



UNIVERSIDAD NACIONAL  
AUTÓNOMA DE  
MÉXICO

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO.

---

---

POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS.

**Estudio de Invisibilidad y Efectos  
Transitorios en Sistemas Cuánticos.**

**TESIS**

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE:  
DOCTOR EN CIENCIAS (FÍSICA).

PRESENTA:

**Sergio Arturo Cordero Reyes.**

DIRECTOR DE TESIS: Dr. Gastón García Calderón.

MIEMBROS DEL COMITÉ TUTORAL:

Dr. Shahen Hacyan Saleryan.

Dr. Víctor Manuel Romero Rochín.



posgrado en ciencias físicas  
u n a m

2009



Universidad Nacional  
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

**Biblioteca Central**



**UNAM – Dirección General de Bibliotecas**  
**Tesis Digitales**  
**Restricciones de uso**

**DERECHOS RESERVADOS ©**  
**PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

**A mi Esposa.**

*Muere lentamente quien evita una pasión y su remolino de  
emociones, pero la pasión eres tú . . .*



El autor, sin perjuicio de la legislación de la **Universidad Nacional Autónoma de México**, otorga a esta obra la siguiente licencia:

Esta obra está licenciada bajo una **Licencia Atribución–No Comercial–Licenciamiento Recíproco 2.5 México de Creative Commons**. Para ver una copia de esta licencia, visite

<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/2.5/mx/>

o envíenos una carta a

**Creative Commons**  
171 Second Street, Suite 300,  
San Francisco, California,  
94105, USA.

---

Redacción y edición de tesis  
con PDF- $\text{\LaTeX}$ , GNU/Linux  
y sistema operativo libre

**Ubuntu 8.04**



## Resumen.

---

En este trabajo se muestra que una elección apropiada de los parámetros de un potencial unidimensional da origen a una transmisión con valores muy cercanos a la unidad para todas las energías de tunelaje excepto en un rango de valores muy cercanos al umbral de energía. El estudio del tiempo de permanencia y de la propagación de paquetes de onda (con una distribución de energías alrededor de las energías de tunelaje) muestra que el efecto del potencial en la propagación de ondas es despreciable; en otras palabras, no se puede distinguir entre un paquete de ondas que se propague vía efecto túnel de otro que se propague libremente. Denominamos a estos sistemas como sistemas invisibles.

## **Abstract.**

---

This work shows that an appropriate choice of the potential parameters in one-dimensional quantum systems gives unity transmission for all tunneling energies, except in a range of energies very close to the energy threshold. The corresponding study of the dwell time and of transient effects for propagating wave packets (whose spectra is around tunneling energies) along the transmission region, shows that the effect of the potential on the propagating tunneling wave packets is negligible; in other words, one cannot distinguish between the tunneling propagating wave packet and one propagating freely. We refer to these systems as invisible systems.

# Índice general

Índice general	i
Introducción.	v
<b>I. Invisibilidad.</b>	<b>1</b>
<b>1. Antecedentes I.</b>	<b>3</b>
1.1. Formalismo de estados resonantes.	4
1.1.1. Desarrollo en resonancias del coeficiente de transmisión.	8
1.1.2. Distribución de polos.	9
1.2. Resonancias aisladas.	11
1.3. Efecto del traslape entre resonancias.	16
1.4. Partícula libre, barrera y pozo simple.	18
1.5. El potencial Pöschl–Teller.	21
1.5.1. El pozo transparente.	26
1.5.2. La barrera transparente.	27
1.6. Tiempo de permanencia ( <i>dwelt time</i> ).	28
1.7. Condiciones de invisibilidad.	30
<b>2. Sistemas compuestos.</b>	<b>33</b>
2.1. Barrera y pozo doble.	34
2.2. Notación tipográfica.	41
2.3. Construcción de sistemas transparentes.	45
<b>3. Sistemas multibarreras.</b>	<b>59</b>
3.1. Cadenas cortas.	59
3.2. Cadenas largas.	66
3.3. Potenciales continuos (aproximación).	69
<b>4. El efecto de la masa.</b>	<b>73</b>
4.1. Masa constante.	74
4.2. Masa variable.	78

## ÍNDICE GENERAL

<b>5. Tiempo de permanencia.</b>	<b>85</b>
5.1. Tiempo de permanencia en sistemas compuestos. . . . .	87
5.2. Tiempo de permanencia en cadenas. . . . .	89
<b>II. Efectos Transitorios.</b>	<b>91</b>
<b>6. Antecedentes II.</b>	<b>93</b>
6.1. Obturador cuántico. . . . .	94
6.2. Paquete Gaussiano truncado (aproximación). . . . .	95
6.2.1. Evolución libre. . . . .	96
6.2.2. Corrección. . . . .	97
<b>7. Solución exacta para la evolución de un paquete Gaussiano.</b>	<b>99</b>
7.1. Amplitud de transmisión. . . . .	100
7.1.1. Ejemplos. . . . .	103
7.2. Evolución Temporal. . . . .	106
7.2.1. Obturador cuántico libre. . . . .	110
7.2.2. Obturador cuántico con potencial. . . . .	111
7.3. Solución exacta para el paquete Gaussiano truncado. . . . .	113
7.3.1. Límite onda plana. . . . .	117
7.3.2. Ejemplo. . . . .	119
<b>8. Paquetes de onda a través de sistemas transparentes.</b>	<b>127</b>
8.1. Sistemas transparentes. . . . .	127
8.2. Onda plana. . . . .	130
8.2.1. Sistemas Simples. . . . .	131
8.2.2. Sistemas compuestos. . . . .	135
8.3. Paquete Gaussiano. . . . .	138
8.3.1. Sistemas simples. . . . .	141
8.3.2. Sistemas compuestos. . . . .	141
<b>Conclusiones.</b>	<b>145</b>
<b>III. Apéndices.</b>	<b>153</b>
<b>A. Matriz de Transferencia.</b>	<b>155</b>
<b>B. Estados resonantes.</b>	<b>159</b>
B.1. Formalismo. . . . .	159
B.2. Región interna. . . . .	161
B.3. Región externa (transmisión). . . . .	164

<b>C. Cálculo de polos.</b>	<b>165</b>
C.1. Método de prueba y error. . . . .	165
C.2. Método asintótico. . . . .	167
<b>D. Función <math>M(x, t; k)</math>.</b>	<b>169</b>
<b>E. Paquete Gaussiano truncado.</b>	<b>175</b>
<b>F. Función de Faddeyeva.</b>	<b>179</b>
<b>G. Propagador.</b>	<b>183</b>
<b>Referencias.</b>	<b>191</b>

# Introducción.

El efecto *túnel*, conocido desde principios de la mecánica cuántica, describe la probabilidad de que una partícula atraviese una región clásicamente prohibida. Este efecto es una predicción de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo del problema.

Si consideramos el problema de dispersión de partículas por un potencial de alcance finito en una dimensión. La solución a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo fuera de la región de interacción es una combinación de ondas planas, en particular, si se considera incidencia de izquierda a derecha, se obtiene que la solución a la derecha del potencial es una onda plana saliente modulada por la amplitud de transmisión  $t(k)$ . Ésta se puede calcular usando el método *matriz de transferencia* (MT) para potenciales y pozos cuadrados, éste se discute en el apéndice A [1]. El método MT permite aproximar la amplitud de transmisión de potenciales continuos, aproximándolos por una sucesión de barreras y/o pozos cuadrados con anchuras apropiadas. La transmisión (o coeficiente de transmisión) se define como el cociente del flujo transmitido entre el flujo incidente, que para el tipo de problemas que vamos a tratar toma la forma  $T(E) = |t(k)|^2$  y se interpreta como la probabilidad de que la partícula atraviese al potencial.

Al considerar un sistema de dos o más barreras separadas, es posible obtener lo que se conoce en la literatura como “*efecto túnel resonante*”, ya que, al tomar los parámetros adecuados del sistema (anchuras y alturas de las barreras, y masa de la partícula), es posible obtener picos de transmisión en la región de tunelaje; resultado que ha sido corroborado experimentalmente por

*Introducción.*

*Esaki et al.*, [2] y posteriormente por *Sollner et al.*, [3] en heteroestructuras semiconductoras de arseniuro de galio (*AlGaAs*), donde el electrón se comporta como una partícula de masa efectiva  $m^* = 0.067 m_e$ , con  $m_e$  la masa del electrón. A los valores de energía para los cuales la transmisión tiene un máximo, se conoce como “*energías de resonancia*” y cuando la resonancia es aislada la transmisión alrededor de la energía de resonancia está perfectamente descrita por una curva tipo lorentziana; conocida en la literatura como fórmula de *Breit-Wigner* [4, 5].

Para los tipos de potenciales que consideramos en este trabajo, el valor máximo de la transmisión es la unidad, *i.e.*, se satisface que en energía de resonancia  $T(E) = 1$ . En este sentido, un haz de partículas monocromático, con energía igual a la energía de resonancia atraviesa al potencial sin sufrir reflexión, podemos decir que el sistema es *transparente* para este un conjunto discreto de energías. Es conveniente mencionar que si bien, en resonancia se cumple  $T(E) = 1$ , en general  $t(k) \neq 1$  con  $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ , produce un cambio de fase al paquete transmitido, y a su vez genera un retraso (o adelanto) de la onda transmitida respecto a la propagación libre. Esto es, si bien el haz monocromático atraviesa por completo al sistema, le lleva mayor (o menor) tiempo en recorrer la región de interacción, comparado con el tiempo que le llevaría recorrer la misma región libremente, esto debido a que la partícula queda atrapada en la región de interacción.

El método MT está diseñado para estados estacionarios, por lo que, hacer un estudio dinámico de la solución con MT nos lleva en general a considerar soluciones numéricas. Para resolver el problema dinámico existe un método alternativo que se conoce en la literatura como *formalismo de estados resonantes* [6]. El concepto de estado resonante fue introducido en 1928 por *Gamow* [7], para describir el decaimiento de partículas alfa. Los estados resonantes satisfacen la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo asociada al problema, con condición a la frontera de onda saliente. En general a estos estados se les asocia un eigenvalor de energía complejo.

En adelante nos referiremos como *energía de resonancia* al valor complejo  $\varepsilon_n = \epsilon_n - i\Gamma_n/2$  asociado al estado resonante y no a la energía real que satisface  $T(E) = 1$ , ya que, se puede mostrar que los valores complejos  $\kappa_n$  ( $\varepsilon_n = \hbar^2 \kappa_n^2 / 2m$ ) son los polos simples de la amplitud de transmisión  $\mathfrak{t}(k)$ , y para una resonancia aislada, el comportamiento de la transmisión alrededor de energía de resonancia está perfectamente descrita por la contribución del polo correspondiente y puede ser descrita por una fórmula de Breit–Wigner [4, 5]. Se puede mostrar que, la energía compleja  $\varepsilon_n$  asociada al estado resonante corresponde a una distribución lorentziana de energías con centro  $\varepsilon_n$  y semi-ancho  $\Gamma_n/2$ , es decir, al estado resonante no le corresponde una energía bien definida, sino una distribución lorentziana de energías [8].

El conjunto de estados resonantes forma una base completa en la región interna. Ésto permite escribir la solución  $\psi_k(x)$  en la región interna como un desarrollo en resonancias, y a su vez (por continuidad), obtener un desarrollo en resonancias de la amplitud de transmisión  $\mathfrak{t}(k) = \psi_k(L)e^{-ikL}$ . Además, la fórmula analítica de la transmisión permite encontrar (en algunos casos) la solución  $\psi(x, t)$  de la ecuación de Schödinger con el modelo de *obturador cuántico*; propuesto y resuelto inicialmente para partícula libre por *Moshinsky* [9] y extendido a potenciales de alcance finito por *García–Calderón et al.*, [10, 11]. Estas soluciones nos permiten comparar los frentes de onda de un paquete que incide sobre el sistema con el frente de onda correspondiente a la propagación libre [11], donde se observa que el frente de onda del paquete transmitido se retrasa con respecto al frente de onda libre. Es conveniente mencionar que, cuando se incide con energía de resonancia, uno sólo puede comparar los frentes de onda a tiempos muy grandes, lo que equivale a considerar distancias grandes, esto es, podemos hablar de un retraso (o adelanto) del frente de onda, sólo como un concepto asintótico (tiempos largos), mientras que al estudiar la solución a tiempos cortos, la señal transmitida sufre efectos transitorios [11, 12]; impidiendo una posible comparación entre éstos.

La distribución de polos de la amplitud de la transmisión depende de los parámetros del potencial y la masa de la partícula. Así, el estudio sistemático de esta distribución permite encontrar diferentes propiedades de los sistemas,



de las cuales destacan: (i) el efecto de dos resonancias fuertemente traslapantes; abren una ventana de transmisión unidad [13], el cual se corroboró recientemente para un sistema óptico [14]. (ii) El efecto de un estado antiligado cercano al umbral para un sistema de una barrera [15], en el cual se muestra que bajo ciertos valores de los parámetros de la barrera, la transmisión pierde su estructura resonante, *i.e.*, el sistema se hace más transparente, incluyendo energías cercanas al umbral. En esta dirección, existen varios ejemplos de sistemas a los que se les ha llamado *transparentes*, o “*sin reflexión*” [16–19], entre estos destaca el llamado potencial Pöschl–Teller (PT), el cual tiene solución analítica [20]. Se muestra que para ciertos parámetros del pozo se puede obtener transmisión unidad, incluyendo la energía del umbral ( $E = 0$ ). Sin embargo, un análisis detallado de la solución, como se discute en la sección 1.5, muestra que  $T(E) = 1$  pero  $t(k) \neq 1$ , por lo tanto, una partícula que atraviese al pozo PT transparente sufrirá un cambio de fase en la región de transmisión, provocando un retraso (o adelanto) respecto a la propagación libre; esto permitirá distinguir entre una partícula que pase a través del pozo PT transparente de una idéntica que se propague libremente.

Un tema de interés actual es la posibilidad de ocultar objetos. Esto se conoce en la literatura como “*optical cloak*” para el caso de ondas electromagnéticas y “*quantum cloaking*” para el caso de ondas materiales [21–25]. Este proceso consiste en cubrir el objeto con un “manto”, de tal forma que el efecto del manto es ocultar al objeto, *i.e.*, si se manda una onda (electromagnética o material), ésta rodea al objeto cubierto con el manto, de tal forma que al pasar por dicha región, la onda se reconstruye sin dispersión. Es conveniente mencionar que estos estudios a la fecha se han realizado en dos y tres dimensiones (2D y 3D) [21–25], ya que si se tratará de un sistema unidimensional, el objeto no podría ser rodeado por la onda incidente. Además, las soluciones son estacionarias, esto es, no se han realizado estudios dinámicos de las soluciones. Por otro lado, en un estudio reciente se muestra numéricamente que el tiempo que le lleva a la onda rodear al objeto no es despreciable, esto es, la señal sufre un retraso [26] por lo que un experimento de interferencia permitiría distinguir la señal de una onda que interactúe con el objeto de otra que viaje libremente.

En esta dirección nos preguntamos lo siguiente: *¿es posible diseñar sistemas invisibles en una dimensión?*, esto es, sistemas que tengan una alta probabilidad de transmitir  $T(E) \approx 1$  con  $t(k) \approx 1$ , es decir, si una partícula pasa a través del sistema, ésta se transmitirá con probabilidad casi unidad sin sufrir un cambio de fase, por lo que en la región de transmisión una partícula transmitida será indistinguible de una que se propague libremente. En otras palabras, no se podrá distinguir entre una partícula que se propague por el sistema de otra idéntica que viaje libremente.

Llamamos “*sistemas invisibles*” a sistemas caracterizados por procesos coherentes (elásticos) que satisfacen: (i) ser transparentes ( $T(E) \approx 1$ ) y (ii) no producen un cambio significativo en la fase de la función de onda que atravesó al potencial ( $t(k) \approx 1$ ), o de forma equivalentemente, pedir que el tiempo de permanencia de la partícula en el interior del potencial sea igual al tiempo que le llevaría recorrer dicha región libremente.

El trabajo de tesis consiste en investigar las características que debe cumplir un sistema invisible, esto es, un primer objetivo es encontrar los parámetros adecuados del sistema para que éste satisfaga las condiciones de transparencia. Se considerarán potenciales de alcance finito en una dimensión (1D), y por simplicidad consideramos potenciales formados por barreras y pozos cuadrados. En este punto enfatizamos lo siguiente, una diferencia entre el estudio que proponemos y los estudios sobre “quantum cloaking”, es que en una dimensión la onda no rodea al potencial; la única forma de pasar a la región de transmisión es vía efecto túnel. Este estudio se hace independiente del tiempo, y se mostrará que es posible diseñar sistemas que son transparentes. Un segundo objetivo es estudiar el tiempo de permanencia que sufre una partícula al interactuar con dichos sistemas, esto permitirá caracterizar a dichos sistemas como invisibles. Finalmente, un tercer objetivo de nuestro trabajo es estudiar los efectos transitorios que sufre un paquete de ondas al atravesar un sistema invisible, ya que si bien el paquete es transmitido con probabilidad cercana a la unidad, no es claro que este se comporte como si evolucionara libremente. Por simplicidad se estudian dos casos particulares: el paquete de onda plana

*Introducción.*

y el paquete Gaussiano, ambos con el modelo de obturador cuántico [10].

Para finalidad de este estudio, el trabajo de tesis se divide en tres partes:

I.– *Invisibilidad.* Se divide en cinco capítulos:

- 1.– *Antecedentes I:* Contiene los aspectos que consideramos más sobresalientes del estudio que se ha realizado sobre sistemas resonantes en 1D, así como el formalismo de estados resonantes mencionado anteriormente.
- 2.– *Transparencia en sistemas compuestos:* Se realiza un estudio sistemático de combinaciones simples de barreras y pozos que tienen una alta probabilidad de transmitir aún para energías cercanas al umbral.
- 3.– *Sistemas multibarrera:* Se extiende el estudio realizado en el capítulo 2 a sistemas multibarrera incluyendo aproximaciones de potenciales continuos.
- 4.– *El efecto de la masa:* Se hace un estudio del efecto de la masa de la partícula sobre la condición de transparencia, para éste se tienen dos casos especiales: (i) masa constante en todo el espacio y (ii) masa variable en la región de interacción.
- 5.– *Tiempo de permanencia:* Se estudia el tiempo de permanencia que sufre una partícula al interactuar con un sistema transparente obtenido en los capítulos anteriores. Este estudio, corrobora que los sistemas encontrados satisfacen las condiciones de invisibilidad.

II.– *Efectos transitorios*. Se divide en tres capítulos:

6.– *Antecedentes II*: Contiene los aspectos más sobresalientes del estudio realizado sobre la evolución temporal de paquetes de onda a través de sistemas resonantes, en particular nos referimos a la aproximación de obturador cuántico y evolución de paquetes gaussianos.

7.– *Solución analítica*: Se hace un nuevo desarrollo en resonancias de la amplitud de transmisión, el cual permite resolver de forma analítica la evolución del paquete transmitido y se da como ejemplo la evolución de un paquete gaussiano en la aproximación del obturador cuántico.

8.– *Paquetes de onda a través de sistemas transparentes*: Usando la solución encontrada en el capítulo 7 se estudia la evolución del paquete transmitido por un sistema transparente y se muestra que el paquete transmitido no sufre un cambio significativo respecto a su propagación libre.

Sin numeración se dan las conclusiones de nuestro trabajo.

III.– *Apéndices*: En este trabajo se dan siete apéndices, los cuales contienen: (A) el formalismo de matriz de transferencia, estados resonantes, un método para el cálculo de los polos complejos de la función de Green de onda saliente, la función  $M(x, t; k)$  que aparece en las soluciones dependientes del tiempo y que es conocida como función de Moshinsky, el paquete Gaussiano truncado, la función de Faddeyeva y finalmente un desarrollo del propagador para un sistema unidimensional con un potencial de alcance finito.

# 1 Antecedentes I.

Iniciamos nuestro estudio introduciendo el *formalismo de estados resonantes* [Secc. 1.1];<sup>1</sup> éste nos permite encontrar una expresión en resonancias de la función de Green de onda saliente en la región interna del potencial.<sup>2</sup> Usando la condición de continuidad a la solución de la ecuación de eigenvalores; se encuentra que la transmisión del sistema es proporcional a la función de Green de onda saliente. Así, las propiedades analíticas de la función de Green son heredadas a la transmisión, *i.e.*, se tiene un desarrollo en resonancias de la transmisión.

Posteriormente, se dan unos ejemplos típicos de sistemas resonantes que consideramos de interés. El primero de ellos es el hecho de que existen una gran variedad de sistemas que satisfacen tener resonancias aisladas [Secc. 1.2]. Durante varios años se buscaron sistemas que satisfagan transmisión uno para una o varias energías bien definidas; las cuales se denominan energías de resonancia,<sup>3</sup> como caso particular nos referimos al modelo de Sollner *et al.*[3];<sup>4</sup> el cual consiste en un sistema de barrera doble (DB). Éste permite bajo ciertos parámetros (anchuras y alturas de las barreras) tener una *resonancia aislada* con energía de resonancia menor a la altura del potencial, y para la cual se tiene que la transmisión cerca de resonancia está perfectamente descrita por un comportamiento tipo Lorentziano [4]. Otro efecto es el *traslape fuerte* entre resonancias [13] (*Strong Overlap*) [Secc. 1.3]; consiste en acercar dos resonancias de tal forma que aparezca una región de energía para la cual su transmisión es prácticamente uno, esto lo podemos ver como abrir una ventana de transparencia en la región de tunelaje y es debido a la interferencia constructiva entre resonancias. Este efecto es parte de la motivación de nuestro trabajo, ya que se ha medido experimentalmente para un sistema óptico.<sup>5</sup> Sin embargo, veremos que no es posible extender dicho efecto a una región

---

<sup>1</sup>Gamow introdujo la noción de estado resonante para describir el decaimiento exponencial de partículas alfa [7]. El estado resonante es solución a la ecuación de eigenvalores asociada al problema con condición a la frontera de onda saliente. En la actualidad llamamos *formalismo de estados resonantes*, a un enfoque analítico basado en el conjunto completo de estados resonantes del sistema [6].

<sup>2</sup>Se puede mostrar que la función de Green de onda saliente satisface  $G^+(x, x'; k) \rightarrow 0$  cuando  $|k| \rightarrow \infty$  ( $k$  complejo) y  $x, x'$  son evaluados en la región interna de un potencial de alcance finito [6, 27].

<sup>3</sup>En los libros de texto se refieren a energía de resonancia a aquellos valores de energía para los cuales la transmisión es uno [1]. Sin embargo, en nuestro contexto la energía de resonancia es la parte real de la energía asociada al estado resonante que en general no satisface ésta condición excepto cuando se trata de una resonancia aislada [4].

<sup>4</sup>Sollner *et al.*, miden experimentalmente la resonancia aislada de un sistema doble barrera creado con Arseniuro de Galio dopado con aluminio (*AlGaAs*) [3].

<sup>5</sup>Hooper *et al.*, estudian la transparencia en un sistema óptico y miden una región de transparencia [14]. El resultado que obtienen desde nuestro punto de vista, es una prueba experimental del efecto *Strong Overlap* predicho varios años atrás en mecánica cuántica para un sistema de triple barrera [13].

## 1 Antecedentes I.

lo suficientemente grande para hacer que un sistema triple barrera transmita con probabilidad uno (o cercana a la unidad) en una región grande del espectro de energías. Nos referimos a energías dentro de la región de tunelaje, *i.e.*,  $E < v$ .

Entrando en materia, el propósito de este trabajo es investigar sobre la posibilidad de que un sistema transmita con probabilidad cercana a la unidad en un espectro grande de energía, y para dicho propósito, nos referimos en este capítulo a tres sistemas simples [Secc. 1.4]. El primero es partícula libre; el cual es un sistema ideal. Los otros dos sistemas son: barrera y pozo simple (SB, SW respectivamente).<sup>6</sup> La barrera simple se ha estudiado anteriormente y se muestra que el efecto de un estado antiligado cercano al umbral<sup>7</sup> produce un cambio drástico en la transmisión del sistema [15]; hace que ésta suba rápidamente a uno y se pierda el efecto de las resonancias lejanas, dándole una forma simple a la transmisión, *i.e.*, una barrera simple se puede hacer transparente. Sin embargo, la transparencia en SB se satisface con parámetros del sistema (anchura y altura de la barrera) muy pequeños; veremos que el mismo efecto se puede observar en un pozo simple, donde la transmisión está dominada por un estado ligado cercano al umbral. Un ejemplo adicional en esta dirección es el denominado potencial *Poschl–Teller* (PT), que es un potencial extendido en todo el espacio y para el cual se puede mostrar que el pozo PT es transparente bajo ciertos parámetros [Secc. 1.5].

Los ejemplos anteriores, muestran que es posible construir sistemas que transmitan con probabilidad casi uno en todo el espectro de energía, los cuales denominamos como transparentes. Sin embargo, el estudio de la transmisión no es suficiente para denominar a dichos sistemas como *invisibles*, ya que, entendemos por un sistema invisible a aquellos sistemas que se comportan como si se tratara de partícula libre, por esta razón es necesario hacer un estudio del tiempo de permanencia (*dwel time*) que sufre una partícula al interactuar con dichos potenciales [Secc. 1.6]. Así, el estudio de la transparencia y el tiempo de permanencia, permiten dar las propiedades analíticas de un sistema invisible [Secc. 1.7].

### 1.1. Formalismo de estados resonantes.

El formalismo de estados resonantes es un enfoque alternativo para estudiar las propiedades analíticas de un sistema y sus soluciones [6]. Éste es empleado tanto para estudiar la evolución temporal en el decaimiento como la evolución temporal en la transmisión [11, 28]; por esta razón consideramos importante hacer un breve desarrollo de dicho formalismo, dando las ideas principales del mismo.

---

<sup>6</sup>Por sus siglas en inglés *single barrier*, *single well*.

<sup>7</sup>En nuestro contexto, nos referimos a energías del umbral a aquellas que son cercanas a cero, esto es, porque los potenciales que consideramos en este trabajo son cero excepto en una región finita del espacio y por lo tanto las soluciones a la ecuación de Schrödinger para el espectro continuo tienen como mínimo  $E = 0$ .

### 1.1 Formalismo de estados resonantes.

Dado un sistema cuántico con hamiltoniano  $H$ , la ecuación de eigenvalores asociada al sistema está dada por

$$\mathcal{H}\psi(x) = k^2\psi(x), \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad (1.1)$$

donde  $\mathcal{H} = 2mH/\hbar^2$  y  $E$  la energía de la partícula de masa  $m$ . La función de Green de onda saliente asociada a la ecuación de eigenvalores (1.1) satisface

$$[k^2 - \mathcal{H}]G^+(x, x'; k) = \delta(x - x'), \quad (1.2a)$$

con condición a la frontera

$$\left. \frac{\partial}{\partial x} G^+(x, x'; k) \right|_{x=0} = -ikG^+(0, x'; k), \quad (1.2b)$$

$$\left. \frac{\partial}{\partial x} G^+(x, x'; k) \right|_{x=L} = ikG^+(L, x'; k). \quad (1.2c)$$

En general nos referiremos al plano  $k$  y no al plano de energías  $E$ . Encontrar la solución de la ecuación (1.2a) es tan complicado como encontrar la solución del problema original (1.1). Sin embargo, si el potencial es de alcance finito, es posible hacer un desarrollo analítico de la función de Green de onda saliente en la región interna del potencial. Suponemos que la partícula esta sujeta a un potencial de alcance finito, *i.e.*,  $v(x < 0) = 0$  y  $v(x > L) = 0$ . Los resultados bajo esta condición son: la función de Green de onda saliente tiende asintóticamente a cero cuando  $|k| \rightarrow \infty$  ( $k$  complejo) si  $0 < (x, x') < L$ , y en general tiene polos simples  $\kappa_n$  [27]. La aplicación del teorema del residuo de Cauchy conduce a un desarrollo del  $G^+(x, x'; k)$  de la forma,

$$G^+(x, x'; k) = \sum_n \frac{R_n(x, x')}{k - \kappa_n}, \quad 0 < (x, x') < L, \quad (1.3)$$

donde la suma se hace sobre todos los polos  $\kappa_n$  de la función de Green,<sup>8</sup>  $R_n(x, x')$  es el  $n$ -ésimo residuo y se indica con el símbolo  $0 < (x, x') < L$  el hecho de que el desarrollo es

<sup>8</sup>Típicamente los polos de la función de Green de onda saliente asociada a un sistema con un potencial de alcance finito se encuentran en el segundo, tercer y cuarto cuadrante del plano complejo  $k$ . Numeramos los polos del segundo y tercer cuadrante con índices negativos y los del cuarto cuadrante con índices positivo. Así, si el potencial es real se satisface  $\kappa_{-n} = -\kappa_n^*$ .

## 1 Antecedentes I.

válido si  $x \neq x' = 0$  y  $x \neq x' = L$ . Así, el problema se reduce al cálculo del  $n$ -ésimo residuo  $R_n(x, x')$ , para el cual hacemos una manipulación algebraica.

Se sustituye (1.3) en (1.2a) y tomamos el límite  $k \rightarrow \kappa_n$  para un  $n$  fijo y encontramos que se debe cumplir la igualdad

$$[\kappa_n^2 - \mathcal{H}]R_n(x, x') = 0, \quad (1.4)$$

*i.e.*, el  $n$ -ésimo residuo satisface la ecuación de eigenvalores (1.1) con  $\kappa_n^2$  complejo. Las condiciones de frontera de la función de Green de onda saliente [Ecs. 1.2b y 1.2c] son heredadas a cada residuo, *i.e.*,

$$\left. \frac{\partial}{\partial x} R_n(x, x') \right|_{x=0} = -i\kappa_n R_n(0, x'), \quad \left. \frac{\partial}{\partial x} R_n(x, x') \right|_{x=L} = i\kappa_n R_n(L, x'). \quad (1.5)$$

Esto nos permite escribir al residuo  $R_n(x, x') = u_n(x)F_n(x')$  donde  $u_n(x)$  corresponde al  $n$ -ésimo estado resonante del sistema; los estados resonantes satisfacen la ecuación de Schrödinger del problema, con condición a la frontera de onda saliente, *i.e.*,

$$[\kappa_n^2 - \mathcal{H}]u_n(x) = 0, \quad \varepsilon_n = \frac{\hbar^2 \kappa_n^2}{2m}, \quad (1.6a)$$

y

$$\left. \frac{d}{dx} u_n(x) \right|_{x=0} = -i\kappa_n u_n(0), \quad \left. \frac{d}{dx} u_n(x) \right|_{x=L} = i\kappa_n u_n(L). \quad (1.6b)$$

Manipulamos la ecuación (1.3) para conocer el valor de  $F_n(x')$ . Escribimos la función de Green como

$$G^+(x, x'; k) = \frac{u_n(x)F_n(x')}{k - \kappa_n} + \chi(x, x'; k), \quad (1.7)$$

con  $\chi(x, x'; k)$  una función analítica en  $k = \kappa_n$ . Así, al sustituir (1.7) en la ecuación (1.2a) y tomar el límite  $k \rightarrow \kappa_n$  se encuentra

$$(\kappa_n^2 - \mathcal{H})\chi(x, x'; \kappa_n) + 2\kappa_n u_n(x)F_n(x') = \delta(x - x'), \quad (1.8)$$



con condiciones a la frontera<sup>9</sup>

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial x}\chi(x, x'; \kappa_n)\Big|_{x=L} &= i\kappa_n\chi(L, x'; \kappa_n) + iu_n(L)F_n(x'), \\ \frac{\partial}{\partial x}\chi(x, x'; \kappa_n)\Big|_{x=0} &= -i\kappa_n\chi(0, x'; \kappa_n) - iu_n(0)F_n(x').\end{aligned}\quad (1.9)$$

Multiplicamos la ecuación (1.8) por  $u_n(x)$  y la ecuación de eigenvalores asociada a  $u_n(x)$  (1.6a) por  $\chi(x, x'; \kappa_n)$ ; restamos e integramos en el intervalo de interacción del potencial  $[0, L]$ , para obtener

$$2\kappa_n \left\{ \int_0^L u_n^2(x) dx + \frac{i}{2\kappa_n} [u_n^2(0) + u_n^2(L)] \right\} F_n(x') = u_n(x'). \quad (1.10)$$

El término entre corchetes de la igualdad (1.10) se identifica como la condición de “normalización” de los estados resonantes, *i.e.*,

$$\int_0^L u_n^2(x) dx + \frac{i}{2\kappa_n} [u_n^2(0) + u_n^2(L)] = 1, \quad (1.11)$$

con lo cual  $F_n(x') = u_n(x')/2\kappa_n$ . Esto nos conduce a la expresión para  $G^+(x, x'; k)$ ,

$$G^+(x, x'; k) = \frac{1}{2} \sum_n \frac{u_n(x)u_n(x')}{\kappa_n(k - \kappa_n)}, \quad 0 < (x, x') < L, \quad (1.12)$$

igualdad que es válida en el interior del potencial y en las fronteras si  $x \neq x'$ .

Si sustituimos (1.12) en (1.2a) se muestra fácilmente que: los estados resonantes son una base completa en la región interna del potencial y a su vez una relación de suma que es importante en algunos cálculos;

$$\frac{1}{2} \sum_n u_n(x)u_n(x') = \delta(x - x'), \quad \sum_n \frac{u_n(x)u_n(x')}{\kappa_n} = 0. \quad (1.13)$$

<sup>9</sup>Las condiciones sobre la frontera de la derivada de la función  $\chi(x, x'; \kappa_n)$  se obtienen calculando primero la derivada de la ecuación (1.7) evaluada en la frontera, de esta expresión se sustituyen las expresiones correspondientes (1.2b, 1.2c y 1.6b) para la función de Green y estados resonantes, posteriormente se emplea (1.7) para escribir todo en términos de  $\chi(x, x'; k)$ , su derivada y el  $n$ -ésimo residuo, al final se calcula el límite  $k \rightarrow \kappa_n$ .

## 1 Antecedentes I.

Usando la regla de suma, podemos escribir la función de Green de onda saliente como

$$G^+(x, x'; k) = \frac{1}{2k} \sum_n \frac{u_n(x)u_n(x')}{k - \kappa_n}, \quad 0 < (x, x') < L. \quad (1.14)$$

### 1.1.1. Desarrollo en resonancias del coeficiente de transmisión.

Supongamos que tenemos el problema de dispersión en una dimensión para un electrón que incide de izquierda a derecha sobre un potencial de alcance finito  $L$ . La solución a la ecuación de eigenvalores fuera del potencial está dada por  $e^{ikx} + r(k)e^{-ikx}$  para  $x < 0$  (región de reflexión) y  $t(k)e^{ikx}$  para  $x > L$  (región de transmisión), donde  $r(k)$  y  $t(k)$  son los coeficientes de reflexión y transmisión respectivamente. Esta solución satisface la ecuación (1.1). La ecuación asociada a la función de Green de onda saliente del problema está dada en Ec. (1.2a). Multiplicamos la Ec. (1.1) por  $G^+(x, x'; k)$  y (1.2a) por  $\psi(x)$ , restamos e integramos en la región interna del potencial  $[0, L]$ , para obtener

$$\psi(x') = \psi(x)\partial_x G^+(x, x'; k) - G^+(x, x'; k)\partial_x \psi(x) \Big|_0^L, \quad 0 < x' < L, \quad (1.15)$$

que corresponde a la solución  $\psi(x)$  en la región interna del potencial. La evaluación en el límite superior es nula, puesto que  $\partial_x G^+(L, x'; k) = ikG^+(L, x'; k)$  y  $\partial_x \psi(L) = ik\psi(L)$ , por lo que

$$\begin{aligned} \psi(x') &= G^+(0, x'; k)[ik - ikr(k)] + ik(1 + r(k))G^+(0, x'; k) = \\ &= 2ikG^+(0, x'; k), \quad 0 < x' \leq L. \end{aligned} \quad (1.16)$$

Usamos la condición de continuidad para las solución a la ecuación de eigenvalores y encontramos

$$\psi(L) = t(k)e^{ikL}, \quad (1.17)$$

lo que nos relaciona de forma inmediata a la función de Green de onda saliente con la amplitud de transmisión, mediante

$$t(k) = 2ikG^+(0, L; k)e^{-ikL}. \quad (1.18)$$

Observe que el desarrollo en resonancias de la función de Green Ec. (1.12) es válida para  $x = 0$ ,  $x' = L$ , por lo que se tiene de forma inmediata el desarrollo del coeficiente de transmisión como un desarrollo en resonancias o, en otras palabras, un desarrollo analítico de la transmisión dado por

$$\mathbf{t}(k) = ik \sum_n \frac{r_n}{\kappa_n(k - \kappa_n)} e^{-ikL}, \quad \mathbf{t}(k) = i \sum_n \frac{r_n}{k - \kappa_n} e^{-ikL}, \quad (1.19)$$

relaciones que son idénticas mediante la relación de suma Ec. (1.13) y donde se define el  $n$ -ésimo residuo de la transmisión  $r_n = u_n(0)u_n(L)$ . Ambas expresiones son empleadas para la descripción correcta de la transmisión cerca de resonancias aisladas o minibandas en sistemas multi-barrera [4, 5]. Sin embargo, la descripción de la transmisión mediante Ecs. (1.19) fuera de resonancia, necesitan en general la contribución de muchos términos.<sup>10</sup> Esto puede desalentar un cálculo, pero existe un desarrollo alternativo que nos permite acelerar la convergencia de la serie. Veremos el desarrollo analítico de una nueva representación de la amplitud de transmisión más adelante [Cap. 7]. Aquí únicamente damos el resultado que es

$$\mathbf{t}(k) = ik \sum_n \frac{r_n e^{-i\kappa_n L}}{\kappa_n(k - \kappa_n)}. \quad (1.20)$$

### 1.1.2. Distribución de polos.

Los polos de la función de Green de onda saliente asociada a un sistema con un potencial de alcance finito  $L$ , satisfacen las siguientes relaciones generales para un potencial real:

- i -  $\Im\{\kappa_n\} < 0$  si  $\Re\{\kappa_n\} \neq 0$  y
- ii - si  $\kappa_n$  es un polo y  $\Re\{\kappa_n\} \neq 0$  entonces  $-\kappa_n^*$  también lo es.

Estos resultados se obtienen al pedir que el operador de inversión temporal conmute con el Hamiltoniano y al exigir condiciones de onda saliente a los estados resonantes<sup>11</sup> [27].

Típicamente se acostumbra numerar a los polos  $\kappa_n$  que se encuentran en el cuarto cuadrante del plano complejo  $k$  ( $\Re\{k\} > 0$ ) con índices positivos, y con números negativos a los que se encuentran en el tercer cuadrante ( $\Re\{k\} < 0$ ); así, se tiene para los polos la relación  $\kappa_{-n} = -\kappa_n^*$  si  $\Re\{\kappa_n\} \neq 0$ . Por otro lado, los polos que se encuentran en el eje imaginario denotados por  $\kappa_s = i\gamma_s$  son ligados si  $\gamma_s > 0$  o antiligados si  $\gamma_s < 0$ . Esto es, porque

<sup>10</sup>Debido a que las resonancias lejanas se traslapan fuertemente y la serie converge lentamente.

<sup>11</sup>Los polos de la función de Green de onda saliente, son los eigenvalores de los estados resonantes si trabajamos en el espacio de energías  $\varepsilon_n = \hbar^2 \kappa_n^2 / 2m = \varepsilon_n - i\Gamma_n / 2$ .

## 1 Antecedentes I.

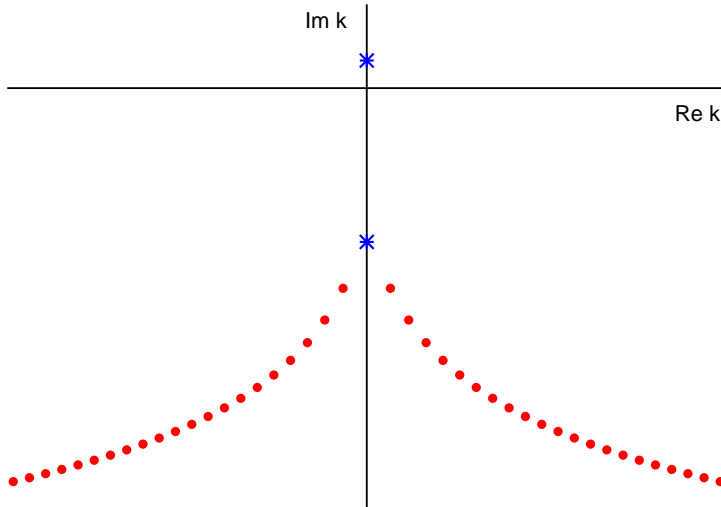


Figura 1.1: Distribución de polos de la función de Green de onda saliente para un pozo, los parámetros son discutidos en el texto. Note que los estados resonantes se encuentran en el tercer y cuarto cuadrante del plano complejo  $k$  (círculos sólidos) y un par ligado y antiligado (asteriscos).

la condición de onda saliente para los estados ligados satisfacen la condición de que: lejos del alcance del potencial decaen exponencialmente, lo que corresponde al comportamiento típico de estos estados. Mientras que para un estado antiligado se tiene que el estado es divergente para  $x > L$  y  $x < 0$ .<sup>12</sup> Sin embargo, vemos que los desarrollos en resonancias no necesitan evaluar a los estados resonantes (incluyendo ligados y antiligados) lejos del potencial, y se tendrán que evaluar en las fronteras, tal es el caso de los desarrollos en resonancias de la transmisión [Ecs. 1.19, 1.20].

En la figura 1.1 se muestra la distribución de polos para un pozo de anchura  $w = 5 \text{ nm}$  y profundidad  $u = -0.23 \text{ eV}$ , se supone una masa efectiva de la partícula  $m^* = 0.067 m_e$ . El comportamiento de la distribución de polos para este potencial en particular, corresponde al comportamiento asintótico que tiene un potencial de alcance finito, esto es, sabemos que los polos lejanos ( $\kappa_n$  con  $n \gg 1$ ) satisfacen  $\Re\{\kappa_n\} \sim n\pi/L$  y  $\Im\{\kappa_n\} \sim \ln n$  [27].

<sup>12</sup>Recuerde que el comportamiento típico de un estado ligado fuera de la región de interacción es  $\psi_{\text{ligado}}(x) \sim e^{-|\kappa_s x|}$  pero para el estado antiligado es  $\psi_{\text{anti}}(x) \sim e^{|\kappa_s x|}$ , por lo que, la función asociada a estados antiligados diverge exponencialmente.

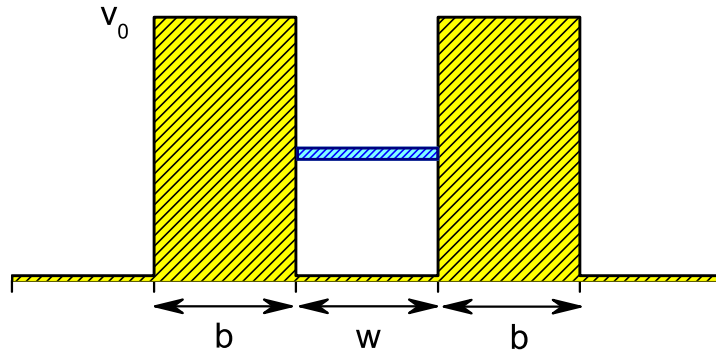


Figura 1.2: Se muestra el perfil de un potencial típico doble barrera (DB) el cual tiene una resonancia aislada con centro menor a la altura de las barreras.

## 1.2. Resonancias aisladas.

Es posible construir sistemas que tengan una o varias resonancias aisladas; estos sistemas tienen típicamente dimensiones de unos cuantos nanómetros ( $nm$ ) y alturas de décimas de electrón volts ( $eV$ ). Tal es el caso de un sistema simple como el de Sollner [3], el cual consiste en dos barreras de anchura  $b = 5 nm$  y alturas  $v_0 = 0.23 eV$ , separadas por un pozo de anchura  $w = 5 nm$ . El sistema se muestra esquemáticamente en la figura 1.2. Si fijamos el valor de la masa efectiva del electrón en  $m^* = 0.067 m_e$ ,<sup>13</sup> la primera resonancia del sistema Sollner es aislada<sup>14</sup> con centro  $\epsilon_1 = 0.080053 eV$  y ancho efectivo  $\Gamma_1 = 1.027782 meV$ , *i.e.*, la transmisión  $T = |t(k)|^2$  satisface:  $T(E) \approx 1$  para  $E = \epsilon_1$  y  $T(E) \approx 0.5$  para  $E = \epsilon_1 \pm \Gamma_1/2$ .

La gráfica de la transmisión como función de la energía se muestra en la figura 1.3, con su correspondiente distribución de las energías de resonancia. Observe que, la segunda resonancia no es tan cercana al eje real para que se considere como aislada, por lo que, la contribución de ésta a la transmisión se traslapa con la contribución de las demás resonancias (excepto la primera), es más notorio el efecto del traslape de las resonancias para la tercer y cuarta resonancia, generan una región de transmisión casi constante, aunque hay que recordar que estas se traslapan con la contribución de otras resonancias. Sin embargo, esto es para valores de energía sobre la altura de las barreras, *i.e.*,  $E > v_0$  [fig. 1.3].

Algo que no debemos perder de vista en la figura 1.3 es la relación que existe entre la estructura resonante de la transmisión y la distribución de las resonancias en el plano complejo de energía  $\epsilon$ , esto nos permite dar una idea cualitativa de cómo es la distribución de las resonancias ( $\epsilon_n$ ) para un potencial de alcance finito al conocer su transmisión.

<sup>13</sup>Corresponde a la masa efectiva del electrón en una Heteroestructura de  $GaAs$  en la aproximación de masa efectiva constante, como el usado por Sollner *et al.*, [3].

<sup>14</sup>Una resonancia aislada  $\epsilon_n = \epsilon_n - i\Gamma_n/2$  da un comportamiento puramente lorentziano al coeficiente de transmisión, con centro  $\epsilon_n$  y semi-ancho  $\Gamma_n/2$ .

1 Antecedentes I.

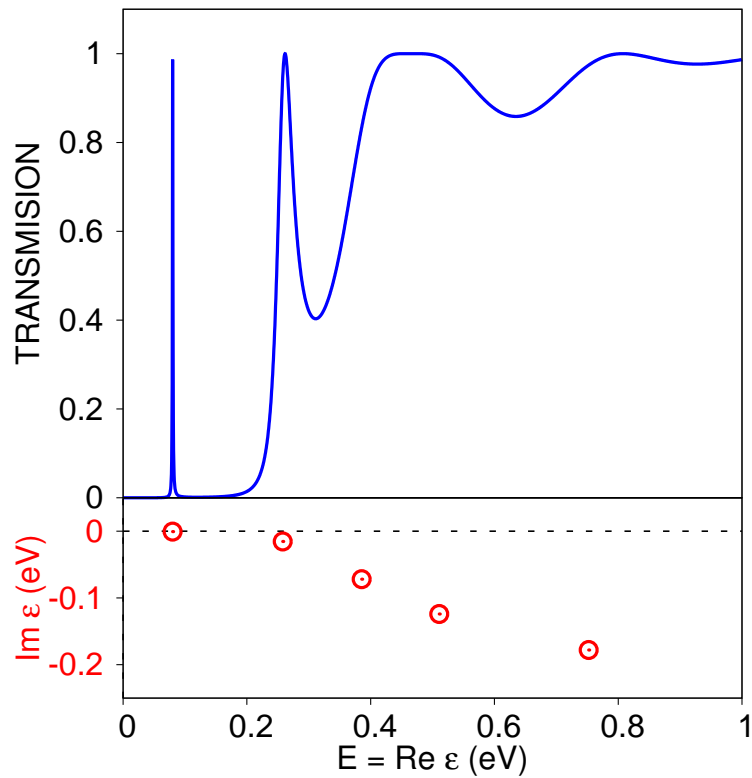


Figura 1.3: Se muestra la transmisión del sistema Sollner [fig. 1.1] como función de la energía  $E$  y su distribución de energías de resonancia  $\varepsilon_n$  en el plano complejo de energía  $\varepsilon$ . Los parámetros son:  $b = w = 5 \text{ nm}$  (anchura de las barreras),  $v_0 = 0.23 \text{ eV}$  (altura de las barreras) y  $m^* = 0.067 m_e$  (masa de la partícula).

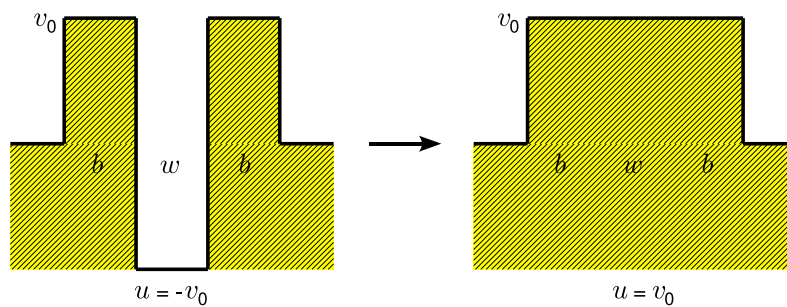


Figura 1.4: Se muestra esquemáticamente el cambio de un potencial doble barrera con profundidad del pozo  $u = -v_0$  a un potencial de una barrera para el cual el parámetro  $u = v_0$ . Note que los demás parámetros quedan invariantes.

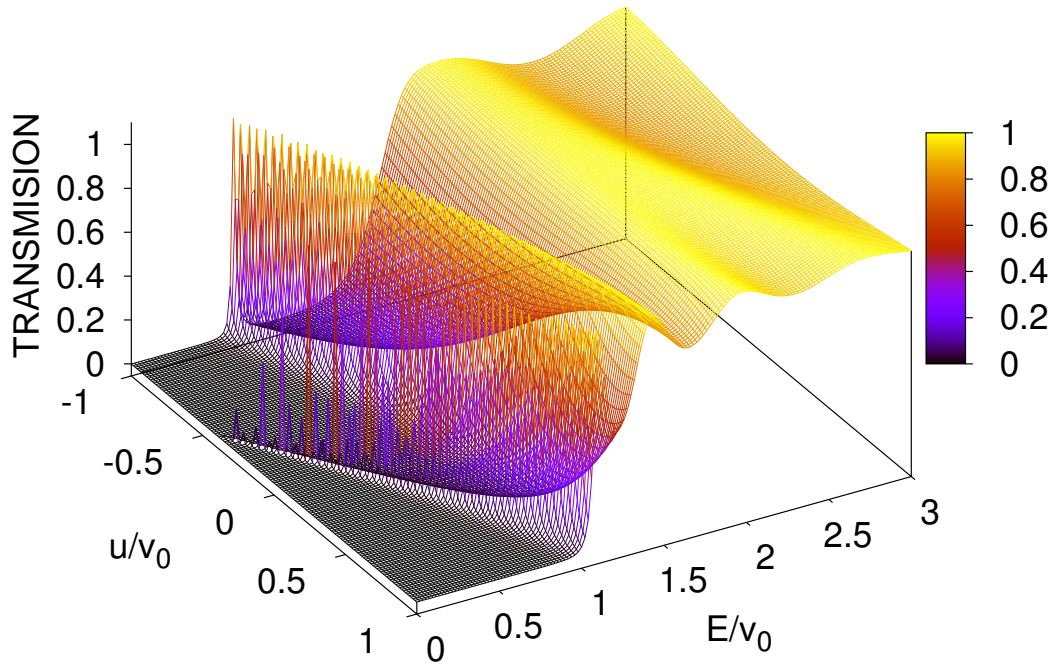


Figura 1.5: Transmisión como función de la energía de una colección de sistemas del tipo mostrado en la figura 1.4, variando la profundidad del pozo  $u$ . Se supone una masa efectiva de la partícula  $m^* = 0.067 m_e$ .

Una forma novedosa de estudiar no sólo un sistema, sino más bien una colección de estos, es variar algún parámetro del potencial. Por ejemplo la profundidad del pozo denotada por  $u$ . Así, la variación de valor  $u$  desde  $u = -v_0$  hasta  $u = v_0$  nos permite analizar sistemáticamente el comportamiento de las resonancias a partir de la transmisión, partiendo de una barrera doble (DB) hasta una barrera simple (SB), esto se muestra esquemáticamente en la figura 1.4. Note que la transmisión del sistema Sollner [fig. 1.3] se tendrá sólo cuando  $u = 0$ .

En la figura 1.5 se muestra la transmisión para la colección de sistemas DB del tipo mostrado en la figura 1.4 para valores del pozo desde  $u = -v_0$  (DB) hasta  $u = v_0$  (SB), recuerde que un corte en  $u = 0$  de esta superficie corresponde a la transmisión del sistema Sollner [fig. 1.3]. Note que, la variación continua de la profundidad  $u$  permite seguir de forma continua la trayectoria de las resonancias.<sup>15</sup> Sin embargo, es más fácil analizar la estructura resonante desde una gráfica en dos dimensiones en escala de grises. Vamos a distinguir los valores para el cual  $T(E) > 0.5$  con los valores  $T(E) \leq 0.5$ , ya que es común decir que,

<sup>15</sup>En la figura 1.5 se observan discontinuidades en la transmisión para las primeras dos resonancias, pero este efecto es debido al número de particiones que se emplearon sobre los ejes  $u$  y  $E$ .

## 1 Antecedentes I.

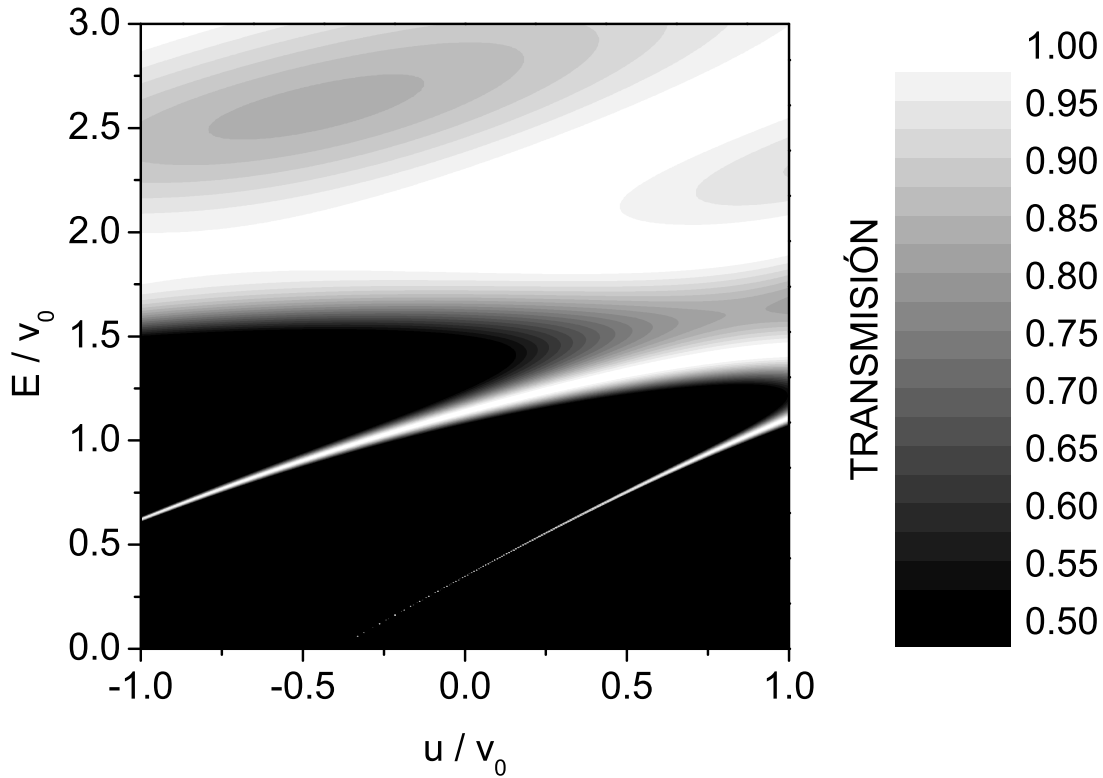


Figura 1.6: Transmisión de un sistema doble barrera como función de la energía y la profundidad  $u$  del pozo. Los parámetros son:  $b = 5 \text{ nm}$ ,  $v_0 = 0.23 \text{ eV}$  y  $m^* = 0.067 m_e$ .

una partícula está en resonancia si ésta tiene un valor de energía  $E$  entre  $E_- = \epsilon_1 - \Gamma_1/2$  y  $E_+ = \epsilon_1 + \Gamma_1/2$ . Matemáticamente sabemos que se satisface estrictamente  $T(E) = 1$  para valores discretos de la energía, por ejemplo  $E = \epsilon_1$  para el sistema de Sollner [fig. 1.3], pero difícilmente se apreciará en una gráfica de superficie. En la figura 1.6 se muestra la transmisión de la colección de sistemas DB variando la profundidad del pozo  $u$ ; equivalente a la gráfica 1.5.

La escala que empleamos es de 0.5 a 1 en la transmisión; así, distinguimos claramente cuando  $T(E) \leq 0.5$  (color negro en la gráfica). La virtud de estudiar una colección de sistemas y no sólo uno, es que podemos visualizar gráficamente cual es la dinámica de las resonancias como función de un parámetro del sistema. Por ejemplo la transmisión como función de la energía  $E$  y la profundidad del pozo  $u$  considerada anteriormente [Figs. 1.5, 1.6]; para la colección de sistemas DB  $\rightarrow$  SB [fig. 1.4]. Notamos que el pozo juega un papel de atracción ( $u < 0$ ) o repulsión ( $u > 0$ ) de las resonancias, lo que nos da una idea cualitativa de qué parámetros usar para tener una energía de resonancia con centro en un valor fijo  $\epsilon$ , *i.e.*, si queremos que el centro de la resonancia esté a la mitad de la altura del potencial ( $\epsilon = v_0/2$ ), para la colección de sistemas del tipo mostrado en la figura 1.4, necesitamos que  $u \approx v_0/4$ ; o por el comportamiento de las resonancias que se muestran en la figura 1.6, po-



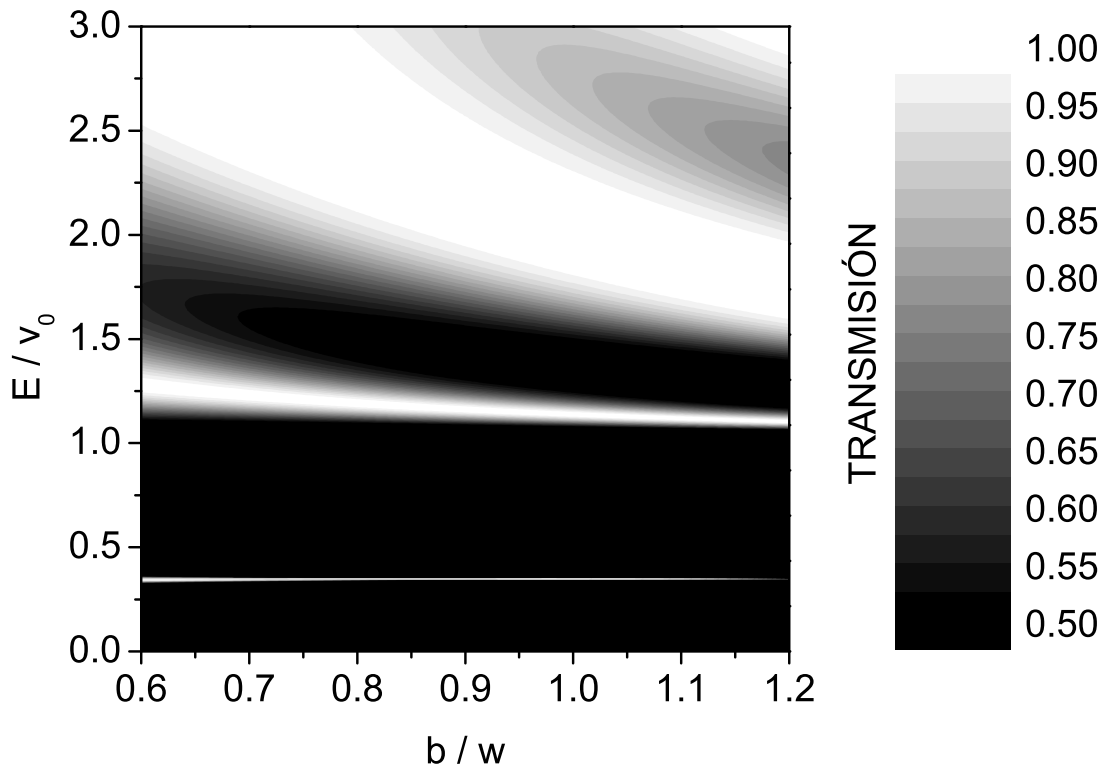


Figura 1.7: Transmisión de un sistema doble barrera simétrico como función de la energía y anchura de las barreras. Los parámetros son:  $w = 5 \text{ nm}$ ,  $v_0 = 0.23 \text{ eV}$  y  $m^* = 0.067 m_e$ .

demostramos tener otras posibilidades, por ejemplo:  $u = -v_0$ , generaría una resonancia con centro cercano a la mitad de la altura del potencial. La diferencia entre los sistemas con  $u = v_0/4$  y  $u = -v_0$ , es que el primero no tiene estados ligados y el segundo tiene un estado ligado, que corresponde a la “*absorción*” del primer estado resonante debido a la presencia del pozo. Note que, si extendemos la gráfica a valores  $u \geq v_0$  se pierde la resonancia en la región de tunelaje; en este caso las resonancias no son aisladas, provocando el comportamiento típico de la transmisión de una barrera cuadrada.

Por otro lado, podemos modificar también el ancho de las barreras o del pozo. En la figura 1.7 se muestra la transmisión de un conjunto de sistemas DB [fig. 1.1] variando simétricamente el ancho de las barreras ( $b_1 = b_2 = b$ ). En este caso, observamos que la resonancia aislada (primera resonancia) no se mueve mucho respecto a su centro, pero el ancho de la resonancia aumenta cuando el ancho de las barreras disminuye y viceversa.

Estos ejemplos muestran el comportamiento cualitativo de las resonancias del sistema en función de sus parámetros, *i.e.*, nos dan una idea cualitativa de cómo será la transmisión del sistema resonante. Entonces, dado un sistema podemos determinar qué parámetros modificar

## 1 Antecedentes I.

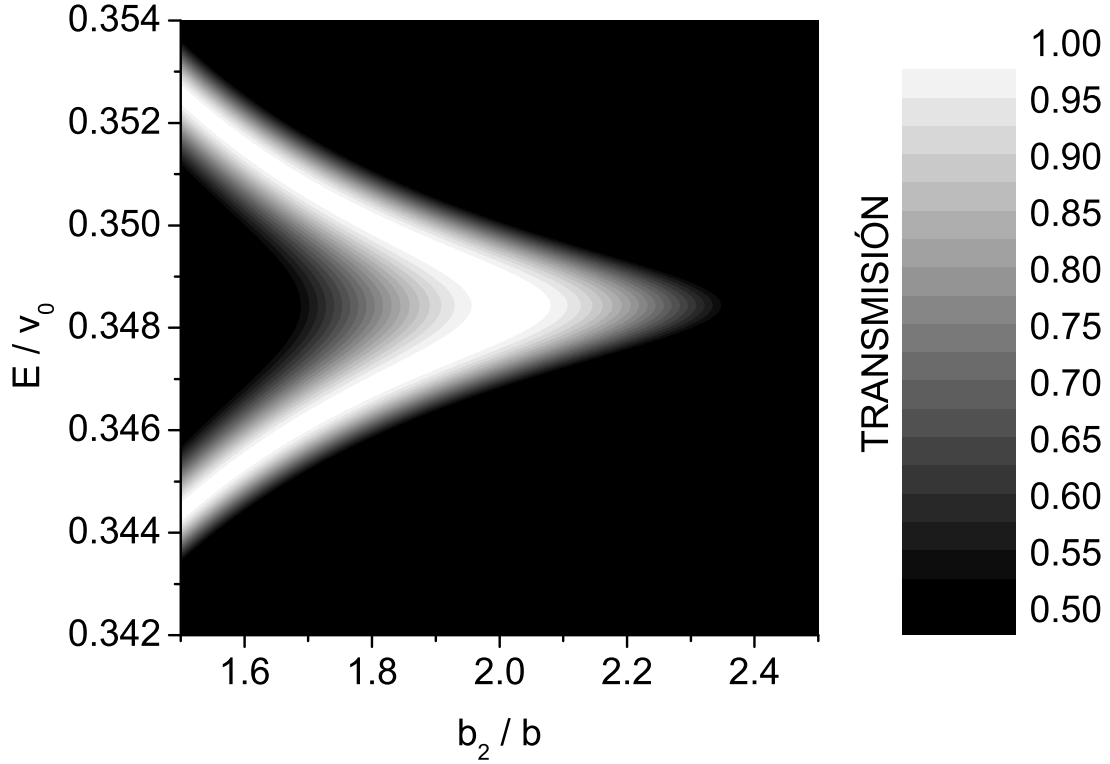


Figura 1.8: Se muestra la transmisión de un sistema triple barrera (TB) como función de la energía y el ancho de la barrera interna  $b_2$ . Los parámetros del sistema son:  $u = u_1 = u_2 = 0$ ,  $w = w_1 = w_2 = 5 \text{ nm}$ ,  $b = b_1 = b_3 = 5 \text{ nm}$ ,  $v_0 = v_1 = v_2 = v_3 = 0.23 \text{ eV}$  y  $m^* = 0.067 m_e$ .

para variar el centro y ancho de las resonancias aisladas.<sup>16</sup>

### 1.3. Efecto del traslape entre resonancias.

Como se mencionó anteriormente [Secc. 1.2], podemos construir un sistema con más de una resonancia aislada. Por ejemplo, si consideramos un sistema de tres barreras (TB), es posible conseguir que dos resonancias se encuentren con una energía menor a la altura del potencial; ya sean aisladas o no. En general, si suponemos que un sistema tiene  $n$  barreras, con los parámetros adecuados tendríamos  $n - 1$  resonancias (aisladas o traslapadas). Un ejemplo se puede ver en la referencia 29, donde se exhibe un sistema de 20 barreras con las primeras 19 resonancias aisladas. Una resonancia aislada se caracteriza por las resonancias vecinas, *i.e.*, si  $\varepsilon_n = \hbar^2 \kappa_n^2 / 2m = \epsilon_n - i\Gamma_n/2$  es la  $n$ -ésima resonancia, entonces  $\varepsilon_n$  es una resonancia aislada si  $|\varepsilon_n - \varepsilon_{n\pm 1}| \gg \Gamma_n$ ; lo que garantiza que la transmisión alrededor de energías  $E = \epsilon_n$

<sup>16</sup>En particular nos referimos a la primer resonancia aislada, aunque el resultado es válido para las demás resonancias; como se puede apreciar en las figuras 1.6 y 1.7.

se describa por una Lorentziana [4].<sup>17</sup>

Consideremos el caso particular de un sistema de tres barreras, en este caso distinguimos las anchuras de las barreras con subíndices. Los parámetros del sistema que consideramos son:  $b = b_1 = b_3 = 5 \text{ nm}$  (anchura de las barreras externas)  $w = w_1 = w_2 = 5 \text{ nm}$  (anchura de los pozos internos),  $v_0 = v_1 = v_2 = v_3 = 0.23 \text{ eV}$  (altura de las barreras), los pozos tiene profundidad cero. La gráfica de la transmisión como función de la energía  $E$  y anchura de la barrera interna  $b_2$  para la colección de sistemas triple barrera definido anteriormente se muestra en la figura 1.8; en este caso se consideran energías alrededor de las dos primeras resonancias. Note que en este caso, el comportamiento de la transmisión genera una “ventana” de transparencia para una anchura alrededor de  $b_2 \approx 2b$ ; esto se conoce como “*Strong overlap*” [13], y es debido a que las resonancias próximas tienen un término de interferencia constructivo; mientras que si aumentamos la anchura de la barrera interna  $b_2 > 2b$  se tiene una interferencia destructiva. También se observa en la gráfica que para valores  $b_2 < 2b$  las resonancias se aíslan. Esto se puede entender de la siguiente manera: cuando  $b_2 \approx b$  la distribución de resonancias es formada por dobletes que corresponden a cada pozo, pero las resonancias no son iguales, ya que las barreras externas están conectadas. Es por esta razón que en la figura 1.8 se tienen dos resonancias bien definidas para valores  $b_2 < 1.6b$ ; mientras que cuando  $b_2 \rightarrow \infty$  por simetría la resonancia del primer pozo es la misma que la resonancia del segundo pozo, esto genera una interferencia destructiva cuando  $b_2 \gg b$ , ya que la transmisión debe ser cero en el límite  $b_2 \rightarrow \infty$ . Note que este mismo efecto se puede conseguir si aumentamos la altura de la barrera interna, ya que por simetría, si hacemos  $v_2 \rightarrow \infty$  el conjunto de resonancias del lado derecho será igual al conjunto de resonancias del lado izquierdo, y no solamente la primer resonancia como en el caso anterior.

Un hecho sobre el efecto *Strong Overlap*, es que para un sistema óptico ha sido medido experimentalmente por Hooper *et al.*, [14]. Se puede comparar el resultado de Hooper *et al.*, con la figura 1.8, son cualitativamente idénticas.

Hacemos un último comentario sobre el sistema triple barrera: dado que es posible modificar el centro y ancho de la resonancia de un sistema [figs. 1.6, 1.7; págs. 14, 15] podemos hacer más grande la región de transmisión unidad [fig. 1.8]. Sin embargo, no podemos extender este efecto a una región lo suficientemente grande, por ejemplo, que sea del orden de tres veces la altura del potencial. Esto es porque al hacer anchas las resonancias estas sufren interferencia con resonancias lejanas, provocando en general una interferencia destructiva.

<sup>17</sup>En algunos casos podemos referirnos a una mini-banda aislada, donde, la transmisión es descrita por la suma e interferencia entre las Lorentzianas correspondientes a cada resonancia que forma la mini-banda [4].

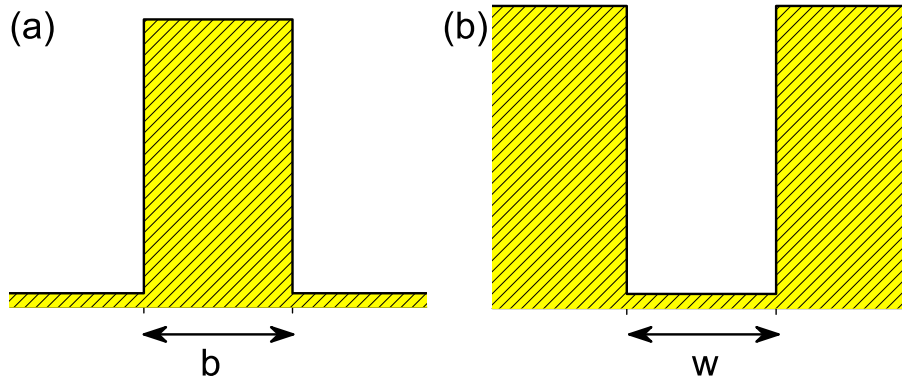


Figura 1.9: Se muestran esquemáticamente el perfil de los potenciales (a) barrera simple SB y (b) pozo simple SW.

## 1.4. Partícula libre, barrera y pozo simple.

En las secciones anteriores se han estudiado dos casos particulares que son: una resonancia aislada [Secc. 1.2; pág. 11] y el efecto *Strong Overlap* [Secc. 1.3; pág. 16]. Sin embargo, en nuestro trabajo de investigación buscamos sistemas que tengan alta probabilidad de transmitir, aún para energías cercanas al umbral ( $E \approx 0$ ). Por esta razón, es necesario definir qué es “*transparencia*”. Estrictamente hablando implica que  $T(E) = 1$  para todo valor de  $E$ . Sin embargo, tomar esta definición de transparencia nos llevaría a concluir inmediatamente que el único sistema transparente es *partícula libre*,<sup>18</sup> ya que, es fácil mostrar que para un potencial de alcance finito, por muy pequeña que sea su altura o profundidad se tendrá la condición  $T(0) = 0$ . Esto nos obliga a definir de forma diferente la transparencia y decir que: un sistema transparente es aquel que tiene una alta probabilidad de transmitir “*casi*” para todo el espectro de energía, excepto para valores de energía cercanas al umbral  $E \approx 0$ . Esto abre la posibilidad de considerar diversos sistemas, en esta sección analizaremos un par de ejemplos que son: barrera y pozo simple (SB, SW) [fig. 1.9], debido a que bajo ciertos parámetros la transmisión del SB está dominada por la contribución de un estado antiligado [15]. Veremos que ocurre lo mismo para un SW; sólo que para éste, la transmisión está dominada por su estado ligado.

La condición para que la transmisión del SB este dominada por un estado antiligado es  $\alpha = \sqrt{2mv/\hbar^2}b \ll 1$ , donde:  $\alpha$  es la opacidad de la barrera,  $v$  la altura y  $b$  la anchura de la

<sup>18</sup>Más adelante veremos que existen otros potenciales distintos de cero que satisfacen  $T(E) = 1$  para todos los valores de energía, incluyendo  $E = 0$ . Sin embargo, estos potenciales son extendidos en todo el espacio, por lo que el concepto de transmisión es asintótico, *i.e.*,  $x \rightarrow \infty$ .

barrera.<sup>19</sup> Esto implica que hay que tomar valores pequeños de  $v$  o  $b$ .<sup>20</sup> En lo que sigue de nuestro trabajo, no nos referimos a la opacidad del sistema, porque ésta se define sólo para una barrera de potencial y no para un pozo o sistema multi-barrera,<sup>21</sup> pero para tomar los parámetros apropiados en este ejemplo sí es útil. Consideremos el caso de una perturbación cuadrada de anchura  $L$  y altura  $v$ ,<sup>22</sup> la gráfica de la transmisión se muestra en la figura 1.10, variando la altura de la perturbación  $v$  desde  $v = -1$  eV (SW) hasta  $v = 1$  eV (SB) con anchura  $L = 0.4$  nm [fig. 1.10a] y variando la anchura de la barrera  $L$  con  $v = 0.23$  eV [fig. 1.10b]. La gráfica que llama más la atención es la figura 1.10a, ya que, cualitativamente se tendrá el mismo comportamiento aún para una perturbación de anchura mayor ( $L > 0.4$  nm); esto es debido a que en el caso  $v = 0$  se tiene el sistema *partícula libre*, y el cambio de la transmisión debe ser continuo excepto para  $E = 0$ .

Para el problema general donde la región de interacción es de 0 a  $L$ , se puede mostrar fácilmente que el coeficiente de transmisión está relacionado con la función de Green de onda saliente mediante  $t(k) = 2ikG^+(0, L; k)e^{-ikL}$  [5], ésta a su vez tiene desarrollo en resonancias (ver secc. 1.1 o el apéndice B); lo que nos lleva a una expresión cerrada del coeficiente de transmisión en resonancias dado por

$$t(k) = ik \sum_n \frac{r_n e^{-i\kappa_n L}}{\kappa_n (k - \kappa_n)}, \quad r_n = u_n(0)u_n(L), \quad (1.21)$$

donde la suma se hace sobre todos los polos de la función de Green que corresponden a los eigenvalores de los estados resonantes del sistema. Los estados resonantes como se menciono anteriormente satisfacen la ecuación de eigenvalores con condiciones a la frontera de onda saliente y para el caso de un potencial real se denotan por  $\kappa_n = \alpha_n - i\beta_n$  con índice positivo ( $n > 0$ ) los polos que se encuentran en el cuarto cuadrante del plano complejo  $k$  y por un argumento de inversión temporal se encuentra que los polos del tercer cuadrante se pueden denotar con índice negativo, satisfaciendo la relación  $\kappa_{-n} = -\kappa_n^*$  [Secc. 1.1; pág. 4]. Notemos que para el caso de una resonancia delgada y aislada la parte imaginaria del polo es casi cero ( $\beta_n \approx 0$ ), *i.e.*, se cumple que  $t(k) \approx 1$  si  $k \approx \alpha_n$ ; así  $\alpha_n/\kappa_n \approx 1$ , por lo que se tiene que cumplir  $ir_n e^{-i\kappa_n L}/(\alpha_n - \kappa_n) \approx 1$  para que se cumpla dicha condición. Esto nos lleva a una descripción de la transmisión cerca de resonancia como una forma Lorentziana. Por otro lado, si un estado ligado o antiligado cercano al umbral domina la transmisión tenemos que  $ir_n e^{-i\kappa_n L}/\kappa_n \approx 1$ , por lo que el término dominante del coeficiente de transmisión es [Ec. 1.21]

<sup>19</sup>Note que la opacidad de una barrera tipo delta siempre es cero y que la transmisión de un potencial delta repulsivo siempre está dominado por un estado antiligado. En otras palabras, pedir  $\alpha \ll 1$  acerca el comportamiento de una barrera a un potencial delta repulsivo.

<sup>20</sup>En este caso nos referimos a sistemas SB que satisfacen  $v < \infty$ , *i.e.*, se excluye el límite potencial delta.

<sup>21</sup>Un hecho interesante, es que el concepto de opacidad no se define para un sistema multi-barrera, ya que la definición de ésta cantidad proviene de la forma funcional de la transmisión de una barrera.

<sup>22</sup>Nos referimos a una perturbación cuadrada en forma general, *i.e.*, puede ser una barrera o un pozo como se muestra en la figura 1.9

1 Antecedentes I.

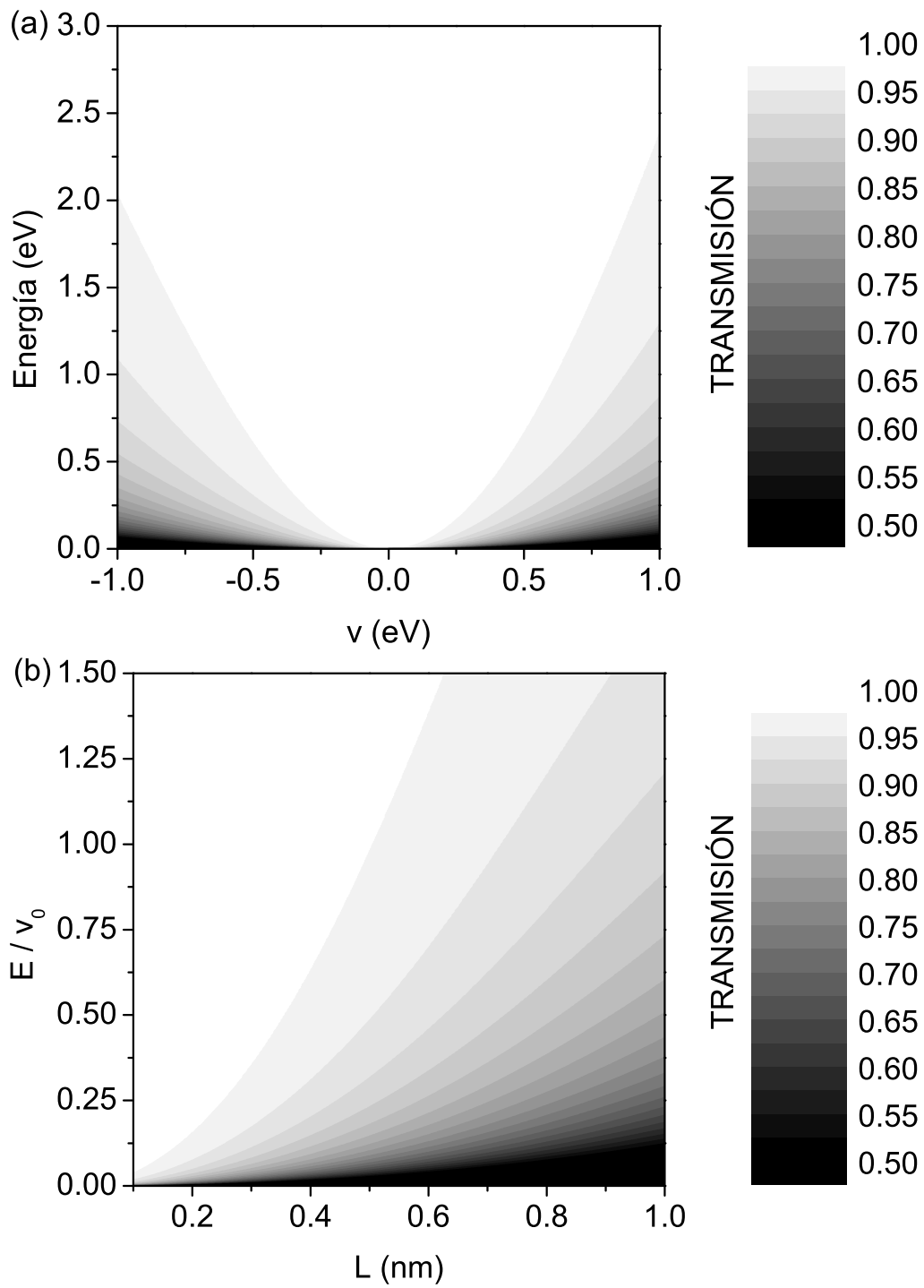


Figura 1.10: Transmisión de una perturbación cuadrada, (a) variando la altura  $v$  de la perturbación con anchura  $L = 0.4$ , (b) variando la anchura de la perturbación y altura  $v_0 = 0.23$ .

$$\mathbf{t}(k) \approx \frac{k}{k - \kappa_s}, \quad T(E) = |\mathbf{t}(k)|^2 = \frac{1}{1 + (|E_s|/E)}, \quad (1.22)$$

donde denotamos con el subíndice  $s$  al estado ligado o antiligado  $\kappa_s = i\gamma_s$  con  $\gamma_s$  real. Note que en este caso  $T(E) = |\mathbf{t}(k)|^2 \rightarrow 1$  cuando  $k \rightarrow \infty$ ; por lo que el término correspondiente al estado ligado o antiligado cercano al umbral domina en todo el espectro de energía y coincide con el comportamiento cualitativo de la transmisión [fig. 1.10a].<sup>23</sup> La ecuación (1.22) es válida para un SB, cuando la transmisión es dominada por un estado antiligado [15]. Desde este punto de vista hemos mostrado que el resultado es válido si se tratara de un SW, ya que la única diferencia es que dominaría un estado ligado.

El comportamiento de la transmisión  $T = |\mathbf{t}(k)|^2$  a partir de (1.22) es una función creciente; esto nos permite encontrar una condición para la cual  $T(E) > T_0 \neq 1$  si  $E > E_0$ , ésta es

$$E_0 = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{1}{T_0} - 1 \right) \gamma_s^2. \quad (1.23)$$

El caso que nos interesa para este trabajo es cuando  $E_0 \ll v_0$ , donde  $v_0 = |v|$ . Es fácil ver a partir de (1.23) que esta condición se cumple cuando  $\gamma_s \approx 0$ , *i.e.*, una condición necesaria es tener un estado ligado o antiligado cercano al umbral.

Por otro lado, si tomamos el límite  $v_0 \rightarrow 0$  (partícula libre); se tiene que la relación entre el coeficiente de transmisión y la función de Green es la misma, *i.e.*, la función de Green de onda saliente libre tiene un polo en  $k = 0$ . Es por esta razón que  $\mathbf{t}(0) = 1$  (partícula libre). Si comparamos este resultado con (1.22), notamos que esencialmente se tiene una función de Green con un polo en  $k = \kappa_s$ , por lo que, si  $\kappa_s \rightarrow 0$  es natural pensar que el sistema debe tender asintóticamente al de partícula libre; siempre y cuando la contribución de las demás resonancias sea despreciable. Esto se observa en la figura 1.10a.

## 1.5. El potencial Pöschl–Teller.

Un potencial que bajo ciertas condiciones satisface ser transparente, *i.e.*,  $T(E) = 1$  para todo valor  $E \geq 0$ , es el conocido potencial Pöschl–Teller (PT), definido como [20]

<sup>23</sup>Note que la forma funcional del coeficiente de transmisión es parecida al coeficiente de transmisión de un potencial delta ( $L = 0$ ), *i.e.*, se diferencian por un factor de fase, el cual no es importante al calcular la transmisión del sistema  $T = |\mathbf{t}(k)|^2$ , en este sentido la barrera o pozo simple pierden la estructura resonante.

## 1 Antecedentes I.

$$v(x) = \frac{v_0}{\cosh^2(x/d)}. \quad (1.24)$$

El perfil de este potencial se muestra en la figura 1.11a para el caso  $v_0 > 0$  (PT barrera) y 1.11b para el caso  $v_0 = -u_0 < 0$  (PT pozo). La ecuación de eigenvalores correspondiente al problema es

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi_k(x) + \left( E - \frac{v_0}{\cosh^2(x/d)} \right) \psi_k(x) = 0, \quad (1.25)$$

donde  $\psi_k(x)$  son las soluciones estacionarias y  $E = \hbar^2 k^2 / 2m$  es la energía asociada a la solución.

Para encontrar la soluciones estacionarias se multiplica por  $2m/\hbar^2$  y se propone el cambio de variable  $\xi = \tanh(x/d)$ , con lo que obtenemos la ecuación adimensional

$$(1 - \xi^2)\psi'' - 2\xi\psi' + \left[ \frac{(kd)^2}{1 - \xi^2} - (k_0d)^2 \right] \psi = 0, \quad (1.26)$$

donde  $k_0^2 \equiv 2mv_0/\hbar^2$ . Note que, la nueva variable  $\xi$  sólo toma valores en el intervalo  $(-1, 1)$ , por lo que, cuando  $\xi \rightarrow \pm 1$  la ecuación (1.26) divergerá, a menos que  $\psi \sim (1 - \xi^2)$ . Esto sugiere proponer una solución de la forma  $\psi(\xi) = (1 - \xi^2)^{s/2} w(\xi)$ , así, la ecuación (1.26) se simplifica cuando

$$s^2 + (kd)^2 = 0; \quad s = \pm ikd, \quad (1.27)$$

y la función  $w(\xi)$  satisface la ecuación

$$(1 - \xi^2)w'' - 2\xi(s + 1)w' - \left[ s(s + 1) + (k_0d)^2 \right] w = 0, \quad (1.28)$$

la cual se puede identificar con la ecuación hipergeométrica, vía el cambio de variable  $u = \frac{1}{2}(1 - \xi)$  (note que  $0 < u < 1$ ) dando

$$u(1 - u)w'' + (1 - 2u)(s + 1)w' - \left[ s(s + 1) + (k_0d)^2 \right] w = 0, \quad (1.29)$$



## 1.5 El potencial Pöschl–Teller.

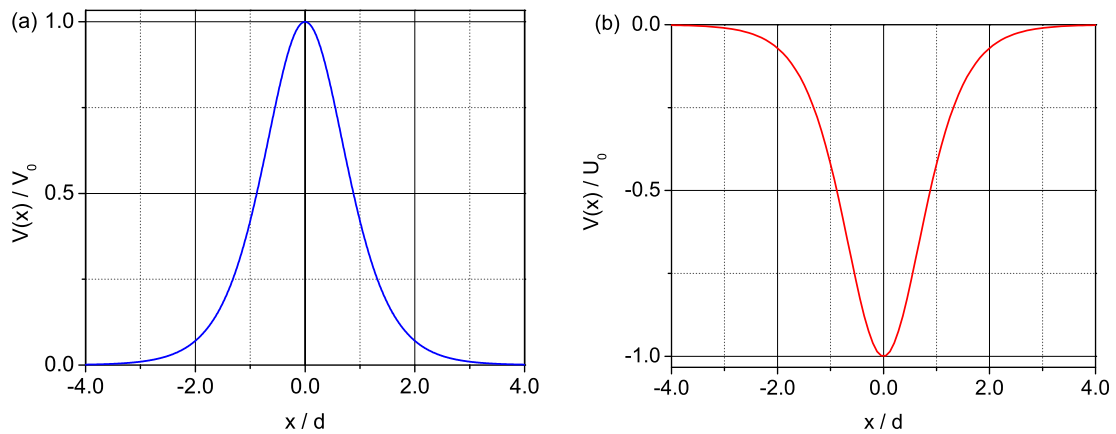


Figura 1.11: Se muestra el perfil del potencial PT definido en la ecuación 1.24 para (a) la barrera y (b) el pozo.

con soluciones regulares

$$w(u) = {}_2F_1(a_{\pm}, b_{\pm} : c, u), \quad (1.30)$$

donde

$$a_{\pm} = -ikd + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \sqrt{1 - (2k_0d)^2}, \quad (1.31a)$$

$$b_{\pm} = -ikd + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{1 - (2k_0d)^2}, \quad (1.31b)$$

$$c = -ikd + 1, \quad (1.31c)$$

$$u = \frac{1}{2} (1 - \xi). \quad (1.31d)$$

Provee sólo una solución, ya que  $a_+ = b_-$  y la función hipergeométrica satisface [30]

$${}_2F_1(a, b : c, u) = {}_2F_1(b, a : c, u), \quad (1.32)$$

por lo tanto la solución es

## 1 Antecedentes I.

$$\psi_k(x) = \left( \frac{1}{\cosh(x/d)} \right)^{\pm ikd} {}_2F_1 \left( a, b : c, \frac{1}{2} \left[ 1 - \tanh(x/d) \right] \right), \quad (1.33)$$

donde se ha eliminado el subíndice de los coeficientes  $a$  y  $b$  puesto que el intercambio de éstos no afecta la solución (ver ecuación 1.30 las definiciones 1.31a y 1.31b, y la relación 1.32) y se ha sustituido la relación  $1 - \xi^2 = 1/\cosh^2(x/d)$  con  $\xi = \tanh(x/d)$ .

Cuando  $x \rightarrow \pm\infty$  es fácil ver que el coeficiente de la función hipergeométrica toma el valor  $2^{\pm ikd} e^{\mp ik|x|}$ , por lo que, si consideramos soluciones con condición de incidencia de izquierda a derecha, entonces, el comportamiento adecuado para  $x \rightarrow \infty$  es  $e^{ikx}$ , por lo que, dicha solución está dada por

$$\psi_k(x) = \left( \frac{1}{\cosh(x/d)} \right)^{-ikd} {}_2F_1 \left( a, b : c, \frac{1}{2} \left[ 1 - \tanh(x/d) \right] \right). \quad (1.34)$$

En el mismo límite ( $x \rightarrow \infty$ ) encontramos que  $\tanh(x/d) \rightarrow 1$ , por lo que la función toma el valor

$${}_2F_1(a, b : c, 0) = 1. \quad (1.35)$$

Así, el comportamiento asintótico ( $x \rightarrow \infty$ ) de nuestra solución es

$$\psi_k(x) \sim 2^{-ikd} e^{ikx}, \quad x \rightarrow \infty. \quad (1.36)$$

Cuando  $x \rightarrow -\infty$ , se tiene que  $\tanh(x/d) \rightarrow -1$ , por lo que, es necesario evaluar la función hipergeométrica en el punto  $u = 1$ ; esto se consigue usando la continuación analítica de la función, dada por [30]

$$\begin{aligned} {}_2F_1(a, b : c, u) &= \frac{\Gamma(c)\Gamma(c-a-b)}{\Gamma(c-a)\Gamma(c-b)} {}_2F_1(a, b : a+b-c+1, 1-u) + \\ &+ (1-u)^{c-a-b} \frac{\Gamma(c)\Gamma(a+b-c)}{\Gamma(a)\Gamma(b)} \times \\ &\times {}_2F_1(c-a, c-b : c-a-b+1, 1-u). \end{aligned} \quad (1.37)$$

El comportamiento asintótico de la función en el límite  $x \rightarrow -\infty$  es

$$\begin{aligned} \psi_k(x) \sim & \frac{2^{-ikd}\Gamma(-ikd+1)\Gamma(ikd)}{\Gamma[(-2ikd+1-\sqrt{1-(2k_0d)^2})/2]\Gamma[(-2ikd+1+\sqrt{1-(2k_0d)^2})/2]}e^{ikx} + \\ & + \frac{2^{-ikd}\Gamma(-ikd+1)\Gamma(ikd)}{\Gamma[(1+\sqrt{1-(2k_0d)^2})/2]\Gamma[(1+\sqrt{1-(2k_0d)^2})/2]}e^{-ikx}; \quad x \rightarrow -\infty. \end{aligned} \quad (1.38)$$

Este comportamiento permite encontrar las amplitudes de reflexión y transmisión, para esto dividimos la ecuación por el factor que multiplica a  $e^{ikx}$  en (1.38), e identificando la forma  $e^{ikx} + \mathbf{r}(k)e^{-ikx}$  para la región de reflexión [Ec. 1.38] y  $\mathbf{t}(k)e^{ikx}$  en la región de transmisión [Ec. 1.36], se encuentra

$$\begin{aligned} \mathbf{r}(k) = & \frac{\Gamma(ikd)}{\pi\Gamma(-ikd)} \cos\left(\frac{1}{2}\pi\sqrt{1-(2k_0d)^2}\right) \Gamma[(-2ikd+1-\sqrt{1-(2k_0d)^2})/2] \times \\ & \times \Gamma[(-2ikd+1+\sqrt{1-(2k_0d)^2})/2], \end{aligned} \quad (1.39)$$

$$\mathbf{t}(k) = \frac{\Gamma[(-2ikd+1-\sqrt{1-(2k_0d)^2})/2]\Gamma[(-2ikd+1+\sqrt{1-(2k_0d)^2})/2]}{\Gamma(-ikd+1)\Gamma(-ikd)}. \quad (1.40)$$

La reflexión  $R(k) = |\mathbf{r}(k)|^2$  y transmisión  $T(E) = |\mathbf{t}(k)|^2$  están dadas por

$$R(k) = \frac{\cos^2(\frac{1}{2}\pi\sqrt{1-(2k_0d)^2})}{\sinh^2(\pi kd) + \cos^2(\frac{1}{2}\pi\sqrt{1-(2k_0d)^2})}, \quad (1.41)$$

$$T(E) = \frac{\sinh^2(\pi kd)}{\sinh^2(\pi kd) + \cos^2(\frac{1}{2}\pi\sqrt{1-(2k_0d)^2})}, \quad (1.42)$$

respectivamente.

Cabe mencionar que el concepto de transmisión y reflexión para este tipo de potencial es asintótico, *i.e.*, la solución sólo tiene el comportamiento  $\psi_k(x) \sim \mathbf{t}(k)e^{ikx}$  (región de transmisión) sólo cuando  $x \rightarrow \infty$ , debido a que el potencial es extendido en todo el espacio.

### 1.5.1. El pozo transparente.

Observamos a partir de la forma funcional de la reflexión (1.41) y transmisión (1.42) que para el caso particular de un pozo  $v_0 = -u_0$ , el numerador de la reflexión se anula cuando se satisface

$$1 - (2k_0d)^2 = (2n + 1)^2. \quad (1.43)$$

Esto proporciona una infinidad de valores  $u_0$  que satisfacen la condición  $T(E) = 1$  para todo valor  $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ , incluyendo el valor  $E = 0$ . Recordemos que por definición  $k_0^2 = 2mv_0 / \hbar^2 = -2mu_0 / \hbar^2$  dando la relación

$$u_0^n = \frac{\hbar^2}{2md^2} n(n + 1). \quad (1.44)$$

Note que, los casos particulares  $n = 0, -1$  corresponden al de partícula libre  $u_0^n = 0$ . Sin embargo, la amplitud de transmisión  $t(k)$  [Ec. 1.40] cuando se satisface la condición (1.43) toma el valor

$$\begin{aligned} t(k) &= \frac{\Gamma(-ikd - n)\Gamma(-ikd + n + 1)}{\Gamma(-ikd)\Gamma(-ikd + 1)} = \\ &= (-1)^{n+1} \frac{n - ikd}{n + ikd} \frac{\Gamma(ikd)\Gamma(n - ikd)}{\Gamma(-ikd)\Gamma(n + ikd)} = e^{i\theta(k)}, \end{aligned} \quad (1.45)$$

donde se usa la relación

$$\Gamma(z)\Gamma(-z) = -\frac{\pi}{z \sin(\pi z)}, \quad (1.46)$$

para encontrar la segunda igualdad y donde  $\theta(k)$  es una fase, en general distinta de cero. Es posible calcular analíticamente la fase  $\theta(k)$  cuando  $n > 0$ ; usando la relación

$$\Gamma(z + n) = z(z + 1)(z + 2) \cdots (z + n - 1)\Gamma(z), \quad (1.47)$$

permite reescribir la amplitud de transmisión como

$$\mathbf{t}(k) = (-1)^{n+1} \prod_{j=0}^n \frac{-ikd + j}{ikd + j} = e^{in\pi} \prod_{j=1}^n e^{-2i\alpha_j(k)}, \quad (1.48)$$

donde  $\alpha_j(k) = \arctan(kd/j)$ , es la fase del complejo  $ikd + j$ . Por lo tanto se tiene

$$\theta(k) = n\pi - 2 \sum_{j=1}^n \alpha_j(k). \quad (1.49)$$

Note que, cuando  $k \rightarrow \infty$  se tiene que  $\theta(k) \rightarrow 0$ , resultado que está en concordancia con lo esperado físicamente para un potencial de alcance finito arbitrario, ya que, partículas muy energéticas no sienten la presencia del potencial. La ecuación (1.49) muestra que, aún bajo la condición de transparencia el potencial Pöschl–Teller modifica la fase del paquete transmitido, por lo que, experimentalmente se podrá distinguir entre una partícula libre con otra que interactúe con el potencial. Sin embargo, al considerar un potencial Pöschl–Teller de alcance finito, *i.e.*, cortar el potencial para que éste esté extendido en una región finita del espacio, se obtiene la condición de transparencia para el cual su fase es prácticamente cero [31]; esto es debido a que al cortar el potencial éste adquiere todas las propiedades analíticas de una barrera o pozo cuadrado. Además, esto hace robusto el efecto de la transparencia del potencial, *i.e.*, no sólo valores exactos en los parámetros proveen la transparencia del potencial.

### 1.5.2. La barrera transparente.

Aunque en el caso de la barrera  $v_0 > 0$  no es posible encontrar la condición  $T(E) = 1$  para todo valor  $E = \hbar^2 k^2 / 2m$  incluyendo  $E = 0$ . Es posible encontrar la condición  $T(E) \approx 1$  para todo valor de la energía  $E$ , excepto para energías cercanas al umbral ( $E \approx 0$ ). Esta condición es sugerida por el resultado encontrado en la sección 1.4 para la barrera cuadrada, *i.e.*, buscar potenciales que satisfagan tener una opacidad  $\alpha = \sqrt{2mv_0/\hbar^2}d$  muy pequeña  $\alpha \ll 1$ , por lo tanto, si se considera  $(2k_0d)^2 = 4\alpha^2 \ll 1$  podemos aproximar el término  $\sqrt{1 - (2k_0d)^2} \approx 1 - 2\alpha^2$ , y simplificar la expresión de la transmisión como

$$\begin{aligned} \mathbf{t}(k) &\approx \frac{kd - i\alpha^2}{kd} \frac{\Gamma(\alpha^2 - ikd)\Gamma[-(\alpha^2 + ikd)]}{\Gamma^2(-ikd)} = \\ &= \frac{\Gamma(\alpha^2 - ikd)\Gamma(1 + ikd)}{\Gamma(\alpha^2 + ikd)\Gamma(1 - ikd)} \frac{\sinh(\pi kd)}{\cos(\pi\alpha^2) \sinh(\pi kd) - i \sin(\pi\alpha^2) \cosh(\pi kd)}, \quad (1.50) \end{aligned}$$

expresión que muestra que la fase no es cero. Por otro lado, usando la misma aproximación en la ecuación (1.42) se obtiene

## 1 Antecedentes I.

$$T(E) \approx \frac{\sinh^2(\pi kd)}{\sinh^2(\pi kd) + \sin^2(\pi \alpha^2)}, \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}; \quad (1.51)$$

resultado que se obtiene fácilmente a partir de (1.50).

El resultado que queremos enfatizar de este análisis es que la amplitud de transmisión se puede escribir como

$$\mathbf{t}(k) \approx \frac{\sinh(\pi kd)}{\sinh(\pi kd) + i \sin(\pi \alpha^2)} e^{i\varphi(k)}, \quad (1.52)$$

donde  $\varphi(k)$  es una fase que ajusta la fase de la expresión (1.50). Además, es fácil ver que la amplitud tiene un estado antiligado cercano al umbral, dado por  $kd = -i\alpha^2$ , esto nos recuerda el caso de la barrera visto anteriormente. Por lo que podemos concluir que el Pöschl–Teller transparente tiene propiedades analíticas semejantes a las de una barrera cuadrada transparente, por lo tanto, el estudio que realizamos con barreras cuadradas no resta generalidad de la forma del potencial. Es conveniente mencionar que el potencial Pöschl–Teller está extendido en todo el espacio, sin embargo, al modelar un potencial de alcance finito con este tipo de potenciales es necesario cortarlo en algún punto, por lo que éste adquirirá todas las propiedades analíticas de una barrera o pozo cuadrado.

## 1.6. Tiempo de permanencia (dwell time).

El tiempo de permanencia o *dwell time* se define como [32]

$$\tau_d(E) \equiv \frac{1}{J_0} \int_0^L |\psi(x; E)|^2 dx, \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad (1.53)$$

donde  $J_0 = \hbar k/m$  es el flujo incidente. Esta cantidad mide el tiempo que permanece la partícula dentro del potencial y la podemos escribir en unidades del tiempo que le llevaría a la partícula recorrer la distancia  $L$  libremente ( $\tau_0 = L/J_0$ ). Esto nos permite comparar fácilmente el tiempo que le tomará a una partícula atravesar la región del potencial.

Es posible encontrar una expresión analítica de la integral [33–35]. Partiendo de la ecuación de Schrödinger

$$(H - E)\psi(x; E) = 0. \quad (1.54)$$

## 1.6 Tiempo de permanencia (dwell time).

Derivamos respecto a  $E$  para encontrar

$$(H - E)\dot{\psi}(x; E) - \psi(x; E) = 0, \quad \dot{\psi}(x; E) \equiv \frac{\partial \psi(x; E)}{\partial E}, \quad (1.55)$$

multiplicamos por  $\dot{\psi}(x; E)$  al conjugado de la ecuación (1.54) y por  $\psi^*(x; E)$  a la ecuación (1.55), restamos las ecuaciones y obtenemos

$$|\psi(x; E)|^2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial}{\partial x} \left[ \psi^*(x; E) \frac{\partial \dot{\psi}(x; E)}{\partial x} - \dot{\psi}(x; E) \frac{\partial \psi^*(x; E)}{\partial x} \right]. \quad (1.56)$$

Esta relación nos permite encontrar el valor de la integral en términos de la función y su derivada en las fronteras [33–35]. Así, el tiempo de permanencia  $\tau_d$  en unidades del tiempo libre  $\tau_0$  se escribe como

$$\frac{\tau_d}{\tau_0} = \frac{1}{L} \int_0^L |\psi(x; E)|^2 dx = T + \frac{1}{L} \left[ T \frac{\partial \theta}{\partial k} + R \frac{\partial \phi}{\partial k} + R^{1/2} \frac{\sin \phi}{k} \right], \quad (1.57)$$

donde  $\mathbf{t} = T^{1/2} e^{i\theta}$  y  $\mathbf{r} = R^{1/2} e^{i\phi}$  son las amplitudes de transmisión y reflexión del problema respectivamente. Esta igualdad es importante, puesto que relaciona el tiempo de permanencia  $\tau_d$  con los tiempos fase  $\tau_\theta$  de la transmisión y  $\tau_\phi$  de la reflexión, *i.e.*,

$$\tau_d \sim T\tau_\theta + R\tau_\phi, \quad \tau_\theta = \hbar \frac{\partial \theta}{\partial E}, \quad \tau_\phi = \hbar \frac{\partial \phi}{\partial E}. \quad (1.58)$$

Además, dicha relación muestra que para una resonancia aislada ( $T = 1$ ), el tiempo de permanencia es igual al tiempo fase de transmisión, ya que, bajo dicha condición se satisface  $\tau_d/\tau_0 \gg 1$ ; resultado que es válido para una resonancia aislada.

Es conveniente decir que, la definición del tiempo de permanencia, así como los tiempos fases son conceptos monocromáticos, *i.e.*, sólo se aplican a estados estacionarios. Por lo que, medir el tiempo de permanencia se limita únicamente al caso monocromático. Además, podemos decir que si  $T \approx 1$  y  $\tau_d/\tau_0 \approx 1$  entonces  $\theta$  es constante, *i.e.*, el tiempo de permanencia es una medida indirecta del comportamiento de la fase, y por tanto, es una medida de la invisibilidad del sistema. Cabe mencionar que cuando  $E \rightarrow \infty$  se tendrá  $\tau_d/\tau_0 \rightarrow 1$  y  $\theta \rightarrow 0$ , por lo que, si  $T \approx 1$  y  $\tau_d/\tau_0 \approx 1$  para todo valor de  $E$ , entonces  $\theta \approx 0$ , *i.e.*, el potencial no afecta la fase de la onda transmitida cuando ésta es muy energética  $E \gg v_0$ .

## 1.7. Condiciones de invisibilidad.

En este capítulo se ha realizado una revisión de algunos sistemas con características diferentes: el comportamiento cualitativo de una resonancia aislada [fig. 1.6, pág. 14], el efecto *Strong Overlap* debido a la interferencia constructiva entre dos resonancias [fig. 1.8, pág. 16] [13] y finalmente el efecto de un estado ligado o antiligado que domina la transmisión para un barrera o pozo cuadrado [fig. 1.10, pág. 20] [15]. Estos ejemplos nos permiten dar ideas generales de como es el coeficiente de transmisión para un sistema multi-barrera.

Algo importante que aprendimos en las secciones 1.2 y 1.3 es el comportamiento cualitativo de las energías de resonancia  $\varepsilon_n = \epsilon_n - i\Gamma_n/2$  (centro  $\epsilon_n$  y ancho  $\Gamma_n$ ) como función de los parámetros del sistema (alturas y anchuras del potencial), esto es importante puesto que es una guía de como crear o modificar un sistema que tenga una transmisión deseada. Dentro de la revisión que se hizo destaca el efecto del estado ligado o antiligado para un SW o SB respectivamente, esto es, porque dichos sistemas al poseer un estado ligado o antiligado cercano al umbral se ajustan a nuestra definición de transparencia.

Para el cálculo de la transmisión se emplea generalmente el *formalismo de la matriz de transferencia* [Ap. A]. Sin embargo, también se cuenta con un formalismo alternativo que es llamado *formalismo de estados resonantes* [Secc. 1.1; pág. 4].<sup>24</sup> Éste último, tiene la virtud de que es un enfoque analítico (ver por ejemplo la ecuaciones 1.21, 1.22), lo que permite resolver la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo [11, 12, 28, 36, 37]; algo que desde el punto de vista del formalismo de matriz de transferencia es complicado.<sup>25</sup>

Si se tratara de un sistema multi-barrera, el enfoque de matriz de transferencia da por lo regular, sólo la solución en forma numérica. Por esta razón es necesario entender cuales son las condiciones analíticas de transparencia para un sistema, ya que, en general siempre es mejor tener un enfoque analítico de un problema, porque éste nos permitirá entender cual es el papel que juegan los parámetros del sistema.

Esto sugiere que debemos tener cuidado al definir qué sistema es *invisible*. Para esto definimos primero lo que es un sistema *transparente*, estos se definieron anteriormente usando resultados numéricos, *i.e.*, a partir de los resultados con matriz de transferencia. Así,

1 DEFINICIÓN. — *Un sistema es transparente si satisface:*

$$i - T(E) > T_0 \approx 1 \text{ para todo valor } E > E_0, \text{ y}$$

<sup>24</sup>vea también el apéndice B.

<sup>25</sup>Cuando son considerados los efectos transitorios en el tunelaje, típicamente se hace para sistemas simples como SB o SW o potenciales delta [vea por ejemplo las referencias 38, 39, 40]. Sin embargo, al considerar sistemas más complejos como DB o TB se recurre típicamente a emplear un método numérico [41, 42].



- ii -  $E_0 \ll v_0$  con  $v_0 = \max\{|v|\}$ , donde  $v$  son los valores de alturas y/o profundidades del potencial.

Así, la figura 1.10a (pág. 20) muestra una colección de sistemas que satisfacen dicha propiedad; proporciona un ejemplo de sistemas transparentes, *i.e.*, tenemos que buscar sistemas que tengan un comportamiento cualitativo a un SB o SW transparente.

Desde el punto de vista analítico (resonancias del sistema), veamos cuales son las propiedades. En la sección 1.4 (pág. 18) vimos que la transmisión está dominada por un estado ligado o antiligado cercano al umbral; por lo que si queremos que un sistema sea cualitativamente igual a un SB o SW transparente, es necesario que éste tenga un estado ligado o antiligado cercano al umbral de energías ( $E \approx 0$ ). Pero no puede ser la única propiedad, ya que por ejemplo, uno de los sistemas mostrado en la figura 1.6 (pág. 14) tiene un estado ligado o antiligado<sup>26</sup> cercano al umbral; éste se obtiene si se considera la profundidad del pozo aproximadamente en  $u \approx -0.5v_0$  [fig. 1.6, pág. 14]. Como podemos observar la resonancia se hace más delgada y después es absorbida por el potencial, entonces, ¿cuál es la otra propiedad?, veamos que pasa en el caso de SB: dado que la anchura de la perturbación es pequeña ( $L = 0.4 \text{ nm}$ ) tenemos que las resonancias son anchas; como en el ejemplo de la figura 1.7 (pág. 15), se hizo delgada la anchura de las barreras provocando que las resonancias se ensancharan, por lo tanto una propiedad es que tenga resonancias anchas. Hablando estrictamente necesitamos que las resonancias sufran un traslape fuerte entre ellas.<sup>27</sup> Además, si deseamos que la transmisión este dominada por el estado ligado o antiligado cerca del umbral es necesario que se cumpla  $ir_s e^{-i\kappa_s L} / \kappa_s \approx 1$ , esto garantiza que la transmisión se describa mediante (1.22). Así, las propiedades analíticas de un sistema transparente son:

1 PROPIEDADES. – *Un sistema transparente tiene las siguientes propiedades:*

- i - *Un estado ligado o antiligado ( $\kappa_s$ ) cercano al umbral, *i.e.*,  $\varepsilon_s \approx 0$ .*
- ii - *Resonancias anchas, *i.e.*,  $|\varepsilon_n - \varepsilon_{n\pm 1}| < \Gamma_n$ , donde  $\varepsilon_n = \epsilon_n - i\Gamma_n/2$  es la  $n$ -ésima energía de resonancia.*
- iii - *El residuo  $r_s$  correspondiente al estado ligado o antiligado ( $\kappa_s$ ) cercano al umbral satisface  $ir_s e^{-i\kappa_s L} / \kappa_s \approx 1$ .*

<sup>26</sup>En general, una resonancia se acerca al eje imaginario con parte negativa, *i.e.*, se convierte en un estado antiligado. Sin embargo, la figura 1.6 muestra que la resonancia se hace cada vez más delgada, esto produce que el estado resonante se pegue al eje imaginario cerca del umbral. No podemos garantizar sin hacer un cálculo que éste sea un estado ligado o antiligado, pero por el momento sólo se da una descripción cualitativa.

<sup>27</sup>veremos más adelante que las resonancias para estos sistemas satisfacen tener el comportamiento asintótico de un sistema arbitrario, y una de las propiedades que caracteriza este comportamiento es el traslape fuerte entre resonancias; que en general da una interferencia destructiva como se vio en la sección 1.3, provocando que la contribución de estas sea despreciable.

## 1 Antecedentes I.

Desde el punto de vista físico, es más fácil intuir qué sistemas satisfacen dichas propiedades y no de la definición de transparencia a partir de la matriz de transferencia. Sin embargo, determinar que tan cercano es el estado ligado o antiligado al umbral, o que tan lejanas deben ser las resonancias no es un problema trivial.

Ahora que hemos definido que es un sistema transparente, estamos en condición de definir en nuestro contexto lo que es un sistema invisible, esto es:

2 DEFINICIÓN. — *Un sistema es invisible si satisface:*

- i.- *Ser transparente.*
- ii.- *El tiempo de permanencia ( $\tau_d$ ) es igual al tiempo libre ( $\tau_0$ ) que le llevaría recorrer a la partícula una distancia igual a la región de interacción.*

Dado que el tiempo de permanencia es una medida indirecta del cambio de fase que sufre la función de onda, esta definición implica que el pozo Pöschl–Teller analizado en la subsección 1.5.1 no es invisible, ya que el cambio de fase [Ec. 1.49] tiende a cero sólo cuando  $E \rightarrow \infty$ . Sin embargo, recordemos que al cortar el potencial Pöschl–Teller, éste adquiere todas las propiedades analíticas de un potencial de alcance finito, por lo cual, se podrán encontrar los parámetros adecuados para que dichos potenciales satisfagan la condición de invisibilidad y no sólo la de transparencia que ha sido exhibida anteriormente [Ec. 1.44].

## 2 Sistemas compuestos.

En el capítulo anterior [Secc. 1.4; pág. 18] exhibimos que bajo ciertos parámetros (anchuras y alturas) de los potenciales SB y SW la transmisión está dominada por un estado ligado o antiligado ( $\kappa_s$ ) con energía cercana al umbral, *i.e.*,  $\varepsilon_s = \hbar^2 \kappa_s^2 / 2m \approx 0$ ; esto nos permitió definir dentro de nuestro contexto la *transparencia* en sistemas cuánticos. Una pregunta que inmediatamente nos llega a la mente es ¿existen *sistemas compuestos* que satisfagan dichas condiciones?,<sup>1</sup> donde entendemos por *sistema compuesto* a un potencial formado por algunas barreras y/o pozos, tales como sistemas doble, triple o cuádruple barrera.

En este capítulo abordamos el estudio de la transparencia en sistemas compuestos, pensamos que una primer extensión de manera natural es considerar como sistema compuesto a un potencial doble barrera, por lo cual iniciamos nuestro estudio con un par de sistemas que son: barrera y pozo doble (DB, DW, respectivamente) [Secc. 2.1]. Se muestra que existe un conjunto de parámetros para los cuales el DB y el DW satisfacen la condición de transparencia.<sup>2</sup> Esto nos lleva a pensar que se pueden crear sistemas transparentes compuestos; por lo que convenimos una notación para referirnos de forma precisa a cada sistema [Secc. 2.2]; ésta nos permite no sólo escribir de forma compacta al sistema, sino también crear una imagen de cómo es el mismo. Finalizamos el capítulo analizando la distribución de polos de algunos sistemas considerados [Secc. 2.3]; esto nos permite generalizar algunas propiedades y lo más importante crear nuevos sistemas transparentes a partir de uno o varios sistemas transparentes o cuasi-transparentes.<sup>3</sup> Se muestra numéricamente que la unión de dos sistemas puede ser transparente aunque cada uno por separado no lo sea.

---

<sup>1</sup>En este punto, es importante mencionar que el estudio del efecto de un estado antiligado sobre la transmisión [15] es la primer evidencia teórica de la existencia de sistemas transparentes. Sin embargo, esto se obtiene considerando alturas (y/o profundidades) y anchuras muy pequeñas por lo que el resultado no es muy sorprendente. La pregunta que nosotros hacemos va en dirección a buscar sistemas con parámetros adecuados para una posible realización experimental.

<sup>2</sup>Se toman inicialmente los sistemas DB y DW, porque en el trabajo de Hooper *et al.*[14] sugieren que su sistema óptico es equivalente a un DB cuántico. Sin embargo, sus resultados exhiben el efecto *strong overlap* [Secc. 1.3; pág. 16] [13]; formado por un sistema triple barrera. Además, dicho efecto es apreciable para sistemas formados de tres o más barreras, ya que es necesario tener minibandas formadas por dos o más resonancias. En otras palabras, para un sistema DB no existe el efecto *strong overlap* y por lo tanto, el sistema óptico de Hooper no tiene como equivalente cuántico a dicho sistema.

<sup>3</sup>Nos referimos a sistemas cuasi-transparentes a aquellos para los cuales su estado ligado o antiligado domine la transmisión, *i.e.*, son sistemas que tienen una transmisión típica de un potencial delta, pero sin ser transparentes.

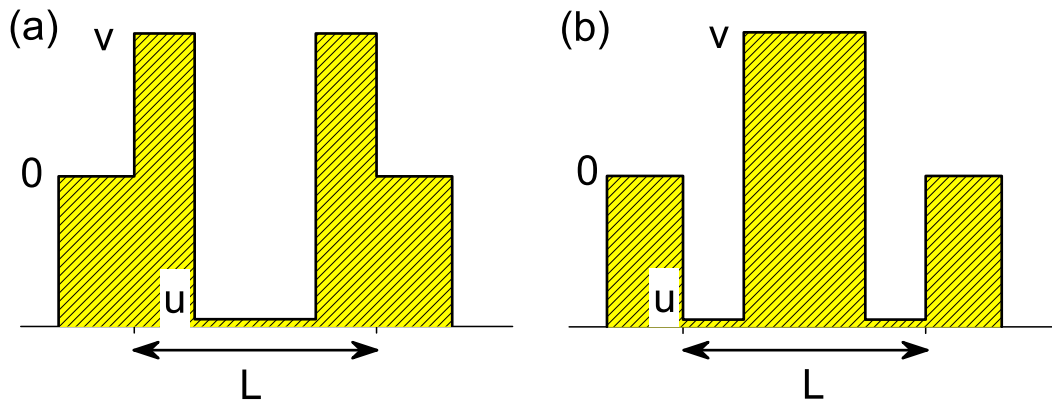


Figura 2.1: Se muestran esquemáticamente los sistemas (a) barrera doble DB y (b) pozo doble DW. En ambos casos, note que el pozo o la barrera interior no tiene profundidad cero, en este caso se denotamos a los sistemas por *bwb* y *wbw* respectivamente [Secc. 2.2].

## 2.1. Barrera y pozo doble.

La primer extensión natural es considerar un sistema de doble barrera o doble pozo (DB, DW). Esto es porque, sabemos que los sistemas SB y SW son transparentes bajo ciertas condiciones. Supongamos que se tiene una de las configuraciones (DB o DW) mostradas en la figura 2.1. Si queremos que nuestro sistema tenga un estado ligado o antiligado cercano al umbral, se puede conseguir disminuyendo la anchura de las barreras o alturas casi cercanas a cero. Sin embargo, este no sería un ejemplo útil,<sup>4</sup> ya que deseamos conocer una configuración grande (anchuras del orden de Angstroms) que se pueda crear con este tipo de sistemas y que satisfagan las condiciones de transparencia [Secc. 1.7; pág. 30].

Por ejemplo, la técnica *Epitaxia por haces moleculares* (MBE, por sus siglas en inglés) permite construir las denominadas super redes que contienen algunos cientos de capas epitaxiales, con espesores de algunos Angstroms [43]. Cabe mencionar que el tiempo de crecimiento de un cristal por MBE es grande (horas por micra de cristal), esto permite tener un buen control de la anchura de las barreras y/o pozos, sin embargo, el límite para la anchura será de una capa atómica, el cual evidentemente depende del material.

Consideremos electrones en un semiconductor, para el cual el electrón se comporta como una partícula de masa efectiva ( $m^*$ ) menor a la masa del electrón ( $m_e$ ), por ejemplo: en el arseniuro de galio (*GaAs*) la masa efectiva asociada al electrón es  $m^* = 0.067 m_e$ . En

<sup>4</sup>Considerar valores muy pequeños en anchuras y/o alturas del potencial, provee un modelo puramente matemático y en general se tendrá la transparencia. Sin embargo, estos parámetros estarán lejos de una posible realización experimental, tal es el caso de los sistemas SB y SW transparentes que consideramos en el capítulo anterior [Secc. 1.4; pág. 18].

## 2.1 Barrera y pozo doble.

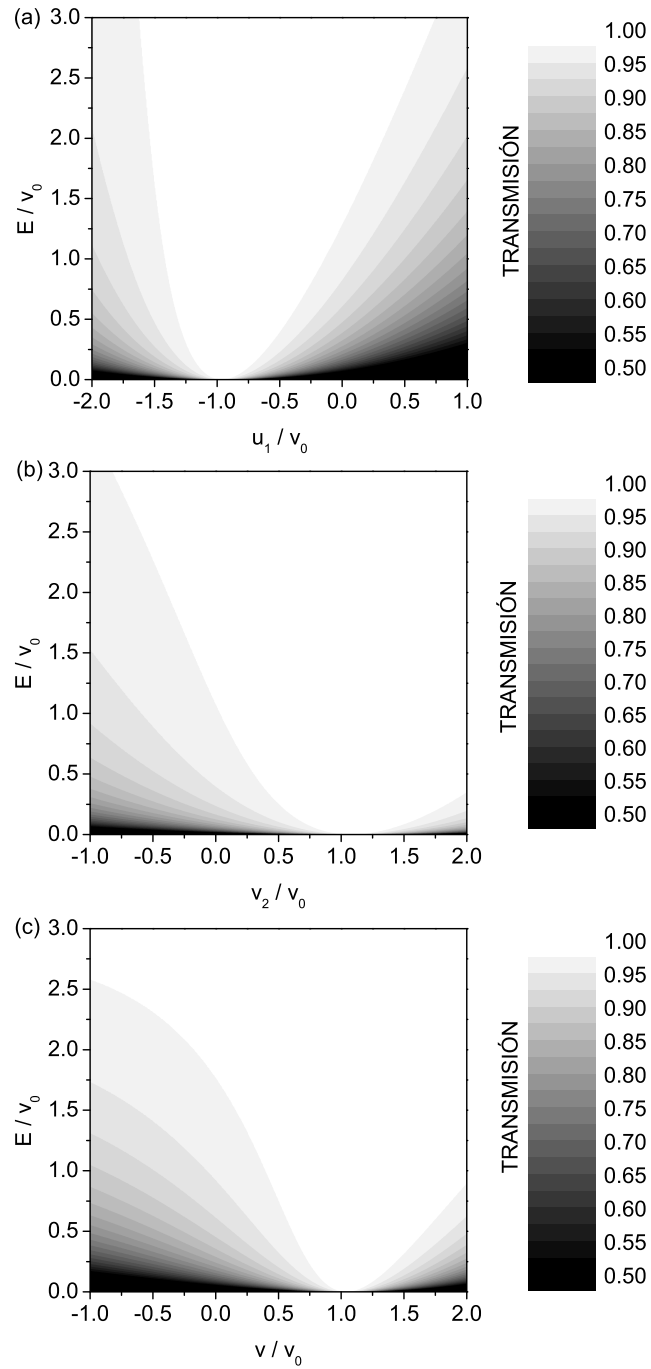


Figura 2.2: Transmisión de un sistema DB con parámetros  $b_1 = b_2 = b = 0.4 \text{ nm}$  (anchura de la barreras),  $w_1 = 2b$  (anchura del pozo) con (a)  $v_1 = v_2 = v_0 = 0.2 \text{ eV}$ , (b)  $v_1 = -u_1 = v_0 = 0.2 \text{ eV}$  y (c)  $u_1 = -v_0 = 0.2 \text{ eV}$ ,  $v_1 = v_2 = v$ .

## 2 Sistemas compuestos.

lo que sigue, suponemos que ésta es la masa efectiva del electrón y dejamos el estudio del efecto de la masa al capítulo 4. Otro punto importante es que deseamos que la altura y anchura de las barreras no sean muy pequeñas. Por ejemplo: en la figura 1.10b, claramente el sistema SB con  $v_0 = 0.23 \text{ eV}$  y anchura  $L = 0.4 \text{ nm}$  no es un sistema transparente, pero sí lo es cuando  $L \approx 0$ ; esto no es bueno si pensamos que se desea hacer una realización experimental.<sup>5</sup> Experimentalmente es más fácil determinar la anchura de las barreras,<sup>6</sup> ya que, como se mencionó anteriormente, la técnica MEB permite tener un buen control de las diferentes anchuras de barreras y pozos, pero las alturas y/o profundidades de las barreras y/o pozos es función de la concentración, para lo cual se tienen reglas empíricas como la de Anderson [1].<sup>7</sup>

Suponemos que la anchura de las barreras externas es  $b = 0.4 \text{ nm}$  [fig. 2.1a]; éstas por ser tan delgadas dan a lugar resonancias anchas. El pozo lo suponemos de anchura  $w = 2b$ , de aquí que el tamaño del sistema es  $L = 4b$ . Aumentar la anchura del pozo es casi equivalente a aumentar su profundidad. Sin embargo, la razón principal de tomar estos parámetros es acercar las resonancias entre si para que estas interfieran destructivamente en general, y dejen únicamente la contribución del estado ligado o antiligado a la transmisión [Ec. 1.23; pág. 21]. Fijas las anchuras de las barreras y el pozo, quedan libres los parámetros  $v_1, v_2$  y  $u_1$  que corresponden a las alturas de las barreras y profundidad del pozo respectivamente; todavía tenemos varios parámetros libres. Si deseamos hacer una gráfica semejante a la figura 1.6 para el sistema  $bwb$  [fig. 2.1a] tenemos que fijar: la altura de las barreras, la profundidad del pozo, para estudiar una colección de sistemas DB simétricos o bien, fijar la altura de una barrera y la profundidad del pozo, para estudiar una colección de sistemas DB asimétricos. Dado que deseamos que la altura sea de unas décimas de electrón volts ( $eV$ ),<sup>8</sup> fijamos el valor  $v_0 = \max\{|v|, |u|\} = 0.2 \text{ eV}$  que corresponde al máximo valor absoluto (alturas y profundidades) de nuestro sistema. Dado que vamos a variar uno de estos parámetros, la definición no debe incluir la altura o profundidad que se varía.

En la figura 2.2 se muestra la transmisión para una colección de sistemas DB como función de la energía y un parámetro del potencial: (a) variando la profundidad del pozo, con

---

<sup>5</sup>Si pensamos en una realización experimental en un semiconductor formado por  $Al_\eta Ga_{1-\eta}As$ , donde  $\eta$  es la concentración de aluminio; la anchura de las barreras tiene como mínimo el ancho de una capa atómica de  $GaAs$  que es aproximadamente de  $L \approx 0.2 \text{ nm}$ .

<sup>6</sup>Si se forma una heteroestructura empleando el método *Epitaxia por haces moleculares* (MEB) la velocidad típica de crecimiento del cristal es del orden de un capa atómica por segundo [43]. Esto permite tener un buen control de las anchuras de las barreras o pozos.

<sup>7</sup>La regla de Anderson es basada en la afinidad del electrón al material, *i.e.*, la energía que requiere un electrón para brincar de la energía mínima de la banda de conducción a un nivel del vacío, donde éste puede escapar del cristal.

<sup>8</sup>Los valores típicos de alturas y profundidades de barreras y pozos en una heteroestructura semiconductor de  $GaAs$  son de unas décimas de electrón Volts; considerar los valores típicos acerca nuestro modelo a una posible realización experimental.

## 2.1 Barrera y pozo doble.

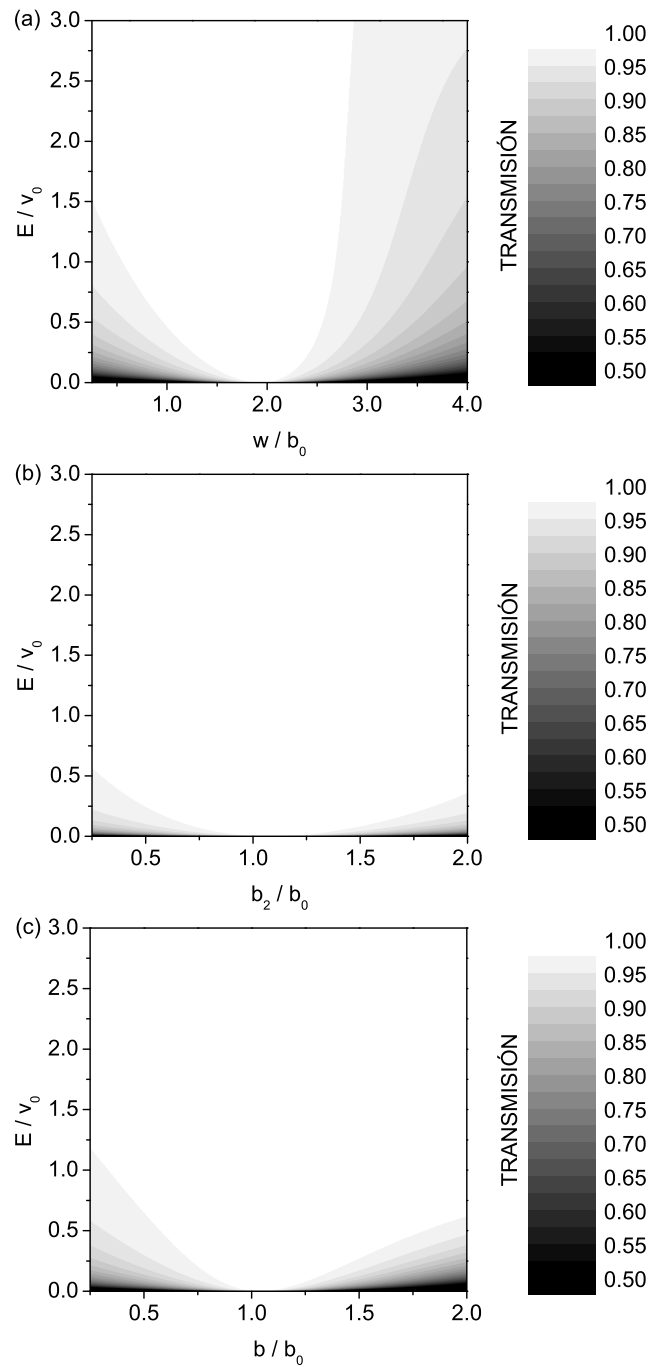


Figura 2.3: Transmisión de un sistema DB con parámetros  $v_1 = v_2 = v_0 = 0.2 \text{ eV}$  (altura de las barreras),  $u_1 = -v_0$  (profundidad del pozo) con (a)  $b_1 = b_2 = b_0 = 0.4 \text{ nm}$ , (b)  $b_1 = 0.5w_1 = b_0 = 0.4 \text{ nm}$  y (c)  $w_1 = 2b_0 = 0.8 \text{ nm}$ ,  $b_1 = b_2 = b$ .

## 2 Sistemas compuestos.

$v_1 = v_2 = v_0$  [fig. 2.2a], (b) variando la altura de la segunda barrera, con  $v_1 = -u_1 = v_0$  [fig. 2.2b] y (c) variando la altura de las barreras simétricamente con profundidad del pozo fija en  $u_1 = -v_0$  [fig. 2.2c]. Observamos que, en efecto esta configuración nos proporciona un sistema transparente; cualitativamente tiene el mismo comportamiento que un SB transparente [fig. 1.10, pág. 20]. Además, los sistemas son robustos frente a variaciones de los parámetros. Note que, en particular tenemos transparencia cuando  $v_1 = v_2 = -u_1 = v_0$ ; no es el sistema óptimo. Si fijamos los parámetros  $v_1 = v_2 = -u_1 = v_0$ , podemos hacer un juego idéntico de gráficas al mostrado en la figura 2.2; variando la anchura de barreras y pozo. Para esto definimos el parámetro  $b_0 = \max\{b\} = 0.4 \text{ nm}$  para el sistema DB [fig. 2.1a]. La gráfica de la transmisión como función de la energía y anchuras de barreras y/o pozo se muestra en la figura 2.3. Al comparar las gráficas [figs. 2.2 y 2.3] observamos que: una variación asimétrica es más robusta frente a pequeñas variaciones, tanto en la altura de la barrera [fig. 2.2b] como en su anchura [fig. 2.3b]; esto sugiere que la simetría del potencial juega un papel importante en la transparencia. Más adelante veremos que no sólo es más robusta, sino que también es más eficiente en el sentido de transparencia.

El otro sistema que analizamos en esta sección es el pozo doble (DW), este lo podemos construir fácilmente si cambiamos  $v \rightarrow -v$  en los parámetros del DB visto previamente; este cambio corresponde a una *reflexión de alturas* en el potencial. En las figuras 2.4 y 2.5 se muestra un juego de gráficas para el DW semejantes a las de DB. Note que, el DW tiene el mismo comportamiento cualitativo que el DB, *i.e.*, podemos decir que el efecto de transparencia es invariante frente a una reflexión del potencial. Note que esta propiedad no se cumple cuando el sistema tiene estructura resonante. Por ejemplo, el sistema Sollner [fig. 1.2, pág. 11], tiene una resonancia aislada, pero si reflejamos las alturas de las barreras ( $v \rightarrow -v$ ), tendrá al menos un estado ligado y sus resonancias ya no serán aisladas; cambia completamente el comportamiento cualitativo de la transmisión.

Los ejemplos vistos en esta sección (DB y DW) muestran que tenemos un gran número de sistemas que satisfacen la condición de transparencia. Además, abre la posibilidad de pensar en sistemas más grandes. Un hecho importante que podemos anticipar y que dejamos para la siguiente sección es que, desde un punto de vista de construcción, los sistemas se forman por dos elementos diferentes que son: barrera y pozo simple (SB, SW). Por ejemplo el DB considerado aquí, se forma por la unión SB–SW–SB y el DW por SW–SB–SW. Esto lo denotaremos en adelante como  $bwb$  y  $wbw$  respectivamente (ver figura 2.1). En la siguiente sección ampliamos la explicación de esta notación. Por el momento nos conformamos con haber exhibido un par de sistemas compuestos que satisfacen la condición de transparencia.

Las preguntas que surgen son: ¿la distribución de polos de los sistema  $bwb$  y  $wbw$  transparentes, satisfacen las propiedades analíticas de transparencia [Secc. 1.7; pág. 30]?<sup>9</sup> ¿por

---

<sup>9</sup>Nos referimos a las propiedades analíticas en términos de las resonancias del sistema.



## 2.1 Barrera y pozo doble.

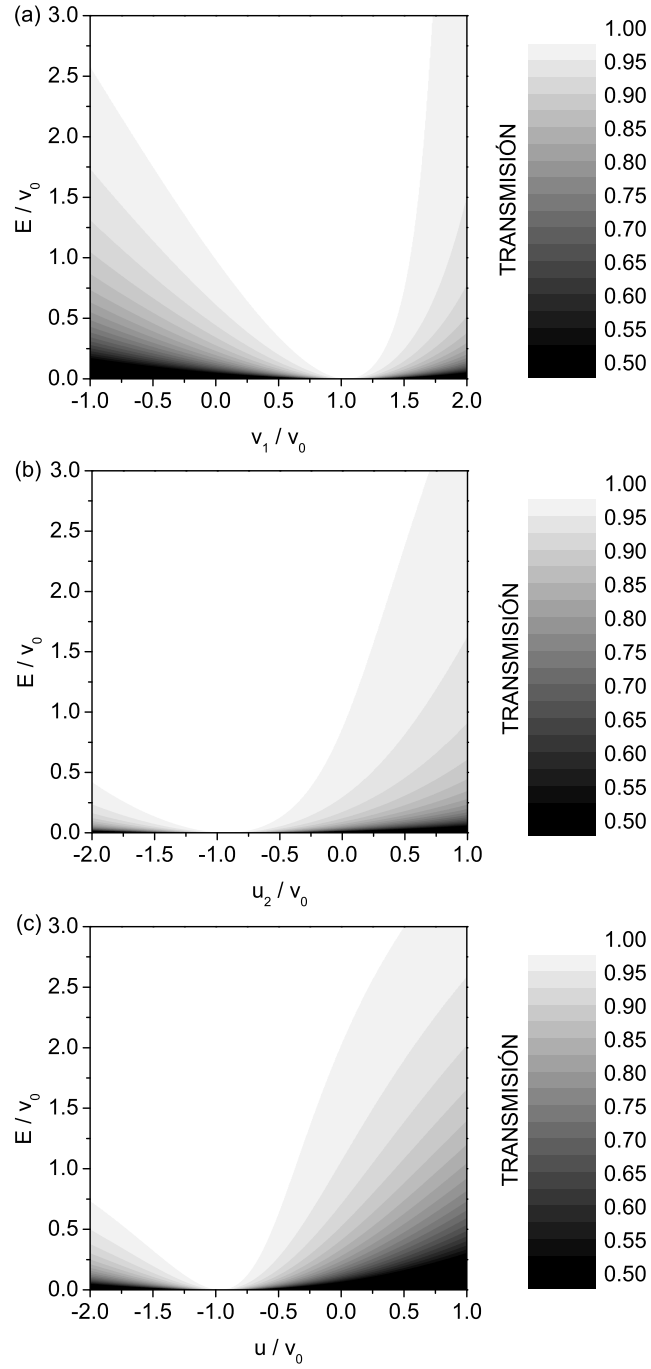


Figura 2.4: Transmisión de un sistema DW con parámetros  $w_1 = w_2 = w = 0.4 \text{ nm}$  (anchura de los pozos),  $b_1 = 2w$  (anchura de la barrera) con (a)  $u_1 = u_2 = -v_0 = -0.2 \text{ eV}$ , (b)  $v_1 = -u_1 = v_0 = 0.2 \text{ eV}$  y (c)  $v_1 = v_0 = 0.2 \text{ eV}$ ,  $u_1 = u_2 = u$ .

2 Sistemas compuestos.

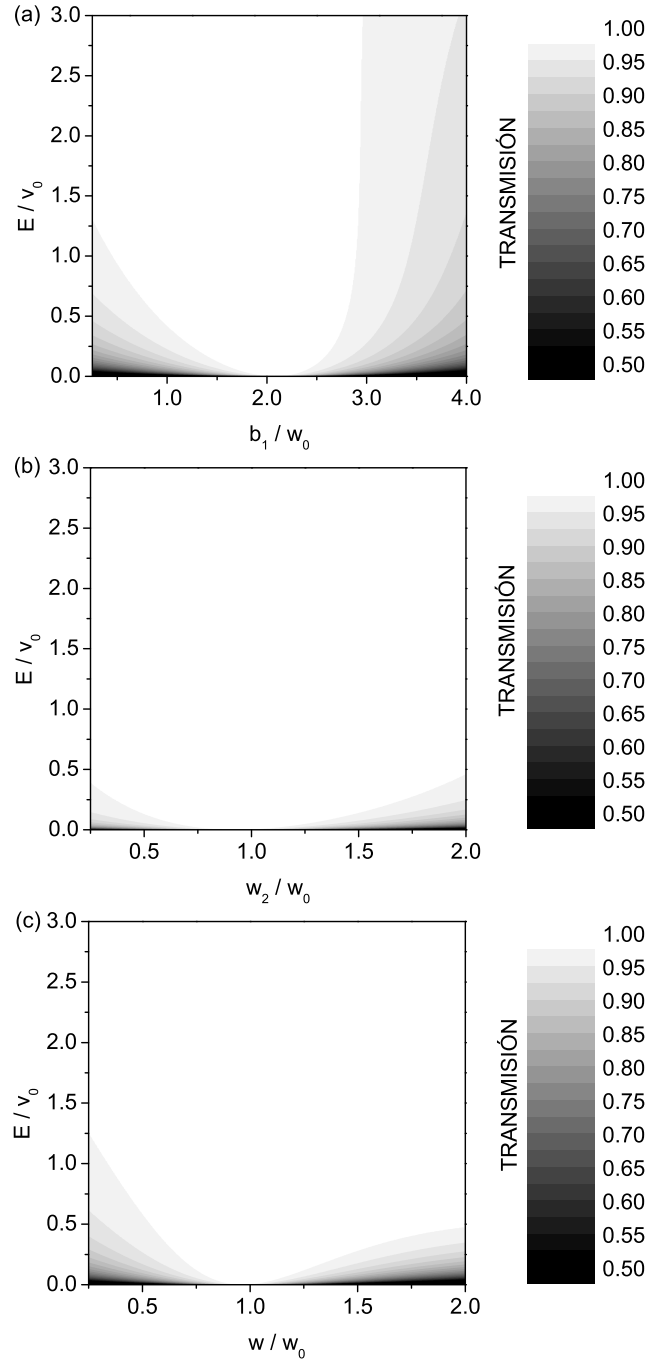


Figura 2.5: Transmisión de un sistema DW con parámetros  $v_1 = v_0 = 0.2 eV$  (altura de la barrera),  $u_1 = u_2 = -v_0$  (profundidad de los pozos) con (a)  $w_1 = w_2 = w_0 = 0.4 nm$ , (b)  $w_1 = 0.5b_1 = w_0 = 0.4 nm$  y (c)  $b_1 = 2w_0 = 0.8 nm$ ,  $w_1 = w_2 = w$ .

qué la combinación de sistemas no transparentes es transparente?,<sup>10</sup> ¿cuál es el sistema  $bwb$  o  $wbw$  más grande que satisface las condiciones de transparencia? y finalmente ¿si construimos el sistema  $bwbwbw$  como la unión de un  $bwb$  y un  $wbw$  transparentes, éste es transparente?

La respuesta a todas las preguntas están fuera del alcance de esta sección y más bien corresponden al estudio de las siguientes secciones. Sin embargo, podemos dar de forma intuitiva la respuesta a algunas de ellas; la primera está relacionada con la distribución de polos de los sistemas  $bwb$  y  $wbw$ ; aunque no hemos calculado los polos de los sistemas, sabemos que las resonancias deben ser anchas porque las anchuras de las barreras son pequeñas como vimos anteriormente [Cap. 1]. El hecho de que estos sistemas posean un estado antiligado o ligado cercano al umbral de energías, podemos decir que es verdad, ya que no habría una explicación razonable por la cual, la transmisión del sistema aumente súbitamente alrededor de energías cercanas al umbral. Respecto a que sistema  $bwb$  es el más grande; podemos decir que la longitud de las barreras y pozos deben ser de unas cuantas décimas de nanómetro, ya que es necesario que la anchura de las barreras sea delgada para tener resonancias anchas. Si fijamos la longitud del sistema se podrían considerar alturas y profundidades mayores. Sin embargo, también debe tener un límite, porque el ancho de las resonancias depende de todos los parámetros del sistema y no sólo de las anchuras de las barreras.

## 2.2. Notación tipográfica.

En la sección 2.1 mostramos que un sistema doble barrera o doble pozo puede ser transparente, y que éste está formado por la unión de dos elementos fundamentales, estos son: la barrera y pozo simple. Así, podemos escribir el DB como  $bwb$  y el DW como  $wbw$ ; sería una forma *tipográfica* del perfil del potencial.<sup>11</sup> Esta idea es buena pero tenemos que ser precisos si queremos que la *notación tipográfica* realmente nos de una idea clara del perfil del potencial. Por ejemplo: el DB que denotamos por  $bwb$ ; imaginamos de forma inmediata que son dos barreras con un pozo al centro, pero la profundidad de pozo puede ser: cero, negativa o positiva [vea por ejemplo el perfil del potencial mostrado en la figura 2.2a]; variamos la profundidad del pozo desde valores  $u_1 = -2v_0$  hasta  $u_1 = v_0$ ; esto complica la visualización del perfil del potencial. Sin embargo, es correcta si  $u_1 < v_0$ , ya que, en realidad se tiene un pozo entre las barreras. Otro punto importante es cuando  $u_1 = 0$ , porque esencialmente el perfil del potencial es diferente al caso  $u_1 \neq 0$  [compare las figuras 1.1 y 2.1a]; además, la matriz de transferencia es la identidad en esa región del espacio cuando  $u_1 = 0$ . Por esta razón vamos a distinguir el caso  $u_1 = 0$ , y escribimos la letra  $s$  en vez de  $w$  cuando la profundidad

<sup>10</sup>Note que, el sistema  $bwb$  transparente es formado dos barreras con parámetros  $v = 0.2 \text{ eV}$  (altura de las barreras) y  $b = 0.4 \text{ nm}$  (anchura de las barreras), y un pozo con parámetros  $u = -0.2 \text{ eV}$  (profundidad),  $w = 0.8 \text{ nm}$  (anchura). Si comparamos la transmisión del sistema  $bwb$  [fig. 2.3, pág. 37] con la transmisión de cualquier elemento que lo conforma (vea por ejemplo la figura 1.10; pág. 20), notaremos que cada elemento por separado no satisface las condiciones de transparencia.

<sup>11</sup>La notación que empleamos es debida a las siglas en inglés:  $bwb$  = barrier-well-barrier y  $wbw$  = well-barrier-well.

## 2 Sistemas compuestos.

del pozo sea cero. Así, tenemos que un DB lo podemos escribir como  $bsb$  para el modelo de Sollner [fig. 1.2, pág. 11], y  $bwb$  cuando la profundidad del pozo es menor a la altura de las barreras externas y es distinto de cero [fig. 2.1, pág. 34]. Note que la introducción de la literal  $s$  es importante, ahora los sistemas  $bswsb$ ,  $bwb$  son diferentes y serán iguales cuando la anchura de los espacios correspondientes tomen el valor  $s = 0$ , en tal caso omitimos su escritura. Además, note que  $bs = b$ , sin importar el tamaño de  $s$ ; aparenta ser una definición confusa pero veremos más adelante que es útil.

Ahora tenemos que definir las reglas para la identificación de la notación tipográfica con el perfil de un potencial; estas se refieren a la altura del potencial y son:

- i – El primer elemento del potencial es aquel que se encuentre a la izquierda del potencial, *i.e.*, medimos de izquierda a derecha y es aquel para el cual la altura del potencial  $\mu$  es diferente de cero, entonces hacemos la siguiente relación:
  - a) Si  $\mu > 0$  escribimos  $b$  y asociamos la literal  $v$  a la altura del potencial.
  - b) Si  $\mu < 0$  escribimos  $w$  y asociamos la letra  $u$  a la profundidad del pozo.
- ii – Para el elemento  $j + 1$ -ésimo, se sigue la siguiente regla
  - a) Si  $\mu_j < \mu_{j+1}$  escribimos  $b$  y asociamos la literal  $v$  a la altura de la barrera.
  - b) Si  $\mu_j > \mu_{j+1}$  escribimos  $w$  y asociamos la literal  $u$  a la profundidad del pozo y
  - c) si  $\mu_{j+1} = 0$  escribimos  $s$ .
- iii – Si las anchuras o alturas de las barreras o pozos son diferentes agregamos un subíndice a las literales para indicar que tienen anchuras diferentes.
- iv – Siempre que sea necesario y/o posible, se simplifica la notación anteponiendo un número entero. Por ejemplo: el sistema  $bwbsbwb = 2bwbs$ , o para un sistema con anchuras diferentes  $w_1b_1w_2s_1w_3b_2w_4 = 2w_{2n-1}b_nw_{2n}s_n$ . Observe que ahora se tiene que  $2bwbs \neq 2bwb$ .

Note que al identificar cualquier sistema con la notación tipográfica siempre se terminará con un elemento  $s$ , el cual se omite si no es necesario para la descripción del mismo.

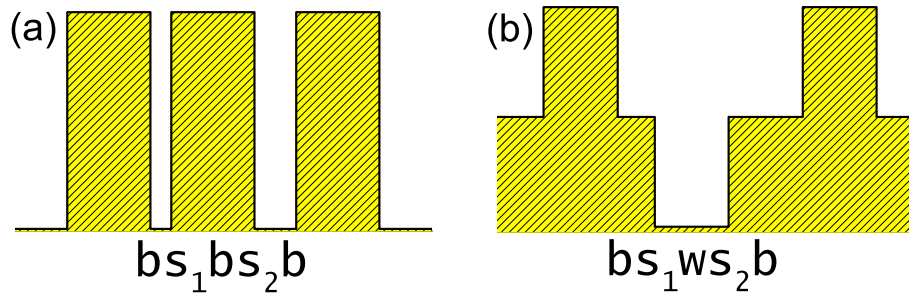


Figura 2.6: Se muestran dos ejemplos del perfil de potencial y su notación tipográfica correspondiente (a) para un sistema triple barrera  $bs_1bs_2b$  y (b) para un sistema doble barrera  $bs_1ws_2b$ .

Un par de ejemplos se muestra en la figura 2.6; para los cuales sólo son necesarios los primeros tres pasos mencionados anteriormente. El cuarto punto únicamente es útil cuando el potencial es formado por muchas barreras y/o pozos. Por ejemplo, el sistema mostrado en la figura 2.6a se puede simplificar como  $3bs_n$ ; sería más complicado visualizar el perfil del potencial en comparación con  $bs_1bs_2b$ . Pero, si se tratara de un sistema de cincuenta barreras; claramente la notación  $50b_ns_n$  es más simple que una cadena completa con 99 caracteres.

El perfil del potencial queda definido con la notación tipográfica. Sin embargo, el sistema completo queda determinado al dar los valores de los parámetros, para lo cual es necesario especificar: anchuras de barreras  $b$ , pozos  $w$  y espacios  $s$ , alturas  $v$  y profundidades  $u$ .<sup>12</sup> Para esto agregaremos entre paréntesis los parámetros por conjuntos según el orden de la cadena. Por ejemplo, el sistema  $bwb$  con parámetros:  $b = 0.4 \text{ nm}$ ,  $w = 0.8 \text{ nm}$ ,  $v = 0.2 \text{ eV}$  y  $u = -0.2 \text{ eV}$  se denota por

$$bwb(0.4, 0.8; 0.2, -0.2).$$

Note que cada coma separa el conjunto de valores de un tipo particular de elemento, y el punto y coma indica que sigue el conjunto de valores correspondientes a las alturas o profundidades de los pozos; el orden en alturas y/o profundidades corresponde al mismo orden de la cadena, en este ejemplo  $bwb$ . Si los elementos del mismo tipo  $b$ ,  $w$  o  $s$  son diferentes; sus valores los escribiremos entre corchetes. Por ejemplo, si tenemos un sistema de cincuenta barreras el cual denotamos por  $50b_ns_n$ , queda determinado el sistema por

$$50b_ns_n(\{b_1, \dots, b_{50}\}, \{s_1, \dots, s_{50}\}; \{v_1, \dots, v_{50}\}),$$

<sup>12</sup>Es necesario especificar la masa de la partícula, la cual en general depende de la posición si consideramos heteroestructuras semiconductoras. En estos ejemplos suponemos que la masa es constante  $m^* = 0.067m_e$ .

## 2 Sistemas compuestos.

es una cadena de caracteres muy grande. Sin embargo, en ocasiones se puede simplificar; ya sea porque se sigue una regla o sólo algunos elementos difieren. Por ejemplo, en un sistema de cincuenta barreras  $50b_n s_n$ , si suponemos que  $b_{2n-1} = b_1$  y  $b_{2n} = b_2$ ,  $s_{n \neq 19} = s_1$  con  $s_{19} = s_0$  y  $v_{n+1} = f(v_n)$  con  $v_1$  dado, se escribe como

$$50b_n s_n(\{b_1, b_2 | b_{2n-1} = b_1 \wedge b_{2n} = b_2\}, \{s_1 | s_{19} = s_0\}; \{v_1 | v_{n+1} = f(v_n)\}),$$

donde el símbolo “|” se lee “tal que” y el símbolo “ $\wedge$ ” se lee “y”.

Finalmente, si nos referimos no a un sistema en particular, sino a una colección infinita de sistemas. Por ejemplo, el conjunto de sistemas doble barrera para los cuales se ha calculado su transmisión [fig. 2.2a], escribimos  $bwb(0.4, 0.8; 0.2, u)$  que corresponde a la colección de sistemas con los parámetros dados y todos los valores posibles de  $u$ ; éste conjunto de sistemas es idéntico al conjunto  $b_1 b_2 b_3(\{0.4 | b_2 = 0.8\}; \{0.2 | v_2 = v\})$ ; no es un problema de ambigüedad de la notación, simplemente es el hecho de que al dejar libre un parámetro, también se deja libre una literal; ya que, una barrera o pozo no está determinado por el signo de su altura, sino más bien por la altura de la barrera o pozo que lo antecede; en tal caso siempre usaremos la notación más simple que nos de una idea clara del conjunto de sistemas al que nos referimos.<sup>13</sup> Hecha esta aclaración, el conjunto de todos los sistemas de tres barreras cuadradas incluyendo deltas, se escribe como  $3b_n s_n(\{b_1, b_2, b_3\}, \{s_1, s_2, s_3 | s_n < \infty\}; \{v_1, v_2, v_3 | v_n \neq 0 \wedge v_1 \neq v_2 \neq v_3 \text{ si } s_n = 0\})$  donde se dejan libres todos los parámetros y se agregan las condiciones  $s_n < \infty$ ,  $v_n \neq 0 \wedge v_1 \neq v_2 \neq v_3$  si  $s_n = 0$  para eliminar los sistemas: partícula libre, una y dos barreras cuadradas.

Otras cantidades que definimos anteriormente y que recordaremos en el resto del texto son:  $v_0$ ,  $b_0$  y  $w_0$ ; corresponden a los valores máximos de los parámetros del sistema, también definimos la longitud  $L$  del sistema. Estos valores se definen como:

$$v_0 \equiv \text{máx}\{|v_n|, |u_n|\}, \quad (2.1a)$$

$$b_0 \equiv \text{máx}\{b_n\}, \quad (2.1b)$$

$$w_0 \equiv \text{máx}\{w_n\}, \quad (2.1c)$$

$$L \equiv \sum_n b_n + w_n + s_n, \quad s_n < \infty, \quad (2.1d)$$

lo que permite normalizar las dimensiones del sistema respecto a un parámetro fijo.

<sup>13</sup>Claramente los sistemas  $bwb$  y  $b_1 b_2 b_3$  descritos son iguales. Sin embargo, al escribir  $bwb$  se tiene una imagen más clara del tipo de sistemas que estamos considerando.

Un ultimo comentario respecto a la notación. Ésta simplifica la programación, *i.e.*, si nosotros deseamos hacer un programa para calcular: la transmisión, reflexión y la solución a la ecuación de eigenvalores de un sistema multibarrera usando matriz de transferencia [Ap. A]. La notación permite contar rápidamente el número de barreras  $b$ , pozos  $w$  y espacios  $s$ ;<sup>14</sup> permite emplear fácilmente el uso de *arrays* en anchuras y alturas. Además, poder generar diferentes combinaciones de sistemas, definiendo adecuadamente la operación suma  $bwb = b + w + b$ .

## 2.3. Construcción de sistemas transparentes.

En la sección 2.1 mostramos que es posible encontrar los parámetros adecuados para que los sistemas  $bwb$  y  $wbw$  sean transparentes. En esta sección analizamos algunas de las propiedades de los sistemas transparentes, para generar nuevas configuraciones.

Iniciamos nuestro estudio con los sistemas más simples que son  $b$  y  $w$ . En la figura 1.10a [pág. 20] se muestra la transmisión de una barrera de anchura  $L = 0.4 \text{ nm}$ ; observamos que sólo valores muy pequeños del potencial satisfacen la condición de transparencia; con alturas y profundidades alrededor de  $v_0 = -5.4 \times 10^{-3} \rightarrow v_0 = 5.4 \times 10^{-3} \text{ eV}$ , casi en un intervalo simétrico; tomemos el caso particular  $v_0 = 5 \times 10^{-3} \text{ eV}$ .

En la figura 2.7, se muestra la distribución de polos para los sistemas  $b(L; v_0)$  y  $w(L; -v_0)$ . Note que las distribuciones son muy parecidas, excepto que  $b$  tiene un estado antiligado cercano al umbral y  $w$  un ligado; tienen un cambio cuantitativo en la distribución de polos sólo

si observamos detalladamente cada valor. Sin embargo, gráficamente no podríamos distinguir a simple vista qué distribución corresponde a cada sistema [fig. 2.7], *i.e.*, el comportamiento cualitativo de la distribución de polos es la misma<sup>15</sup>. Por otro lado, si aumentamos la altura  $v_0$  en ambos sistemas hasta valores lo suficientemente grandes para que la estructura resonante sea apreciable; veremos que la distribución de polos es diferente, observando que para la barrera no tenemos estados antiligados, mientras que para el pozo siempre se tendrá al menos un estado ligado; esto permitirá distinguir un sistema de otro únicamente con ver la distribución de polos. Esto pone de manifiesto que la propiedad de transparencia se encuentra en un límite en el cual no hay una gran diferencia cualitativa y/o cuantitativa en la distribución de polos cuando reflejamos sobre las alturas de las barreras, *i.e.*,  $b(L; v_0) \rightarrow w(L; -v_0)$ . ¿Será ésta la razón por la cual el sistema  $bwb$  [fig. 2.2, pág. 35] es transparente al igual que el  $wbw$  [fig. 2.4, pág. 39] usando los mismos parámetros?. Antes de analizar la distribución

<sup>14</sup>Estos están relacionados con el número de matrices que se tienen que multiplicar. Por ejemplo, para un sistema  $5bwbs$  el número de total de matrices a multiplicar es  $15 = 10 + 5$ , correspondientes a las 10 barreras y 5 pozos del sistema; los espacios únicamente dan un factor de fase que es importante.

<sup>15</sup>Este efecto es heredado al sistema  $bwb$ , y es la razón por la cual  $wbw$  también es transparente.

2 Sistemas compuestos.

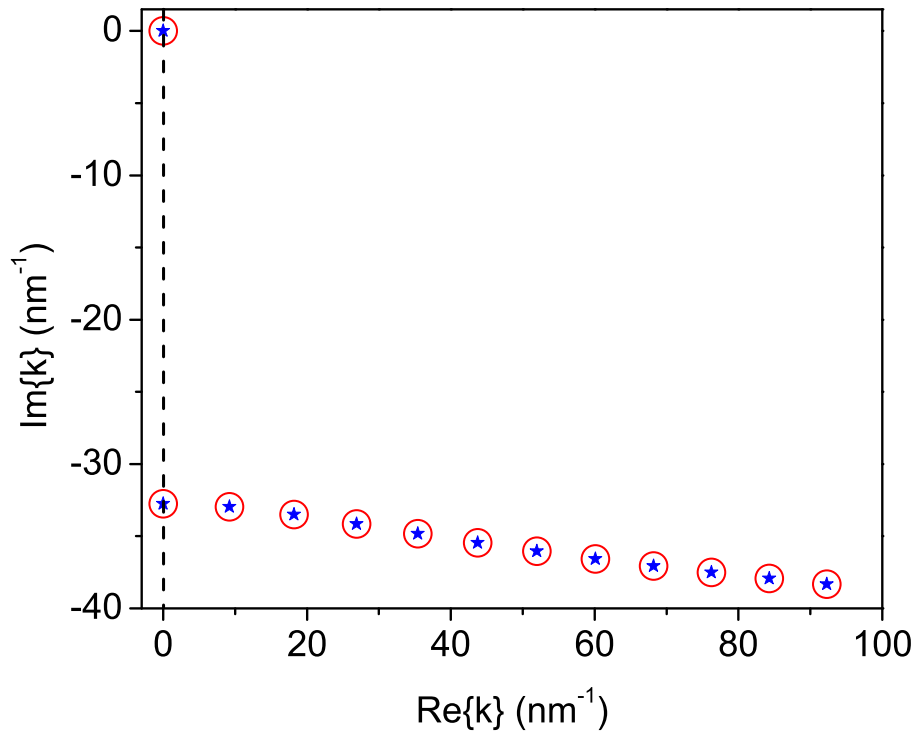


Figura 2.7: Distribución de polos de dos barreras cuadradas de longitud  $L = 0.4 \text{ nm}$  y  $v_0 = 5 \times 10^{-3} \text{ eV}$ , correspondientes a los sistemas:  $b(L, v_0)$  (círculos huecos) y  $w(L; -v_0)$  (estrellas sólidas). El estado ligado cercano al umbral del pozo es  $\kappa_w = 1.75817 \times 10^{-3}i$  y el antiligado de la barrera  $\kappa_b = -1.75899 \times 10^{-3}i$

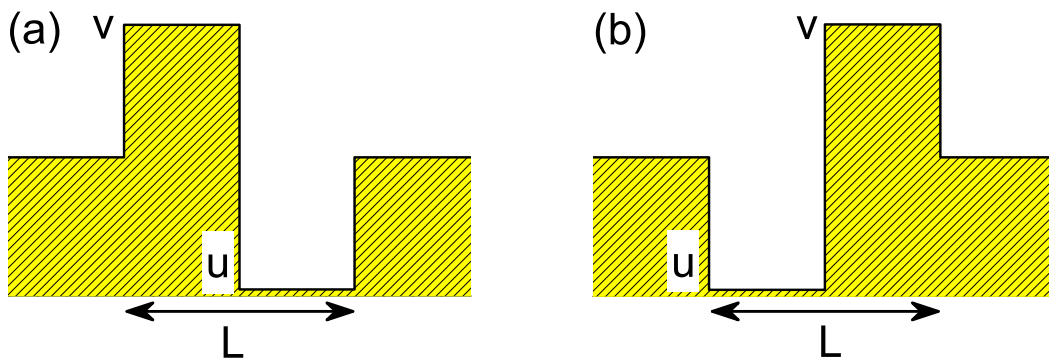


Figura 2.8: Se muestran esquemáticamente los sistemas (a)  $bw$  y (b)  $wb$ .



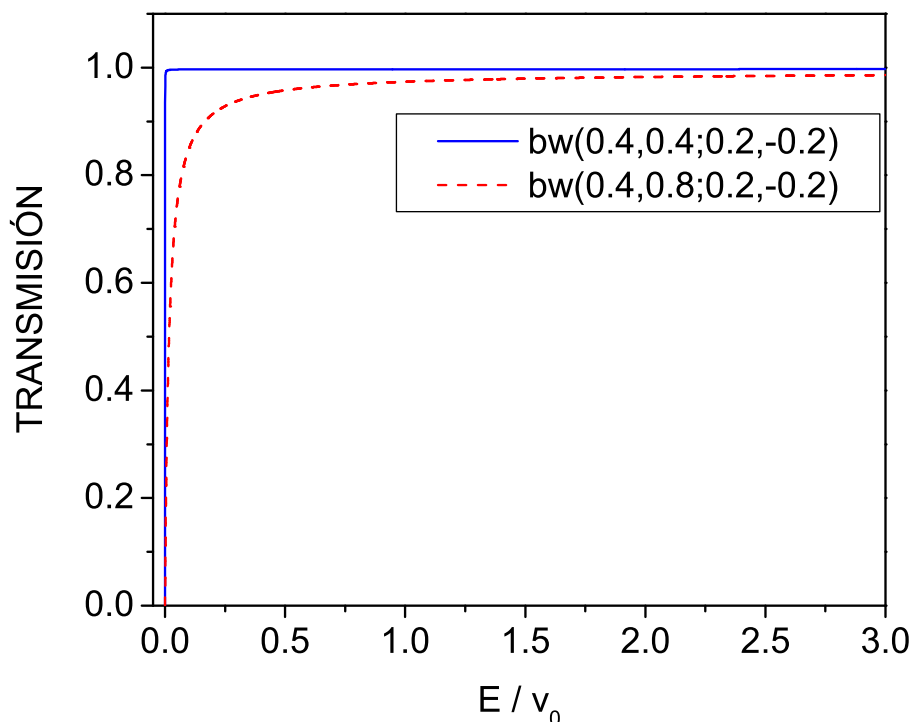


Figura 2.9: Transmisión de los sistemas  $bw$  con parámetros  $v_0 = 0.2 \text{ eV}$  y  $b_0 = 0.4 \text{ nm}$ .  $bw(b_0, w = b_0; v_0, -v_0)$  (línea continua) y  $bw(b_0, w = 2b_0; v_0, -v_0)$  (línea cortada).

de polos para los sistemas  $bwb$ ,  $wbw$ , analizamos un sistema que es más simple, este es el  $bw$  o,  $wb$  si lo reflejamos [fig. 2.8].

¿Qué parámetros usamos para el sistema  $bw$ ?, en principio no sabemos cuales son los parámetros óptimos para cualquier sistema. Sin embargo, sabemos que éste debe tener resonancias anchas y un estado ligado o antiligado cercano al umbral. Por ejemplo, podemos suponer que el sistema  $bwb$  [fig. 2.2] es la unión de un sistema  $bw$  con un  $b$  o, también es posible que sea la unión de dos sistemas  $bw$  y  $wb$  ya que en nuestra notación se cumple  $bwwb = bwb$  si los pozos tienen la misma profundidad [Secc. 2.2]. A partir de un  $bwb$  tenemos cualitativamente dos posibilidades para construir un  $bw$  transparente, por ejemplo si consideramos los potenciales  $bw(0.4, 0.8; 0.2, -0.2)$  y  $bw(0.4, 0.4; 0.2, -0.2)$ , sabemos que al unir una barrera  $b(0.4; 0.2)$  al primero se obtiene un  $bwb$  transparente, o si reflejamos el segundo, *i.e.*, construir el  $wb(0.4, 0.4; -0.2, 0.2)$ , así al unir el segundo sistema con éste se obtendrá el  $bwb$  transparente. La gráfica de la transmisión para estos sistemas se muestra en la figura 2.9, donde se observa que, el sistema  $bw(0.4, 0.4; 0.2, -0.2)$  es transparente, y el otro no. Esto es una propiedad interesante, ya que sabemos que  $bwb(0.4, 0.8; 0.2, -0.2)$  [fig. 2.2] es transparente y lo podemos construir de dos formas diferentes: con la unión de  $bw$  y  $b$

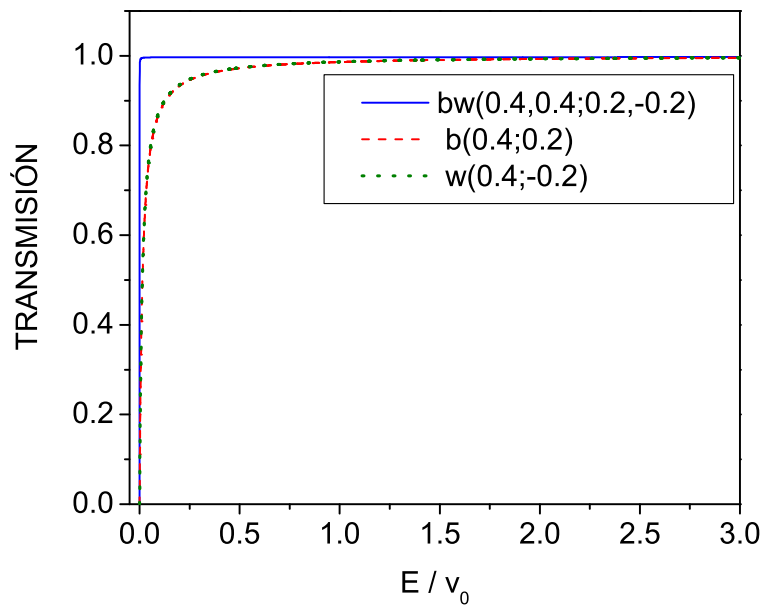


Figura 2.10: Transmisión del sistemas  $bw(0.4, 0.4; 0.2, -0.2)$  (línea continua) comparada con sus componentes  $b(0.4; 0.2)$  (línea cortada) y  $w(0.4; -0.2)$  (línea punteada).

o,  $bw$  y  $wb$ . Este hecho es importante porque si tomamos la opción  $bwb = bw \cup wb$ , donde  $\cup$  se lee “unión”; es necesario que cada elemento de la unión sea transparente; mientras que la otra posibilidad es  $bwb = bw \cup b$  muestra que *la unión de dos sistemas no transparentes puede ser transparente ¿por qué?*

Un ejemplo más simple es el  $bw(0.4, 0.4; 0.2, -0.2)$  ya que es la unión de  $b \cup w$ . En la figura 2.10, se muestra la transmisión para este sistema y cada una de las componentes que lo conforman. Note que la transmisión de las componentes  $b$  y  $w$  del sistema es prácticamente la misma; esto es porque la transmisión es dominada por el estado ligado o antiligado cercano al umbral. Sin embargo, no está lo suficientemente cerca del umbral para que el sistema sea transparente; a estos los denominamos *cuasi-transparentes*.

Podemos entender esto a partir de la distribución de polos de cada sistema [fig. 2.11]. Note que, la distribución de polos del sistema transparente [fig. 2.11a] es más densa que la distribución de cada una de sus componentes [fig. 2.11b]. Además, los polos de  $b$  o  $w$  están más alejados del eje real que los polos del  $bw$ . Pero, como se ha mencionado anteriormente, la contribución de polos lejanos es despreciable respecto a la contribución del estado ligado o antiligado. Además observe que el sistema  $bw$  no tiene un estado antiligado lejano.

La figura 2.11b muestra que la transmisión de los sistemas  $b$  y  $w$  está dominada por el estado antiligado y ligado respectivamente como se sugirió anteriormente, y notamos que la

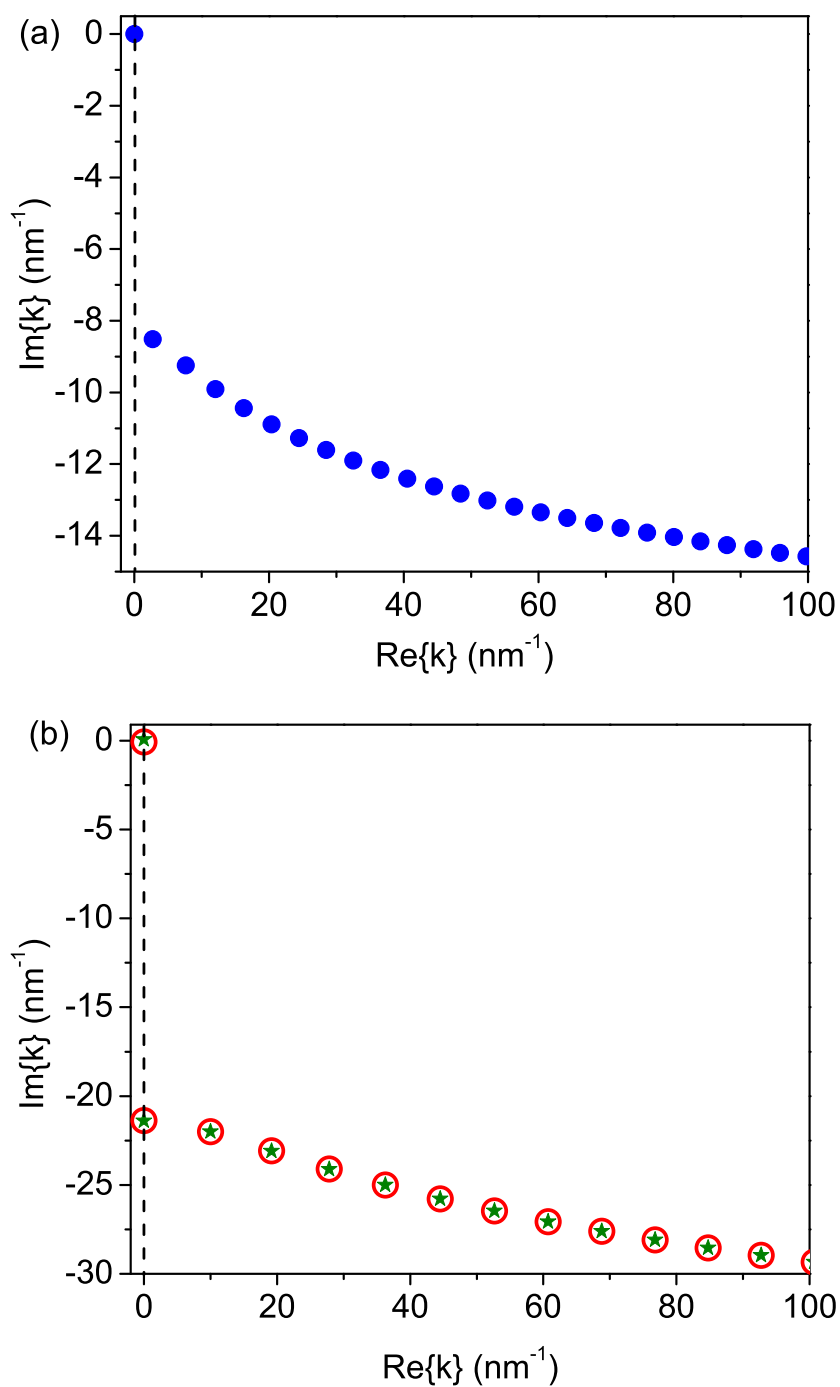


Figura 2.11: Distribución de polos de los sistemas  $bw$ ,  $b$  y  $w$  para (a) sistema  $bw(0.4, 0.4; 0.2, -0.2)$  con un estado ligado  $\kappa_{bw} = 2.6348 \times 10^{-3}i$  y (b) sistemas  $b(0.4; 0.2)$  (círculos huecos),  $w(0.4; -0.2)$  (estrellas sólidas), con estado  $\kappa_b = -7.1014 \times 10^{-2}i$  y  $\kappa_w = 6.9694 \times 10^{-2}i$  respectivamente.

2 Sistemas compuestos.

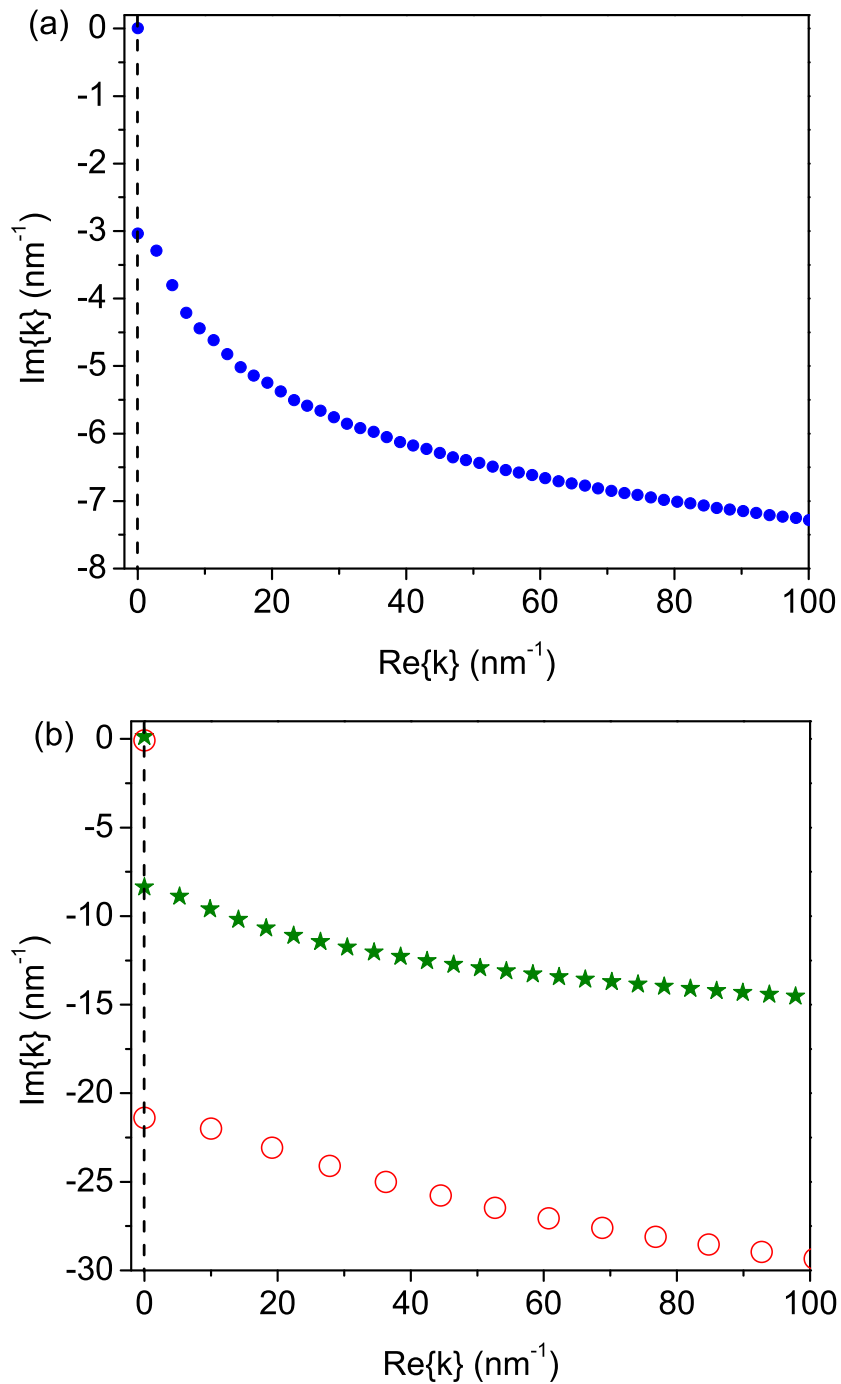


Figura 2.12: Distribución de polos de los sistemas  $bwb$ ,  $b$  y  $w$  para (a) sistema  $bwb(0.4, 0.8; 0.2, -0.2)$  con un estado ligado cercano al umbral  $\kappa_{bwb} = 5.5695 \times 10^{-3}i$  y (b) sistemas  $b(0.4; 0.2)$  (círculos huecos),  $w(0.8; -0.2)$  (estrellas sólidas), con  $\kappa_b = -7.1014 \times 10^{-2}i$  y  $\kappa_w = 0.1357i$  respectivamente.

unión de los sistemas es transparente [fig. 2.10]. En términos de la distribución de polos, se tiene un estado ligado más cercano al umbral, que para el  $bw$  tiene un orden de magnitud menor que en el caso de los sistemas  $b$  o  $w$ ; esto hace que la transmisión suba aproximadamente dos ordenes de magnitud más rápido para el  $bw$  que en el caso  $b$  o  $w$  [Ec. 1.23, pág. 21], hecho que se muestra claramente en la figura 2.10.

Un hecho importante de la distribución de polos de los sistemas  $bw$  [fig. 2.11a],  $b$  y  $w$  [fig. 2.11b] es que el estado ligado o antiligado cercano al umbral de cada sistema satisface  $\kappa_{bw} \sim \kappa_b + \kappa_w$ . Esto sugiere una técnica para encontrar sistemas que tengan un estado ligado o antiligado cercano al umbral. Pero observamos que no se cumple para estado resonantes ( $\Re\{k\} \neq 0$ ), ya que se satisface  $0 > \Im\{\kappa_{bw}\} > \Im\{\kappa_b\}$ ; esto implica que tenemos un límite, *i.e.*, no podemos formar sistemas con un número muy grande de barreras y pozos porque la contribución de las resonancias ya no será despreciable en la transmisión. Finalmente, note que la distribución de polos del sistema completo no tiene una relación simple con las distribuciones de los polos de cada sistema por separado, el aspecto más sobresaliente para este sistema ( $bw$ ) es el estado antiligado lejano al origen [fig. 2.11a] ¡ya no lo tiene!.

Otro sistema que analizamos en esta sección es el  $bwb(0.4, 0.8; 0.2, -0.2)$ . La distribución de polos se muestra en la figura 2.12, donde suponemos que éste es formado por la unión  $bwb = b \cup w \cup b$ . Nuevamente las resonancias son más delgadas en el sistema completo  $bwb$  [fig. 2.12a] que las de cada elemento que lo conforman  $b$  y  $w$  [fig. 2.12b]. Además, observamos que el estado ligado cercano al umbral cumple  $\kappa_{bwb} \sim \kappa_b + \kappa_w + \kappa_b$ ; regla que nos da el orden de magnitud, pero no determina si es un estado ligado o antiligado. Otro aspecto importante que observamos en la figura 2.12b comparada con la figura 2.11b, es que, al aumentar la anchura del pozo, las resonancias se hacen más densas y delgadas, *i.e.*, el ancho de las resonancias no sólo depende de las anchuras de las barreras; como intuitivamente se argumento para construir el sistema  $bwb$  [Secc. 2.1].

Hemos visto que los sistemas  $bw(0.4, 0.4; 0.2, -0.2)$  y  $bwb(0.4, 0.8; 0.2, -0.2)$  son transparentes; ambos los podemos construir con la unión de dos o tres elementos de naturaleza diferente  $b$  y  $w$ . Pero, también tenemos una posibilidad adicional, y es agregar una distancia  $s$  entre los elementos, *i.e.*,  $bsw(0.4, s, 0.4; 0.2, -0.2)$  que corresponde al conjunto de todos los sistemas que tienen una barrera y un pozo. El  $bwb$  tiene más posibilidades de construcción, pero una de ellas es  $bwsbw(0.4, 0.4, s; 0.2, -0.2)$  que corresponde a todos los sistemas que tienen dos barreras (barrera y pozo)  $bw$  y  $wb$  idénticas en anchuras. En ambos casos en el límite  $s \rightarrow 0$  se tienen los sistemas transparentes  $bw$  y  $bwb$  respectivamente. Por otro lado para el sistema  $bsw$  en el límite  $s \rightarrow \infty$  no es transparente, ya que los elementos del sistema son casi independientes, y en el mismo límite el sistema  $bwsbw$  es transparente, porque cada elemento que lo conforma es transparente. En la figura 2.13 se muestra la transmisión de un subconjunto de sistemas  $bsw$  [fig. 2.13a] y  $bwsbw$  [fig. 2.13b].

Note que el sistema  $bwsbw$  presenta transparencia total como función de la separación  $s$

2 Sistemas compuestos.

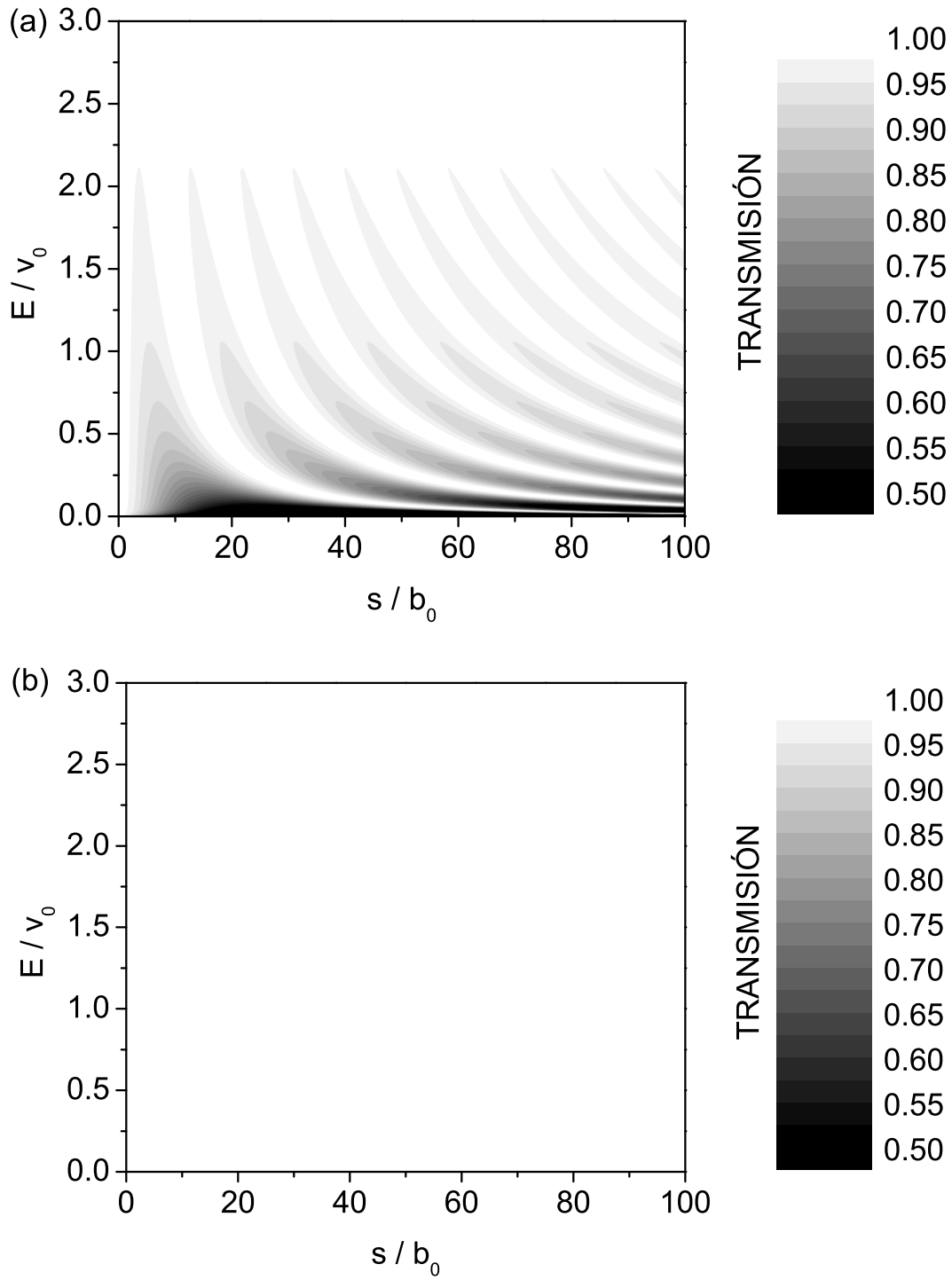


Figura 2.13: Transmisión para los sistemas  $bsw$  y  $bwsbw$  con parámetros  $w_0 = b_0 = 0.4 \text{ nm}$ ,  $v_0 = 0.2 \text{ eV}$  (a)  $bsw(b_0, s, w_0; v_0, -v_0)$  y (b)  $bwsbw(b_0, w_0, s; v_0, -v_0)$ .

entre los subsistemas  $bw$  y  $wb$  [fig. 2.13b], mientras que para el sistema  $bsw$  observamos que prácticamente el único sistema transparente del conjunto es para  $s = 0$ . A partir de este análisis debe ser claro que si calculamos la transmisión del sistema  $bswsb$  como función de la separación  $s$ , encontraremos que el valor óptimo es  $s = 0$ . Otro sistema que se desprende inmediatamente es  $bwsbw = 2bws$ , pero éste mostrará que tiene prácticamente el mismo comportamiento del sistema  $bwsbw$  [fig. 2.13b] ya que está formado por dos sistemas transparentes.

El resultado del análisis anterior nos dice que podemos crear sistemas transparentes a partir de uno o dos sistemas transparentes o cuasi-transparentes. Suponga que se tiene un sistema cuasi-transparente denotado por  $\Xi$ , *i.e.*, tiene resonancias anchas y un estado ligado o antiligado cercano al umbral. Entonces a partir de éste podemos formar un nuevo sistema como función de uno de sus parámetros  $\lambda$ <sup>16</sup> así:

1. Dados  $\lambda_1$  y  $\lambda_2$  tales que,  $\Xi(\lambda_1)$  tiene un estado ligado cercano al umbral y  $\Xi(\lambda_2)$  tiene un estado antiligado cercano al umbral, entonces  $\Xi(\lambda_1) \cup \Xi(\lambda_2)$  tiene un estado ligado o antiligado cercano al umbral, y
2.  $\Xi(\lambda_1) \cup \Xi(\lambda_2)$  tiene resonancias anchas.

El problema de las resonancias del sistema es que no podemos generalizar su comportamiento, por esta razón es necesario corroborar numéricamente que el sistema es transparente, ya sea por medio de la matriz de transferencia o el formalismo de estados resonantes.

Un ejemplo simple de como construir un sistema transparente a partir de otro lo vimos cuando formamos el  $bwb$ . Sin embargo, podemos formar otro sistema a partir del  $bwb$  y es el  $bw_1bsbw_2b$ . Esto lo podemos hacer porque el  $bwb(0.4, 0.8; 0.2, -0.2)$  tiene un estado ligado, por lo tanto, si variamos la profundidad del pozo para el segundo sistema, podemos hacer que éste tenga un estado antiligado de tal forma que  $bw_1bsbw_2b$  debe tener un estado ligado o antiligado cercano al umbral; ésta no es la única opción, de hecho podemos hacer una variación a la altura de las barreras, ya sea simétrica o asimétrica para conseguir el mismo efecto. En la figura 2.14 se muestra la transmisión para una colección de sistemas de la forma  $b_1w_1b_2s_1b_3w_2b_4 = 2b_{2n-1}w_nb_{2n}s_n$  variando diferentes parámetros al segundo sistema  $b_3w_2b_4$ , en este caso, tomamos como separación el valor  $s_0 = 0.8 \text{ nm}$ , ya que en la transmisión de un sistema formado por dos sistemas transparentes casi no depende de la separación entre ellos [fig. 2.13b]. Observemos que el sistema  $2bwbs$  está en la frontera del conjunto de sistemas  $2b_{2n-1}w_nb_{2n}s_n$  y es casi transparente, como ejemplo consideramos este sistema para mostrar la distribución de polos; sabemos que para los demás sistemas debe ser cualitativamente el mismo comportamiento. En la figura 2.15 se muestra la distribución de polos del sistema  $2bwbs$  con los parámetros  $s_0 = w_0 = 2b_0 = 0.8 \text{ nm}$  y  $v_0 = 0.2 \text{ eV}$ . Note que en este caso

<sup>16</sup>En este caso nos referimos a  $\lambda$  como un parámetro del sistema, por ejemplo, anchura o altura de alguna barrera contenida en el sistema  $\Xi$ . Pero se podría considerar como un conjunto de parámetros.

2 Sistemas compuestos.

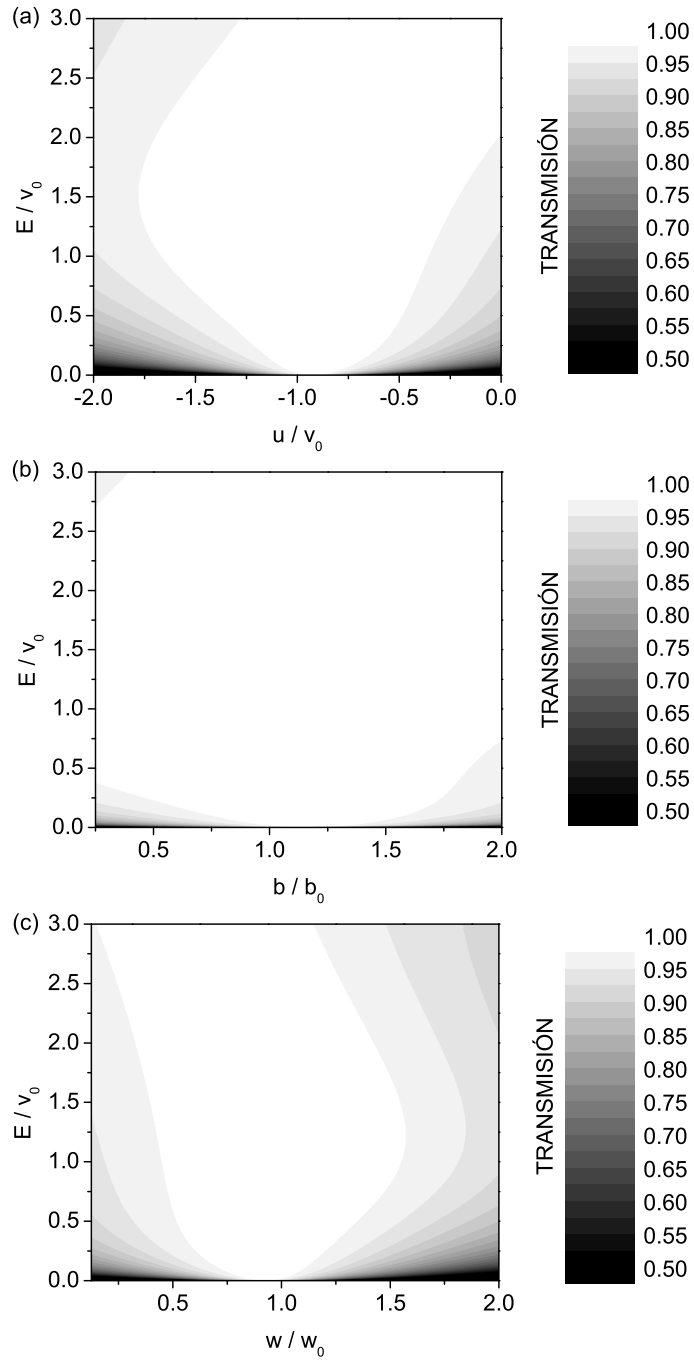


Figura 2.14: Transmisión para los sistemas tipo  $bwbsbw$  con parámetros  $v_0 = 0.2 \text{ eV}$ ,  $s_0 = w_0 = 2b_0 = 0.8 \text{ nm}$  (a)  $2bw_nbs(b_0, w_0, s_0; v_0, \{-v_0, u\})$  (b)  $2b_{2n-1}wb_{2n}s(\{b_0, b\}, w_0, s_0; v_0, -v_0)$  y (c)  $2bw_nbs(b_0, \{w_0, w\}, s_0; v_0, -v_0)$ .



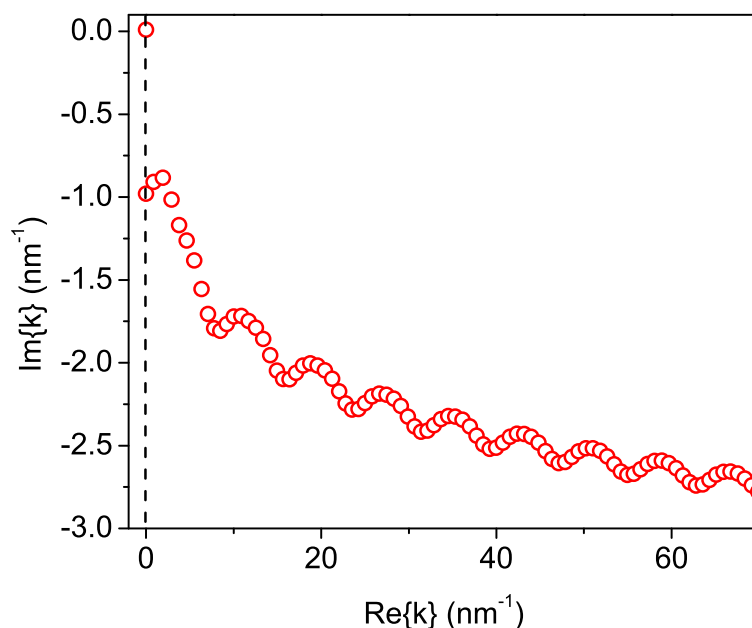


Figura 2.15: Distribución de polos del sistema  $2bwbs(b_0, w_0, s_0; v_0, -v_0)$  con parámetros  $s_0 = w_0 = 2b_0 = 0.8 \text{ nm}$  y  $v_0 = 0.2 \text{ eV}$ , con un estado ligado cercano al umbral  $\kappa_{2bwbs} = 0.01098i$ .

la distribución de polos tiene una estructura cualitativamente diferente a la distribución de polos del sistema  $bwb$  [fig. 2.12a] y no sólo cuantitativa.

Podemos observar que: las distribuciones de polos para los sistemas  $b$ ,  $w$ ,  $bw$ ,  $bwb$ , y  $2bwbs$  transparentes, mostrados en las figuras 2.7, 2.11, 2.12 y 2.15 respectivamente, es el hecho de que todas las resonancias  $\Re\{\kappa_n\} \neq 0$  satisfacen

$$\Re\{\kappa_{n\pm 1} - \kappa_n\} \approx \frac{\pi}{L}, \quad (2.2)$$

donde  $L$  es la longitud del sistema. Esto permite con gran facilidad proponer un polo aproximado en la rutina de Newton–Raphson que es empleada para encontrar los polos de la función de Green de onda saliente [Ap. C]. Además, este comportamiento de los polos corresponde al comportamiento asintótico de los polos de cualquier sistema de alcance finito  $L$  [27], para la región de energías grandes donde  $T(E) \approx 1$ .

Por último veamos cuales son los parámetros máximos para el sistema  $2bwbs$ ; para esto consideramos el conjunto de sistemas

$$2bwbs(b_0, 2b_0, 2b_0; v_0, -v_0),$$

para el cual fijando la anchura  $b_0$  se puede hacer una variación de la altura y la profundidad de los pozos simétricamente, o bien, fijando el valor de la altura  $v_0$  se puede estudiar

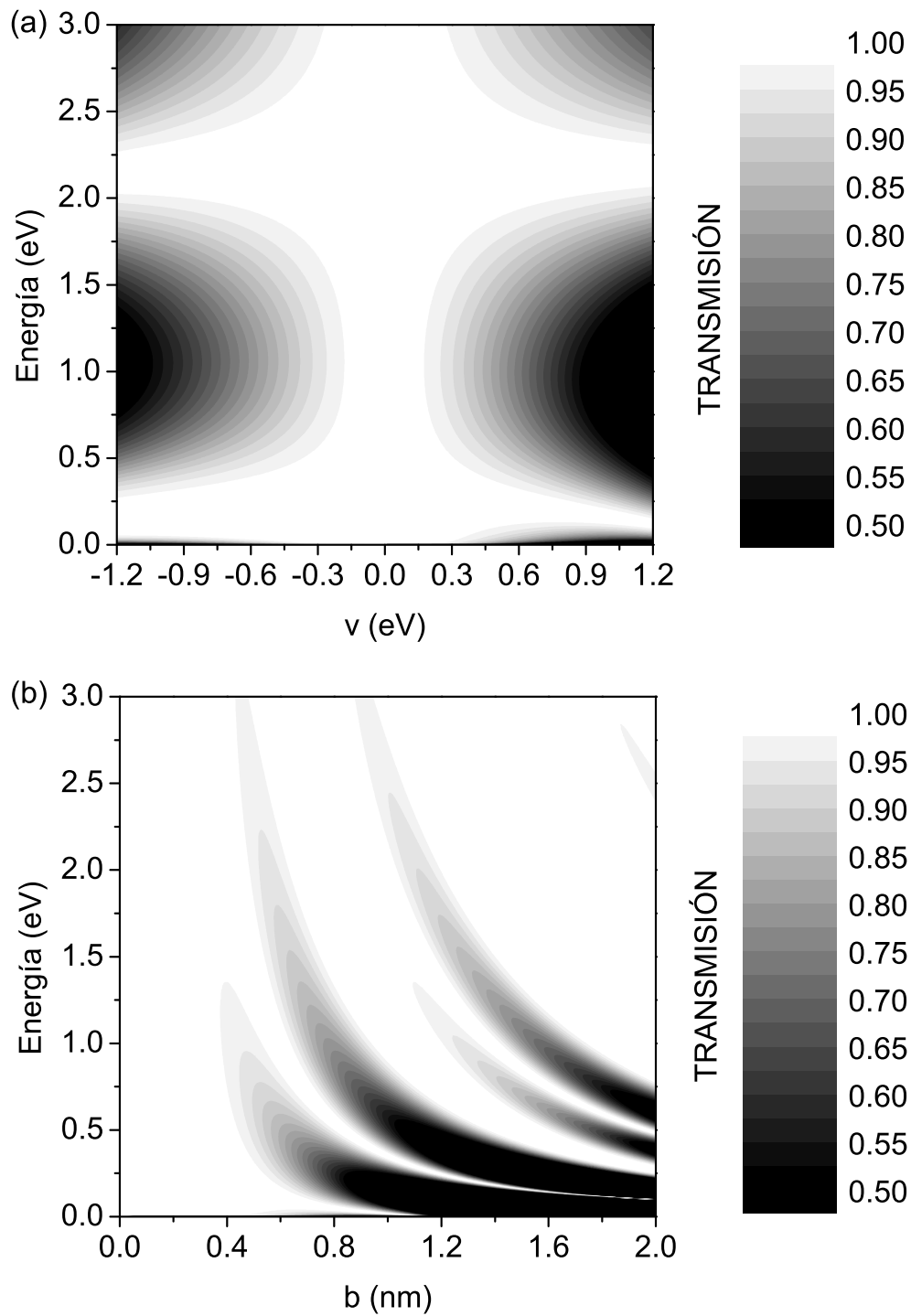


Figura 2.16: Transmisión del conjunto de sistemas (a)  $2bwbs(b_0, w_0, s_0; v, -v)$  con  $s_0 = w_0 = 2b_0 = 0.8 \text{ nm}$  y (b)  $2bwbs(b, 2b, 2b; v_0, -v_0)$  con  $v_0 = 0.2 \text{ eV}$ .

### 2.3 Construcción de sistemas transparentes.

sistemáticamente el comportamiento de la transmisión como función de la anchura de las barreras, note que la proporción del espacio  $s$ , los pozos  $w$  y barreras  $b$  es  $s = w = 2b_0$ .

La gráfica de la transmisión del conjunto de sistemas con  $b_0 = 0.4$  se muestra en la figura 2.16a, ésta exhibe que el valor  $v = 0.2 \text{ eV}$  es prácticamente el máximo que podemos considerar para que el sistema sea transparente, *i.e.*, los sistemas  $2bws(0.4, 0.8, 0.8; v, -v)$  con  $|v| < 0.2 \text{ eV}$  son transparentes. Por otro lado, si fijamos la altura  $v_0 = 0.2 \text{ eV}$  y mantenemos la proporción  $s = w = 2b$  encontramos que la anchura máximo es  $b = 0.4 \text{ nm}$ . La transmisión del conjunto de sistemas se muestra en la figura 2.16b, y para anchuras mayores se observa una estructura resonante.

## 3 Sistemas multibarreras.

En el capítulo 2 vimos que es posible construir un sistema transparente a partir de sistemas que no son transparentes [fig. 2.10, pág. 48], o bien a partir de la combinación de sistemas transparentes [fig. 2.16, pág. 56]; esto nos permitió encontrar los parámetros adecuados para que un sistema tipo  $2bwbs$  sea transparente [fig. 2.14, pág. 54].

En este capítulo estudiaremos la posibilidad de construir sistemas más grandes, *i.e.*, consideraremos cadenas largas de sistemas transparentes o cuasi-transparentes de tal forma que la composición forme un sistema transparente. En adelante nos referiremos al bloque fundamental (BB, por sus siglas en inglés “*Building Block*”) como la configuración más simple que describa cualitativamente al sistema. Por ejemplo el sistema  $2bwbs$  es formado por dos BB idénticos, donde el BB corresponde al sistema  $bwb$ .

Para fines de nuestro estudio catalogamos dos tipos de cadenas: *cortas* y *largas*. Llamamos *cadena corta* a aquellas que se forman con menos de cien BB's, mientras que denominamos como *cadena larga* a aquellas que son formadas por más de cien BB's. Estas las estudiamos en la secciones 3.1 y 3.2, respectivamente. Además, veremos otro tipo de sistemas multibarreras los cuales no son formados por un BB, sino más bien por una regla simple  $v_n = v(n)$ ,  $b_n = b(n)$ ; corresponden a la descripción de un potencial continuo, *i.e.*, aproximamos un potencial continuo por una sucesión de barreras y pozos [Secc. 3.3].

### 3.1. Cadenas cortas.

Iniciamos nuestro estudio con la posibilidad de construir sistemas transparentes formados por algunos BB's. Un ejemplo es el sistema  $2bwbs$  estudiado en el capítulo 2; esto nos llevaría a pensar que es posible construir sistemas con más de dos BB's.

Lo primero que debemos considerar es el hecho de que al combinar algunos BB's el estado ligado o antiligado  $\kappa_s$  cercano al umbral se aleja del origen, dando como resultado un estado  $\kappa_s \approx N\kappa_s$ , donde  $\kappa_s$  es el estado ligado o antiligado de la cadena y  $N$  el número de BB's que forman la cadena. Dicho esto, sabemos que se tienen que unir BB's que tengan un estado ligado y otro antiligado como primer aproximación. Así, si son  $\kappa_a$  el estado antiligado del primer BB y  $\kappa_b$  el estado ligado del segundo BB; al unir  $N = N_1 + N_2$  elementos de estos se tendrá que el orden de magnitud del estado ligado o antiligado del sistema será  $|\kappa_s| \approx |N_1\kappa_a + N_2\kappa_b|$ . En este caso indicamos el módulo ya que sabemos que estricta-

### 3 Sistemas multibarreras.

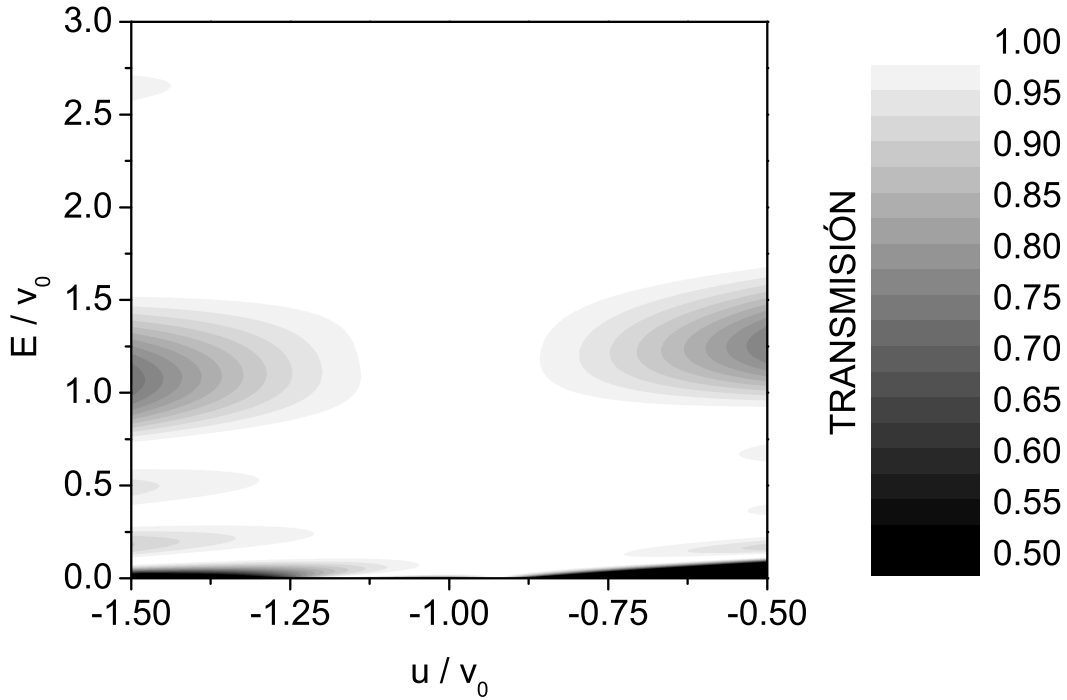


Figura 3.1: Transmisión de la cadena  $10bw_nbs(b_0, w_0, s_0; v_0, \{u_n | u_{2n+1} = -v_0 \wedge u_{2n} = u\})$ , con  $s_0 = w_0 = 2b_0 = 0.8 \text{ nm}$  y  $v_0 = 0.2 \text{ eV}$ .

mente no es una suma simple, pero lo más importante es que se tendrá la suma de un número positivo con uno negativo; provoca que el estado ligado o antiligado final se acerque al origen.

A partir del sistema  $bwb$  estudiado en el capítulo 2 podemos construir la colección de cadenas  $Nbw_nbs(b_0, w_0, s_0; v_0, \{u_n | u_{2n+1} = -v_0 \wedge u_{2n} = u\})$ , con  $s_0 = w_0 = 2b_0 = 0.8 \text{ nm}$  y  $v_0 = 0.2 \text{ eV}$ . En este caso, dejamos libre el parámetro  $u$ . Así podemos estudiar la transmisión de la colección de cadenas al optimizar el valor de la profundidad de los pozos pares en la cadena. La transmisión de esta colección se muestra en la figura 3.1, para una cadena de 10 BB's. Note que el conjunto de valores  $u_{2n}$  satisfacen la condición de transparencia si  $u_{2n}$  toma un valor alrededor de  $-v_0$ ; esto muestra que para el caso particular  $u_{2n} = -v_0$  el sistema es transparente, *i.e.*, la cadena simple  $10bwb$  es transparente.

Otro ejemplo que tenemos de forma inmediata es considerar el mismo BB pero ahora tomar 100 elementos. Si consideramos los mismos parámetros en la cadena de 100 BB's, *i.e.*,  $100bw_nbs(b_0, w_0, s_0; v_0, \{u_n | u_{2n+1} = -v_0 \wedge u_{2n} = u\})$  con  $s_0 = w_0 = 2b_0 = 0.8 \text{ nm}$ ,  $v_0 = 0.2 \text{ eV}$  podemos buscar el valor óptimo de  $u$ . La transmisión de este conjunto de sistemas se muestra en la figura 3.2, en la cual se observa que el valor  $u_{2n}$  próximo al valor  $-v_0$  hace que el sistema sea transparente. Sin embargo, es menos robusto que la cadena de 10 BB [fig. 3.1].

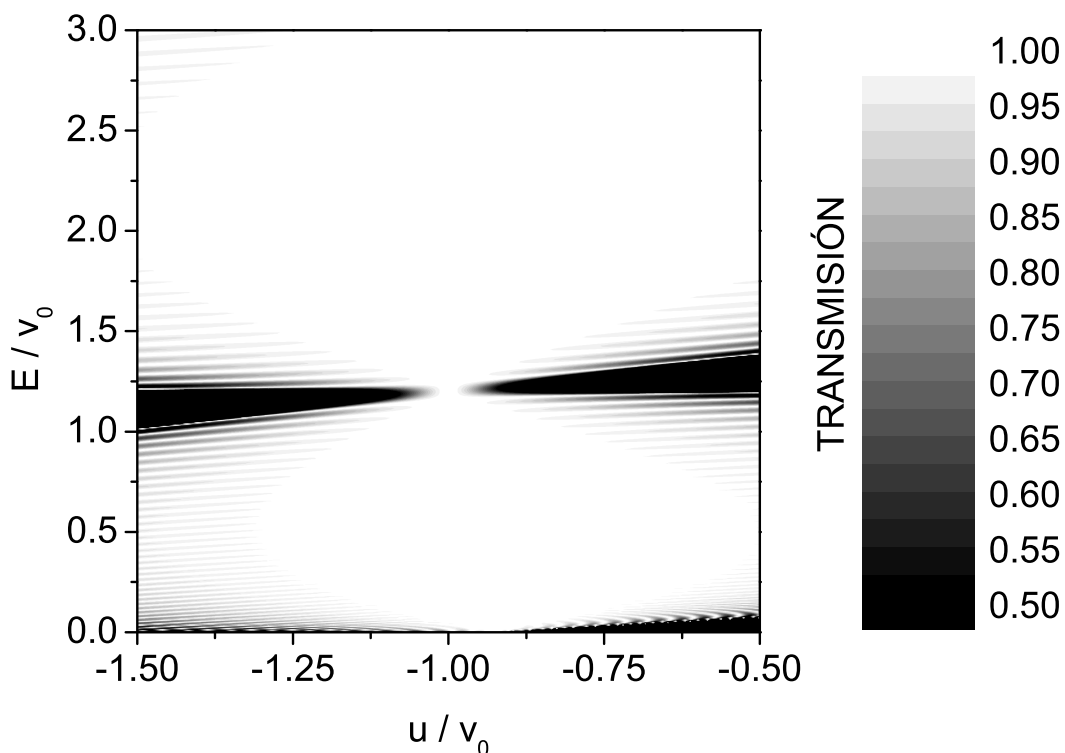


Figura 3.2: Transmisión de la cadena  $100bw_nbs(b_0, w_0, s_0; v_0, \{u_n | u_{2n+1} = -v_0 \wedge u_{2n} = u\})$ , con  $s_0 = w_0 = 2b_0 = 0.8 \text{ nm}$  y  $v_0 = 0.2 \text{ eV}$ .

Estos dos ejemplos muestran que la transparencia en cadenas cortas es posible o, por lo menos parcialmente;<sup>1</sup> abre la posibilidad de considerar sistemas más grandes y complejos.

Un hecho importante que observamos en la figura 3.2 es que aparece una zona de opacidad para componentes de energía mayores a la altura de la barrera  $E > v_0$ ; tal es el caso del sistema  $100bw_nbs(0.4, 0.8, 0.8, 0.2, \{u_{2n+1} = -0.2, u_{2n} = -0.18\})$ . La transmisión de este sistema se muestra en la figura 3.3 comparado con el sistema  $100bwbs(0.4, 0.8, 0.8; 0.2, -0.2)$ . Note que en ambos sistemas la transmisión presenta oscilaciones. Sin embargo, para el sistema transparente no se observa dicha estructura cuando empleamos el criterio de la gráfica 3.2 o, en otras palabras en la definición de transparencia [Cap. 1].

Podemos intuir que este efecto es debido a una interferencia destructiva entre resonancias lejanas, ya que al formar un sistema por varias barreras, sabemos que las resonancias se agrupan, formando lo que se conoce como bandas de energía. Verificamos esto al calcular

<sup>1</sup>En este caso decimos que es parcialmente transparente porque lo es en la región de tunelaje, aunque a energías grandes no lo es.

### 3 Sistemas multibarreras.

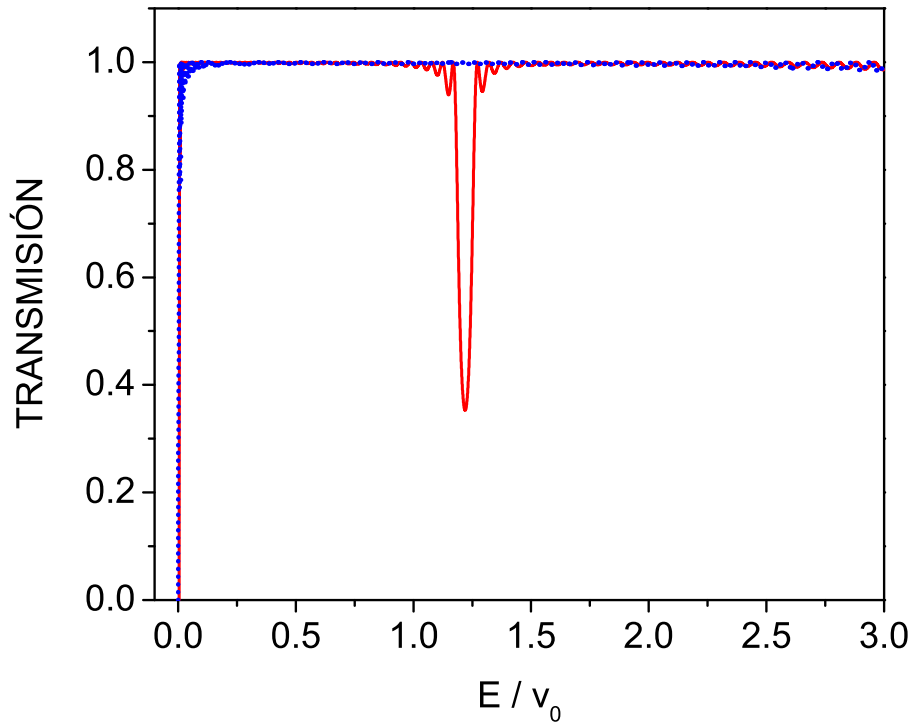


Figura 3.3: Transmisión de la cadena  $100bw_nbs(b_0, w_0, s_0; v_0, \{u_n | u_{2n+1} = -0.2 \wedge u_{2n} = -0.18\})$  (línea continua) en comparación con la cadena  $100bw_nbs(b_0, w_0, s_0; v_0, -v_0)$ , con  $s_0 = w_0 = 2b_0 = 0.8 \text{ nm}$  y  $v_0 = 0.2 \text{ eV}$ .

la transmisión del conjunto de sistemas  $100bwbs(0.4, 0.8, s; 0.2, -0.2)$  la cual se muestra en la figura 3.4. Puesto que, al aumentar la separación  $s$  entre BB's las resonancias se juntan aumentando el efecto de la interferencia destructiva.

Otro aspecto que observamos en la figura 3.4 es que aparece una región opaca en la transmisión, y en la misma podemos observar que una extensión de la gráfica a energías más grandes, mostrará una región opaca, aún para valores  $s \sim b_0$ . Además, también podemos anticipar que dicho efecto debe presentarlo la cadena más corta  $10bwbs$  [fig. 3.1] para valores grandes de energía.

En la figura 3.5 mostramos la transmisión como función de la energía para los sistemas  $100bwbs$  y  $10bwbs$ . Note que ambos sistemas presentan un mínimo de transmisión alrededor de siete veces la altura de las barreras  $v_0 = 0.2 \text{ eV}$ . Este efecto es desalentador en lo que respecta a la transparencia. Sin embargo, es un resultado que va más allá de la intuición física en el sentido que clásicamente una partícula con una energía mayor a la altura de la barrera tiene probabilidad uno de atravesar la barrera, mientras que para estos sistemas cuánticos encontramos que las partículas con energía menor a la altura del potencial tunean con

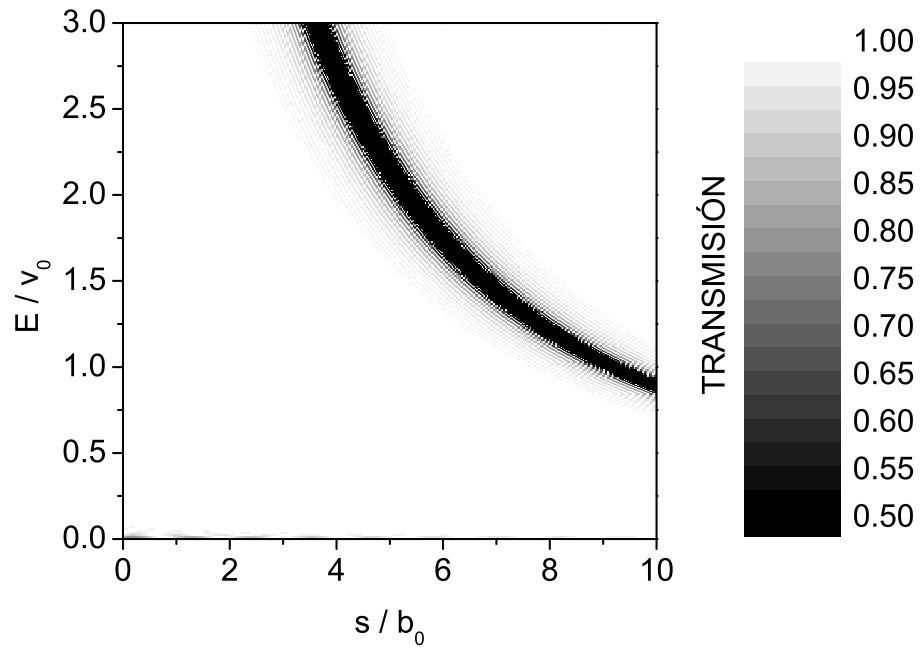


Figura 3.4: Transmisión como función de la energía y la separación entre BB de la cadena  $100bwb(b_0, w_0, s; v_0, -v_0)$  con  $2b_0 = w_0 = 0.8 \text{ nm}$  y  $v_0 = 0.2 \text{ eV}$ .

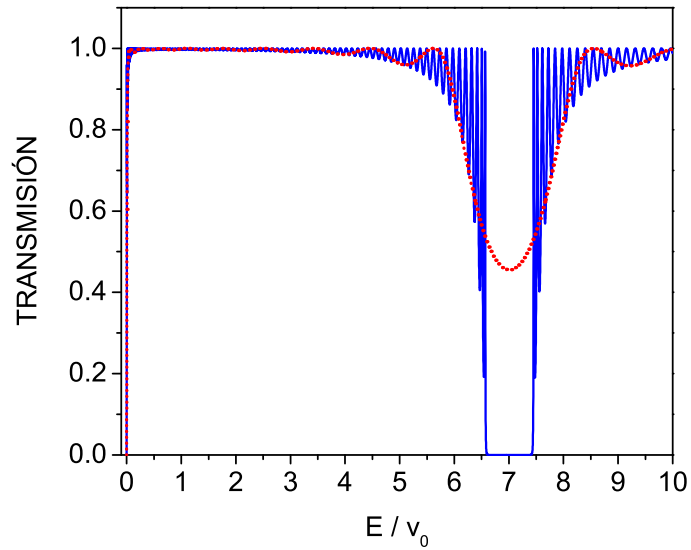


Figura 3.5: Transmisión como función de la energía de los sistemas  $100bwbs(b_0, w_0, s_0; v_0, -v_0)$  (línea continua) y  $10bwbs(b_0, w_0, s_0; v_0, -v_0)$  (línea punteada) con  $b_0 = s_0 = 0.4 \text{ nm}$ ,  $w_0 = 0.8 \text{ nm}$  y  $v_0 = 0.2 \text{ eV}$ .



### 3 Sistemas multibarreras.

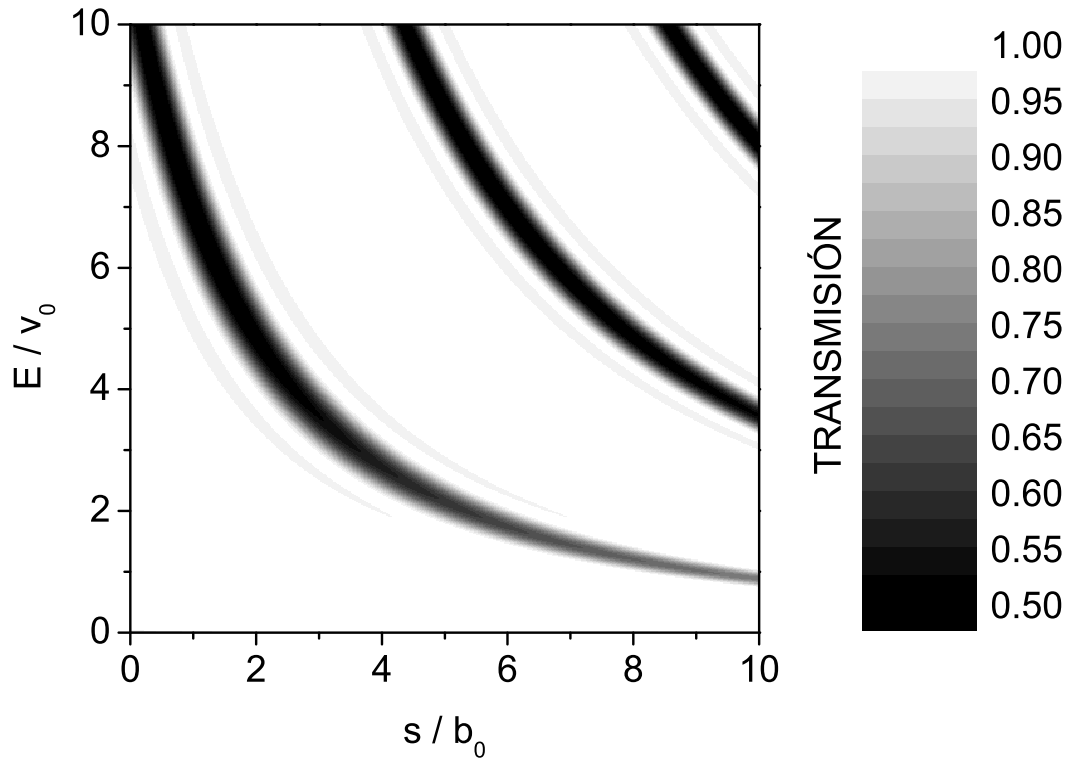


Figura 3.6: Transmisión como función de la energía y la separación entre BB de la cadena  $10bwb(b_0, w_0, s; v_0, -v_0)$  con  $2b_0 = w_0 = 0.8 \text{ nm}$  y  $v_0 = 0.2 \text{ eV}$ .

probabilidad casi uno, y en contra parte tenemos que para algún rango de energía sienten fuertemente la presencia del potencial. El efecto es más drástico en el sistema de 100 BB's para el cual las partículas con energía dentro del rango  $E = 7v_0 \pm 0.5v_0$  son reflejadas en su totalidad; ¡ven una pared impenetrable! de forma equivalente a una *banda de energía prohibida*. Además, la figura 3.5 muestra que el centro de la banda se puede controlar variando la separación ( $s$ ) entre BB's. Un cálculo de la transmisión equivalente a la figura 3.4 pero para el sistema de 10 BB's se muestra en la figura 3.6, en la cual observamos que la banda de energía aparece a energías grandes cuando la separación entre BB's es pequeña; mientras que al aumentar ésta, la banda aparece a energías menores. Además, muestra que no es un única la banda, sino más bien una colección de bandas, *i.e.*, el sistema parcialmente transparente presenta varias regiones de transparencia.

Exhibimos que el centro y ancho de la banda dependen de la separación entre BB's [fig. 3.6]. Podemos considerar a estos sistemas transparentes, puesto que lo son en la región de tunelaje, *i.e.*, una partícula con energía menor a  $6v_0$  pasa con probabilidad casi uno.

Finalmente, se muestra la distribución de polos de los sistemas  $10bwb$ s y  $100bwb$ s en las

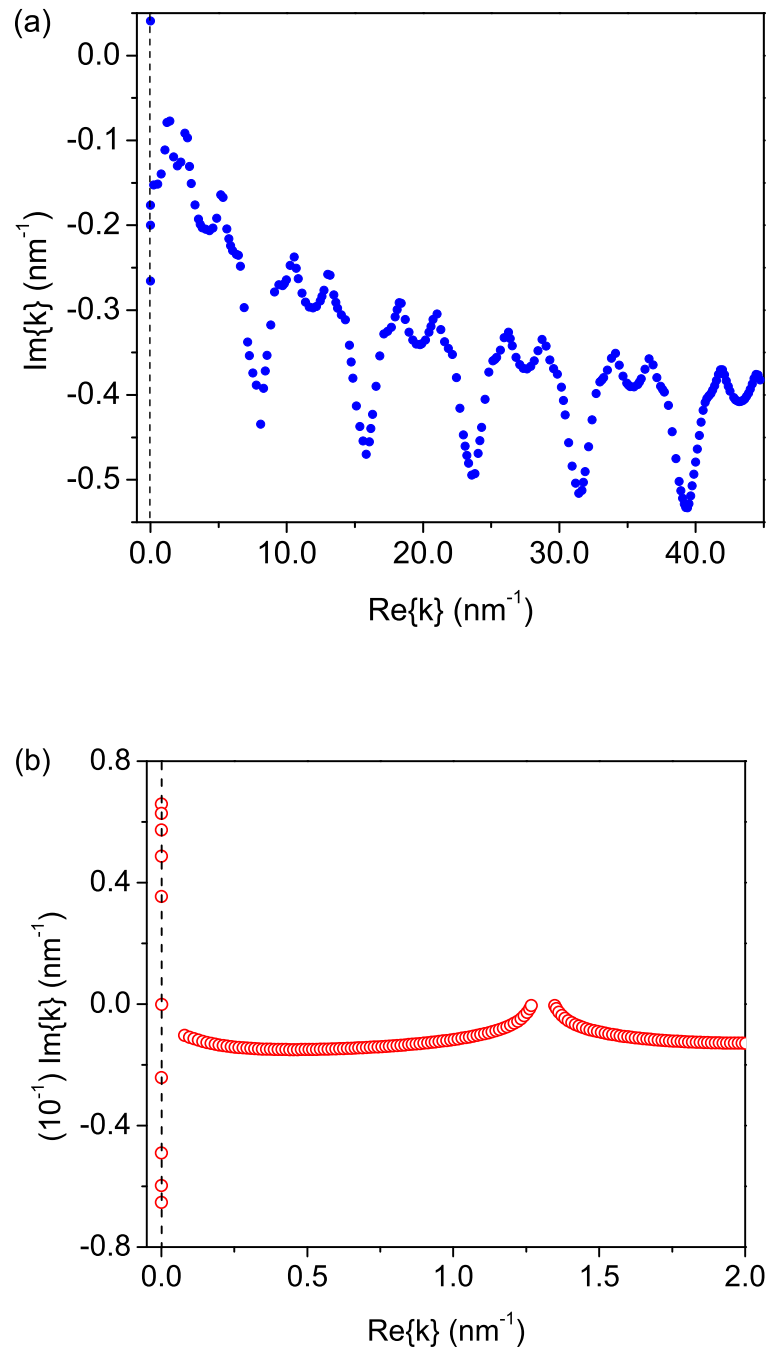


Figura 3.7: Se muestra la distribución de polos correspondientes a los sistemas (a)  $10bwb(b_0, w_0, s_0; v_0, -v_0)$  y (b)  $100bwb(b_0, w_0, s_0; v_0, -v_0)$  con  $2b_0 = s_0 = w_0 = 0.8 \text{ nm}$  y  $v_0 = 0.2 \text{ eV}$ .

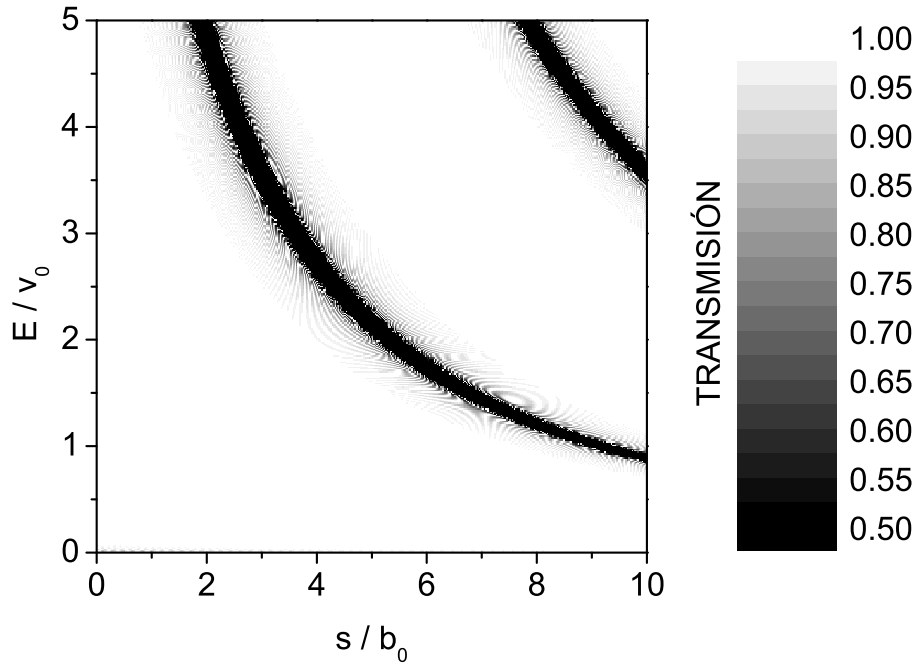


Figura 3.8: Transmisión del sistema  $500bwb(b_0, w_0, s; v_0, -v_0)$  como función de la energía y la separación entre BB, con  $2b_0 = w_0 = 0.8 \text{ nm}$  y  $v_0 = 0.2 \text{ eV}$ .

figuras 3.7a y 3.7b respectivamente. Note que la distribución de polos del sistema  $100bwbs$  [fig. 3.7b] presenta una banda<sup>2</sup> correspondiente a la banda que presenta la transmisión para la cual  $T(E) = 0$ , *i.e.*, la fórmula (2.2) [pág. 55] no es válida para todos los polos. Sin embargo, sí lo es para la cadena de polos. Además, desde un punto de vista de las distribuciones de polos entendemos que la banda de energía que presenta la transmisión es debida a una interferencia entre cadenas de polos y no a un par de polos en particular, *i.e.*, se aíslan las cadenas de polos, efecto semejante a un polo o minibanda aislada.<sup>3</sup>

## 3.2. Cadenas largas.

Ahora consideramos el efecto de transparencia parcial en cadenas largas; estas como ya se dijo anteriormente son aquellas que están formadas por más de cien BB's. Como ya sabemos, estos sistemas multibarrera deben presentar diferentes bandas de energía para los cuales la transmisión es muy baja o nula; pero estamos interesados en verificar si bajo ciertos parámetros del sistema se tiene transparencia en la región de tunelaje, *i.e.*, para energías menores a la altura de la barrera.

<sup>2</sup>En este sentido nos referimos a que la separación entre la parte real de las resonancias no es la misma por lo menos para un par  $\Re\{\kappa_{n+1} - \kappa_n\} \neq \pi/L$ .

<sup>3</sup>Como ejemplos se pueden ver los sistemas  $bsb$  [fig. 1.6, pág. 14] y  $bsbsb$  [fig. 1.8, pág. 16].

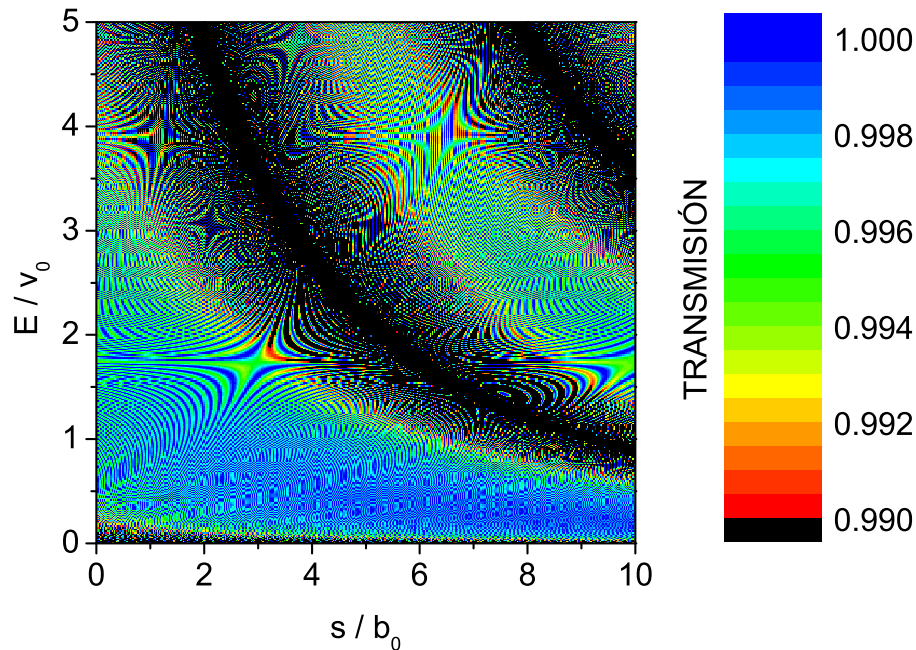


Figura 3.9: Se muestra una escala más fina en la transmisión de la figura 3.8.

Consideremos el BB  $bwb(0.4, 0.8; 0.2, -0.2)$  para formar una cadena larga de 500 BB's, estudiamos la colección de sistemas como función de la separación entre BB's. La transmisión de este conjunto se muestra en la figura 3.8 como función de la energía y la separación  $s$  entre BB's.

Observamos nuevamente que se tiene transparencia en la región de tunelaje, y que aparecen las bandas de energía, semejantes a las figuras 3.4 y 3.6. Sin embargo, en la figura 3.8 se aprecia la estructura oscilatoria de la transmisión semejante a la mostrada en la figura 3.5. Esto nos motiva a hacer un zoom de la transmisión que se muestra en la figura 3.9, y en la cual se observa la complejidad matemática de la transmisión, semejante a la de un fractal (no es fractal).

Una gráfica interesante es considerar el sistema  $500bwbs(0.4, 0.8, 0.8; v, -v)$ , esto nos permite ver si es posible encontrar un valor óptimo  $v$  para el cual el sistema sea transparente casi para todo el rango de energía. En la figura 3.10 se muestra la transmisión de esta colección de sistemas como función de la energía y el parámetro  $v$ . Note que, éste será transparente si se considera un valor  $v \approx 0$ , que es de poco interés. Sin embargo, al fijar la altura de las barreras y pozos; por ejemplo  $v_0 = 0.3 \text{ eV}$ , la figura 3.10 muestra que el sistema es transparente en la región de tunelaje.

### 3 Sistemas multibarreras.

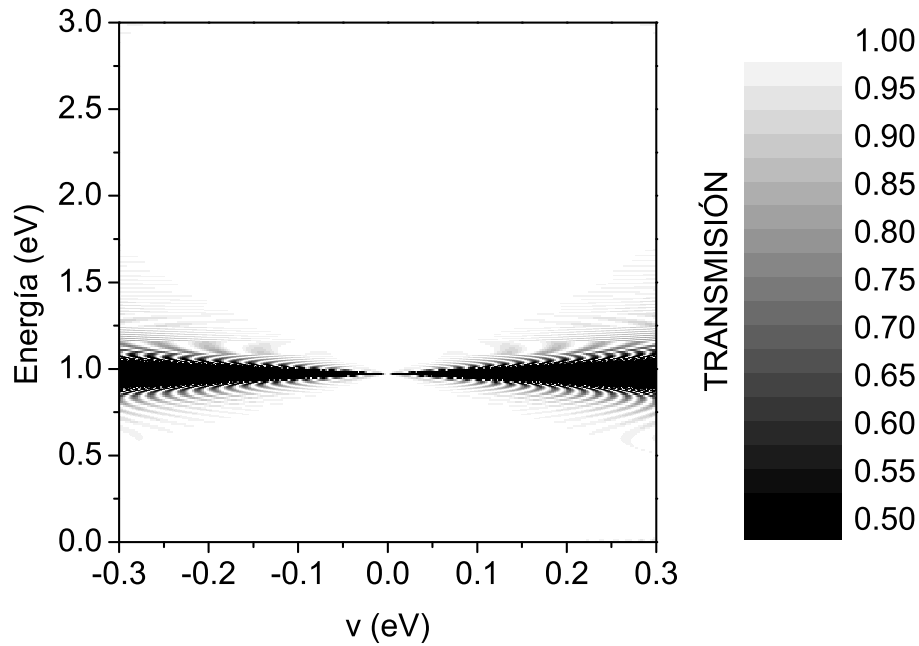


Figura 3.10: Transmisión de la colección de sistemas  $500bws(0.4, 0.8, 0.8; v, -v)$  como función de la energía y el parámetro  $v$ .

En conclusión podemos decir que las cadenas son parcialmente transparentes y que la transparencia total se obtendrá al considerar valores pequeños en los parámetros, esto nos llevaría a pensar en un sistema puramente matemático, *i.e.*, lejos de una realidad física en la actualidad.<sup>4</sup>

Un hecho interesante de las cadenas largas es que, si son formadas por sistemas transparentes se pueden encontrar el número y parámetros adecuados de BB's para que se cumpla  $T(E) \approx 1$  si  $E < v_0$  excepto para una energía bien definida  $E_0$  donde  $T(E_0) = 0$ . Resultado que se obtiene para la cadena  $500bws$  si aumentamos la separación entre BB's hasta valores  $s > 10b_0$  [fig. 3.8]. Este resultado invierte los papeles entre la transmisión y reflexión cuando se buscan sistemas con resonancias aisladas. En otras palabras, el sistema de Sollner  $bsb(5, 5; 0, 23)$  [Secc. 1.2; pág. 11] tiene una resonancia aislada que satisface  $T(E) \approx 0$  si  $E < v_0$  excepto para un valor  $E_0$  donde se cumple  $T(E_0) = 1$ ; ahora el sistema  $500bws(0, 4, 0, 8, s; 0, 2, -0, 2)$  con  $s > 10b_0$  satisface que  $R(E) \approx 0$  si  $E < v_0$  excepto para un valor  $E_0$  donde  $R(E_0) = 1$ . Podríamos llamar a estos valores como *antirresonancias*.

<sup>4</sup>Para los padres de la mecánica cuántica considerar una perturbación cuadrada era únicamente en sentido académico. En la actualidad podemos imaginar sistemas físicos reales donde el potencial es modelado por barreras o pozos; tal es el caso de sistemas cuánticos artificiales como las heteroestructuras.

### 3.3. Potenciales continuos (aproximación).

Otro tipo de sistemas de interés son aquellos que no se forman a partir de uno o más BB's; estos tienen la desventaja de ser más complejos en su descripción. Por ejemplo, supongamos que tenemos el potencial

$$v(x) = Ax^2 \cos(Bx)e^{-Cx^2}, \quad -\frac{L}{2} < x < \frac{L}{2}, \quad (3.1)$$

y cero en otro lugar. Claramente, no es trivial encontrar la matriz de transferencia de este sistema. Sin embargo, se puede aproximar por una colección de barreras y/o pozos delgados; como el mostrado en la figura 3.11.

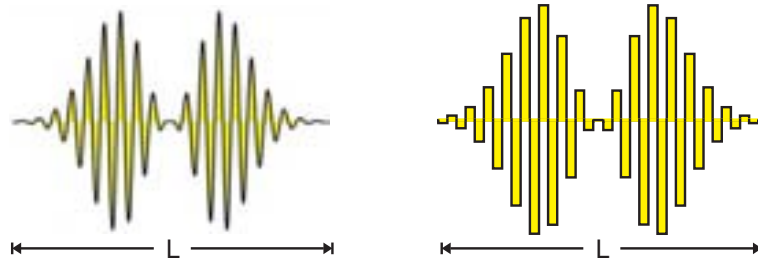


Figura 3.11: Potencial  $v(x) = Ax^2 \cos(Bx)e^{-Cx^2}$  modelado mediante una partición gruesa de barreras y pozos y representada por el sistema  $(2n + 1)b_m(b_0; \{v_m | v_m = v(x^m)\})$  donde  $b_0 = L/(2n + 1)$  y  $x^m = mL/(2n + 1)$  con  $m = 0, \pm 1, \dots, \pm n$ .

La aproximación mediante un conjunto de barreras y pozos del potencial exacto se puede hacer de diferente forma: (a) considerar una partición gruesa semejante a la mostrada en la figura 3.11, que corresponde a olvidar la estructura fina del potencial y (b) hacer una partición fina en la región de interacción. Nosotros hacemos los dos cálculos, y para este fin supondremos que  $v(-BL/2) = v(BL/2) = 0$ ; por lo tanto se tiene que

$$B = \frac{(2n + 1)\pi}{L},$$

donde  $2n + 1$  es el número total de perturbaciones cuadradas en el sistema. Así, para una partición gruesa se tiene que los ceros del potencial son  $x = 0$  y  $x = x_m$  donde

$$x_{\pm m} = \pm \frac{(2m + 1)L}{4n + 2}, \quad m = 0, 1, \dots, n.$$

Esto nos permite calcular las anchuras de las barreras y pozos

$$b_0 = w_0 = |x_{\pm(m+1)} - x_{\pm m}| = \frac{L}{2n + 1},$$

### 3 Sistemas multibarreras.

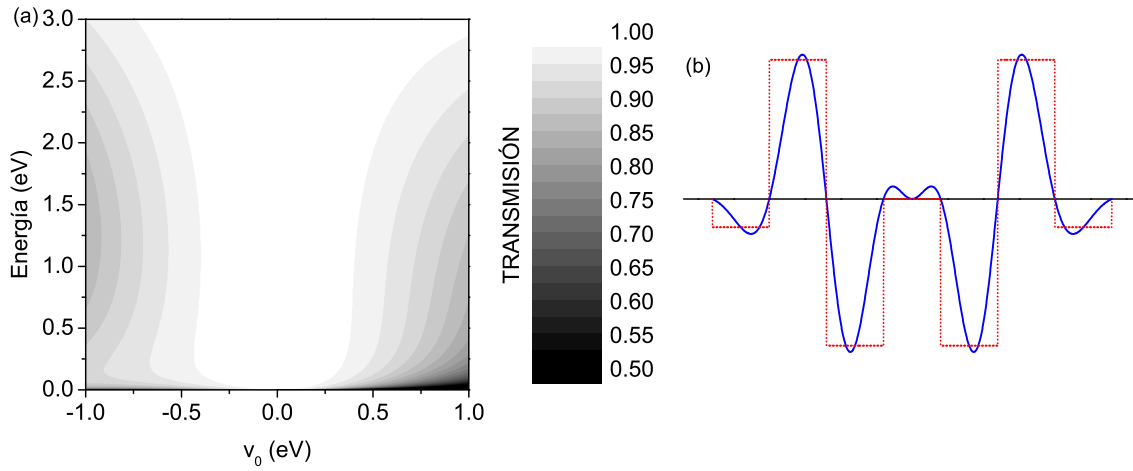


Figura 3.12: (a) Transmisión como función de la energía y altura máxima  $v_0 = \max\{|v_n|\}$  de una aproximación gruesa al potencial Ec. (3.1) con  $B = \pi/4$ ,  $C = 0.03$  y  $L = 2.8 \text{ nm}$ . El sistema es representado por  $7b_n(0.4; \{v_n | v_n = v_0 v(x^n)/v_{max}\})$ . (b) Se muestra el perfil del potencial exacto (línea continua) y se compara con el perfil del potencial usando la partición gruesa (línea punteada).

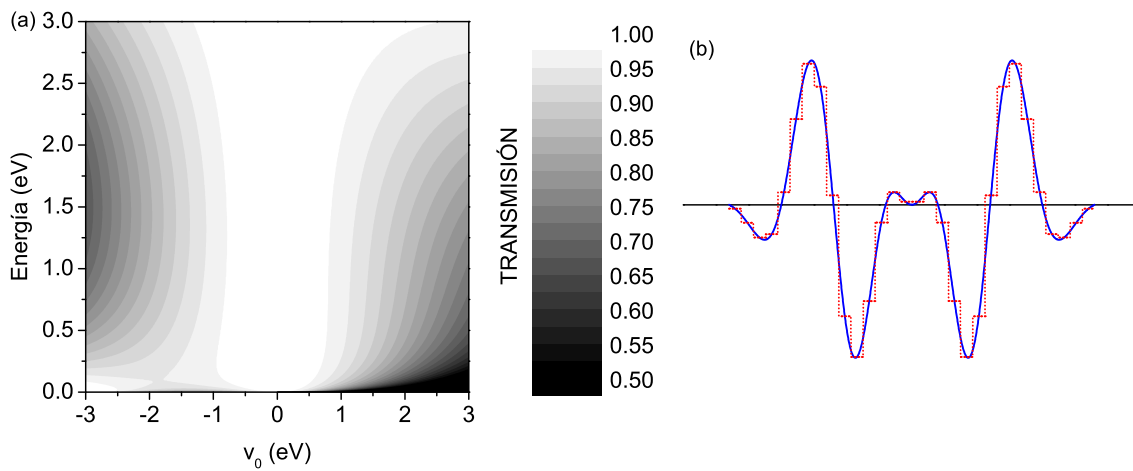


Figura 3.13: (a) Transmisión como función de la energía y altura máxima  $v_0 = \max\{|v_n|\}$  de una aproximación fina al potencial (3.1) con  $B = \pi/4$ ,  $C = 0.03$  y  $L = 2.8 \text{ nm}$ , el sistema es aproximado por  $30b_n(L/30; \{v_n | v_n = v_0 v(x^n)/v_{max}\})$  donde  $x^n$  es el centro de cada barrera o pozo. (b) Se muestra el perfil del potencial exacto (línea continua) y se compara con el perfil del potencial asociado a la partición fina (línea punteada).

### 3.3 Potenciales continuos (aproximación).

la altura o profundidad de los pozos la tomaremos como el valor del potencial en la parte central de la barrera, *i.e.*,

$$x^r = x_r + \frac{b_0}{2} = \frac{rL}{2n+1}, \quad r = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm N,$$

donde  $2N + 1$  es el número total de particiones que se hacen al potencial. Así, la partición más pequeña (partición gruesa) que se le puede hacer al potencial, es descrita por  $(2n + 1)b_m(b_0; \{v_m | v_m = v(x^m)\})$ , *i.e.*,  $N = n$ . Sin embargo, aumentar el número de particiones no está limitado a números impares  $2n + 1$ , por lo que, se puede generalizar y escribir una partición fina del potencial como  $\mathcal{N}b_m(L/\mathcal{N}; \{v_m | v_m = v(x^m)\})$ , donde  $\mathcal{N}$  es el número total de particiones. Note que, en este caso no es conveniente considerar la unión de sistemas  $bw$  puesto que la escritura del potencial es más complicada y no se obtiene mayor información del sistema.

Como primer ejemplo, supongamos que  $n = 3$ , *i.e.*, consideramos un sistema de siete perturbaciones cuadradas usando una aproximación gruesa al potencial (3.1); tomamos como longitud del sistema  $L = 2.8 \text{ nm}$ . Así la anchura de cada barrera cuadrada es  $b_0 = 0.4 \text{ nm}$ ; igual que en los casos considerados anteriormente. Para analizar correctamente el comportamiento del sistema como función de la altura de las barreras, renormalizamos el potencial mediante  $v_{max} = \text{máx}\{|v(x_n)|\}$ , así el sistema  $7b_n(0.4; \{v_n = v_0 v(x^n)/v_{max}\})$  representa una colección de sistemas de la misma longitud y con máximo  $v_0$ . La transmisión como función de la energía y  $v_0$  se muestra en la figura 3.12, en la cual se observa que existe transparencia para valores  $v_0$  dentro del rango  $V_0 = \pm 0.2 \text{ eV}$  aproximadamente.

La transmisión como función de la energía y  $v_0$  para una aproximación de (3.1) con una partición fina de 30 barreras se muestra en la figura 3.13, y se observa que el rango de valores para el cual se cumple la transparencia aumenta hasta un valor casi de  $\pm 0.5 \text{ eV}$ ; es de esperar por continuidad que si hacemos que la partición tienda a infinito, *i.e.*,  $b_n \rightarrow 0$ , la propiedad de transparencia a lo menos se mantendrá en el mismo rango de energías. Por lo tanto, encontramos para este ejemplo que, la continuidad del potencial favorece el efecto de la transparencia.

Ahora consideremos el mismo tipo de potencial (3.1) pero con  $n = 10$ , *i.e.*, usamos una aproximación gruesa de 21 barreras. Nuevamente si fijamos las anchuras de las barreras  $b_0 = 0.4 \text{ nm}$ ; la longitud del sistema es  $L = 8.4 \text{ nm}$ . La transmisión como función de la energía y  $v_0$  se muestra en la figura 3.14a para la aproximación gruesa y en la figura 3.14b para una aproximación fina de 100 barreras. Nuevamente se encuentra que la aproximación fina al potencial es más transparente que la aproximación gruesa. Además, este sistema que es más grande también tiene un rango de energías mayor para el cual se da la transparencia, comparado con el sistema  $7b_n$  [figs. 3.12 y 3.13]. Sin embargo, es posible apreciar en la figura 3.14 que se obtiene una región de opacidad; en este caso para valores de energía  $E \sim 5 \text{ eV}$  si consideramos  $v_0 \sim 1 \text{ eV}$ .



### 3 Sistemas multibarreras.

Este hecho abre la posibilidad de considerar varios sistemas, tales como cadenas de potenciales Pöschl–Teller [31]. En particular este resultado muestra que pequeñas variaciones en un perfil del potencial cuadrado no afecta la transparencia del sistema, sino más bien aumenta el rango de valores para el cual el sistema es transparente.

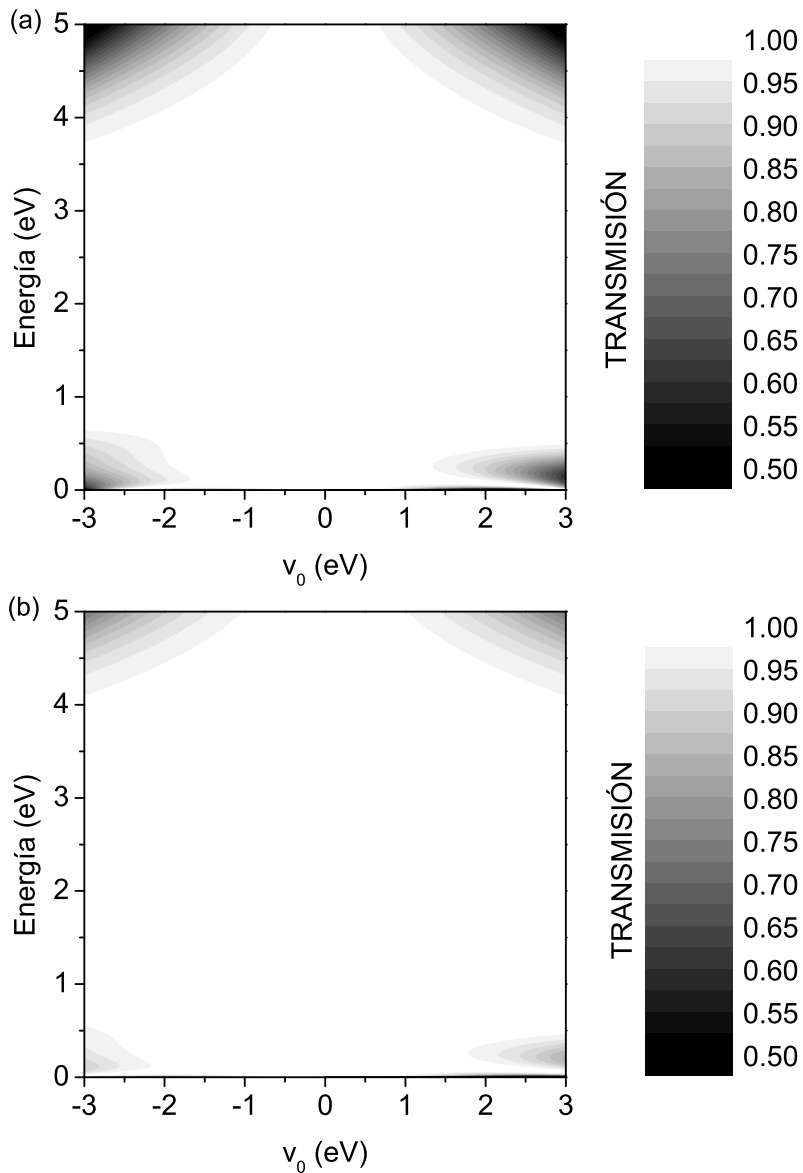


Figura 3.14: Transmisión como función de la energía y altura máxima  $v_0 = \max\{|v_n|\}$  del potencial (3.1) usando: (a) una partición gruesa  $21b_n(0.4; \{v_n|v_n = v_0v(x^n)/v_{max}\})$  y (b) una partición fina  $100b_n(L/100; \{v_n|v_n = v_0v(x^n)/v_{max}\})$ , donde  $x^m$  es el centro de cada barrera o pozo y  $L = 8.4 \text{ nm}$ .

## 4 El efecto de la masa.

En los capítulos anteriores se han considerado diferentes sistemas que tienen la propiedad de transparencia. En los ejemplos que se han dado, se tomó como caso particular la masa efectiva del electrón en una heteroestructura de arseniuro de galio [ $m^* = 0.067 m_e$ ] a lo largo de todo el sistema. Está fue considerada porque inicialmente nos motivó una posible realización experimental basada en la construcción de un sistema multibarrera a partir de una heteroestructura de *GaAs* dopada con *AlAs*; compuesto que se conoce por el nombre *arseniuro de galio-aluminio* y denotado por  $Al_\eta Ga_{1-\eta} As$  [3], donde  $\eta$  es la concentración de aluminio.

En este capítulo estudiamos otro aspecto importante en la transmisión, que es el efecto de la masa. Esto es porque sabemos que los sistemas transparente estudiados anteriormente son robustos frente a pequeñas variaciones de los parámetros del potencial.<sup>1</sup> Sin embargo, un parámetro del sistema completo es la masa de la partícula; por lo que tratamos de averiguar qué pasa cuando la masa de la partícula cambia<sup>2</sup> ¿la transparencia se conserva?. Tenemos dos situaciones diferentes: (a) La aproximación de masa constante a lo largo de todo el espacio [Secc. 4.1]; esta se ha considerado en los capítulos anteriores. Sin embargo, sólo consideramos el caso particular  $m^* = 0.067 m_e$  que corresponde a una heteroestructura de *GaAs*; en esta sección se hace un estudio de la transmisión como función de la masa para diferentes sistemas, en este caso el sistema cambia al cambiar la masa de la partícula y (b) masa variable [Secc. 4.2]. Sabemos que el electrón se comporta como una partícula de masa  $m^*$  (en general  $m^* \neq m_e$  donde  $m_e$  es la masa del electrón) en una heteroestructura de un compuesto químico en particular, *i.e.*, la masa depende del compuesto químico. Por ejemplo, si se construye un sistema multibarrera con  $Al_\eta Ga_{1-\eta} Al$ , las barreras y pozos son formados en la heteroestructura al variar la concentración  $\eta$ , *i.e.*, estrictamente cambiamos el compuesto químico, lo que muestra que la masa depende de la concentración  $\eta$  [ $m = m(\eta)$ ]. Esto hace que la masa dependa de la posición explícitamente. Por lo tanto, un electrón en dicho sistema tendrá una masa diferente si se encuentra en una barrera o en un pozo. Por esta razón consideramos el problema de masa variable.

---

<sup>1</sup>Anchuras, alturas, profundidades y separación entre BB's; vea por ejemplo la transmisión como función de la energía y un parámetro del potencial para los sistemas *bwb* [fig. 2.2, pág. 35], *2bwbs* [fig. 2.16, pág. 56], *10bwbs* [fig. 3.1, pág. 60] o para la aproximación de un potencial continuo [fig. 3.13, pág. 70].

<sup>2</sup>Es sabido que en una heteroestructura la masa efectiva del electrón cambia como función de la concentración del material con el que se está dopando. Por ejemplo, la masa efectiva del electrón en *GaAs* es de  $m^* = 0.067 m_e$ , mientras que para *AlAs* es de  $m^* = 0.15 m_e$  [1].

#### 4 El efecto de la masa.

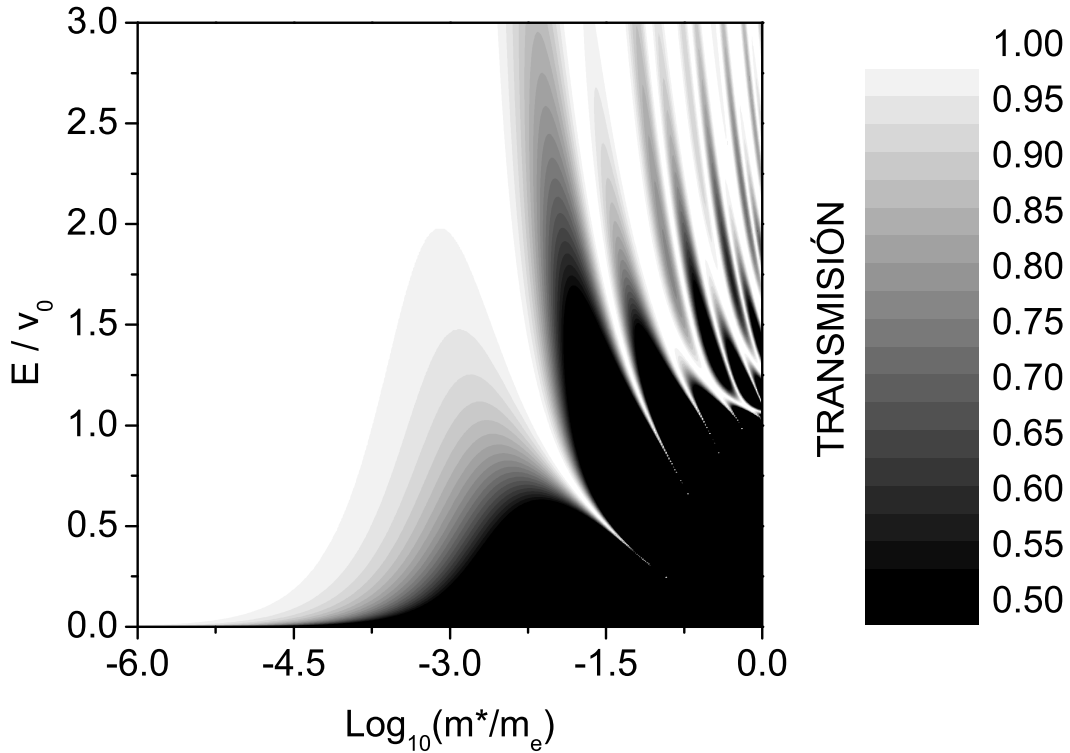


Figura 4.1: Transmisión del sistema Sollner como función de la energía y la masa efectiva del electrón.

### 4.1. Masa constante.

Un primer problema que deseamos analizar es el efecto que produce la masa de la partícula en la transmisión. Podemos llegar a una conclusión rápidamente si consideramos la ecuación de eigenvalores

$$-\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x) + \frac{2m}{\hbar^2}V(x)\psi(x) = k^2\psi(x), \quad (4.1)$$

donde la energía es  $E = \hbar^2 k^2 / 2m$  y  $V(x)$  es el potencial. Note que el potencial está modulado por la masa; así intuitivamente podemos decir que una partícula con masa muy pequeña (en comparación con la masa del electrón) no siente el efecto del potencial. Nos preguntamos lo siguiente: ¿dado un sistema con potencial  $V(x)$  arbitrario de alcance finito, para qué valores de la masa  $m$  el sistema es transparente? o bien, ¿siempre existe un valor  $m \neq 0$  para el cuál el sistema es transparente?.

Un primer ejemplo es considerar el sistema Sollner  $bsb(5, 5; 0.23)$ ; analizamos sistemáticamente este sistema variando el valor de la masa; suponemos que se trata de un electrón que

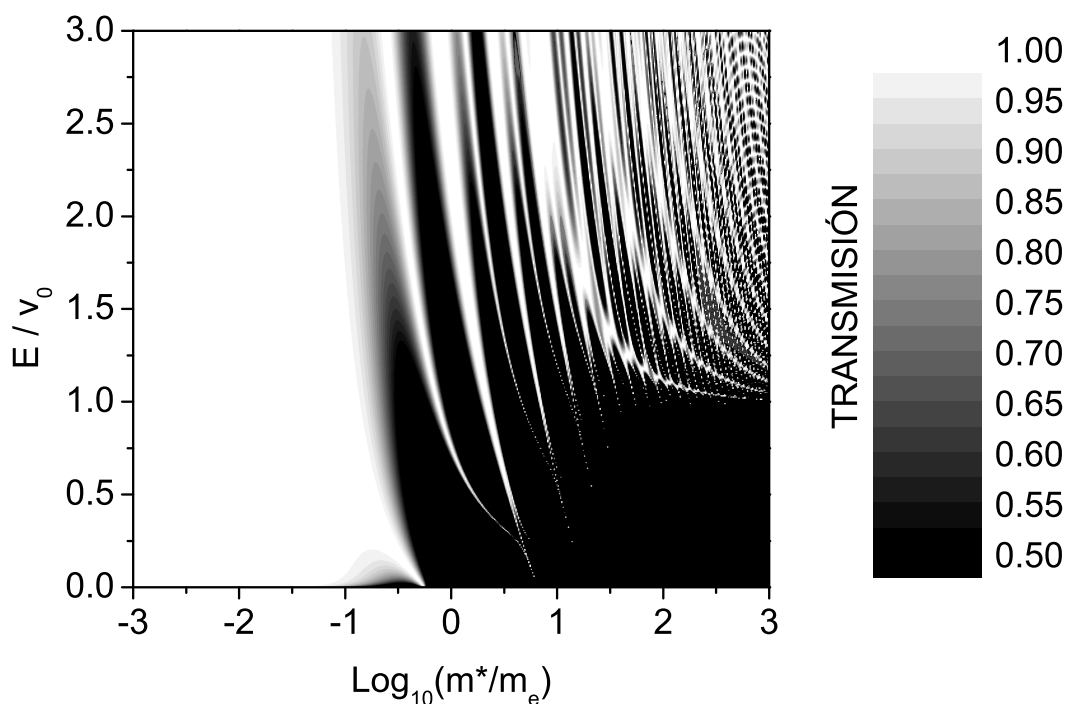


Figura 4.2: Transmisión del sistema  $2bwbs(0.4, 0.8, 0.8; 0.2, -0.2)$  como función de la energía y la masa efectiva del electrón.

tiene una masa efectiva  $m^*$ . Esto nos permite considerar únicamente el factor adimensional  $m^*/m_e$ ;<sup>3</sup> la transmisión del sistema Sollner como función de la energía y la masa efectiva del electrón se muestra en la figura 4.1; en escala  $\log_{10}(m^*/m_e)$ . Observamos que para valores  $\log_{10}(m^*/m_e) < -5$  el sistema es transparente. Esto pone de manifiesto que la masa de la partícula es muy importante para el efecto de transparencia, y podemos decir que la respuesta a la pregunta es afirmativa, *i.e.*, dado un sistema arbitrario, siempre existe un valor de  $m^*$  para el cual el sistema es transparente.

Otro ejemplo es considerar un sistema transparente con masa  $m^* = 0.067 m_e$ ; como caso particular consideremos el sistema  $2bwbs(0.4, 0.8, 0.8; 0.2, -0.2)$ ; la gráfica de la transmisión como función de la energía y la masa de la partícula se muestra en la figura 4.2 en escala logarítmica. Se observa que el sistema  $2bwbs$  es robusto frente a variaciones de la masa y da la propiedad de transparencia para valores de la masa  $m^*/m_e < 0.083$ ; éste corresponde a un valor aproximadamente del 24% sobre el valor  $m^*/m_e = 0.067$  considerado en capítulos anteriores. Además, note que si se considera la masa del electrón [ $\log_{10}(m^*/m_e) = 0$  en la figura 4.2] para el sistema  $2bwbs$  éste es opaco, *i.e.*, presenta una estructura resonante.

Los ejemplos mostrados en las figuras 4.1 y 4.2 muestran que la masa de la partícula es im-

<sup>3</sup>En forma equivalente; medimos la masa de la partícula en unidades de la masa del electrón.

4 El efecto de la masa.

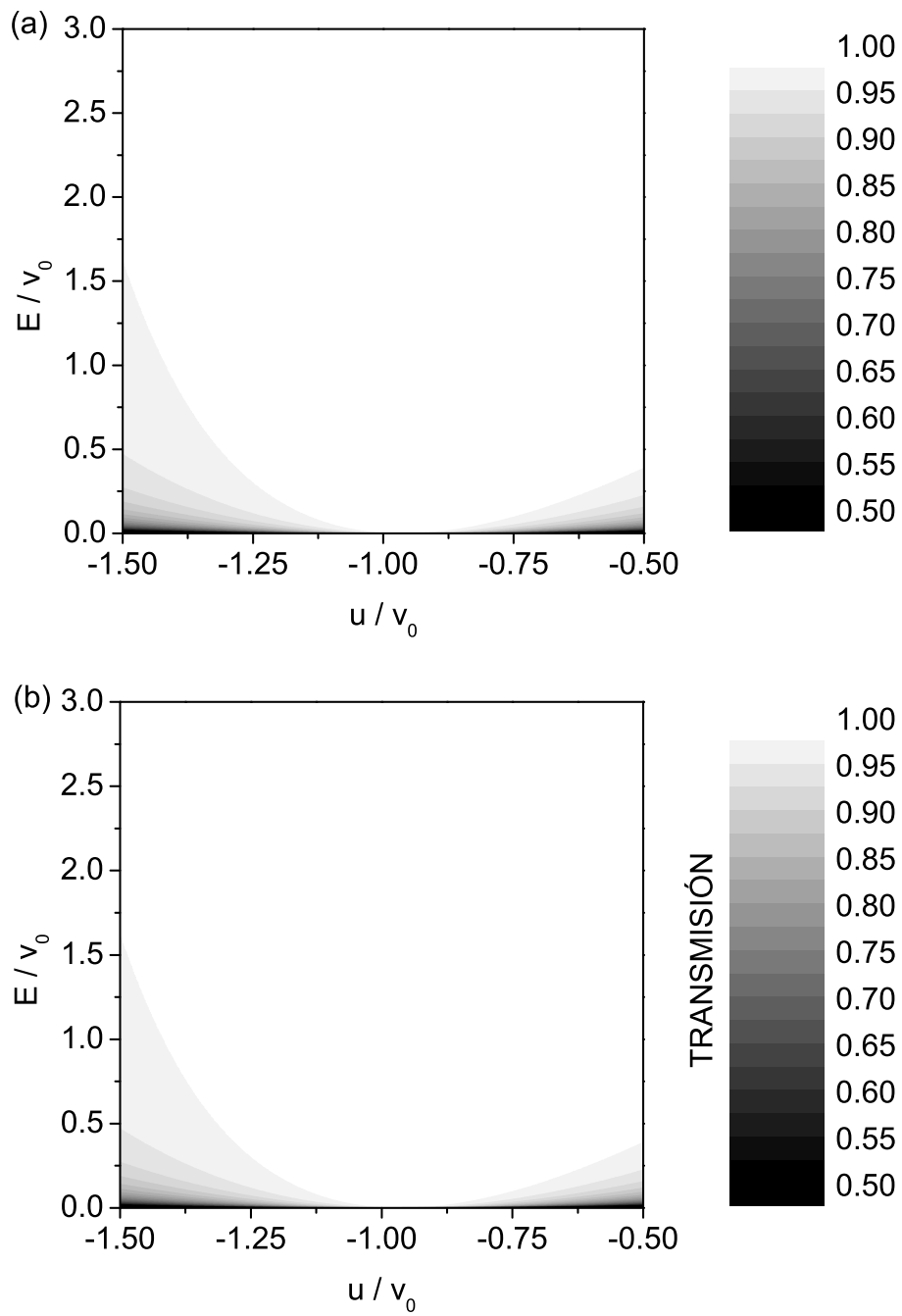


Figura 4.3: Transmisión de dos sistemas *bwb* equivalentes: (a)  $bwb(0.4, 0.8; 0.2, u)$  con  $m^* = 0.067 m_e$  ( $v_0 = 0.2$ ) y (b)  $bwb(0.4, 0.8; 0.0134, u)$  con  $m^* = m_e$  ( $v_0 = 0.0134$ ).

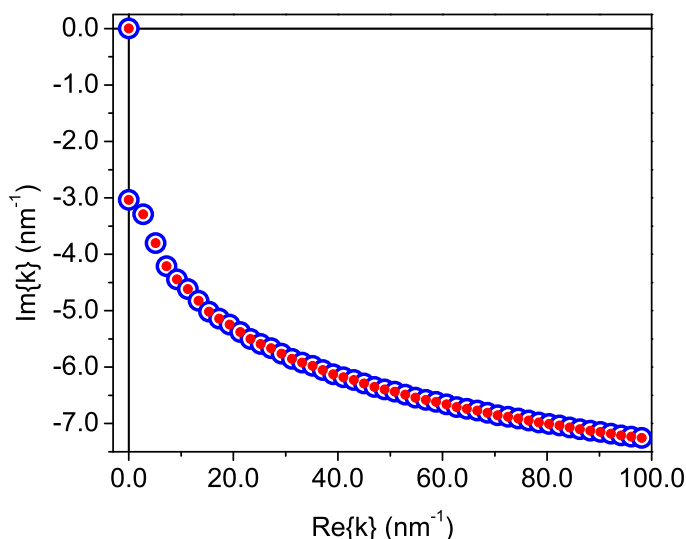


Figura 4.4: Se muestra la distribución de polos de los sistemas equivalentes  $bwb(0.4, 0.8; v_0, -v_0)$  con  $v_0 = 0.2 \text{ eV}$  y  $m^* = 0.067 m_e$  (círculos huecos),  $v_0 = 0.0134 \text{ eV}$  y  $m^* = m_e$  (círculos sólidos). Ambos sistemas tiene el mismo estado ligado  $k_b = 5.56948 \times 10^{-3}i$ .

portante para el efecto de transparencia. Además, el resultado sugiere que podemos encontrar sistemas *equivalentes*; puesto que para fines prácticos la masa modula la altura del potencial Ec. (4.1), *i.e.*, si consideramos la colección de sistemas  $bwb(0.4, 0.8; 0.2, u)$  con masa efectiva  $m^* = 0.067 m_e$ , éste debe ser equivalente a la colección de sistemas  $bwb(0.4, 0.8; 0.0134, u)$  con masa efectiva igual a la masa del electrón  $m^* = m_e$ .

Se compara la transmisión de los sistemas equivalentes en la figura 4.3, correspondientes a los sistemas  $bwb(0.4, 0.8; 0.2, u)$  con masa efectiva  $m^* = 0.067 m_e$  [fig. 4.3a] y para el sistema  $bwb(0.4, 0.8; 0.0134, u)$  con masa efectiva  $m^* = m_e$  [fig. 4.3b]. Note que las gráficas son idénticas, pero no hay que perder de vista que las escalas son diferentes por la definición de  $v_0$  para cada sistema [Ec. 2.1a; pág. 44], *i.e.*, la transmisión es igual como función de  $E/v_0$ .

Otro aspecto importante es la distribución de polos; podemos anticipar a partir de (4.1) que la distribución de polos debe ser la misma para el par de sistemas equivalentes mostrados en la figura 4.3; tomamos como caso particular dos sistemas  $bwb(0.4, 0.8; v_0, -v_0)$  con  $v_0 = 0.2 \text{ eV}$  y masa efectiva  $m^* = 0.067 m_e$  y para el segundo sistema  $v_0 = 0.0134 \text{ eV}$  con masa efectiva  $m^* = m_e$ . La distribución de polos se muestra en la figura 4.4, donde verificamos que las distribuciones de polos son idénticas. En otras palabras, hemos exhibido que un sistema con potencial  $V(x)$  de alcance finito  $L$  y masa de la partícula  $m_1$ , es equivalente a un sistema con potencial  $U(x)$  y masa de la partícula  $m_2$  si se satisface  $U(x) = m_1 V(x)/m_2$ ; resultado que se puede verificar en (4.1). Un hecho importante es que al considerar la masa de la partícula mayor, la altura de las barreras disminuye, lo cual es desafortunado si deseamos plantear un

#### 4 El efecto de la masa.

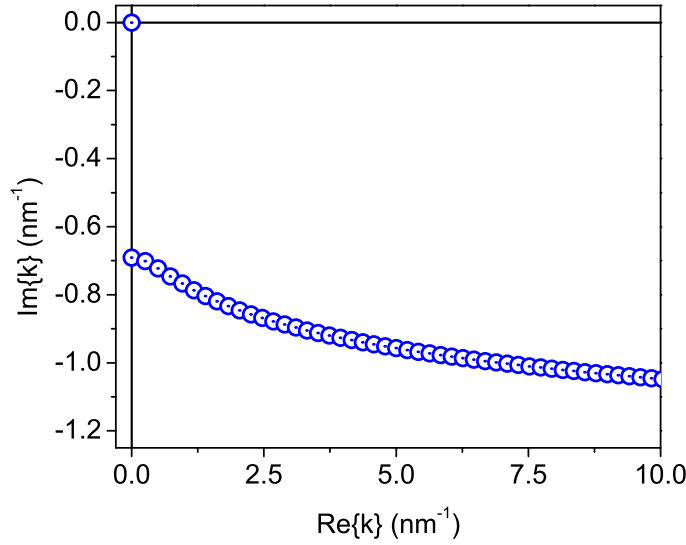


Figura 4.5: Se muestra la distribución de polos del sistema Sollner con masa efectiva  $m = 10^{-5}m_e$  y con un estado antiligado  $k_a = -3.0237984 \times 10^{-4}i$ .

posible experimento donde se use la masa del electrón; esto nos limita a sistemas donde el electrón tenga una masa efectiva menor.

Retomando el sistema Sollner, observamos que si la partícula tiene una masa efectiva  $m = 10^{-5} m_e$  el sistema es transparente [fig. 4.1]. La pregunta es ¿dicho sistema tiene las mismas propiedades analíticas que un sistema transparente?, *i.e.*, un estado ligado o antiligado cercano al origen y resonancias anchas. La distribución de polos del sistema Sollner con masa efectiva  $m^* = 10^{-5} m_e$  se muestra en la figura 4.5, y se observan las mismas propiedades analíticas de un sistema transparente.

Hemos exhibido con estos ejemplos que si disminuimos la masa de la partícula se aumenta la probabilidad de transmisión, y que cualquier sistema se puede hacer transparente si se considera un valor apropiado de la masa.

## 4.2. Masa variable.

En la sección anterior se mostró que disminuir la masa de la partícula aumenta la probabilidad de transmisión, y que hacer esto es equivalente a disminuir la altura del potencial. En esta sección vamos a considerar el problema desde un punto de vista más general, puesto que si bien es válida la aproximación de masa efectiva constante en toda la región de interacción [Secc. 4.1], para un semiconductor dopado la masa no es constante, *i.e.*, si se forma una heteroestructura semiconductor de  $Al_\eta Ga_{1-\eta}As$  la masa efectiva depende de la concentración

$\eta$ . Así, la masa es  $m^* = 0.067 m_e$  para  $GaAs$  ( $\eta = 0$ ) y  $m^* = 0.15 m_e$  para  $AlAs$  ( $\eta = 1$ ), y la formación de una barrera o pozo se hace al variar la concentración  $0 < \eta < 1$ . Por lo tanto, el problema general es un sistema de masa variable, como función de la posición. En este caso, la ecuación de eigenvalores se escribe como [1]

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{1}{m(x)} \frac{\partial}{\partial x} \right) + V(x) \right] \psi(x) = E\psi(x). \quad (4.2)$$

Ecuación que conserva la naturaleza hermitiana del problema, y donde escribimos la masa efectiva  $m^* = m(x)m_e$ , con  $m(x)$  una cantidad adimensional.

La condición de continuidad de la función de onda permanece invariante mientras que, la condición de la derivada presenta un cambio debido a la dependencia de la masa, *i.e.*, si  $x_0$  es un punto de discontinuidad en la masa tenemos que

$$\psi(x_0^-) = \psi(x_0^+), \quad \frac{1}{m(x_0^-)} \psi'(x_0^-) = \frac{1}{m(x_0^+)} \psi'(x_0^+). \quad (4.3)$$

Ahora, el cálculo de la matriz de transferencia se ve modificada por la discontinuidad en la derivada. Sin embargo, es fácil verificar que el análisis es idéntico al caso de masa constante [Ap. A]; únicamente hay que introducir la información de la masa en la definición Ec. (A.2), esto lo conseguimos si observamos que el segundo renglón de (A.2) corresponde a la condición de continuidad en la derivada, *i.e.*, escribimos

$$\mathcal{F}_k(x) = \begin{pmatrix} e^{ikx} & e^{-ikx} \\ \frac{ik}{m} e^{ikx} & \frac{-ik}{m} e^{-ikx} \end{pmatrix}, \quad (4.4)$$

la cual tiene como inversa,

$$\mathcal{F}_k^{-1}(x) = \frac{m}{2ik} \begin{pmatrix} \frac{ik}{m} e^{-ikx} & e^{-ikx} \\ \frac{ik}{m} e^{ikx} & -e^{ikx} \end{pmatrix}. \quad (4.5)$$

Finalmente, la matriz de transferencia de una barrera cuadrada se escribe como

$$\mathcal{T}_{a \rightarrow b} = F_k^{-1}(b) F_\beta(b) F_\beta^{-1}(a) F_k(a), \quad (4.6)$$



#### 4 El efecto de la masa.

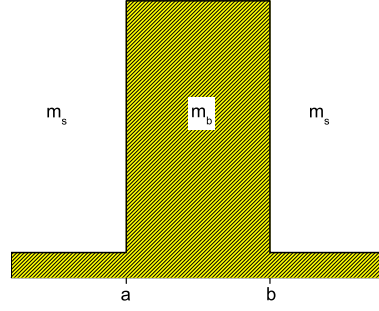


Figura 4.6: Sistema barrera simple para el cálculo de la matriz de transferencia de una perturbación cuadrada arbitraria con masas efectivas  $m^* = m_s m_e$  en  $x < a$ ,  $m^* = m_b m_e$  en  $a < x < b$  y  $m^* = m_s m_e$  para  $x > b$ .

donde  $E = \hbar^2 k^2 / 2m_0$  y  $\hbar^2 \beta^2 / 2m_1 = E - V$ ,  $m_0$  y  $m_1$  corresponden a la masa efectiva de la partícula con potencial cero y  $V \neq 0$  respectivamente; para un sistema multibarrera se tiene que  $\mathcal{T}_{a \rightarrow b} = \mathcal{T}_{a_n \rightarrow b_n} \times \cdots \times \mathcal{T}_{a_1 \rightarrow b_1}$ , donde se identifica  $a = a_1$  y  $b = b_n$ . Consideremos el caso de una perturbación cuadrada como el mostrado en la figura 4.6, donde se considera que la masa en el potencial es diferente a la masa fuera del alcance del potencial; denotamos por  $k_s$  y  $k_b$  los respectivos números de onda de la partícula en las tres regiones. Así la matriz de transferencia está dada por

$$\mathcal{T}_{a \rightarrow b} = \mathcal{F}_{k_s}^{-1}(b) \mathcal{F}_{k_b}(b) \mathcal{F}_{k_b}^{-1}(a) \mathcal{F}_{k_s}(a), \quad (4.7)$$

la cual en forma explícita tiene los elementos de matriz

$$\begin{aligned} t_{11} &= \frac{1}{2} \left[ 2 \cos k_b L + i \left( \frac{m_b k_s}{m_s k_b} + \frac{m_s k_b}{m_b k_s} \right) \sin k_b L \right] e^{-i k_s L}, \\ t_{12} &= \frac{i}{2} \left( \frac{m_s k_b}{m_b k_s} - \frac{m_b k_s}{m_s k_b} \right) \sin k_b L e^{-i k_s (b+a)}, \\ t_{21} &= t_{12}^*, \quad t_{22} = t_{11}^*, \end{aligned} \quad (4.8)$$

donde  $L = b - a$  es el anchura de la perturbación.

Un primer ejemplo es considerar el sistema Sollner suponiendo que la masa de la partícula en las barreras es diferente de la masa efectiva fuera de ellas. Suponemos que la masa efectiva del electrón en las barreras es  $m_b^* = 0.15 m_e$  que corresponde al *AlAs* y fuera de ellas es  $m_s^* = 0.067 m_e$  que corresponde al *GaAs*; la razón de considerar un cambio grande en la

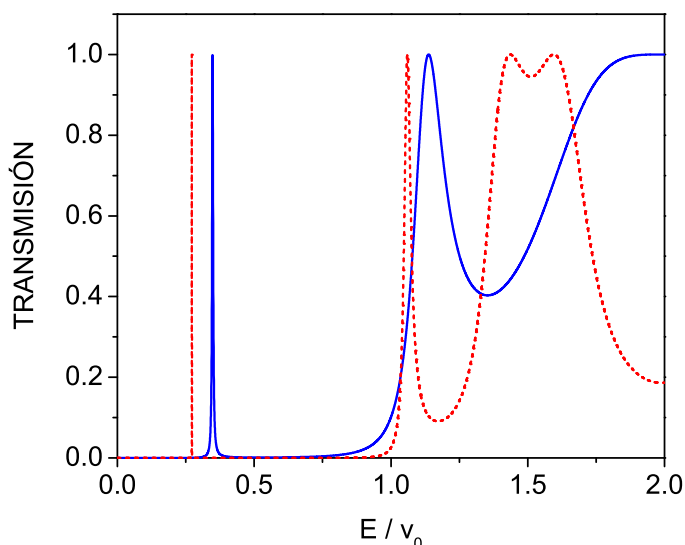


Figura 4.7: Transmisión del sistema Sollner  $bsb(5,5;0.23)$  con masa efectiva del electrón  $m_s^* = 0.067 m_e$  fuera de las barreras y  $m_b^* = 0.15 m_e$  en las barreras (línea cortada), se compara con la transmisión suponiendo que la masa efectiva  $m^* = 0.067 m_e$  es igual en todo el espacio (línea continua).

masa es para amplificar el efecto que ésta tiene en un sistema conocido.<sup>4</sup>

En la figura 4.7, se muestra la transmisión del sistema Sollner como función de la energía, ésta se compara en la misma figura con la transmisión del mismo potencial suponiendo que la masa es constante. Observamos que hay un cambio considerable en la transmisión, lo cual era de esperar puesto que se ha considerado una variación grande en la masa efectiva del electrón. Sin embargo, el punto importante es que la estructura resonante se conserva, y que el efecto de variar la masa en las barreras hace más delgadas las resonancias.<sup>5</sup> Este hecho, implicará que un sistema pierda la transparencia si la masa efectiva sufre una variación grande en las barreras y/o pozos. Sin embargo, variaciones grandes de la masa corresponden a variaciones grandes en alturas y/o profundidades de barreras y/o pozos. Dado que estamos considerando variaciones pequeñas en el potencial  $v_0 \lesssim 0.2 eV$  podemos considerar que la masa efectiva del electrón tiene una pequeña variación.

Un ejemplo es considerar el sistema  $bwb(0.4,0.8;0.15,-0.15)$  con masa efectiva de la partícula  $m_s^* = 0.08 m_e$ ,  $m_b^* = 0.093 m_e$  y  $m_w^* = 0.067 m_e$ ; la gráfica de la transmisión

<sup>4</sup>Tanto la masa efectiva de la partícula y altura de las barreras dependen de la concentración  $\eta$ ; este ejemplo supone un cambio en la masa pero no en la altura del potencial.

<sup>5</sup>Nosotros consideramos una variación grande en la masa para que se amplificará la diferencia en ambos sistemas pero, si consideramos variaciones del orden del 20% de la masa no se verá un cambio considerable; esta es la razón por la cual la aproximación de masa constante es válida [Secc. 4.1].

#### 4 El efecto de la masa.

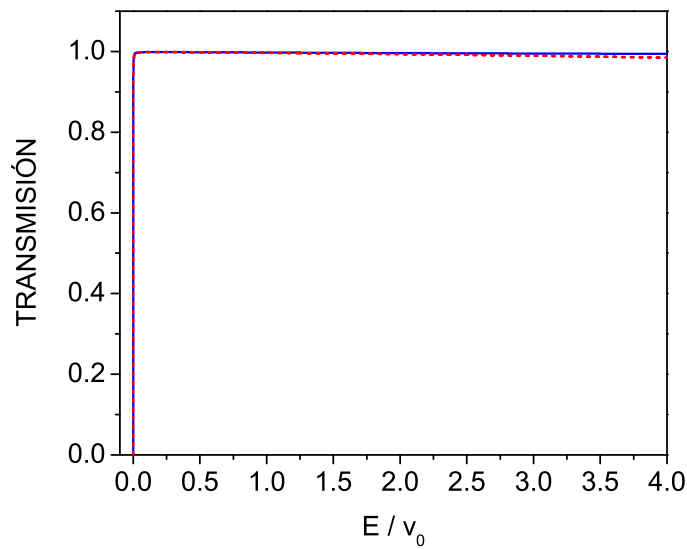


Figura 4.8: Transmisión del sistema  $bwb(0.4, 0.8; 0.15, -0.15)$  con masa efectiva  $m^* = 0.08 m_e$  constante en todo el espacio (línea continua); se compara con el mismo sistema suponiendo que las masa efectiva es variable con valores  $m_s^* = 0.08 m_e, m_b^* = 0.093 m_e$  y  $m_w^* = 0.067 m_e$  (línea punteada).

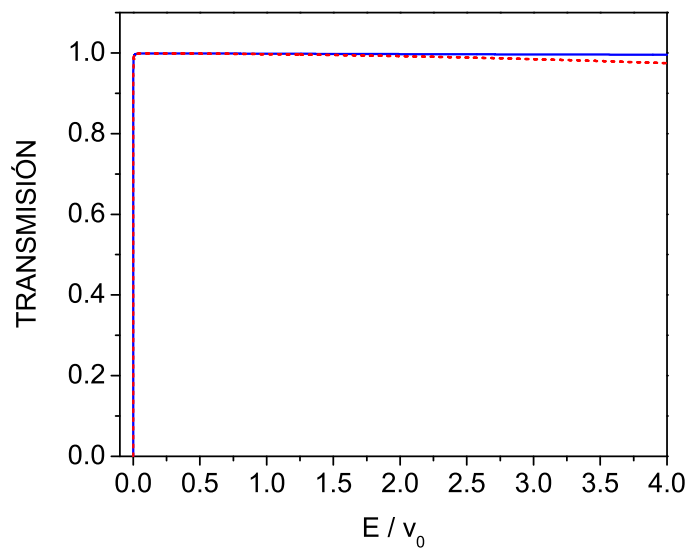


Figura 4.9: Transmisión del sistema  $bwb(0.4, 0.8; 0.1, -0.1)$  con masa efectiva  $m^* = 0.108 m_e$  constante en todo el espacio (línea continua), en comparación del mismo sistema suponiendo que las masas efectivas son  $m_s^* = 0.108 m_e, m_b^* = 0.15 m_e$  y  $m_w^* = 0.067 m_e$  (línea punteada).

como función de la energía de este sistema se muestra en la figura 4.8, y se compara con la transmisión del mismo sistema con una masa efectiva constante en toda la región del espacio  $m^* = 0.08 m_e$ . En ambos casos se encuentra que los sistemas satisfacen la propiedad de transparencia pero, estrictamente hablando, es más transparente el sistema con masa efectiva constante.

Otro ejemplo es considerar un sistema semejante  $bwb(0.4, 0.8; 0.1, -0.1)$  con las masas efectivas  $m_s^* = 0.108 m_e$ ,  $m_b^* = 0.15 m_e$  y  $m_w^* = 0.067 m_e$ ; la transmisión de éste se muestra en la figura 4.9. En este ejemplo es más notorio que, al considerar una variación más grande en la masa el efecto de transparencia tiende a perderse. Sin embargo, aún para esta variación aproximadamente del 38 % alrededor de  $m_s^*$  se seguirá satisfaciendo la condición de transparencia; puesto que,  $T(E) > 0.95$ , *i.e.*, el sistema tiene una alta probabilidad de transmitir.

## 5 Tiempo de permanencia.

En los capítulos anteriores se ha mostrado que existe una gran variedad de sistemas que satisfacen la condición de transparencia ( $T \approx 1$ ), algunos ejemplos de estos son: sistemas de una partícula con masa efectiva  $m^* = 0.067 m_e$  que interactúa con los potenciales  $bw(0,4, 0,4; 0,2, -0,2)$ ,  $bwb(0,4, 0,8; 0,2, -0,2)$  y  $wbw(0,4, 0,8; -0,2, 0,2)$ . También se mostró que, cadenas formadas por estos potenciales [Cap. 3] en general forman sistemas semitransparentes, esto es, sólo son transparentes por bandas de energía; resultado que es más evidente en cadenas largas [fig. 3.8, pág. 66].

En este capítulo estudiamos el tiempo de permanencia que sufre una partícula al interactuar con algún potencial; en particular nos referimos a potenciales transparentes. Para dicho propósito se usará la relación que se encontró anteriormente para el tiempo de permanencia [Secc. 1.6; pág. 28], la cual en unidades del tiempo libre  $\tau_0 = L/J_0$ , se escribe como

$$\frac{\tau_d}{\tau_0} \equiv T + \frac{1}{L} \left[ T \frac{\partial \theta}{\partial k} + R \frac{\partial \phi}{\partial k} + R^{1/2} \frac{\sin \phi}{k} \right], \quad (5.1)$$

donde  $\mathbf{t} = T^{1/2} e^{i\theta}$  y  $\mathbf{r} = R^{1/2} e^{i\phi}$ . Recordemos que en términos de los elementos de la matriz de transferencia [Ap. A], las amplitudes de transmisión y reflexión toman los valores

$$\mathbf{t} = \frac{1}{t_{22}}, \quad \mathbf{r} = -\frac{t_{21}}{t_{22}}. \quad (5.2)$$

Esto nos permite encontrar fácilmente las derivadas de las fases, dando como resultado

$$\frac{\partial \theta}{\partial k} = -\Im \left\{ \mathbf{t} \frac{\partial t_{22}}{\partial k} \right\}, \quad \frac{\partial \phi}{\partial k} = \Im \left\{ \frac{1}{t_{21}} \frac{\partial t_{21}}{\partial k} - \mathbf{t} \frac{\partial t_{22}}{\partial k} \right\}. \quad (5.3)$$

Sustituimos estas relaciones en (5.1) para encontrar en términos de los elementos de la matriz de transferencia, la relación

$$\frac{\tau_d}{\tau_0} = T + \frac{1}{L} \Im \left[ \frac{R}{t_{22}} \frac{\partial t_{21}}{\partial k} - \mathbf{t} \frac{\partial t_{22}}{\partial k} + \frac{\mathbf{r}}{k} \right]. \quad (5.4)$$

## 5 Tiempo de permanencia.

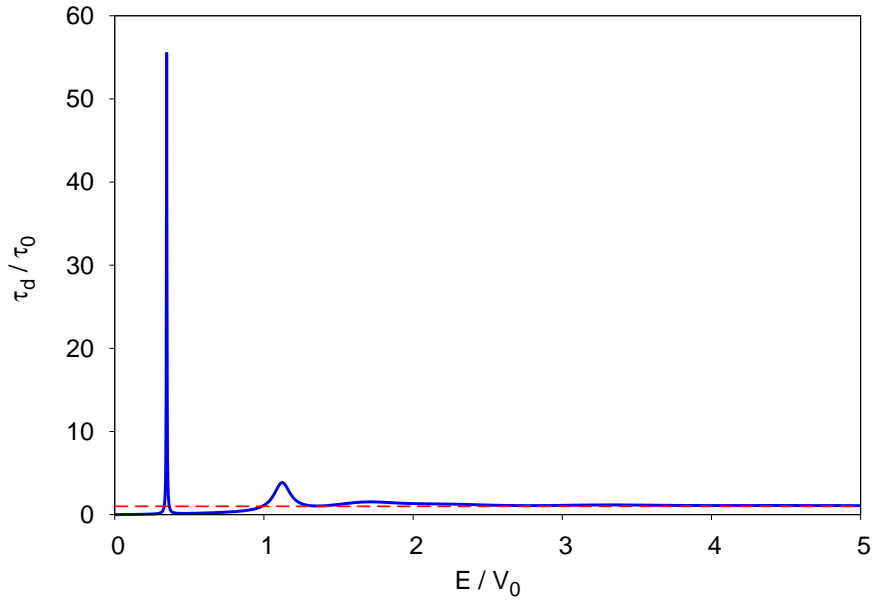


Figura 5.1: Tiempo de permanencia asociado a una partícula de masa efectiva  $m^* = 0.067 m_e$  al interactuar con el potencial doble barrera  $2bs(5, 5; 0.23)$ .

Esta relación permite encontrar rápidamente el valor de la integral definida para el tiempo de permanencia [Secc. 1.6] usando el formalismo de matriz de transferencia [Ap. A].

Es claro a partir de la definición [Ec. 1.53] y la situación física que, cuando  $E \rightarrow \infty$  la partícula no se entera de la existencia del potencial, esto es, no sólo la transmisión tiende a la unidad en dicho límite, sino que la función de onda en el interior tiende asintóticamente a  $\psi(x; E) \sim e^{ikx}$ , por lo que, en dicho límite se tiene

$$\lim_{E \rightarrow \infty} \frac{\tau_d}{\tau_0} \rightarrow 1, \quad (5.5)$$

mientras que en el otro límite  $E \rightarrow 0$ , la función de onda en el interior tiende a cero, por lo tanto

$$\lim_{E \rightarrow 0} \frac{\tau_d}{\tau_0} \rightarrow 0. \quad (5.6)$$

Como referencia a nuestros resultados, consideramos el sistema de Sollner dado por el potencial  $bsb(5, 5; 0.23)$ , la transmisión de éste como función de la energía se vio anteriormente y se muestra en la figura [fig. 1.6, pág. 14]; es el caso particular donde la profundidad del

pozo es cero. Observamos que este sistema tiene una resonancia aislada para un valor de energía  $E \approx 0.08 \text{ eV}$  aproximadamente.

El tiempo de permanencia como función de la energía de este sistema se muestra en la figura 5.1, exhibiendo claramente que: en los límites  $E \rightarrow \infty$  y  $E \rightarrow 0$  se satisfacen las igualdades (5.5) y (5.6) respectivamente. Además, se observa que para energías alrededor de la energía de la primer resonancia  $E \approx 0.08 \text{ eV}$  se tiene que  $\tau_d \approx 55\tau_0$ , *i.e.*, si bien un haz monocromático con energía igual a la energía de resonancia tiene transmisión unidad, la partícula queda atrapada en el potencial un tiempo mucho mayor que el tiempo que le llevaría recorrer la distancia  $L$  (anchura del potencial) libremente. El segundo pico que se observa en la gráfica 5.1 corresponde a la segunda energía de resonancia  $E \approx 0.258 \text{ eV}$  por arriba de la altura del potencial  $v_0 = 0.23 \text{ eV}$ . Note que, el comportamiento del tiempo de permanencia como función de la energía trata de mimetizar la transmisión del sistema; compare la figura 5.1 del tiempo de permanencia con el de la transmisión [fig. 1.3, pág. 12], aunque la escala no permite ver el efecto de la estructura resonante para energías mayores a la altura del potencial.

## 5.1. Tiempo de permanencia en sistemas compuestos.

Analizamos el tiempo de permanencia en sistemas compuestos. Estos sistemas se estudiaron en el capítulo 2, y nos referimos a estos como combinaciones simples de barreras y pozos, tales como los potenciales descritos por  $bw$ ,  $bwb$ ,  $wbw$  y combinaciones simples de estos ( $2bwbs$ ,  $bwbswbw$ ). En la figura 5.2 se muestra el tiempo de permanencia que sufre una partícula de masa  $m^* = 0.067 m_e$  al interactuar con los sistemas  $bw(0.4, 0.4; v_0, -v_0)$ ,  $bwb(0.4, 0.8; v_0, -v_0)$  y  $2bwbs(0.4, 0.8, 0.8; v_0, -v_0)$ . Consideramos dos valores de  $v_0$ , que son:  $v_0 = 0.2 \text{ eV}$  figura 5.2a y  $v_0 = 0.12 \text{ eV}$  figura 5.2b. Es notable que en estos tres sistemas el tiempo de permanencia es del orden del tiempo libre  $\tau_d \approx \tau_0$ , a diferencia del tiempo de permanencia que sufre la misma partícula al interactuar con el sistema Sollner [fig. 5.1]; principalmente para valores de energía alrededor de la resonancia aislada.

Otro aspecto interesante que podemos ver en la figura 5.2 es que, el tiempo de permanencia  $\tau_d$  de la partícula en el potencial  $2bwbs$ , es más cercano al tiempo libre  $\tau_0$ , y para el sistema más simple ( $bw$ ) el tiempo de permanencia es estrictamente menor que el tiempo libre; esto sugiere que no sólo la posición del polo ligado (o antiligado) asociado a la transmisión juegue un papel importante en el tiempo de permanencia, sino que también es importante la estructura del mismo, *i.e.*, del número de barreras y pozos que forman al potencial. En otras palabras, observamos que potenciales con mas estructura son más invisibles.

Claramente, este resultado muestra que los sistemas simples que satisfacen la condición de transparencia son invisibles, puesto que una partícula no sufre un adelanto o retraso significativo al pasar a través del potencial.

5 Tiempo de permanencia.

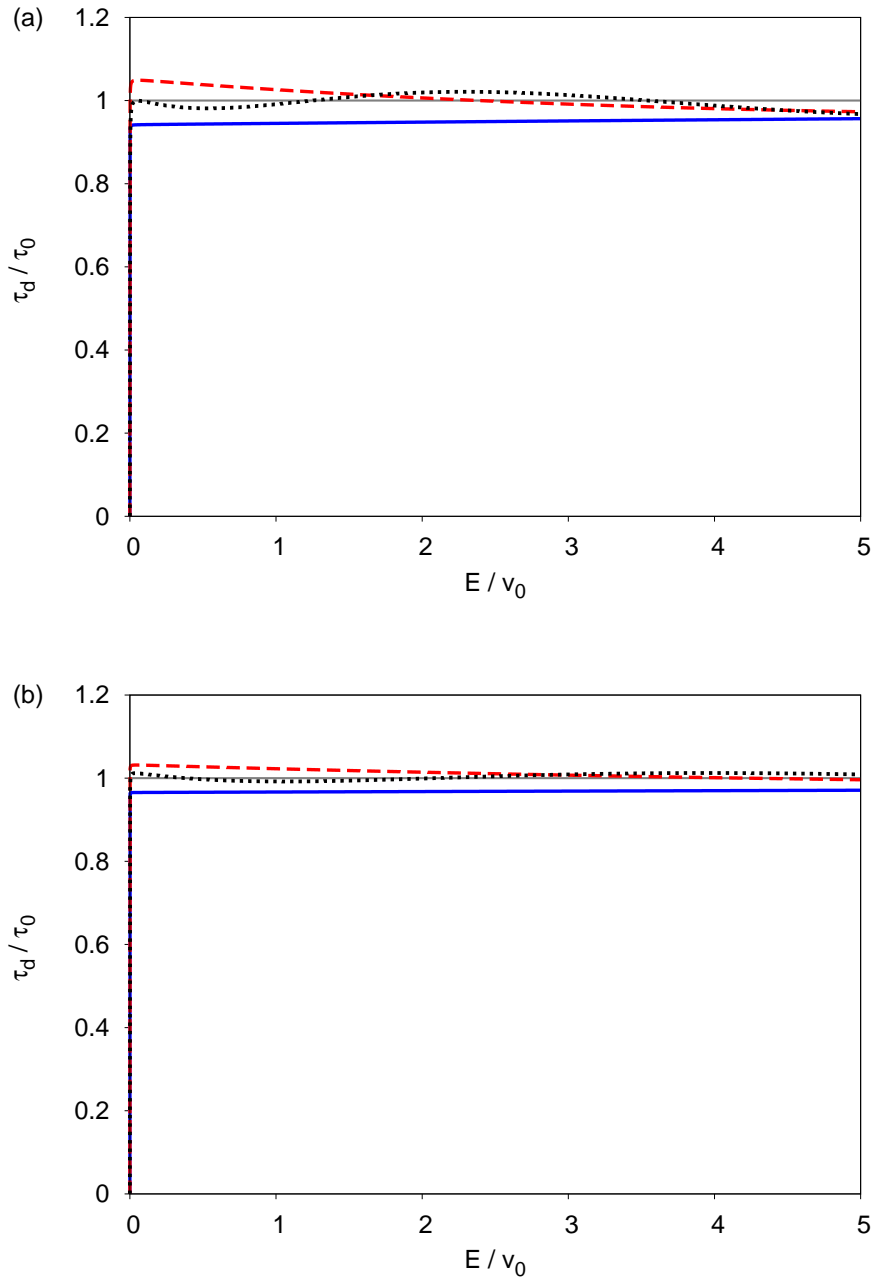


Figura 5.2: Tiempo de permanencia de una partícula con masa efectiva  $m^* = 0.067 m_e$  que interactúa con los potenciales  $bw(0.4, 0.4; v_0, -v_0)$  (línea continua)  $bwb(0.4, 0.8; v_0, -v_0)$  (línea cortada) y  $2bwbs(0.4, 0.8, 0.8; v_0, -v_0)$  (línea punteada), para el valor (a)  $v_0 = 0.2 \text{ eV}$  y (b)  $v_0 = 0.12 \text{ eV}$ . Para guiar el ojo se indica la línea  $\tau_d = \tau_0$ .



## 5.2. Tiempo de permanencia en cadenas.

Como podemos anticipar a partir de la figura 5.2, el tiempo de permanencia  $\tau_d$  de los potenciales con menor altura y profundidad se aproxima mejor al tiempo de evolución libre  $\tau_0$  en comparación con el caso límite ( $v_0 = 0.2 \text{ eV}$  para algunos potenciales), esto es, anteriormente se mostró que para barreras y pozos del orden de  $b = 0.4 \text{ nm}$  y  $w = 0.8 \text{ nm}$ , la relación entre alturas y profundidades es  $u_0 \approx -v_0$ , donde  $v_0 = 0.2$  es la altura máxima de las barreras; se mostró para el potencial  $2bwbs$  [fig. 2.16, pág. 56]. Esto sugiere estudiar cadenas formadas por el bloque fundamental (*building block*) (BB)  $bwb(0.4, 0.8; 0.2, -0.2)$ , ya que, al acercar las alturas de las barreras y profundidades de los pozos al umbral se mejorará la invisibilidad del sistema. Resultado que se puede apreciar en la figura 5.2.

Analicemos dos casos particulares para los cuales se ha calculado la transmisión anteriormente, estos son: una cadena corta formada por 10 BB y una cadena larga formada por 100 BB [fig. 3.5, pág. 63]. Como sugiere el comportamiento de su transmisión [fig. 3.5], es evidente que esperamos cambios en el tiempo de permanencia alrededor de siete veces la altura de la barrera, debido a que ambos sistemas presentan un banda de energía prohibida en la transmisión ( $T(E) < 0.5$ ).

En la figura 5.3 se muestra el tiempo de permanencia de una partícula de masa efectiva  $m^* = 0.067 m_e$  que interactúa con una cadena formada por el BB invisible con 10 BB [fig. 5.3a], y una cadena de 100 BB [fig. 5.3b]. Como se había anticipado partículas con energía alrededor de siete veces la altura de la barrera ( $v_0 = 0.2$ ) sufren un tiempo de permanencia mayor o menor que el tiempo libre ( $\tau_0$ ). Sin embargo, para la cadena de 10 BB el tiempo de permanencia es del orden del tiempo libre  $\tau_d \approx (1 \pm 0.2)\tau_1$ , esto es, podemos concluir que: una partícula con energía  $E \sim 7v_0$  que atraviese la cadena no tendrá un cambio significativo en su fase, de tal forma que, sólo se detectará una disminución en amplitud debida al comportamiento de la transmisión [fig. 3.5], pero no sufrirá un retraso o avance. Por otro lado, para una cadena más grande (100 BB) se tendrá que partículas con energías  $E \sim 7v_0$  sufrirán un tiempo de retraso o avance significativo, permitiendo distinguir entre una señal que viaja libremente con una que es transmitida por la cadena, no sólo por la disminución de su amplitud, sino por el cambio de fase que sufre el paquete. Además en ambos casos, se tiene que partículas con energía del orden de la altura de la barrera ( $E \sim v_0$ ), el tiempo de permanencia en el sistema es muy aproximado al tiempo libre ( $\tau_d \approx \tau_0$ ), excepto a energías muy cercanas al umbral. Esto es, las cadenas son invisibles por bandas.

Por último, es conveniente mencionar que los resultados que se han encontrado en estos capítulos son únicamente para el caso monocromático, *i.e.*, todos los resultados provienen de las soluciones estacionarias de la ecuación de Schrödinger y por lo tanto, no es aplicable a paquetes de onda en el continuo.

5 Tiempo de permanencia.

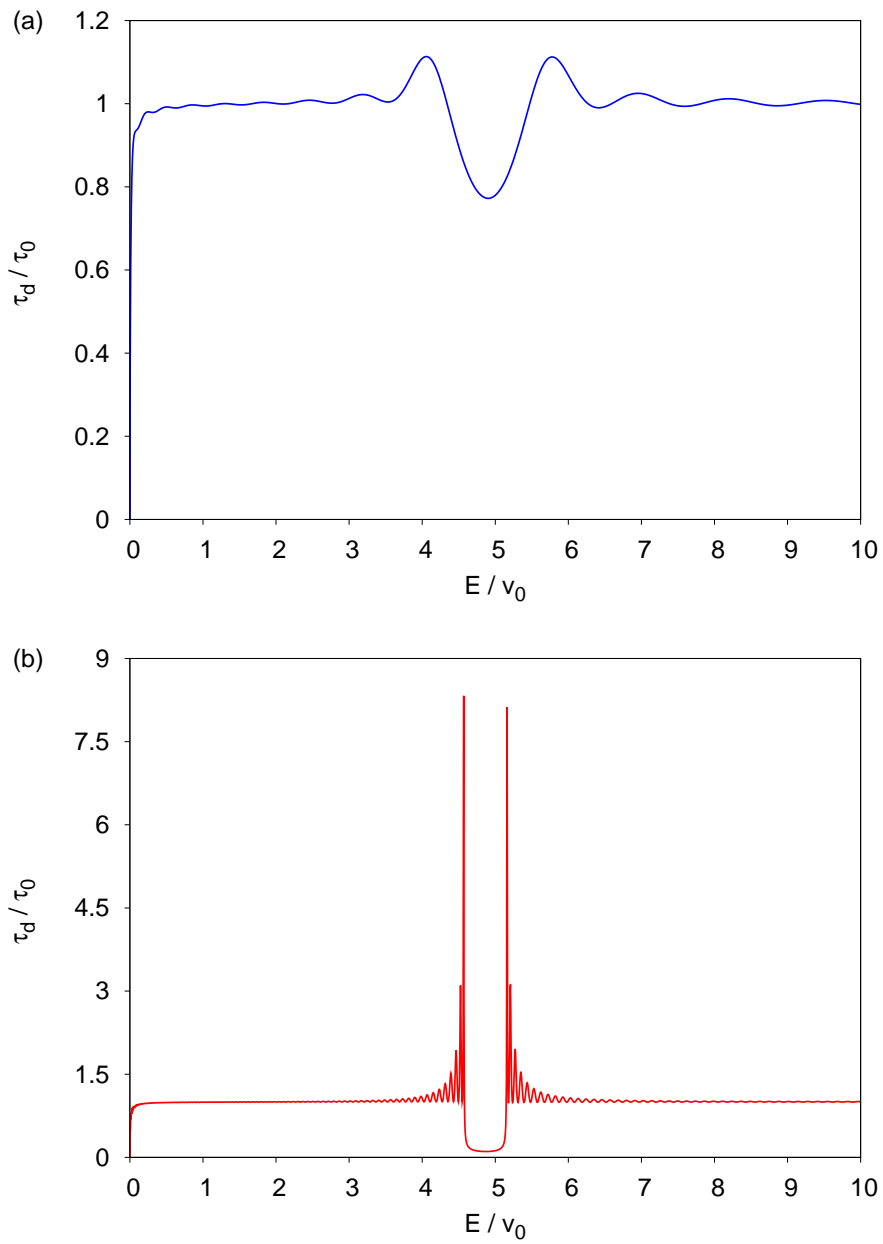


Figura 5.3: Tiempo de permanencia de una partícula con masa efectiva  $m^* = 0.067 m_e$  que interactúa con una cadena formada por el BB  $bwb(0.4, 0.8; 0.2, -0.2)$ , la separación entre BB es de  $s = 0.8 \text{ nm}$  para (a) una cadena de 10 BB y (b) una cadena de 100 BB.

## 6 Antecedentes II.

En los capítulos anteriores se estudió la posibilidad de construir sistemas invisibles. Recordemos que un sistema es invisible si satisface: (i) ser transparente y (ii) el tiempo de permanencia es del orden del tiempo libre. Sin embargo, el estudio que se realizó sólo es aplicable al caso monocromático, *i.e.*, únicamente se ha estudiado la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo.

En el capítulo 5 se mostró que partículas que interactúan con sistemas transparentes sufren un tiempo de permanencia del orden del tiempo libre [fig. 5.2, pág. 88]; esto muestra que dichos sistemas son invisibles para el caso monocromático. Sin embargo, se encuentran pequeñas variaciones en el tiempo de permanencia entre partículas con energía  $E$  y  $E + \Delta E$ , es evidente que, si construimos un paquete de onda, éste estará formado por contribuciones monocromáticas en un rango de energía (o momento), por lo tanto, el análisis anterior no nos permite contestar las preguntas: (a) ¿qué pasa si un paquete de onda atraviesa a un sistema invisible? y (b) ¿se podrá distinguir mediante un experimento de interferencia, un paquete de onda que pasa a través de un sistema invisible de uno idéntico que se propague libremente?.

El problema que estudiamos en esta segunda parte de nuestro trabajo es: encontrar la solución de la ecuación de Schrödinger para una partícula que se encuentre con estado inicial  $\psi_0(x)$ , la cual interactúa con un potencial  $v(x)$  de alcance finito, *i.e.*,  $v(x) = 0$  para  $x < 0$  y  $x > L$  donde  $L$  es el alcance del potencial. La solución a este problema en general es no trivial y se ha encontrado en algunos casos la solución para  $x > L$  (región de transmisión); ver por ejemplo las referencias 11, 10, 37 y 40, donde se hace una simplificación a la expresión analítica de la amplitud de transmisión. En esta dirección se tienen esencialmente dos límites: el primero es suponer que el ancho efectivo en la distribución de momentos del paquete inicial coincide o es menor al ancho de la primer resonancia; esta simplificación nos permite encontrar también la solución en la región interna [11] [Ap. B]. El otro límite es considerar que la transmisión está dominada por un estado antiligado; en este caso es posible resolver la evolución de un paquete de onda tipo Gaussiano. Es factible pensar que el método que se emplea para el cálculo de la solución es el mismo para otros tipos de paquetes. En este trabajo consideramos únicamente el paquete Gaussiano.

Partimos del formalismo de estados resonantes expuesto en el capítulo 1 [Secc. 1.1; pág. 4]. Éste nos permite dar en forma analítica una expresión cerrada de la función de Green de onda saliente, y a su vez, dar una expresión cerrada de la amplitud de transmisión [Ec. 1.12; pág. 7]. Como un primer ejemplo se discute la solución al problema de obturador cuántico

no libre propuesto y resuelto por García–Calderón [11] [Secc. 6.1]; se muestra el desarrollo alternativo usando transformada de Laplace para este mismo problema en el apéndice B. Finalmente damos la solución de un paquete Gaussiano que interactúa con un sistema para el cual su transmisión es dominada por un estado antiligado [37] [Secc. 6.2];<sup>1</sup> en esta sección se muestra con más detalle el desarrollo de la solución, ya que usamos el mismo método para encontrar la solución como un desarrollo en resonancias [Cap. 7].

## 6.1. Obturador cuántico.

Brevemente recordemos que el problema del obturador propuesto y resuelto por Moshinsky hacia el año de 1952 en un trabajo que tiene por título *difracción en el tiempo* [9],<sup>2</sup> es un ejemplo típico de la solución a la ecuación de Schrödinger y consiste en modelar el obturador como un absorbedor o reflector ideal en el punto  $x = 0$ . Se supone que éste es removido al instante  $t = 0$  con condición inicial

$$\psi_0(x) = \begin{cases} e^{ik_0x} & x < 0 \\ 0 & x > 0 \end{cases}, \quad (6.1)$$

*i.e.*, onda plana para  $x < 0$  y cero para  $x > 0$ . En el trabajo de Moshinsky se considera la propagación libre de electrones. Sin embargo, podemos suponer que se tiene el obturador con las mismas condiciones, pero agregando un potencial de alcance finito  $L$ , en este caso suponemos  $v(x < 0) = 0$ ; este modelo es conocido en la literatura como *obturador cuántico* que inicialmente fue propuesto y resuelto para onda plana por García–Calderón [11].

El ejemplo consiste en considerar las mismas condiciones iniciales dadas por Moshinsky aplicadas al caso de un potencial que se encuentra al otro lado del obturador  $x > 0$ . La solución a este problema se obtiene de forma exacta usando transformada de Laplace [11] [Ap. B], aquí únicamente damos la solución

$$\psi(x, t) = \mathbf{t}(k)M(x, t; k) + i \sum_n \frac{r_n e^{-i\kappa_n L}}{\kappa_n - k} M(x, t, \kappa_n), \quad x > L, \quad (6.2)$$

donde  $\mathbf{t}(k)$  es la transmisión del problema,  $M(x, t; k)$  es conocida como la función  $M$  [Ap. D] y  $E = \hbar^2 k^2 / 2m$  es la energía del paquete incidente. Cabe mencionar que esta solución es exacta, *i.e.*, no se han hecho simplificaciones a la amplitud de transmisión. En esta sección no exponemos en detalle como se llega a dicha solución, porque más adelante mostraremos una forma alternativa para llegar a ella, usando directamente el propagador.

<sup>1</sup>Es inmediato darse cuenta que la solución encontrada por Villavicencio *et al.*, [37] es válida para sistemas donde la transmisión es dominada por un estado ligado.

<sup>2</sup>La difracción temporal para partículas materiales fue medida por Szriftgiser, *et al.*, en 1996 [44].

## 6.2 Paquete Gaussiano truncado (aproximación).

Antes de concluir esta sección vamos a enfatizar un hecho de la solución que tal vez puede pasar por alto un lector poco familiarizado con el problema del obturador [9]. La solución (6.2) se puede escribir como

$$\psi(x, t) = \mathbf{t}(k)\psi_f(x, t) + \psi_c(x, t), \quad (6.3)$$

donde  $\psi_f(x, t)$  es la propagación libre del paquete de onda encontrado por Moshinsky y  $\psi_c(x, t)$  es una corrección a la propagación libre, debida al efecto del potencial. Note que la propagación libre es modulada por la amplitud de transmisión correspondiente a la energía del paquete; este factor le da información del sistema al paquete transmitido modificando su amplitud y fase en la región de transmisión  $x > L$ , que para fines prácticos se puede renormalizar. Sin embargo, se sabe que un paquete de onda sufre un retraso o adelanto al interactuar con un sistema y éste es debido al término  $\psi_c(x, t)$ ; estrictamente se debe al término de interferencia entre el término de la propagación libre y el de corrección [12]. En otras palabras, si el término de interferencia entre  $\mathbf{t}(k)\psi_f(x, t)$  y  $\psi_c(x, t)$  es despreciable, el paquete transmitido sufrirá una disminución en su probabilidad pero no un retraso o adelanto apreciable.

## 6.2. Paquete Gaussiano truncado (aproximación).

Un problema de interés que se ha resuelto recientemente es el problema de un paquete de onda Gaussiano empleando el modelo de obturador cuántico. Recuerde que este modelo consiste en tener como estado inicial un estado cortado, *i.e.*, suponemos que el estado inicial satisface  $\psi_0(x > 0) = 0$ , por lo que para nuestro estado inicial tipo Gaussiano en realidad se tiene un estado Gaussiano truncado [Ap. E]. Este problema se puede resolver de forma analítica si suponemos que la transmisión está dominada por un estado ligado o antiligado [37],<sup>3</sup> en dicho caso tenemos que la transmisión es

$$\mathbf{t}(k) = ik \frac{r_1}{\kappa_1(k - \kappa_1)} e^{-ikL} = \frac{k}{k - \kappa_1} e^{-ikL}, \quad (6.4)$$

donde se aproxima  $ir_1 = \kappa_1$ ; es una buena aproximación si el estado ligado o antiligado son muy cercanos al origen [15], y de hecho es exacta cuando se trata del potencial delta  $L = 0$  con  $\kappa_1 \neq 0$ . La solución en la región de transmisión  $x > L$  está dada por [10, 45]

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk \mathbf{t}(k) \phi_0(k) e^{ikx - i\hbar k^2 t / 2m}, \quad x > L, \quad (6.5)$$

<sup>3</sup>En nuestro trabajo se ha mostrado que para sistemas transparentes la transmisión es dominada por un estado ligado o antiligado cercano al origen, por esta razón es muy importante esta solución, ya que da una buena descripción de la evolución de un paquete de onda Gaussiano. Sin embargo, siempre existe la duda ¿qué pasa con la contribución de los demás polos? ¿realmente son despreciables?

## 6 Antecedentes II.

donde  $t(k)$  es la amplitud de transmisión del problema Ec. (6.4) y  $\phi_0(k)$  es la transformada de Fourier del estado inicial  $\psi_0(x)$ . Para el paquete de onda Gaussiano truncado se tiene que la transformada de Fourier está dada por [Ap. E]

$$\phi_0(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}(2\pi\sigma^2)^{1/4} \frac{\omega(iz)}{\sqrt{\omega(iz_0)}}, \quad z = \frac{x_0}{2\sigma} - i(k - k_0)\sigma, \quad (6.6)$$

donde  $z_0 = x_0/\sqrt{2}\sigma$ ,  $E_0 = \hbar^2 k_0^2/2m$  es la energía del paquete inicial,  $x_0$  el centro del paquete,  $\sigma$  el ancho efectivo del paquete y donde  $\omega(z) = e^{-z^2} \operatorname{erfc}(-iz)$ ; es conocida en la literatura como función de Faddeyeva [30, 46, 47] [Ap. F]. Ahora sustituimos la Ec. (6.4) en (6.5), tomando en cuenta la identidad  $k/(k - \kappa_1) = 1 + \kappa_1/(k - \kappa_1)$ , escribimos

$$\psi(x, t) = \psi_f(x - L, t) + \frac{\kappa_1(2\pi\sigma^2)^{1/4}}{\sqrt{\omega(iz_0)}} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \frac{\omega(iz)}{k - \kappa_1} e^{ik(x-L) - i\hbar k^2 t/2m}, \quad (6.7)$$

donde  $\psi_f(x, t)$  es la evolución libre del paquete Gaussiano truncado y el término integral es la corrección a dicha evolución. Así, podemos calcular cada término de forma independiente.

### 6.2.1. Evolución libre.

La evolución libre de un paquete Gaussiano truncado se puede calcular de forma exacta vía el propagador. Para esto, es necesario conocer el propagador libre; el cual está dado por

$$K(x, t, y, 0) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} e^{ik(x-y) - i\hbar k^2 t/2m}. \quad (6.8)$$

Completamos cuadrados en el exponente y bajo un cambio de variable adecuado es posible llegar fácilmente a

$$K(x, t, y, 0) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar t}} e^{im(x-y)^2/2\hbar t}. \quad (6.9)$$

Una observación es que, en la literatura se acostumbra eliminar el factor de fase ( $\sqrt{-i}$ ) que aparece en el propagador. Sin embargo, recordemos que la solución que buscamos no corresponde a evolución libre de un paquete, *i.e.*, no podemos eliminar este factor de fase si deseamos llegar al resultado correcto.

Finalmente, si denotamos por  $A$  la constante de normalización del paquete Gaussiano truncado, encontramos que la propagación libre del estado CGWP está dada por

## 6.2 Paquete Gaussiano truncado (aproximación).

$$\begin{aligned}
\psi_f(x, t) &= A \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar t}} \int_{-\infty}^0 dy e^{im(x-y)^2/2\hbar t} e^{-(y-x_0)^2/4\sigma^2} e^{ik_0 y} = \\
&= A \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{imx^2/2\hbar t} e^{-x_0^2/4\sigma^2} \frac{e^{z_f^2}}{(1+it/\tau)^{1/2}} \int_{z_f}^{\infty} dy e^{-y^2} = \\
&= A e^{imx^2/2\hbar t} e^{-x_0^2/4\sigma^2} \frac{e^{z_f^2}}{(1+it/\tau)^{1/2}} \frac{1}{2} \operatorname{erfc}(z_f) = \\
&= \frac{1}{2} \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{\sigma}} \frac{e^{imx^2/2\hbar t}}{(1+it/\tau)^{1/2}} \frac{\omega(iz_f)}{\sqrt{\omega(iz_0)}}, \tag{6.10}
\end{aligned}$$

donde sustituimos al final la constante de normalización  $A = \sqrt{2}(2\pi)^{-1/4} e^{x_0^2/4\sigma^2} / \sqrt{\sigma \omega(iz_0)}$  [Ap. E],  $\tau = 2m\sigma^2/\hbar$  y

$$z_f = e^{-i\pi/4} \left(\frac{\tau}{t}\right)^{1/2} \frac{x/2\sigma + it(ik_0\sigma + x_0/2\sigma)/\tau}{(1+it/\tau)^{1/2}}. \tag{6.11}$$

### 6.2.2. Corrección.

Anteriormente se calculó la propagación libre que corresponde al primer término de (6.7). En esta sección calculamos una aproximación al término de corrección; segundo término en (6.7). Suponemos que el máximo del paquete está al lado izquierdo del potencial ( $x_0 < 0$ ), que corresponde a tener el máximo de probabilidad al lado izquierdo del potencial y no un comportamiento puramente asintótico que corresponderá a las colas del paquete Gaussiano, si suponemos que  $x_0 > 0$ .

Si  $x_0 < 0$  usamos la relación de simetría de la función de Faddeyeva [30, 46, 47], para escribir

$$\omega(iz) = 2e^{z^2} - \omega(-iz), \tag{6.12}$$

dado que siempre se satisface  $\Im\{iz\} < 0$  cuando  $x_0 < 0$  [Ec. 6.6], *i.e.*, la función  $\omega(iz)$  siempre tendrá el comportamiento exponencial, mientras que  $\omega(-iz)$  tiene un comportamiento no exponencial para valores grandes de  $|z|$ . La integral con el término exponencial se puede calcular de forma analítica y dejamos el término no exponencial a un cálculo numérico. Es conveniente mencionar que, la contribución no exponencial de la función de Faddeyeva es despreciable si  $|x_0/2\sigma| \gg 1$ , condición que corresponde a una situación física de interés, *i.e.*, un pulso que está totalmente contenido en la región de reflexión ( $x < 0$ ) y que se aproxima hacia la región de interacción ( $k_0 > 0$ ).

## 6 Antecedentes II.

Para fines del cálculo de la integral definimos el integrando

$$I(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{z^2 + ikx - i\hbar k^2 t / 2m}, \quad (6.13)$$

sustituimos el valor de  $z$  [Ec. 6.6] y completamos cuadrados en el exponente para encontrar

$$\begin{aligned} I(x, t) &= e^{x_0^2/4\sigma^2} e^{ik_0 x - i\hbar k_0^2 t / 2m} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{ikx' - i\hbar k^2 t' / 2m}}{k - \kappa'_1} dk = \\ &= -2\pi i e^{x_0^2/4\sigma^2} e^{ik_0 x - i\hbar k_0^2 t / 2m} M(x', t'; \kappa'_1), \end{aligned} \quad (6.14a)$$

identificando la función  $M(x, t; k)$  con el término integral [Ap. D] y donde se define

$$x' = x - x_0 - \frac{\hbar k_0}{m} t, \quad t' = t - i\tau, \quad \kappa'_1 = \kappa_1 - k_0, \quad (6.14b)$$

Finalmente, al sustituir la constante de normalización se llega a la solución aproximada

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \psi_f(x - L, t) + \kappa_1 \psi_1^{ec}(x - L, t; \kappa_1) + \kappa_1 \psi_1^{nc}(x - L, t; \kappa_1), \quad (6.15) \\ \psi_1^{ec}(x, t, k_0) &= -2i(2\pi)^{1/4} \sqrt{\frac{\sigma}{\omega(i z_0)}} e^{x_0^2/4\sigma^2} e^{ik_0 x - i\hbar k_0^2 t / 2m} M(x', t'; \kappa'_1), \\ \psi_1^{nc}(x, t, k_0) &= -\frac{(2\pi\sigma^2)^{1/4}}{\sqrt{\omega(i z_0)}} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \frac{\omega(-iz)}{k - \kappa_1} e^{ikx - i\hbar k^2 t / 2m}, \end{aligned}$$

donde se denota por  $\psi_1^{ec}(x, t; k_0)$  y  $\psi_1^{nc}(x, t; k_0)$  las contribuciones exponencial y no exponencial al término integral de la ecuación (6.7) debidas al término exponencial y no exponencial de la función de Faddeyeva [Ec. 6.12]. Nuevamente observe que esta solución es la combinación de la propagación libre y un término de corrección.

Los ejemplos vistos aquí los consideramos de mayor interés para nuestro trabajo. Sin embargo, cabe mencionar que existen diversos trabajos donde se han hecho diferentes aproximaciones para encontrar la solución a este tipo de problemas, ya sea que se aborden de forma analítica o numérica [39, 41, 48–50].



## 7 Solución exacta para la evolución de un paquete Gaussiano.

Encontrar la evolución de un paquete de onda arbitrario es un problema abierto; esto es debido a que no se tienen relaciones generales que permitan simplificar los cálculos para encontrar la solución analítica.

Un primer intento para resolver el problema de evolución, es emplear el modelo del obturador cuántico para potenciales de alcance finito [11, 10, 37, 51, 52]; éste permite modelar a partículas que inciden (por ejemplo, de izquierda a derecha) sobre una región finita de potencial. Recordemos que para potenciales de alcance finito, la amplitud de transmisión tiene desarrollo en resonancias [Secc. 1.1.1; pág. 8]. Sin embargo, la convergencia de los desarrollos [Ec. 1.19; pág. 9] es muy lenta, este hecho a desalentado el empleo de estados iniciales arbitrarios, ya que, en general, un ejemplo de esta naturaleza necesita la contribución de muchos términos en el desarrollo.

El primer objetivo de este capítulo es abordar el problema de la convergencia del desarrollo de la amplitud de transmisión, esto nos lleva a una nueva representación en resonancias que tiene una convergencia rápida [Secc. 7.1]. Se muestran un par de ejemplos para el cálculo de la transmisión y se compara: el cálculo exacto de la transmisión usando matriz de transferencia [Ap. A] y el desarrollo en resonancias.

Esta nueva expresión para la amplitud de transmisión nos motiva a buscar relaciones generales para encontrar la solución analítica de la evolución de un paquete de onda en la región de transmisión, usando el modelo de obturador cuántico [11]. Se muestra que para un potencial de alcance finito, es posible encontrar la solución analítica como un desarrollo en resonancias [Secc. 7.2]. Además, la evolución del paquete en la región de transmisión es una combinación lineal de la evolución libre del paquete y un término de corrección; esto generaliza el resultado de García–Calderón [11] a paquetes de onda arbitrarios. Se muestran dos casos conocidos que son: el problema del obturador libre resuelto por Moshinsky [9] y el problema del obturador no libre (o aproximación al obturador cuántico) propuesto y resuelto por García–Calderón [11].

Se encuentra la solución analítica exacta en las regiones interna y de transmisión para la evolución de un paquete de onda Gaussiano truncado (CGWP)<sup>1</sup> [Secc. 7.3] en el modelo de

---

<sup>1</sup>Por sus siglas en inglés *cutoff Gaussian wave packet*

## 7 Solución exacta para la evolución de un paquete Gaussiano.

obturador cuántico; problema que fue abordado por Villavicencio *et al.*, [37], ilustrando como casos particulares la solución para el potencial delta y una barrera delgada, donde la transmisión es dominada por un estado antiligado. Se verifica fácilmente que nuestro resultado en la aproximación de una resonancia aislada coincide funcionalmente con el resultado de Wulf y Skalozub [48], y que en el límite al estado inicial *onda plana* coincide con el resultado de García-Calderón [11].

Finalmente, se calcula la evolución de un CGWP que es transmitido a través de un sistema típico de Sollner [3] (barrera doble). Este ejemplo muestra que la densidad de probabilidad del paquete transmitido reproduce a tiempos y distancias grandes la transmisión del sistema. En otras palabras, encontramos que el paquete transmitido hereda las propiedades analíticas del sistema [Secc. 7.3.2], resultado visto anteriormente para onda plana [51] y en la aproximación de una resonancia aislada para el estado Gaussiano [49].

### 7.1. Amplitud de transmisión.

El primer problema al que nos enfrentamos al calcular la transmisión fuera de resonancia, empleando el desarrollo analítico que provee de forma natural la función de Green para un potencial de alcance finito [Ec.1.19; pág. 9], es que tiene una convergencia lenta (puede necesitar la contribución de millones de polos); esto puede desalentar a cualquiera que desee hacer un cálculo preciso. Ya que por otro lado se tiene el formalismo de la matriz de transferencia [Ap. A] y hacer una consideración de tantos polos sería un método tan complejo como encontrar una solución puramente numérica<sup>2</sup>. En esta sección vamos a ver una forma alternativa del desarrollo de la amplitud de transmisión. Recordemos que éste está dado por la función de Green de onda saliente y que por lo tanto tienen los mismos polos; por lo que una nueva representación debe tener las mismas propiedades. Recordemos las expresiones de la amplitud de transmisión encontradas en el capítulo 1, éstas son:

$$\mathbf{t}(k) = 2ikG^+(0, L; k)e^{-ikL}, \quad (7.1a)$$

$$\mathbf{t}(k) = ik \sum_n \frac{r_n}{\kappa_n(k - \kappa_n)} e^{-ikL}, \quad (7.1b)$$

$$\mathbf{t}(k) = i \sum_n \frac{r_n}{k - \kappa_n} e^{-ikL}, \quad (7.1c)$$

donde  $r_n = u_n(0)u_n(L)$ ; recuerde que la suma se hace sobre todos los polos de la función de Green de onda saliente, en nuestro estudio (potenciales reales) los polos del tercer cuadrante

---

<sup>2</sup>Es rápido y muy preciso el cálculo de la transmisión usando la Matriz de Transferencia. Sin embargo, resolver numéricamente la integral [Ec. 6.5; pág. 95] es rápida si el paquete tiene una distribución muy delgada en el espacio de momentos  $k$ , de lo contrario no.

del plano complejo  $k$  se etiquetan con índices negativos y con índices positivos a los del cuarto cuadrante, de tal forma que satisfacen  $\kappa_{-n} = -\kappa_n^*$ , nunca usamos el índice  $n = 0$  para designar a un polo. La convergencia lenta de las expresiones (7.1b y 7.1c) es debida a que  $u_n(L) \sim e^{i\kappa_n L}$  cuando  $|n| \gg 1$ . Dado que  $\Im\{\kappa_n\} < 0$ , en general se tendrá que este factor tiende a crecer exponencialmente; recordemos que debe tener un factor de normalización, por lo que en realidad no crece con tal rapidez y cuando  $n \rightarrow \infty$  tenemos que  $r_n \rightarrow 0$ . El problema es que para hacer despreciable al coeficiente  $r_n$  en las series [Ecs. 7.1b, 7.1c], se tiene que considerar un valor  $n \gg 1$ ; puede ser del orden de miles o millones, esto dependerá del sistema. Esta es la razón por la cual las series (7.1b y 7.1c) tienen una convergencia lenta.

Para resolver el problema de convergencia, definimos la función

$$\gamma(k) = \frac{\mathbf{t}(k)}{ik}, \quad (7.2)$$

la cual hereda todas las propiedades analíticas de la amplitud de transmisión, pero tiene un comportamiento asintótico diferente cuando  $k \rightarrow \infty$ , que es  $\gamma(k) \rightarrow 0$ . La pregunta es: ¿éste límite es válido para  $|k| \rightarrow \infty$ ?, *i.e.*, extenderlo al plano complejo. Si observamos la expresión (7.1a) es evidente que el límite es válido para valores  $\Im\{k\} \leq 0$  lo que deja como caso interesante a  $\Im\{k\} > 0$ . Para analizar esto, consideremos el siguiente ejemplo: suponga que se tiene una barrera cuadrada<sup>3</sup> de altura  $v$ . La amplitud de transmisión es

$$\mathbf{t}(k) = 2 \left[ 2 \cos(\sqrt{k^2 - U}L) - i \left( \frac{k}{\sqrt{k^2 - U}} + \frac{\sqrt{k^2 - U}}{k} \right) \sin(\sqrt{k^2 - U}L) \right]^{-1} e^{-ikL}, \quad (7.3)$$

donde  $U = 2mv/\hbar^2$ . Así, si calculamos el límite  $|k| \rightarrow \infty$  con  $k$  complejo en la expresión de la amplitud de transmisión [Ec. 7.3], encontramos que

$$\lim_{|k| \rightarrow \infty} \mathbf{t}(k) \rightarrow 1, \quad (7.4)$$

para todo valor  $|k| \rightarrow \infty$  en el plano complejo, por lo tanto se tiene inmediatamente que  $\lim_{|k| \rightarrow \infty} \gamma(k) \rightarrow 0$ . Esto nos permite hacer una expansión en resonancias de la función  $\gamma(k)$  en el plano complejo  $k$  y además note que  $k = 0$  no es un polo de  $\gamma(k)$ . Este mismo resultado se puede mostrar para un sistema un poco más complicado que es el doble delta, pero nos quedamos únicamente con este ejemplo.

Lo anterior sugiere suponer que el límite  $\gamma(k) \rightarrow 0$  se cumple para todos los potenciales de alcance finito. Así, usamos el teorema de Cauchy para escribir

<sup>3</sup>Tomamos una barrera cuadrada porque estamos interesados en valores de  $k$  grandes y para fines prácticos, sabemos que las componentes grandes de energía de un estado no sienten la estructura del potencial, *i.e.*, sentirán el efecto del potencial como una barrera efectiva.

7 Solución exacta para la evolución de un paquete Gaussiano.

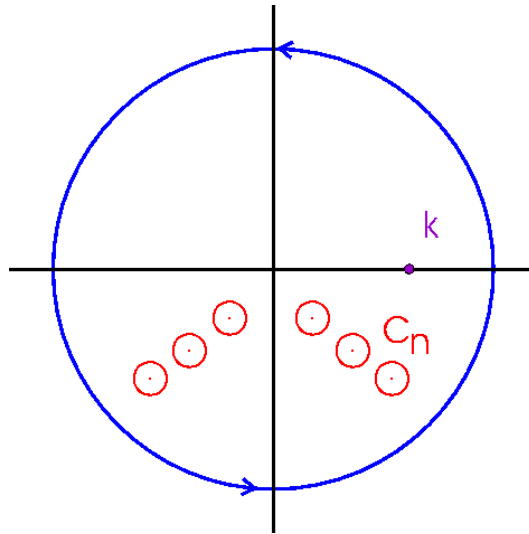


Figura 7.1: Trayectoria de integración  $\Gamma$  en el plano complejo  $z$  para el cálculo de  $\gamma(k)$ .

$$\gamma(k) = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma} dz \frac{\gamma(z)}{z - k}, \quad (7.5)$$

donde la trayectoria  $\Gamma$  rodea al polo  $k$  y excluye a los polos complejos de  $\gamma(z)$ . La importancia del teorema es que podemos elegir arbitrariamente la trayectoria. Una posible trayectoria de integración se muestra en la figura 7.1, la cual se extiende a todo el plano complejo  $k$  y donde  $\Gamma$  es el contorno que rodea al plano complejo, menos la contribución de cada polo de la función de Green. El cálculo exacto de la integral nos lleva a una nueva representación de la amplitud de transmisión que es

$$\mathbf{t}(k) = ik \sum_n \frac{r_n e^{-i\kappa_n L}}{\kappa_n (k - \kappa_n)}. \quad (7.6)$$

Esta representación elimina el problema de considerar miles o millones de polos, por la razón que se mencionó anteriormente.<sup>4</sup> Sin embargo, no hay que descartar los otros desarrollos, puesto que tienen virtudes que éste no. Para enfatizar esto, mencionamos que se ha probado que los desarrollos (7.1b y 7.1c) son una muy buena aproximación de la amplitud de transmisión alrededor de energías de resonancia aisladas o minibandas aisladas,<sup>5</sup> usando

<sup>4</sup>Anteriormente se mencionó que el residuo tiene un comportamiento  $r_n \sim e^{i\kappa_n L}$  para valores grandes de  $n$  y éste tiende a cero por el factor de normalización. Sin embargo, en este comportamiento es eliminado desde el primer residuo en (7.6), por lo que  $r_n e^{-i\kappa_n L} \rightarrow 0$  más rápidamente.

<sup>5</sup>La transmisión alrededor de una resonancia aislada tiene una forma lorentziana y las minibandas aisladas son formadas por un conjunto de resonancias que pueden traslaparse entre sí, pero no con el resto de las resonancias.

únicamente la contribución de las resonancias involucradas en la estructura resonante en cuestión [4], pero, describir la transmisión para estos casos con el desarrollo (7.6) nos llevaría a considerar varias resonancias; tal vez decenas o centenas. En este trabajo, no estamos interesados en describir la transmisión alrededor de resonancias aisladas o minibandas, sino más bien en describir la transmisión para un rango grande de energía, *i.e.*, necesitamos considerar la contribución de varias resonancias, y por lo tanto, si el sistema tiene resonancias aisladas, éstas quedan perfectamente descritas.

### 7.1.1. Ejemplos.

Antes de abordar el problema de evolución, consideremos un par de ejemplos para verificar que la expresión (7.6) reproduce la transmisión del sistema, comparamos éste con el cálculo que predice el formalismo de matriz de transferencia [Ap. A]. En nuestros ejemplos usamos la masa efectiva  $m^* = 0.067 m_e$  para el electrón.

Un primer ejemplo es el sistema Sollner [fig. 1.2, pág. 11], el cual consiste en un sistema doble barrera denotado por  $bsb(5, 5; 0.23)$  [Secc. 2.2; pág. 41]. Se compara el desarrollo en resonancias con el cálculo exacto de la transmisión para este sistema en la figura 7.2, y observamos que ésta muestra un perfecto traslape entre las curvas; el cálculo exacto (con matriz de transferencia) y el desarrollo en resonancias aproximado con la contribución de 600 polos.<sup>6</sup> Observamos que la primer resonancia del sistema es aislada, por lo que es conveniente hacer una ampliación de la transmisión alrededor de la energía de resonancia y se muestra que la ecuación (7.6) se ajusta perfectamente a la descripción.

El error máximo entre las curvas es para un valor de energía  $E = 5v_0$ , éste lo definimos mediante

$$\Delta T_N(E) \equiv T^{exacta}(E) - T_N^{approx}(E), \quad (7.7)$$

donde  $T^{exacta}(E)$  es la transmisión calculada con matriz de transferencia y  $T_N^{approx}(E)$  es la transmisión aproximada con la contribución de  $N$  dada por la expresión

$$\mathbf{t}_N(k) = ik \sum_{n=-N}^N \frac{r_n e^{-i\kappa_n L}}{\kappa_n(k - \kappa_n)}; \quad T_N^{approx}(E) = |\mathbf{t}_N(k)|^2. \quad (7.8)$$

Una estimación leída de la gráfica [fig. 7.2] muestra que el error es  $\Delta T_{600} = 7.22 \times 10^{-3}$ , lo que muestra que el cálculo con 600 polos es una muy buena aproximación.

Otro ejemplo que consideramos por simplicidad es un sistema de doble barrera tipo Soll-

7 Solución exacta para la evolución de un paquete Gaussiano.

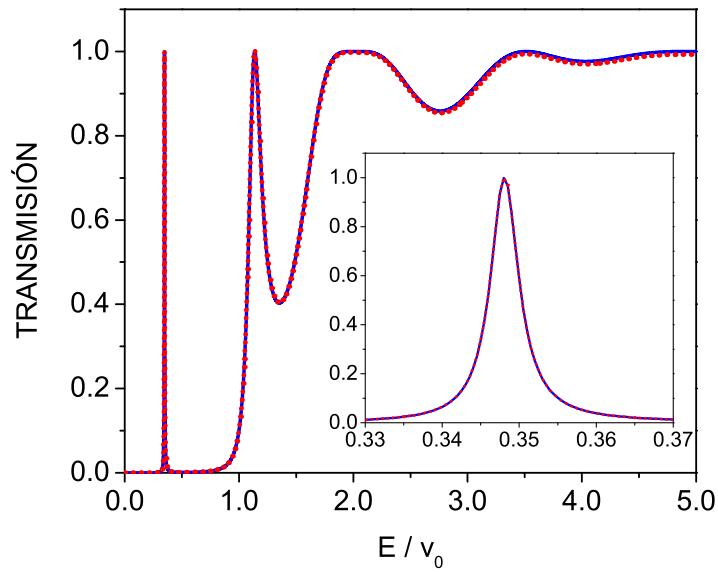


Figura 7.2: Transmisión como función de la energía del sistema Sollner  $bsb(5, 5; 0.23)$  con  $v_0 = 0.23$  (línea continua) y una aproximación de 600 polos usando la expresión (7.8) (línea punteada). Se muestra una ampliación de la gráfica alrededor de la primer resonancia aislada.

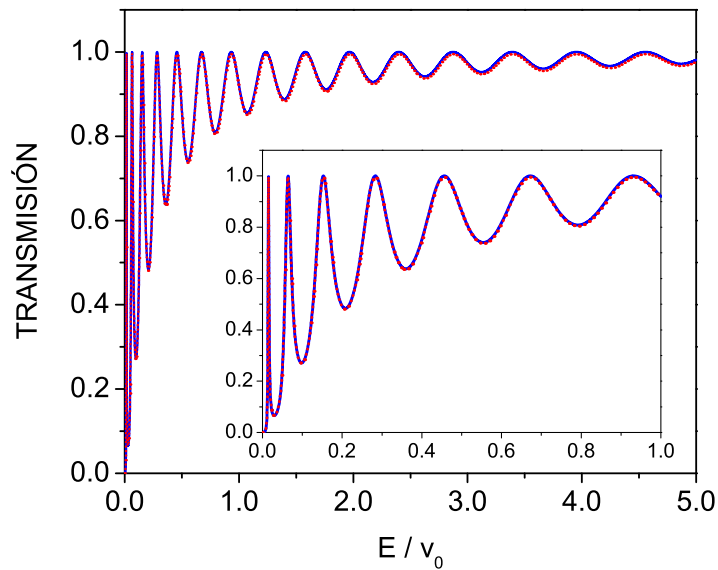


Figura 7.3: Transmisión como función de la energía de un sistema de doble barrera (aproximación al doble delta)  $bsb(0.1, 0.1; 10)$  con  $v_0 = 10$  (línea continua) y una aproximación de 350 polos usando la expresión (7.8) (línea punteada). Se muestra una ampliación de la transmisión para valores de energía hasta la altura de las barreras.

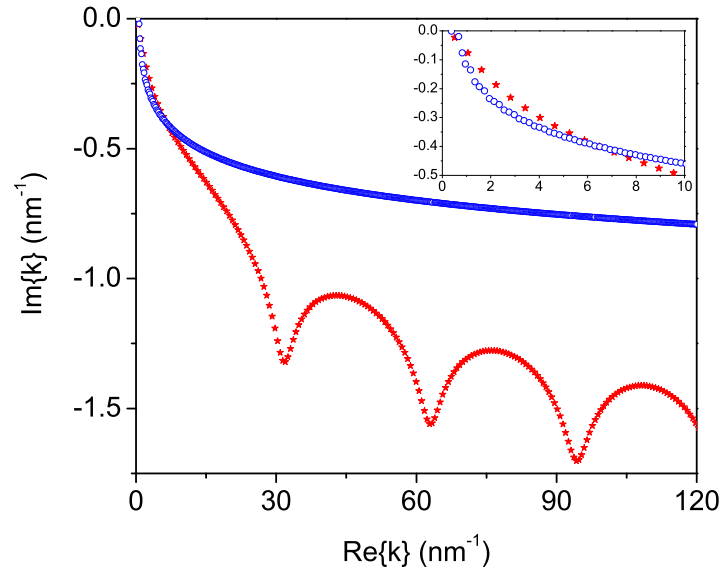


Figura 7.4: Comparación de las distribuciones de polos para el sistema de Sollner  $bsb(5, 5; 0, 23)$  (círculos huecos) y el  $bsb(0.1, 5; 10)$  (estrellas sólidas). En la misma se muestra una ampliación de la gráfica para los primeros polos.

ner. Sólo que en esta ocasión suponemos que el ancho de las barreras es muy pequeño y la altura grande; esto corresponde a una aproximación al sistema doble delta. Para este ejemplo tomamos  $v = 10 \text{ eV}$  (altura de las barreras),  $b = 0.1 \text{ nm}$  (ancho de las barreras) y con la finalidad de que existan varias resonancias hasta la altura de las barreras, consideramos una separación entre barreras de  $w = 5 \text{ nm}$ , este sistema se denota por  $bsb(0.1, 5; 10)$ . Así el sistema tendrá una estructura resonante más complicada que el sistema Sollner  $bsb(5, 5; 0, 23)$ .

En la figura 7.3 se muestra la transmisión del sistema  $bsb(0.1, 5; 10)$  como función de la energía, hasta cinco veces la altura de las barreras. Comparamos el cálculo exacto con una aproximación de 350 polos, en la misma se muestra una ampliación de la transmisión para energías hasta la altura de las barreras. El error máximo para este ejemplo es de  $\Delta T_{350} = 5.31 \times 10^{-3}$ , que es un error estrictamente menor al calculado para el sistema Sollner con 600 polos; pero del mismo orden. Note que el sistema  $bsb(0.1, 5; 10)$  no tiene ninguna resonancia aislada, a diferencia del sistema Sollner.

Estos ejemplos muestran que la expresión (7.6) converge rápidamente, y además aprendemos que no siempre se emplea la misma cantidad de polos para diferentes sistemas. Este comentario aunque parece obvio va en dirección al siguiente hecho: note que la estructura

<sup>6</sup>En la aproximación, nos referimos sólo al número de polos en el cuarto cuadrante  $N = 600$ , puesto que los del tercer (etiquetados con índices negativos) se relacionan con estos vía  $\kappa_{-n} = -\kappa_n^*$ , por lo que, se debe entender que la suma contiene  $2N$  términos,  $N$  del tercer cuadrante y  $N$  del cuarto.

## 7 Solución exacta para la evolución de un paquete Gaussiano.

resonante del sistema Sollner es más simple [fig. 7.2] y la estructura del sistema tipo doble delta es más complicada [fig. 7.3]; por sentido común pensaríamos que se necesitan menos polos para el cálculo de la transmisión del sistema Sollner, pero encontramos un error del mismo orden considerando menos polos en el sistema tipo doble delta. Además, los sistemas son cualitativamente iguales.

La explicación de esto es a partir de la distribución de polos de cada sistema. En la figura 7.4 se muestran las distribuciones de polos para el sistema Sollner  $bsb(5, 5; 0, 23)$  y el sistema tipo doble delta  $bsb(0.1, 5; 10)$ . Note que los polos del sistema Sollner son más cercanos al eje real, y además son más densos; esto se aprecia mejor en la ampliación de la gráfica de los primeros polos, y en el hecho de que en el intervalo mostrado en la figura 7.4 tenemos 570 polos para el sistema Sollner y 198 para el sistema tipo doble delta. Esto explica porqué el desarrollo de la transmisión del sistema Sollner necesita la contribución de más polos, ya que su distribución de polos es más cercana al eje real y más densa; en comparación con la distribución de polos del sistema tipo doble delta  $bsb(0.1, 5; 10)$ .

## 7.2. Evolución Temporal.

Antes de calcular la evolución de un paquete de onda determinado, recordemos brevemente cual es el problema que se quiere resolver en forma general, al final simplificamos el análisis al caso particular de potenciales de alcance finito.

Supongamos que se tiene una partícula de masa  $m$  con estado inicial  $\psi_0(x)$  y energía  $E_0 = \hbar^2 k_0^2 / 2m$ . La evolución del paquete está determinada por la ecuación de Schrödinger con condición inicial  $\psi_0(x)$ , *i.e.*, se satisface

$$H\psi(x, t) = i\hbar\partial_t\psi(x, t), \quad \psi(x, 0) = \psi_0(x), \quad (7.9)$$

donde  $H$  es el operador Hamiltoniano correspondiente al problema, resolver este problema en general es muy complicado. Sin embargo, podemos dar una idea simple (basada en primeros principios) de como calcular la solución.

No conocemos la solución para un estado inicial arbitrario, pero si suponemos que  $\chi_k(x)$  son las eigenfunciones del Hamiltoniano, *i.e.*, son solución a la ecuación de eigenvalores

$$H\chi_k(x) = E\chi_k(x), \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad (7.10)$$

la evolución temporal de este paquete está dada por



$$\chi_k(x, t) = \chi_k(x) e^{-i\hbar k^2 t/2m}. \quad (7.11)$$

Note que no es necesario pedir que las eigenfunciones del Hamiltoniano sean normalizadas, pero suponemos que lo son. La virtud de la ecuación de Schrödinger es su linealidad, *i.e.*, la combinación lineal de dos o más soluciones es solución. Un ejemplo trivial es suponer que tenemos un estado inicial que es la combinación lineal de tres eigenfunciones

$$\psi_0(x) = A_{k_1} \chi_{k_1}(x) + A_{k_2} \chi_{k_2}(x) + A_{k_3} \chi_{k_3}(x), \quad (7.12)$$

donde  $\sum_j |A_{k_j}|^2 = 1$  para que esté debidamente normalizada. Por lo tanto la evolución de este paquete es

$$\psi(x, t) = A_{k_1} \chi_{k_1}(x) e^{-ik_1^2 t/2m} + A_{k_2} \chi_{k_2}(x) e^{-ik_2^2 t/2m} + A_{k_3} \chi_{k_3}(x) e^{-ik_3^2 t/2m}, \quad (7.13)$$

y es fácil mostrar que es solución de (7.9). Evidentemente este resultado se puede generalizar a un espectro continuo, *i.e.*,

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dk A(k) \chi_k(x) e^{-i\hbar k^2 t/2m}. \quad (7.14)$$

Así, el problema se reduce al cálculo de  $A(k)$  y  $\chi_k(x)$ . Uno puede pensar que esto no ha reducido el problema, puesto que el problema se reduce al dar explícitamente la forma de  $A(k)$  y  $\chi_k(x)$ , por lo tanto, para poder simplificar el problema, es necesario hacer consideraciones sobre el potencial y estado inicial.

Si consideramos un potencial de alcance finito (extendido de 0 a  $L$ ) los estados de dispersión de izquierda a derecha  $\chi_k^+(x)$  están dados por

$$\chi_k^+(x) = \begin{cases} e^{ikx} + \mathbf{r}(k) e^{-ikx} & x < 0 \\ \chi_{int}^+(x; k) & 0 < x < L \\ \mathbf{t}(k) e^{ikx} & L < x \end{cases}, \quad (7.15)$$

## 7 Solución exacta para la evolución de un paquete Gaussiano.

donde  $\mathbf{r}(k)$  y  $\mathbf{t}(k)$  son las amplitudes de reflexión y transmisión respectivamente. La solución en la región interna  $\chi_{int}^+(x; k)$  como se vio anteriormente [Ec. 1.16, pág. 8] está dada por la función de Green de onda saliente, mediante

$$\chi_{int}^+(x; k) = 2ikG^+(0, x; k). \quad (7.16)$$

Los estados  $\chi_k^+(x)$  forman la base del Hamiltoniano que permite propagar paquetes de onda que inicialmente estén contenidos en su totalidad en la región de reflexión ( $x < 0$ ), *i.e.*, supondremos que nuestro estado inicial satisface  $\psi_0(x > 0) = 0$ ; corresponde al modelo de obturador cuántico. Bajo esta condición se puede mostrar que en ausencia de estados ligados la solución está dada por [45, 53]

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk \phi_0(k) \chi_k^+(x) e^{-i\hbar k^2 t/2m}, \quad (7.17)$$

donde  $\phi_0(k)$  es la transformada de Fourier del estado inicial

$$\phi_0(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_0(x) e^{-ikx}. \quad (7.18)$$

Cabe mencionar que la derivación de la igualdad (7.17) es no trivial e involucra la contribución de estados de dispersión de derecha a izquierda, esto se muestra en detalle en el apéndice G.

La solución en forma explícita para ( $x > 0$ ) se obtiene al sustituir la expansión analítica de la función de Green [Ec. 1.14] y de la amplitud transmisión [Ec. 7.6], tenemos

$$\psi(x, t) = \sum_n u_n(0) u_n(x) \frac{i}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk \frac{\phi_0(k)}{k - \kappa_n} e^{-i\hbar k^2 t/2m}, \quad 0 < x < L, \quad (7.19a)$$

$$\psi(x, t) = \sum_n \frac{r_n e^{-i\kappa_n L}}{\kappa_n} \frac{i}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk \frac{k \phi_0(k)}{k - \kappa_n} e^{ikx - i\hbar k^2 t/2m}, \quad x > L. \quad (7.19b)$$

donde la suma se hace sobre todos los polos de la función de Green de onda saliente.

La ecuación (7.19b) se puede manipular algebraicamente para obtener

$$\begin{aligned} \psi(x, t) = & \mathbf{t}(k_0)\psi_f(x, t) + i \sum_n r_n e^{-i\kappa_n L} \left[ \frac{\psi_f(x, t)}{\kappa_n - k_0} + \right. \\ & \left. + \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk \frac{\phi_0(k)}{k - \kappa_n} e^{ikx - i\hbar k^2 t/2m} \right], \end{aligned} \quad (7.19c)$$

donde  $E_0 = \hbar^2 k_0^2/2m$  es la energía del paquete inicial y  $\psi_f(x, t)$  la evolución libre del paquete inicial.

Note que la solución en la región de transmisión [Ec. 7.19c], se ha escrito en forma análoga a la solución que encontró García-Calderón [Ec. 6.2; pág. 94] [11];<sup>7</sup> desde un punto de vista físico, muestra que la evolución del paquete de onda tiene como primer contribución la propagación libre del paquete modulada por la transmisión correspondiente a la energía del paquete, y el segundo término es una corrección a la evolución libre, *i.e.*, encontramos para el modelo de obturador cuántico que, la solución general a la propagación de paquetes de onda toma la forma

$$\psi(x, t) = \mathbf{t}(k_0)\psi_f(x, t) + \psi_c(x, t; k_0), \quad E_0 = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m}, \quad (7.20)$$

donde

$$\psi_c(x, t; k_0) = i \sum_n r_n e^{-i\kappa_n L} \left[ \frac{\psi_f(x, t)}{\kappa_n - k_0} + \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk \frac{\phi_0(k)}{k - \kappa_n} e^{ikx - i\hbar k^2 t/2m} \right]. \quad (7.21)$$

La importancia de escribir la solución (7.19c) en la forma (7.20) es que, sabemos que el retraso o adelanto que sufre un paquete de onda es debido a la interferencia entre la evolución libre y la corrección a ésta; este hecho fue exhibido en la propagación de ondas planas usando el modelo de obturador cuántico [11, 12].

Antes de dar un ejemplo, notemos que las soluciones en las regiones interna (7.19a) y de transmisión (7.19c) tienen la misma forma integral, que es

$$\psi_n(x, t; k_0) \equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk \frac{\phi_0(k)}{k - \kappa_n} e^{ikx - i\hbar k^2 t/2m}, \quad (7.22)$$

<sup>7</sup>Esto muestra que la igualdad [Ec. 6.2, pág. 94] es de forma general para el problema del obturador cuántico con un potencial de alcance finito.

## 7 Solución exacta para la evolución de un paquete Gaussiano.

donde indicamos la dependencia explícitamente de  $k_0$  puesto que en general  $\phi_0(k)$  depende de esta constante. Esto, reduce el problema a calcular únicamente la evolución libre  $\psi_f(x, t)$  y cada término  $\psi_n(x, t; k_0)$  para conocer la evolución para  $x > 0$ . En términos de estas definiciones la solución se escribe como

$$\psi(x, t) = i \sum_n u_n(0) u_n(x) \psi_n(0, t; k_0), \quad 0 < x < L, \quad (7.23)$$

$$\psi(x, t) = \mathbf{t}(k_0) \psi_f(x, t) + \psi_c(x, t; k_0), \quad x > L, \quad (7.24)$$

donde

$$\psi_c(x, t; k_0) = i \sum_n r_n e^{-i\kappa_n L} \left[ \frac{\psi_f(x, t)}{\kappa_n - k_0} + \psi_n(x, t; k_0) \right]. \quad (7.25)$$

En otras palabras, si conocemos la evolución en la región de transmisión, tenemos de forma inmediata la evolución en la región interna. Sin embargo, la región interna aún tiene el problema de convergencia, puesto que no es muy útil si necesitamos la contribución de muchos polos.

### 7.2.1. Obturador cuántico libre.

Una primer aplicación que consideramos para verificar que la solución (7.17) es correcta es el obturador resuelto por Moshinsky [9], con condición inicial

$$\psi_0(x) = \begin{cases} e^{ik_0 x} & x < 0 \\ 0 & x > 0 \end{cases}. \quad (7.26)$$

Podemos darnos cuenta que esta función no es cuadráticamente integrable, por lo que su transformada de Fourier estrictamente no existe. Pero, la podemos ver como un límite si suponemos que  $k'$  es compleja con parte imaginaria  $\beta = -\Im\{k'\}$ , i.e.,  $k' = k_0 - i\beta$  con  $\beta > 0$ ; esto hace que (7.26) sea cuadráticamente integrable y al final calculamos el límite  $\beta \rightarrow 0^+$ .<sup>8</sup> Bajo este supuesto la transformada de Fourier toma la forma

$$\phi_0(k) = \lim_{\beta \rightarrow 0^+} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^0 dk e^{i(k'-k)x} = \frac{i}{\sqrt{2\pi}} \lim_{\beta \rightarrow 0^+} \frac{1}{k - k'} \rightarrow \frac{i}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{k - k_0}. \quad (7.27)$$

<sup>8</sup>Típicamente se toma el límite  $\beta \rightarrow 0^+$ , pero podríamos no hacer dicho límite, y el resultado es el mismo; excepto que la energía del paquete es compleja.

Dado que el problema es el de partícula libre se tiene que  $t(k) = 1$  para todo valor  $k$ , por lo que  $\chi_k^+(x) = e^{ikx}$  en (7.15). Así la evolución del paquete en todo el espacio<sup>9</sup> está dada por

$$\psi(x, t) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \frac{e^{ikx - i\hbar k^2 t/2m}}{k - k_0}. \quad (7.28)$$

La integral se relaciona con una función conocida en la literatura mediante

$$\frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \frac{e^{ikx - i\hbar k^2 t/2m}}{k - k_0} = \frac{1}{2} e^{imx^2/2\hbar t} \omega(iy), \quad (7.29)$$

donde

$$\omega(iy) = e^{y^2} \operatorname{erfc}(y), \quad y = e^{-i\pi/4} \sqrt{\frac{m}{2\hbar t}} \left( x - \frac{\hbar k_0}{m} t \right), \quad (7.30)$$

con  $\operatorname{erfc}(y)$  la función de error complementario [30]. La función  $\omega(z)$  es conocida en la literatura como *función de Faddeyeva* [30, 46, 47]. En adelante nos referimos por función de Moshinsky o función  $M$  a la solución de este problema y la denotamos por  $M(x, t; k)$ , i.e.,

$$M(x, t; k) = \frac{1}{2} e^{imx^2/2\hbar t} \omega(iy), \quad \text{con } y = e^{-i\pi/4} \sqrt{\frac{m}{2\hbar t}} \left( x - \frac{\hbar k_0}{m} t \right). \quad (7.31)$$

En el apéndice D se muestra que también puede tomar la forma  $M(x, t; k_0) \sim -\omega(-iy)$  con el mismo factor; esto es cuando  $\Im\{k_0\} > 0$ . Como en este caso  $\Im\{k_0\} = 0$ , uno tendrá la duda si evaluar una u otra forma de la función  $M$ . Por lo que aclaramos: en este análisis tomamos un límite que es  $\beta \rightarrow 0^+$ , si este límite se hubiese calculado al final notaremos que la evaluación con (7.31) es la correcta.

### 7.2.2. Obturador cuántico con potencial.

Un segundo ejemplo que damos aquí, es el problema del obturador cuántico con un potencial de alcance finito, esto es,  $v(x < 0) = 0$  y  $v(x > L) = 0$ . Este problema fue resuelto por García-Calderón usando transformadas de Laplace [11]; el desarrollo se muestra detalladamente en el apéndice B.

<sup>9</sup>Aquí podemos garantizar que la solución es en todo el espacio  $x$ , puesto que se trata de la evolución libre.

## 7 Solución exacta para la evolución de un paquete Gaussiano.

Nosotros en vez de emplear la transformada de Laplace, usaremos las expresiones encontradas en esta sección, a saber, las soluciones (7.23 y 7.24) para la solución en la regiones interna ( $0 < x < L$ ) y de transmisión ( $x > L$ ) respectivamente. Dado que la condición inicial es la misma que emplea Moshinsky [Ec. 7.26] la transformada de Fourier está dada por la igualdad (7.27), y la propagación libre del paquete corresponde a la función  $M$  [Ec. 7.31]. Esto resuelve la mitad del problema, por lo que únicamente tenemos que calcular cada elemento  $\psi_n(x, t; k_0)$  [Ec. 7.22] que es

$$\begin{aligned}\psi_n(x, t; k_0) &= \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \frac{e^{ikx - i\hbar k^2 t/2m}}{(k - \kappa_n)(k - k_0)} = \\ &= \frac{1}{k_0 - \kappa_n} \times \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \left[ \frac{1}{k - k_0} - \frac{1}{k - \kappa_n} \right] e^{ikx - i\hbar k^2 t/2m} = \\ &= \frac{M(x, t; k_0) - M(x, t; \kappa_n)}{k_0 - \kappa_n},\end{aligned}\tag{7.32}$$

sustituimos (7.32) en las ecuaciones (7.23) y (7.24) para encontrar

$$\psi(x, t) = i \sum_n \frac{u_n(0)u_n(x)}{k_0 - \kappa_n} \left[ M(0, t; k_0) - M(0, t; \kappa_n) \right], \quad 0 < x < L,\tag{7.33a}$$

$$\psi(x, t) = \mathbf{t}(k_0)M(x, t; k_0) - i \sum_n \frac{r_n e^{-i\kappa_n L}}{k_0 - \kappa_n} M(x, t; \kappa_n), \quad x > L,\tag{7.33b}$$

que corresponde a la solución proporcionada por García–Calderón [11]. Es notable que, el método que presentamos aquí es mucho más simplificado que el desarrollo con transformada de Laplace [Ap. B]. Sin embargo, podemos darnos cuenta que, el método que presentamos aquí se puede ver como una generalización del método con transformada de Laplace [11] [Ap. B], ya que la trayectoria de integración cambiará en caso de tener estados ligados, resultado que no es obvio de la expresión (7.17) [Ap. G], mientras el método para encontrar la solución usando transformada de Laplace nos lleva a la solución exacta sin tener que modificar la trayectoria de integración [Ap. B].

Además, algo que no debemos perder de vista es el hecho de que al conocer la solución [Ec. 7.33b] podemos intuir fácilmente la nueva expresión de la amplitud de transmisión presentado en este trabajo [Ec. 7.6].

### 7.3. Solución exacta para el paquete Gaussiano truncado.

En las secciones anteriores se ha mostrado el método que empleamos para el cálculo de la evolución de un paquete de onda arbitrario para el modelo de obturador cuántico. En esta sección se muestra como encontrar la solución exacta en la región de transmisión, para la evolución de un paquete Gaussiano truncado (CGWP) con parámetros:  $\sigma$  ancho efectivo del paquete,  $x_c$  centro del paquete y  $E_0 = \hbar^2 k_0^2 / 2m$  energía del paquete, i.e., la condición inicial está dada por

$$\psi_0(x) = \begin{cases} Ae^{-(x-x_c)^2/2\sigma} e^{ik_0 x} & x < 0 \\ 0 & x > 0 \end{cases}, \quad (7.34)$$

donde

$$A = \left(\frac{2}{\pi\sigma^2}\right)^{1/4} \frac{e^{x_c^2/4\sigma^2}}{\sqrt{\omega(iz_c)}} = \left(\frac{2}{\pi\sigma^2}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{\operatorname{erfc}(z_c)}}, \quad z_c = \frac{x_c}{\sqrt{2}\sigma}, \quad (7.35)$$

es la constante de normalización (ver el apéndice E).

Como vimos anteriormente la solución se reduce al cálculo de la propagación libre  $\psi_f(x, t)$  y al término  $\psi_n(x, t; k_0)$  para cada polo [Ec. 7.22]. La evolución libre del CGWP se desarrollo anteriormente [Secc. 6.2.1] y está dada por [37]

$$\psi_f(x, t) = \frac{1}{2} \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{\sigma}} \frac{e^{imx^2/2\hbar t}}{(1+it/\tau)^{1/2}} \frac{\omega(iz_f)}{\sqrt{\omega(iz_c)}}, \quad x \geq L, \quad (7.36)$$

$$z_f = e^{-i\pi/4} \left(\frac{\tau}{t}\right)^{1/2} \frac{x/2\sigma + it(ik_0\sigma + x_c/2\sigma)/\tau}{(1+it/\tau)^{1/2}}.$$

con  $\tau = 2m\sigma^2/\hbar$ , aquí se indica la condición  $x \geq L$  para enfatizar que estamos buscando la solución en la región de transmisión. Aunque cabe mencionar que la solución (7.36) es válida para todo el espacio  $x$ . Por lo tanto, el problema se reduce al cálculo de  $\psi_n(x, t; k_0)$  [Ec. 7.22]. Para la cual se tiene parte de la solución, a saber, si suponemos que el centro del paquete satisface  $x_c < 0$ , podemos separar en dos términos la función  $\psi_n(x, t; k_0)$ : un término que viene del comportamiento exponencial de la función de Faddeyeva y otro que tiene un comportamiento asintótico no exponencial [Ec. 6.12, pág. 97]. La solución para la

## 7 Solución exacta para la evolución de un paquete Gaussiano.

contribución exponencial es conocida [37, 48] y por lo tanto podemos escribir

$$\begin{aligned}\psi_n(x, t; k_0) &= \psi_n^{ec}(x, t; k_0) + \psi_n^{nc}(x, t; k_0) \\ \psi_n^{ec}(x, t; k_0) &= -2i(2\pi)^{1/4} \sqrt{\frac{\sigma}{\omega(iz_c)}} e^{x_c^2/4\sigma^2} e^{ik_0x - i\hbar k_0^2 t/2m} M(x', t'; \kappa'_n),\end{aligned}\quad (7.37a)$$

$$\psi_n^{nc}(x, t; k_0) = -\frac{(2\pi\sigma^2)^{1/4}}{\sqrt{\omega(iz_c)}} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \frac{\omega(-iz)}{k - \kappa_n} e^{ikx - i\hbar k^2 t/2m}, \quad (7.37b)$$

donde nuevamente se denotan por  $\psi_n^{ec}(x, t; k_0)$  y  $\psi_n^{nc}(x, t; k_0)$  las contribuciones debidas a los términos exponencial y no exponencial de la función de Faddeyeva, y se definen las cantidades

$$x' \equiv x - x_c - \hbar k_0 t/m, \quad t' \equiv t - i \frac{2m\sigma^2}{\hbar} = t - i\tau \quad (7.37c)$$

$$\kappa'_n \equiv \kappa_n - k_0, \quad z_c \equiv \frac{x_c}{\sqrt{2}\sigma}, \quad (7.37d)$$

y

$$z \equiv \frac{x_c}{2\sigma} - i(k - k_0)\sigma = -i(k - k'_0)\sigma, \quad \text{con } k'_0 \equiv k_0 - i \frac{x_c}{2\sigma^2}. \quad (7.37e)$$

Ésta solución fue presentada por Villavicencio *et al.*, [37] como caso particular en donde la transmisión es dominada por la contribución de un estado antiligado [Secc. 6.2], y es fácil darse cuenta que es válida para un estado resonante arbitrario. Una observación es que el término  $\psi_n^{ec}(x, t; k_0)$  aparece únicamente cuando  $x_c < 0$ , de lo contrario se tendrá que  $\psi_n(x, t; k_0) = \psi_n^{nc}(x, t; k_0)$  si  $x_c > 0$ , en tal caso sólo hay que cambiar  $z$  por  $-z$  en la ecuación (7.37b), pero en este trabajo siempre supondremos  $x_c < 0$ , que corresponde a la situación física que deseamos describir, *i.e.*, un CGWP que se aproxima de izquierda a derecha hacia una región de potencial.

En este trabajo mostramos como encontrar analíticamente la contribución no exponencial  $\psi_n^{nc}(x, t; k_0)$  a la solución, cuando se satisface que  $|z| > 1$  [Ec. 7.37e] para todo valor  $k$ ; en este caso podemos escribir la función de Faddeyeva en su desarrollo asintótico que es [30, 46]

$$\omega(-iz) \approx -\frac{i}{\pi} \sum_{j=0}^N \frac{\Gamma(j + 1/2)}{(k - k'_0)^{2j+1} \sigma^{2j+1}}, \quad (7.38)$$



### 7.3 Solución exacta para el paquete Gaussiano truncado.

donde  $N$  es finito. En la mayoría de los casos es suficiente quedarnos con dos o tres términos para obtener un valor muy aproximado de  $\omega(-iz)$ . Podemos escribir a (7.38) de una forma más simple si identificamos cada término  $(k - k'_0)^{-(2j+1)} = (2j)!^{-1} D_{k'_0}^{2j} (k - k'_0)^{-1}$ , donde  $D_{k'_0}^n$  es la derivada  $n$ -ésima respecto a la variable  $k'_0$ , i.e.,

$$\omega(-iz) \approx -\frac{i}{\pi} \sum_{j=0}^N \frac{\Gamma(j+1/2)}{(2j)! \sigma^{2j+1}} D_{k'_0}^{2j} \frac{1}{k - k'_0}, \quad (7.39)$$

esto reduce el cálculo de  $\psi_n^{nc}(x, t; k_0)$  a una integral conocida, de hecho ya se calculó [Secc. 7.2.2], y por lo tanto se tiene

$$\begin{aligned} \psi_n^{nc}(x, t; k_0) &= \left( \frac{2}{\pi \sigma^2} \right)^{1/4} \frac{1}{k'_0 - \kappa_n} \frac{M(x, t; k'_0) - M(x, t; \kappa_n)}{\sqrt{\omega(iz_c)}} + \\ &+ \frac{1}{\pi} \frac{(2\pi \sigma^2)^{1/4}}{\sqrt{\omega(iz_c)}} \sum_{j=1}^N \frac{\Gamma(j+1/2)}{\sigma^{2j+1} (\kappa_n - k'_0)^{2j+1}} M(x, t; \kappa_n) - \\ &- \frac{1}{\pi} \frac{(2\pi \sigma^2)^{1/4}}{\sqrt{\omega(iz_c)}} \sum_{j=1}^N \frac{\Gamma(j+1/2)}{(2j)! \sigma^{2j+1}} D_{k'_0}^{2j} \frac{M(x, t; k'_0)}{k'_0 - \kappa_n}, \end{aligned} \quad (7.40)$$

donde se ha separado el término  $j = 0$  en la suma. La derivada que aparece en (7.40) se puede calcular en forma exacta vía la expresión de la derivada de un producto; tiene la forma

$$D_{k'_0}^{2j} \frac{M(x, t; k'_0)}{k'_0 - k} = \sum_{l=0}^{2j} \frac{(-1)^l (2j)!}{l! (k - k'_0)^{2j+1-l}} D_{k'_0}^l M(x, t; k'_0). \quad (7.41)$$

El cálculo de la  $n$ -ésima derivada de la función  $M$  respecto a la variable  $k'_0$  se da en la ecuación (D.14) [Ap. D], al sustituirla se encuentra

$$\begin{aligned} \psi_n^{nc}(x, t; k_0) &= \left( \frac{2}{\pi \sigma^2} \right)^{1/4} \frac{1}{k'_0 - \kappa_n} \frac{M(x, t; k'_0) - M(x, t; \kappa_n)}{\sqrt{\omega(iz_c)}} + \\ &+ \frac{1}{\pi} \frac{(2\pi \sigma^2)^{1/4}}{\sqrt{\omega(iz_c)}} \left\{ \sum_{j=1}^N \frac{\Gamma(j+1/2)}{[\sigma(\kappa_n - k'_0)]^{2j+1}} \left[ M(x, t; \kappa_n) + M(x, t; k'_0) + \right. \right. \\ &\left. \left. + \frac{1}{2} G_j e^{imx^2/2ht} - F_j M(x, t; k'_0) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (7.42)$$

## 7 Solución exacta para la evolución de un paquete Gaussiano.

con

$$G_j = \left( \frac{2i}{\sqrt{\pi}} \right) \sum_{l=1}^{2j} \frac{(\kappa_n - k'_0)^l}{l!} z_p^l g_l(z), \quad F_j = \sum_{l=1}^{2j} \frac{(\kappa_n - k'_0)^l}{l!} z_p^l f_l(z), \quad (7.43a)$$

$$z = -e^{i\pi/4} \sqrt{\frac{m}{2\hbar t}} \left( x - \frac{\hbar k'_0}{m} t \right), \quad z_p = e^{i\pi/4} \sqrt{\frac{\hbar t}{2m}}, \quad (7.43b)$$

y  $g_1(z) = 1$ ,  $f_1(z) = 2z$ ,  $g_{l+1}(z) = g'_l(z) - f_l(z)$ ,  $f_{l+1}(z) = f'_l(z) - 2zf_l(z)$ .

Por lo tanto, la evolución de un paquete Gaussiano está determinada por

$$\psi(x, t) = i \sum_n u_n(0) u_n(x) \left( \psi_n^{ec}(x, t; k_0) + \psi_n^{nc}(x, t; k_0) \right), \quad (7.44)$$

para la región interna ( $0 < x < L$ ), y en la región de transmisión ( $x > L$ ) por

$$\psi(x, t) = \mathbf{t}(k_0) \psi_f(x, t) + i \sum_n r_n e^{-ik_L} \left[ \frac{\psi_f(x, t)}{\kappa_n - k_0} + \psi_n^{ec}(x, t; k_0) + \psi_n^{nc}(x, t; k_0) \right]. \quad (7.45)$$

Si tomamos los parámetros adecuados del estado inicial, *i.e.*, que se satisfaga la condición  $-x_c/2\sigma \gg 1$  la contribución  $\psi_n^{nc}(x, t; k_0)$  es despreciable, lo que simplifica el cálculo numérico de la solución.<sup>10</sup> Cabe mencionar que no considerar este término en la solución nos lleva a que la solución no satisfaga la condición inicial [Ec. 7.34] [52], *i.e.*, la contribución  $\psi_n^{nc}(x, t; k_0)$  es importante a tiempos muy cortos.

Es conveniente mencionar que la solución completa satisface la condición inicial, *i.e.*, si calculamos el límite  $t \rightarrow 0$  en la ecuación (7.45) se encuentra que  $\lim_{t \rightarrow 0} \psi(x > 0, t) = 0$ . Esto se obtiene fácilmente para la solución libre [Ec. 7.36] ya que el propagador libre satisface  $K(x > 0, 0; y < 0; 0) = 0$  [Ec. 6.8, pág. 96] y el argumento de la función de Faddeyeva que es empleado para la función  $M$  en este límite tiende a infinito como

$$y \rightarrow e^{-i\pi/4} \sqrt{\frac{m}{2\hbar}} x t^{-1/2}.$$

<sup>10</sup>Un cálculo sencillo muestra que para el estado inicial CGWP se tiene  $\psi_n^{nc}(x, t; k_0) \sim e^{-x_c^2/4\sigma^2} \psi_n^{ec}(x, t; k_0)$ .

### 7.3 Solución exacta para el paquete Gaussiano truncado.

Así, al evaluar  $\omega(iy)$  encontramos que  $\Im\{iy\} > 0$  si  $x > 0$  por lo que en el límite se tendrá  $\omega(iy) \rightarrow 0$ . Esto muestra que cada contribución de la función  $M$  se anula exactamente cuando  $t \rightarrow 0$ . Sin embargo, aunque el límite es correcto, hay que tomar en cuenta que la solución es no relativista, por lo tanto, nuestra solución no describe correctamente la evolución del paquete si se consideran tiempos muy cortos. Esto se puede ver fácilmente, ya que, para un valor  $t > 0$  la solución (7.45) es distinta de cero, sin importar la posición  $x > 0$ , ni que tan pequeño sea el valor  $t$ . Por tal razón es necesario enfatizar que la solución es válida para tiempos mayores a un tiempo mínimo  $\tau_{min}$ .

Definimos a  $\tau_{min}$  como diez veces el tiempo que le llevaría recorrer a la luz una distancia  $x$ , *i.e.*,

$$\tau_{min} \equiv 10\tau_r, \quad \text{con} \quad \tau_r = \frac{x}{c}, \quad (7.46)$$

donde  $c = 300 \text{ nm/fs}$  es la velocidad de la luz. Encontramos que  $\tau_{min} = x/30 \text{ fs}$ , donde  $x$  se mide en nanómetros ( $\text{nm}$ ). Esto garantiza que la solución para  $t > \tau_{min}$  es confiable. Aunque hay que tomar en cuenta que, cambios abruptos en intervalos de tiempo muy cortos también pueden necesitar una corrección relativista.

#### 7.3.1. Límite onda plana.

Una forma de verificar la solución que obtuvimos [Secc. 7.3] es calcular el límite  $\sigma \rightarrow \infty$ , el cual si se toma adecuadamente corresponde al límite onda plana.

Para tomar adecuadamente el límite hay que notar lo siguiente: al pedir que el CGWP esté normalizado implica que al tomar  $\sigma \rightarrow \infty$  la condición inicial tienda a cero [Ec. 7.34], para evitar esto hay que multiplicar tanto la condición inicial como la solución por el factor  $A^{-1} = (\pi\sigma^2/2)^{1/4}$ ; recordemos que  $x_c < 0$ . Así la condición inicial tiende a la condición inicial tomada por Moshinsky [9] y García Calderón [11] [Ec. 7.26], *i.e.*, onda plana. Por lo que en dicho límite nuestra solución debe tender a la solución encontrada por García Calderón. Dado que en este límite  $z_c = x_c/\sqrt{2}\sigma \rightarrow 0$  [Ec. 7.37d] tenemos que  $\omega(iz_c) \rightarrow 1$ . Es fácil verificar que la propagación libre tiende a

$$\left(\frac{\pi\sigma^2}{2}\right)^{1/4} \psi_f(x, t) \rightarrow \frac{1}{2} e^{imx^2/2\hbar t} \omega(z_f), \quad (7.47)$$

7 Solución exacta para la evolución de un paquete Gaussiano.

y

$$z_f \rightarrow e^{i\pi/4} \sqrt{\frac{m}{2\hbar t}} \left( x - \frac{\hbar k_0}{m} t \right); \quad (7.48)$$

ya que  $k_0$  es real se tiene la forma usual de la función  $M$  [Ap. D], por lo tanto encontramos

$$\lim_{\sigma \rightarrow \infty} \left( \frac{\pi\sigma^2}{2} \right)^{1/4} \psi_f(x, t) \rightarrow M(x, t; k_0). \quad (7.49)$$

Ahora bien, calculemos el límite de  $\psi_n(x, t; k_0)$ , el cual se calcula en dos partes: la contribución exponencial y la no exponencial. Sus límites son

$$\begin{aligned} \lim_{\sigma \rightarrow \infty} \left( \frac{\pi\sigma^2}{2} \right)^{1/4} \psi_n^{ec}(x, t; k_0) &= -2i\sqrt{\pi}\sigma e^{ik_0x - i\hbar k_0^2 t/2m} M(x', t'; \kappa'_n) \rightarrow \\ &\rightarrow \frac{e^{ik_0x - i\hbar k_0^2 t/2m}}{k_0 - \kappa_n}, \end{aligned} \quad (7.50a)$$

y

$$\lim_{\sigma \rightarrow \infty} \left( \frac{\pi\sigma^2}{2} \right)^{1/4} \psi_n^{nc}(x, t; k_0) \rightarrow \frac{M_+(x, t; k_0) - M(x, t; \kappa_n)}{k_0 - \kappa_n}, \quad (7.50b)$$

donde indicamos con el subíndice “+” que la función  $M$  no se evalúa de forma usual [Ap. D]. Pero, al calcular la suma de la contribución exponencial (7.50a) y la no exponencial (7.50b) se encuentra

$$\begin{aligned} \lim_{\sigma \rightarrow \infty} \left( \frac{\pi\sigma^2}{2} \right)^{1/4} \psi_n(x, t; k_0) &= \lim_{\sigma \rightarrow \infty} \left( \frac{\pi\sigma^2}{2} \right)^{1/4} \left( \psi_n^{ec}(x, t; k_0) + \psi_n^{nc}(x, t; k_0) \right) \rightarrow \\ &\rightarrow \frac{M(x, t; k_0) - M(x, t; \kappa_n)}{k_0 - \kappa_n}, \end{aligned} \quad (7.50c)$$

donde se usa la relación de simetría  $e^{ik_0x - i\hbar k_0^2 t/2m} + M_+(x, t; k_0) = M(x, t; k_0)$  que es heredada de la función de Faddeyeva [Ap. F].

Finalmente al sustituir los límites encontramos que

$$\psi(x, t) \rightarrow i \sum_n \frac{u_n(0)u_n(x)}{k_0 - \kappa_n} M(x, t; k_0) - i \sum_n \frac{u_n(0)u_n(x)}{k_0 - \kappa_n} M(x, t; \kappa_n), \quad (7.51a)$$

### 7.3 Solución exacta para el paquete Gaussiano truncado.

para la región interna ( $0 < x < L$ ) y para la región de transmisión ( $x > L$ ) se tiene

$$\psi(x, t) \rightarrow \mathbf{t}(k_0)M(x, t; k_0) - i \sum_n \frac{r_n e^{-i\kappa_n L}}{k_0 - \kappa_n} M(x, t; \kappa_n); \quad (7.51b)$$

que corresponde a la solución encontrada por García Calderón [11]. Esto muestra que las soluciones (7.44 y 7.45) tienen un comportamiento físicamente aceptable en el límite onda plana ( $\sigma \rightarrow \infty$ ).

Una aclaración sobre este límite es que el comportamiento asintótico de  $\sigma \gg x_c$  no se obtiene de esta forma, ya que la solución es válida si  $|x_c/2\sigma| \gg 1$  con  $x_c < 0$ ; por el desarrollo que se empleo en el cálculo de  $\omega(-iz)$  [Ec. 7.38]. Sin embargo, para el límite  $\sigma \rightarrow \infty$  si se puede emplear el desarrollo por que  $|z| \rightarrow \infty$ , excepto para el valor  $k = k_0$  que es un punto de medida cero en la integral [Ec. 7.37b].

#### 7.3.2. Ejemplo.

Como un primer ejemplo de la solución, consideramos un electrón que se encuentra en un estado CGWP con parámetros iniciales:  $x_c = -5 \text{ nm}$  (centro del paquete)  $\sigma = 0.5 \text{ nm}$  (ancho efectivo) y  $E_0 = 0.12 \text{ eV}$  (energía), que interactúa con un sistema típico de Sollner  $bsb(5, 5; 0.23)$ , suponemos una masa efectiva  $m^* = 0.067 m_e$ . Se muestra esquemáticamente el problema en la figura 7.5.

Ahora, supongamos que se coloca un detector a una distancia  $x_0 = 2L = 30 \text{ nm}$ . La señal recibida al detector como función del tiempo se muestra en la figura 7.6 y se compara con la medición que se obtendría para la propagación libre del paquete.

La densidad de probabilidad  $|\psi(x, t)|^2$  se presenta en las gráficas sin unidades, esto lo conseguimos al multiplicar por el factor  $\sigma$ ; recuerde que, la interpretación probabilística de la

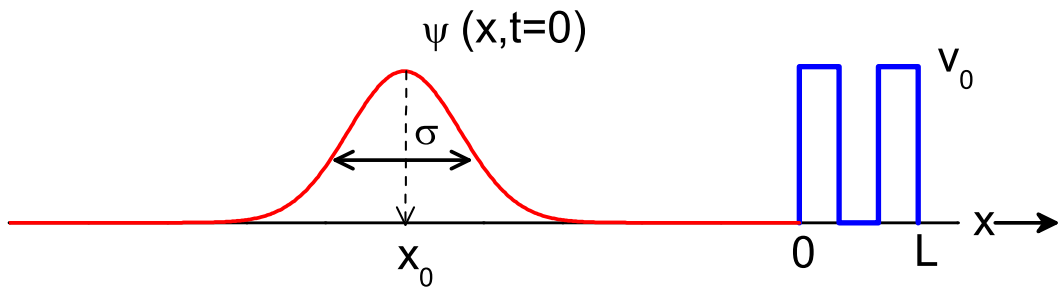


Figura 7.5: Esquema del problema de un electrón con estado inicial CGWP que incide sobre un potencial típico de Sollner; los parámetros se discuten en el texto.

7 Solución exacta para la evolución de un paquete Gaussiano.

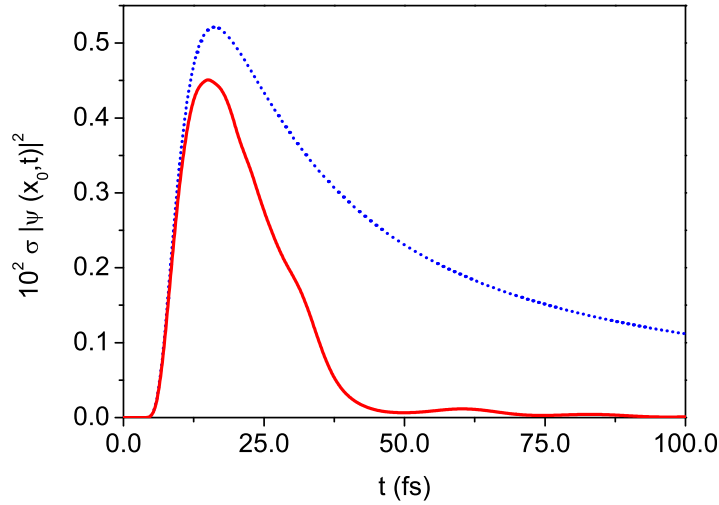


Figura 7.6: Densidad de probabilidad no normalizada como función del tiempo en un punto fijo  $x_0 = 2L = 30 \text{ nm}$ , para la evolución de un estado inicial CGWP libre (línea punteada) y uno idéntico que pasa a través del sistema Sollner (línea continua). El tiempo mínimo confiable de la solución es  $\tau_{min} = 1 \text{ fs}$ .

función de onda nos dice que: la probabilidad de encontrar a la partícula entre  $x$  y  $x + dx$  a un tiempo  $t$  es  $|\psi(x, t)|^2 dx$ , por lo que, claramente se observa una disminución en la probabilidad de que la partícula atraviese el potencial.

Observamos que las señales (libre y no libre fig. 7.6) tienen el mismo comportamiento a tiempos cortos, casi hasta  $10 \text{ fs}$ , pero éste cambia drásticamente a tiempos mas grandes; esto corresponde al efecto del potencial. Podemos entender esto a partir de la ecuación (7.17) ya que el detector se encuentra en la región de transmisión, se tiene que la solución es

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk \phi_0(k) \mathbf{t}(k) e^{ikx - i\hbar k^2 t / 2m} \quad x > L, \quad (7.52)$$

donde  $\phi_0(k)$  es la transformada de Fourier del estado inicial y  $\mathbf{t}(k)$  la amplitud de transmisión del problema. Ahora, el único factor que cambia al considerar la propagación no libre es amplitud de transmisión; esto sugiere comparar las cantidades  $|\phi_0(k)|^2$  y  $|\phi_0(k) \mathbf{t}(k)|^2$  que corresponden a la evolución libre y no libre respectivamente, la comparación de estas cantidades se muestra en la figura 7.7.<sup>11</sup> Observe que  $|\phi_0(k) \mathbf{t}(k)|^2$  es idéntico a  $|\phi_0(k)|^2$  para valores grandes de  $|k|$ , esto es, el efecto del sistema afecta únicamente al espectro del paquete alrededor de cero. Por esta razón, las componentes lentas ( $k \approx 0$ ) del paquete dan

<sup>11</sup>Es notorio que  $|\phi_0(k)|^2 > 1$  en la figura 7.7. Sin embargo, no debe perder de vista que esta cantidad es una distribución de probabilidad.

### 7.3 Solución exacta para el paquete Gaussiano truncado.

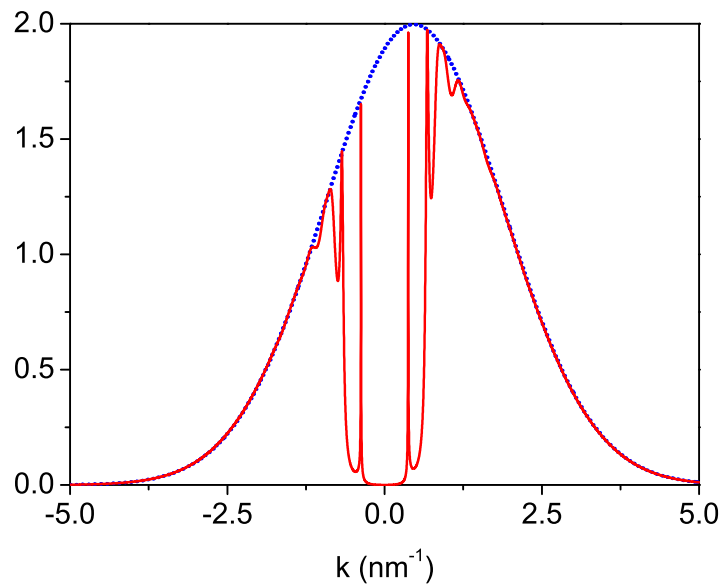


Figura 7.7: Se muestra la comparación entre las cantidades  $|\phi_0(k)|^2$  (línea punteada) y  $|\phi_0(k)t(k)|^2$  (línea continua).

una señal a tiempos largos [fig. 7.6] que será orden del tiempo de vuelo de cada componente, note que éstas sufren una disminución en la probabilidad de ser transmitidas como se observa en la figura 7.7.

En otras palabras, podemos relacionar cualitativamente la gráfica de la transmisión [fig. 7.2] con la evolución de un paquete [fig. 7.6], o bien relacionar el espectro del paquete inicial modulado por la transmisión del sistema [fig. 7.7] con la evolución del paquete [fig. 7.6], ya que  $t(k) \rightarrow 1$  cuando  $|k| \rightarrow \infty$ , *i.e.*, las componentes rápidas del paquete no sienten el efecto del potencial, mientras que las componentes lentas sufren un cambio drástico en su comportamiento; se generan pequeñas oscilaciones en la señal debidas a la estructura resonante del sistema. Esta idea nos permite intuir cualitativamente cómo será la medición en la región de transmisión  $|\psi(x_0, t)|^2$  como función del tiempo de un paquete al interactuar con un sistema, si conocemos la transmisión de éste.

Otro caso que consideramos es colocar al detector muy lejos del sistema, por ejemplo:  $x_0 = 10^4 L = 1.5 \times 10^5 \text{ nm}$ , dado que al considerar  $x_0 \gg L$  se tendrá que las componentes pequeñas tendrán una contribución importante en la integral (7.52); esto provocará que la estructura resonante del sistema se refleje más en la medición de la densidad de probabilidad la cual se muestra en la figura 7.8. Observamos que las componentes correspondientes al primer estado resonante tienen una contribución mayor, al colocar el detector más lejos que en el caso de una distancia corta [fig. 7.6]; esto sugiere considerar distancias más grandes. Por ejemplo

## 7 Solución exacta para la evolución de un paquete Gaussiano.

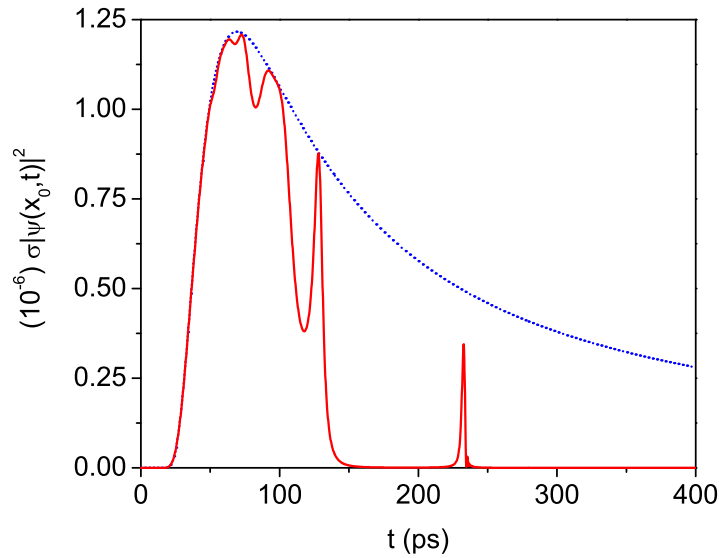


Figura 7.8: Densidad de probabilidad no normalizada como función del tiempo en un punto fijo  $x_0 = 10^4 \times L = 1.5 \times 10^5 \text{ nm} = 0.15 \text{ mm}$ , para la evolución de un estado inicial CGWP libre (línea punteada) y uno idéntico que pasa a través del sistema Sollner (línea continua). El tiempo mínimo confiable de la solución es  $\tau_{min} = 5 \text{ ps}$ .

para distancias macroscópicas  $x_0 = 15 \text{ mm}$  y  $x_0 = 150 \text{ mm}$ , la densidad de probabilidad como función del tiempo se muestra en la figura 7.9a y 7.9b respectivamente. Note que para estas distancias el perfil de la densidad de probabilidad como función del tiempo no cambia cualitativamente, *i.e.*, se llega a una situación que podríamos llamar “estacionaria”.<sup>12</sup>

Estos resultados muestran que la medición de la densidad de probabilidad como función del tiempo depende de la distancia en la cual se coloca el detector, hasta llegar a una distancia para la cual no se tendrá un cambio cualitativo. Además, si comparamos las figuras 7.7 y 7.9 observamos que las componentes coincidentes con el paquete a  $t = 0$  tienden a ser coincidentes con el paquete transmitido en función del tiempo y distancias grandes; esto sugiere que la función de onda transmitida tiende a regenerarse o reconstruirse bajo estas condiciones.

Podemos dar algunas ideas que nos llevarían a tratar de entender esto. Lo primero que hay que notar es lo siguiente: sabemos que las componentes grandes ( $E > v_0$ ) del paquete inicial no sienten el efecto del potencial, *i.e.*, evolucionan de forma casi libre,<sup>13</sup> este argumento fue utilizado para entender porqué la señal del paquete libre concuerda con la evolución no libre

<sup>12</sup>Es claro que para este proceso no hay solución estacionaria, pero nos referimos a esto en el sentido de que el perfil de la densidad de probabilidad tiene la forma cualitativa de la transmisión.

<sup>13</sup>Podemos concluir esto a partir del estudio del tiempo de permanencia [Cap. 5], ya que, el resultado monocromático muestra que las componentes grandes de energía no sufren un retraso o adelanto considerable [fig. 5.1, pág. 86].



7.3 Solución exacta para el paquete Gaussiano truncado.

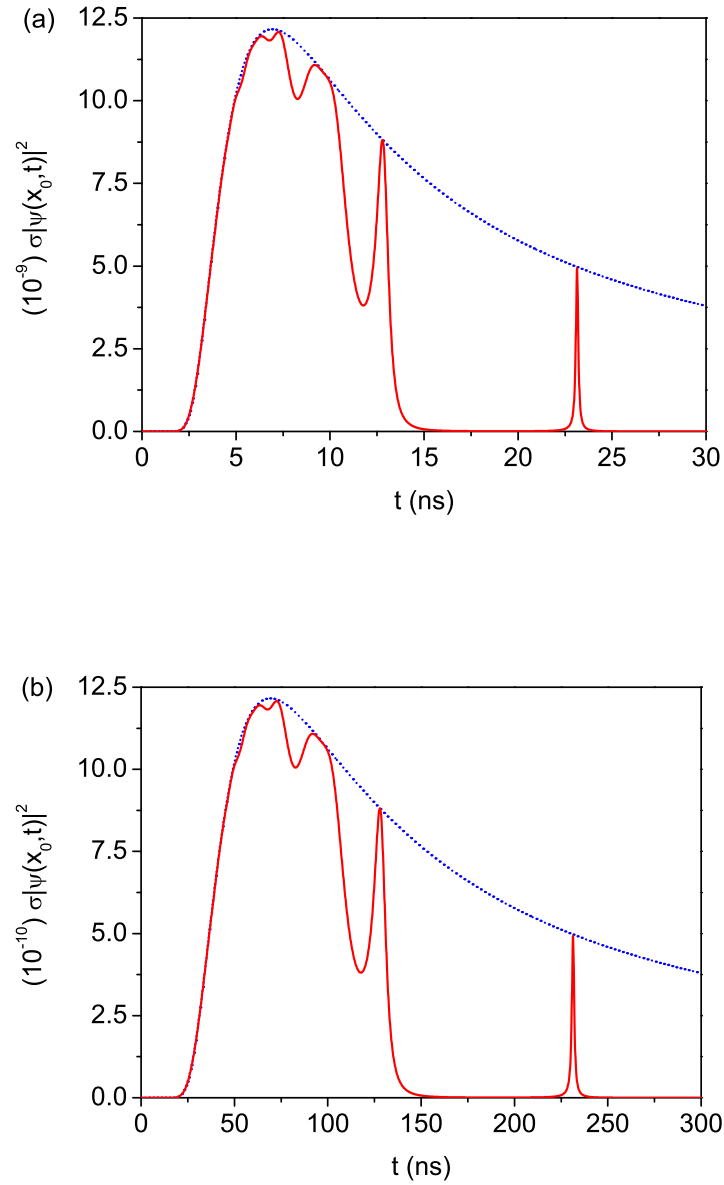


Figura 7.9: Densidad de probabilidad no normalizada como función del tiempo de un estado CGWP (línea continua), que pasa a través de un sistema Sollner, se coloca el detector a (a)  $x_0 = 15 \text{ mm}$  con  $\tau_{min} = 0.5 \text{ ns}$  y (b)  $x_0 = 150 \text{ mm}$  con  $\tau_{min} = 5 \text{ ns}$ , en ambos casos se compara con la evolución libre del paquete (línea punteada).

## 7 Solución exacta para la evolución de un paquete Gaussiano.

inicialmente. Así, el caso interesante es cuando se está en resonancia, por lo cual discutimos sólo las componentes en resonancia.

Sabemos que las componentes en resonancia tienen transmisión uno, pero sufren un retraso o adelanto respecto a la evolución libre de un paquete monocromático [11], éste se relaciona con el tiempo de vida media del estado resonante, *i.e.*, podemos imaginar que la componente en resonancia del paquete entra completamente al sistema y queda capturada dentro de éste, *i.e.*, se forma un estado cuasi estacionario [54], el cual escapa de la región de interacción vía un proceso de decaimiento. El proceso real es un poco diferente puesto que ocurren simultáneamente los procesos de decaimiento y tunelaje, esto modifica cuantitativamente la medición de la señal recibida, pero no el comportamiento cualitativo que deseamos entender. Ahora bien, si colocamos el detector a una distancia no muy lejana ( $x \sim L$ ) del sistema, se medirá el proceso de decaimiento, puesto que el tiempo de vuelo de las componentes no es tan grande como para permitir que las componentes en resonancia del paquete escapen por completo de la región de interacción, *i.e.*, cuando la distancia no es muy grande el detector mide a “*cuenta gotas*” la señal producida por la componente en resonancia.

Por otro lado, si la distancia del detector es mucho mayor que la longitud del sistema ( $x_0 \gg L$ ), el tiempo de vuelo de las componentes en resonancia es lo suficientemente grande para que éstas escapen por completo del sistema, perdiendo así la información del decaimiento exponencial que sufren éstas al escapar de la región de interacción.<sup>14</sup> Para verificar esto, consideremos el mismo sistema de Sollner empleado hasta ahora y únicamente supondremos que la energía del paquete CGWP es  $E_0 = 0.08 \text{ eV}$  que corresponde a la energía del primer estado resonante; el tiempo lo medimos en unidades de tiempo de vida media del primer estado resonante que es  $\tau_1 = \hbar/\Gamma_1 = 0.64 \text{ ps}$ .

En la figura 7.10 se muestra la densidad de probabilidad como función del tiempo para dos situaciones diferentes: la primera corresponde a colocar el detector a una distancia no muy lejana del sistema  $x_0 = 4000 \text{ nm}$  [fig. 7.10a] y la segunda colocando el detector a una distancia macroscópica  $x_0 = 40 \text{ mm}$  [fig. 7.10b]. Observamos que, colocar el detector a una distancia corta [fig. 7.10a] exhibe la ley de decaimiento exponencial del primer estado resonante, *i.e.*, el detector mide la señal de las componentes en resonancia en los dos procesos (“*tuneleo-decaimiento*”) simultáneamente. Por otra parte, se tiene que a distancias macroscópicas la señal que mide el detector no tiene información del proceso de decaimiento exponencial que sufren las componentes en resonancia, *i.e.*, únicamente ve una señal deformada debido a la transmisión del sistema. ¡Se pierde el decaimiento exponencial que sufre la partícula en el proceso!

---

<sup>14</sup>Esto es un hecho importante, puesto que nos dice que el decaimiento es un efecto físico que se observa únicamente por la cercanía del detector al sistema.

### 7.3 Solución exacta para el paquete Gaussiano truncado.

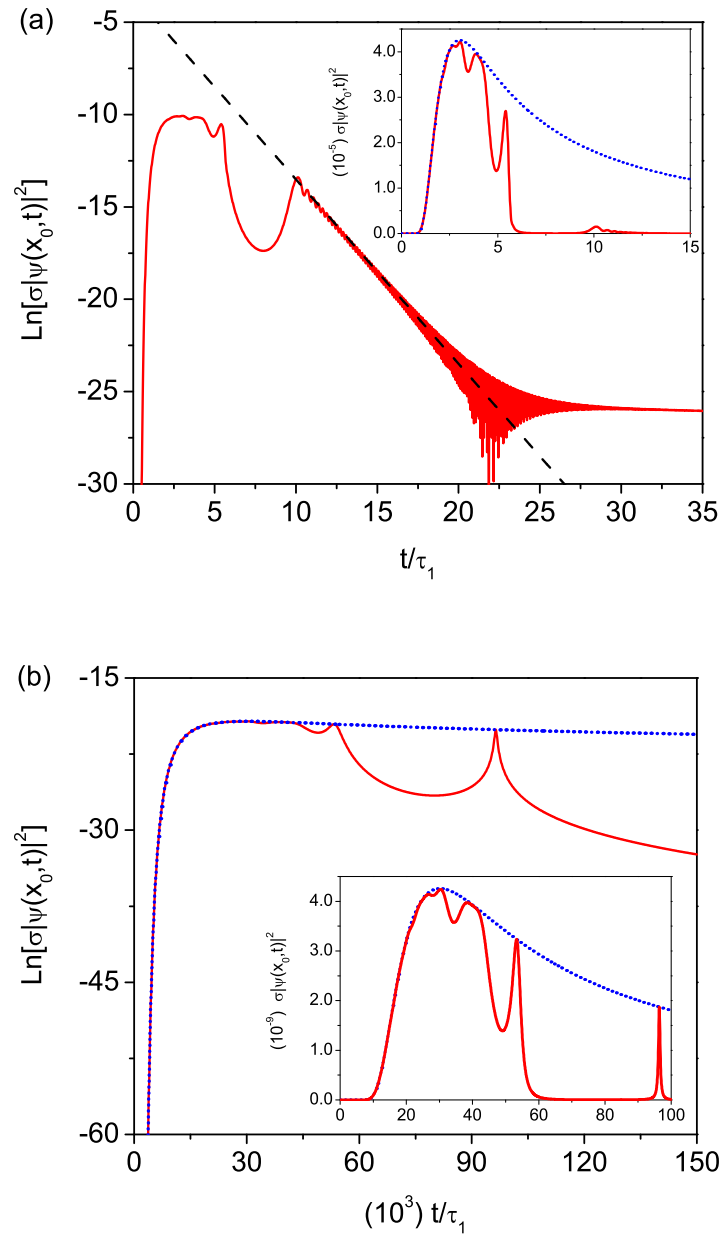


Figura 7.10: Densidad de probabilidad no normalizada en la región de transmisión como función del tiempo en escala semi-logarítmica, para un paquete CGWP que interactúa con un sistema típico de Sollner  $bsb(5, 5; 0, 23)$ , los parámetros se discuten en el texto. El detector es colocado a una distancia (a)  $x_0 = 4000 \text{ nm}$  con  $\tau_{min}/\tau_1 = 0.208$  y se compara con la ley de decaimiento exponencial del primer estado resonante (línea cortada) y (b)  $x_0 = 40 \text{ mm}$  con  $\tau_{min}/\tau_1 = 2.08 \times 10^3$ . En ambos casos se compara con la evolución del paquete libre (línea punteada)

## 7 Solución exacta para la evolución de un paquete Gaussiano.

Un hecho que no debemos pasar por alto es que el perfil de la onda transmitida a tiempos largos se parece al coeficiente de transmisión del sistema  $T(E) = |t(k)|^2$  con  $E = \hbar^2 k^2 / 2m$  [fig. 7.2], esto sería más evidente al hacer una gráfica de la densidad de probabilidad como función de la posición a un tiempo fijo. Corresponde esencialmente a una reflexión especular respecto a la vertical de las gráficas consideradas [figs. 7.6, 7.8 y 7.9]. Este resultado sugiere que el paquete transmitido adquiere todas las propiedades analíticas del sistema, *i.e.*, polos complejos tanto espacial como temporalmente. Estos son evidenciados a tiempos largos y distancias grandes provocando la reconstrucción del espectro del sistema en la densidad de probabilidad, *i.e.*, podemos concluir que: el destino final del paquete transmitido en un proceso coherente, es mimetizar la transmisión del sistema y por lo tanto, se podrá obtener ésta a partir del paquete transmitido [52].

Cabe mencionar que en todos los ejemplos considerados en este capítulo, la señal a tiempos cortos  $t < \tau_{min}$  es despreciable, por lo que, nuestros resultados son confiables en el intervalo de tiempo que se están analizando.

## 8 Paquetes de onda a través de sistemas transparentes.

Un tópico que hemos estudiado en este trabajo es la invisibilidad de la materia. Como se ha exhibido en los primeros capítulos de este trabajo [1–5], bajo ciertas condiciones se puede conseguir que un sistema sea invisible, excepto en un rango de energías cercanas al umbral. Sin embargo, este análisis es independiente del tiempo. La pregunta inmediata es ¿qué pasa cuando un paquete de onda atraviesa dicho sistema?. Dado que se trata de un sistema invisible podríamos decir que el paquete de onda no sufre un cambio apreciable en su transformada de Fourier.<sup>1</sup> Sin embargo, este argumento podría ser incorrecto puesto que, en el caso más simple sabemos que un estado inicial de onda plana sufre un retraso o adelanto al atravesar un sistema arbitrario [11, 12].

Este capítulo es dividido en tres secciones: en la primera discutimos los sistemas invisibles que vamos a considerar para la propagación de ondas [Secc. 8.1], luego analizamos la transmisión como función del tiempo de un paquete “onda plana” [Secc. 8.2], y finalmente se estudia la propagación de un paquete de onda tipo “Gaussiano” [Secc. 8.3]. Esto se hace considerando diferentes sistemas transparentes que catalogamos como “simples” y “compuestos”, en particular nos referimos a los sistemas *bwb* y cadenas de éstos, respectivamente. En todos los casos expuestos en este capítulo, suponemos que la masa efectiva de la partícula es  $m^* = 0.067 m_e$ .

### 8.1. Sistemas transparentes.

Como se mencionó anteriormente, en este capítulo vamos a estudiar la propagación de ondas a través de diferentes sistemas transparentes, por lo cual, consideramos importante definir con anticipación los diferentes sistemas que vamos a considerar en el desarrollo de este capítulo.

Recordemos que los sistemas transparentes encontrados principalmente en los capítulos 2 y 3, tienen un estado ligado o antiligado cercano al origen, esto es, la transmisión se puede aproximar únicamente con la contribución de dicho estado, por lo que el coeficiente de transmisión ( $T(E) = |t(k)|^2$ ) no distingue si se trata de un estado ligado o antiligado.

---

<sup>1</sup>Vea por ejemplo la figura 7.7 donde la transformada de Fourier es modificada por la estructura resonante del sistema.

8 Paquetes de onda a través de sistemas transparentes.

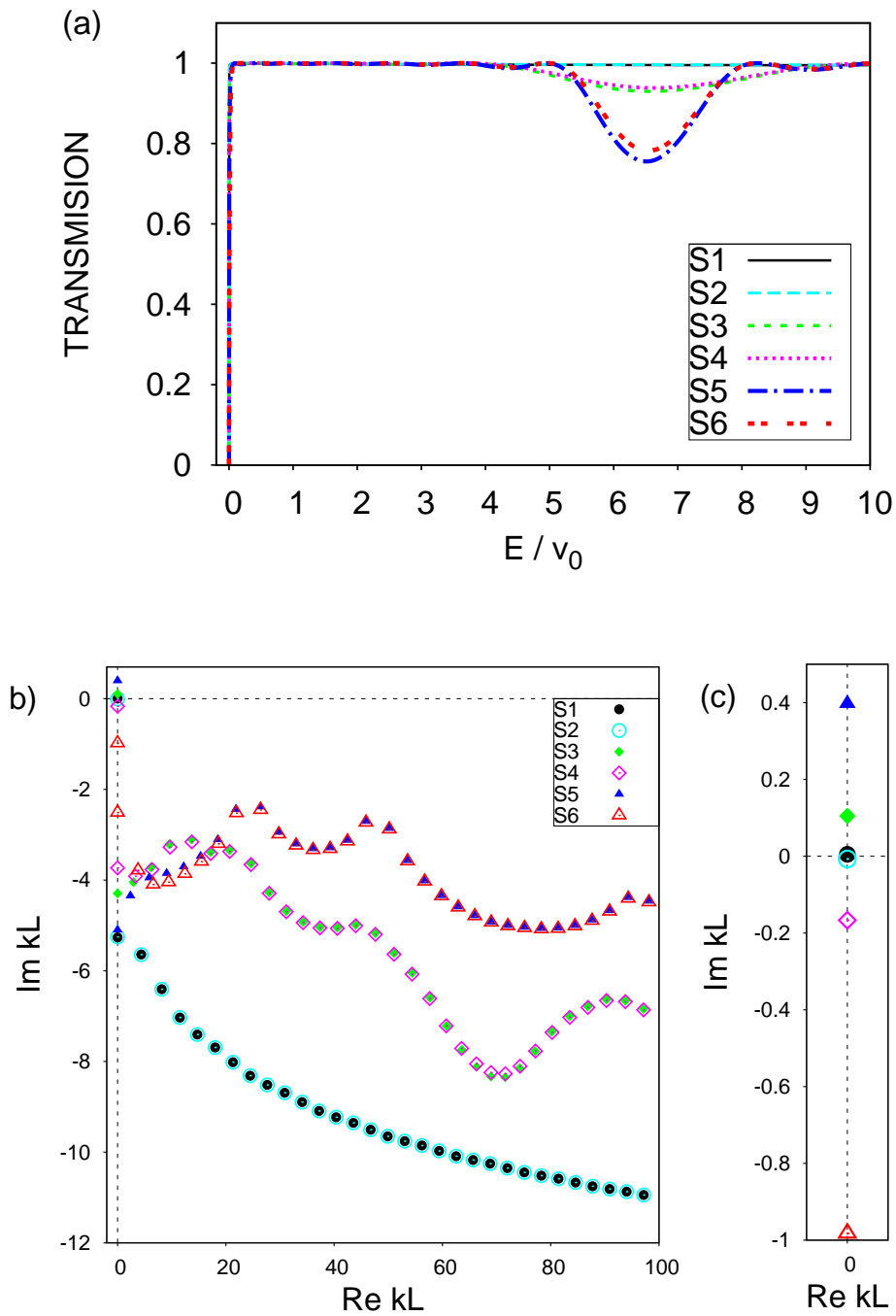


Figura 8.1: (a) Transmisión como función de la energía de los sistemas  $S_1$ ,  $S_2$ ,  $S_3$ ,  $S_4$ ,  $S_5$  y  $S_6$  definidos en el texto. (b) Distribución de polos en el plano complejo  $kL$  correspondientes a cada sistema y (c) muestra una amplificación de la distribución de los estados cercanos al origen.

Sin embargo, la propagación de ondas si tiene una diferencia cualitativa importante, esto se discute al encontrar la ecuación (7.17, pág. 108) y en el apéndice G. El resultado es que, la contribución de un estado ligado con energía  $\varepsilon_b < 0$ , a la propagación de un paquete de ondas permanece para todo tiempo ( $\sim e^{-i\varepsilon_b t/\hbar}$ ), mientras que la contribución de un estado antiligado con energía  $\varepsilon_a < 0$  se desvanece a tiempos grandes ( $\sim t^{-3/2}$ ). Cabe mencionar que la contribución  $\sim t^{-1/2}$  que proporciona la función de Faddeyeva, se anula exactamente en la propagación de ondas [52], como es esperado para el tiempo de permanencia [55].

Lo anterior sugiere considerar como sistemas simples a dos sistemas transparentes semejantes, uno que posea un estado ligado y otro con un estado antiligado cercano al origen, y a partir de estos generar sistemas compuestos.

Tomemos como sistemas simples a los potenciales  $bwb(0.4, 0.8; 0.15, -0.15)$  con un estado ligado y  $bwb(0.4, 0.8; 0.15, -0.14)$  con un estado antiligado, ambos cercanos al origen. Estos sistemas los denotamos como  $S1$  y  $S2$  respectivamente y consideramos una masa efectiva del electrón  $m^* = 0.067 m_e$ . A partir de estos sistemas generamos los sistemas  $S3 = 4S1s$ ,  $S4 = 4S2s$ ,  $S5 = 8S1s$  y  $S6 = 8S2s$  con la separación  $s = 0.8 \text{ nm}$  en todos los casos. Los parámetros más importantes de estos sistemas son:

Sistema	$\kappa_b [nm^{-1}]$	$\varepsilon_b [meV]$	$L (nm)$
$S1$	$3.093 \times 10^{-4}i$	$-5.439 \times 10^{-3}$	1.60
$S2$	$-4.452 \times 10^{-4}i$	$-1.127 \times 10^{-2}$	1.60
$S3$	$1.192 \times 10^{-3}i$	$-8.078 \times 10^{-2}$	8.80
$S4$	$-1.894 \times 10^{-3}i$	$-2.039 \times 10^{-1}$	8.80
$S5$	$2.158 \times 10^{-3}i$	$-2.647 \times 10^{-1}$	18.4
$S6$	$-5.340 \times 10^{-3}i$	$-1.621 \times 10^0$	18.4

donde denotamos por  $\kappa_b$  al estado ligado o antiligado, según corresponda.

En las figuras 8.1a y 8.1b se muestran respectivamente, la transmisión y distribución de polos en el plano complejo  $kL$  de estos sistemas, además en la figura 8.1c se hace una ampliación de la distribución de polos cercanos al origen. Note que, estrictamente los sistemas  $S1$  y  $S2$  son transparentes hasta valores de energía alrededor de diez veces la altura del potencial ( $E = 10v_0 = 1.5 \text{ eV}$ ), mientras que los sistemas  $S3$  a  $S6$  presentan una disminución de probabilidad entre cinco y nueve veces la altura de la barrera, esto era de esperar puesto que sabemos que al crear cadenas, la distribución de polos se acerca al eje real [Cap. 3], resultado que es claro en la distribución de polos [fig. 8.1b]. Sin embargo, es notorio que los sistemas son transparentes hasta cuatro veces la altura de las barreras [fig. 8.1a]. Además, observe que las distribuciones de polos por parejas, *i.e.*,  $S1 : S2$ ,  $S3 : S4$  y  $S5 : S6$  son cualitativamente iguales excepto para los primeros polos.

Esto nos permitirá comparar paquetes de onda que se propaguen a través de sistemas transparentes que tienen la misma probabilidad de transmitir [fig. 8.1a] y cualitativamente la misma distribución de polos complejos [fig. 8.1b] excepto la contribución más importante que es debida a la contribución de un estado ligado o antiligado [fig. 8.1c].

## 8.2. Onda plana.

El primer caso que analizamos en este capítulo corresponde al caso de un paquete tipo “onda plana” para el modelo de obturador cuántico, *i.e.*, suponemos que el estado inicial es dado por

$$\psi_0(x) = \begin{cases} e^{ik_0x} & x < 0 \\ 0 & x > 0 \end{cases}, \quad E_0 = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m}. \quad (8.1)$$

La evolución en la región de transmisión de este paquete de onda, está dada por la ecuación (7.33b) [pág. 112].

En el caso de sistemas resonantes comúnmente se propone que la energía del estado inicial sea igual a la parte real de la resonancia [11], debido a que la transmisión es la unidad y esto permite comparar la señal transmitida con la propagación libre del estado, sin necesidad de renormalizar. Sin embargo, en nuestro caso, tenemos que la transmisión es la unidad excepto para energías cercanas al umbral ( $E \approx 0$ ).

Nosotros enfocamos nuestro estudio a valores de energía en la región de tunelaje, *i.e.*,  $0 < E_0 < v_0$ , en general proponemos dos casos de interés que son:  $E_0 = v_0/2$  y  $E_0 = \varepsilon_b$  para los sistemas propuestos en la sección anterior. Note que para el valor  $E_0 = \varepsilon_b$  se tiene que  $T(E_0) = 0.5$  de acuerdo a la igualdad (1.22) [pág. 21]. Además consideramos en particular para los sistemas compuestos ( $S3-S6$ ) el valor  $E_0 = 6.5v_0$ , que es aproximadamente el valor donde se encuentra el mínimo de transmisión de estos sistemas [fig. 8.1a].

Cabe mencionar que en todos los cálculos que hacemos en esta sección, se emplea una aproximación de 200 polos del cuarto cuadrante, esto es, se suman 400 términos en la solución [Ec. 6.2, pág. 94], los cuales son suficientes para tener una muy buena aproximación de la transmisión de cada sistema, y por lo tanto permite dar una buena descripción de la evolución de un paquete de onda.



### 8.2.1. Sistemas Simples.

Como se mencionó anteriormente los sistemas simples que definimos son:

$$S1 = bwb(0.4, 0.8; 0.15, -0.15) \quad y$$

$$S2 = bwb(0.4, 0.8; 0.15, -0.14),$$

que tienen la virtud de poseer un estado ligado y antiligado respectivamente. Además, su distribución de polos complejos  $\kappa_n$  es prácticamente la misma [fig. 8.1b], incluyendo el valor del estado antiligado lejano al origen. La virtud de estos sistemas es que se pueden comparar fácilmente, puesto que tienen la misma longitud  $L$ , esto es, al colocar el detector en una posición  $x_0 > L$  la señal transmitida viaja libremente una distancia igual  $d = x_0 - L$  para ambos sistemas.

Supongamos que el detector es colocado a una distancia  $x_0 = 2L$  y que el estado inicial tiene una energía igual a  $E_0 = v_0/2$ . Note que estamos considerando distancias cortas, puesto que queremos analizar el efecto del estado ligado y antiligado del sistema sobre la evolución, y considerar distancias grandes ( $x_0 \gg L$ ) nos llevaría a cancelar su contribución, ya que la contribución de un estado ligado se desvanece exponencialmente como función de la posición ( $u_b(x) \sim e^{-|\kappa_b x|}$ ,  $x > L$ ).

La densidad de probabilidad como función del tiempo se muestra en la figura 8.2, y se observa que la señal transmitida por los sistemas  $S1$  y  $S2$  es idéntica a la señal que se me-

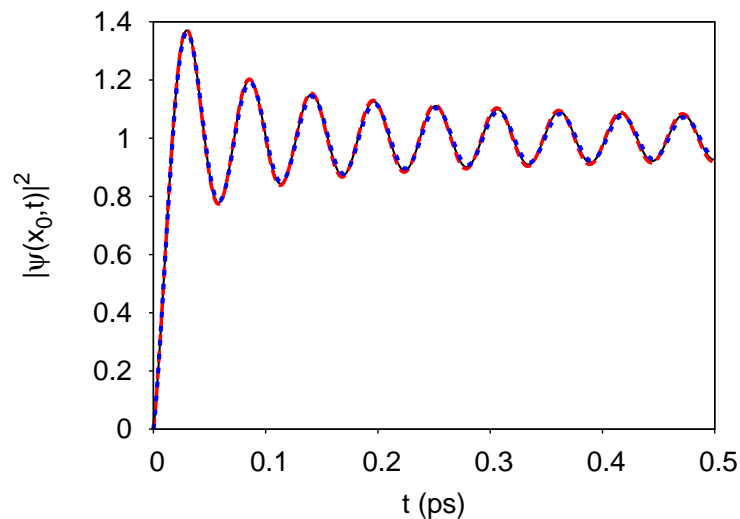


Figura 8.2: Densidad de probabilidad como función del tiempo, para el problema de obturador cuántico libre (línea continua), el obturado con el sistema  $S1$  (línea cortada) y con el sistema  $S2$  (línea punteada). Los parámetros se discuten en el texto.

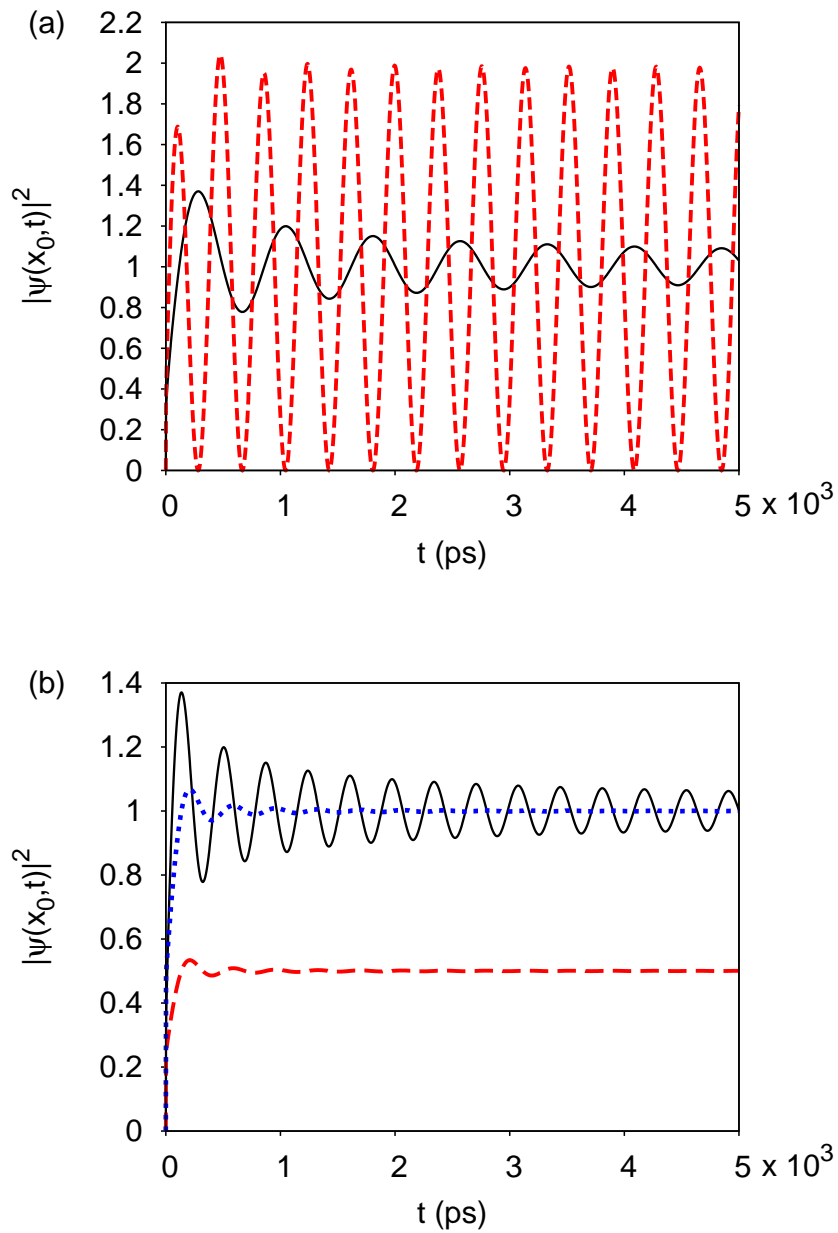


Figura 8.3: Se compara la densidad de probabilidad como función del tiempo para el problema del obrutador, solución libre (línea continua) y no libre (línea cortada) para (a) el sistema  $S1$  y (b) el sistema  $S2$ , en este caso se renormaliza la señal transmitida (línea punteada). Los parámetros se discuten en el texto.

diría si la partícula viajara libremente (línea continua). Por lo tanto, el análisis temporal de la solución para estos sistemas muestra que, los sistemas  $S1$  y  $S2$  son estrictamente hablando invisibles, puesto que, una partícula que viaja a través de estos, se comporta como si se tratara de partícula libre, *i.e.*, no siente el efecto del potencial.

Observe, que ambas curvas [fig. 8.2] presentan las oscilaciones típicas de la difracción temporal [9], debidas a la interferencia entre el comportamiento exponencial y no exponencial de la función de Moshinsky [Ec. 7.31, pág. 7.31]. Además note que las oscilaciones son alrededor del valor  $T(E_0) \approx 1$  para este caso, lo que muestra de forma cualitativa que en promedio la partícula se transmite con probabilidad  $T(E_0) \leq 1$ .

Por otro lado, nos interesa saber si el resultado anterior es válido para todos los valores de energía, incluyendo valores cercanos al umbral. Para lo cual proponemos los valores de energía  $E_0 = |\varepsilon_{S1}| = 5.439 \times 10^{-6} \text{ eV}$  y  $E_0 = |\varepsilon_{S2}| = 1.127 \times 10^{-5} \text{ eV}$  para los sistemas  $S1$  y  $S2$  respectivamente. Recuerde que para estos valores de energía se tiene idealmente que  $T(E_0) = 0.5$  según la fórmula (1.22) [pág. 21].

En la figura 8.3a y 8.3b se muestran respectivamente, la densidad de probabilidad como función del tiempo a una posición fija  $x_0 = 2L$  para ondas planas que atraviesan a los sistemas  $S1$  [fig. 8.3a] y  $S2$  [fig. 8.3b] y donde  $L$  es la longitud del sistema correspondiente. Es notorio en la figura 8.3, que la influencia del estado ligado y antiligado es importante para energías cercanas al umbral  $E_0 \approx 0$ . Podemos entender esto a partir de la solución, ya que como se mencionó anteriormente ambas soluciones tienen una diferencia cualitativa importante.

Consideremos la solución para el caso donde la transmisión es dominada por un estado ligado. Sabemos que en la aproximación de un sólo término la solución en la región de transmisión ( $x > L$ ) con un estado ligado  $\kappa_b$ , tiene la forma

$$\psi(x, t) = \mathbf{t}(k_0)M(x, t; k_0) - \frac{i}{k_0 - \kappa_b}M(x, t; \kappa_b) + C_b u_b(x) e^{-i\varepsilon_b t/\hbar}, \quad (8.2)$$

donde  $C_b$  es la proyección del estado ligado con el estado inicial, que para el tipo de estado inicial que estamos considerando [Ec. 8.1], toma la forma

$$C_b = \frac{u_b(0)}{\gamma_b + ik_0}, \quad \kappa_b = i\gamma_b; \quad |C_b|^2 = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{u_b^2(0)}{E_0 + |\varepsilon_b|}. \quad (8.3)$$

Note que el factor que multiplica a  $u_b(0)$  es el mismo que multiplica al segundo término de la solución [Ec. 8.2], por lo que el análisis para este caso, nos permite inferir el efecto del

## 8 Paquetes de onda a través de sistemas transparentes.

estado antiligado [fig. 8.3b].

Ahora bien, por la dependencia del coeficiente  $C_b$  como función de la energía ( $E_0$ ) del paquete inicial, encontramos que éste toma un valor máximo cuando  $E_0 = 0$ . Denotemos por  $C_{max} = \hbar u_b(0)/\sqrt{2m|\varepsilon_b|}$  al valor máximo del módulo del coeficiente, entonces se tiene que el módulo al cuadrado del coeficiente como función de la energía es

$$|C_b|^2 = \frac{C_{max}^2}{1 + \frac{E_0}{|\varepsilon_b|}}, \quad (8.4)$$

esto muestra que la contribución de los coeficientes del segundo y tercer término en (8.2) se hacen despreciables cuando  $E_0 \gg |\varepsilon_b|$ , resultado que concuerda con la figura 8.2, ya que, para  $E_0 = v_0/2$  se tiene que  $E_0/\varepsilon_b \approx 1.38 \times 10^4$  para el sistema S1. Por lo que, la contribución a la densidad de probabilidad del segundo y tercer término es muy pequeña. Sin embargo, cuando  $E_0 \approx \varepsilon_b$  esta contribución no es despreciable, lo que provoca fuertes oscilaciones entre la propagación libre del paquete y la contribución del estado ligado [fig. 8.3a], o bien, un efecto de amortiguación debido a la presencia de un estado antiligado [fig. 8.3b].

Cabe mencionar que este efecto sólo se verá a distancias cortas, puesto que como se puede apreciar en la ecuación (8.2) la contribución del estado ligado se desvanece exponencialmente cuando  $x \gg L$ , lo mismo pasa con la contribución no exponencial del estado ligado (segundo término en la ecuación 8.2), dejando únicamente la propagación libre.

Un hecho que no debemos pasar por alto es la gran diferencia entre los procesos, esto es, sabemos que para el problema del obturador sin estados ligados, la solución asintótica tiende a la eigenfunción con energía  $E_0$ , *i.e.*, para el problema de obturador cuántico con potencial y condición inicial de onda plana [Ec. 8.1], en ausencia de estados ligados se cumple [11]

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \psi(x, t; E_0) \rightarrow \chi_{k_0}^+(x) e^{-iE_0 t/\hbar}, \quad E_0 = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m}. \quad (8.5)$$

Por lo que, asintóticamente se llega a una situación estacionaria, resultado que se aprecia en la figura 8.3b. Sin embargo, para el mismo estado inicial que atravesase un potencial que acepta al menos un estado ligado, se tendrá que

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \psi(x, t; E_0) \rightarrow \chi_{k_0}^+(x) e^{-iE_0 t/\hbar} + C_b u_b(x) e^{-i\varepsilon_b t/\hbar}, \quad E_0 = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m}. \quad (8.6)$$

Sólo a distancias grandes  $x \gg L$  tiende al estado estacionario, pero en general nunca llega a una situación estacionaria,<sup>2</sup> debido a que parte del estado inicial queda atrapada en el interior potencial, cuando la proyección entre el estado inicial y el estado ligado no es nula.

## 8.2.2. Sistemas compuestos.

Ahora consideremos la propagación de ondas en los sistemas compuestos  $S3$ – $S6$ . Como podríamos anticipar a partir del resultado obtenido en la sección anterior, el efecto del estado ligado debe ser más notorio para estos sistemas, ya que un estado ligado lejano al origen tiene mayor contribución dentro y alrededor del potencial.

En la figura 8.4 se muestra la densidad de probabilidad como función del tiempo de un paquete de onda plano con energía  $E_0 = v_0/2$ , que atraviesa al sistema  $S3$  (línea cortada) y  $S4$  (línea punteada) en comparación con la propagación libre del paquete (línea continua), suponiendo que el detector es colocado a una distancia  $x_0 = 2L$  [fig. 8.4a], y bajo los mismos parámetros para los sistemas  $S5$  y  $S6$  [fig. 8.4b]. Recuerde que la longitud  $L$  corresponde a cada sistema.

Como se puede observar en ambos casos, se encuentran pequeñas variaciones a tiempos grandes  $t \sim 300 f_s$ , entre la señal transmitida y la propagación libre, sin embargo, no se encuentra un cambio drástico en la señal transmitida. Por lo que, podemos considerar a estos sistemas invisibles ante la propagación de ondas, excepto para paquetes de onda que viajen con energías muy cercanas al umbral ( $E \approx 0$ ). Esto es, una conclusión preliminar es que, los sistemas parcialmente transparentes en una región de energía  $[E_{min}, E_{max}]$ , son invisibles para la propagación de ondas con energía dentro del intervalo de transparencia.

Otro caso de interés, es el valor de energía  $E_0 = 6.5v_0$  ya que como se vio anteriormente la transmisión para los sistemas  $S3$ – $S6$  muestra una disminución [fig. 8.1a], para valores alrededor de  $E_0 = 6.5v_0$ .

En la figura 8.5 se muestra un juego idéntico de gráficas para los sistemas  $S3$  y  $S4$  [fig. 8.5a], y los sistemas  $S5$  y  $S6$  [fig. 8.5b], para ondas planas que inciden con una energía igual a  $E_0 = 6.5v_0$ , al igual que en el caso anterior se supone que el detector es colocado a una distancia  $x_0 = 2L$ . Sin embargo, para poder comparar con el caso libre (línea continua) es necesario renormalizar la señal transmitida, *i.e.*, se hace una gráfica de  $|\psi(x, t)|^2/T(E_0)$ , lo cual no afecta a la propagación libre. Esto permite ver el efecto del potencial sobre la propagación de ondas planas transmitidas por el potencial, pero no la disminución en probabilidad de ser transmitida, como se predice por la transmisión [fig. 8.1a].

<sup>2</sup>Una discusión amplia de este resultado se hace en la tesis de licenciatura de *Luis Guillermo Mendoza Luna* con título “Efecto de los estados ligados sobre los transitorios cuánticos en una dimensión” (Facultad de Ciencias, UNAM 2009).

8 Paquetes de onda a través de sistemas transparentes.

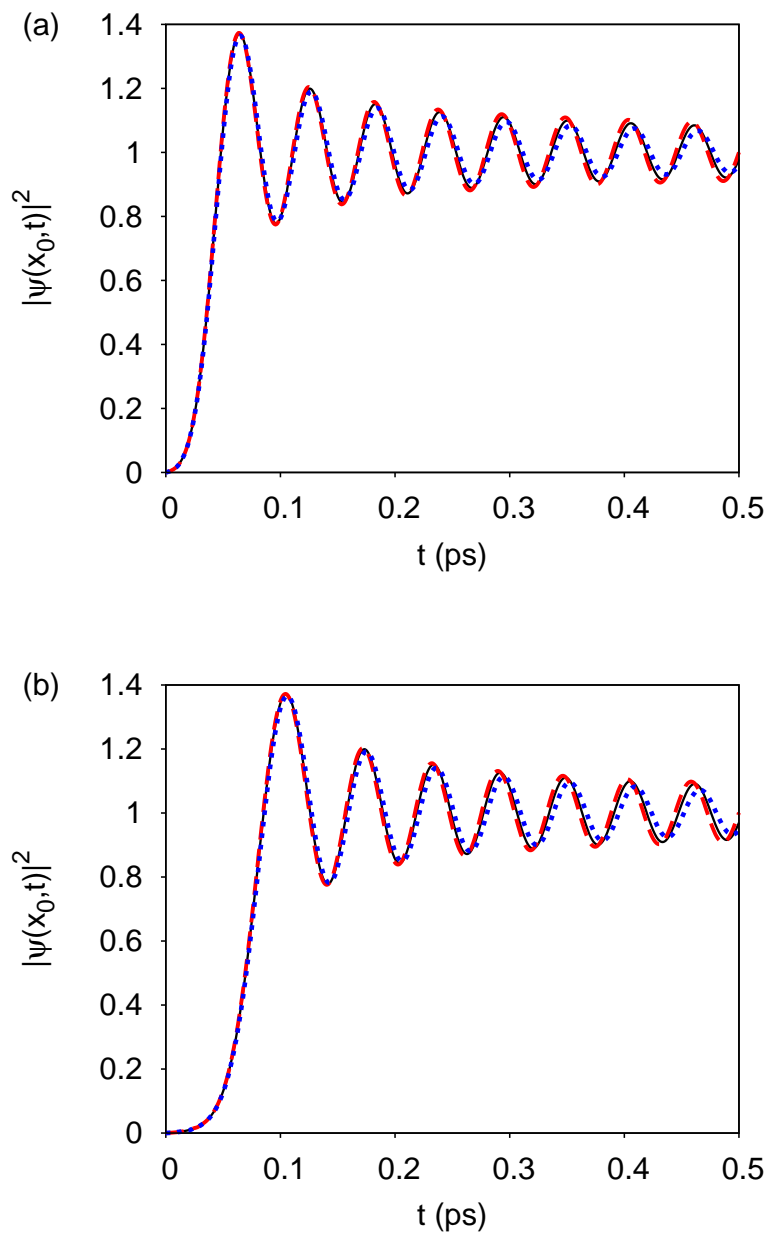


Figura 8.4: Se muestra la densidad de probabilidad como función del tiempo de una onda plana que atraviesa a los sistemas (a)  $S3$  (línea cortada) y  $S4$  (línea punteada), (b)  $S5$  (línea cortada) y  $S6$  (línea punteada). En ambos casos se compara con la propagación libre (línea continua). Los parámetros se discuten en el texto.

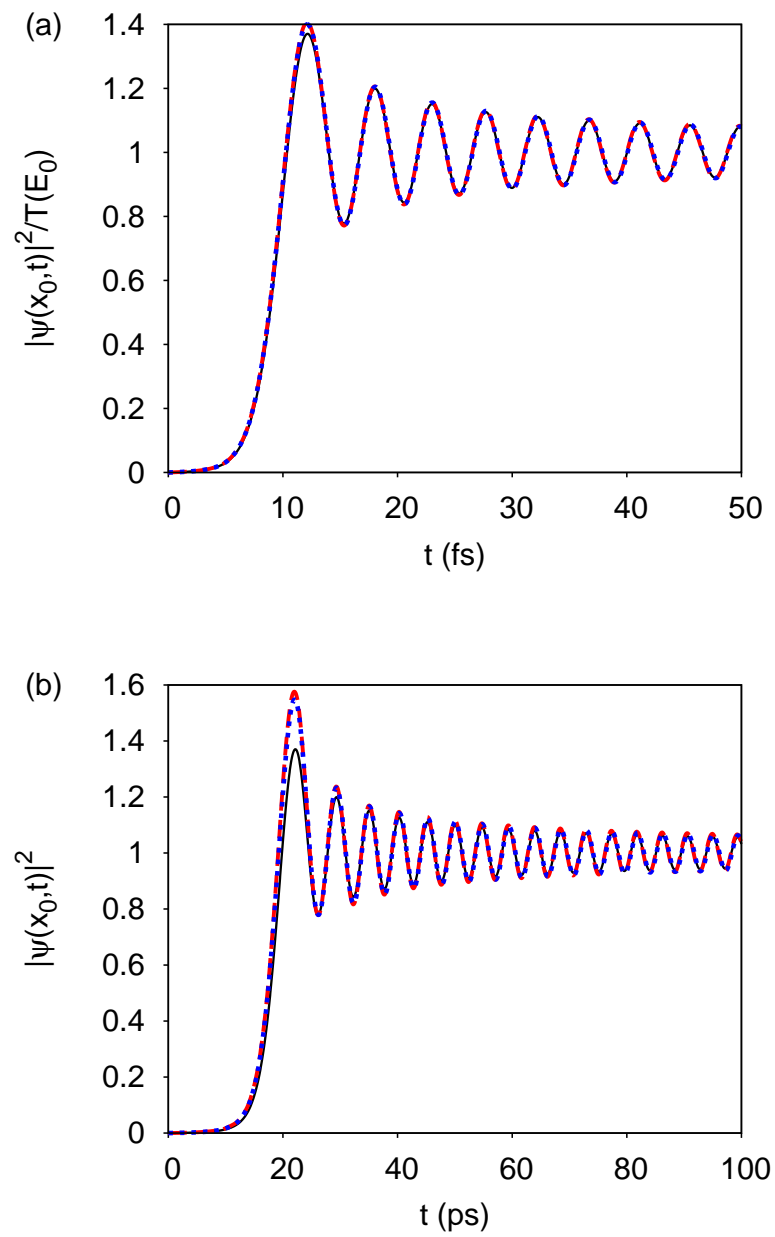


Figura 8.5: Se muestra la densidad de probabilidad como función del tiempo de una onda plana que atraviesa a los sistemas (a)  $S3$  (línea cortada) y  $S4$  (línea punteada), (b)  $S5$  (línea cortada) y  $S6$  (línea punteada). En ambos casos se compara con la propagación libre (línea continua). Los parámetros se discuten en el texto.

Observamos que hay una pequeña variación en la amplitud del primer máximo de la solución cuando el paquete atraviesa los sistemas  $S3$  y  $S4$  [fig. 8.5a], mientras que para los sistemas  $S5$  y  $S6$  es más notoria esta diferencia [fig. 8.5b]. Esto es debido al efecto del potencial sobre la propagación de ondas, como se podría anticipar por el estudio realizado en el capítulo 5, el efecto del potencial sobre una onda monocromática, no sólo es la disminución la probabilidad de ser transmitida, sino que también ésta sufre un retraso o adelanto respecto a la propagación libre, esto se ve más claramente en la figura 8.5b.

En conclusión, podemos decir que un sistema parcialmente transparente (tales como los sistemas  $S3$ – $S6$  vistos aquí), también es parcialmente invisible ante la propagación de ondas planas. Además, la evolución de ondas planas no distingue si el sistema contiene un estado ligado o antiligado cercano al origen, a menos que se consideren energías cercanas al umbral (donde pierden la propiedad de transparencia), y distancias cortas ( $x \sim L$ , donde la contribución del estado ligado no es despreciable) como se aprecia en la figura 8.3.

### 8.3. Paquete Gaussiano.

Anteriormente se analizó el problema del obturador cuántico con el estado inicial de onda plana, y se mostró para casos particulares que el sistema transparente también es invisible ante la propagación de ondas planas [Secc. 8.2], *i.e.*, una onda plana que atraviesa el sistema no solamente se transmite con probabilidad uno, sino que también evoluciona como si se tratara de partícula libre.

Ahora, vamos a considerar un problema más general, *i.e.*, consideramos el problema del obturador cuántico, sólo que en esta ocasión el estado inicial corresponde a un estado tipo Gaussiano, este problema se abordó anteriormente para la propagación de un paquete CGWP a través de un sistema típico de Sollner, el cual se muestra esquemáticamente en la figura 7.5 (pág. 119). Consideramos los mismos sistemas transparentes  $S1$ ,  $S2$ ,  $S3$ ,  $S4$ ,  $S5$  y  $S6$  definidos anteriormente.

Dado que el paquete CGWP tiene un espectro con ancho  $(2\sigma)^{-1}$  en el espacio  $k$ , donde  $\sigma$  es el ancho efectivo del paquete en el espacio de posición ( $x$ ), sugerimos fijar los parámetros del paquete inicial. Nosotros consideramos en esta sección los siguientes valores

$$\begin{aligned}x_c &= -20 \text{ nm}, && \text{(centro del paquete),} \\ \sigma &= 2 \text{ nm}, && \text{(ancho efectivo),} \\ E_0 &= \frac{v_0}{2}, && \text{(energía),}\end{aligned}\tag{8.7}$$



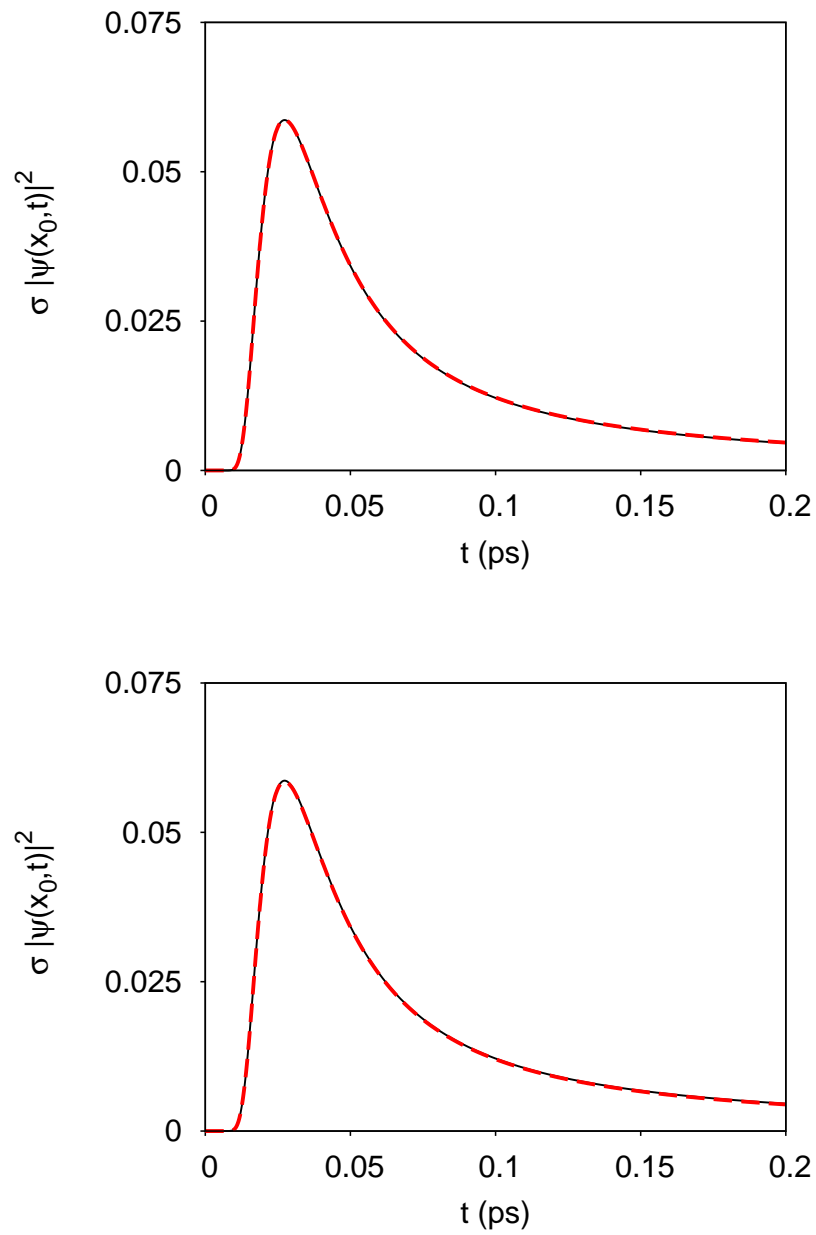


Figura 8.6: Densidad de probabilidad no normalizada de una partícula con estado inicial CGWP que atraviesa una región finita de potencial (línea cortada) (a)  $S1$  y (b)  $S2$ . En ambos casos se compara con la propagación libre del mismo estado inicial (línea continua). Los parámetros se discuten en el texto.

8 Paquetes de onda a través de sistemas transparentes.

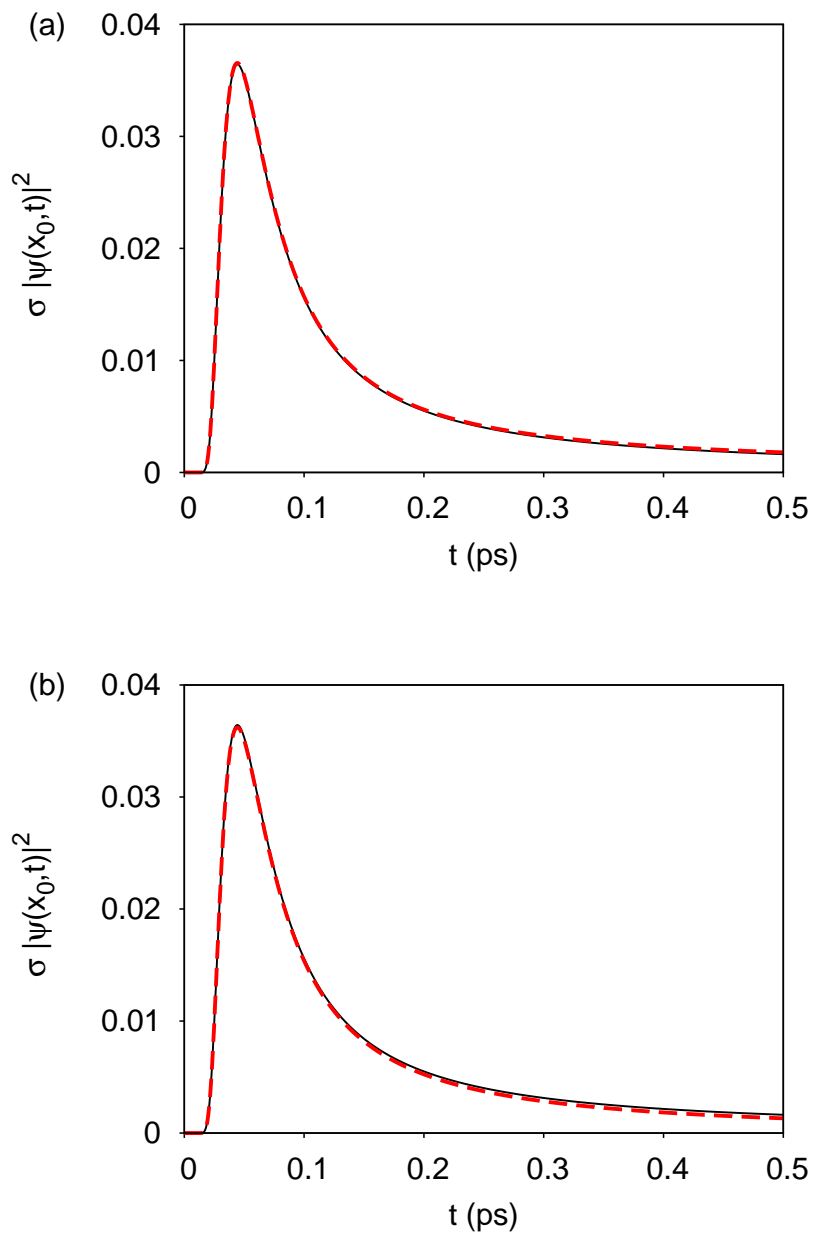


Figura 8.7: Densidad de probabilidad no normalizada de una partícula con estado inicial CGWP que atraviesa una región finita de potencial (línea cortada) (a)  $S3$  y (b)  $S4$ . En ambos casos se compara con la propagación libre del mismo estado inicial (línea continua). Los parámetros se discuten en el texto.

ya que, para estos valores se satisface  $|x_c|/2\sigma = 5$ , valor que garantiza que el corte que se le hace al paquete Gaussiano es despreciable. Además, el ancho que se escoge permite garantizar que casi todo el espectro del paquete está compuesto por energías de tunelaje, *i.e.*,  $0 < E < v_0$ . Por lo tanto, el proceso que se describe con este paquete es precisamente la evolución de un CGWP que atraviesa una región de interacción vía efecto túnel.

### 8.3.1. Sistemas simples.

En la figura 8.6 se muestra la densidad de probabilidad no normalizada ( $\sigma|\psi(x, t)|^2$ ) como función del tiempo para un estado CGWP con los parámetros discutidos (8.7), que atraviesa los sistemas transparentes (línea cortada)  $S1$  [fig. 8.6a] y  $S2$  [fig. 8.6b]. Se supone que el detector es colocado a una distancia  $x_0 = 2L$  con  $L$  la longitud correspondiente a cada sistema.

Observamos que en ambos casos la partícula con estado CGWP atraviesa el sistema como si se tratara de partícula libre (línea continua), aunque cabe mencionar, por el estudio anterior con estados de onda plana, que para el caso del sistema  $S1$  al tener un estado ligado éste dominará con el tiempo, puesto que éste no se desvanece cuando  $t \rightarrow \infty$ . Por otro lado, es fácil probar que la densidad de probabilidad del estado CGWP libre disminuye como potencia inversa del tiempo, *i.e.*,  $|\psi_f(x, t)|^2 \sim t^{-1}e^{-t}$ , mientras que en ausencia de estados ligados se tendrá un comportamiento inverso al cubo del tiempo, *i.e.*,  $|\psi(x, t)|^2 \sim t^{-3}e^{-t}$  [52, 55]. En otras palabras, en ambos casos se verá una diferencia entre la propagación libre y no libre del estado CGWP. Sin embargo, esto ocurrirá a tiempos largos donde la señal recibida será prácticamente indetectable.

### 8.3.2. Sistemas compuestos.

En la figura 8.7 se muestra la densidad de probabilidad no normalizada de un CGWP que atraviesa a los sistemas  $S3$  [fig. 8.7a] y  $S4$  [fig. 8.7b], así como en la figura 8.8a y b para los sistemas  $S5$  y  $S6$  respectivamente.

Claramente observamos que para los sistemas con un estado ligado ( $S3$  y  $S5$ ) el paquete CGWP atraviesa el sistema como si se tratara de partícula libre, figuras 8.7a y 8.8a respectivamente. Esto es una muestra de que los sistemas parcialmente transparentes son parcialmente invisibles; recuerde que el espectro del paquete está en la región de energías donde los sistemas son transparentes. En otras palabras, las pequeñas variaciones del tiempo de permanencia [Cap. 5] entre diferentes componentes del paquete de onda son despreciables.

Sin embargo, para los sistemas con un estado antiligado ( $S4$  y  $S6$ ) se observa que hay una pequeña disminución en la densidad de probabilidad a tiempos grandes, figuras 8.7b y 8.8b respectivamente, siendo más notoria para el sistema  $S6$  [fig. 8.8b]. Esta diferencia en la densidad de probabilidad es debida al comportamiento  $\sim t^{-3}$  del paquete transmitido. En otras palabras, el comportamiento inherente  $t^{-3}$  de un paquete transmitido, permitirá a tiempos

8 Paquetes de onda a través de sistemas transparentes.

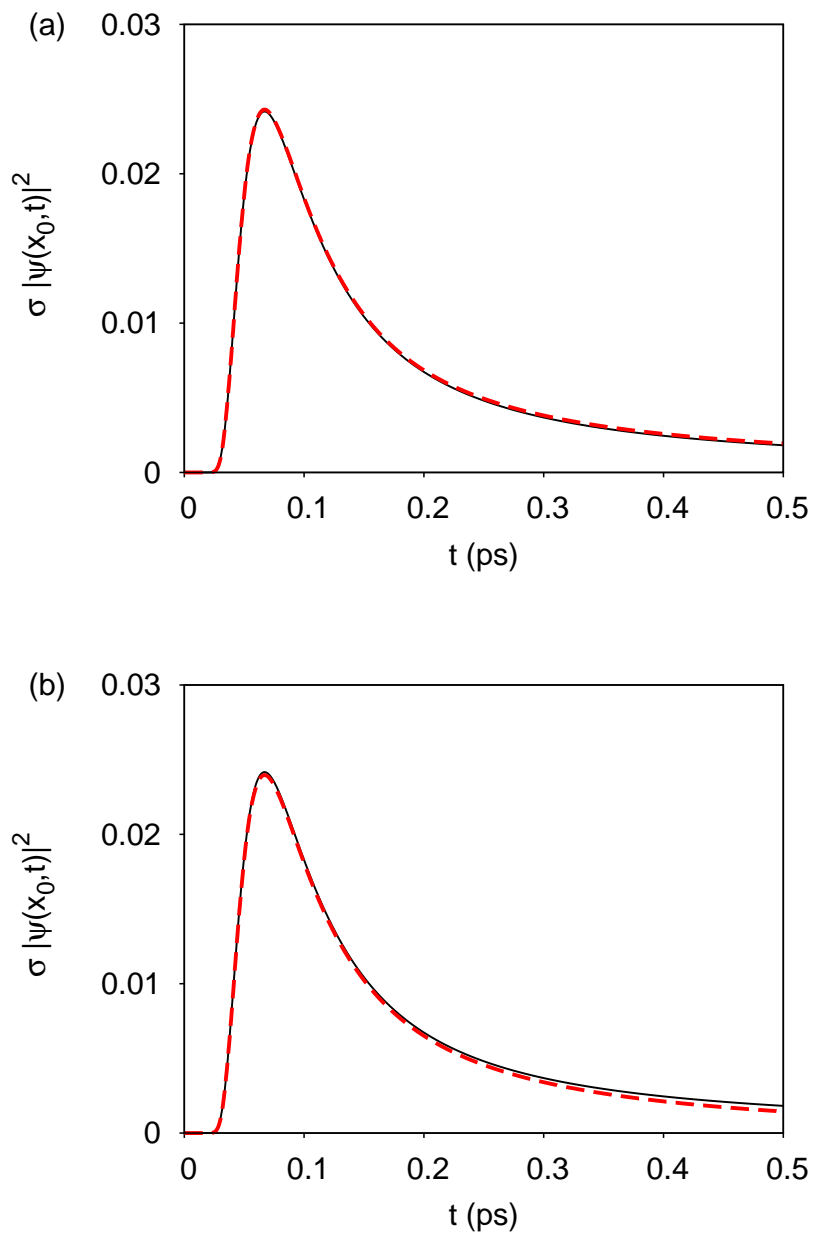


Figura 8.8: Densidad de probabilidad no normalizada de una partícula con estado inicial CGWP que atraviesa una región finita de potencial (línea cortada) (a)  $S5$  y (b)  $S6$ . En ambos casos se compara con la propagación libre del mismo estado inicial (línea continua). Los parámetros se discuten en el texto.

grandes distinguir la señal, pero esto se consigue, sólo cuando el tiempo es muy largo para el cual la señal recibida es indetectable.

Es importante enfatizar el siguiente hecho, el estudio realizado hasta ahora es la transmisión de paquetes de onda como función del tiempo a distancias cortas, esto se hizo porque deseamos estudiar la influencia del estado ligado y antiligado cercano al origen sobre la propagación de ondas. Sin embargo, es notorio que este efecto se mantendrá a distancias grandes, aun cuando las contribuciones exponencial (del estado ligado) y no exponencial (del estado ligado y antiligado) en la solución sean despreciables, ya que es claro que en el límite  $t \rightarrow \infty$  la densidad de probabilidad en un punto  $x$  fijo, tiene un comportamiento asintótico para los diferentes tipos de propagación como:

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow \infty} |\psi_f(x, t)|^2 &\sim t^{-1}, && \text{(libre),} \\ \lim_{t \rightarrow \infty} |\psi_a(x, t)|^2 &\sim t^{-3}, && \text{(con un estado antiligado),} \\ \lim_{t \rightarrow \infty} |\psi_b(x, t)|^2 &\sim cte., && \text{(con un estado ligado).} \end{aligned}$$

La densidad de probabilidad como función del tiempo de un CGWP que atraviesa a los sistemas  $S5$  y  $S6$  se muestra en la figura 8.9, suponiendo que el detector es colocado a una distancia  $x_0 = 100L$ . Como se puede observar la diferencia entre el paquete transmitido aparece a tiempos largos  $\sim 10 ps$ , corresponde aproximadamente a tres veces el tiempo de vuelo libre  $\tau_f$ ,

$$\tau_f = \frac{m(x_0 - x_c)}{\hbar k_0},$$

que para los parámetros dados se tiene  $\tau_f \approx 2.93 ps$ . A diferencia de una situación donde el detector es colocado a una distancia corta, por ejemplo para el sistema  $S6$  a  $x_0 = 2L$  [fig. 8.8b] encontramos que  $\tau_f \approx 0.09 ps$  y la desviación de la densidad de probabilidad es para un valor  $t \approx 0.1 ps \approx \tau_f$ . Esto muestra que a distancias grandes ( $x \gg L$ ) el efecto del estado ligado y antiligado se dará a tiempos mayores que tiempo de vuelo libre de la partícula.

Sin embargo, cabe mencionar que estas diferencias son despreciables, por lo que, concluimos que estos sistemas son parcialmente invisibles ante la propagación de ondas, y que la diferencia de pequeñas variaciones en el tiempo de permanencia de componentes monocromáticas de un paquete, no afecta sustancialmente su evolución a través de sistemas transparentes.

## 8 Paquetes de onda a través de sistemas transparentes.

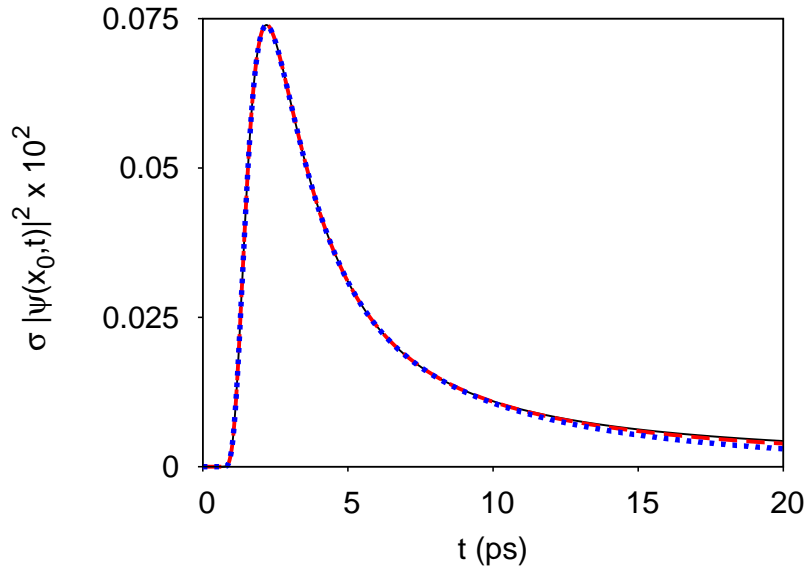


Figura 8.9: Densidad de probabilidad no normalizada de una partícula con estado inicial CGWP que atraviesa una región finita de potencial  $S5$  (línea cortada) y  $S6$  (línea punteada), se compara con la propagación libre (línea continua). Los parámetros se discuten en el texto.

Finalmente, recordemos que el estudio presentado aquí, es únicamente para un paquete Gaussiano con parámetros dados en (8.7). Debe ser claro que mientras se satisfagan las condiciones:

(i)  $\frac{x_c}{2\sigma} \gg 1$ , con  $x_c < 0$  y

(ii) que el espectro del paquete esté formado principalmente por energías para el cual el sistema es invisible.

Se mantendrán los resultados de esta sección. Por lo tanto, este resultado garantiza que existe una gran variedad de estados CGWP que atravesarán un sistema invisible como si se tratara de partícula libre, *i.e.*, los efectos transitorios de estos paquetes al atravesar sistemas invisibles son despreciables.

# Conclusiones.

En este trabajo se han estudiado diferentes tópicos del problema de transmisión. Nos enfocamos principalmente a dos problemas, que son: la invisibilidad de la materia y el problema de evolución temporal de un paquete de onda que atraviesa a un potencial de alcance finito.<sup>3</sup> En particular nos referimos a la transmisión en la región de tunelaje, *i.e.*, la transmisión de una partícula con energía menor a la altura de las barreras. Se emplean dos enfoques diferentes para este propósito: *Matriz de Transferencia* [Ap. A] y el *Formalismo de Estados Resonantes* [Cap. 1], [Ap. B]. Éste último es un enfoque analítico que permite estudiar la transmisión  $t(k)$  en forma estacionaria, y las propiedades analíticas de la solución a la ecuación de Schrödinger, *i.e.*, estudiar los efectos transitorios de un paquete de onda que atraviesa al sistema [Cap. 7].

## Resultados.

Los resultados que consideramos más sobresalientes de este trabajo son:

- i. – **Invisibilidad de la materia.** Una definición apropiada de la transparencia en la materia, permite considerar un espectro grande de sistemas que tengan una alta probabilidad de transmitir prácticamente en todo el espectro de energía, excepto para un intervalo cercano al umbral, ya que al considerar un potencial de alcance finito con  $V(x) > 0$  en alguna región del espacio, se tiene que  $T(0) = 0$  [20].

---

<sup>3</sup>Se ven desde un punto de vista general algunas propiedades de la evolución temporal de un paquete de onda arbitrario, y como caso particular se aplica a un paquete de onda Gaussiano usando el modelo de obturador cuántico.

*Conclusiones.*

- a) Se muestra empleando matriz de transferencia que diferentes sistemas, por ejemplo  $bwb$ ,  $2bwbs$  [Cap. 2] y en general una cadena formada por uno o más  $BB^4$  [Cap. 3], son transparentes en la región de tunelaje, *i.e.*, para energías menores a la altura del potencial. Además, siempre es posible encontrar los parámetros adecuados para que el sistema transmita con probabilidad casi uno, arriba de dos o más veces la altura de las barreras. A los cuales denominamos sistemas parcialmente transparentes.
  
- b) El formalismo de estados resonantes es apropiado para estudiar las propiedades analíticas de estos sistemas, encontramos que: *La transmisión en sistemas transparentes es dominada por la contribución de un estado ligado o antiligado cercano al umbral.* Excepto para sistemas más complejos, tal es el caso de las cadenas, donde la transmisión del sistema necesita la contribución de varios estados ligados y/o antiligados y/o resonantes, dando origen a *bandas prohibidas* de energía, *i.e.*, si la cadena es muy larga siempre presentará regiones de energía donde la transmisión es nula<sup>5</sup> [Secc. 3.2; pág. 66]. Sin embargo, si la cadena no es lo suficientemente larga, es posible encontrar los parámetros adecuados para que la transmisión en la región de tunelaje este perfectamente descrita por un estado ligado o antiligado.
  
- c) Se muestra que los sistemas transparentes son robustos frente a pequeñas variaciones en los parámetros del sistema, tales como: anchuras, alturas y/o profundidades de barreras y/o pozos, además, de variaciones en la masa y deformaciones en el perfil de las barreras y/o pozos, dando esta última una mejoría en la transmisión; capítulos 2, 3 y 4 respectivamente.

---

<sup>4</sup>Bloques fundamentales (*Building Blocks*).

<sup>5</sup>Podemos hacer el análogo de una superred, donde sabemos que los electrones viajan por bandas de conducción y para los cuales se muestra que existen bandas prohibidas de energía.



- d) Los sistemas transparentes son robustos frente a una reflexión del potencial, *i.e.*, cambiar alturas por profundidades y viceversa, por ejemplo, si el sistema  $S1(v, u)$  es transparente, entonces  $S1(u, v)$  es cuasi-transparente,<sup>6</sup> donde  $v$  es la colección de alturas y  $u$  la colección de profundidades de barreras y pozos respectivamente. Este efecto se refleja en la distribución de polos de los sistemas, *i.e.*, si comparamos las distribuciones de polos de los sistemas  $S1(v, u)$  con los del sistema  $S1(u, v)$  notaremos que el único estado que sufre una variación importante es el estado ligado o antiligado cercano al umbral, el resto de estados resonantes quedan *casi* invariantes frente a la reflexión (vea la figura 2.7 pág. 46).
- e) Dado un potencial de alcance finito arbitrario, siempre es posible encontrar una masa asociada a la partícula para que éste sea transparente, *i.e.*, las partículas con masa muy pequeña aumentan el espectro de sistemas transparentes [Cap. 4]. Otro efecto de la masa sobre el sistema es que: si tenemos un sistema transparente  $S(v, u, m_1)$  donde  $m_1$  es la masa efectiva del electrón en el medio 1, y se tiene otro medio donde la masa efectiva del electrón es  $m_2$ , entonces el sistema  $S'(v', u', m_2)$  es transparente, si se cumple  $v' = m_1 v / m_2$  y  $u' = m_1 u / m_2$ , *i.e.*, los sistemas son *equivalentes*.<sup>7</sup>
- f) Dados dos sistemas total o parcialmente transparentes en la región de tunelaje, se puede construir un sistema transparente con la unión de estos dos sistemas. Esto permite considerar un gran número de posibilidades para la construcción de estos sistemas.
- g) El tiempo de permanencia en sistemas transparentes es del orden del tiempo que le llevaría a la partícula recorrer la región de interacción, esto es, se exhibe que la mayoría de los sistemas transparentes

---

<sup>6</sup>No garantizamos que  $S1(u, v)$  sea transparente, pero si podemos garantizar que si hacemos una pequeña variación de alguno de sus parámetros lo será.

<sup>7</sup>En este sentido, la transmisión  $T(E)$  de sistemas equivalentes son idénticas en una gráfica  $T(E)$  vs.  $E/v_0$  siendo  $v_0 = \max\{|v|, |u|\}$ .

encontrados en este trabajo son invisibles [Cap. 5], excepto para partículas con energías cercanas al umbral.

- h) La propagación de ondas planas en el modelo de obturador cuántico [Secc. 8.2] no sufren un retraso o adelanto respecto a la propagación libre al transmitirse a través de un sistema invisible, excepto cuando se consideran energías cercanas al umbral donde la influencia del estado ligado o antiligado es importante [fig. 8.3, pág. 132], o bien para valores de energía donde  $T(E) < 1$  (en cadenas) [fig. 8.5, pág. 137].
- i) Si se considera un paquete Gaussiano con espectro en la región de tunelaje, se encuentra que no sufre un retraso o adelanto respecto a la propagación libre al pasar a través de un sistema invisible. [Secc. 8.3]. Esto muestra que pequeñas variaciones del tiempo de permanencia entre las diferentes componentes que forman al paquete de onda, son despreciables en la evolución.

ii. – **Coefficiente de transmisión.** Se encuentra una nueva representación del coeficiente de transmisión como un desarrollo en resonancias del sistema. Éste tiene la virtud de tener una convergencia rápida, *i.e.*, dado un valor finito de energía ( $0 < E < \infty$ ), siempre es posible encontrar un número finito de resonancias para el cual, el desarrollo en resonancias de la transmisión reproduce el mismo resultado que se encuentra con matriz de transferencia, en el rango de energías  $0 \rightarrow E$  [Secc. 7.1; pág. 100].

Este resultado no sólo muestra que el formalismo de estados resonantes es una herramienta poderosa, sino que al ser un enfoque puramente analítico abre la posibilidad de buscar relaciones generales que permitan resolver la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo. En particular se mostró que la evolución en la región de transmisión de un paquete de ondas arbitrario se puede escribir como la contribución de dos términos: uno que corresponde a la propagación libre del paquete, modulado por la transmisión correspondiente a su energía, y el otro a un término de

corrección debido a la presencia del potencial [Ec. 7.20, pág. 109].

iii. – **Solución analítica para la propagación de un estado Gaussiano (CGWP).** El primer ejemplo de la solución analítica exacta de la evolución de un paquete de ondas en la región de transmisión, usando el modelo de obturador cuántico, es el de onda plana [11]. En este trabajo, se muestra la solución analítica exacta para la evolución de un paquete gaussiano CGWP para el mismo modelo, y se encuentra en ausencia de estados ligados que: El paquete transmitido a través de un potencial de alcance finito, tiene esencialmente dos comportamientos diferentes como función de la posición del detector.

- a) Distancias cortas: La evolución del paquete transmitido está compuesta de dos procesos diferentes: *tunelaje* y *decaimiento*, *i.e.*, la señal se compone de ondas que están atravesando al sistema vía *efecto túnel* y otras que *decaen* del sistema, debido a que algunas componentes del paquete inicial son atrapadas dentro del sistema, para después escapar de éste vía un proceso de decaimiento.
  
- b) Distancias grandes (macroscópicas): La evolución del paquete transmitido pierde información del proceso de decaimiento exponencial que sufren algunas componentes del estado inicial, para finalmente copiar en su perfil el coeficiente de transmisión del sistema, *i.e.*, el paquete transmitido hereda las propiedades analíticas del sistema.

Estos resultados, muestran que el decaimiento exponencial<sup>8</sup> de un estado cuasi-estacionario formado por un proceso de dispersión [54, 56], es inherente a la posición del detector, *i.e.*, si experimentalmente deseamos medir la ley de decaimiento exponencial de un estado cuasi-estacionario formado por un proceso de dispersión, es necesario colocar el detector

---

<sup>8</sup>Nos referimos únicamente a la ley de decaimiento exponencial, ya que la complejidad de la solución, no permite verificar que la ley de decaimiento no exponencial también sea eliminada del paquete transmitido a distancias macroscópicas.

## Conclusiones.

cerca del sistema, ya que si se consideran distancias largas, no se verá la ley de decaimiento exponencial. Debemos aclarar que las distancias cortas y largas dependen del máximo valor tiempo de vida media y el tiempo de vuelo libre de la partícula. Por ejemplo, una distancia larga es cuando  $\tau_f \gg \tau$ , donde  $\tau_f$  es el tiempo de vuelo libre, *i.e.*, es el tiempo que lleva a la partícula recorrer libremente la distancia entre el sistema y el detector, y  $\tau$  el valor máximo de la vida media, que en general corresponde al tiempo de vida media del primer estado resonante. En otras palabras: *Para este proceso, el decaimiento exponencial de una partícula depende de la distancia a la que se le observa.*

Otros aspectos importantes de este trabajo son: el estudio analítico de la función de *Moshinsky* [Ap. **D**], en particular resalta la idea de extenderla a tiempos complejos  $\Im\{t\} < 0$ , que es de utilidad para el cálculo de la evolución de un paquete gaussiano, y se muestra que ésta está relacionada con la función de *Faddeyeva* [Ap. **F**], de tal forma que siempre tiene un comportamiento físico aceptable para todo  $k$  en el plano complejo, y no sólo en el semi-plano inferior, *i.e.*,  $\Im\{k\} < 0$ .

## Trabajo futuro.

Algunos trabajos de investigación que se generan de forma inmediata a partir del trabajo que hemos presentado son los siguientes

1. *Estudio de la evolución temporal en la región interna y de reflexión.* En este trabajo se ha estudiado la propagación de ondas Gaussianas en la región de transmisión, como trabajo futuro es de interés extender las ideas planteadas en este trabajo a la región interna y de reflexión.
2. *Ingeniería de sistemas transparentes.* El resultado de poder construir un sistema transparente a partir de dos sistemas, total o parcialmente transparentes, abre una infinidad de posibilidades para la construcción de estos

sistemas. En este trabajo se mostraron las combinaciones más simples. Sin embargo, un trabajo futuro es considerar combinaciones más complejas, y establecer reglas generales de construcción de estos sistemas.

3. *Orden y simetrías.* Esto está relacionado con la ingeniería de sistemas transparentes. Exhibimos para algunos sistemas que el sistema transparente óptimo no es simétrico frente a una reflexión espacial ( $x \rightarrow -x$ ) aunque el caso simétrico sea lo suficientemente transparente, *i.e.*, romper la simetría mejora la transparencia del sistema. Esto es un hecho interesante, puesto que, si construimos una barrera o pozo por capas de igual anchura, pero con un error (experimental) en la altura o profundidad arbitrario, ¿cómo afecta esto a la transparencia del sistema? y ¿cómo afecta el orden de barreras y pozos en la transparencia?. La segunda pregunta es en dirección al hecho de que si  $bwb$  es transparente y  $wbw$  también lo es, entonces  $bwbswbw$  es transparente aunque sea menos transparente que cada elemento que lo conforma. Sin embargo, usando los mismos elementos se puede construir  $bbbswww = bsw$  que corresponde a un ordenamiento de los elementos del sistema, entonces ¿cuáles son las condiciones para que el sistema sea transparente sin importar el orden?.
  
4. *La evolución de paquetes de onda en términos del cálculo fraccional.* Un hecho importante es que las dos soluciones analíticas que se han encontrado para la evolución de un paquete de ondas a través de un potencial de alcance finito, involucran la función de *Moshinsky*. Ésta al estar directamente relacionada con la función de *Faddeyeva*, muestra que estas soluciones se pueden escribir en términos de operadores fraccionales. La pregunta que surge inmediatamente es ¿existe un operador fraccional que relacione directamente la evolución libre de un paquete, con la corrección que sufre al atravesar el potencial?, *i.e.*, ¿ $\psi_c(x, t) = \mathfrak{D}\psi_f(x, t)$ ?, note que  $\mathfrak{D}$  debe tener toda la información del sistema, y que si la respuesta es afirmativa entonces  $\psi(x, t) = [\mathbf{t}(k_0) + \mathfrak{D}]\psi_f(x, t)$  en la región de transmisión.

**Parte III**  
**Apéndices.**

# A Matriz de Transferencia.

Consideremos el problema de una barrera de potencial en el intervalo  $[a, b]$ . La solución general a la ecuación asociada de eigenvalores está dada por

$$\psi(x) = \begin{cases} A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx} & x < a \\ C e^{iqx} + D e^{-iqx} & a < x < b \\ A_2 e^{ikx} + B_2 e^{-ikx} & b < x \end{cases}, \quad (\text{A.1})$$

donde  $E = \hbar^2 k^2 / 2m$  es la energía de la partícula y  $\hbar^2 q^2 / 2m = E - V$ , con  $V$  la altura de la barrera. El problema se muestra esquemáticamente en la figura A.1.

Los coeficientes en (A.1) están determinados por las condiciones de frontera; para simplificar la escritura de éstas introducimos la matriz  $\mathcal{F}(x)$  definida por

$$\mathcal{F}_k(x) \equiv \begin{pmatrix} e^{ikx} & e^{-ikx} \\ ik e^{ikx} & -ik e^{-ikx} \end{pmatrix}. \quad (\text{A.2})$$

Así las condiciones de frontera se escriben como

$$\mathcal{F}_k(a) \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = \mathcal{F}_q(a) \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}, \quad \mathcal{F}_q(b) \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = \mathcal{F}_k(b) \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.3})$$

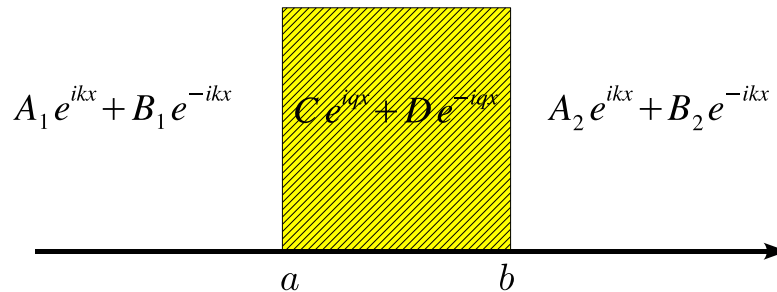


Figura A.1: Se muestra esquemáticamente el problema general de dispersión en una dimensión.

### A Matriz de Transferencia.

Si  $k \neq 0$ , es fácil verificar que la matriz (A.2) tiene inversa; esto permite simplificar las igualdades (A.3) a una ecuación que involucra los coeficientes en las regiones externas del potencial ( $x < a$  y  $b < x$ ). Tenemos

$$\begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} = \mathcal{F}_k^{-1}(b)\mathcal{F}_q(b)\mathcal{F}_q^{-1}(a)\mathcal{F}_k(a)\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} \equiv \mathcal{T}_{a \rightarrow b}\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.4})$$

donde  $\mathcal{T}_{a \rightarrow b}$  es conocida en la literatura como la matriz de transferencia, contiene toda la información del potencial y evidentemente, depende de la energía y masa de la partícula; ésta relaciona los coeficientes de entrada  $A_1, B_1$  de la solución para  $x < a$  con los de salida  $A_2, B_2$  para  $b < x$  (vea la figura A.1). Cabe mencionar que los elementos de matriz  $t_{ij}$  satisfacen  $t_{11} = t_{22}^*$  y  $t_{12} = t_{21}^*$ , resultado que se obtiene al pedir que el conjugado de la solución sea solución a la ecuación de Schrödinger, *i.e.*, el Hamiltoniano del problema conmuta con el operador de inversión temporal.

Es fácil probar a partir de las condiciones en la frontera que, para un sistema de dos o más barreras la matriz de transferencia total es el producto de las matrices de transferencia de cada barrera. Así, la matriz de transferencia para un sistema multibarrera está dada por

$$\mathcal{T}_{a \rightarrow b} = \mathcal{T}_{a_n \rightarrow b_n} \mathcal{T}_{a_{n-1} \rightarrow b_{n-1}} \cdots \mathcal{T}_{a_1 \rightarrow b_1}, \quad a = a_1, \quad b = b_n, \quad (\text{A.5})$$

donde suponemos que el sistema está formado por  $n$  barreras (o pozos) y la región de interacción del potencial es el intervalo  $[a, b]$  (vea la figura A.2). Cabe mencionar que a las regiones de potencial cero definidas por los intervalos  $[b_{j-1}, a_j]$  [fig. A.2] les corresponde como matriz de transferencia la identidad  $\mathcal{T}_{b_{j-1} \rightarrow a_j} = \mathbf{1}$ , por esta razón se omite su escritura en la fórmula (A.5) y es válida aún cuando algunos (o todos) tengan ancho cero ( $a_j - b_{j-1} = 0$ ).

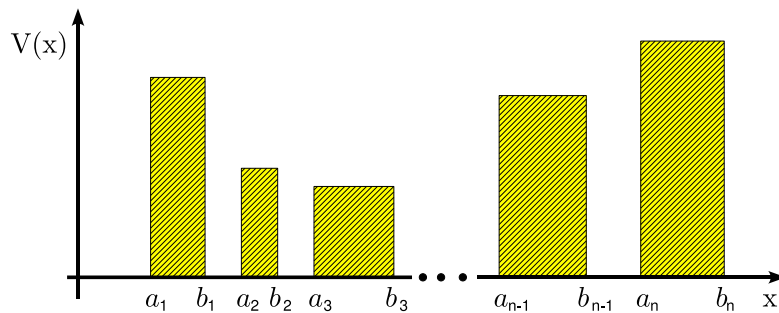


Figura A.2: Se muestra un sistema compuesto por  $n$  barreras y la asociación de los parámetros de cada una de ellas con los índices empleados en la ecuación (A.5).



Una solución particular se obtiene al considerar estados con incidencia de izquierda a derecha para los cuales se asignan los valores  $A_1 = 1$  con  $B_2 = 0$ , se encuentra que las amplitudes de reflexión  $B_1 = \mathbf{r}$  y transmisión  $A_2 = \mathbf{t}$  de estos estados están dadas por

$$\mathbf{r} = -\frac{t_{21}}{t_{22}}; \quad \mathbf{t} = \frac{1}{t_{22}}, \quad (\text{A.6})$$

donde se usa que el determinante de la matriz de transferencia es la unidad ( $\det \mathcal{T} = 1$ ); resultado que se obtiene de la conservación de flujo. Así mismo, la condición de incidencia de derecha a izquierda ( $B_2 = 1, A_1 = 0$ ) nos dan como resultado los coeficientes  $B_1 = \mathbf{t}'$  y  $A_2 = \mathbf{r}'$  con

$$\mathbf{t}' = \frac{1}{t_{22}} = \mathbf{t}; \quad \mathbf{r}' = \frac{t_{12}}{t_{22}} = -\mathbf{r}^* \frac{\mathbf{t}'}{\mathbf{t}^*}. \quad (\text{A.7})$$

Note que, inversión temporal implica que  $\mathbf{t}(-k) = \mathbf{t}^*(k)$ ,  $\mathbf{r}(-k) = \mathbf{r}^*(k)$  y  $\mathbf{r}'(-k) = \mathbf{r}'^*(k)$ .

## B Estados resonantes.

En este apéndice se muestra como obtener la propagación de un estado inicial en aproximación del obturador cuántico, usando el formalismo de estados resonantes [11]; en la región interna y de transmisión, para un potencial de alcance finito  $L > 0$ .

Como caso particular se considera un paquete de onda *cuasi* monocromático que interactúa con un potencial de alcance finito; extendido de  $a$  a  $b$ . Para resolver el problema de tunelaje aplicamos la transformada de Laplace a la ecuación de Schrödinger, esto permite encontrar fácilmente la solución en la región de transmisión y para la región interna, es conveniente emplear la función de Green de onda saliente; encontramos la solución de la función de onda en el espacio transformado. El hecho de que se puede escribir la solución en términos de la función de Green de onda saliente, permite hacer uso de sus propiedades analíticas en el plano complejo; particularmente en la región interna, en la cual sabemos que tiene un desarrollo en resonancias y a partir de éste es fácil encontrar la transformada inversa de Laplace.

### B.1. Formalismo.

Supongamos que una partícula se mueve de izquierda a derecha aproximándose hacia una región finita de potencial ( $V(x < a) = 0$  y  $V(x > b) = 0$ ) con condición inicial

$$\psi_0(x) = \begin{cases} e^{ikx} & x < a \\ 0 & x > a \end{cases} . \quad (\text{B.1})$$

La solución a este problema  $\psi(x, t; k)$  debe satisfacer: la ecuación de Schrödinger

$$H\psi(x, t; k) = i\hbar\partial_t\psi(x, t; k), \quad (\text{B.2})$$

donde  $H$  es el operador Hamiltoniano y la condición inicial  $\psi(x, t = 0; k) = \psi_0(x)$ . Denotamos a  $\xi(x, s) = \mathcal{L}_t[\psi(x, t; k)]$  que corresponde a la transformada de Laplace de la función. Así, al aplicar ésta a la ecuación de Schrödinger e identificar la variable  $s = -ip^2/\alpha$  con

B Estados resonantes.

$\alpha = 2m/\hbar$  encontramos

$$\{\partial_x^2 + p^2\}\xi(x, p) = i\alpha e^{ikx}, \quad x < a, \quad (\text{B.3a})$$

$$\{\partial_x^2 + p^2 - U(x)\}\xi(x, p) = 0, \quad a < x < b, \quad (\text{B.3b})$$

$$\{\partial_x^2 + p^2\}\xi(x, p) = 0, \quad b < x, \quad (\text{B.3c})$$

donde  $U(x) \equiv 2mV(x)/\hbar^2$ .

La solución en la región externa al potencial [Ecs. B.3a,B.3c] está dada por

$$\xi(x, p) = \begin{cases} i\alpha(p^2 - k^2)^{-1}e^{ikx} + C(p)e^{-ipx} & x < a \\ D(p)e^{ipx} & b < x \end{cases}, \quad (\text{B.4})$$

donde se impone la condición física de onda saliente a la derecha.<sup>1</sup>

Para encontrar la solución en la región interna del potencial es conveniente emplear la función de Green de onda saliente; ésta satisface:

$$\{\partial_x^2 + p^2 - U(x)\}G^+(x, x'; p) = \delta(x - x'), \quad a < x < b, \quad (\text{B.5})$$

y condición de onda saliente en las fronteras, *i.e.*,

$$\left. \frac{\partial}{\partial x} G^+(x, x'; p) \right|_{x=a_-} = -ipG^+(a, x'; p), \quad (\text{B.6a})$$

onda saliente por la izquierda y

$$\left. \frac{\partial}{\partial x} G^+(x, x'; p) \right|_{x=b_+} = ipG^+(b, x'; p), \quad (\text{B.6b})$$

---

<sup>1</sup>Recuerde que la condición de obturador cuántico para este problema, implica que inicialmente no hay probabilidad de encontrar a la partícula en la región interna y de transmisión  $x > a$  [Ec. B.1], por lo que, físicamente no hay contribución de ondas que se propaguen de derecha a izquierda del potencial en la solución, en otras palabras, la condición física implica que la evolución del paquete esta dada en términos de los estados de dispersión de izquierda a derecha (vea el apéndice A).

onda saliente por la derecha. Note que, las condiciones son para valores  $a_-$  y  $b_+$ , i.e., se aproximan por la región externa al potencial.

Multiplicamos la ecuación (B.5) por  $\xi(x, p)$  y a la ecuación (B.3b) por  $G^+(x, x'; p)$ , al restarlas se encuentra

$$\partial_x \left[ \xi(x, p) \partial_x G^+(x, x'; p) - G^+(x, x'; p) \partial_x \xi(x, p) \right] = \delta(x - x') \xi(x, p), \quad (\text{B.7})$$

donde se ha empleado la identidad  $\partial_x [f \partial_x g - g \partial_x f] = f \partial_x^2 g - g \partial_x^2 f$  para cualesquiera dos funciones  $f, g$  de la variable  $x$ . Integramos a (B.8) en el intervalo de interacción  $[a, b]$  y usando las condiciones a la frontera de  $\xi(x, p)$  (es continua Ec. B.4) y  $G^+(x, x'; p)$  (onda saliente) se encuentra

$$\xi(x, p) = \frac{\alpha}{k - p} G^+(a, x; p) e^{ika}, \quad a < x < b. \quad (\text{B.8})$$

Cabe mencionar que este resultado se obtiene fácilmente si suponemos que  $\xi(x, p)$  tiene derivada continua en  $x = a$  y  $x = b$ , sin embargo, se puede mostrar que es el mismo resultado aún cuando su derivada no sea continua; para hacer la demostración hay que tomar en cuenta la derivada de  $G^+(x, x'; p)$  tampoco es continua, resultado que se obtiene de la ecuación (B.5).

Al evaluar en  $x = b$  se encuentra, por continuidad, el coeficiente  $D(p)$ , por lo tanto la solución en la región de transmisión [Ec. B.3c] se puede escribir como

$$\xi(x, p) = \frac{\alpha}{k - p} G^+(a, b; p) e^{ika} e^{-ipb} e^{ipx}, \quad b < x. \quad (\text{B.9})$$

## B.2. Región interna.

Para encontrar la solución en la región interna al potencial, hacemos una expansión analítica al plano complejo  $p$  de la función  $\xi(x, p)$  definida en la región interna del potencial [Ec. B.8]. Así, podemos escribir la integral de contorno

$$\frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma} dz \frac{z \xi(x, z)}{z - p} = 0, \quad (\text{B.10})$$

donde  $\Gamma = \sum_n c_n + c_p + c_k + c_s$  [fig. B.1]. Sabemos que en la región interna se cumple  $G^+(x, x'; z) \rightarrow 0$  para  $|z| \rightarrow \infty$  [5, 6], por lo que la integral sobre la trayectoria  $c_s$  es nula; quedando únicamente la contribución

B Estados resonantes.

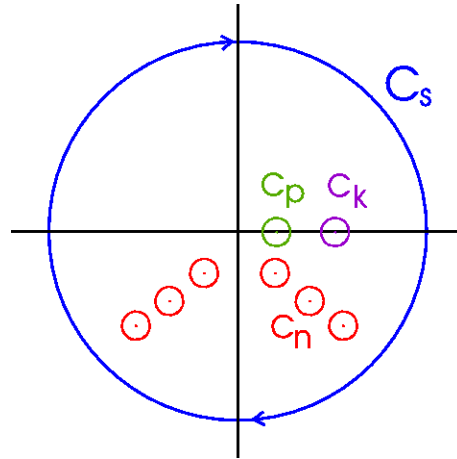


Figura B.1: Contorno de integración en el plano complejo  $z$ .

$$\oint_{c_p} dz \frac{z\xi(x, z)}{z - p} = - \oint_{c_k} dz \frac{z\xi(x, z)}{z - p} - \sum_n \oint_{c_n} dz \frac{z\xi(x, z)}{z - p}, \quad (\text{B.11})$$

las primeras dos integrales son inmediatas pero, para evaluar la integral sobre cada trayectoria  $c_n$  que rodea al  $n$ -ésimo polo  $k_n$  de la función de Green es necesario emplear el teorema del residuo.<sup>2</sup> Se encuentra que el residuo de la función de Green esta dado por [6]; [Ec. 1.12, pág. 7]

$$\text{Res } G^+(x, x'; k) = \lim_{k \rightarrow k_n} (k - k_n) G^+(x, x'; k) = \frac{u_n(x) u_n(x')}{2k_n}, \quad (\text{B.12})$$

igualdad que es válida en la región interna del potencial  $a < (x, x') < b$  y donde  $u_n(x)$  es el  $n$ -ésimo estado resonante; éstos satisfacen la ecuación de Schrödinger con condición a la

<sup>2</sup>Recordemos que el teorema del residuo nos dice que si  $\gamma$  es un trayectoria simple cerrada que encierra uno o varios polos de una función  $f(z)$ , entonces

$$\oint_{\gamma} dz f(z) = 2\pi i \sum_{z_n \in A} \text{Res} f(z),$$

donde  $\text{Res} f(z) = \lim_{z \rightarrow z_n} (z - z_n) f(z)$  son los residuos de la función,  $z_n$  los polos de  $f(z)$  contenidos en la región  $A$  del plano complejo  $z$  con contorno  $\gamma$  y donde  $\gamma$  se recorre en dirección contraria a la manecillas del reloj.

frontera de onda saliente, *i.e.*,

$$Hu_n(x) = E_n u_n(x), \quad E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m}, \quad (\text{B.13a})$$

$$\left. \frac{d}{dx} u_n(x) \right|_{x=a} = -ik_n u_n(a), \quad \left. \frac{d}{dx} u_n(x) \right|_{x=b} = ik_n u_n(b), \quad (\text{B.13b})$$

normalizados mediante

$$\int_a^b dx u_n^2(x) + \frac{i}{2k_n} \left[ u_n^2(a) + u_n^2(b) \right] = 1. \quad (\text{B.13c})$$

Sustituimos la ecuación (B.8) en (B.11) y usamos el teorema del residuo para encontrar

$$p\xi(x, p) = \alpha \frac{kG^+(a, x; k)}{k-p} e^{ika} + \frac{\alpha e^{ika}}{2} \sum_n \frac{u_n(a)u_n(x)}{(p-k_n)(k-k_n)}. \quad (\text{B.14})$$

Este resultado muestra que la solución en la región interna tiene un desarrollo en resonancias.

Para encontrar la evolución temporal se aplica la transformada inversa de Laplace, esto es

$$\psi(x, t; k) = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} dp \xi(x, p) e^{-ip^2 t/\alpha} \left( \frac{-2i}{\alpha} \right) p. \quad (\text{B.15})$$

Al sustituir la ecuación (B.14) en la ecuación (B.15) se encuentra

$$\psi(x, t; k) = \phi(x, k) M(0, t; k) - ie^{ika} \sum_n \frac{u_n(a)u_n(x)}{k-k_n} M(0, t; k_n), \quad a < x < b, \quad (\text{B.16})$$

donde  $\phi(x, k) = 2ikG^+(a, x; k)e^{ika}$  es la solución estacionaria, y  $M(x, t; k)$  es la función  $M$ , ésta se define como [Ap. D]

$$M(x, t; k) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dp \frac{e^{-ip^2 t/\alpha} e^{ipx}}{p-k} = \frac{1}{2} e^{imx^2/2\hbar t} e^{y^2} \operatorname{erfc}(y), \quad (\text{B.17})$$

con  $\operatorname{erfc}(y)$  la función de error complementario y

$$y = e^{-i\pi/4} \left( \frac{m}{2\hbar t} \right)^{1/2} \left[ x - \frac{\hbar k}{m} t \right]. \quad (\text{B.18})$$

### B.3. Región externa (transmisión).

El análisis de la región de transmisión para valores  $b < x$  es idéntico al empleado en la región interna, sólo que, en esta ocasión se hace el desarrollo analítico del coeficiente  $D(p) = \xi(x, p)e^{-ipx}$  [Ec. B.9]. Así, la integral

$$\frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma} dz \frac{zD(z)}{z-p} = 0, \quad (\text{B.19})$$

idéntica a la ecuación (B.10) y usando una relación análoga a (B.11) se encuentra la igualdad

$$pD(p) = \alpha \frac{G^+(a, b; k)e^{-ikL}}{k-p} + \frac{\alpha e^{ika}}{2} \sum_n \frac{u_n(a)u_n(b)e^{-ik_nb}}{(k-k_n)(p-k_n)}, \quad (\text{B.20})$$

donde  $L = b - a$  es el ancho del potencial. Así, al sustituir  $\xi(x, p) = D(p)e^{ipx}$  en la ecuación (B.15) e identificar el término  $pD(p)$  se encuentra que la solución en la región de transmisión es

$$\psi(x, t; k) = \mathbf{t}(k)M(x, t; k) - ie^{ika} \sum_n \frac{u_n(a)u_n(b)e^{-ik_nb}}{k-k_n} M(x, t; k_n), \quad b < x, \quad (\text{B.21})$$

donde  $\mathbf{t}(k) = 2ikG^+(a, b; k)e^{-ikL}$  es la amplitud de transmisión del problema.

## C Cálculo de polos.

El cálculo de polos de una función en general es complejo si no sabemos que método emplear. Nosotros, usamos en este trabajo el método de *Newton–Raphson*; éste es empleado para el cálculo de los ceros de una función y se hace aproximándose por su derivada. La idea es simple, si suponemos que  $F(k)$  tiene un cero en  $k_0$ , i.e.,  $F(k_0) = 0$ , dado que no conocemos el valor  $k_0$  suponemos que  $k_r \approx k_0$ . Así  $k_0 = k_r + \Delta k$ , por lo tanto se tiene

$$F(k_0) = F(k_r + \Delta k) \approx F(k_r) + F'(k_r)\Delta k \approx 0, \quad (\text{C.1})$$

donde usamos la expansión de Taylor al rededor de  $k_r$ , dado que  $\Delta k = k_0 - k_r$  se tiene que

$$k_0 \approx k_r - \frac{F(k_r)}{F'(k_r)}; \quad (\text{C.2})$$

proporciona un método recursivo para encontrar el valor  $k_0$ . Sin embargo, para hacer efectivo el método es necesario conocer el cero aproximado  $k_r$ . Esto es desalentador, puesto que en general no sabemos cual es el cero aproximado. Pero podemos dar un método que es efectivo para cualquier función; suponemos que  $k$  es complejo.

### C.1. Método de prueba y error.

El primer método que vamos a dar aquí es de gran utilidad cuando no sabemos donde están los ceros de la función  $F(k)$ . Consiste en la simple idea de hacer un método de *prueba y error* sobre el plano complejo  $k$ , i.e., vamos a explorar subconjuntos del plano complejo y a examinar cada punto como si fuera un cero aproximado.

Dado que estamos pensando en una función arbitraria, supongamos que tenemos una rutina para calcular el cero de la función  $F(k)$ , i.e., tenemos la función  $NR(k^{prox}, k_0)$ , i.e.,  $NR$  es la rutina Newton–Raphson de la función  $F(k)$  y tiene como entrada  $k^{prox}$  (cero aproximado) y como salida  $k_0$  el cual tiene dos posibilidades: (a)  $k_0$  es cero de la función  $F(k)$  con la precisión deseada y (b)  $k_0 = k'_0$  donde  $k'_0$  sabemos que no es cero de  $F(k)$ . Esta condición es de utilidad puesto que si introducimos un  $k^{prox}$  erróneo la rutina  $NR$  debe terminar en un número de pasos finito y dar como resultado  $k'_0$ ; esto indica que no encontró el cero de la



### C Cálculo de polos.

función.

Ahora, tomemos el intervalo  $I = [k_r^{\min}, k_r^{\max}] \times [k_i^{\min}, k_i^{\max}]$  en el plano complejo  $k$ , nosotros sospechamos que hay un cero en el intervalo. Así, podemos hacer una partición fina de este intervalo y explorar todo el intervalo dando un valor  $k_{nm}^{\text{prox}}$  representativo del subintervalo  $I_{nm}$ , como se muestra en la figura C.1. La elección del cero aproximado es arbitraria. Sin embargo, podemos considerar en general el punto medio de cada subintervalo, *i.e.*, supongamos que se hacen  $N$  particiones en el eje real y  $M$  en el imaginario, esto transforma el intervalo  $I$  en  $N \times M$  subintervalos que denotamos por  $I_{nm}$  y cada uno de ellos será representado por el elemento  $k_{nm}^{\text{prox}} \in I_{nm}$  dado por

$$k_{nm}^{\text{prox}} = k_r^{\min} + \frac{(2n-1)}{2} \Delta k_r + i \left[ k_i^{\min} + \frac{(2m-1)}{2} \Delta k_i \right], \quad (\text{C.3})$$

$$\Delta k_r = \frac{k_r^{\max} - k_r^{\min}}{N}, \quad \Delta k_i = \frac{k_i^{\max} - k_i^{\min}}{M}.$$

Así, nuestra rutina tiene que calcular todos los valores  $NR(k_{nm}^{\text{prox}}, k_0)$ , y dependiendo del resultado tendremos las raíces que se encuentran en el intervalo  $I$  que pueden ser cero, una o varias.

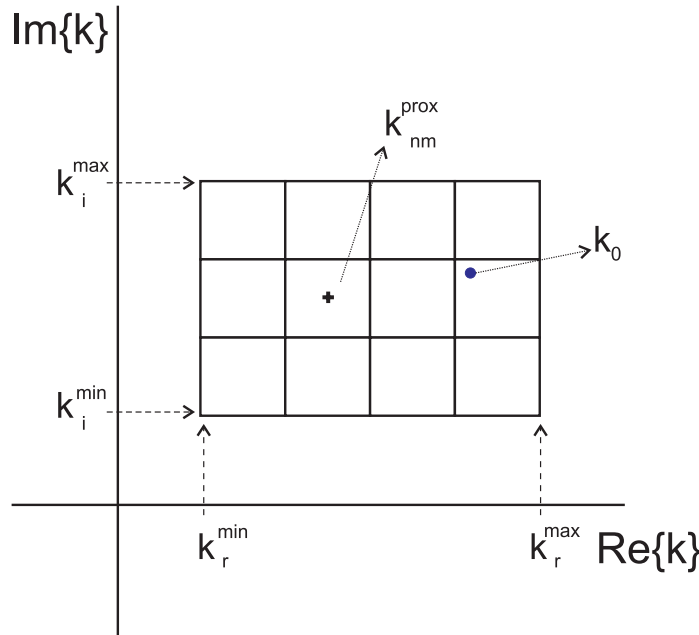


Figura C.1: Partición del intervalo  $I$  en el plano complejo  $k$ , cada subintervalo  $I_{nm}$  es representado por un punto en su interior  $k_{nm}^{\text{prox}}$  y es empleado en el método Newton–Raphson como cero aproximado de  $k_0$ .

Este método es efectivo puesto que emplea el método de Newton–Raphson para el cálculo de los ceros y no es necesario conocer un cero aproximado. Sin embargo, tiene sus inconvenientes, principalmente por el tiempo de cálculo, veamos:

1. Dada una función arbitraria  $F(k)$ , puede tener los ceros en cualquier parte del plano complejo, esto implica considerar una cantidad considerable de intervalos y a cada intervalo dividirlo en  $N \times M$  subintervalos; implica barrer un intervalo grande en el plano complejo y además la partición tiene que ser fina, *i.e.*,  $N, M \gg 1$  para garantizar que cada elemento  $k_{nm}$  representativo de  $I_{nm}$  y es un cero próximo si  $k_0 \in I_{nm}$ . Para simplificar esto es necesario tener conocimiento de *por dónde* se encuentran los ceros.
2. Si  $NR(k^{prox}, k_0)$  tarda un tiempo  $t$  en determinar si  $k^{prox}$  converge a un cero o no (en el mejor de los casos podemos suponer que siempre tarda lo mismo) y sólo hay un cero en  $I$ , esto implica invertir un tiempo mínimo  $T = N \times M \times t$  para calcular el cero y en el mejor de los casos nos dará ceros que no se encuentran en el intervalo  $I$ .
3. Si  $F(k) \rightarrow 0$  sobre alguna trayectoria, es necesario tener un criterio para eliminar estos puntos y no cometer el error de considerarlos como ceros de  $F(k)$ .

En otras palabras, el método implica invertir un tiempo mayor para el cálculo de los ceros. Pero, es funcional cuando no se conocen los ceros aproximados de  $F(k)$ . Además, se pueden hacer variantes del mismo; por ejemplo, dar un intervalo diferente (un cono o círculo), pero esto dependerá del conocimiento analítico que se tenga sobre  $F(k)$ .

## C.2. Método asintótico.

Este método es aplicable a funciones para las cuales sus ceros tienen un comportamiento peculiar, o al menos de forma asintótica. Suponga que los ceros de la función  $F(k)$  satisfacen que  $\Re\{k_{n+1} - k_n\} \approx a$  con  $a$  constante y que  $\Im\{k_{n+1}\} \approx \Im\{k_n\}$ . Entonces, sabemos que  $k_{n+1} \approx k_n + a + i\gamma$ , donde  $\gamma$  es un real cercano a cero, esto simplifica el cálculo puesto que no requiere una partición fina de un intervalo  $I$ , pero debemos especificar con cuidado cual es el cero aproximado, ya que por experiencia, sabemos que si damos el valor aproximado  $k^{prox} = k_n + a$ , la salida de  $NR(k^{prox}, k_0)$  no necesariamente es  $k_{n+1}$ . Esto nos fuerza a tener consideraciones respecto a este método.

1. Sabemos que  $\Re\{k_{n+1}\} \approx \Re\{k_n\} + a$  y que  $\Im\{k_{n+1}\} \approx \Im\{k_n\}$ . Así el cero aproximado inmediato está determinado por  $k^{prox} = k_n + a$ .

### C Cálculo de polos.

2. Definimos una nueva rutina  $NR2(k^{prox}, k_0, a, \gamma)$ , donde  $k^{prox}$ ,  $k_0$  son las mismas que en el caso de la rutina  $NR$ , pero hemos agregado el ancho y un factor  $\gamma$ . Ésta debe hacer esencialmente lo mismo que la rutina  $NR$ , sólo que ahora debe tener un par de condiciones adicionales:

- a) Si en la rutina interna  $NR2$  se tiene que

$$k_0 = k_r - \frac{F(k_r)}{F'(k_r)},$$

es el cero y  $\Re\{k_0\} > \Re\{k^{prox}\} + 1.5a$  ó  $\Re\{k_0\} < \Re\{k^{prox}\} + 0.5a$  entonces se hace  $\Re\{k_r\} = \Re\{k^{prox}\} + a(1+r)$ , donde  $r$  es un número arbitrario que toma valores entre  $[-0.5, 0.5]$ , y

- b) Si  $\Im\{k_0\} < \gamma^1$  entonces se hace  $\Im\{k_r\} = \Im\{k^{prox}\} + \Delta\gamma s$  donde  $s$  es un número arbitrario entre  $[-0.5, 0.5]$  y  $\Delta\gamma = \gamma - \Im\{k_0\}$ . Note que la definición de  $\Delta\gamma$  se puede modificar.

Estas dos condiciones garantizan que la salida de  $NR2$  es  $k_{n+1}$  y no otro.

Esta nueva rutina permite calcular los ceros de la función uno tras otro en un orden creciente y es de gran utilidad para el cálculo de los polos de la matriz de transferencia, ya que estos coinciden con los ceros del elemento  $t_{22}(k)$  y asintóticamente tienen el comportamiento descrito en el método 2.<sup>2</sup>

---

<sup>1</sup>Aquí pensamos que  $\Im\{k_n\} < 0$  y  $\gamma < 0$ .

<sup>2</sup>Una combinación de los dos métodos presentados aquí, nos permiten encontrar los primeros  $N \gg 1$  polos de forma eficiente, puede encontrar las rutinas correspondientes en código Fortran en la dirección <http://code.google.com/p/resonances>. Cabe mencionar que al no tener una expresión analítica (en general) de los polos aproximados para un potencial dado, el cálculo de los polos requiere de experiencia, principalmente para calcular los primeros polos, ya que, estos no obedecen una regla general.

## D Función $M(x, t; k)$ .

La función  $M(x, t; k)$  conocida por algunos autores como función de Moshinsky, es la solución del problema del obturador libre en una dimensión con condición inicial  $\psi_0(x) = e^{ikx}$  para  $x < 0$  y cero para valores positivos de  $x$  [9]. Es fácil mostrar para este problema que la solución de la ecuación de Schrödinger es  $\psi(x, t > 0) = M(x, t; k)$  donde

$$M(x, t; k) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} dq \frac{e^{iqx - i\hbar q^2 t/2m}}{k - q} = \frac{1}{2} e^{imx^2/2\hbar t} \omega(iy), \quad k = k^*, \quad (\text{D.1})$$

con  $\omega(z)$  la función de Faddeyeva [30, 46] [Ap. F] y

$$y = e^{-i\pi/4} \sqrt{\frac{m}{2\hbar t}} \left[ x - \frac{\hbar k}{m} t \right]. \quad (\text{D.2})$$

Deseamos evaluar la Ec. (D.1) para el caso  $k \neq k^*$ , i.e.,  $k$  complejo; suponemos que los parámetros  $x$  y  $t$  son reales. Completamos cuadrados en la exponencial

$$iqx - i\frac{\hbar t}{2m} q^2 = i\frac{mx^2}{2\hbar t} + \left[ -\sqrt{\frac{-im}{2\hbar t}} \left( x - \frac{\hbar q}{m} t \right) \right]^2 \equiv i\frac{mx^2}{2\hbar t} + u^2; \quad (\text{D.3})$$

ésta proporciona de forma natural un cambio de variable ( $u$ ). Así, la integral (D.1) toma la forma

$$\frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} dq \frac{e^{iqx - i\hbar q^2 t/2m}}{k - q} = -\frac{e^{imx^2/2\hbar t}}{2\pi i} \int_{-\infty+i\infty}^{\infty-i\infty} du \frac{e^{u^2}}{-iz + u}, \quad (\text{D.4})$$

con

$$z = e^{i\pi/4} \sqrt{\frac{m}{2\hbar t}} \left( x - \frac{\hbar k}{m} t \right) = iy. \quad (\text{D.5})$$

D Función  $M(x, t; k)$ .

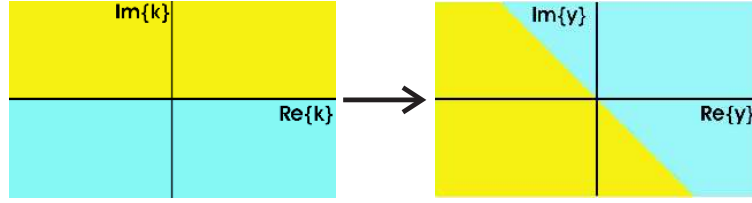


Figura D.1: Se muestra esquemáticamente el mapeo del plano complejo  $k$  al plano complejo  $-iz = y$ .

Por otro lado, la función de Faddeyeva tiene una forma integral simple cuando la parte imaginaria del argumento es positivo; ésta es [30, 46]

$$\omega(z) = \frac{i}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} du \frac{e^{-u^2}}{z - u} = \frac{1}{\pi i} \int_{-\infty i}^{\infty i} du \frac{e^{u^2}}{-iz + u}, \quad \Im\{z\} > 0. \quad (\text{D.6})$$

Es fácil mostrar mediante un cambio de variable que la integral (D.6) toma el valor  $-\omega(-z)$  si  $\Im\{z\} < 0$ ; por esta razón la función de Faddeyeva tiene la forma integral (D.6) únicamente para  $\Im\{z\} > 0$ . Sin embargo, esta condición no impide evaluar la integral para el caso contrario.

Primero analicemos un mapeo del plano complejo  $k$  al plano complejo  $-iz$  con  $-iz = y$  [Ec. D.2]; enfatizamos que se consideran  $x$  y  $t$  reales con  $t > 0$  por lo que tomar el valor  $x = 0$  no cambia el comportamiento cualitativo del mapeo. En el primer paso el mapeo se cambia  $k \rightarrow -k$  [Ec. D.2], después se hace una rotación por un ángulo de  $-\pi/4$ ; esto se puede ver en la figura D.1, y nos permite ver gráficamente a donde se trasladan los valores  $k$  en el mapeo. Por último, si  $k$  es real estos valores se mapean sobre la línea que divide las dos regiones, definida por valores  $y = |y|e^{-i\pi/4}$ .

Notemos que la condición  $\Im\{z\} > 0$  es equivalente a  $\Re\{y\} > 0$ ; esto es evidente de la igualdad  $z = iy$  [Ec. D.5] y será de utilidad para evaluar la integral [Ec.D.4]. Definimos la trayectoria cerrada  $\Gamma = L + C_1 + R + C_2$ , donde  $L$  es la recta definida por  $u = |u|e^{-i\pi/4}$ ,  $R$  el eje imaginario del plano complejo  $u$  y  $C_1, C_2$  cierran la trayectoria de integración, como se muestra en la figura D.2. Se encuentra que las integrales sobre las trayectorias  $C_1$  y  $C_2$  son nulas, ya que, para esos valores  $e^{u^2} \rightarrow 0$ . Por lo tanto tenemos

$$-\frac{1}{2\pi i} \int_L du \frac{e^{u^2}}{-iz + u} = -\text{Res}\{\} + \frac{1}{2\pi i} \int_{-i\infty}^{i\infty} du \frac{e^{u^2}}{-iz + u}, \quad (\text{D.7})$$

donde  $\text{Res}\{\}$  es el residuo de la función. Es claro que si  $-iz$  está en las regiones  $I$  y  $II$  el residuo es cero, por lo que se tiene inmediatamente la expresión de la integral [Ec. D.6].

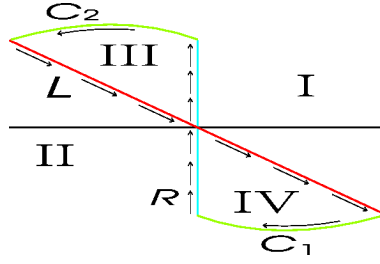


Figura D.2: Trayectoria cerrada de integración  $\Gamma$ , indicando las cuatro posibles regiones donde se pueda encontrar  $-iz = y$ .

Por otro lado, si  $-iz$  está en la región *III* el residuo es  $-e^{-z^2}$  y finalmente si  $-iz$  está en la región *IV* el residuo es  $e^{-z^2}$ . Esto se puede obtener agregando una trayectoria cerrada que contenga únicamente a la singularidad, el signo viene de la dirección de la trayectoria. Finalmente encontramos que la Ec. (D.1) toma la forma

$$M(x, t; k) = \frac{1}{2} e^{imx^2/2ht} \begin{cases} \omega(iy) & y \in I \\ -\omega(-iy) & y \in II \\ 2e^{-z^2} - \omega(-z) = \omega(iy) & y \in III \\ -2e^{-z^2} + \omega(z) = -\omega(-iy) & y \in IV \end{cases}, \quad (\text{D.8a})$$

o en términos de la posición  $k$  en el plano complejo tenemos

$$M(x, t; k) = \frac{1}{2} e^{imx^2/2ht} \begin{cases} \omega(iy) & \Im\{k\} \leq 0 \\ -\omega(-iy) & \Im\{k\} > 0 \end{cases}, \quad (\text{D.8b})$$

con  $y$  definida en la ecuación (D.2). Este resultado generaliza la definición de la función  $M$  [Ec. D.1] al plano complejo  $k$ .

Antes de analizar el caso  $x$  o  $t$  complejos veamos los límites  $t \rightarrow \infty$  y  $x \rightarrow \pm\infty$  con  $k$  compleja. El primer límite  $t \rightarrow \infty$ ; en este caso se tiene que  $y \rightarrow -e^{-i\pi/4} k \sqrt{t}$ , si  $\Im\{k\} < 0$  entonces  $-\pi < \arg(k) < 0$ , por lo tanto  $-\pi/4 < \arg(y) < \pi - \pi/4$ ; corresponde al mapeo mostrado en la figura D.1. Así al evaluar  $\omega(iy)$  tenemos dos situaciones:  $\Im\{iy\} > 0$  o  $\Im\{iy\} < 0$ . Así

$$\lim_{t \rightarrow \infty, \Im\{iy\} > 0} \omega(iy) \rightarrow 0, \quad \lim_{t \rightarrow \infty, \Im\{iy\} < 0} \omega(iy) = 2e^{y^2} - \omega(-iy) \rightarrow 0, \quad (\text{D.9})$$

D Función  $M(x, t; k)$ .

es claro a partir de la figura D.1 que  $e^{y^2} \rightarrow 0$ , ya que  $|\Re\{y\}| < \Im\{y\}$ . Un análisis semejante nos lleva a concluir que  $\omega(-iy) \rightarrow 0$  cuando  $t \rightarrow \infty$  y  $\Im\{k\} > 0$ . Por otro lado, para el límite  $x \rightarrow \pm\infty$  encontramos  $y \rightarrow \mp e^{i\pi/4}x$ ; esto nos lleva a concluir que  $\omega(iy) \rightarrow 0$  con  $\Im\{k\} < 0$  y  $\omega(-iy) \rightarrow 0$  con  $\Im\{k\} > 0$ . Por lo tanto, la solución (D.8b) es físicamente aceptable para todo valor  $t > 0$ ,  $x$  reales y  $k$  complejo.

Notemos que si suponemos  $x$  complejo, la integral (D.1) diverge; esto nos lleva a considerar únicamente al caso más general que es  $t$  complejo; para esto pedimos que  $t = |t|e^{-i\phi_t}$  con  $0 < \phi_t < \pi/2$ , donde suponemos que  $\Re\{t\} > 0$  ya que la función debe converger a (D.8b) en el límite  $\Im\{t\} \rightarrow 0$  y  $\Im\{t\} < 0$ ; no es más que la condición para que (D.1) converja. En este caso, el análisis que nos lleva de (D.1) a (D.7) es el mismo. Sin embargo, el cálculo de la integral no. Para mostrar esto, recordemos de la figura D.1 que los polos de (D.7) están en el plano  $y$ ; nos sugiere hacer el mismo mapeo, el cual se muestra en la figura D.3. Notemos que el mapeo con  $x = 0$  es cualitativamente igual al mapeo que se hizo con  $t$  real, pero, cuando  $x \neq 0$  se tiene que la trayectoria de integración y el mapeo del eje real  $k$  no coinciden. Una forma rápida de ver como se modifica el cálculo de la integral (D.7) es escribir  $-\hbar k't/m = x - \hbar kt/m$ , por lo que el mapeo se hace sobre  $k'$  que corresponde al mapeo mostrado en la figura D.3a. Así  $k' = k - mx/\hbar t$  nos lleva inmediatamente a

$$M(x, t; k) = \frac{1}{2}e^{imx^2/2\hbar t} \begin{cases} \omega(iy) & \Im\{k - mx/\hbar t\} \leq 0 \\ -\omega(-iy) & \Im\{k - mx/\hbar t\} > 0 \end{cases}, \quad (\text{D.10})$$

tiene un comportamiento físicamente aceptable si  $x > 0$ . Si  $x < 0$  se ve fácilmente que la definición se invierte, por esta razón, es conveniente escribir  $k - m|x|/\hbar t$ ; es útil cuando  $x$  es función de  $\Re\{t\}$ .

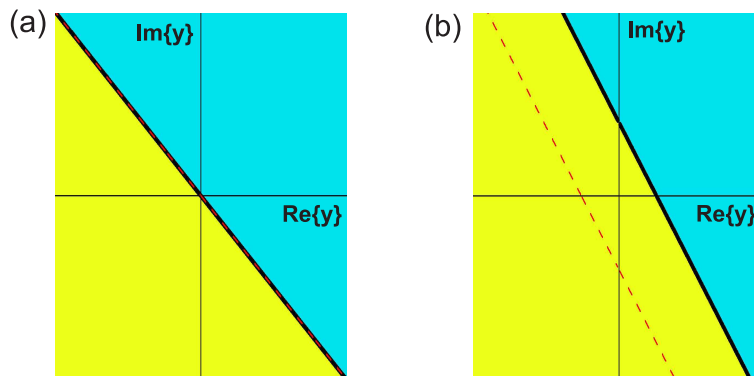


Figura D.3: Se muestra esquemáticamente el mapeo del plano complejo  $k$  al plano complejo  $y$  con  $t$  complejo (a) con  $x = 0$ , (b)  $x \neq 0$ , en ambas gráficas se muestra la trayectoria de integración  $L$  correspondiente a (D.7) línea cortada.

Este análisis muestra que en realidad tenemos dos funciones  $M(x, t; k)$ , la notación es correcta si vemos la definición (D.1). Sin embargo, en algunos casos, principalmente cuando tomamos límites, la función de  $M$  no se evalúa de la forma usual (D.10); cuando sucede esto es conveniente tomar una notación alternativa, *i.e.*,

$$M_{\pm}(x, t; k) = \mp \frac{1}{2} e^{imx^2/2\hbar t} \omega(\mp iy). \quad (\text{D.11})$$

Las cuales están bien definidas y heredan la relación de simetría en el plano  $k$

$$M_{-}(x, t; k) - M_{+}(x, t; k) = e^{ikx - i\hbar k^2 t/2m}, \quad (\text{D.12})$$

que es fácil probar a partir de las relaciones de simetría de la función de Faddeyeva (F.13) [30, 46].

Ahora, vamos a mostrar una forma rápida de obtener la derivada  $n$ -ésima respecto a  $k$  ya que (D.10) depende únicamente de  $k$  en el argumento de la función de Faddeyeva en forma lineal. Dado que ambas definiciones (D.11) tienen esencialmente el mismo comportamiento denotamos por  $z_{\pm}$  el argumento de la función (D.11) y encontramos que

$$\partial_k M_{\pm}(x, t; k) = \left[ \mp e^{imx^2/\hbar t} \left( \frac{i}{\sqrt{\pi}} \right) - 2z_{\pm} M_{\pm}(x, t; k) \right] \partial_k z_{\pm}, \quad (\text{D.13})$$

donde  $\partial_k z_{\pm}$  es una constante. Esta fórmula se puede generalizar fácilmente si suponemos que

$$\partial_k^n M_{\pm}(x, t; k) = \left[ \mp g_n(z_{\pm}) e^{imx^2/\hbar t} \left( \frac{i}{\sqrt{\pi}} \right) - f_n(z_{\pm}) M_{\pm}(x, t; k) \right] (\partial_k z_{\pm})^n; \quad (\text{D.14})$$

claramente se debe cumplir  $g_1(z_{\pm}) = 1$  y  $f_1(z_{\pm}) = 2z_{\pm}$ , y los elementos  $g_{n+1}(z_{\pm})$  y  $f_{n+1}(z_{\pm})$  se encuentran derivando a (D.14), para el cual se tiene

$$\begin{aligned} \partial_k^{n+1} M(x, t; k) &= \partial_k (\partial_k^n M(x, t; k)) = \\ &= \left[ \mp g'_n(z_{\pm}) e^{imx^2/\hbar t} \left( \frac{i}{\sqrt{\pi}} \right) - f'_n(z_{\pm}) M(x, t; k) - \right. \\ &\quad \left. - f_n(z_{\pm}) \partial_{z_{\pm}} M(x, t; k) \right] (\partial_k z_{\pm})^{n+1}; \end{aligned} \quad (\text{D.15})$$



*D* Función  $M(x, t; k)$ .

al sustituir la última parcial e identificar los coeficientes  $g_{n+1}(z_{\pm})$  y  $f_{n+1}(z_{\pm})$  se encuentra que la relación es

$$g_{n+1}(z_{\pm}) = g'_n(z_{\pm}) - f_n(z_{\pm}), \quad g_1(z_{\pm}) = 1, \quad (\text{D.16})$$

$$f_{n+1}(z_{\pm}) = f'_n(z_{\pm}) - 2z_{\pm}f_n(z_{\pm}), \quad f_1(z_{\pm}) = 2z_{\pm}. \quad (\text{D.17})$$

## E Paquete Gaussiano truncado.

El paquete gaussiano normalizado está dado por

$$\psi(x) = \left( \frac{1}{2\pi\sigma^2} \right)^{1/4} e^{-(x-x_0)^2/4\sigma^2} e^{ik_0x}, \quad (\text{E.1})$$

donde  $x_0$  es el centro,  $\sigma$  el ancho y  $E_0 = \hbar^2 k_0^2/2m$  es la energía del paquete. Estamos interesados en encontrar la transformada de Fourier del paquete que es bien conocida en la literatura. Pero nosotros la descompondremos en dos contribuciones. La transformada de Fourier de (E.1) está dada por

$$\begin{aligned} \phi(k) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left( \frac{1}{2\pi\sigma^2} \right)^{1/4} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-(x-x_0)^2/4\sigma^2} e^{-i(k-k_0)x} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left( \frac{1}{2\pi\sigma^2} \right)^{1/4} e^{-i(k-k_0)x_0} e^{-(k-k_0)^2\sigma^2} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-(x+2i\sigma^2(k-k_0))^2/4\sigma^2} = \\ &= 2\sigma \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left( \frac{1}{2\pi\sigma^2} \right)^{1/4} e^{-i(k-k_0)x_0} e^{-(k-k_0)^2\sigma^2} \int_{-\infty}^{\infty} du e^{-u^2} = \\ &= \left( \frac{2\sigma^2}{\pi} \right)^{1/4} e^{-(k-k_0)^2\sigma^2} e^{-i(k-k_0)x_0}, \end{aligned} \quad (\text{E.2})$$

es otra distribución Gaussiana. Sin embargo, una forma alternativa de calcular ésta es descomponer en dos términos la integral (E.2), *i.e.*,

$$\phi(k) = \phi_{<}(k) + \phi_{>}(k), \quad (\text{E.3})$$

donde

$$\phi_{<}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left( \frac{1}{2\pi\sigma^2} \right)^{1/4} \int_{-\infty}^0 dx e^{-(x-x_0)^2/4\sigma^2} e^{-i(k-k_0)x}, \quad (\text{E.4a})$$

$$\phi_{>}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left( \frac{1}{2\pi\sigma^2} \right)^{1/4} \int_0^{\infty} dx e^{-(x+x_0)^2/4\sigma^2} e^{i(k-k_0)x}, \quad (\text{E.4b})$$

*E Paquete Gaussiano truncado.*

donde se hizo el cambio de variable  $x = -x$  en (E.4b) para tener los mismos límites de integración y así poder calcular al mismo tiempo la integral que aparece en las definiciones. Así

$$\begin{aligned}
\xi_{\pm}(k) &= \int_{-\infty}^0 dx e^{-(x \pm x_0)^2/4\sigma^2} e^{\pm i(k-k_0)x} = \\
&= e^{-i(k-k_0)x_0} \int_{-\infty}^{\pm x_0} dx e^{-[x^2 \mp 4i\sigma^2(k-k_0)x]/4\sigma^2} = \\
&= e^{-i(k-k_0)x_0} e^{-(k-k_0)^2\sigma^2} \int_{-\infty}^{\pm x_0} dx e^{-[x \mp 2i\sigma^2(k-k_0)]^2/4\sigma^2} = \\
&= 2\sigma e^{-i(k-k_0)x_0} e^{-(k-k_0)^2\sigma^2} \int_{\mp z}^{\infty} du e^{-u^2} = \\
&= \sqrt{\pi}\sigma e^{-x_0^2/4\sigma^2} \omega(\mp iz), \tag{E.5}
\end{aligned}$$

donde  $z = x_0/2\sigma - i(k - k_0)\sigma$  y  $\omega(z)$  la función de Faddeyeva [30, 46] [Ap. F].

Finalmente, se encuentra

$$\phi_{<}(k) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{\sigma^2}{2\pi} \right)^{1/4} e^{-x_0^2/4\sigma^2} \omega(iz), \tag{E.6a}$$

$$\phi_{>}(k) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{\sigma^2}{2\pi} \right)^{1/4} e^{-x_0^2/4\sigma^2} \omega(-iz), \tag{E.6b}$$

al calcular  $\phi_{<}(k) + \phi_{>}(k)$  e identificar la identidad  $\omega(z) + \omega(-z) = 2e^{-z^2}$  se llega fácilmente a (E.2).

La idea de escribir la transformada de Fourier como la contribución de dos términos, está basada en el hecho de considerar un paquete de ondas gaussiano truncado, *i.e.*, un estado  $\chi(x < 0) = A\psi(x)$  y cero para  $x > 0$ , con  $A$  la constante de normalización y  $\psi(x)$  dada en (E.1). En este caso, la transformada de Fourier de este estado será  $\xi(k) = A\phi_{<}(k)$  y la constante de normalización para el estado truncado está dada por

$$|A|^{-2} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \int_{-\infty}^0 dx e^{-(x-x_0)^2/2\sigma^2} = \frac{1}{2} e^{-x_0^2/2\sigma^2} \omega(iz_0), \tag{E.7}$$

donde  $z_0 = x_0/\sqrt{2}\sigma$ . Así, el paquete

$$\chi(x) = A\left(\frac{1}{2\pi\sigma^2}\right)^{1/4} e^{-(x-x_0)^2/4\sigma^2} e^{ik_0x}, \quad x \leq 0, \quad (\text{E.8})$$

y cero en otro lugar, tiene como transformada de Fourier

$$\xi(k) = \left(\frac{\sigma^2}{2\pi}\right)^{1/4} \frac{\omega(iz)}{\sqrt{\omega(iz_0)}}. \quad (\text{E.9})$$

## F Función de Faddeyeva.

La función de Faddeyeva es definida por [46]

$$\omega(z) = e^{-z^2} \left( 1 + \frac{2i}{\sqrt{\pi}} \int_0^z du e^{u^2} \right). \quad (\text{F.1})$$

Ésta tiene diferentes representaciones, por ejemplo, sólo hay que notar que el término entre paréntesis de (F.1) es la definición de la función de error complementario si se hace el cambio de variable  $u \rightarrow -iu$ . Así  $\omega(z) = e^{-z^2} \operatorname{erfc}(-iz)$ , también es fácil probar en el caso  $\Im\{z\} > 0$  que

$$\omega(z) = \frac{i}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} du \frac{e^{-u^2}}{z-u}, \quad \Im\{z\} > 0, \quad (\text{F.2})$$

la demostración típica es partir de (F.2) y verificar que coincide con (F.1). Sin embargo, las propiedades y representaciones de la función  $\omega(z)$  son ya conocidas, y no sería útil repetir las demostraciones [30, 46]. Nosotros nos enfocaremos en particular a la representación en serie de potencias

$$\omega(z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(iz)^n}{\Gamma\left(\frac{n}{2} + 1\right)}. \quad (\text{F.3})$$

Es fácil probar que la serie (F.3) es convergente ya que cumple  $|z|^n/\Gamma(n/2 + 1) \rightarrow 0$  cuando  $n \rightarrow \infty$ <sup>1</sup>. Además si representamos a  $z$  en forma polar, es claro que las series correspondientes a la parte real e imaginaria están acotadas por series convergentes. El hecho de que (F.3) sea absolutamente convergente nos permite hacer un reordenamiento de los términos de la serie y así poder escribir

$$\omega(z) = e^{-z^2} + f(z), \quad f(z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(iz)^{2n+1}}{\Gamma\left(\frac{2n+1}{2} + 1\right)}, \quad (\text{F.4})$$

<sup>1</sup>En particular podemos ver que para valores pares de  $n = 2m$  cada término de la serie tiende a cero igual que los términos de una función exponencial.

*F Función de Faddeyeva.*

una forma equivalente de demostrar que  $\omega(z)$  se puede escribir como la suma (F.4) es considerar la ecuación diferencial

$$\omega'(z) + 2z\omega(z) = \frac{2i}{\sqrt{\pi}}, \quad \omega(0) = 1. \quad (\text{F.5})$$

Es claro que la solución homogénea de (F.5) es la exponencial que aparece en (F.4); empleando el método de Frobenius a la ecuación inhomogénea con  $f(0) = 0$  nos lleva a la serie (F.4). La pregunta que nos hacemos es, ¿podemos escribir a  $f(z)$  (F.4) en una forma conocida?, la respuesta a esta pregunta es sí, de hecho tiene una forma conocida tan antigua como la exponencial, sólo que históricamente no se introduce el concepto en el cálculo que nos lleva a formas integrales que generan funciones tan complejas. Para exponer esto, introducimos la función  $E_t(\nu, a)$  mediante

$$E_t(\nu, a) \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a^n t^{n+\nu}}{\Gamma(n + \nu + 1)}, \quad (\text{F.6})$$

conocidas como las funciones  $Et$ . Note que,  $e^{at} = E_t(0, a)$ , esto permite entender que, las funciones  $Et$  son una especie de generalización de la función exponencial; esto sería más factible si apareciera  $a^{n+\nu}$  en la serie (F.6), pero esto no es necesario. A partir de (F.6), es fácil ver que se satisface

$$f(z) = izE_t\left(\frac{1}{2}, -z^2\right)\Big|_{t=1}, \quad f(z) = E_t\left(\frac{1}{2}, 1\right)\Big|_{t=(iz)^2}, \quad (\text{F.7})$$

esto muestra que  $f(z)$  es una función conocida, pero ¿dónde aparecen las funciones  $Et$ ? Una forma directa de ver la forma integral de la función de  $Et$  con parámetro  $\nu = 1/2$ , es darnos cuenta que la integral que aparece en (F.1) es la función  $f(z)$ , por lo que ésta tiene una expresión integral. Sin embargo, no es única, ya que en (F.7) tenemos dos formas diferentes de expresar a  $f(z)$ . Para encontrar la forma integral de las funciones  $Et$  es necesario introducir el concepto de integral fraccional; es una generalización de integración múltiple. La integral fraccional se define mediante el operador

$$D_t^{-\nu}g(t) = \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_0^t d\xi (t - \xi)^{\nu-1}g(\xi), \quad \nu > 0, \quad (\text{F.8})$$

conocido como operador de Riemann–Liouville [57]<sup>2</sup>. Note que coincide con integración múltiple cuando  $\nu = n$ ; por notación se escribe  $D^\nu$  cuando se refiere a la derivada fraccional.

<sup>2</sup>En general el operador de Riemann–Liouville se denota como  ${}_aD_t^{-\nu}$ , donde los subíndices corresponden a los límites de integración. Sin embargo, en nuestro caso el límite inferior siempre es cero, por lo que, omitimos su escritura.

Ahora, en términos del operador de Riemann–Liouville las funciones  $E_t$  están dadas por  $E_t(\nu, a) = D^{-\nu}e^{at}$ . La demostración es simple y se escribe

$$\begin{aligned} D_t^{-\nu}e^{at} &= \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_0^t d\xi (t - \xi)^{\nu-1} e^{a\xi} = \frac{e^{at}}{\Gamma(\nu)} \int_0^t du u^{\nu-1} e^{-au} = \\ &= \frac{a^{-\nu} e^{at} \gamma(\nu, at)}{\Gamma(\nu)} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a^n t^{n+\nu}}{\Gamma(n + \nu + 1)} = E_t(\nu, a), \end{aligned} \quad (\text{F.9})$$

donde  $\gamma(\nu, at)$  es la función gamma incompleta y su desarrollo en serie es

$$\gamma(\nu, x) = e^{-x} x^\nu \Gamma(\nu) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{\Gamma(n + \nu + 1)}. \quad (\text{F.10})$$

Lo anterior muestra que la función de Faddeyeva se puede escribir como la aplicación de un operador a la función exponencial, *i.e.*,

$$\omega(z) = \left( 1 + iz D_t^{-1/2} \right) e^{-z^2 t} \Big|_{t=1}, \quad (\text{F.11})$$

$$\omega(z) = \left( 1 + D_t^{-1/2} \right) e^t \Big|_{t=(iz)^2}, \quad (\text{F.12})$$

que corresponde a la igualdad (F.4) empleando la representación (F.7).

Otro aspecto importante de la función de Faddeyeva son las relaciones de simetría en el plano complejo  $z$ . Es fácil probar a partir de (F.11) que se cumple

$$\omega(z) + \omega(-z) = 2e^{-z^2}, \quad (\text{F.13})$$

y también

$$\omega(z^*) = \omega^*(-z). \quad (\text{F.14})$$

Estas relaciones son de gran utilidad cuando se quiere hacer una aproximación numérica de la función.

## G Propagador.

Desarrollamos el propagador para un potencial de alcance finito (extendido de  $a$  a  $b$ ), para simplificar los cálculos usamos notación de Dirac, y definimos el siguiente operador que se aplica a estados de posición

$$\Theta_a^b|x\rangle = \begin{cases} |x\rangle & a < x < b \\ |\mathbf{0}\rangle & \text{otro caso} \end{cases}, \quad (\text{G.1})$$

donde  $|\mathbf{0}\rangle$  es el vector cero, *i.e.*,  $\mathcal{A}|\mathbf{0}\rangle = |\mathbf{0}\rangle$  para un operador arbitrario  $\mathcal{A}$ . Nos referimos a este operador como el *operador paso* y adoptamos la siguiente notación para un vector arbitrario  $|\psi\rangle$

$$\Theta_a^b|\psi\rangle \equiv |_a^b \psi\rangle, \quad (\text{G.2a})$$

$$\Theta_{-\infty}^b|\psi\rangle \equiv \Theta^b|\psi\rangle = |^b \psi\rangle, \quad (\text{G.2b})$$

$$\Theta_a^\infty|\psi\rangle \equiv \Theta_a|\psi\rangle = |_a \psi\rangle, \quad (\text{G.2c})$$

$$\langle x|_a^b \psi\rangle \equiv \langle x|_a^b \psi\rangle, \quad (\text{G.2d})$$

para valores reales  $a < b$ . Note que, por definición, el operador paso satisface

$$\Theta^a + \Theta_a^b + \Theta_b = \mathbf{1}, \quad (\text{G.3a})$$

$$\Theta_{a_1}^{b_1} \Theta_{a_2}^{b_2} = \Theta_{a_3}^{b_3}, \quad (\text{G.3b})$$

donde  $a_3 = \text{máx}\{a_1, a_2\}$ ,  $b_3 = \text{mín}\{b_1, b_2\}$  y

$$\Theta_a^b = \mathbf{0}, \quad b \leq a. \quad (\text{G.3c})$$



*G Propagador.*

Para un potencial arbitrario extendido de  $a$  a  $b$ , podemos escribir las soluciones de la ecuación de Schrödinger en términos del operador paso como

$$|\chi_k^+\rangle = |^a k\rangle + \mathbf{r} |^a -k\rangle + |^b_a \chi_k^+\rangle + \mathbf{t} |^b k\rangle, \quad (\text{G.4a})$$

para los estados de dispersión de izquierda a derecha y

$$|\chi_k^-\rangle = \mathbf{t}' |^a -k\rangle + |^b_a \chi_k^-\rangle + |^b -k\rangle + \mathbf{r}' |^b k\rangle, \quad (\text{G.4b})$$

para los estados de dispersión de derecha a izquierda, donde  $\mathbf{t}, \mathbf{t}', \mathbf{r}$  y  $\mathbf{r}'$  son las amplitudes de transmisión y reflexión respectivamente, con  $\mathbf{t} = \mathbf{t}'$  y

$$\langle x|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx}. \quad (\text{G.5})$$

Entonces la solución más general al problema de dispersión la podemos escribir como

$$|\psi_k^\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ |\chi_k^+\rangle \pm |\chi_k^-\rangle \right], \quad k > 0. \quad (\text{G.6})$$

Para el caso particular en que nuestro potencial tenga estados ligados los denotaremos explícitamente como  $|\beta\rangle$  con energía correspondiente  $\varepsilon_\beta = -\hbar^2\beta^2/2m$ . Dado que los vectores forman una base completa del continuo se cumple la condición<sup>1</sup>

$$\mathbf{1} = \sum_{s=\pm} \int' dk |\psi_k^s\rangle \langle \psi_k^s| = \int_{-\infty}^{\infty} dk |k\rangle \langle k|, \quad (\text{G.7})$$

donde simplificamos la contribución de los estados ligados y la integral se hace sobre valores  $k > 0$ , esto es

<sup>1</sup>Cabe mencionar que esta igualdad es válida por la siguiente razón: si denotamos por  $\mathbf{H}_S$  el espacio vectorial generado por los vectores  $|\psi_k^s\rangle$  [Eq. G.6] (incluyendo estados ligados) y por  $\mathbf{H}_0$  el espacio vectorial generado por los vectores  $|k\rangle$  [Ec. G.5]. Tenemos que, si  $|\eta\rangle \in \mathbf{H}_S$  entonces  $|\eta\rangle \in \mathbf{H}_0$  ya que  $\langle \eta|\eta\rangle < \infty$ , *i.e.*, es cuadráticamente integrable, por lo tanto  $\mathbf{H}_S \subseteq \mathbf{H}_0$ , por otro lado, si  $|\eta\rangle \in \mathbf{H}_0$  sabemos que el dominio de la proyección  $\eta(x) = \langle x|\eta\rangle$  son los reales, luego, el dominio de las proyecciones  $\psi_k^s(x) = \langle x|\psi_k^s\rangle$  son los reales, por lo que  $\mathbf{H}_S$  genera todas las funciones complejas (cuadráticamente integrables) con dominio en los reales, por lo tanto  $|\eta\rangle \in \mathbf{H}_S$ , *i.e.*,  $\mathbf{H}_0 \subseteq \mathbf{H}_S$ . Esto muestra que  $\mathbf{H}_0 = \mathbf{H}_S$  y dado que la identidad del espacio de operadores que se aplican sobre  $\mathbf{H}_S$  es única, se satisface la igualdad. Note que para que sea válida la igualdad se usa el hecho de que el dominio de las proyecciones en el espacio de posición  $x$  es el mismo para ambos espacios vectoriales.

$$\sum_s \int' |\psi_k^s\rangle\langle\psi_k^s| = \sum_s \int_0^\infty dk |\chi_k^s\rangle\langle\chi_k^s| + \sum_\beta |\beta\rangle\langle\beta|. \quad (\text{G.8})$$

Manipulando el producto directo del espectro continuo [Ecs. G.4a, G.4b] se obtiene

$$\begin{aligned} |\chi_k^+\rangle\langle\chi_k^+| &= |^a k\rangle\langle k^a| + \mathbf{r}^* |^a k\rangle\langle -k^a| + |^a k\rangle\langle\chi_k^+{}^b| + \mathbf{t}^* |^a k\rangle\langle k^b| + \\ &+ \mathbf{r} |^a -k\rangle\langle k^a| + \mathbf{R} |^a -k\rangle\langle -k^a| + \mathbf{r} |^a -k\rangle\langle\chi_k^+{}^b| + \mathbf{r} \mathbf{t}^* |^a -k\rangle\langle k^b| + \\ &+ |^b \chi_k^+\rangle\langle k^a| + \mathbf{r}^* |^b \chi_k^+\rangle\langle -k^a| + |^b \chi_k^+\rangle\langle\chi_k^+{}^b| + \mathbf{t}^* |^b \chi_k^+\rangle\langle k^b| + \\ &+ \mathbf{t} |^b k\rangle\langle k^a| + \mathbf{t} \mathbf{r}^* |^b k\rangle\langle -k^a| + \mathbf{t} |^b k\rangle\langle\chi_k^+{}^b| + \mathbf{T} |^b k\rangle\langle k^b|, \end{aligned} \quad (\text{G.9a})$$

y

$$\begin{aligned} |\chi_k^-\rangle\langle\chi_k^-| &= \mathbf{T} |^a -k\rangle\langle -k^a| + \mathbf{t} |^a -k\rangle\langle\chi_k^-{}^b| + \mathbf{t} |^a -k\rangle\langle -k^b| + \mathbf{t} \mathbf{r}'^* |^a -k\rangle\langle k^b| + \\ &+ \mathbf{t}^* |^b \chi_k^-\rangle\langle -k^a| + |^b \chi_k^-\rangle\langle\chi_k^-{}^b| + |^b \chi_k^-\rangle\langle -k^b| + \mathbf{r}'^* |^b \chi_k^-\rangle\langle k^b| + \\ &+ \mathbf{t}^* |^b -k\rangle\langle -k^a| + |^b -k\rangle\langle\chi_k^-{}^b| + |^b -k\rangle\langle -k^b| + \mathbf{r}'^* |^b -k\rangle\langle k^b| + \\ &+ \mathbf{t}^* \mathbf{r}' |^b k\rangle\langle -k^a| + \mathbf{r}' |^b k\rangle\langle\chi_k^-{}^b| + \mathbf{r}' |^b k\rangle\langle -k^b| + \mathbf{R}' |^b k\rangle\langle k^b|, \end{aligned} \quad (\text{G.9b})$$

donde  $\mathbf{T} = |\mathbf{t}|^2 = |\mathbf{t}'|^2$ ,  $\mathbf{R} = |\mathbf{r}|^2$  y  $\mathbf{R}' = |\mathbf{r}'|^2$ , note que  $\mathbf{R} = \mathbf{R}'$ . Sustituimos estas ecuaciones en (G.8) y usamos las relaciones  $\mathbf{t}(-k) = \mathbf{t}^*(k)$ ,  $\mathbf{r}(-k) = \mathbf{r}^*(k)$ ,  $\mathbf{r}'(-k) = \mathbf{r}'^*(k)$  y  $\mathbf{r}' \mathbf{t}^* + \mathbf{r}^* \mathbf{t} = 0$  [Ap. A] para encontrar

*G Propagador.*

$$\begin{aligned}
\sum_s \int dk |\chi_k^s\rangle\langle\chi_k^s| &= \int_{-\infty}^{\infty} dk |k\rangle\langle k| + \sum_{\beta} |\beta\rangle\langle\beta| + \\
&+ \int_0^{\infty} dk \left[ |^b_a \chi_k^+\rangle\langle\chi_k^+|^b_a| + |^b_a \chi_k^-\rangle\langle\chi_k^-|^b_a| \right] - \int_{-\infty}^{\infty} dk |^b_a k\rangle\langle k|^b_a| + \\
&+ \int_{-\infty}^{\infty} dk \mathbf{r} |^a - k\rangle\langle k|^a| + \int_{-\infty}^{\infty} dk \mathbf{r}' |^b k\rangle\langle -k|^b| + \\
&+ \int_0^{\infty} dk \left[ |^b_a \chi_k^+\rangle\langle k|^a| + \mathbf{r}^* |^b_a \chi_k^+\rangle\langle -k|^a| + \mathbf{t}^* |^b_a \chi_k^-\rangle\langle -k|^a| \right] + \\
&+ \int_0^{\infty} dk \left[ |^a k\rangle\langle\chi_k^+|^b_a| + \mathbf{r} |^a - k\rangle\langle\chi_k^+|^b_a| + \mathbf{t} |^a - k\rangle\langle\chi_k^-|^b_a| \right] + \\
&+ \int_{-\infty}^{\infty} dk (\mathbf{t} - 1) |^b k\rangle\langle k|^a| + \int_{-\infty}^{\infty} dk (\mathbf{t}^* - 1) |^a k\rangle\langle k|^b| + \\
&+ \int_0^{\infty} dk \left[ \mathbf{t} |^b k\rangle\langle\chi_k^+|^b_a| + \mathbf{r}' |^b k\rangle\langle\chi_k^-|^b_a| + |^b - k\rangle\langle\chi_k^-|^b_a| \right] + \\
&+ \int_0^{\infty} dk \left[ \mathbf{t}^* |^b_a \chi_k^+\rangle\langle k|^b| + \mathbf{r}'^* |^b_a \chi_k^-\rangle\langle k|^b| + |^b_a \chi_k^-\rangle\langle -k|^b| \right]. \quad (\text{G.10})
\end{aligned}$$

Comparando esta igualdad con [Eq. G.7] concluimos que, la contribución de los estados ligados y el resto de las integrales es cero. Además, si usamos la identidad  $\langle x'|x\rangle = \delta(x - x')$  se pueden probar nueve identidades entre las diferentes contribuciones de los estados ligados y los del continuo, por ejemplo, si suponemos que  $x, x' < a$  encontramos

$$\sum_{\beta} \langle x'|\beta\rangle\langle\beta|x\rangle = - \int_{-\infty}^{\infty} dk \mathbf{r} \langle x'^a| - k\rangle\langle k|^a x\rangle. \quad (\text{G.11})$$

El interés de escribir la identidad en términos del operador paso, es poder separar las diferentes contribuciones del estado inicial de una región del espacio a otra. Recordemos que el operador de evolución es

$$\mathcal{U}(t) = e^{-i\mathcal{H}t/\hbar}, \quad (\text{G.12})$$

donde  $\mathcal{H}$  es el operador Hamiltoniano correspondiente al problema. Así, si suponemos que a  $t = 0$  el estado del sistema es  $|\psi_0\rangle$  tenemos que el estado del sistema a un tiempo  $t \neq 0$  está dado por  $|\psi(t)\rangle = \mathcal{U}(t)|\psi_0\rangle$ . Sin embargo, en general la evolución del estado depende de la base completa [Ec. G.6], en otras palabras, necesitamos conocer las diferentes contribuciones de las proyecciones  $\langle\psi_k^\pm|\psi_0\rangle$  para encontrar la solución exacta. Una idea interesante para poder simplificar estos cálculos es usar la identidad  $|\psi_0\rangle = |^a\psi_0\rangle + |^b_a\psi_0\rangle + |^b\psi_0\rangle$ , así la solución se escribe como

$$|\psi(t)\rangle = \mathcal{U}(t)|^a\psi_0\rangle + \mathcal{U}(t)|^b_a\psi_0\rangle + \mathcal{U}(t)|^b\psi_0\rangle. \quad (\text{G.13})$$

Esta igualdad nos permite definir tres propagadores

$$K^a(t) \equiv \mathcal{U}(t)\Theta^a, \quad (\text{G.14a})$$

$$K_a^b(t) \equiv \mathcal{U}(t)\Theta_a^b, \quad (\text{G.14b})$$

$$K_b(t) \equiv \mathcal{U}(t)\Theta_b. \quad (\text{G.14c})$$

Note que el operador de paso [Ec. G.1] no conmuta con el operador de evolución. Introduciendo la identidad [Ec. G.8] entre el operador evolución y el operador paso en las ecuaciones (G.14a – G.14c), encontramos

$$\begin{aligned} K^a(t) &= \mathcal{U}(t) \left[ \sum_{\beta} |\beta\rangle\langle\beta^a| + \int_{-\infty}^{\infty} dk |\chi_k^+\rangle\langle k^a| \right] - \\ &- \mathcal{U}(t) \left[ \int_{-\infty}^{\infty} dk |^b_a\chi_k^+\rangle\langle k^a| + \sum_{\beta} |^b_a\beta\rangle\langle\beta^a| \right], \end{aligned} \quad (\text{G.15a})$$

$$K_a^b(t) = \mathcal{U}(t) \left[ \sum_{\beta} |\beta\rangle\langle\beta^b_a| + \int_0^{\infty} dk \left( |\chi_k^+\rangle\langle\chi_k^b_a| + |\chi_k^-\rangle\langle\chi_k^b_a| \right) \right], \quad (\text{G.15b})$$

$$\begin{aligned} K_b(t) &= \mathcal{U}(t) \left[ \sum_{\beta} |\beta\rangle\langle\beta^b| + \int_{-\infty}^{\infty} dk |\chi_k^-\rangle\langle -k^b| \right] - \\ &- \mathcal{U}(t) \left[ \int_{-\infty}^{\infty} dk |^b_a\chi_k^-\rangle\langle k^b| + \sum_{\beta} |^b_a\beta\rangle\langle\beta^b| \right]. \end{aligned} \quad (\text{G.15c})$$

*G Propagador.*

Se puede mostrar que el segundo término de las ecuaciones (G.15a) y (G.15c) es cero. Veámoslo para el caso particular de la ecuación (G.15a). Consideremos el elemento de matriz  $\langle x', x \rangle$  del término integral, i.e.,

$$\int_{-\infty}^{\infty} dk \langle x' | \chi_k^+ \rangle \langle k |^a x \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk \chi_{int}^+(x'; k) e^{-ikx}, \quad a < x' < b, \quad x < a, \quad (\text{G.16})$$

donde  $\chi_{int}^+(x'; k) = \langle x' | \chi_k^+ \rangle$  es la solución interna del estado de dispersión correspondiente. Sin embargo, para valores grandes de  $k$  la solución interna se puede aproximar como  $\chi_{int}^+(x'; k) \sim \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \mathbf{t}(k) e^{ikx'}$ , si extendemos ésta a valores complejos  $k$  se tiene que el comportamiento asintótico del integrando es

$$\chi_{int}^+(x'; k) e^{-ikx} \sim \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \mathbf{t}(k) e^{ik(x'-x)} \rightarrow 0, \quad \text{cuando } |k| \rightarrow \infty \text{ con } \text{Im}\{k\} > 0, \quad (\text{G.17})$$

ya que  $x' - x > 0$ . Esta relación nos permite cerrar la trayectoria de integración por arriba del plano complejo  $k$ , y usando el teorema de Cauchy, encontramos

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk \chi_{int}^+(x'; k) e^{-ikx} = i\sqrt{2\pi} \sum \text{Res} \left( \chi_{int}^+(x'; k) e^{-ikx} \right), \quad (\text{G.18})$$

donde la suma se hace sobre todos los polos de la solución interna, éstos corresponden a los valores complejos  $k = i\beta$  con  $\beta > 0$  (de los estados ligados) y el residuo correspondiente es dado por

$$\lim_{k \rightarrow i\beta} (k - i\beta) \chi_{int}^+(x'; k) e^{-ikx} = \frac{i}{\sqrt{2\pi}} u_\beta(a) u_\beta(x') e^{\beta(x-a)}, \quad (\text{G.19})$$

donde se usa la expansión en resonancias de  $\chi_{int}(x; k)$  para encontrar el residuo. Ya que el estado ligado para  $x < a$  está fuera de la región de interacción, tenemos que  $u_\beta(x) = u_\beta(a) e^{\beta(x-a)}$  para  $x < a$ . Además, sabemos que los estados ligados tienen funciones reales (o fase constante), por lo tanto encontramos que

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk \chi_{int}^+(x'; k) e^{-ikx} = - \sum_{\beta} u_\beta(x') u_\beta(x) = - \langle x' | \left( \sum_{\beta} | \begin{smallmatrix} b \\ a \end{smallmatrix} \beta \rangle \langle \beta \begin{smallmatrix} a \\ \end{smallmatrix} | \right) | x \rangle, \quad (\text{G.20})$$

esto muestra que el segundo término de la ecuación (G.15a) es cero. Usando un análisis similar se puede probar que el segundo término de la ecuación (G.15c) es cero. Por lo tanto, se tiene

$$K^a(t) = \mathcal{U}(t) \left[ \sum_{\beta} |\beta\rangle \langle \beta^a| + \int_{-\infty}^{\infty} dk |\chi_k^+\rangle \langle k^a| \right], \quad (\text{G.21a})$$

$$K_a^b(t) = \mathcal{U}(t) \left[ \sum_{\beta} |\beta\rangle \langle \beta^b| + \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} dk \left( |\chi_k^+\rangle \langle \chi_k^+{}^b| + |\chi_k^-\rangle \langle \chi_k^-{}^b| \right) \right], \quad (\text{G.21b})$$

$$K_b(t) = \mathcal{U}(t) \left[ \sum_{\beta} |\beta\rangle \langle \beta^b| + \int_{-\infty}^{\infty} dk |\chi_k^-\rangle \langle -k^b| \right], \quad (\text{G.21c})$$

donde extendemos la integral en (G.21b) a todo el espectro de momentos. Finalmente escribimos la contribución de los estados ligados en forma integral semejante a la usada anteriormente [Ec. G.8]; para no escribir explícitamente la contribución de estados ligados. Aplicamos el operador de evolución para encontrar

$$K^a(t) = \int' dk e^{-i\hbar k^2 t/2m} |\chi_k^+\rangle \langle k^a|, \quad (\text{G.22a})$$

$$K_a^b(t) = \frac{1}{2} \int' dk e^{-i\hbar k^2 t/2m} \left( |\chi_k^+\rangle \langle \chi_k^+{}^b| + |\chi_k^-\rangle \langle \chi_k^-{}^b| \right), \quad (\text{G.22b})$$

$$K_b(t) = \int' dk e^{-i\hbar k^2 t/2m} |\chi_k^-\rangle \langle -k^b|; \quad (\text{G.22c})$$

una posible trayectoria de integración se muestra en la figura G.1. Claramente en ausencia de estados ligados, las integrales son de  $-\infty$  a  $\infty$ . Además si el estado inicial satisface  $\Theta^a |\psi_0\rangle = |\psi_0\rangle$  (condición del obturador de izquierda a derecha) se tendrá que la evolución de este estado es dada por

$$|\psi(t)\rangle = \int' dk \langle k|\psi_0\rangle e^{-i\hbar k^2 t/2m} |\chi_k^+\rangle, \quad \Theta^a |\psi_0\rangle = |\psi_0\rangle, \quad (\text{G.23})$$

donde  $\langle k|\psi_0\rangle$  es la transformada de Fourier del estado inicial.

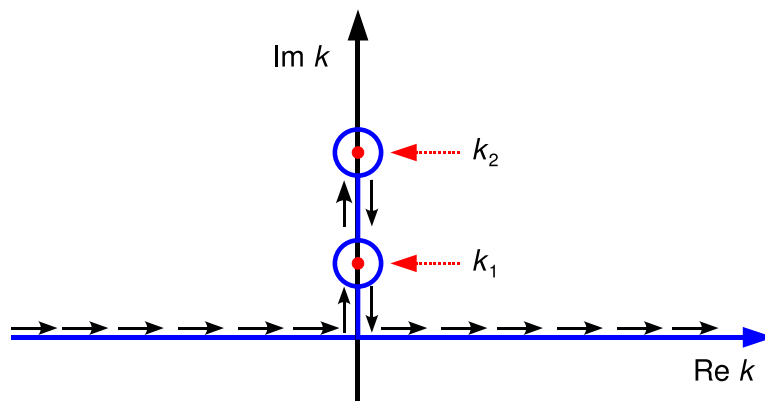


Figura G.1: Se muestra la trayectoria de integración correspondiente a las ecuaciones (G.22a–G.22c), para el caso particular de un potencial que contenga dos estados ligados, denotados por  $k_1 = i\beta_1$  y  $k_2 = i\beta_2$ .

# Referencias.

- [1] **Davies, J. H.**, *The Physics of Low-dimensional Semiconductors: An Introduction*, Cambridge University Press, 1998.
- [2] **Chang, L. L., Esaki, L. and Tsu, R.**, *Resonant tunneling in semiconductor double barriers*, Appl. Phys. Lett., Vol. 24, No. 12, pp. 593–595, 1974.
- [3] **Sollner, T. C. L. G., Goodhue, W. D., Tannenwald, P. E., Parker, C. D. and Peck, D. D.**, *Resonant tunneling through quantum wells at frequencies up to 2.5 THz*, Appl. Phys. Lett., Vol. 43, No. 6, pp. 588–590, 1983.
- [4] **García-Calderón, G., Romo, R. and Rubio, A.**, *Description of overlapping resonances in multibarrier tunneling structures*, Phys. Rev. B, Vol. 47, pp. 9572–9576, 1993.
- [5] **García-Calderón, G., Romo, R. and Rubio, A.**, *Description of resonant tunneling near threshold.*, Phys. Rev. B, Vol. 50, pp. 15142–15147, 1994.
- [6] **García-Calderón, G.**, *Resonant States and the Decay Process: Symmetries in Physics*, chap. 17, p. 252, Springer–Verlag Berlin, 1992.
- [7] **Gamow, G.**, *Zur quantentheorie des atomkernes*, Z. Phys., Vol. 51, pp. 204–212, 1928.
- [8] **de Llano, M.**, *Mecánica Cuántica*, chap. 1, p. 10, Las prensas de Ciencias, 1996.
- [9] **Moshinsky, M.**, *Diffraction in Time*, Phys. Rev., Vol. 88, No. 3, pp. 625–631, Nov 1952.
- [10] **Yamada, N., García-Calderón, G. and Villavicencio, J.**, *Quantum–shutter approach to tunneling time scales with wave packets*, Phys. Rev. A, Vol. 72, pp. 012106, 2005.
- [11] **García-Calderón, G. and Rubio, A.**, *Transient effects and delay time in the dynamics of resonant tunneling*, Phys. Rev. A, Vol. 55, pp. 3361–3370, 1997.
- [12] **Hernández, A. and García-Calderón, G.**, *Quantum shutter transient solutions and the delay time for the  $\delta$  potential.*, Phys. Rev. A, Vol. 68, pp. 014104, 2003.
- [13] **Romo, R. and García-Calderón, G.**, *Strong overlap and transmission in triple–barrier resonant structures.*, Phys. Rev. B, Vol. 49, pp. 14016–14019, 1994.
- [14] **Hooper, I. R., Preist, T. W. and Sambles, J. R.**, *Making Tunnel Barriers (Including Metals) Transparent.*, Phys. Rev. Lett., Vol. 97, pp. 053902, 2006.
- [15] **García-Calderón, G. and Villavicencio, J.**, *Effect of antibound states in single barrier tunneling.*, Phys. Rev. A, Vol. 71, pp. 024103, 2005.



## REFERENCIAS.

- [16] **Stahlhofen, A. A.**, *Completely transparent potentials for the Schrödinger equation*, Phys. Rev. A, Vol. 51, No. 2, pp. 934–943, Feb 1995.
- [17] **Kurasov, P.** and **Luger, A.**, *Reflectionless Potentials and Point Interactions in Pontryagin Spaces*, Letters in Mathematical Physics, Vol. 73, pp. 109–122, 2005.
- [18] **Maydanyuk, S. P.**, *SUSY-hierarchy of one-dimensional reflectionless potentials*, Annals of Physics, Vol. 316, pp. 440–465, 2005.
- [19] **Kerimov, G. A.** and **Ventura, A.**, *Group-theoretical approach to reflectionless potentials*, J. Math. Phys., Vol. 47, No. 8, pp. 082108, 2006.
- [20] **Landau, L. D.** and **Lifshitz, E. M.**, *Quantum Mechanics (Non-relativistic Theory)*, chap. 3, p. 81, Pergamon Press, 1977.
- [21] **Cai, W.**, **Chettiar, U. K.**, **Kildishev, A. V.** and **Shalaev, V. M.**, *Optical cloaking with metamaterials*, Nature Photonics, Vol. 1, pp. 224–227, 2007.
- [22] **Cai, W.**, **Chettiar, U. K.**, **Kildishev, A. V.**, **Shalaev, V. M.** and **Milton, G. W.**, *Nonmagnetic cloak with minimized scattering*, Applied Physics Letters, Vol. 91, No. 11, pp. 111105, 2007.
- [23] **Zhang, S.**, **Genov, D. A.**, **Sun, C.** and **Zhang, X.**, *Cloaking of Matter Waves*, Physical Review Letters, Vol. 100, No. 12, pp. 123002, 2008.
- [24] **Greenleaf, A.**, **Kurylev, Y.**, **Lassas, M.** and **Uhlmann, G.**, *Approximate Quantum Cloaking and Almost-Trapped States*, Physical Review Letters, Vol. 101, No. 22, pp. 220404, 2008.
- [25] **Jiang, W. X.**, **Chin, J. Y.**, **Li, Z.**, **Cheng, Q.**, **Liu, R.** and **Cui, T. J.**, *Analytical design of conformally invisible cloaks for arbitrarily shaped objects*, Physical Review E (Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics), Vol. 77, No. 6, pp. 066607, 2008.
- [26] **Zhao, Y.** and **Hao, Y.**, *Full-wave parallel dispersive finite-difference time-domain modeling of three-dimensional electromagnetic cloaking structures*, arXiv:0903.4204v1 [physics.comp-ph] 24 Mar 2009.
- [27] **Newton, R. G.**, *Scattering theory of Waves and Particles*, Springer-Verlag, 1982.
- [28] **García-Calderón, G.**, **Mateos, J. L.** and **Moshinsky, M.**, *Resonant Spectra and the Time Evolution of the Survival and Nonescape Probabilities*, Phys. Rev. Lett., Vol. 74, pp. 337–340, 1995.
- [29] **García-Calderón, G.**, **Romo, R.** and **Rubio, A.**, *Effect of disorder in specific realizations of multibarrier random systems.*, Phys. Rev. B, Vol. 56, pp. 4845–4852, 1997.
- [30] **Abramowitz, M.** and **Stegun, I.**, *Handbook of Mathematical Functions*, Dover, N. Y., 1968.
- [31] **Cordero, S.** and **García-Calderón, G.**, *Invisibility of quantum systems to tunneling of matter waves*, Phys. Rev. A, Vol. 79, No. 5, pp. 052103, 2009.

- [32] **Landauer, R. and Martin, T.**, *Barrier interaction time in tunneling*, Rev. Mod. Phys., Vol. 66, pp. 217–228, 1994.
- [33] **Smith, F. T.**, *Lifetime Matrix in Collision Theory*, Phys. Rev., Vol. 118, No. 1, pp. 349–356, Apr 1960.
- [34] **Hauge, E. H., Falck, J. P. and Fjeldly, T. A.**, *Transmission and reflection times for scattering of wave packets off tunneling barriers*, Phys. Rev. B, Vol. 36, No. 8, pp. 4203–4214, Sep 1987.
- [35] **García-Calderón, G. and Rubio, A.**, *Properties of the dwell time and the transmission and reflection times for resonant tunneling*, Solid State Commun., Vol. 71, pp. 237–241, 1989.
- [36] **Romo, R., Villavicencio, J. and García-Calderón, G.**, *Transient tunneling effects of resonance doublets in triple barrier systems*, Phys. Rev. B, Vol. 66, pp. 033108, 2002.
- [37] **Villavicencio, J., Romo, R. and Cruz, E.**, *Tunneling and delay time of cutoff Gaussian wave packets*, Phys. Rev. A, Vol. 75, pp. 012111, 2007.
- [38] **Elberfeld, W. and Kleber, M.**, *Time-dependent tunneling through thin barriers: A simple analytical solution*, Am. J. Phys., Vol. 56, pp. 154–159, 1998.
- [39] **Pérez, A. L., Brouard, S. and Muga, J. G.**, *Explicit solution for a Gaussian wave packet impinging on a square barrier*, J. Phys. A: Math. Gen., Vol. 36, pp. 2371–2378, 2003.
- [40] **Andreatta, M. A. and Dodonov, V. V.**, *Tunnelling of narrow Gaussian packets through delta potentials*, J. Phys. A: Math. Gen., Vol. 37, pp. 2423–2438, 2004.
- [41] **Simanjuntak, H. P. and Pereyra, P.**, *Evolution and tunneling time of electron wave packets through a superlattice*, Phys. Rev. B, Vol. 67, pp. 045301, 2003.
- [42] **Støvneng, J. A. and Hauge, E. H.**, *Time-dependent resonant tunneling of wave packets in the tight-binding model*, Phys. Rev. B, Vol. 44, pp. 13582, 1991.
- [43] **Mishounyi, V. A., del Castillo, I. C. H., Gorbachev, A. Y. and Martínez, A. L.**, *Tecnologías epitaxiales de cristales semiconductores*, Avance y Perspectiva, Vol. 21, pp. 21–31, enero–febrero 2002.
- [44] **Szriftgiser, P., Guéry-Odelin, D., Arndt, M. and Dalibard, J.**, *Atomic Wave Diffraction and Interference Using Temporal Slits*, Phys. Rev. Lett., Vol. 77, No. 1, pp. 4–7, Jul 1996.
- [45] **Brouard, S. and Muga, J. G.**, *Transient and asymptotic effects in tunneling*, Phys. Rev. A, Vol. 54, No. 4, pp. 3055–3066, Oct 1996.
- [46] **Faddeyeva, V.Ñ. and Terentev, M.Ñ.**, Tables of values of the function

$$\omega(z) = e^{-z^2} \left( 1 + \frac{2i}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{t^2} dt \right),$$

for complex argument, Edited by Academician V. A. Fock, printed in Great Britain by Pergamon Printing & Art Services LTD. London, 1961.

## REFERENCIAS.

- [47] **Poppe, G. P. M.** and **Wijers, C. M. J.**, *More efficient computation of the complex error function*, ACM Trans. Math. Softw., Vol. 16, No. 1, pp. 38–46, 1990.
- [48] **Wulf, U.** and **Skalozub, V. V.**, *Pulse propagation in resonant tunneling*, Phys. Rev. B, Vol. 72, pp. 165331, 2005.
- [49] **Malyshev, A. V.**, **Orellana, P. A.** and **Domínguez-Adame, F.**, *Quantum electron splitter based on two quantum dots attached to leads*, Phys. Rev. B, Vol. 74, No. 3, pp. 033308, 2006.
- [50] **Wulf, U.**, **Skalozub, V.** and **Zakharov, A.**, *Multi-saddle-point approximation for pulse propagation in resonant tunneling*, Phys. Rev. B, Vol. 77, No. 4, pp. 045318, 2008.
- [51] **Villavicencio, J.** and **Romo, R.**, *Resonance forerunners in superlattices*, Phys. Rev. B, Vol. 68, pp. 153311, 2003.
- [52] **Cordero, S.** and **García-Calderón, G.**, *Transient effects and reconstruction of the energy spectra in the time evolution of transmitted Gaussian wave packets*, submitted to JPA [arXiv:0906.4994v1](https://arxiv.org/abs/0906.4994v1).
- [53] **García-Calderón, G.**, **Villavicencio, J.** and **Yamada, N.**, *Equivalence between the real-time Feynman histories and the quantum-shutter approaches for the “passage time” in tunneling.*, Phys. Rev. A, Vol. 67, pp. 052106, 2003.
- [54] **Peisakhovich, Y. G.** and **Shtygashev, A. A.**, *Formation of a quasistationary state by scattering of wave packets on a finite lattice*, Phys. Rev. B, Vol. 77, No. 7, pp. 075326, 2008.
- [55] **Muga, J. G.**, **Delgado, V.** and **Snider, R. F.**, *Dwell time and asymptotic behavior of the probability density*, Phys. Rev. B, Vol. 52, No. 23, pp. 16381–16384, Dec 1995.
- [56] **Peisakhovich, Y. G.** and **Shtygashev, A. A.**, *Formation of a quasistationary state by Gaussian wave packet scattering on a lattice of  $N$  identical delta potentials*, Phys. Rev. B, Vol. 77, No. 7, pp. 075327, 2008.
- [57] **Tarasov, V. E.**, *Weyl Quantization of Fractional Derivatives*, Journal of Mathematical Physics, Vol. 49, pp. 102112, 2008.