónico mostrada en color morado.

Para este caso de potencial (IV.3.2), aplicando el método multi-escalón (ver código B.3) se obtienen los polos de la Figura IV.11, y sus posiciones son tabuladas en la Tabla IV.3 como E_b^{ms} .

La siguiente expresión es el bien conocido espectro del oscilador armónico cuántico

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (\text{IV.3.3})$$

puede ser reescrita de la siguiente manera

$$E_n = (2n + 1) \frac{1}{2} \hbar\omega. \quad (\text{IV.3.4})$$

Debido a que se considera el potencial Oscilador (IV.3.2) adimensional, de esta última tomamos $\frac{1}{2} \hbar\omega = 1$, entonces

$$E_n = 2n + 1 \quad (\text{IV.3.5})$$

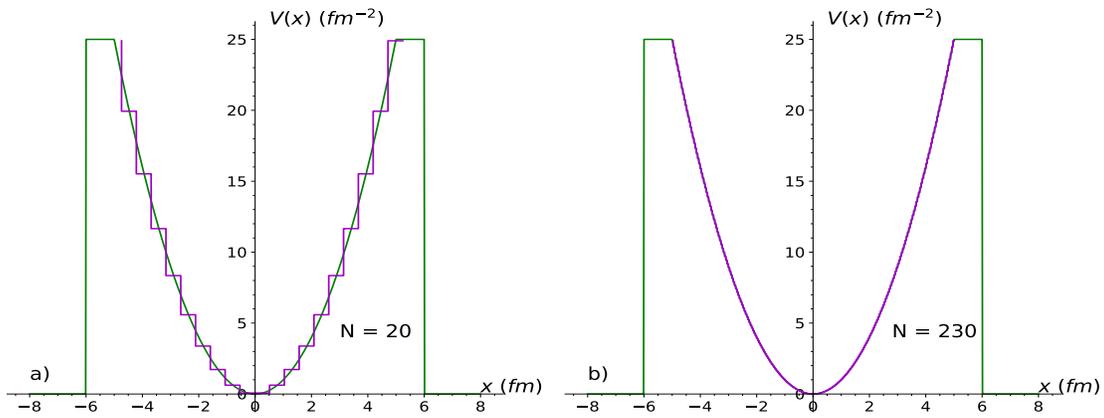


Figura IV.10: *Potencial Oscilador acotado (línea verde) a) Aproximación multi-step de 20 steps (línea morada). b) Aproximación multi-step mucho más fina de 230 steps (línea morada).*

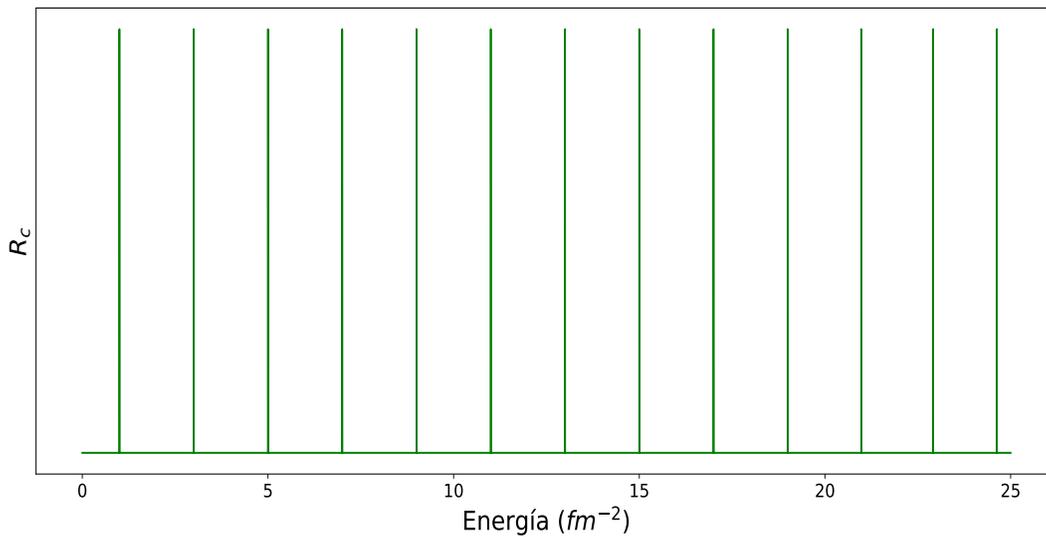


Figura IV.11: *Polos del coeficiente de reflexión para el potencial tipo oscilador armónico (IV.3.2). La posición de los polos serán las energías de bonding para el oscilador*

n	E_b^{exact} (fm^{-2})	E_b^{ms} (fm^{-2})
0	1	1.000025
1	3	3.000075
2	5	5.000125
3	7	6.999550
4	9	9.000225
5	11	11.000275
6	13	13.000325
7	15	14.999750
8	17	16.999175
9	19	18.994850
10	21	20.977399
11	23	22.913073
12	25	24.629991

Tabla IV.3: *Energías de bonding para el potencial oscilador armónico cuántico adimensional (IV.3.2).*

Estas energías que son obtenidas analíticamente las llamaremos E_b^{exact} y son tabuladas en la segunda columna de la Tabla IV.3.

Esta manera de superar la limitación del método a través de proponer un potencial oscilador acotado permitió al menos obtener las primeras 12 energías de enlace para este potencial singular, si es necesario obtener aún más energías de enlace del potencial singular, basta con modificar la ecuación IV.3.2 aumentando la altura tanto como sea necesario y el poder de cómputo lo permita, sin embargo, se puede notar en la Tabla IV.3, que las energías que están cercanas a la altura del potencial dado serán menos precisas debido a efectos de borde del potencial modificado.

IV.4. Doble pozo de potencial simétrico

Este es otro potencial de interés por su aplicación en mecánica cuántica como en *Procesamiento cuántico de la información* donde este potencial se propone como una compuerta lógica cuántica, formación de bandas en sólidos debido a la degeneración que se da, en química cuántica donde este potencial en su forma asimétrica se emplea para modelar reacciones químicas que van de un estado menos estable a uno con mayor estabilidad, entre otros. El potencial está dado de la siguiente manera

$$V(x) = \begin{cases} x^2(x^2 - 16), & |x| < 4, \\ 0, & |x| > 4. \end{cases} \quad (\text{IV.4.1})$$

Debido a que este potencial en los extremos no tiende a una constante, se tiene que transformar de igual manera que para el caso del oscilador armónico, quedando de la siguiente manera

$$V(x) = \begin{cases} x^2(x^2 - 16) + 64, & |x| < 4 \\ 64, & 4 < |x| < 6 \\ 0, & |x| > 6 \end{cases} \quad (\text{IV.4.2})$$

En la FigIV.12 se muestra al potencial doble pozo simétrico modificado, para que en los extremos sea constante.

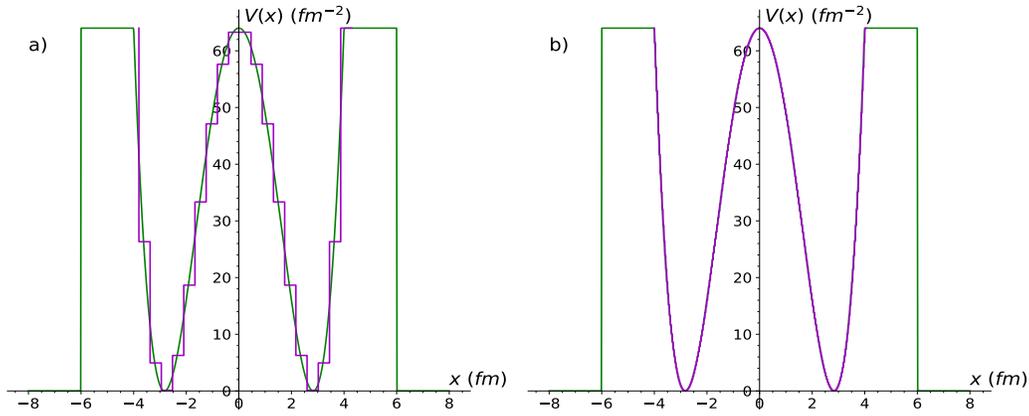


Figura IV.12: *Doble pozo de potencial simétrico (color verde). a) Aproximación multi-escalón con 20 escalones, b) Aproximación multi-escalón con 240 escalones (color morado).*

Para este potencial se obtuvo el espectro de energía, Figura IV.13, el cual fue comparado de manera cualitativa con los resultados de [13] donde de igual manera abordan este método multi-escalón desde otro enfoque. El espectro obtenido aquí es prácticamente el mismo que en el artículo [13].

IV.5. Doble barrera cuadrada

Un potencial más que es resuelto en [13] es el potencial doble barrera cuadrada que puede simular bastante bien a una barrera doble gaussiana, debido a la naturaleza del método multi-escalón, la aproximación a esta doble barrera cuadrada es exacta. Con este ejemplo podemos corroborar nuevamente que el enfoque usado para el método de aproximación multi-escalón en esta tesis es equivalente al enfoque multi-escalón usado

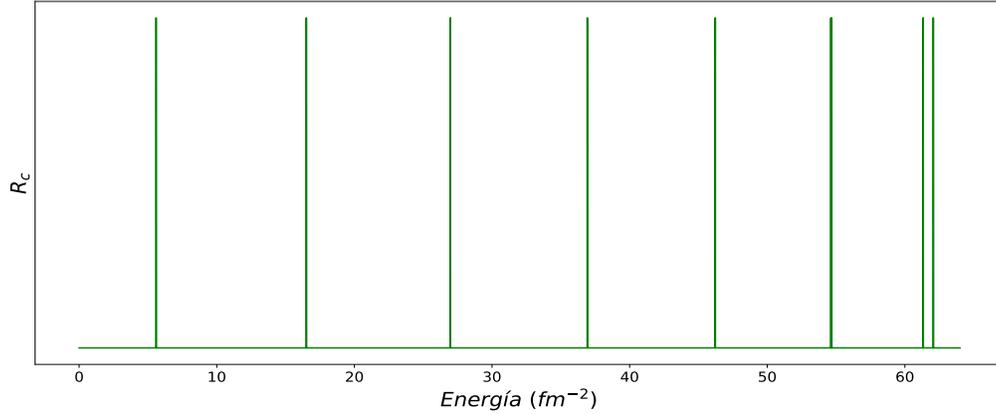


Figura IV.13: *Espectro de energía para el doble pozo de potencial simétrico.*

en [13] por medio de la comparación cualitativa de la Figura 2 en dicho artículo y la Figura IV.14. El potencial está dado como

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x < 8 \\ 1, & 8 \leq x < 10,5 \\ 0, & 10,5 \leq x < 18,5 \\ 1, & 18,5 \leq x < 21 \\ 0, & x > 21 \end{cases} \quad (\text{IV.5.1})$$

Esta doble barrera de potencial tiene una separación entre barreras de $8fm$ y la anchura de cada barrera es de $2,5fm$, para aplicar el método multi-escalón en este caso (ver código B.4), basta con dar la altura de las barreras y la anchura de las barreras en cada región del espacio, en este caso se tienen 5 regiones. En la Figura IV.14 se puede apreciar el efecto tunel cuando el coeficiente de reflexión es mínimo.

IV.6. Potencial de Wood-Saxon

El potencial de Wood-Saxon es ampliamente usado como modelo físico en física nuclear para las interacciones nucleares e interacciones entre los nucleones dentro del núcleo atómico. El potencial de Wood-Saxon es expresado de la siguiente manera:

$$V(x) = -\frac{V_0 e^{-x/a}}{1 + e^{-x/a}} - \frac{V_1 e^{-x/a}}{(1 + e^{-x/a})^2} \quad (\text{IV.6.1})$$

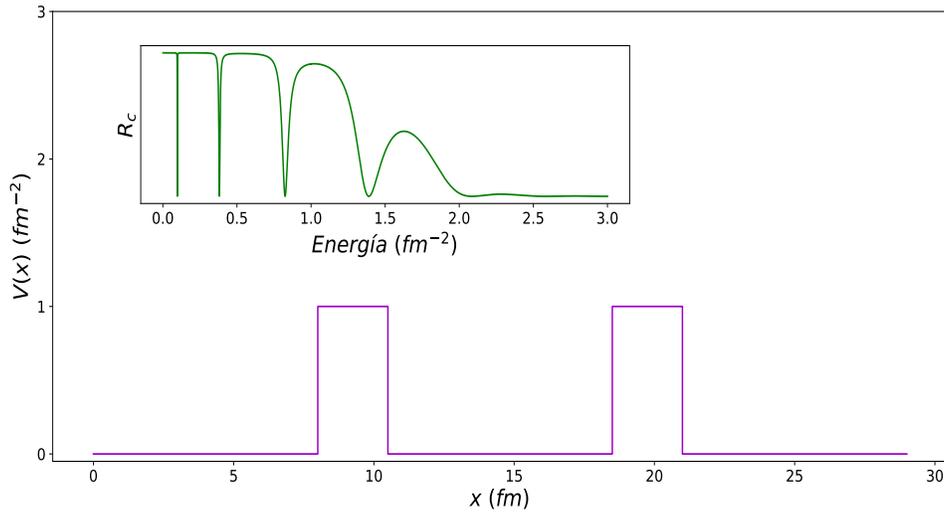


Figura IV.14: Doble barrera de potencial de altura 1 fm^{-2} (morado). Figura interna, espectro de resonancias del coeficiente de reflexión (verde).

donde a define el alcance del potencial, V_0 y V_1 definen en combiación la profundidad del potencial. Para que este potencial sea un pozo se debe cumplir que $V_0 \leq 0$ y $|V_0| < V_1$; para $V_0 \neq 0$ ($V_1 > 0$) el potencial es asimétrico tendiendo a dos valores constantes distintos en $\pm\infty$, el caso simétrico ocurre cuando $V_0 = 0$ ($V_1 > 0$). En la Figura IV.15 se muestra el potencial de Wood-Saxon para $a = 1 \text{ fm}$, $V_0 = -3 \text{ fm}^{-2}$ y $V_1 = 40 \text{ fm}^{-2}$. Nuevamente la unidad de energía aquí es fm^{-2} ya que el factor de masa $2m/\hbar^2 = 1$ cuando se plantea la ecuación de Schrödinger.

Cuando el número de escalones aumenta, la aproximación de potencial multi-escalón es prácticamente indistinguible de la forma del potencial. Para la obtención de las energías de los estados ligados por medio del programa desarrollado, fue suficiente utilizar la aproximación con 250 escalones.

Podemos observar que la aproximación a la gráfica del potencial no es completa, en efecto, es necesario truncar la aproximación en algún punto de la gráfica anterior al valor asintótico del potencial. La elección de este punto determina una mejor aproximación a los eigenvalores más altos del espectro de energía. Si este punto es superado, se observa que el espectro de resonancias del coeficiente se desvanece. (ver código B.5)

Para este potencial se calculó el coeficiente de reflexión R_c para 250 fronteras y después se graficó R_c como función de la energía en un rango $-8,55 \text{ fm}^{-2} \leq E \leq 0$, ver la Figura IV.16. En esta gráfica la posición de los picos corresponde a energías de enlace que son denotadas como E_b^{ms} debido a que son obtenidas por el método multi-escalón y son tabuladas en la segunda columna de la Tabla IV.4.

El potencial de Wood-Saxon es un pozo unidimensional y es analíticamente soluble

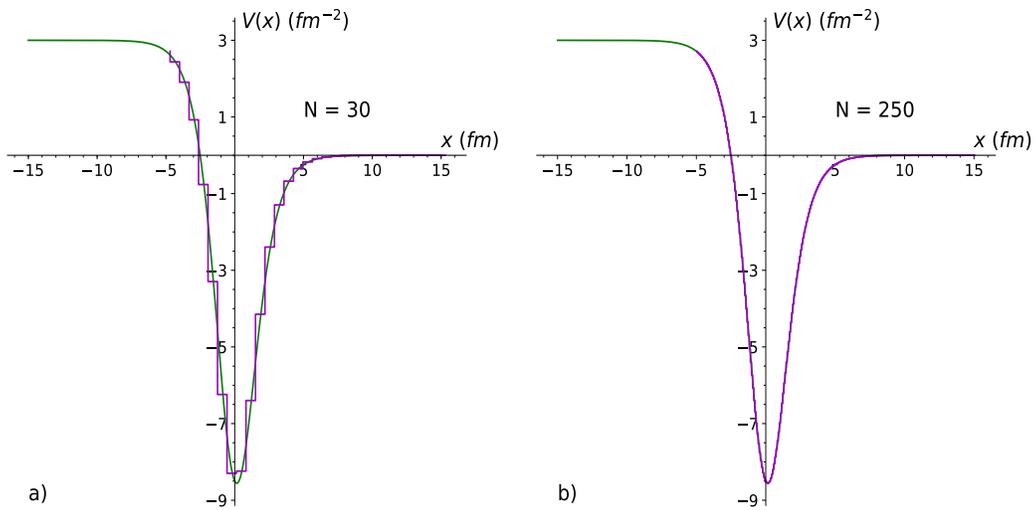


Figura IV.15: Potencial Wood-Saxon (línea verde) a) Aproximación multi-escalón de 30 steps b) Aproximación multi-escalón mucho más fina de 250 steps (línea morada).

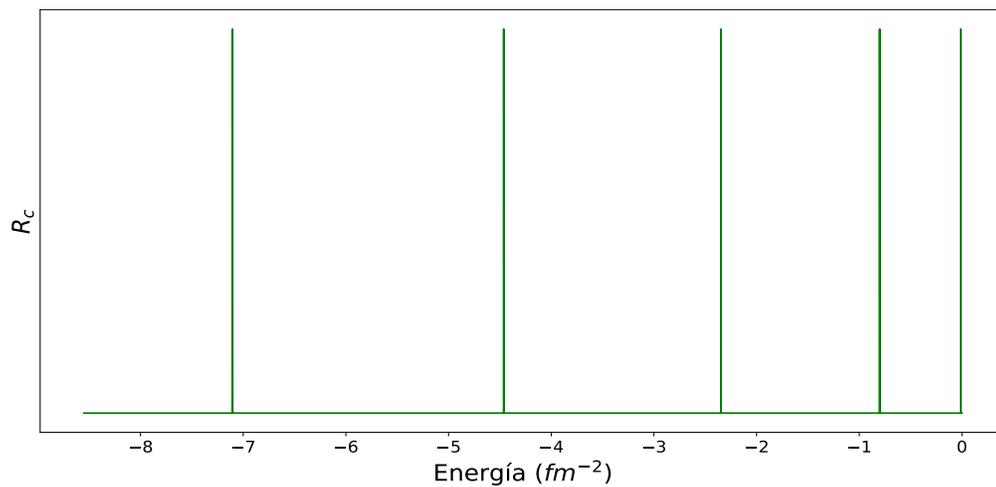


Figura IV.16: Gráfica de los polos del coeficiente de reflexión del potencial generalizado de Wood-Saxon, como función de la energía.

[24] y su espectro de energía es obtenido de la expresión analítica

$$E_n = - \left(\frac{1}{4a} \right)^2 \times \left[2n + 1 - h + \frac{4a^2 V_0}{2n + 1 - h} \right] \quad (\text{IV.6.2})$$

donde $h = \sqrt{1 + 4a^2 V_1}$ y $n = 0, 1, 2, \dots$

Con los valores de los parámetros ya establecidos para este potencial, los resultados para las energías de enlace que se obtienen de esta fórmula son tabulados en la primera columna de la Tabla IV.4, y comparados con el espectro obtenido en la Figura IV.16. Los valores de E_b^{exact} con E_b^{ms} coinciden hasta el orden de centésimas.

n	E_b^{exact} (fm^{-2})	E_b^{ms} (fm^{-2})
0	-7.10480	-7.10394
1	-4.46266	-4.46235
2	-2.34688	-2.34682
3	-0.80061	-0.80072
4	-0.01184	-0.01197

Tabla IV.4: Energías de enlace para el potencial generalizado Wood-Saxon para los parámetros $V_0 = -3fm^{-2}$, $V_1 = 40fm^{-2}$ y $a = 1fm$. n , E_b^{exact} y E_b^{ms} representan el número de estado, resultados de la ecuación (IV.6.2) y resultados de aplicar el método multi-escalón, respectivamente.

IV.7. Potencial cuadrático no singular

Este potencial, al igual que el potencial generalizado de Wood-Saxon, es asimétrico, estos son equivalentes con valores de sus parámetros específicos [24], sin embargo, es de utilidad estudiar estos potenciales analíticamente solubles ya que se requiere realizar una aproximación con el método multi-escalón que no será completa, al igual que en el potencial de Wood-Saxon.

El potencial cuadrático no singular está dado por

$$V(x) = V_0 \left(\frac{ae^{2\alpha x} + be^{\alpha x} + c}{(e^{\alpha x} + 1)^2} \right) \quad (\text{IV.7.1})$$

donde a , b y c son parámetros adimensionales, V_0 define la intensidad del pozo y α define el ancho del potencial.

Para que este potencial sea un pozo se debe de cumplir que $0 \leq V_0$. En la Figura

IV.17 se muestra el potencial Cuadrático para los valores de los parámetros $a = 6$, $b = -4$, $c = 7$, $\alpha = 0,5 fm^{-1}$ y $V_0 = 3 fm^{-2}$.

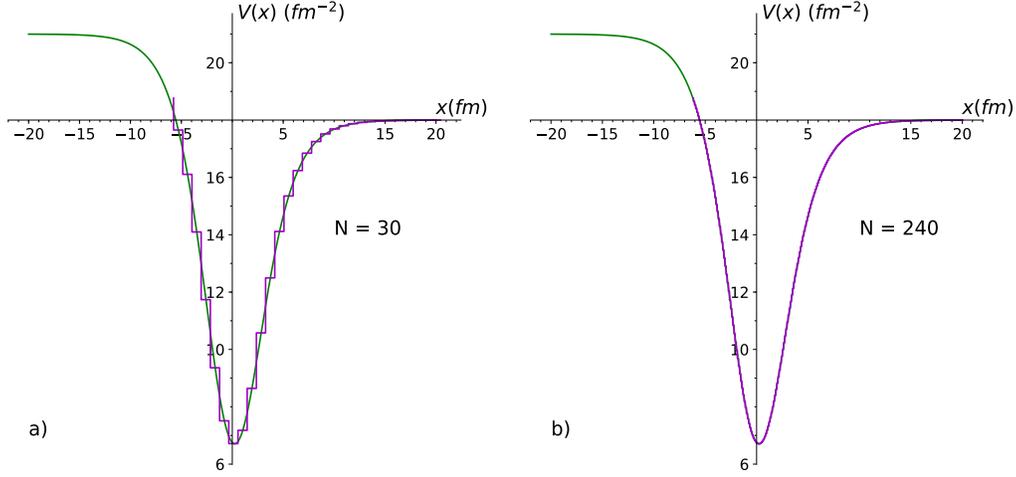


Figura IV.17: *Potencial Cuadrático (línea verde) a) Aproximación multi-escalón de 30 escalones (línea morada). b) Aproximación multi-escalón mucho más fina de 240 escalones (línea morada).*

Para este potencial se calculó el coeficiente de reflexión R_c para 240 fronteras y después se graficó R_c como función de la energía en un rango $6,7 fm^{-2} \leq E \leq 18 fm^{-2}$ ver la Figura IV.18.

Para poder encontrar los polos del coeficiente R_c , fue necesario hacer un barrido de energía partido (ver código B.6), es decir, primero se obtuvo el coeficiente R_c para energías $6,7 fm^{-2} \leq E \leq 10 fm^{-2}$ y luego el coeficiente R_c para energías $10 fm^{-2} \leq E \leq 18 fm^{-2}$, esto fue necesario debido a que los polos que se encuentran cerca de los bordes del potencial opacan de alguna manera los polos en energías más bajas, siendo imposible por el método multi-escalón detectarlos haciendo un barrido completo de energía.

Este potencial es un buen ejemplo en el cual el procedimiento para encontrar las energías de estados ligados por medio del método multi-escalón cambia, y hay que hacer más manipulación para encontrar esas energías, en especial las energías pertenecientes a estados base. En esta gráfica IV.18 la posición de los picos corresponde a energías de enlace que se denotan como E_b^{ms} y son tabuladas en la segunda columna de la Tabla IV.4.

El potencial Cuadrático es analíticamente soluble [24] y su espectro de energía es obtenido de la siguiente expresión analítica

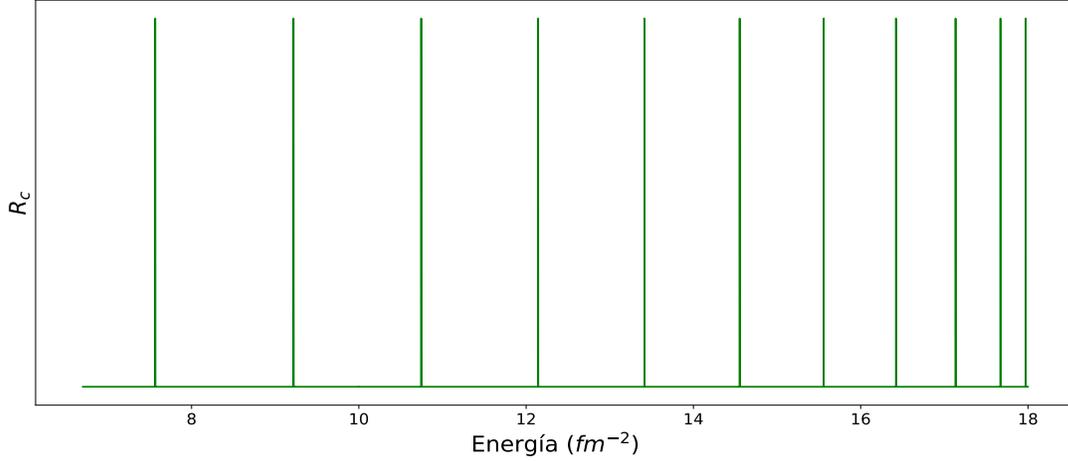


Figura IV.18: Gráfica de los polos del coeficiente de reflexión del potencial Cuadrático, como función de la energía.

n	E_b^{exact} (fm^{-2})	E_b^{ms} (fm^{-2})
0	7.5646	7.5652
1	9.2184	9.2188
2	10.7451	10.7454
3	12.1440	12.1442
4	13.4139	13.4140
5	14.5527	14.5529
6	15.5574	15.5573
7	16.4220	16.4217
8	17.1352	17.1341
9	17.6730	17.6703
10	17.9754	17.9733

Tabla IV.5: Energías de enlace para el potencial Cuadrático para los parámetros $V_0 = 3fm^{-2}$, $a = 6$, $b = -4$, $c = 7$, $\alpha = 0,5fm^{-1}$. n , E_b^{exact} y E_b^{ms} representan el número de estado, resultados de la ecuación (IV.7.2) y resultados de aplicar el método multi-escalón, respectivamente.

$$E_n = - \left(\frac{\alpha}{4} \right)^2 \times \left[2n + 1 - h + \frac{4\alpha^{-2}(a - c)V_0}{2n + 1 - h} \right]^2 + aV_0 \quad (\text{IV.7.2})$$

donde $h = \sqrt{1 + 4\alpha^{-2}(a - b + c)V_0}$ para $n = 0, 1, 2, \dots$

Los resultados obtenidos para esta expresión analítica de los estados de enlace son tabulados en la primer columna de la Tabla [IV.5](#).

IV.8. Potencial periódico

Una aplicación muy interesante es la de un potencial que se repite con regularidad. Esta situación física se encuentra por supuesto en los cristales, y en particular en los metales. Un modelo bastante usado en física del estado sólido es el modelo de Kronig-Penney, que cual describe los estados de energía de un electrón en un cristal. Para esto supone que la estructura cristalina configura un potencial periódico, de cambios abruptos que, si bien es hipotético, es de gran ayuda en los cálculos. El potencial correspondiente a un potencial periódico tiene la propiedad

$$V(x + a) = V(x) \quad (\text{IV.8.1})$$

$$V(x + na) = V(x), \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots \quad (\text{IV.8.2})$$

donde a es la separación entre pozos de potencial.

Debido a como es fomulado este método de aproximación multi-escalón [\[17\]](#) y en el [Capítulo III](#), la aplicación del método es factible y al igual que en el potencial doble barrera la aproximación multi-escalón es exacta, ya que basta con dar la profundidad de los pozos, la separación y anchura de ellos para poder obtener el coeficiente de reflexión R_c para el potencial periódico con n pozos de potencial tantos como el poder de cómputo lo permita.

Es notable ver en la [Figura IV.19](#), que el método multi-escalón reproduce el efecto de bandas de energía (ver código [B.7](#)), al igual que el modelo de Kronig-Penney, cuando consideramos un arreglo de pozos lo suficientemente grande. El método de aproximación multi-escalón va más allá debido a que puede aproximar un potencial periódico considerando una serie de pozos no solamente cuadrados sino también de cualquier otra forma, sin embargo, el tiempo de computo se alarga bastante, y se ocuparían mayores recursos computacionales para aproximar un potencial periodico de estos tipos.

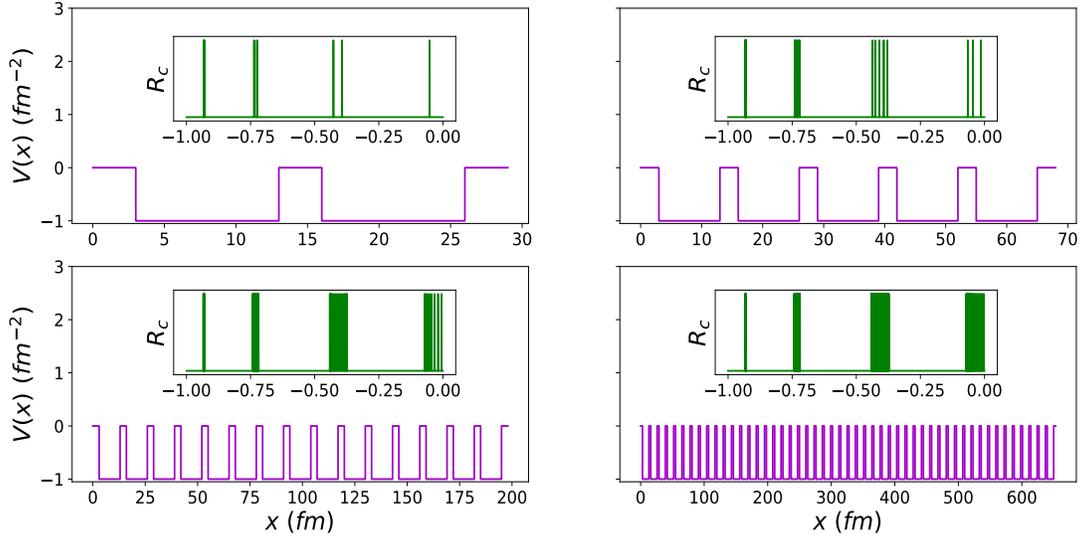


Figura IV.19: *Distintos espectros de energía para distinto número de pozos en el potencial periódico. Figura superior izquierda: 2 pozos, superior derecha: 5 pozos. Figura inferior izquierda: 15 pozos, inferior derecha: 50 pozos*

IV.9. Potencial analíticamente no soluble

Debido al éxito del método multi-escalón para reproducir con bastante precisión las energías de bonding de las expresiones analíticas para los potenciales de las secciones anteriores, ahora es fiable la aplicación del método para cualquier forma de potencial, ya sea analíticamente soluble o no. Para mostrar la utilidad del método multi-escalón, se considera el siguiente potencial que no es analíticamente soluble

$$V(x) = \left(\frac{1}{2}x^2 - J \right) e^{-\lambda x^2} \quad (\text{IV.9.1})$$

donde J es la profundidad y λ define el alcance del potencial ver Figura IV.20.

Los valores de los parámetros son tomados como $J = 0,55eV$ y $\lambda = 0,5$ el potencial que se genera es un pozo con dos barreras repulsivas en cada lado del pozo como se muestra en la Figura IV.20, el pozo tiene una profundidad de $-0,55eV$ y las barreras de los lados del potencial tienen una altura de $0,2eV$.

La partícula considerada en este potencial es un electrón. Se simula el potencial por medio del método multi-escalón como se ve en las Figuras IV.20 y IV.22.

Para obtener las energías de enlace que están dentro del pozo, se tuvo que aproximar al potencial solamente de la parte del pozo sin considerar las dos crestas de los

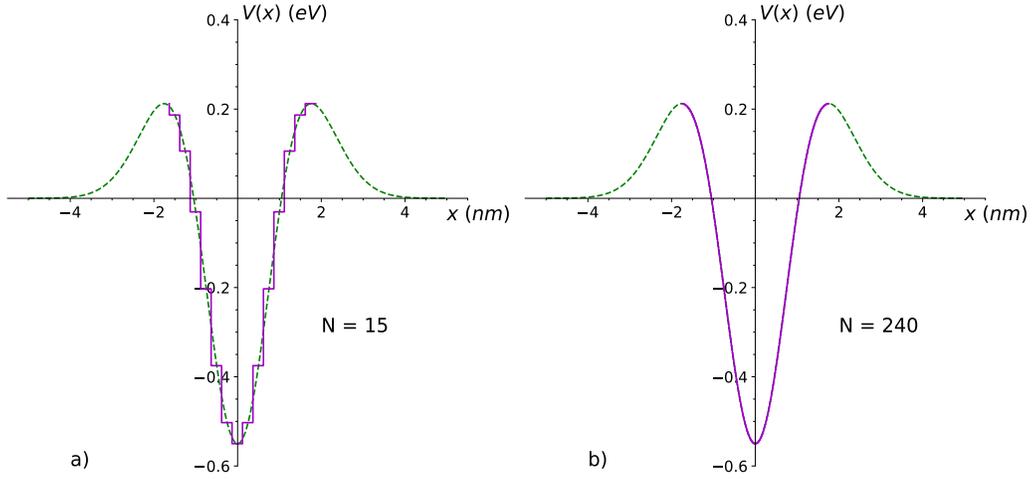


Figura IV.20: *Potencial No soluble (línea verde discontinua) a) Aproximación multi-step de 15 steps (línea morada). b) Aproximación multi-step mucho más fina de 240 steps (línea morada).*

lados, Figura IV.20, para que las crestas no afecten la obtención del coeficiente de reflexión R_c y los polos sean visibles, gracias a como el método multi-escalón funciona esto es posible de hacer, como se ha hecho en los potenciales anteriores IV.6 y IV.7.

La obtención de las energías de enlace con el método de Runge-Kutta entra en problemas debido a las barreras de potencial en los lados, sin duda, esta es una ventaja del método presentado aquí sobre el método de aproximación de Runge-Kutta.

Se obtiene el coeficiente R_c de este potencial para la zona interna (ver código B.8), haciendo un barrido de energía $-0,55eV \leq E \leq 0,2eV$ y se grafican los polos en la Figura IV.21, las posiciones de los picos o polos del coeficiente R_c son tabulados en la Tabla IV.6 como E_b^{ms} .

Para obtener las resonancias de este potencial, ahora se aproxima a todo el potencial por el método multi-step, usando 300 escalones, ver Figura IV.22, para energías positivas $E > 0$ en un rango $0eV \leq E \leq 0,55eV$.

Estas resonancias también son tabuladas en la Tabla IV.6 como E_r^{ms} , los valores de estas resonancias concuerdan con los resultados con los resultados que se obtiene del método de Runge-Kutta.

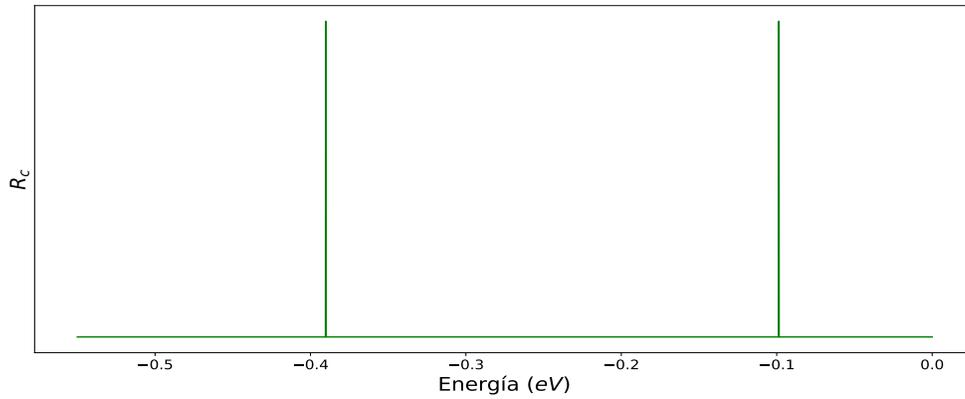


Figura IV.21: *Polos del coeficiente de reflexión para el potencial no soluble analíticamente.*

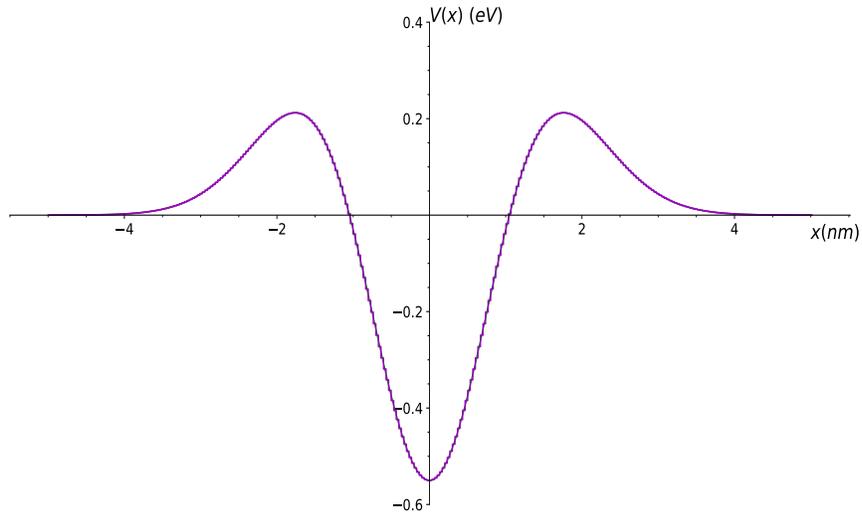


Figura IV.22: *Se aproxima el potencial completo por 300 escalones, para poder obtener las energías de resonancia para el potencial no soluble*

E_b^{ms} (eV)	E_r^{ms} (eV)
-0.39018	0.1244
-0.09861	0.2944

Tabla IV.6: *Energías de enlace y de resonancia para el potencial analíticamente no soluble con parámetros $J = 0,55\text{eV}$ y $\alpha = 0,5$. E_b^{ms} y E_r^{ms} representan los resultados de aplicar el método multi-step para energías de bonding y energías de resonancia, respectivamente.*

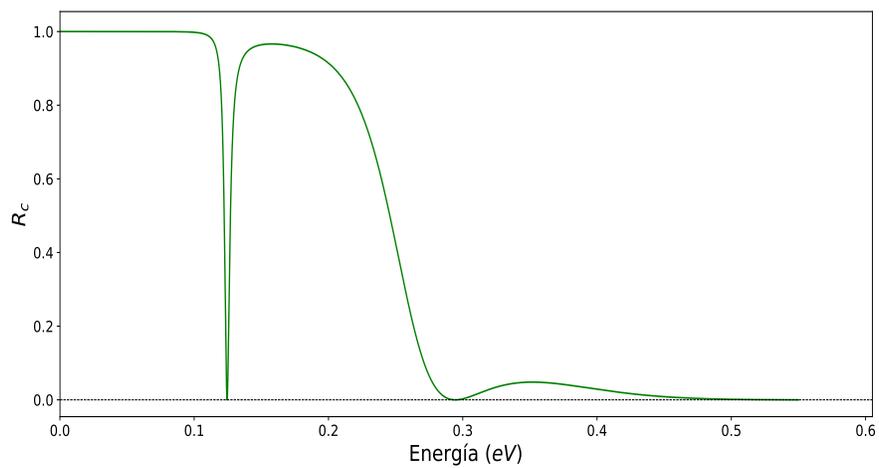


Figura IV.23: Gráfica de R_c , donde las resonancias son las posiciones de los mínimos del coeficiente.

Conclusiones

El método multi-escalón es una alternativa eficiente para obtener numéricamente el espectro de energía de un sistema cuántico no relativista. Una ventaja del método, es que puede ser usado en sistemas con pozos de potencial de diversas características; continuos, discretos con discontinuidades finitas, simétricos, asimétricos y periódicos. Inclusive puede seguir siendo útil, cuando el potencial es singular, si un criterio de corte es considerado. Desde luego que el método por si mismo, no permite determinar las funciones de estado del sistema, sin embargo, al tener ya el espectro de energía puede ser posible obtener sus funciones propias de manera mas fácil con otros métodos.

Por sus resultados, el algoritmo del Apéndice [A](#) puede ser usado para determinar el espectro de energía de un sistema con potencial sin solución analítica.

APÉNDICES

Apéndice A

Programa desarrollado en python del método de aproximación Multi-escalón

En este apéndice se expone el programa realizado en lenguaje de programación Python por medio de programación orientada a objetos (POO), en el cual se explican los métodos de la clase MultiStep.

Los tipos de potencial suaves, que se pueden aproximar por un potencial multi-escalón (*multi-step*), son objetos que podemos instanciar en esta clase MultiStep y aplicar todos los métodos de los que dispone esta clase.

A.1. Clase MultiStep

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from scipy.signal import argrelextrema
import pandas as pd
```

```
class MultiStep():
```

```
    """This class is a semi analytical method for physics who gets the
    bonding energies and the resonance energies using the reflection
    coefficient of the multi-step potential which is able to fit in any
    smooth potential even if the potential is not analytically solvable.
```

```
    Description:
```

```
    Set the potential that you want to get its energies. the potencial
```

has to return an array that contains the range of the position 'x' and the intensities of the potential 'V' due to 'x'.

The construction of the function of your potential is up to you, the only requirement the function HAS TO RETURN x,V IN THIS ORDER.

Example:

```
def potential():
    x = np.linspace(0, 6, 100)
    V = x**2
    return x, V
```

```
potential = MultiStep(potential())
```

Parameters

```
function : potential
"""
```

```
def __init__(self, potential):
```

```
    self.x = potential[0]
    self.V = potential[1]
    self.dim_k = 1
    self.dim_x = 1
```

```
def scan_energy(self, energy_min, energy_max, partitions):
```

```
    """
```

```
    Set the range of the energy in which you want to scan bonding
    energies of resonance effects.
```

Parameters

```
    scalar : energy_min
    scalar : energy_max
    scalar : partitions : How many steps the energy will take from
    energy_min to energy_max.
```

```
    """
```

```
    self._En = np.linspace(energy_min, energy_max, partitions)
```

```
def reflexion_amplitude(self, initial_region, final_region):
```

```
    """ Returns all the reflexion amplitudes for each different energy
    in the method energy() this is the multistep method
```

```
    scalar : initial_region : the first partition of the potential
    scalar : final_region : the last partition of the potential
    """
```

```

a = initial_region
b = final_region
if a + 1 == b:

    return (np.sqrt(self.dim_k * (self._En - self.V[a]) + 0j) -
            np.sqrt(self.dim_k * (self._En - self.V[b]) + 0j)) / \
            (np.sqrt(self.dim_k * (self._En - self.V[a]) + 0j) +
             np.sqrt(self.dim_k * (self._En - self.V[b]) + 0j))

else:

    t = self.reflexion_amplitude(a + 1, b) * \
        np.exp(2 * 1j *
                np.sqrt(self.dim_k * (self._En - self.V[a + 1]) + 0j) *
                ((self.x[a + 1] - self.x[a]) * self.dim_x))
    w = self.reflexion_amplitude(a, a + 1)

    return (w + t) / (1 + w * t)

def bonding_energies(self, array_reflexion_amplitudes):

    """This method only works for potential wells and energies under
    the potential.

    Returns an array of the bonding energies
    """
    self._arr = array_reflexion_amplitudes
    self._b_energies = self._En[argrelextrema(self._arr, np.greater)[0]]
    data = pd.DataFrame({'Bonding Energies': self._b_energies})
    return data

def plot_poles(self):

    """ This method plot the poles of the reflection coefficient
    for a potetial well where the energies are under it.

    The poles are normalized to show all of them because some poles
    are greater than other ones.

    """
    R = []
    for i in self._En:
        if i in self._b_energies:
            R.append(1)
        else:
            R.append(0)
    plt.plot(self._En, R, color='green')
    plt.yticks([])

```

```

if self.dim_k == 1:
    plt.xlabel(r'Energia  $(fm^{-2})$ ')
else:
    plt.xlabel(r'Energia (eV)')

plt.ylabel(r'$R_c$')

def resonance_energies(self, array_reflexion_amplitudes):

    """ This method only works if the energies are over the potential
    well or is a potential barrier.

    Returns an array of energies where the transmission is total.

    Parameters

    array : array_reflexion_amplitudes : array with all the reflexion
    coefficients for each given energy

    """
    self._rarr = array_reflexion_amplitudes
    trans = self._En[argrelextrema(self._rarr, np.less)[0]]
    ref = self._En[argrelextrema(self._rarr, np.greater)[0]]

    if len(trans) == len(ref):
        data = pd.DataFrame({'Resonance_Engy':trans, 'Quasi_bon_Engy':ref})
        return data
    else:
        data = pd.DataFrame({'Resonance_Engy':trans})
        data2 = pd.DataFrame({'Quasi_bon_Engy':ref})
        return data.join(data2)

def plot_resonances(self):

    """ This only works if the energies are over the potential
    well or is a potential barrier
    """
    plt.plot(self._En, self._rarr, color='green')
    if self.dim_k == 1:
        plt.xlabel(r'Energia  $(fm^{-2})$ ')
    else:
        plt.xlabel(r'Energia (eV)')

    plt.ylabel(r'$R_c$')
    plt.axhline(ls='dashed', lw=0.7, color='black')

```

A.2. Métodos de la clase MultiStep

A.2.1. Método Barrido de la Energía

Este método es aplicado al objeto tipo potencial multi-step para declarar el rango de energías donde se obtendrá el coeficiente de Reflexion R_c .

```
def scan_energy(self, energy_min, energy_max, partitions):  
  
    """  
    Set the range of the energy in which you want to scan bonding  
    energies of resonance effects.  
  
    Parameters  
  
    scalar : energy_min  
    scalar : energy_max  
    scalar : partitions : How many steps the energy will take from  
    energy_min to energy_max.  
    """  
    self._En = np.linspace(energy_min, energy_max, partitions)
```

A.2.2. Método de la clase para la Obtención del coeficiente de reflexión

Se muestra el método recursivo para obtener el coeficiente de reflexión, desde la region inicial hasta la región.

```
def reflexion_amplitude(self, initial_region, final_region):  
  
    """ Returns all the reflexion amplitudes for each different energy  
    in the method energy() this is the multistep method  
  
    scalar : initial_region : the first partition of the potential  
    scalar : final_region : the last partition of the potential  
    """  
    a = initial_region  
    b = final_region  
    if a + 1 == b:  
  
        return (np.sqrt(self.dim_k * (self._En - self.V[a]) + 0j) -  
                np.sqrt(self.dim_k * (self._En - self.V[b]) + 0j)) / \  
                (np.sqrt(self.dim_k * (self._En - self.V[a]) + 0j) +  
                 np.sqrt(self.dim_k * (self._En - self.V[b]) + 0j))  
  
    else:  
  
        t = self.reflexion_amplitude(a + 1, b) *\  

```

```

        np.exp(2 * 1j *
               np.sqrt(self.dim_k * (self._En - self.V[a + 1]) + 0j) *
               ((self.x[a + 1] - self.x[a]) * self.dim_x))
w = self.reflexion_amplitude(a, a + 1)

return (w + t) / (1 + w * t)

```

A.2.3. Método para la obtención de las energías de bonding del Coeficiente de reflexión

Una vez aplicado el método anterior, con el arreglo de coeficientes de reflexión obtenidos se ingresan en este método para regresar solamente las energías donde el coeficiente de reflexión diverge, es decir, busca los máximos del coeficiente de reflexión en todo el rango de energías.

```

def bonding_energies(self, array_reflexion_amplitudes):

    """This method only works for potential wells and energies under
    the potential.

    Returns an array of the bonding energies
    """
    self._arr = array_reflexion_amplitudes
    self._b_energies = self._En[argrelextrema(self._arr, np.greater)[0]]
    data = pd.DataFrame({'Bonding Energies': self._b_energies})
    return data

```

A.2.4. Método que grafica los polos del coeficiente de reflexión.

```

def plot_poles(self):

    """ This method plot the poles of the reflection coefficient
    for a potetial well where the energies are under it.

    The poles are normalized to show all of them because some poles
    are greater than other ones.

    """
    R = []
    for i in self._En:
        if i in self._b_energies:
            R.append(1)
        else:
            R.append(0)
    plt.plot(self._En, R, color='green')

```

```

plt.yticks([])
if self.dim_k == 1:
    plt.xlabel(r'Energia  $(fm^{-2})$ ')
else:
    plt.xlabel(r'Energia (eV)')

plt.ylabel(r'$R_c$')

```

A.2.5. Método para obtener las energías de resonancia.

Para cuando el potencial es una barrera y energías positivas se puede usar este método para obtener las energías de resonancia que ocupa el arreglo del coeficiente de reflexión obtenido por el método [A.2.2](#).

```

def resonance_energies(self, array_reflexion_amplitudes):

    """ This method only works if the energies are over the potential
    well or is a potential barrier.

    Returns an array of energies where the transmission is total.

    Parameters

    array : array_reflexion_amplitudes : array with all the reflexion
    coefficients for each given energy

    """
    self._rarr = array_reflexion_amplitudes
    trans = self._En[argrextrema(self._rarr, np.less)[0]]
    ref = self._En[argrextrema(self._rarr, np.greater)[0]]

    if len(trans) == len(ref):
        data = pd.DataFrame({'Resonance_Engy':trans, 'Quasi_bon_Engy':ref})
        return data

```

A.2.6. Método para graficar las resonancias del potencial

Este método solo se aplica después de aplicar el método anterior.

```

def plot_resonances(self):

    """ This only works if the energies are over the potential
    well or is a potential barrier
    """
    plt.plot(self._En, self._rarr, color='green')
    if self.dim_k == 1:
        plt.xlabel(r'Energia  $(fm^{-2})$ ')
    else:
        plt.xlabel(r'Energia (eV)')

```

```
plt.ylabel(r'$R_c$')  
plt.axhline(ls='dashed', lw=0.7, color='black')
```

Apéndice B

Implementación del programa para cada potencial

B.1. Potencial Eckart

```
import numpy as np
from matplotlib import pyplot as plt
from multistep import MultiStep

def potencial_eckart(x_inicial_position, x_final_position, n_steps):
    '''Eckart potential, this function returns two
    array one stands for the x positions and the second one
    stands for the height of the potential V in each position.
    '''
    x = np.linspace(x_inicial_position, x_final_position, n_steps)
    V = -4 / ((np.cosh(0.7 * x)) ** 2)
    return x, V

N_steps = 240

# creating an object who belongs to the MultiStep class called "eckart"
eckart = MultiStep(potencial_eckart(-6, 6, N_steps))

#applying the methods to the object "eckart"
#to obtaing the bonding energies and plot the poles

eckart.scan_energy(-4, -0.01, 40000)

coeff_ref = abs(eckart.reflexion_amplitude(0, N_steps - 1))**2

bonding_energies = eckart.bonding_energies(coeff_ref)
```

```

print(bonding_energies)

eckart.plot_poles()
plt.show()

# This is the case when the potential is a barrier
# Changing the attribute V to -V and applying the methods to obtain
# the resonance energies a plot them.

eckart.V = -eckart.V
eckart.scan_energy(0, 8, 4000)
coeff = abs(eckart.reflexion_amplitude(0, N_steps-1))**2

eckart.resonance_energies(coeff)

eckart.plot_resonances()
plt.show()

```

Para obtener las energías tanto de bonding como de resonancia, se tienen que obtener por separado, es decir, primero correr el programa solo para el caso del pozo de potencial y obtener las energías de bonding y luego el caso contrario.

B.2. Potencial Ginocchio

```

import numpy as np
from matplotlib import pyplot as plt
from multistep import MultiStep

# Parameters and constants
L = 4 # lambda
L2 = L ** 2
N = 5 # Nu
V_d = 8 # fixed potential dept
V_0 = V_d / (L2 * (N ** 2 + N - 0.5) + 0.5) # attractive force v0

# GINOCCHIO POTENTIAL

def ginocchio_potential(n_steps):
    '''
    n_steps: is the number of regions the potential will be partitioned
    '''

    y0 = np.linspace(-1, 1, n_steps)
    y2 = y0 ** 2
    V = V_0 * ((-L2) * N * (N + 1) * (1 - y2) - ((1 - L2) / 4) *
               (-5 * (1 - L2) * y2 ** 2 + (7 - L2) * y2 + 2) *
               (1 - y2))

```

```

y0_1 = np.linspace(-0.9999999999999999, 0.9999999999999999, n_steps)
r = (1 / L ** 2) * (np.arctanh(y0_1) + np.sqrt(L ** 2 - 1) *
                  (np.arctan(np.sqrt(L ** 2 - 1) * y0_1)))
x = r / np.sqrt(V_0)
x[0] = -4
x[-1] = 4
return x, V

# creating an object who belongs to the MultiStep class
#   called "potencial_gino"

potencial_gino = MultiStep(ginocchio_potential(250))

# applying the methods to this object to obtain the poles for
# bonding energies

potencial_gino.scan_energy(-8, 0, 2000)

coeff_reflex = abs(potencial_gino.reflexion_amplitude(0, 250-1))**2

bound_energies = potencial_gino.bonding_energies(coeff_reflex)

print(bound_energies)

potencial_gino.plot_poles()
plt.show()

# Taking the Ginocchio potential for its barrier form

potencial_gino.V = - potencial_gino.V

# applying the methods to obtain the resonance energies

potencial_gino.scan_energy(8.6, 18, 2000)

coeff_reflex = abs(potencial_gino.reflexion_amplitude(0, 250-1))**2

resonance_energies = potencial_gino.resonance_energies(coeff_reflex)
print(resonance_energies)

potencial_gino.plot_resonances()
plt.show()

```

Debido a la naturaleza del potencial Ginocchio, no podemos dar directamente el intervalo de el espacio x donde queremos graficar el potencial, debido que depende de otras variables r y y .

B.3. Potencial oscilador armónico cuántico

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from multistep import MultiStep

def oscilador(x0, x1, N_steps):
    """Funcion del potencial oscilador cuantico
    con limite de altura de potencial de 25
    """
    arreglo_de_x = np.linspace(x0, x1, N_steps)
    y = []
    for i in arreglo_de_x:
        if -5 < i < 5:
            y.append(i**2)
        elif -6 < i < -5 or 5 < i < 6:
            y.append(25)
        else:
            y.append(0)
    return arreglo_de_x, np.array(y)

#Creacion de objeto de la clase MultiStep
oscila = MultiStep(oscilador(-4.99, 4.99, 250))

#Realizando un barrido de energia de 0 a 25
oscila.scan_energy(0, 25, 40000)

#obtencion del coeficiente de reflexion
coeff = abs(oscila.reflexion_amplitude(0, 249))**2

#grafica de el coeficiente de reflexion en funcion de la energia
energias_bonding = oscila.bonding_energies(coeff)

#impresion de las energias de enlace del potencial
print(energias_bonding)

oscila.plot_poles()

plt.show()
```

B.4. Potencial doble barrera cuadrada

```
import numpy as np
```

```

import matplotlib.pyplot as plt
from multistep import MultiStep

def potencial_periodico(sep_entre_pozos, anch_de_los_pozos, n_pozos, profud):
    """Definicion del potencial periodico
    donde se tiene el control de la separacion entre los pozos
    el ancho de los pozos, numero de pozos y la profundidad de ellos.
    """
    iterando = range(int((4 * n_pozos + 2)/2))
    x = [0]
    V = []
    c = sep_entre_pozos
    for i in iterando:
        if i%2==0:
            V.append(0)
            V.append(0)
            x.append(c)
            x.append(c)
            c+=anch_de_los_pozos
        else:
            V.append(profud)
            V.append(profud)
            x.append(c)
            x.append(c)
            c+=sep_entre_pozos
    x = x[:-1]
    return x, V

# se define una doble barrera con altura de las barreras de 1 unidad.
double_barrier = MultiStep(potencial_periodico(8, 2, 2, 1))

# se realiza un barrido de energias de 0 a 2 unidades
double_barrier.scan_energy(0, 2, 4000)

# obtencion de coeficiente de reflexion para las 5 fronteras
# los parametros dentro de reflexion_amplitude van de 0 a 9
# debido a como esta definida la funcion periodica arriba
coeff = abs(double_barrier.reflexion_amplitude(0, 9))**2

# se obtienen las posiciones de los polos de los coeficientes de reflexion
energias_bon = double_barrier.resonance_energies(coeff)

print(energias_bon)

# se grafican las resonancias
double_barrier.plot_resonances()
plt.show()

```

B.5. Potencial Wood Saxon

```
import numpy as np
from matplotlib import pyplot as plt
from multistep import MultiStep

#Parameters for the potential
a = 1
V0 = -3
V1 = 40
h_ws = np.sqrt(1 + 4 * (a ** 2) * V1)

def wood_saxon(x_inicial_position, x_final_position, n_steps):
    '''Wood-Saxon potential, this function returns two
    array one stands for the x positions and the second one
    stands for the height of the potential V in each position.
    '''
    x = np.linspace(x_inicial_position, x_final_position, n_steps)
    V = ((-V0 * np.exp(-(x / a))) / (1 + np.exp(-(x / a))) +
         (-V1 * np.exp(-(x / a))) / (1 + np.exp(-(x / a))) ** 2)

    return x, V

# creating an object from the class MultiStep called "wood"
wood = MultiStep(wood_saxon(-5, 15, 250))

# applying the methods to the object "wood"
# in order to obtain the poles and bonding energies
wood.scan_energy(-8.55, 0, 40000)

coeff_ref = abs(wood.reflexion_amplitude(0, 249))**2

bon_energies = wood.bonding_energies(coeff_ref)

print(bon_energies)

wood.plot_poles()

plt.show()
```

B.6. Potencial Cuadrático no singular

```
import numpy as np
from matplotlib import pyplot as plt
from multistep import MultiStep
```

```

# Parameters

a = 6
b = -4
c = 7
k = 0.5
Vi = 3
h_q = np.sqrt(1 + 4 * k**(-2) * (a - b + c) * Vi)

def quadratic_potential(x_inicial_position, x_final_position, n_steps):
    '''This function returns x and V who stands for
    an array of the positions and for the heights of
    the potential respectively.
    '''
    x = np.linspace(x_inicial_position, x_final_position, n_steps)
    V = Vi * ((a * np.exp(2 * k * x) + b * np.exp(k * x) + c) /
              (np.exp(k * x) + 1) ** 2)
    return x, V

profundidad = 6.7
#-5.6

# Making an object who belongs to the MultiStep class called "Qpotential"
Qpotential = MultiStep(quadratic_potential(-6, 20, 240))

# Using the methods from the class to obtain the poles plot and
# the bonding energies

Qpotential.scan_energy(6.7, 10, 40000)

coeff_ref = abs(Qpotential.reflexion_amplitude(0, 239))**2

bon_energ = Qpotential.bonding_energies(coeff_ref)

print(bon_energ)

Qpotential.plot_poles()

#We need to do a second energy scanning because of the nature
#of the potential to find all the bonding energies

Qpotential.scan_energy(10, 18, 40000)

coeff_ref = abs(Qpotential.reflexion_amplitude(0, 239))**2

bon_energ = Qpotential.bonding_energies(coeff_ref)

```

```

print(bon_energ)

Qpotential.plot_poles()

# We plot the poles all together after doing the two energy scanning

plt.show()

```

B.7. Potencial periódico

```

import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from multistep import MultiStep

def potencial_periodico(sep_entre_pozos, anch_de_los_pozos, n_pozos, profud):
    """Definicion del potencial periodico
    donde se tiene el control de la separacion entre los pozos
    el ancho de los pozos, numero de pozos y la profundidad de ellos.
    """
    iterando = range(int((4 * n_pozos + 2)/2))
    x = [0]
    V = []
    c = sep_entre_pozos
    for i in iterando:
        if i%2==0:
            V.append(0)
            V.append(0)
            x.append(c)
            x.append(c)
            c+=anch_de_los_pozos
        else:
            V.append(profud)
            V.append(profud)
            x.append(c)
            x.append(c)
            c+=sep_entre_pozos
    x = x[:-1]
    return x, V

# se define una doble barrera con altura de las barreras de 1 unidad.
periodico = MultiStep(potencial_periodico(3, 10, 50, -1))

# se realiza un barrido de energias de 0 a 2 unidades
periodico.scan_energy(-1, 0, 4000)

# obtencion de coeficiente de reflexion para las 5 fronteras
# los parametros dentro de reflexion_amplitude van de 0 a 9
# debido a como esta definida la funcion periodica arriba

```

```

coeff = abs(periodico.reflexion_amplitude(0, 202))**2

# obtenemos las posiciones de los polos de los coeficientes de reflexion
energias_bon = periodico.bonding_energies(coeff)

# Se grafica el espectro que producen esto polos
periodico.plot_poles()
plt.show()

```

B.8. Potencial Analíticamente no soluble

```

import numpy as np
from matplotlib import pyplot as plt
from multistep import MultiStep
from scipy.signal import argrelextrema # for local maxima in an array

# Parameters and constants

J = 0.55 # Dept of the potential
alfa = 0.5
max_pot = 0.2122451562431589 # Potential maximum value
hbar = 6.582119514e-16
m = 511e3 / (3e8 ** 2)
c = (2 * m) / (hbar ** 2)
d = 1e-9

# NOT SOLVABLE POTENTIAL

def notsolvable(x_0, x_n, n_steps):
    x = np.linspace(x_0, x_n, n_steps)
    V = (0.5 * x ** 2 - J) * np.exp(-alfa * x ** 2)
    return x, V

s = 300

# Creating an object from the MultiStep class called "nspoten"
#In this object we don't consider an approximation of the whole
#potential because of the shoulders that it has in both side

nspoten = MultiStep(notsolvable(-1.75, 1.75, 500))

# Setting the attributes who stands for dimensions of k and x
#that in this case aren't dimensionless.

nspoten.dim_k = c
nspoten.dim_x = d

```

```

# applying the methos to this object "nspoten" to get the bonding
# energies and plot the poles

nspoten.scan_energy(-0.55, 0, 4000)

coeff_ref = abs(nspoten.reflexion_amplitude(0, 499))**2

bonding_energies = nspoten.bonding_energies(coeff_ref)

print(bonding_energies)

nspoten.plot_poles()

plt.show()

# creating a new object called "nspotential2" who stands for the
# aproximation for the whole potential considering the shouldrs

nspotencial2 = MultiStep(otsolvable(-5, 5, 300))

nspotencial2.dim_k = c
nspotencial2.dim_x = d

# Now using the methods to obtain the resonance energies
# and plot them

nspotencial2.scan_energy(0, 0.55, 40000)

coeff_ref2 = abs(nspotencial2.reflexion_amplitude(0, 299))**2

res_energies = nspotencial2.resonance_energies(coeff_ref2)

print(res_energies)

nspotencial2.plot_resonances()

plt.show()

```

En el código se presentan las dos formas para obtener las energías de bonding y de resonancia, sin embargo, en el código hay que comentar cualquiera de las partes dos partes al momento de correrlo para la obtención de las energías y obtener, ya sea, las de resonancia o las de bonding primero.

Referencias

- [1] T.E.Simos, P.S. Williams, "On finite difference methods for the solution of the Schrödinger equation", *Comput. Chem.* 23, 513 (1999).
- [2] A.D. Raptis, "Exponential multistep methods for ordinary differential equations", *Bulletin of the Greek Mathematical Society* 25, 113 (1984).
- [3] L.G. Ixaru, "Numerical Methods for Differential Equations and Applications", Reidel, Dordrecht-Boston-Lancaster, (1984).
- [4] L.G. Ixaru, M Rizea, "A Numerov-like scheme for the numerical solution of the Schrödinger equation in the deep continuum spectrum of energies", *Comput. Phys. Commun.* 19,23 (1980).
- [5] T. E. Simos, P. S. Williams, "A new Runge-Jutta-Nystrom method with phase-lag of order infinity for the numerical solution of the Schrodinger equation", *MATCH-Communications in Mathematical and in Computer Chemistry* 45,123 (2002).
- [6] P. Henrici, "Discrete variable methods in ordinary differential equations", John Wiley and Sons, New York, 1962.
- [7] L. G. Ixaru, G. V. Berghe, "Exponential fitting" KluwerAcademic Publisher, The Netherlands, (2004).
- [8] L. G. Ixaru, M. Rizea, "a Comparison of some four-step methods for the numerical solution of the Schrödinger equation", *Comput. Phys. Commun.* 38,329 (1985).
- [9] A. París, L. Rández, "New embedded explicit pairs of exponentially fitted Runge-Kutta methods", *IMA J. Appl. Math.* 234,767 (2010).
- [10] R. D'Ambrosio, E. Esposito, B. Paternoster, "Exponentially fitted two-step hybrid methods for $y'' = f(x, y)$ " *IMA J.Appl. Math.* 235, 4888 (2011).
- [11] R. D'Ambrosio, M. Ferro, B. Paternoster, "Trigonometrically fitted two-step hybrid methods for special second order ordinary differential equations", *Math. Com-put. Simulat.* 81, 1068 (2011).

- [12] G. A. Panopoulos, Z. A. Anastassi, T. E. Simos, “Two Optimized Symmetric Eight-Step Implicit Methods for Initial-Value Problems with Oscillating Solutions”, *J.Math. Chem.* 46, 604 (2009).
- [13] H. Lee, Y.J. Lee, “Determinable solutions for one-dimensional quantum potentials: scattering, quasi-bound and bound-state problems”, *J. Phys. A* 40, 3569 (2007).
- [14] Sahu, Basudeb Sahu, Bidhubhusan Agarwalla, Santosh. “Evaluation of eigenvalues of a smooth potential via Schroedinger transmission across multi-step potential” . *Pramana-journal of Physics - PRAMANA-J PHYS.* 70. 27-39 (2008).
- [15] de la Peña Luis; “Introducción a la Mecánica Cuántica”,Fondo de Cultura Económica, México (2008).
- [16] David J. Griffiths; “Introduction to Quantum Mechanics”,Pearson Prentice Hall, (2004).
- [17] R T Deck and Xiangshan Li,*Am. J. Phys.*63, 920 (1995).
- [18] Basudeb Sahu, Bidhubhusan Sahu, Santosh AgarwallaFakir; *Pramana J. of Physics.* No 1. pp. 27-39 (2008).
- [19] C Eckart,*Phys. Rev.*35, 1303 (1930).
- [20] Z Ahmed,*Phys. Lett.*A157, 1 (1991).
- [21] S Bjornholm and J E Lynn,*Rev. Mod. Phys.*52, 725 (1980).
- [22] J N Ginocchio,*Ann. Phys.*152, 203 (1984).
- [23] B Sahu, S K Agarwalla and C S Shastri,*J. Phys. A: Math. Gen.*35, 4349 (2002).
- [24] Peña J J, Ovando G, Morales J, García Ravelo J, *J Mol Model.*23(9):265, (2017).
- [25] Z Ahmed,*Phys. Rev.*A47, 4761 (1993).