Universidad Nacional Autónoma de México

Facultad de Ciencias

Efectos del desorden controlado en sistemas finitos periódicos

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

FÍSICO

P R E S E N T A :

ADÁN GONZÁLEZ SALAZAR

TUTOR:
DR. MAURICIO FORTES BESPROSVANI

2010

Hoja de datos del jurado

1. Datos del alumno
   González
   Salazar
   Adán
   (596) 9242168
   Universidad Nacional Autónoma de México
   Facultad de Ciencias
   Física
   403062302
2. Datos del tutor
   Dr. Mauricio
   Fortes
   Besprosvani
3. Datos del sinodal 1
   Dr. Manuel
   de Llano
   de la Garza
4. Datos del sinodal 2
   Dr. Jacques
   Soullard
   Saintrais
5. Datos del sinodal 3
   Dr. Miguel Ángel
   Solís
   Atala
6. Datos del sinodal 4
   Dra. Marcela Dolores
   Grether
   González
7. Datos de la tesis
   Efectos del desorden controlado en sistemas finitos periódicos
   126 p.
   2010

A mi madre Catalina
y a mi hermana Minerva

Agradecimientos

Con esta tesis finalizo una etapa muy importante de mi vida, una etapa que me ha ayudado a crecer como ser humano.

Por tal motivo, quiero agradecer a la UNAM por haberme dado a todos aquellos profesores que contribuyeron en mi formación durante este tiempo.

Agradezco al Dr. Mauricio Fortes Besprosvani por haber aceptado dirigir esta tesis. Agradezco al Dr. Miguel Ángel Solís Atala, al Dr. Francisco Javier Sevilla Pérez y a la M. C. Patricia Salas Casales, pues con sus sugerencias ayudaron a enriquecer este trabajo.

También, al realizar esta tesis, agradezco el apoyo económico recibido a través del PAPIIT.

Agradezco muy especialmente a mis padres por haberme dedicado su vida en mis primeros años, por todo su cariño, apoyo y comprensión y por haberme dado también la libertad de hacer de mi vida lo que he querido.

Agradezco a mi hermana Minerva por todo su apoyo incondicional durante todos estos largos años, me he sentido contagiado con su ejemplo de superación. Agradezco a mis demás hermanos por haber contribuido en mí de una u otra forma.

Y agradezco también a todas esas personas que no menciono aquí pero que han estado conmigo en los momentos alegres y difíciles de mi vida.

Adán González Salazar

Índice general

Índice de figuras

Resumen

En esta tesis se estudian los sistemas finitos unidimensionales usando un tipo particular del potencial de Kronig-Penney: el potencial delta de Dirac. Con éste se modela cada centro dispersor (átomo o molécula) de tales sistemas.

Exite una infinidad de formas para configurar un sistema en particular con N centros dispersores, sin embargo, en esta tesis se escogen las más representativas y resultan cuando

1. Se da el mismo espaciamiento entre las posiciones de los potenciales delta y se asigna una intensidad común a todos ellos, con esta configuración representamos al sistema ordenado.

2. A partir del sistema ordenado, se eliminan y/o agregan potenciales delta en sitios fuera de la red.

3. Se modifican ligeramente de forma aleatoria las posiciones y/o las intensidades ordenadas de todos los potenciales delta.

Así, se analizan sistemas con 1, 2, 25 y 50 potenciales delta atendiendo algunas configuraciones anteriores. En tal análisis se estudian

1. La estructura de bandas en los espectros de energías de estos sistemas.

2. Las propiedades generales de la densidad de probabilidad de la partícula como función del desorden.

3. Los efectos del desorden en los coeficientes de transmisión y reflexión.

Para realizar estos análisis, debido a la complejidad de manipular las ecuaciones de dispersión para los sistemas con 25 y 50 potenciales delta, se implementan algortimos en el lenguaje Mathematica, los cuales aparecen en el Apéndice de esta tesis.

Capítulo 1

Introducción

En la ciencia moderna, la física del estado sólido juega un papel muy importante. Gracias a ello han sido posibles enormes avances en la creación de nuevos materiales con propiedades únicas, en la electrónica, la nanotecnología, etc.

Los sólidos se caracterizan principalmente porque oponen resistencia a cambios de forma y de volumen y pueden clasificarse como cristalinos y amorfos [1]. En los sólidos cristalinos existe una repetición perenne de los mismos elementos (átomos, grupos de átomos, moléculas) en su estructura y pueden modelarse usando el potencial de Kronig-Penney (KP) [2]. En éste, una partícula se mueve bajo la influencia de una cadena lineal infinita de potenciales rectangulares igualmente espaciados [3]. Además, en este modelo se considera al sólido de longitud infinita y se considera que el potencial asociado a cada elemento ocupa un cierto intervalo de distancia. Al resolver la ecuación de Schrödinger unidimensional e independiente del tiempo para este potencial periódico, se pueden obtener características de interés del sistema.

Considerando el importante avance de la nanociencia en los últimos años, en donde se estudian sistemas de unos pocos nanómetros (como los fullerenos, los nanotubos [4, 5], los superconductores de alta temperatura crítica [6], etc.), en esta tesis se estudiarán los sistemas finitos restringidos al caso unidimensional de longitud L y con N elementos. Se estudiarán sistemas con un máximo de 100 elementos. Se puede seguir utilizando el potencial de KP para simular cada elemento del sólido confinándolos dentro de una caja de potencial de paredes infinitas para modelar sus extremos, sin embargo, en el límite del potencial de KP, cuando la longitud de la barrera del potencial tiende a cero y su altura a infinito, se obtiene un potencial particularmente interesante: el potencial delta de Dirac [7]. Con este potencial, cada elemento del sólido tiene un alcance puntual.

En esta tesis usaremos potenciales delta de Dirac para modelar cada elemento de los sistemas finitos unidimensionales. Si mantenemos todos los potenciales delta a la misma intensidad configuramos un *sistema ordenado* y modelamos un sistema monoatómico. Sin embargo, se puede introducir desorden a dicho sistema ya sea variando las intensidades de algunos potenciales delta o variando en una cantidad ϵ pequeña sus respectivas posiciones ordenadas, modificando así su periodicidad. Si anulamos las

intensidades de algunos de estos potenciales, entonces simulamos vacancias en el arreglo. Si introducimos potenciales delta entre los intersticios de los potenciales periódicos, entonces tendremos imperfecciones en el sistema. Si introducimos potenciales delta con instensidades distintas a las del resto, simulamos impurezas en el sistema [1]. Generalizando, podemos configurar un *sistema con desorden composicional*, que lo definiremos como aquel sistema en el cual se varían aleatoriamente las intensidades de todos los potenciales delta manteniendo sus respectivas posiciones periódicas. Podemos configurar también un *sistema con desorden estructural* que puede definirse como aquel sistema en el cual se varían aleatoriamente en cantidades ϵ pequeñas alrededor de sus respectivas posiciones periódicas manteniendo una intensidad común y constante todos los potenciales delta. Más aún, podemos configurar un *sistema con desorden total*, resultado de combinar los dos tipos de desorden anteriores [8]. Aquí cabe mencionar que para todos los sistemas que construiremos y analizaremos, sus respectivas dimensiones variarán de acuerdo al número de potenciales delta presentes, manteniendo así una densidad de potenciales delta constante en todos los sistemas. En buena parte de esta tesis encontraremos los niveles de energía de una partícula para algunos sistemas con vacancias, impurezas, desorden composicional, desorden estructural y desorden total. Compararemos estos niveles con el del sistema ordenado para averiguar así el efecto de introducir desorden sobre el sistema ordenado. Encontraremos que conforme se incrementa el número de potenciales delta, aparece la estructura de bandas, es decir, los niveles de energía se agrupan formando *bandas de energía* con $N + 1$ niveles en cada banda, alternados con las *bandas prohibidas*, bandas donde no se encuentra ningún nivel de energía [1]. Se obtendrá que el ancho de las bandas de energía depende de las intensidades de los potenciales delta y del espaciamiento entre ellos. Manteniendo fijo este espaciamiento, se obtendrá que conforme se aumentan las intensidades de los potenciales delta, las bandas de energía comienzan a adelgazarse, aumentando así el ancho de las bandas prohibidas.

Asimismo, tomando algunos sistemas con números pares e impares de potenciales delta y construyendo varias configuraciones distintas con desorden estructural, composicional y total para cada sistema, se hará un análisis estadístico de sus niveles de energías y se obtendrán algunas propiedades interesantes tanto para los sistemas pares como para los impares. Así por ejemplo, a grandes rasgos, se obtendrá que para los sistemas impares con desorden estructural, los niveles de energías centrales de cada banda permanecen prácticamente estables, mientras que para los sistemas pares con el mismo desorden estructural no se observa ese efecto.

Siguiendo con el análisis, se obtendrá la densidad de probabilidad en función de la posición para algunos sistemas con N potenciales delta. Si el sistema es ordenado, se obtendrá que la función de onda para el estado base toma su valor máximo a la mitad del sistema decayendo simétricamente en sus extremos y la densidad de probabilidad también presenta esta simetría. Si el sistema presenta desorden composicional entonces se obtendrá que la función de onda para el estado base se localiza en alguna región (no necesariamente a la mitad de la longitud total del sistema) y en consecuencia la densidad de probabilidad en esta región es mucho mayor que en el resto. Se obtendrá que para el sistema con desorden estructural la densidad de probabilidad también alcanza un máximo en alguna región desplazada del centro del sistema, sin embargo aquí, este máximo sobresale poco. Si el sistema presenta desorden total, se obtendrá que la densidad de probabilidad también alcanza su máximo en alguna región del sistema desplazada de su centro. Así, generalizando, en los sistemas con desorden composicional, estructural y total, las funciones de onda tienden a localizarse en alguna región desplazada de la mitad del sistema y en consecuencia en esa región también hay localización en su densidad de probabilidad, se llega así al fenómeno conocido como localización de Anderson [9].

Por último, se estudiará al sistema cuando eliminamos la restricción de la partícula a moverse dentro de la caja de paredes infinitas, suponiendo ahora que pueda incidir desde el infinito hasta encontrarse con los potenciales delta de nuestro sistema, existiendo la posibilidad de que traspase el arreglo dependiendo de su configuración específica y de la energía de la partícula. Aquí, se estudiarán algunos parámetros de interés como los coeficientes de transmisión y de reflexión [10], los cuales al graficarlos en función de la energía nos ayudarán a entender el comportamiento del sistema cuando presenta desorden estructural, composicional y total. Por ejemplo, para un sistema en específico con un considerable número de potenciales delta, se obtendrá que el coeficiente de transmisión toma valores distintos de cero para algunos intervalos de energía, anulándose para el resto. Se obtendrá también que para los sistemas con imperfecciones e impurezas, los coeficientes de transmisión alcanzan valores muy pequeños (toman el valor de uno cuando el haz se transmite completamente y cero cuando no hay transmisión).

Ahora bien, para un sistema confinado con N elementos, se puede asociar cada elemento con una matriz de transferencia [12]. Haciendo el producto de todas las matrices de transferencia y aplicando las condiciones de frontera, se obtiene la ecuación de dispersión de tal sistema. Cuando el sistema consta de un gran número de potenciales delta, su ecuación de dispersión resulta difícil manipularla y resolverla en función de la energía debido al gran número de términos que contiene. Y resolverla es imprescindible ya que nos dará los posibles niveles de energía de la partícula dentro del sistema. Por ello, se desarrollarán algoritmos en el lenguaje Mathematica, que no sólo resuelven la ecuación de dispersión de cualquier sistema que interese, sino que además grafican los niveles de energía y promedian estos niveles cuando se tienen varias configuraciones (ya sea con desorden estructural, composicional o total) del mismo sistema. Se implementará también un algoritmo para graficar sus funciones de onda y las densidades de probabilidad cuando interese analizar estas cuestiones.

Cuando el sistema no está confinado, también podemos asociar sus elementos con matrices de transferencia y hacer el producto de todas ellas para obtener su respectiva ecuación de dispersión, sin embargo, aquí impondremos otras condiciones de frontera considerando la naturaleza del mismo sistema. Como en estos sistemas nos interesará estudiar los coeficientes de transmisión y de reflexión, también se desarrollará un algoritmo que calcula y grafica estos coeficientes en función de la energía de la partícula.

Cabe mencionarse que en general, estos algoritmos se diseñarán para cualquier cantidad de potenciales delta que interese analizar y sólo se tendrá como limitante la eficiencia computacional. Por último, todos estos algoritmos se encuentran en el apéndice y se hará referencia a ellos cuando se les utilice en el transcurso de los capítulos.

Capítulo 2

Teoría general: potenciales periódicos finitos

2.1. La ecuación de Schrödinger

En la mecánica cuántica, la función de onda $\Psi(x,t)$ proporciona toda la información del estado dinámico de una partícula. Tal función de onda es solución de la ecuación de Schrödinger unidimensional dependiente del tiempo

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x)\Psi(x,t), \tag{2.1}$$

donde $V(x)$ es la energía potencial de la partícula de masa m.

Max Born dio la interpretación estadística de la función de onda $\Psi(x,t)$ [11], la cual nos dice que $|\Psi(x,t)|^2$ es la probabilidad de encontrar a la partícula en el punto x al tiempo t, o más precisamente

$$P(x,t)dx = |\Psi(x,t)|^2 dx, \tag{2.2}$$

define la probabilidad de que la partícula descrita por la función de onda $\Psi(x,t)$ pueda ser encontrada entre x y $x+dx$ al tiempo t. Con esta interpretación, se requiere que

$$\int_{-\infty}^{\infty} P(x,t)dx = 1, \tag{2.3}$$

dado que la partícula debe de estar en algún lugar. La función de onda $\Psi(x,t)$ puede ser compleja, pero $|\Psi(x,t)|^2 = \Psi(x,t)\Psi^*(x,t)$, (donde $\Psi^*(x,t)$ es el complejo conjugado de $\Psi(x,t)$) es un número real y no negativo.

Suponiendo $\Psi(x,t)$ puede separarse en una parte espacial y otra temporal, es decir, suponiendo que

$$\Psi(x,t) = \psi(x)\phi(t), \tag{2.4}$$

podemos reescribir la Ec. (2.1) como

$$i\hbar\psi(x)\frac{d\phi(t)}{dt} = \phi(t)\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x)\}, \tag{2.5}$$

dividiendo ambos miembros de la ecuación anterior por $\psi(x)\phi(t)$ tenemos

$$i\hbar\frac{1}{\phi(t)}\frac{d\phi(t)}{dt} = \frac{1}{\psi(x)}\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x)\}. \tag{2.6}$$

El lado izquierdo de la ecuación anterior sólo depende de t y el lado derecho sólo depende de x, esto se satisface sólo si ambos lados de la ecuación son iguales a una constante, digamos C. Así, podemos escribir el lado izquierdo de la Ec. (2.6) como

$$i\hbar\frac{1}{\phi(t)}\frac{d\phi(t)}{dt} = C, \tag{2.7}$$

integrando con respecto al tiempo, tenemos

$$i\hbar\int\frac{1}{\phi(t)}\frac{d\phi(t)}{dt}dt = C\int dt, \tag{2.8}$$

o bien

$$i\hbar\ln(\phi(t)) = Ct, \tag{2.9}$$

aplicando la exponencial a ambos miembros de la ecuación anterior para despejar $\phi(t)$ obtenemos

$$\phi(t) = e^{-iCt/\hbar}, \tag{2.10}$$

la constante C se identifica como la energía E del sistema, por lo tanto

$$\phi(t) = e^{-iEt/\hbar}, \tag{2.11}$$

así, podemos reescribir la Ec. (2.4) como

$$\Psi(x,t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar}, \tag{2.12}$$

y por lo tanto, la función $\psi(x)$ satisface la ecuación

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x). \tag{2.13}$$

La ecuación anterior es conocida como la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo.

2.2. La matriz de transferencia

Determinemos la función de onda para una partícula que se mueve en una región donde la energía potencial $V(x)$ está distribuida como se muestra en la Fig. 2.1. Si la energía E de la partícula es mayor que cero, la solución general de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo está dado por

$$\psi(x) = \begin{cases} A_0 e^{ikx} + B_0 e^{-ikx} & \text{si } x < a \\ \psi_{ab}(x) & \text{si } a < x < b \\ A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx} & \text{si } x > b \end{cases}, \tag{2.14}$$

donde definimos

$$k \equiv \sqrt{2mE}/\hbar, \tag{2.15}$$

que es un número real y positivo dado que $E > 0$.

Si consideramos la Ec. (2.12), es decir, si incluimos el factor tiempo, entonces $A_0 e^{ikx}$ y $A_1 e^{ikx}$ representan ondas propagándose a la derecha, mientras que $B_0 e^{-ikx}$ y $B_1 e^{-ikx}$ representan ondas propagándose a la izquierda, como se muestra en la misma la Fig. 2.1.

La expresión para $\psi_{ab}(x)$ depende de la forma específica del potencial en el intervalo (a, b). Considerando las condiciones de frontera en a y b (tal como la continuidad de $\psi(x)$ y de su derivada), se pueden obtener dos relaciones lineales entre los coeficientes A_0, B_0, A_1 y B_1, estas relaciones pueden expresarse como

$$\begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} = \mathbf{M} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix}, \tag{2.16}$$

donde

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix}. \tag{2.17}$$

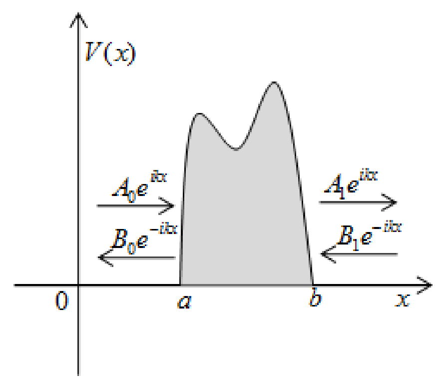


Figura 2.1: Funciones de onda para un potencial arbitrario.

La matriz $\mathbf{M}$ es conocida como matriz de transferencia [12]. Por otra parte, tomando el complejo conjugado de la Ec. (2.1) e invirtiendo el sentido en el que trascurre el tiempo, es decir poniendo $-t$ en vez de t y asumiendo que $V(x)$ es real, se tiene

$$i\hbar \frac{\partial \Psi^*(x,-t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi^*(x,-t)}{\partial x^2} + V(x)\Psi^*(x,-t), \tag{2.18}$$

si $\Psi(x,t)$ es una solución de la ecuación de Schrödinger, entonces $\Psi^*(x,-t)$ es también solución, por lo tanto, podemos expresar $\psi^*(x)$ para nuestro potencial como

$$\psi^*(x) = \begin{cases} A_0^* e^{-ikx} + B_0^* e^{ikx} & \text{si } x < a \\ \psi_{ab}^*(x) & \text{si } a < x < b \\ A_1^* e^{-ikx} + B_1^* e^{ikx} & \text{si } x > b \end{cases}; \tag{2.19}$$

en analogía con la Ec. (2.16), podemos expresar las relaciones entre los coeficientes A_0^*, B_0^*, A_1^*, y B_1^*, como

$$\begin{pmatrix} B_0^* \\ A_0^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B_1^* \\ A_1^* \end{pmatrix}, \tag{2.20}$$

hallando el complejo conjugado de cada término de la ecuación anterior e intercambiando filas (también columnas en la matriz de transferencia), se obtiene

$$\begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{22}^* & M_{21}^* \\ M_{12}^* & M_{11}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix}, \tag{2.21}$$

y al comparar las Ecs. (2.16) y (2.21) vemos que

$$M_{11} = M_{22}^*, \tag{2.22}$$

y

$$M_{21} = M_{12}^*. \tag{2.23}$$

Por otra parte, la corriente de probabilidad en una dimensión está dada por [13]

$$j \equiv \frac{\hbar}{2mi}(\psi^*(x)\frac{d\psi(x)}{dx} - \frac{d\psi^*(x)}{dx}\psi(x)), \tag{2.24}$$

en nuestro caso, como no hay una dirección preferencial de la partícula incidente (Fig. 2.1), entonces debe satisfacerse que

$$j|_{x<a} = j|_{x>b}, \tag{2.25}$$

la ecuación anterior expresa la conservación de la probabilidad en el sistema. Usando las Ecs. (2.14) y (2.19), así como la Ec. (2.24) para $x < a$, y luego de simplificar obtenemos

$$j|_{x<a} = \frac{\hbar k}{m}(|A_0|^2 - |B_0|^2), \tag{2.26}$$

para $x > b$ obtenemos

$$j|_{x>b} = \frac{\hbar k}{m}(|A_1|^2 - |B_1|^2), \tag{2.27}$$

y de acuerdo con la Ec. (2.25) se tiene

$$|A_0|^2 - |B_0|^2 = |A_1|^2 - |B_1|^2, \tag{2.28}$$

podemos reescribir la ecuación anterior como

$$\begin{pmatrix} A_0 & B_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_0^* \\ B_0^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_1 & B_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1^* \\ B_1^* \end{pmatrix}; \tag{2.29}$$

por otra parte, el complejo conjugado de la Ec. (2.16) puede expresarse como

$$\begin{pmatrix} A_0^* \\ B_0^* \end{pmatrix} = \mathbf{M}^* \begin{pmatrix} A_1^* \\ B_1^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11}^* & M_{12}^* \\ M_{21}^* & M_{22}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1^* \\ B_1^* \end{pmatrix}, \tag{2.30}$$

también, podemos escribir la misma Ec. (2.16) en términos de su transpuesta como

$$\begin{pmatrix} A_0 & B_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_1 & B_1 \end{pmatrix} \mathbf{M}^t = \begin{pmatrix} A_1 & B_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} M_{11} & M_{21} \\ M_{12} & M_{22} \end{pmatrix}, \tag{2.31}$$

donde $\mathbf{M^t}$ es la matriz transpuesta de $\mathbf{M}$. Usando las dos ecuaciones anteriores, podemos reescribir la Ec. (2.29) como

$$\begin{pmatrix} A_1 & B_1 \end{pmatrix} \mathbf{M}^t \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \mathbf{M}^* \begin{pmatrix} A_1^* \\ B_1^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_1 & B_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1^* \\ B_1^* \end{pmatrix}, \tag{2.32}$$

para satisfacer la ecuación anterior se requiere que

$$\mathbf{M}^t \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \mathbf{M}^* = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \tag{2.33}$$

haciendo el producto de las matrices del lado izquierdo de la ecuación anterior se tiene

$$\begin{pmatrix} |M_{11}|^2 - |M_{21}|^2 & M_{11}M_{12}^* - M_{21}M_{22}^* \\ M_{12}M_{11}^* - M_{22}M_{21}^* & |M_{12}|^2 - |M_{22}|^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \tag{2.34}$$

es decir

$$|M_{11}|^2 - |M_{21}|^2 = 1, \qquad |M_{22}|^2 - |M_{12}|^2 = 1, \tag{2.35}$$

y

$$M_{11}M_{12}^* - M_{21}M_{22}^* = 0, \qquad M_{12}M_{11}^* - M_{22}M_{21}^* = 0; \tag{2.36}$$

usando las Ecs. (2.22) y (2.23), podemos reescribir las Ecs. (2.35) como

$$M_{11}M_{11}^* - M_{21}M_{21}^* = M_{11}M_{11}^* - M_{12}^*(M_{12}^*)^* = |M_{11}|^2 - |M_{12}|^2 = 1, \tag{2.37}$$

y

$$M_{22}M_{22}^* - M_{12}M_{12}^* = M_{11}^*M_{11} - M_{12}M_{12}^* = |M_{11}|^2 - |M_{12}|^2 = 1, \tag{2.38}$$

haciendo $w = M_{11}$ y $z = M_{12}$ y volviendo a usar las Ecs. (2.22) y (2.23), la matriz de transferencia $\mathbf{M}$ puede expresarse como

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} w & z \\ z^* & w^* \end{pmatrix}, \tag{2.39}$$

y se satisface

$$\det \mathbf{M} = |w|^2 - |z|^2 = 1. \tag{2.40}$$

2.3. N potenciales arbitrarios periódicamente localizados

Supongamos que replicamos N veces, a intervalos regulares, el potencial mostrado en la Fig. 2.1, tal como se muestra en la Fig. 2.2. La separación entre los potenciales es de $s > b - a$. Si $N \to \infty$, el periodo de los potenciales es de $\zeta = a + s$, usando el teorema de Bloch [10], podemos saber cuál es la forma de la función de onda entre los potenciales periódicos, ya que este teorema establece que la función de onda $\psi(x)$ en el espacio entre los potenciales periódicos puede expresarse como

$$\psi(x) = e^{ikx}u(x), \tag{2.41}$$

donde $u(x) = u(x + \zeta)$, es decir, $u(x)$ es una función periódica con periodo ζ. Podemos seguir analizando el caso para cuando $N \to \infty$, sin embargo, nuestro interés es analizar el caso en el que N es finito. Así, construiremos la matriz de transferencia para N finito.

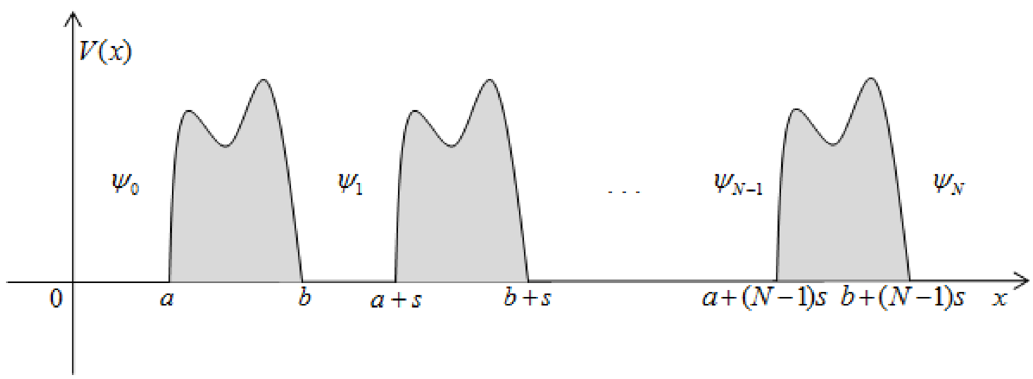


Figura 2.2: Arreglo de N potenciales arbitrarios periódicamente espaciados por s.

Para el caso finito, podemos escribir las funciones de onda entre los potenciales como [12]

$$\psi_n(x) = A_n e^{ik(x-ns)} + B_n e^{-ik(x-ns)}, \tag{2.42}$$

donde $b + (n-1)s < x < a + ns$, con $n = 1, 2, \cdots, N-1$. Por extensión, suponemos que $\psi_0(x) = A_0 e^{ikx} + B_0 e^{-ikx}$ para $x < a$ y $\psi_N(x) = A_N e^{ik(x-Ns)} + B_N e^{-ik(x-Ns)}$ para $x > b + (N-1)s$. Cabe resaltar que hemos puesto a cada $\psi_n(x)$ en un sistema de coordenadas local cuyo origen se encuentra en ns. Si cambiamos n por $n+1$ en la Ec. (2.42), obtenemos

$$\psi_{n+1}(x) = A_{n+1} e^{ik(x-ns)} e^{-iks} + B_{n+1} e^{-ik(x-ns)} e^{iks}; \tag{2.43}$$

como se mostró en la sección anterior, se pueden establecer dos relaciones lineales entre los coeficientes A_n, B_n, A_{n+1} y B_{n+1}, dichas relaciones pueden expresarse (usando la matriz de transferencia dado por la Ec. (2.39)) como

$$\begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} = \mathbf{M} \begin{pmatrix} A_{n+1} e^{-iks} \\ B_{n+1} e^{iks} \end{pmatrix}, \tag{2.44}$$

o bien

$$\begin{pmatrix} A_n \\ \\ B_n \end{pmatrix} = \mathbf{Q} \begin{pmatrix} A_{n+1} \\ \\ B_{n+1} \end{pmatrix}, \tag{2.45}$$

donde

$$\mathbf{Q} = \mathbf{M} \begin{pmatrix} e^{-iks} & 0 \\ \\ 0 & e^{iks} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} we^{-iks} & ze^{iks} \\ \\ z^* e^{-iks} & w^* e^{iks} \end{pmatrix}. \tag{2.46}$$

Por extensión, para $n = 0$ tenemos de la Ec. (2.45)

$$\begin{pmatrix} A_0 \\ \\ B_0 \end{pmatrix} = \mathbf{Q} \begin{pmatrix} A_1 \\ \\ B_1 \end{pmatrix}, \tag{2.47}$$

con $n = 1$ tenemos

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ \\ B_1 \end{pmatrix} = \mathbf{Q} \begin{pmatrix} A_2 \\ \\ B_2 \end{pmatrix}, \tag{2.48}$$

para $n = 2$ se tiene

$$\begin{pmatrix} A_2 \\ \\ B_2 \end{pmatrix} = \mathbf{Q} \begin{pmatrix} A_3 \\ \\ B_3 \end{pmatrix}, \tag{2.49}$$

continuando con este proceso, cuando $n = N - 1$, obtenemos las dos relaciones lineales entre los coeficientes de las funciones de onda $\psi_{N-1}(x)$ y $\psi_N(x)$, es decir

$$\begin{pmatrix} A_{N-1} \\ \\ B_{N-1} \end{pmatrix} = \mathbf{Q} \begin{pmatrix} A_N \\ \\ B_N \end{pmatrix}. \tag{2.50}$$

Al sustituir la Ec. (2.48) en la Ec. (2.47) obtenemos las dos relaciones lineales entre los coeficientes de $\psi_0(x)$ y $\psi_2(x)$, a su vez, sustituyendo la Ec. (2.49) en la expresión matricial obtenida que relaciona los coeficientes A_0 y B_0 con los coeficientes A_2 y B_2, obtenemos la relación entre los coeficientes de $\psi_0(x)$ y $\psi_3(x)$; si continuamos con este proceso recursivo, podemos establecer las relaciones entre los coeficientes de las funciones de onda $\psi_0(x)$ y $\psi_N(x)$. Esta relación puede expresarse como

$$\begin{pmatrix} A_0 \\ \\ B_0 \end{pmatrix} = \mathbf{Q} \cdot \mathbf{Q} \cdot \ldots \cdot \mathbf{Q} \begin{pmatrix} A_N \\ \\ B_N \end{pmatrix}, \tag{2.51}$$

o bien

$$\begin{pmatrix} A_0 \\ \\ B_0 \end{pmatrix} = \mathbf{Q}^N \begin{pmatrix} A_N \\ \\ B_N \end{pmatrix}, \tag{2.52}$$

así, para hallar las relaciones entre los coeficientes de $\psi_0(x)$ y $\psi_N(x)$; nuestro problema se reduce a calcular $\mathbf{Q}^N$. Por otra parte, la ecuación característica de la matriz $\mathbf{Q}$ es

$$\det(\mathbf{Q} - l\mathbf{I}) = 0, \tag{2.53}$$

siendo $\mathbf{I}$ la matriz identidad de 2x2 y l un escalar, eigenvalor de $\mathbf{Q}$. Más explícitamente, podemos reescribir la Ec. (2.53) como

$$\det \begin{pmatrix} we^{-iks} - l & ze^{iks} \\ z^* e^{-iks} & w^* e^{iks} - l \end{pmatrix} = 0, \tag{2.54}$$

o bien

$$l^2 - l(we^{-iks} + w^* e^{iks}) + |w|^2 - |z|^2 = 0, \tag{2.55}$$

pero, podemos identificar a $we^{-iks} + w^* e^{iks}$ como la traza de la matriz $\mathbf{Q}$, y de la Ec. (2.40), $|w|^2 - |z|^2 = 1$; por lo que podemos reescribir la Ec. (2.55) en la forma

$$l^2 - 2l\eta + 1 = 0, \tag{2.56}$$

donde $\eta \equiv \frac{1}{2}\mathrm{tr}(\mathbf{Q})$. Más aún, dado que $w = \mathrm{Re}(w) + i\mathrm{Im}(w)$, $w^* = \mathrm{Re}(w) - i\mathrm{Im}(w)$, $e^{iks} = \cos(ks) + i\,\mathrm{sen}(ks)$ y $e^{-iks} = \cos(ks) - i\,\mathrm{sen}(ks)$ podemos expresar η como

$$\eta = \mathrm{Re}(w)\cos(ks) + \mathrm{Im}(w)\,\mathrm{sen}(ks). \tag{2.57}$$

Usando el teorema de Cayley - Hamilton, el cual establece que toda matriz cuadrada satisface su propia ecuación característica [14], de la Ec. (2.56) se tiene

$$\mathbf{Q}^2 - 2\mathbf{Q}\eta + \mathbf{I} = 0, \tag{2.58}$$

o bien, despejando $\mathbf{Q}^2$

$$\mathbf{Q}^2 = 2\mathbf{Q}\eta - \mathbf{I}, \tag{2.59}$$

multiplicando por $\mathbf{Q}$ ambos miembros de la ecuación anterior se obtiene

$$\mathbf{Q}^3 = 2\mathbf{Q}^2\eta - \mathbf{Q}, \tag{2.60}$$

y sustituyendo la Ec. (2.59) en la ecuación anterior obtenemos

$$\mathbf{Q}^3 = \mathbf{Q}(4\eta^2 - 1) - 2\eta\mathbf{I}; \tag{2.61}$$

si multiplicamos la ecuación anterior por $\mathbf{Q}$ se obtiene

$$\mathbf{Q}^4 = \mathbf{Q}^2(4\eta^2 - 1) - 2\eta\mathbf{Q}, \tag{2.62}$$

análogamente, sustituyendo la Ec. (2.59) en la ecuación anterior tenemos

$$\mathbf{Q}^4 = \mathbf{Q}(8\eta^3 - 4\eta) - \mathbf{I}(4\eta^2 - 1), \tag{2.63}$$

continuando con este proceso, se puede llegar a $\mathbf{Q}^N$; la forma general de esta matriz es

$$\mathbf{Q}^N = \mathbf{Q}U_{N-1}(\eta) - \mathbf{I}U_{N-2}(\eta), \tag{2.64}$$

donde $U_{N-1}(\eta)$ y $U_{N-2}(\eta)$ son polinomios en η de grados $N-1$ y $N-2$ respectivamente. Si multiplicamos por $\mathbf{Q}$ esta última ecuación, se obtiene

$$\mathbf{Q}^{N+1} = \mathbf{Q}^2U_{N-1}(\eta) - \mathbf{Q}U_{N-2}(\eta), \tag{2.65}$$

pero, sustituyendo $\mathbf{Q}^2$ en la ecuación anterior, obtenemos

$$\mathbf{Q}^{N+1} = \mathbf{Q}(2\eta U_{N-1}(\eta) - U_{N-2}(\eta)) - \mathbf{I}U_{N-1}(\eta). \tag{2.66}$$

Por otra parte, renombrando N por $N+1$ en la Ec. (2.64)

$$\mathbf{Q}^{N+1} = \mathbf{Q}U_{N}(\eta) - \mathbf{I}U_{N-1}(\eta), \tag{2.67}$$

o bien, igualando estas dos últimas ecuaciones y luego de agrupar términos, se llega a

$$\mathbf{Q}(U_{N-2}(\eta) - 2\eta U_{N-1}(\eta) + U_N(\eta)) = \mathbf{0}, \tag{2.68}$$

como los elementos de la matriz $\mathbf{Q}$ no son cero, se sigue que

$$U_{N-2}(\eta) - 2\eta U_{N-1}(\eta) + U_N(\eta) = 0, \tag{2.69}$$

renombrando N por $N+2$ se llega finalmente a

$$U_{N+2}(\eta) - 2\eta U_{N+1}(\eta) + U_N(\eta) = 0; \tag{2.70}$$

la ecuación anterior es la relación de recursión de los polinomios de Chebyshev [15].

Poniendo $N=2$ en la Ec. (2.64) se tiene

$$\mathbf{Q}^2 = \mathbf{Q}U_1(\eta) - \mathbf{I}U_0(\eta), \tag{2.71}$$

y si comparamos las Ecs. (2.59) y (2.71) vemos que $U_0(\eta) = 1$ y $U_1(\eta) = 2\eta$, es decir, U_N es el enésimo polinomio de Chebyshev de segundo tipo. Los polinomios de Chebyshev de segundo tipo pueden expresarse en términos de funciones trigonométricas como

$$U_N(\eta) = \frac{\operatorname{sen}((N+1)\theta)}{\operatorname{sen}(\theta)}, \tag{2.72}$$

donde

$$\theta = \arccos(\eta). \tag{2.73}$$

Usando las Ecs.(2.46) y (2.64), la matriz $\mathbf{Q^N}$ puede reescribirse como

$$\mathbf{Q}^N = \begin{pmatrix} we^{-iks}U_{N-1}(\eta) - U_{N-2}(\eta) & ze^{iks}U_{N-1}(\eta) \\ z^*e^{-iks}U_{N-1}(\eta) & w^*e^{iks}U_{N-1}(\eta) - U_{N-2}(\eta) \end{pmatrix}, \tag{2.74}$$

con ayuda de la matriz anterior podemos establecer las dos relaciones lineales de entre los coeficientes de las funciones de onda $\psi_0(x)$ y $\psi_N(x)$.

2.4. N potenciales arbitrarios periódicamente localizados y confinados

Ahora, supongamos que el arreglo de N potenciales está confinado por una caja de paredes infinitas como se muestra en la Fig. 2.3.

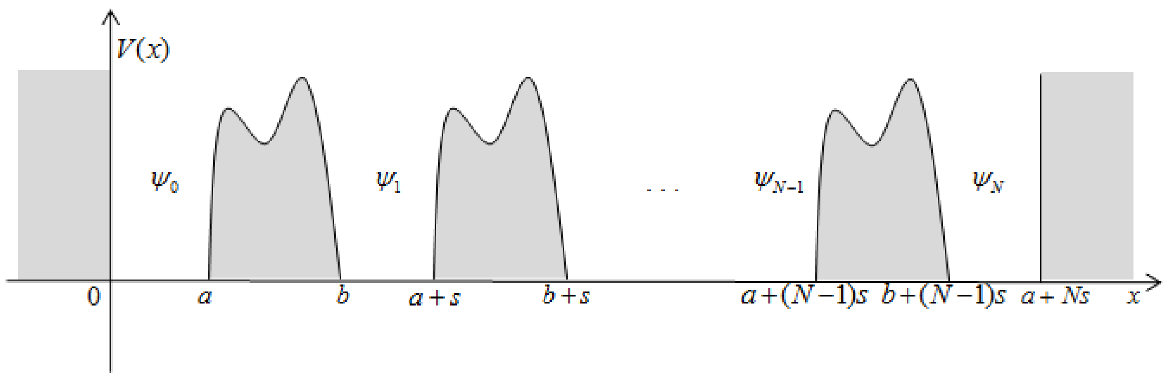


Figura 2.3: Caja de paredes infinitas con N potenciales arbitrarios igualmente espaciados por s.

Como las paredes de la caja tienen una altura infinita, las funciones de onda $\psi_0(x)$ y $\psi_N(x)$ tienden a cero en los extremos de la caja, esto es, en $x = 0$, $\psi_0(0) = 0$, o bien

$$A_0 + B_0 = 0, \tag{2.75}$$

y en $x = a + Ns$, $\psi_N(a + Ns) = 0$, o bien

$$A_N e^{ika} + B_N e^{-ika} = 0. \tag{2.76}$$

Ahora bien, de la Ec. (2.74) podemos obtener las dos relaciones lineales entre los coeficientes A_0, B_0, A_N y B_N, las cuales son

$$A_0 = (we^{-iks}U_{N-1}(\eta) - U_{N-2}(\eta))A_N + ze^{iks}U_{N-1}(\eta)B_N, \tag{2.77}$$

y

$$B_0 = z^* e^{-iks}U_{N-1}(\eta)A_N + (w^* e^{iks}U_{N-1}(\eta) - U_{N-2}(\eta))B_N; \tag{2.78}$$

si sumamos estas dos últimas ecuaciones obtenemos

$$A_0 + B_0 = [(w + z^*)e^{-iks}U_{N-1}(\eta) - U_{N-2}(\eta)]A_N + [(w^* + z)e^{iks}U_{N-1}(\eta) - U_{N-2}(\eta)]B_N. \tag{2.79}$$

Por otro lado, despejando B_N de la Ec. (2.76)

$$B_N = -A_N e^{2ika}, \tag{2.80}$$

y sustituyendo las Ecs. (2.75) y (2.80) en la Ec. (2.79) hallamos que

$$A_N[((w+z^*)e^{-iks}-(w^*+z)e^{ik(2a+s)})U_{N-1}(\eta)+(e^{2ika}-1)U_{N-2}(\eta)]=0, \qquad (2.81)$$

multiplicando ambos miembros de la ecuación anterior por e^{-ika} y dado que $A_N \neq 0$, se tiene

$$[(w+z^*)e^{-ik(a+s)}-(w^*+z)e^{ik(a+s)}]U_{N-1}(\eta)+[e^{ika}-e^{-ika}]U_{N-2}(\eta)=0, \qquad (2.82)$$

pero $e^{-ik(a+s)}=\cos(k(a+s))-i\,\mathrm{sen}(k(a+s))$, $e^{ik(a+s)}=\cos(k(a+s))+i\,\mathrm{sen}(k(a+s))$ y $e^{ika}-e^{-ika}=2i\,\mathrm{sen}(ka)$, además, por ser complejos, $w=\mathrm{Re}(w)+i\mathrm{Im}(w)$, $w^*=\mathrm{Re}(w)-i\mathrm{Im}(w)$, $z=\mathrm{Re}(z)+i\mathrm{Im}(z)$ y $z^*=\mathrm{Re}(z)-i\mathrm{Im}(z)$, así, con todo esto y luego de algunas simplificaciones, podemos reescribir la Ec. (2.82) como

$$[(\mathrm{Re}(w)+\mathrm{Re}(z))\,\mathrm{sen}(k(a+s))+(\mathrm{Im}(z)-\mathrm{Im}(w))\cos(k(a+s))]U_{N-1}(\eta)=\mathrm{sen}(ka)U_{N-2}(\eta). \qquad (2.83)$$

eligiendo a como nuestra unidad de longitud y haciendo $\phi\equiv ka$ y $\rho\equiv s/a$, podemos reescribir la ecuación anterior como

$$\boxed{\begin{aligned}\mathrm{sen}(\phi)U_{N-2}(\eta) &= [(\mathrm{Re}(w)+\mathrm{Re}(z))\,\mathrm{sen}(\phi(1+\rho))\\ &+ (\mathrm{Im}(z)-\mathrm{Im}(w))\cos(\phi(1+\rho))]U_{N-1}(\eta), \qquad (2.84)\end{aligned}}$$

y usando la Ec. (2.57), η en términos de ϕ y ρ puede reescribirse como

$$\eta=\mathrm{Re}(w)\cos(\rho\phi)+\mathrm{Im}(w)\,\mathrm{sen}(\rho\phi). \qquad (2.85)$$

Así, la Ec. (2.84) es una función implícita de la variable real ϕ (manteniendo fijo ρ) y se le conoce como *ecuación de dispersión* para el sistema de N potenciales periódicos dentro de la caja de potencial de paredes infinitas. Esta ecuación sólo tiene soluciones para ciertos valores de ϕ, variable relacionada con la energía E de una partícula dentro del sistema (véase la Ec. (2.15)). Conociendo w y z (que dependen de la forma del potencial), podemos resolver numéricamente esta ecuación de dispersión para los valores de ϕ.

Capítulo 3

Sistemas ordenados de potenciales delta de Dirac

En la Sección 2.2 del capítulo anterior, encontramos la forma y las propiedades de la matriz de transferencia para un potencial arbitrario. En éste y en los siguientes capítulos, restringimos nuestro análisis a un tipo de potencial particular: el potencial delta de Dirac.

3.1. Un potencial delta de Dirac

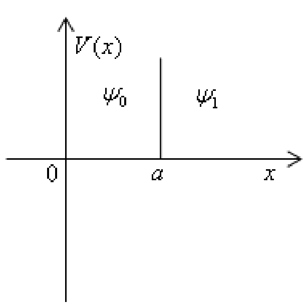
Consideremos la Fig. 3.1, el potencial delta repulsivo puede expresarse como

$$V(x) = c\delta(x-a), \tag{3.1}$$

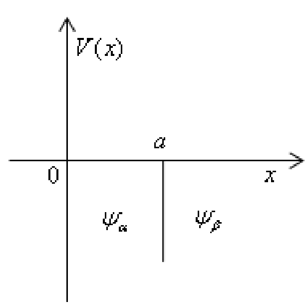
y el atractivo como

$$V(x) = -c\delta(x-a), \tag{3.2}$$

donde c es alguna constante positiva con dimensiones de energía multiplicada por unidad de longitud. Tanto para $x < a$ como para $x > a$ el potencial $V(x)$ es cero, en ambos casos



(a)



(b)

Figura 3.1: Un potencial delta de Dirac (a) repulsivo, (b) atractivo.

podemos reescribir la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo (Ec. (2.13)) como

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+\frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x)=0. \tag{3.3}$$

Ahora bien, si $E>0$, para $x<a$ la solución más general de la ecuación anterior está dada por

$$\psi_0(x)=A_0e^{ikx}+B_0e^{-ikx}, \tag{3.4}$$

y para $x>a$ la solución más general de la ecuación 3.3 es

$$\psi_1(x)=A_1e^{ikx}+B_1e^{-ikx}, \tag{3.5}$$

donde en ambos casos $k=\sqrt{2mE}/\hbar$. Las expresiones para las derivadas de $\psi_0(x)$ y $\psi_1(x)$ están dadas por

$$\frac{d\psi_0(x)}{dx}=ik(A_0e^{ikx}-B_0e^{-ikx}), \tag{3.6}$$

y

$$\frac{d\psi_1(x)}{dx}=ik(A_1e^{ikx}-B_1e^{-ikx}). \tag{3.7}$$

Ahora bien, en $x=a$; $V(x)=c\delta(x-a)$, introduciendo este potencial en la ecuación estacionaria de Schrödinger se tiene

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+c\delta(x-a)\psi(x)=E\psi(x), \tag{3.8}$$

o bien

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}-\frac{2mc}{\hbar^2}\delta(x-a)\psi(x)=-\frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x); \tag{3.9}$$

integrando ambos miembros de la ecuación anterior desde $a-\epsilon$ hasta $a+\epsilon$, con ϵ una cantidad muy pequeña, obtenemos

$$\int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}dx-\frac{2mc}{\hbar^2}\int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon}\delta(x-a)\psi(x)dx=-\frac{2mE}{\hbar^2}\int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon}\psi(x)dx, \tag{3.10}$$

pero

$$\lim_{\epsilon\to 0}\int_{a_1-\epsilon}^{a_1+\epsilon}\psi(x)dx=0, \tag{3.11}$$

dado que la función de onda $\psi(x)$ es continua. Así, podemos reescribir la Ec. (3.10) como

$$\int_{a_1-\epsilon}^{a_1+\epsilon}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}dx=\frac{2mc}{\hbar^2}\int_{a_1-\epsilon}^{a_1+\epsilon}\delta(x-a)\psi(x)dx; \tag{3.12}$$

pero por otra parte

$$\int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon}\delta(x-a)\psi(x)dx=\psi(a), \tag{3.13}$$

por lo que finalmente obtenemos

$$\frac{2mc}{\hbar^2}\psi(a) = \frac{d\psi(x)}{dx}|_{a+\epsilon} - \frac{d\psi(x)}{dx}|_{a-\epsilon}. \tag{3.14}$$

Por otra parte, como la función de onda $\psi(x)$ es continua en $x = a$ de las Ecs. (3.4) y (3.5) se tiene

$$A_0 e^{ika} + B_0 e^{-ika} = A_1 e^{ika} + B_1 e^{-ika}, \tag{3.15}$$

también, vemos de la Ec. (3.14) que hay una relación entre $\psi(a)$ y $d\psi(x)/dx$ evaluada en $x = a - \epsilon$ y $x = a + \epsilon$. Si $x = a - \epsilon$, la derivada $d\psi(x)/dx$ corresponde a la que se define para $x < a$, y para $x = a+\epsilon$, la derivada $d\psi(x)/dx$ corresponde a la que se define para $x > a$, así, usando las Ecs. (3.6) y (3.7), en el límite cuando $\epsilon \to 0$ obtenemos

$$\frac{2mc}{\hbar^2}(A_1 e^{ika} + B_1 e^{-ika}) = ik(A_1 e^{ika} - B_1 e^{-ika}) - ik(A_0 e^{ika} - B_0 e^{-ika}), \tag{3.16}$$

o bien, agrupando términos

$$A_0 ike^{ika} - B_0 ike^{-ika} = A_1(\frac{i\hbar^2 k - 2mc}{\hbar^2})e^{ika} - B_1(\frac{i\hbar^2 k + 2mc}{\hbar^2})e^{-ika}, \tag{3.17}$$

podemos reescribir las Ecs. (3.15) y (3.17) en forma matricial como

$$\begin{pmatrix} e^{ika} & e^{-ika} \\ ike^{ika} & -ike^{-ika} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{ika} & e^{-ika} \\ (\frac{i\hbar^2 k - 2mc}{\hbar^2})e^{ika} & -(\frac{i\hbar^2 k + 2mc}{\hbar^2})e^{-ika} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix}, \tag{3.18}$$

llamemos

$$\mathbf{R} = \begin{pmatrix} e^{ika} & e^{-ika} \\ ike^{ika} & -ike^{-ika} \end{pmatrix}, \qquad \mathbf{S} = \begin{pmatrix} e^{ika} & e^{-ika} \\ (\frac{i\hbar^2 k - 2mc}{\hbar^2})e^{ika} & -(\frac{i\hbar^2 k + 2mc}{\hbar^2})e^{-ika} \end{pmatrix}, \tag{3.19}$$

así, las matrices inversas de $\mathbf{R}$ y $\mathbf{S}$ son, respectivamente

$$\mathbf{R^{-1}} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}e^{-ika} & -i\frac{1}{2k}e^{-ika} \\ \frac{1}{2}e^{ika} & i\frac{1}{2k}e^{ika} \end{pmatrix}, \qquad \mathbf{S^{-1}} = \begin{pmatrix} (\frac{\hbar^2 k - i2mc}{2\hbar^2 k})e^{-ika} & -i\frac{1}{2k}e^{-ika} \\ (\frac{\hbar^2 k + i2mc}{2\hbar^2 k})e^{ika} & i\frac{1}{2k}e^{ika} \end{pmatrix}, \tag{3.20}$$

multiplicando ambos miembros de la Ec. (3.18) por $\mathbf{R^{-1}}$

$$\begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}e^{-ika} & -i\frac{1}{2k}e^{-ika} \\ \frac{1}{2}e^{ika} & i\frac{1}{2k}e^{ka} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ika} & e^{-ika} \\ (\frac{i\hbar^2 k - 2mc}{\hbar^2})e^{ika} & -(\frac{i\hbar^2 k + 2mc}{\hbar^2})e^{-ika} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix}, \tag{3.21}$$

haciendo el producto de las dos matrices de 2x2 del lado derecho de la ecuación anterior se obtiene

$$\begin{pmatrix} A_0 \\ \\ B_0 \end{pmatrix} = \mathbf{M} \begin{pmatrix} A_1 \\ \\ B_1 \end{pmatrix}, \tag{3.22}$$

donde

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 1 + i\frac{mc}{\hbar^2 k} & i\frac{mc}{\hbar^2 k}e^{-2ika} \\ \\ -i\frac{mc}{\hbar^2 k}e^{2ika} & 1 - i\frac{mc}{\hbar^2 k} \end{pmatrix}, \tag{3.23}$$

así pues, hemos encontrado la forma de la matriz de transferencia para el potencial delta de Dirac. Multiplicando por a/a los términos $mc/\hbar^2 k$, tomando en cuenta que $\phi = ka$ y definiendo el parámetro adimensional $\lambda = mca/\hbar^2$, podemos volver a reescribir la matriz de transferencia anterior como

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 1 + i\frac{\lambda}{\phi} & i\frac{\lambda}{\phi}e^{-2i\phi} \\ \\ -i\frac{\lambda}{\phi}e^{2i\phi} & 1 - i\frac{\lambda}{\phi} \end{pmatrix}. \tag{3.24}$$

Al comparar las Ecs. (2.39) y (3.24) vemos que

$$w = 1 + i\frac{\lambda}{\phi}, \qquad z = i\frac{\lambda}{\phi}e^{-2i\phi} = \frac{\lambda}{\phi}\operatorname{sen}(2\phi) + i\frac{\lambda}{\phi}\cos(2\phi), \tag{3.25}$$

y

$$w^* = 1 - i\frac{\lambda}{\phi}, \qquad z^* = -i\frac{\lambda}{\phi}e^{2i\phi} = \frac{\lambda}{\phi}\operatorname{sen}(2\phi) - i\frac{\lambda}{\phi}\cos(2\phi). \tag{3.26}$$

Al obtener el determinante de la matriz $\mathbf{M}$, vemos que efectivamente, satisface la propiedad dada en la Ec. 2.40, es decir,

$$\det \mathbf{M} = (1 + i\frac{\lambda}{\phi})(1 - i\frac{\lambda}{\phi}) - (i\frac{\lambda}{\phi}e^{-2i\phi})(-i\frac{\lambda}{\phi}e^{2i\phi}) = 1. \tag{3.27}$$

Ahora bien, supongamos que una partícula incide desde el infinito hasta el potencial delta repulsivo de izquierda a derecha y se transmite a la derecha luego de traspasar el potencial delta. Para la onda incidente tenemos de la Ec. (3.4)

$$\psi_0(x) = e^{ikx} + Re^{-ikx}, \tag{3.28}$$

donde hemos hecho $A_0 = 1$ y $B_0 = R$; y para la onda que se transmite, de la Ec. (3.5) se tiene

$$\psi_1(x) = Te^{ikx}, \tag{3.29}$$

donde hemos hecho $A_1 = T$. Usando la matríz de transferencia, tenemos

$$\begin{pmatrix} 1 \\ \\ R \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 + i\frac{mc}{\hbar^2 k} & i\frac{mc}{\hbar^2 k}e^{-2ika} \\ \\ -i\frac{mc}{\hbar^2 k}e^{2ika} & 1 - i\frac{mc}{\hbar^2 k} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T \\ \\ 0 \end{pmatrix}, \tag{3.30}$$

de la ecuación anterior se obtiene

$$T = \frac{\hbar^2 k}{\hbar^2 k + imc}, \qquad R = -i\frac{mc}{\hbar^2 k} e^{2ika} T = \frac{-imc}{\hbar^2 k + imc} e^{2ika}, \tag{3.31}$$

como $|T|^2 = TT^*$ y $|R|^2 = RR^*$, de la ecuación anterior tenemos

$$|T|^2 = \frac{\hbar^4 k^2}{\hbar^4 k^2 + m^2 c^2}, \qquad |R|^2 = \frac{m^2 c^2}{\hbar^4 k^2 + m^2 c^2}, \tag{3.32}$$

o bien, usando el hecho de que $k = \sqrt{2mE}/\hbar$, podemos reescribir $|T|^2$ y $|R|^2$ como

$$|T|^2 = \frac{2mE\hbar^2}{2mE\hbar^2 + m^2 c^2} \tag{3.33}$$

y

$$|R|^2 = \frac{m^2 c^2}{2mE\hbar^2 + m^2 c^2}. \tag{3.34}$$

Así, en las dos ecuaciones anteriores se expresan los coeficientes de transmisión y de reflexión para una partícula en nuestro sistema de un potencial delta repulsivo.

Por otra parte, también podemos hacer el análisis si $E < 0$, en ese caso, $E = -|E|$ y podemos reescribir la Ec. 3.3 como

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - \frac{2m|E|}{\hbar^2}\psi(x) = 0, \tag{3.35}$$

para $x < a$ la solución más general de la Ec. 3.3 es de la forma $A_\alpha e^{-Kx} + B_\alpha e^{Kx}$, y para $x > a$ su solución más general es de la forma $A_\beta e^{-Kx} + B_\beta e^{Kx}$, donde en ambas ecuaciones $K = \sqrt{2m|E|}/\hbar$. Pero el término $A_\alpha e^{-Kx}$ se indefine cuando $x \to -\infty$, por lo que debemos elegir $A_\alpha = 0$; y el término $B_\beta e^{Kx}$ también se indefine cuando $x \to \infty$, aquí debemos elegir $B_\beta = 0$. Así, para $x < a$ tenemos finalmente

$$\psi_\alpha(x) = B_\alpha e^{Kx}, \tag{3.36}$$

y para $x > a$ se tiene

$$\psi_\beta(x) = A_\beta e^{-Kx}. \tag{3.37}$$

Las expresiones para las derivadas de $\psi_\alpha(x)$ y $\psi_\beta(x)$ son, respectivamente

$$\frac{d\psi_\alpha(x)}{dx} = B_\alpha K e^{Kx}, \tag{3.38}$$

y

$$\frac{d\psi_\beta(x)}{dx} = -A_\beta K e^{-Kx}. \tag{3.39}$$

Por otra parte, en $x = a$ para el potencial atractivo $V(x) = -c\delta(x-a)$, sustituyendo este potencial en la ecuación estacionaria de Schrödinger (Ec. 2.13) y análogamente a lo realizado de la Ec. (3.10) a la Ec. (3.14), se llega finalmente a

$$\frac{-2mc}{\hbar^2}\psi(a) = \frac{d\psi(x)}{dx}|_{a+\epsilon} - \frac{d\psi(x)}{dx}|_{a-\epsilon}, \tag{3.40}$$

en el límite cuando $\epsilon \to 0$, sustituyendo las Ecs. (3.38) y (3.39) en la ecuación anterior se tiene

$$\frac{-2mc}{\hbar^2}B_\alpha e^{Ka} = -A_\beta K e^{-Ka} - B_\alpha K e^{Ka}, \tag{3.41}$$

donde para $\psi(a)$ hemos elegido indistintamente la Ec. (3.36). Por otra parte, como la función de onda es continua en a, de las Ecs. (3.36) y (3.37) tenemos

$$B_\alpha e^{Ka} = A_\beta e^{-Ka}, \tag{3.42}$$

despejando A_β de esta última ecuación y al sustituirla en la Ec. (3.41) y luego de algunas simplificaciones, se obtiene

$$(\frac{-2mc}{\hbar^2} + 2K)B_\alpha e^{Ka} = 0, \tag{3.43}$$

como en general $B_\alpha e^{Ka} \neq 0$, entonces

$$\frac{-2mc}{\hbar^2} + 2K = 0, \tag{3.44}$$

o bien

$$K = \frac{mc}{\hbar^2}, \tag{3.45}$$

como también $K = \sqrt{2m|E|}/\hbar$, entonces, al sustituirla en la ecuación anterior tenemos

$$\frac{2m|E|}{\hbar} = \frac{mc}{\hbar^2}, \tag{3.46}$$

o bien, dado que $E = -|E|$

$$E = \frac{-mc^2}{2\hbar^2}, \tag{3.47}$$

esta es la energía del único estado ligado para este potencial delta atractivo [16].

3.2. Espectros de energías en sistemas ordenados de potenciales delta de Dirac

Cuando se tiene una distribución periódica en las posiciones de los potenciales dentro de una caja de paredes infinitas, es posible obtener el espectro de energías de una partícula dentro de tal sistema usando la ecuación de dispersión obtenida en la sección

2.4, siempre y cuando se conozcan w y z, y por ende w^* y z^*, los elementos de la matriz de transferencia.

Así, siguiendo nuestro análisis, consideremos ahora los potenciales delta distribuidos de manera periódica dentro de una caja de paredes infinitas; determinaremos el espectro de energías de una partícula dentro de este sistema usando la ecuación de dispersión (2.83), dado que ya conocemos los elementos de la matriz de trasferencia para estos potenciales. Al sustituir $\mathrm{Re}(w)$, $\mathrm{Re}(z)$, $\mathrm{Im}(w)$ y $\mathrm{Im}(z)$ en la ecuación de dispersión (2.84) obtenemos

$$\boxed{\begin{aligned} \mathrm{sen}(\phi)U_{N-2}(\eta) &= [(1+\frac{\lambda}{\phi}\mathrm{sen}(2\phi))\,\mathrm{sen}(\phi(1+\rho)) \\ &+ \frac{\lambda}{\phi}(\cos(2\phi)-1)\cos(\phi(1+\rho))]U_{N-1}(\eta), \qquad (3.48) \end{aligned}}$$

donde λ es proporcional a la intensidad c del potencial delta. Así, la ecuación anterior es la ecuación de dispersión para el sistema con N potenciales delta en posiciones periódicas dentro de una caja de potencial de paredes infinitas.

3.2.1. Un potencial delta

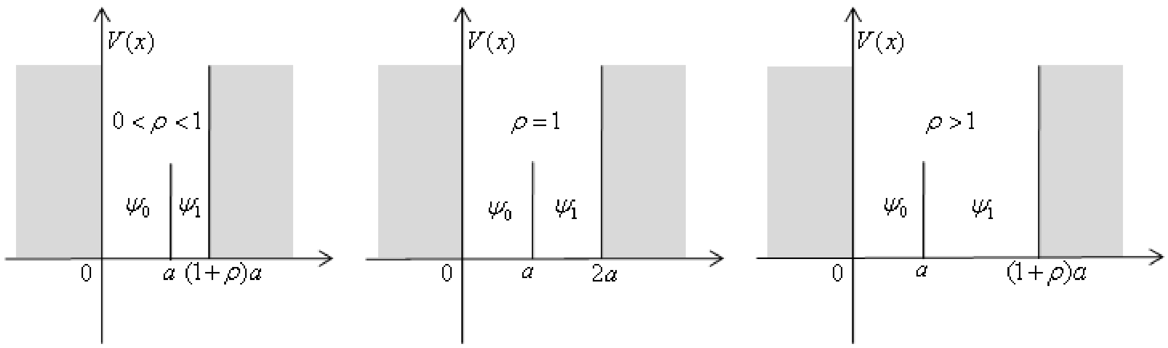
Si se tiene un solo potencial delta dentro de la caja de paredes infinitas, N toma el valor de 1 y los polinomios de Chebyshev de segundo tipo $U_{N-1}(\eta)$ y $U_{N-2}(\eta)$ son, respectivamente $U_0(\eta) = 1$ y $U_{-1}(\eta) = 0$, sustituyendo las dos ecuaciones anteriores en la ecuación de dispersión (3.48), se obtiene

$$f(\rho,\phi,\lambda) = [1+\frac{\lambda}{\phi}\mathrm{sen}(2\phi)]\,\mathrm{sen}(\phi(1+\rho)) + \frac{\lambda}{\phi}[\cos(2\phi)-1]\cos(\phi(1+\rho)) = 0, \quad (3.49)$$

la ecuación anterior es la ecuación de dispersión para el sistema con un potencial delta dentro de una caja de paredes infinitas. Dando valores numéricos a λ y ρ elegimos la intensidad del potencial delta y la separación de este potencial con la pared derecha infinita del pozo de potencial, así, para una λ y una ρ específica, los valores de ϕ para los cuales $f(\rho,\phi,\lambda) = 0$, son soluciones de la ecuación de dispersión anterior. Por otra parte, como $\rho = s/a$ y la pared infinita derecha del pozo de potencial se localiza en $x = a + s$ (dado que $N = 1$), se sigue que la longitud total de esta caja de paredes infinitas es de $L = (1+\rho)a$. Ahora bien, en cuanto a la elección del valor numérico de ρ, establezcamos los siguientes casos: $0 < \rho < 1$, $\rho = 1$ y $\rho > 1$.

Si $\rho = 1$ como se muestra en la Fig. 3.2b, entonces el potencial delta está centrado dentro de la caja de paredes infinitas siendo $2a$ la longitud total de esta caja y la Ec. (3.49) puede simplificarse como

$$f(\phi,\lambda) = [1+\frac{\lambda}{\phi}\mathrm{sen}(2\phi)]\,\mathrm{sen}(2\phi) + \frac{\lambda}{\phi}[\cos(2\phi)-1]\cos(2\phi) = 0, \qquad (3.50)$$



(a) (b) (c)

Figura 3.2: Un potencial delta dentro de la caja de paredes infinitas donde (a) $0 < \rho < 1$, (b) $\rho = 1$ y (c) $\rho > 1$.

o bien

$$f(\phi, \lambda) = \phi \operatorname{sen}(2\phi) + \lambda(1 - \cos(2\phi)) = 0. \tag{3.51}$$

Si $\lambda = 0$, la ecuación anterior se reduce a

$$\operatorname{sen}(2\phi) = 0, \tag{3.52}$$

la cual se satisface si $2\phi = n\pi$, o bien

$$\phi = \frac{n\pi}{2}, \tag{3.53}$$

donde $n = 1, 2, 3, \dots$, hemos descartado los enteros negativos pues $\phi > 0$ ya que $\phi = ka$ y según la Ec. 2.15, $k > 0$ pues $E > 0$. Por otro lado, despejando E de la misma Ec. 2.15, se tiene

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} k^2, \tag{3.54}$$

o bien, como $k = \phi/a$

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\phi^2}{a^2}, \tag{3.55}$$

sustituyendo la Ec. (3.53) en la ecuación anterior tenemos

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{n^2\pi^2}{4a^2} = \frac{n^2\pi^2}{4} E_u, \tag{3.56}$$

donde hemos hecho

$$E_u \equiv \hbar^2/2ma^2, \tag{3.57}$$

tomemos esta E_u como nuestra unidad natural de energía que será utilizada en todas las figuras. Así, dado que $n = 1, 2, 3, \dots$, las energías de la partícula dentro de la caja de paredes infinitas están dadas por

$$E = \frac{\pi^2}{4} E_u, \quad \pi^2 E_u, \quad \frac{9\pi^2}{4} E_u, \quad \cdots , \tag{3.58}$$

es decir, la partícula dentro de la caja no puede tener una energía arbitraria, sino solamente aquellos valores dados por la Ec. (3.56).

Si $\lambda \neq 0$, entonces evaluando directamente la Ec. (3.51) en un dominio $D = \{\phi \in \mathbf{R} | 0 < \phi < \phi_f\}$, encontraremos valores de ϕ para los cuales $f(\phi, \lambda) = 0$, tales valores están relacionados con las energías que puede tomar la partícula dentro del sistema mediante la Ec. (3.55), es decir

$$E = \phi^2 E_u, \tag{3.59}$$

y seguimos manteniendo nuestra unidad de energía dada por la Ec. (3.57).

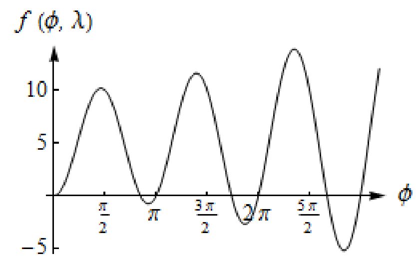


Figura 3.3: Gráfica de $f(\phi, \lambda)$ vs. ϕ donde se muestran algunos valores de ϕ soluciones de la ecuación $f(\phi, \lambda) = 0$, con $\lambda = 5$.

En la Fig. 3.3 graficamos $f(\phi, \lambda)$ vs. ϕ con $\lambda = 5$, las intersecciones de la curva con el eje ϕ corresponden a los valores que satisfacen la Ec. (3.51).

Para este sistema, así como para los sistemas con más de un potencial delta, podemos usar el algoritmo dado en el Apéndice B.1 para encontrar las soluciones de sus respectivas ecuaciones de dispersión (Ec. (3.59) para este caso) y poder expresar así las energías permitidas de una partícula dentro de estos sistemas.

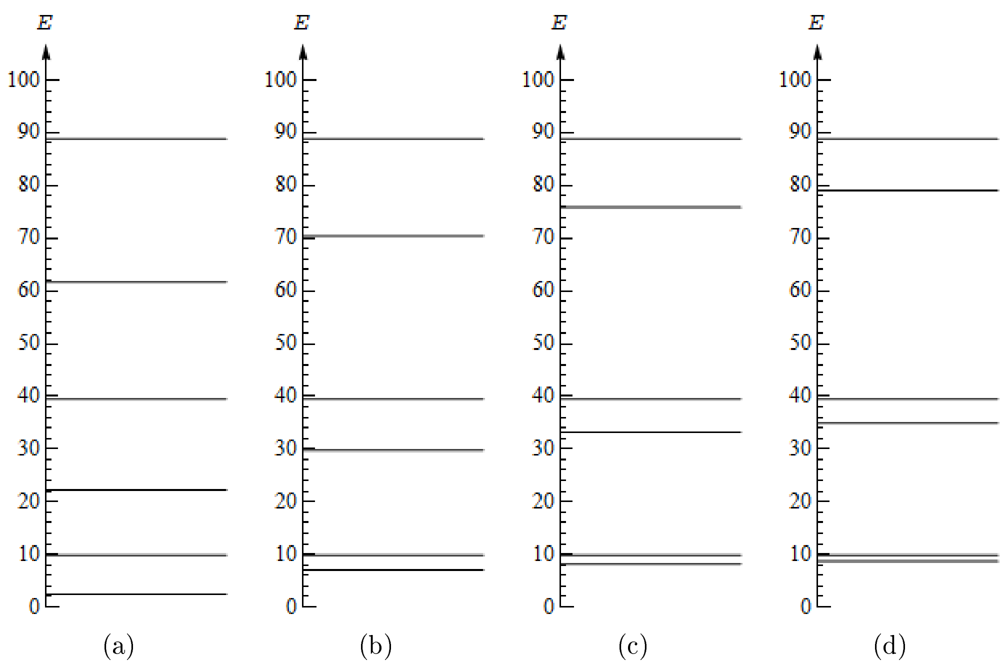


Figura 3.4: Niveles de energía en unidades de $\hbar^2/2ma^2$ de una partícula dentro de una caja de paredes infinitas y longitud $2a$ con 1 potencial delta con (a) $\lambda = 0$, (b) $\lambda = 5$, (c) $\lambda = 10$ y (d) $\lambda = 15$.

En la Fig. 3.4 graficamos algunos niveles de energía de una partícula dentro de la caja de paredes infinitas de longitud $2a$ conteniendo un potencial delta con intensidad de a) $\lambda = 0$, es decir, la caja de potencial vacía, b) $\lambda = 5$, c) $\lambda = 10$ y d) $\lambda = 15$. Para la caja vacía $\phi = n\pi/2$, mientras que para las demás, sustituimos directamente los valores numéricos de ϕ soluciones de la Ec. (3.51), en la Ec. (3.59).

Por otra parte, en los casos en que $\rho \neq 1$, es decir $0 < \rho < 1$ (Fig. 3.2a) o $\rho > 1$ (Fig. 3.2c), también podemos obtener el espectro de energías. Dando valores numéricos a λ y ρ en la ecuación de dispersión (3.49), eligiendo un dominio D (recordando que $D = \{\phi \in \mathbf{R} | 0 < \phi < \phi_f\}$) y utilizando el algoritmo B.1, se pueden encontrar los valores de ϕ soluciones de dicha ecuación de dispersión. En el caso particular en que $\lambda = 0$, la Ec. (3.49) se reduce a

$$\operatorname{sen}(\phi(1+\rho)) = 0, \tag{3.60}$$

la cual se satisface si $\phi(1+\rho) = n\pi$, o bien

$$\phi = \frac{n\pi}{1+\rho}. \tag{3.61}$$

Como se ha mencionado anteriormente, ρ está relacionado con la longitud total de la caja de potencial ya que $L = (1+\rho)$.

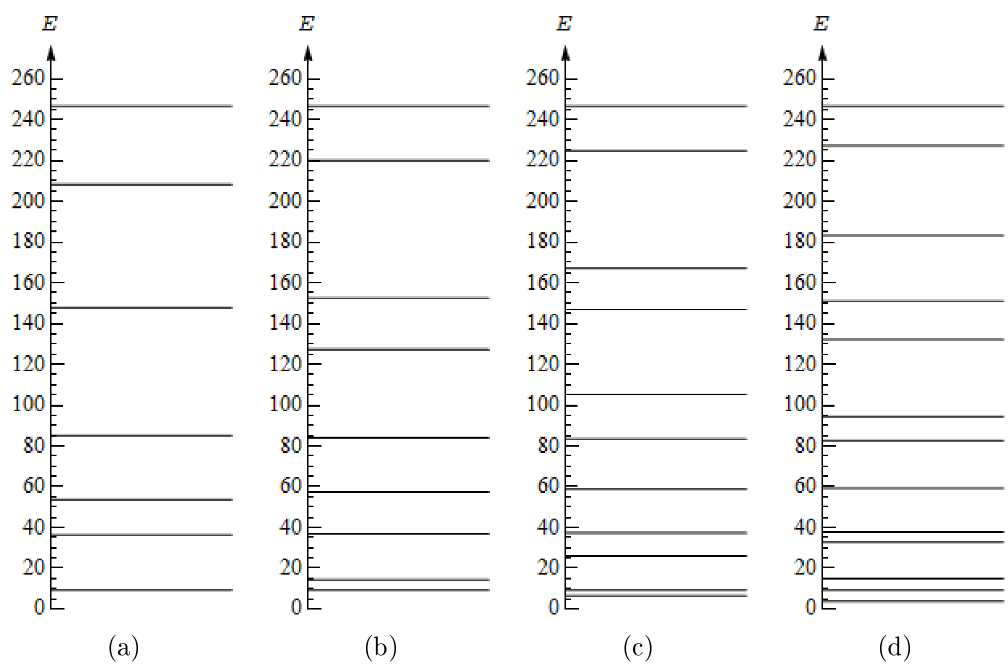


Figura 3.5: Niveles de energía en unidades de $\hbar^2/2ma^2$ de una partícula dentro de una caja de paredes infinitas con 1 potencial delta de intensidad fija $\lambda = 15$ y con (a) $\rho = 0.4$, (b) $\rho = 0.8$, (c) $\rho = 1.2$ y (d) $\rho = 1.6$.

En la Fig. 3.5 graficamos algunos niveles de energía de una partícula dentro de la caja de paredes infinitas manteniendo $\lambda = 15$ constante y haciendo a) $\rho = 0.4$, b) $\rho = 0.8$, c) $\rho = 1.2$ y d) $\rho = 1.6$.

Al comparar las Figs. 3.4 y 3.5 vemos que cuando variamos la intensidad del potencial delta manteniendo fijo la longitud total de la caja de potencial, hay niveles de energía que se mantienen fijos, independientemente de la variación del potencial delta, esto también ocurre cuando variamos sólo la longitud total de la caja de potencial manteniendo fijo la intensidad del potencial delta. Al final de este capítulo se presenta un análisis detallado de estas interesantes características.

3.2.2. $N \geq 2$ potenciales delta

Usando la Ec. (3.48) y los polinomios de Chebyshev de segundo tipo, también podemos obtener la ecuación de dispersión y el espectro de energías para los sistemas con más de un potencial delta. Como ejemplos, analizaremos los casos con 2, 25 y 50 potenciales delta dentro de la caja de paredes infinitas.

Para el primer caso, con $N = 2$ el polinomio $U_{N-1}(\eta)$ está dado por $U_1(\eta) = 2\eta = 2(\cos(\rho\phi) + (\lambda/\phi)\,\mathrm{sen}(\rho\phi))$, donde para esta última igualdad hemos usado las Ecs. (2.85) y (3.25), y $U_{N-2}(\eta)$ es simplemente $U_0(\eta) = 1$. Así, sustituyendo $U_1(\eta)$ y $U_0(\eta)$ en la Ec. (3.48), se tiene

$$\begin{aligned} f(\rho,\phi,\lambda) &= 2(\cos(\phi) + \frac{\lambda}{\phi}\,\mathrm{sen}(\phi))[(1 + \frac{\lambda}{\phi}\,\mathrm{sen}(2\phi))\,\mathrm{sen}(\phi(1+\rho)) \\ &+ \frac{\lambda}{\phi}(\cos(2\phi) - 1)\cos(\phi(1+\rho))] - \mathrm{sen}(\phi) = 0, \end{aligned} \tag{3.62}$$

la ecuación anterior es la ecuación de dispersión para el sistema con dos potenciales delta. Para este sistema, así como para el sistema con 25 potenciales delta, fijemos $\rho = 1$ (dejemos para el sistema con 50 potenciales delta el análisis más exhaustivo al variar también ρ, parámetro relacionado con la longitud total de la caja de potencial). Así, con $N = 2$, los potenciales delta se encuentran en las posiciones a y $2a$ respectivamente, y la caja de potencial tiene una longitud total de $3a$.

En la Fig. 3.6 graficamos los primeros niveles de energía de una partícula dentro de la caja de paredes infinitas de longitud $3a$ con 2 potenciales delta igualmente espaciados y con intensidades de a) $\lambda = 0$, la caja vacía, b) $\lambda = 5$, c) $\lambda = 10$ y d) $\lambda = 15$.

Análogamente a los sistemas con uno y con dos deltas, también podemos obtener los polinomios de Chebyshev $U_{N-1}(\eta)$ y $U_{N-2}(\eta)$ para los sistemas con $N = 25$ y 50 deltas. Sustituyendo en la Ec. (3.48) los pares de polinomios correspondientes a cada uno de estos sistemas, obtenemos sus respectivas ecuaciones de dispersión. Elijamos distintos valores numéricos para λ y mantengamos $\rho = 1$ en la ecuación de dispersión para el sistemas con 25 deltas.

En la Fig. 3.7 graficamos algunos niveles permitidos de energía de una partícula dentro de la caja de paredes infinitas de longitud $26a$ con 25 potenciales delta igualmente espaciados y con intensidades de a) $\lambda = 0$, la caja vacía, b) $\lambda = 5$, c) $\lambda = 10$ y d) $\lambda = 15$.

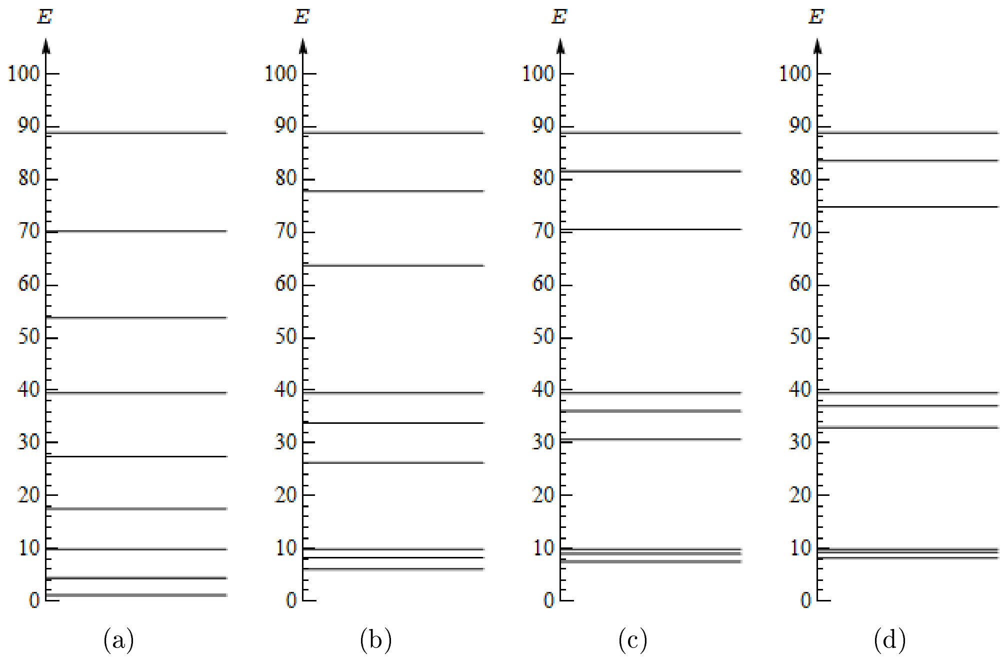


Figura 3.6: Niveles de energía en unidades de $\hbar^2/2ma^2$ de una partícula dentro de una caja de paredes infinitas de longitud $3a$ con 2 potenciales delta siendo (a) $\lambda = 0$, (b) $\lambda = 5$, (c) $\lambda = 10$ y (d) $\lambda = 15$.

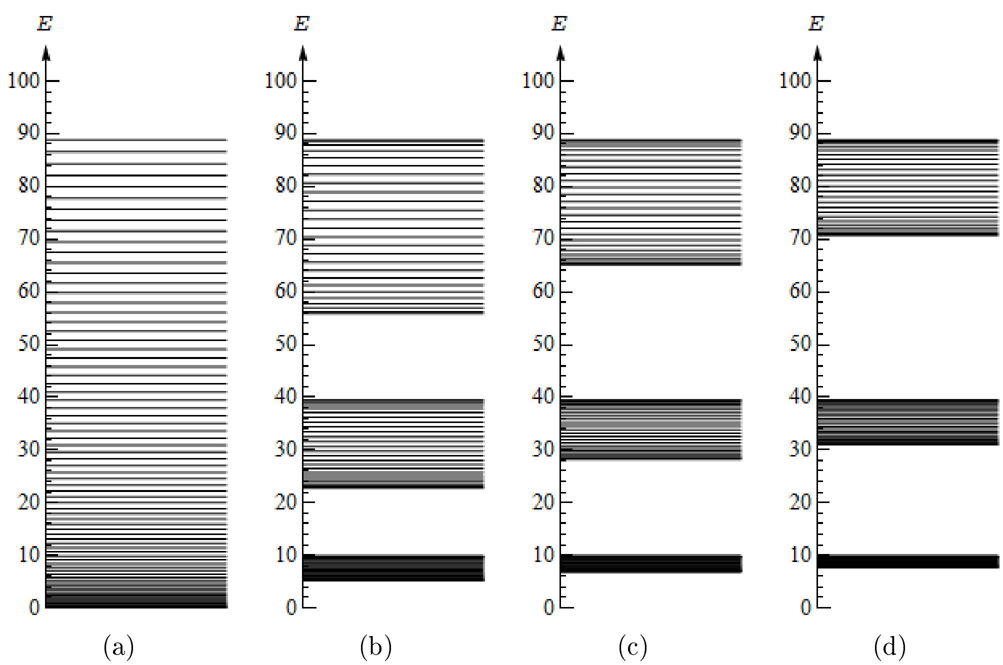


Figura 3.7: Niveles de energía en unidades de $\hbar^2/2ma^2$ de una partícula dentro de una caja de paredes infinitas y longitud $26a$ con 25 potenciales delta siendo (a) $\lambda = 0$, (b) $\lambda = 5$, (c) $\lambda = 10$ y (d) $\lambda = 15$.

Por último, para el sistema con 50 potenciales delta consideremos los casos cuando $\rho = 1$, $0 < \rho < 1$ y $\rho > 1$.

Si $\rho = 1$, la longitud total de la caja de paredes infinitas es de $51a$ y los potenciales delta se localizan en las posiciones a, $2a$, ... , $50a$. Para este caso, elijamos distintos valores de λ y para cada valor, obtengamos los espectros de energías.

En los casos en que $\rho \neq 1$, la longitud total de la caja de paredes infinitas es de $L = (1 + 50\rho)a$, pues de acuerdo a la Fig. 2.3, para un sistema con N potenciales delta, $L = (a + Ns) = a(1 + N\rho)$ ya que $s = \rho a$. En estos casos, los potenciales delta se localizan en las posiciones a, $a + \rho a$, ... , $a + 50\rho a$. También, para estos casos hagamos $\lambda = 15$ y variemos ρ en 0.4, 0.8, 1.2 y 1.6, así, para cada valor de ρ, la longitud total de la caja de potencial es de $L = 41a$, $81a$, $121a$ y $161a$, respectivamente.

En la Fig. 3.8 graficamos algunos niveles de energía de una partícula dentro de la caja de paredes infinitas de longitud $51a$ con 50 potenciales delta espaciados periódicamente con intensidades de a) $\lambda = 0$, b) $\lambda = 5$, c) $\lambda = 10$ y d) $\lambda = 15$.

En la Fig. 3.9 graficamos algunos niveles de energía de una partícula dentro de la caja de paredes infinitas conteniendo 50 potenciales delta, manteniendo fijo sus respectivas intensidades en $\lambda = 15$ y haciendo a) $\rho = 0.4$, b) $\rho = 0.8$, c) $\rho = 1.2$ y d) $\rho = 1.6$.

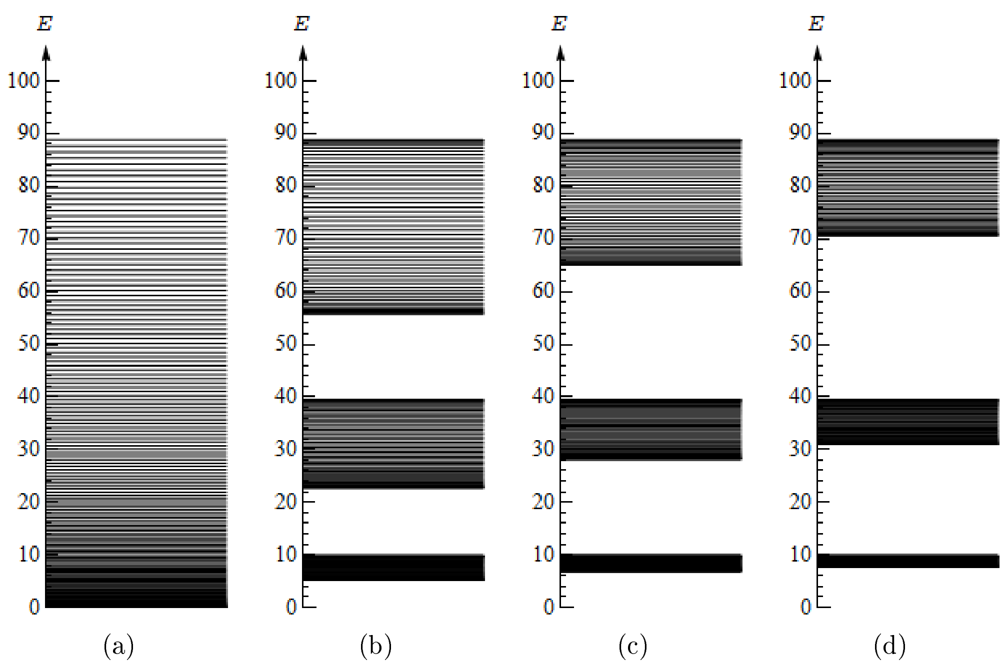
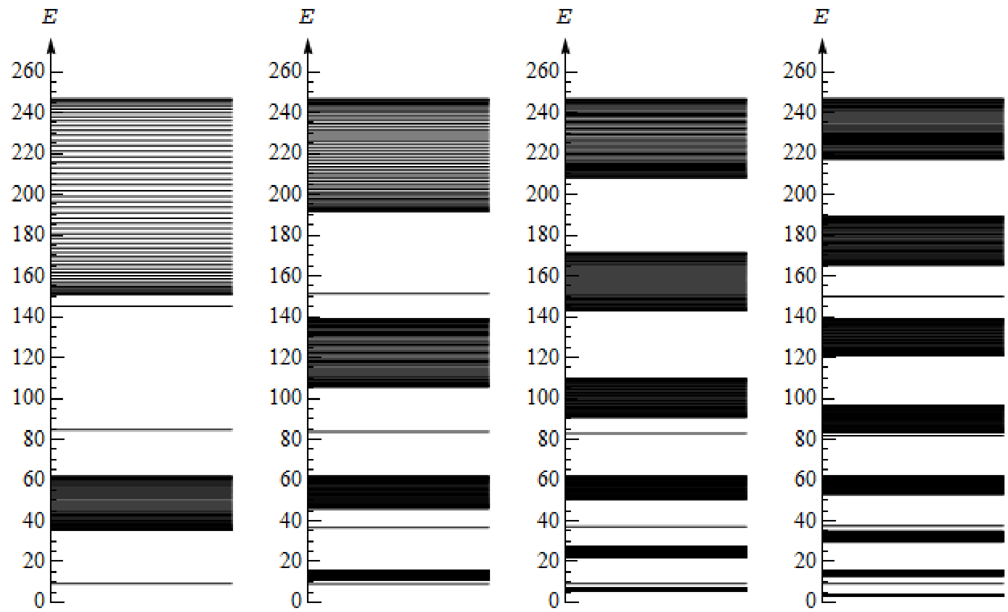


Figura 3.8: Niveles de energía en unidades de $\hbar^2/2ma^2$ de una partícula dentro de una caja de paredes infinitas y longitud $51a$ con 50 potenciales delta de Dirac siendo (a) $\lambda = 0$, (b) $\lambda = 5$, (c) $\lambda = 10$ y (d) $\lambda = 15$.



(a) (b) (c) (d)

Figura 3.9: Niveles de energía en unidades de $\hbar^2/2ma^2$ de una partícula dentro de una caja de paredes infinitas con 50 potenciales delta con una intensidad común de $\lambda = 15$ y con (a) $\rho = 0.4$, (b) $\rho = 0.8$, (c) $\rho = 1.2$ y (d) $\rho = 1.6$.

Analicemos las gráficas de los espectros de energías mostradas en esta sección, para ello, en general tomemos una caja de potencial de longitud $L = a(1 + N\rho)$ conteniendo N potenciales delta.

Si $\rho = 1$, los potenciales delta están espaciados periódicamente dentro de la caja y se encuentran en las posiciones a, $2a$, $\ldots$, Na, respectivamente; con esta configuración, analicemos los dos valores límites de λ. Si $\lambda = 0$, entonces tendremos solamente la caja de potencial vacía de longitud $L = a(1 + N)$ y en base a las Ecs. (3.53) y (3.61), en general, para una caja de potencial de paredes infinitas y longitud L

$$\phi = \frac{n\pi a}{L}, \tag{3.63}$$

así, sustituyendo la ecuación anterior en la Ec. (3.55), obtenemos la expresión de los niveles de energía para $\lambda = 0$

$$E_{\lambda=0} = \frac{n^2\pi^2}{(1+N)^2} E_u, \tag{3.64}$$

donde E_u se ha definido en la Ec. 3.57. En el otro límite, cuando $\lambda \to \infty$, tendremos $N+1$ celdas de potencial dentro de la caja de paredes infinitas, siendo $s = a$ la longitud de cada celda y en este caso $L = a$, por lo tanto,

$$\phi = n\pi, \tag{3.65}$$

y nuevamente, al sustituir la expresión anterior en la Ec. (3.55) se obtiene

$$E_{\lambda\to\infty} = n^2\pi^2 E_u, \tag{3.66}$$

en la ecuación anterior se expresan los niveles de energía permitidos para cada celda y dado que tenemos $N+1$ celdas de paredes infinitas dentro de la caja de potencial de paredes infinitas, tendremos $N+1$ niveles de energías con el mismo valor numérico, es decir tenemos el caso de degeneración [13]. Así, cuando tenemos potenciales delta con intensidades $0 < \lambda < \infty$ dentro de la caja de paredes infinitas, los niveles de energía E_λ debido a estos potenciales, se encuentran entre $E_{\lambda=0} < E_\lambda < E_{\lambda\to\infty}$. También, de las Figs. 3.4, 3.6, 3.7 y 3.8 podemos ver que para valores de $\lambda \neq 0$, los niveles de energía se agrupan formando bandas de energía alternadas por regiones vacías, bandas vacías que se acentúan conforme se incrementa el valor numérico de λ. Cabe mencionarse también que cada banda de energía está formado por $N+1$ niveles de energía, permaneciendo constante su nivel de energía máximo independientemente del valor numérico de λ. Debido a que en los niveles de energía máximos para las primeras tres bandas de energía de cada configuración de las Figs. 3.4, 3.6, 3.7 y 3.8, n corresponden a $(N+1)$, $2(N+1)$, $3(N+1)$ y dado que los valores numéricos de estos niveles de energía son, respectivamente $\pi^2 E_u$, $4\pi^2 E_u$ y $9\pi^2 E_u$, podemos suponer que los niveles de energía máximos de cada banda satisfacen la Ec. (3.64), aún cuando $\lambda \neq 0$.

Por otra parte, si $0 < \rho < 1$ o $\rho > 1$, de acuerdo a la Fig. 2.3 y dado que $s = \rho a$, los potenciales delta se encuentran en las posiciones a, $a+\rho a$, $\ldots$, $a+(N-1)\rho a$. Con $\lambda = 0$ tendremos la caja de potencial vacía de longitud $L = a(1+N\rho)$, sustituyendo L en la Ec. (3.63) tenemos

$$\phi = \frac{n\pi}{1+N\rho}, \tag{3.67}$$

y por lo tanto, sustituyendo la ecuación anterior en la Ec. (3.55), los niveles de energía para estos casos, están dados por

$$E_{\lambda=0} = \frac{n^2\pi^2}{(1+\rho N)^2} E_u. \tag{3.68}$$

Si $\lambda \to \infty$, también tendremos $N+1$ celdas de potencial dentro de la caja de paredes infinitas, pero ahora, tendremos una celda de potencial de longitud a (la primera celda de izquierda a derecha del sistema) y N celdas de longitud $s = \rho a$. Para la celda de longitud a, ϕ y $E_{\lambda\to\infty}$ están dadas por las Ecs. (3.65) y (3.66) respectivamente, mientras que para las N celdas de longitud ρa, de acuerdo con la Ec. (3.63)

$$\phi = \frac{n\pi}{\rho} \tag{3.69}$$

y en consecuencia

$$E_{\lambda\to\infty} = \frac{n^2\pi^2}{\rho^2} E_u. \tag{3.70}$$

Análogamente al caso con $\rho = 1$, los niveles de energía E_λ debido a la intensidad $\lambda \neq 0$ de los potenciales delta, se encuentran entre $E_{\lambda=0} < E_\lambda < E_{\lambda\to\infty}$ donde $E_{\lambda=0}$ y $E_{\lambda\to\infty}$ están ahora dadas por las Ecs. (3.68) y (3.70), además, como puede verse en los espectros de energías de las configuraciones de las Figs. 3.5 y 3.9, en un intervalo dado de energías, para una intensidad λ fija y conforme se incrementa la longitud total de la caja de potencial, los niveles de energías también forman bandas de energía conteniendo también $N + 1$ niveles de energías, sin embargo, ahora los máximos de cada banda no satisfacen la Ec. (3.64) sino la Ec. (3.68), es decir, los máximos de cada banda dependen de la longitud total de la caja de potencial y no de la intensidad de los potenciales delta.

Capítulo 4

Sistemas desordenados de potenciales delta de Dirac

En el capítulo anterior, calculamos la forma de w y de z para el potencial delta de Dirac y obtuvimos los posibles niveles de energía que puede tomar una partícula en el sistema de un conjunto de potenciales delta contenidos dentro de una caja de paredes infinitas. Sin embargo, en tal análisis, los potenciales delta están localizados periódicamente y todos tienen la misma intensidad. En este capítulo extendemos nuestro análisis, considerando ahora la posibilidad de que las posiciones de estos potenciales puedan no estar en forma periódica, ni tener todos la misma intensidad; con esta generalización, ya no podemos usar la matriz $\mathbf{Q^N}$ para obtener las dos relaciones lineales entre los coeficientes de $\psi_0(x)$ y $\psi_N(x)$, pues como se sabe, $\mathbf{Q^N}$ fue obtenido considerando la periodicidad en las posiciones de los potenciales delta y la misma intensidad para todos ellos. En este capítulo se derivará una nueva matriz de transferencia para este caso más general; se obtendrá la forma de la ecuación de dispersión y también se obtendrán los espectros de energías de una partícula dentro de algunos de estos sistemas más generales.

4.1. Ecuación de dispersión de los sistemas desordenados de potenciales delta de Dirac

Analicemos el caso general en el cual se tienen N potenciales delta dentro de una caja de potencial de paredes infinitas de longitud $\beta_{N+1}a$ (véase la Fig. 4.1). Supongamos que los potenciales delta se encuentran en las posiciones $x = \beta_1 a$, $\beta_2 a$, $\ldots$, $\beta_{n-1}a$, $\beta_n a$, $\beta_{n+1}a$, $\ldots$, $\beta_{N-1}a$, $\beta_N a$, siendo c_1, c_2, $\ldots$, c_{n-1}, c_n, c_{n+1}, $\ldots$, c_{N-1}, c_N sus respectivas intensidades y con $\beta_{n-1} < \beta_n < \beta_{n+1}$.

En el intervalo $\beta_n a < x < \beta_{n+1}a$ el potencial $V(x) = 0$, por lo que la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo (Ec. (2.13)) toma la forma análoga a la expresada por la Ec. (3.3) del capítulo anterior, salvo que ahora tenemos $\psi_n(x)$ en vez de $\psi(x)$, es

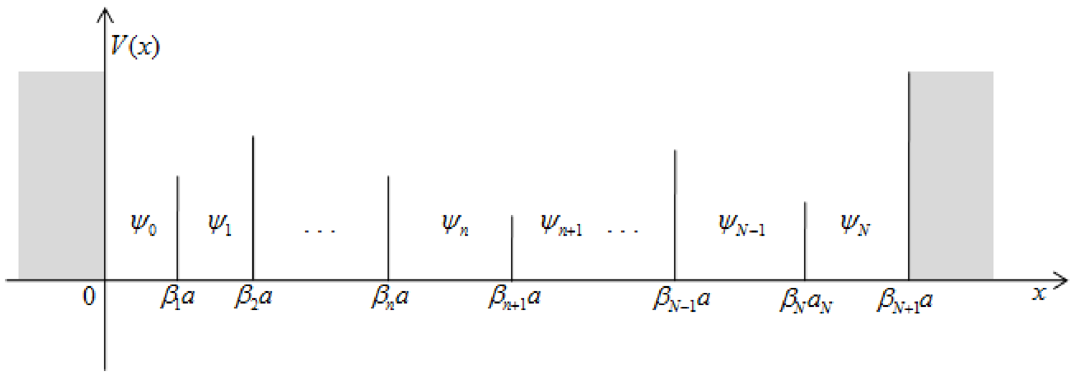


Figura 4.1: N potenciales delta dentro de una caja de paredes infinitas.

decir

$$\frac{d^2\psi_n(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi_n(x) = 0, \tag{4.1}$$

la solución general de la ecuación anterior es de la forma

$$\psi_n(x) = A_n e^{ikx} + B_n e^{-ikx} \qquad \beta_n a < x < \beta_{n+1} a, \tag{4.2}$$

cambiando $\psi_n(x)$ por $\psi_{n+1}(x)$ en la Ec. (4.1), se obtiene que su solución general es de la forma

$$\psi_{n+1}(x) = A_{n+1} e^{ikx} + B_{n+1} e^{-ikx} \qquad \beta_{n+1} a < x < \beta_{n+2} a. \tag{4.3}$$

Las expresiones para las derivadas de $\psi_n(x)$ y $\psi_{n+1}(x)$ son, respectivamente

$$\frac{d\psi_n(x)}{dx} = ik(A_n e^{ikx} - B_n e^{-ikx}) \qquad \beta_n a < x < \beta_{n+1} a, \tag{4.4}$$

y

$$\frac{d\psi_{n+1}(x)}{dx} = ik(A_{n+1} e^{ikx} - B_{n+1} e^{-ikx}) \qquad \beta_{n+1} a < x < \beta_{n+2} a, \tag{4.5}$$

aplicando la propiedad de continuidad de la función de onda en $x = \beta_{n+1} a$, de las Ecs. (4.2) y (4.3) obtenemos

$$\psi_n(\beta_{n+1} a) = \psi_{n+1}(\beta_{n+1} a), \tag{4.6}$$

o bien

$$A_n e^{i\beta_{n+1} ka} + B_n e^{-i\beta_{n+1} ka} = A_{n+1} e^{i\beta_{n+1} ka} + B_{n+1} e^{-i\beta_{n+1} ka}. \tag{4.7}$$

Tal como se hizo en la sección 3.1 del Capítulo 3, podemos establecer otra igualdad que relacione $\psi_{n+1}(\beta_{n+1} a)$ con las derivadas de $\psi_n(x)$ y $\psi_{n+1}(x)$ evaluadas en $\beta_{n+1} a - \epsilon$ y $\beta_{n+1} a + \epsilon$ respectivamente, es decir, podemos establecer

$$\frac{2mc_{n+1}}{\hbar^2}\psi_{n+1}(\beta_{n+1} a) = \frac{d\psi_{n+1}(x)}{dx}|_{\beta_{n+1} a + \epsilon} - \frac{d\psi_n(x)}{dx}|_{\beta_{n+1} a - \epsilon}, \tag{4.8}$$

o bien, en el límite cuando $\epsilon \to 0$ se tiene

$$\frac{2mc_{n+1}}{\hbar^2}(A_{n+1}e^{i\beta_{n+1}ka} + B_{n+1}e^{-i\beta_{n+1}ka}) = ik(A_{n+1}e^{i\beta_{n+1}ka} \\ -B_{n+1}e^{-i\beta_{n+1}ka}) - ik(A_n e^{i\beta_{n+1}ka} - B_n e^{-i\beta_{n+1}ka}), \tag{4.9}$$

luego de agrupar términos, la ecuación anterior puede reescribirse como

$$\begin{aligned} A_n ike^{i\beta_{n+1}ka} \quad - \quad B_n ike^{-i\beta_{n+1}ka} = A_{n+1}(\frac{i\hbar^2 k - 2mc_{n+1}}{\hbar^2})e^{i\beta_{n+1}ka} \\ - \quad B_{n+1}(\frac{i\hbar^2 k + 2mc_{n+1}}{\hbar^2})e^{-i\beta_{n+1}ka}. \end{aligned} \tag{4.10}$$

En forma matricial, las Ecs. (4.7) y (4.10) pueden reescribirse como

$$\mathbf{T}\begin{pmatrix} A_n \\ \\ B_n \end{pmatrix} = \mathbf{U}\begin{pmatrix} A_{n+1} \\ \\ B_{n+1} \end{pmatrix}, \tag{4.11}$$

donde

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} e^{i\beta_{n+1}ka} & e^{-i\beta_{n+1}ka} \\ \\ ike^{i\beta_{n+1}ka} & -ike^{-i\beta_{n+1}ka} \end{pmatrix}, \tag{4.12}$$

y

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} e^{i\beta_{n+1}ka} & e^{-i\beta_{n+1}ka} \\ \\ (\frac{i\hbar^2 k - 2mc_{n+1}}{\hbar^2})e^{i\beta_{n+1}ka} & -(\frac{i\hbar^2 k + 2mc_{n+1}}{\hbar^2})e^{-i\beta_{n+1}ka} \end{pmatrix}. \tag{4.13}$$

Por otra parte, la inversa de $\mathbf{T}$ está dada por

$$\mathbf{T}^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}e^{-i\beta_{n+1}ka} & -i\frac{1}{2k}e^{-i\beta_{n+1}ka} \\ \\ \frac{1}{2}e^{i\beta_{n+1}ka} & i\frac{1}{2k}e^{i\beta_{n+1}ka} \end{pmatrix}, \tag{4.14}$$

y la inversa de $\mathbf{U}$ es

$$\mathbf{U}^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{(\hbar^2 k - 2imc_{n+1})}{2\hbar^2 k}e^{-i\beta_{n+1}ka} & -i\frac{1}{2k}e^{-i\beta_{n+1}ka} \\ \\ \frac{(\hbar^2 k + 2imc_{n+1})}{2\hbar^2 k}e^{i\beta_{n+1}ka} & i\frac{1}{2k}e^{i\beta_{n+1}ka} \end{pmatrix}. \tag{4.15}$$

Multiplicando ambos miembros de la Ec. (4.11) por $\mathbf{T}^{-1}$ se obtiene

$$\begin{pmatrix} A_n \\ \\ B_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 + i\frac{mc_{n+1}}{\hbar^2 k} & i\frac{mc_{n+1}}{\hbar^2 k}e^{-2i\beta_{n+1}ka} \\ \\ -i\frac{mc_{n+1}}{\hbar^2 k}e^{2i\beta_{n+1}ka} & 1 - i\frac{mc_{n+1}}{\hbar^2 k} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} A_{n+1} \\ \\ B_{n+1} \end{pmatrix}, \tag{4.16}$$

análogamente, multiplicando ambos miembros de la Ec. (4.11) por $\mathbf{U}^{-1}$ obtenemos

$$\begin{pmatrix} A_{n+1} \\ \\ B_{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 - i\frac{mc_{n+1}}{\hbar^2 k} & -i\frac{mc_{n+1}}{\hbar^2 k}e^{-2i\beta_{n+1}ka} \\ \\ i\frac{mc_{n+1}}{\hbar^2 k}e^{2i\beta_{n+1}ka} & 1 + i\frac{mc_{n+1}}{\hbar^2 k} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_n \\ \\ B_n \end{pmatrix}, \tag{4.17}$$

usando cualquiera de las dos ecuaciones anteriores, podemos establecer las relaciones entre los coeficientes de las funciones de onda ψ_n y ψ_{n+1}, por ejemplo, usando la Ec. (4.16) obtenemos A_n y B_n en función de A_{n+1} y B_{n+1}, o por medio de la Ec. (4.17), podemos obtener A_{n+1} y B_{n+1} en función de A_n y B_n. Elijamos indistintamente la Ec. (4.16) para establecer estas relaciones, en este caso, podemos expresar la matriz de transferencia como

$$\mathbf{P}_{n+1}(\phi, \beta_{n+1}, \lambda_{n+1}) = \begin{pmatrix} 1 + i\frac{\lambda_{n+1}}{\phi} & i\frac{\lambda_{n+1}}{\phi}e^{-2i\beta_{n+1}\phi} \\ \\ -i\frac{\lambda_{n+1}}{\phi}e^{2i\beta_{n+1}\phi} & 1 - i\frac{\lambda_{n+1}}{\phi} \end{pmatrix}, \tag{4.18}$$

donde hemos multiplicado por a/a el término $mc_{n+1}/\hbar^2 k$, hemos hecho $ka = \phi$ y $mc_{n+1}a/\hbar^2 = \lambda_{n+1}$, en una forma más desarrollada, podemos expresar los elementos de esta matriz de transferencia como

$$\begin{aligned} w = 1 + i\frac{\lambda_{n+1}}{\phi}, \qquad z &= i\frac{\lambda_{n+1}}{\phi}e^{-2i\beta_{n+1}\phi} = \frac{\lambda_{n+1}}{\phi}\,\mathrm{sen}(2\beta_{n+1}\phi) \\ &+ i\frac{\lambda_{n+1}}{\phi}\cos(2\beta_{n+1}\phi), \end{aligned} \tag{4.19}$$

y

$$\begin{aligned} w^* = 1 - i\frac{\lambda_{n+1}}{\phi}, \qquad z^* &= -i\frac{\lambda_{n+1}}{\phi}e^{2i\beta_{n+1}\phi} = \frac{\lambda_{n+1}}{\phi}\,\mathrm{sen}(2\beta_{n+1}\phi) \\ &- i\frac{\lambda_{n+1}}{\phi}\cos(2\beta_{n+1}\phi). \end{aligned} \tag{4.20}$$

Usando recursivamente la Ec. (4.16) podemos relacionar los coeficientes de las funciones de onda $\psi_0(x)$ y $\psi_N(x)$, explícitamente, con $n = 0$ en la Ec. (4.16), tenemos la relación entre los coeficientes de $\psi_0(x)$ y $\psi_1(x)$

$$\begin{pmatrix} A_0 \\ \\ B_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 + i\frac{\lambda_1}{\phi} & i\frac{\lambda_1}{\phi}e^{-2i\beta_1\phi} \\ \\ -i\frac{\lambda_1}{\phi}e^{2i\beta_1\phi} & 1 - i\frac{\lambda_1}{\phi} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ \\ B_1 \end{pmatrix} = \mathbf{P}_1(\phi, \beta_1, \lambda_1) \begin{pmatrix} A_1 \\ \\ B_1 \end{pmatrix}, \tag{4.21}$$

con $n = 1$ se tienen las relaciones entre los coeficientes de $\psi_1(x)$ y $\psi_2(x)$

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ \\ B_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 + i\frac{\lambda_2}{\phi} & i\frac{\lambda_2}{\phi}e^{-2i\beta_2\phi} \\ \\ -i\frac{\lambda_2}{\phi}e^{2i\beta_2\phi} & 1 - i\frac{\lambda_2}{\phi} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_2 \\ \\ B_2 \end{pmatrix} = \mathbf{P}_2(\phi, \beta_2, \lambda_2) \begin{pmatrix} A_2 \\ \\ B_2 \end{pmatrix}, \tag{4.22}$$

con $n = 2$ se obtienen las relaciones entre los coeficientes de $\psi_2(x)$ y $\psi_3(x)$

$$\begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 + i\frac{\lambda_3}{\phi} & i\frac{\lambda_3}{\phi}e^{-2i\beta_3\phi} \\ -i\frac{\lambda_3}{\phi}e^{2i\beta_3\phi} & 1 - i\frac{\lambda_3}{\phi} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix} = \mathbf{P}_3(\phi, \beta_3, \lambda_3) \begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix}, \quad (4.23)$$

siguiendo este procedimiento, cuando finalmente llegamos a $n = N-1$, establecemos las dos relaciones lineales entre los coeficientes de las funciones de onda $\psi_{N-1}(x)$ y $\psi_N(x)$

$$\begin{pmatrix} A_{N-1} \\ B_{N-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 + i\frac{\lambda_N}{\phi} & i\frac{\lambda_N}{\phi}e^{-2i\beta_N\phi} \\ -i\frac{\lambda_N}{\phi}e^{2i\beta_N\phi} & 1 - i\frac{\lambda_N}{\phi} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_N \\ B_N \end{pmatrix} = \mathbf{P}_N(\phi, \beta_N, \lambda_N) \begin{pmatrix} A_N \\ B_N \end{pmatrix}, \quad (4.24)$$

sustituyendo la Ec. (4.22) en la Ec. (4.21) relacionamos los coeficientes de $\psi_0(x)$ y $\psi_1(x)$; a su vez, sustituyendo la Ec. (4.23) en la expresión matricial que relaciona los coeficientes de $\psi_0(x)$ y $\psi_1(x)$, podemos establecer las relaciones entre los coeficientes de $\psi_0(x)$ y $\psi_2(x)$; continuando con este proceso recursivo, como se dijo anteriormente, podemos llegar a relacionar coeficientes de $\psi_0(x)$ y $\psi_N(x)$, esta relación puede expresarse como

$$\begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} = \mathbf{P}_1(\phi, \beta_1, \lambda_1) \cdot \mathbf{P}_2(\phi, \beta_2, \lambda_2) \cdot \ldots \cdot \mathbf{P}_N(\phi, \beta_N, \lambda_N) \begin{pmatrix} A_N \\ B_N \end{pmatrix}. \quad (4.25)$$

Por otra parte, dado que para $n = 0$ la Ec. (4.2) toma la forma

$$\psi_0(x) = A_0 e^{ikx} + B_0 e^{-ikx} \qquad 0 < x < \beta_1 a, \quad (4.26)$$

para $n = N$, la misma Ec. (4.2) puede reescribirse como

$$\psi_N(x) = A_N e^{ikx} + B_N e^{-ikx} \qquad \beta_N a_N < x < \beta_{N+1} a, \quad (4.27)$$

pero, debido a las condiciones de frontera, es decir, debido a que $\psi_0(0) = \psi_N(\beta_{N+1}a) = 0$, la función de onda $\psi_0(x)$ puede expresarse como

$$\psi_0(x) = A_0 e^{ikx} - A_0 e^{-ikx} = A_0(e^{ikx} - e^{-ikx}), \quad (4.28)$$

y la función de onda $\psi_N(x)$ puede reescribirse como

$$\psi_N(x) = A_N e^{ikx} - A_N e^{2i\beta_{N+1}ka} e^{-ikx} = A_N(e^{ikx} - e^{ik(2\beta_{N+1}a - x)}). \quad (4.29)$$

Comparando las Ecs. (4.26) y (4.27) con las Ecs. (4.28) y (4.29) vemos que $B_0 = -A_0$ y $B_N = -A_N e^{2i\beta_{N+1}ka}$, así, podemos volver a reescribir la Ec. (4.25) como

$$\begin{pmatrix} A_0 \\ -A_0 \end{pmatrix} = \mathbf{P}_1(\phi, \beta_1, \lambda_1) \cdot \mathbf{P}_2(\phi, \beta_2, \lambda_2) \ldots \cdot \mathbf{P}_N(\phi, \beta_N, \lambda_N) \begin{pmatrix} A_N \\ -A_N e^{2i\beta_{N+1}\phi} \end{pmatrix}, \quad (4.30)$$

las matrices $\mathbf{P}_1(\phi, \beta_1, \lambda_1)$, $\mathbf{P}_2(\phi, \beta_2, \lambda_2)$, $\cdots$, $\mathbf{P}_N(\phi, \beta_N, \lambda_N)$, son de la forma dada en la Ec. (2.39) y el determinante de cada una de estas matrices es la unidad. Sea $\mathbf{P}(\phi, \beta_1, \beta_2, ..., \beta_N, \lambda_1, \lambda_2, ..., \lambda_N)$ la matriz que resulta al hacer el producto de las matrices de tranferencia $\mathbf{P}_1$, $\mathbf{P}_2$, $\cdots$, $\mathbf{P}_N$. La matriz $\mathbf{P}(\phi, \beta_1, \beta_2, ..., \beta_N, \lambda_1, \lambda_2, ..., \lambda_N)$ conserva las mismas propiedades que tienen las matrices $\mathbf{P}_1$, $\mathbf{P}_2$, $\cdots$, $\mathbf{P}_N$, es decir

$$\mathbf{P}(\phi, \beta_1, \beta_2, ..., \beta_N, \lambda_1, \lambda_2, ..., \lambda_N) = \begin{pmatrix} W_T & Z_T \\ Z_T^* & W_T^* \end{pmatrix}, \tag{4.31}$$

y

$$\det \mathbf{P}(\phi, \beta_1, \beta_2, ..., \beta_N, \lambda_1, \lambda_2, ..., \lambda_N) = |W_T|^2 - |Z_T|^2 = 1, \tag{4.32}$$

donde para esta última igualdad hemos usado la propiedad de que el determinante de cada matriz de transferencia $\mathbf{P}_1$, $\mathbf{P}_2$, $\cdots$, $\mathbf{P}_N$ es la unidad y también hemos usado reiteradamente la propiedad de que para cualesquiera matrices cuadradas de 2x2 $\mathbf{M}_1$ y $\mathbf{M}_2$, satisfacen que [14]

$$\det(\mathbf{M}_1\mathbf{M}_2) = \det \mathbf{M}_1 \det \mathbf{M}_2. \tag{4.33}$$

Así, los respectivos elementos de la matriz $\mathbf{P}$, W_T, Z_T, W_T^* y Z_T^*, son los que resultan al hacer el producto de los respectivos elementos de las N matrices de transferencia y además $W_T = \mathrm{Re}(W_T) + i\mathrm{Im}(W_T)$ y $Z_T = \mathrm{Re}(Z_T) + i\mathrm{Im}(Z_T)$. Sustituyendo la Ec. (4.31) en la Ec. (4.30), se tiene

$$\begin{pmatrix} A_0 \\ -A_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} W_T & Z_T \\ Z_T^* & W_T^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_N \\ -A_N e^{2i\beta_{N+1}\phi} \end{pmatrix}, \tag{4.34}$$

de la ecuación matricial anterior podemos obtener la ecuación de dispersión del sistema que estamos analizando (Fig. 4.1). Si multiplicamos ambos miembros de la Ec. (4.34) por el vector fila $(1 \quad 1)$ obtenemos

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} W_T & Z_T \\ Z_T^* & W_T^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_N \\ -A_N e^{2i\beta_{N+1}\phi} \end{pmatrix} = 0, \tag{4.35}$$

o bien, al hacer el producto de las matrices se obtiene

$$(W_T + Z_T^*)A_N - (Z_T + W_T^*)A_N e^{2i\beta_{N+1}\phi} = 0, \tag{4.36}$$

como $A_N \neq 0$, podemos reescribir la ecuación anterior como

$$(W_T + Z_T^*) - (W_T^* + Z_T)e^{2i\beta_{N+1}\phi} = 0, \tag{4.37}$$

multiplicando ambos miembros de la ecuación anterior por $e^{-i\beta_{N+1}\phi}$ se obtiene

$$W_T e^{-i\beta_{N+1}\phi} - W_T^* e^{i\beta_{N+1}\phi} - Z_T e^{i\beta_{N+1}\phi} + Z_T^* e^{-i\beta_{N+1}\phi} = 0, \tag{4.38}$$

expresando W_T, W_T^*, Z_T y Z_T^* en sus formas desarrolladas y teniendo en cuenta que $e^{i\beta_{N+1}\phi} = \cos(\beta_{N+1}\phi) + i\,\mathrm{sen}(\beta_{N+1}\phi)$ y $e^{-i\beta_{N+1}\phi} = \cos(\beta_{N+1}\phi) - i\,\mathrm{sen}(\beta_{N+1}\phi)$, podemos desarrollar la Ec. (4.38) y luego de hacer algunas simplificaciones obtenemos

$$\boxed{(\mathrm{Re}(W_T) + \mathrm{Re}(Z_T))\,\mathrm{sen}(\beta_{N+1}\phi) + (\mathrm{Im}(Z_T) - \mathrm{Im}(W_T))\cos(\beta_{N+1}\phi) = 0, \quad (4.39)}$$

la ecuación anterior es la ecuación de dispersión del sistema desordenado de N potenciales delta de Dirac dentro la caja de potencial con paredes infinitas, esta ecuación de dispersión es más general que la Ec. (3.48), dado que ahora tanto las posiciones como las intensidades de los potenciales delta pueden tener valores arbitrarios.

4.1.1. Ecuación de dispersión del sistema con 1 potencial delta

A partir de la ecuación anterior, obtengamos nuevamente la ecuación de dispersión para el sistema con un potencial delta localizado en $x = \beta_1 a$, con $\beta_2 a$ la longitud total de la caja de paredes infinitas, ahora la posición de este potencial puede elegirse dentro del intervalo $0 < x < \beta_2 a$, a diferencia de la subsección 3.2.1 del capítulo anterior, donde la posición del potencial delta siempre se localizaba en a. También, en este caso tenemos una sola matriz de transferencia pues solo se tiene un potencial delta, así, de las Ecs. (4.19) y (4.20) con $n = 0$ vemos que $\mathrm{Re}(W_T) = 1$, $\mathrm{Im}(W_T) = \lambda_1/\phi$, $\mathrm{Re}(Z_T) = (\lambda_1/\phi)\,\mathrm{sen}(2\beta_1\phi)$ y $\mathrm{Im}(Z_T) = (\lambda_1/\phi)\cos(2\beta_1\phi)$, sustituyendo las cuatro expresiones anteriores en la Ec. (4.39) con $N = 1$ se tiene

$$(1 + \frac{\lambda_1}{\phi}\,\mathrm{sen}(2\beta_1\phi))\,\mathrm{sen}(\beta_2\phi) + \frac{\lambda_1}{\phi}(\cos(2\beta_1\phi) - 1)\cos(\beta_2\phi) = 0, \qquad (4.40)$$

la ecuación anterior es la ecuación de dispersión para el sistema con un potencial delta dentro de la caja de paredes infinitas, coincide con la ecuación de dispersión (3.49) si hacemos $\beta_1 = 1$ y $\beta_2 = (1 + \rho)$, pero (4.40) es más general, pues como se dijo anteriormente, ahora la posición del potencial delta puede estar en cualquier punto dentro del intervalo $0 < x < \beta_2 a$.

4.2. Espectros de energías en los sistemas desordenados con potenciales delta

Fijando un sistema específico con N potenciales delta y partiendo del sistema ordenado, podemos eliminar aleatoriamente un potencial delta para simular una vacancia en el arreglo, mover este potencial de su posición ordenada en una cantidad ϵ pequeña, simulando así un desorden en la configuración de la red, aumentar o disminuir su intensidad para simular un centro dispersor (átomo o molécula) distinto del resto que conforman todo el sistema. También podemos mover simultáneamente las posiciones de todos los potenciales delta construyendo así un sistema con desorden estructural, lo mismo podemos hacer con sus intensidades, en este caso construimos un sistema con desorden composicional, más aún, ampliando el análisis, podemos construir un sistema con desorden total, donde se varían tanto las posiciones como las intensidades de todos los potenciales delta.

También es posible obtener el espectro de energías de una partícula dentro de los sistemas desordenados. Manteniendo a como nuestra unidad de longitud y dando valores numéricos a β_1, β_2, $\cdots$, β_N, β_{N+1}, a las intensidades de los potenciales delta λ_1, λ_2, $\cdots$, λ_N, y luego de realizar el producto de las N matrices de transferencia correspondientes a los N potenciales, encontramos las expresiones para W_T y Z_T que al sustituirlas en la Ec. 4.39 obtenemos la ecuación de dispersión del sistema con tales valores numéricos especificados, luego, con el algoritmo del Apéndice B.3 se pueden encontrar los valores de ϕ que satisfacen tal ecuación de dispersión y podemos seguir usando la Ec.(3.59) para obtener los espectros de energías.

4.2.1. Espectros de energías en sistemas con $N \geq 2$ potenciales delta

Obtengamos los espectros de energías para los sistemas desordenados con 2, 25 y 50 potenciales delta. Iniciemos nuestro análisis considerando el sistema más sencillo, el sistema con dos potenciales delta, para ello, haciendo $\beta_3 = 3$ fijamos la longitud total de la caja de potencial en $3a$ y consideremos los siguientes casos:

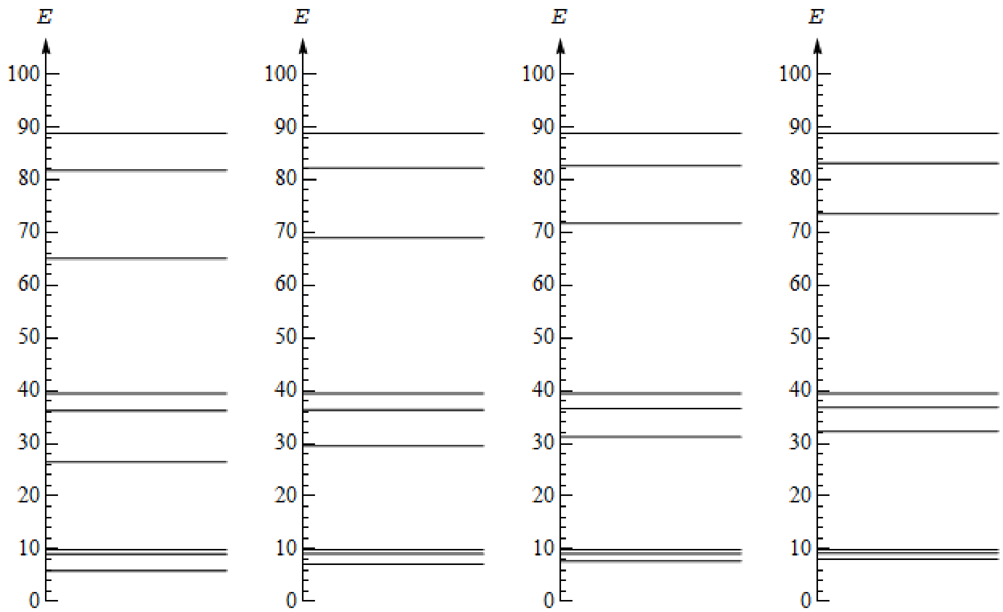
1. Haciendo $\beta_1 = 1$ y $\beta_2 = 2$ fijamos las posiciones de los potenciales delta en a y $2a$ respectivamente, fijemos también la intensidad del potencial delta localizado en a en $\lambda_1 = 15$ y variemos la intensidad λ_2 del potencial delta localizado en $2a$ en a) 3, b) 6, c) 9 y d) 12.

2. Fijando las intensidades de ambos potenciales delta en $\lambda_1 = \lambda_2 = 15$ y con $\beta_1 = 1$ fijamos también la posición del primer potencial delta en a, variemos β_2 en a) 2.02, b) 2.04, c) 2.06 y d) 2.08, es decir, estamos variando la posición del segundo potencial delta alrededor de $2a$, su posición ordenada.

En ambos casos, con el algoritmo del Apéndice B.3, encontramos las raíces de la ecuación de dispersión obtenida para cada valor de λ_2 o de β_2. Sustituyendo estas raíces en la Ec. (3.58) obtenemos los niveles discretos de energía de una partícula dentro de estos sistemas.

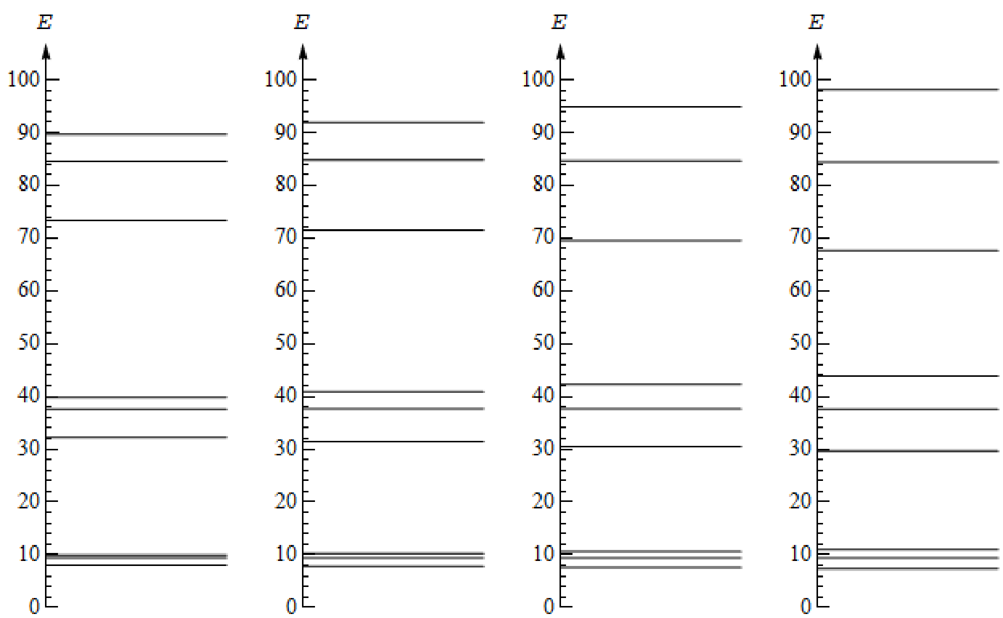
En la Fig. 4.2 graficamos el espectro de energías de una partícula dentro del sistema con dos potenciales delta con $\beta_1 = 1$, $\beta_2 = 2$, $\lambda_1 = 15$ y variando λ_2 en a) 3, b) 6, c) 9 y d) 12.

En la Fig. 4.3 graficamos el espectro de energías de una partícula dentro del sistema con dos potenciales delta con $\lambda_1 = \lambda_2 = 15$, $\beta_1 = 1$ y variando β_2 en a) 2.02, b) 2.04, c) 2.06 y d) 2.08.



(a) (b) (c) (d)

Figura 4.2: Niveles de energía en unidades de $\hbar^2/2ma^2$ de una partícula dentro de la caja de paredes infinitas y longitud $3a$ con 2 potenciales delta, manteniendo fijo las posiciones de los potenciales en a y $2a$ respectivamente, pero variando λ_2 en (a) 3, (b) 6, (c) 9 y (d) 12.



(a) (b) (c) (d)

Figura 4.3: Niveles de energía en unidades de $\hbar^2/2ma^2$ de una partícula dentro de una caja de paredes infinitas y longitud $3a$ con 2 potenciales delta, manteniendo las intensidades de ambos potenciales en 15, variando β_2 en (a) 2.02, (b) 2.04, (c) 2.06 y (d) 2.08.

Como puede verse en la Fig. 4.2, cuando se varía la intensidad del potencial delta localizado en $2a$, hay variaciones muy notables en los niveles de energía E_1, E_4 y E_7, hay pocas variaciones en los niveles E_2, E_5 y E_8, pero los niveles de energía E_3, E_6 y E_9 se mantienen constantes en $\pi^2 E_u$, $4\pi^2 E_u$ y $9\pi^2 E_u$ respectivamente, independientemente de la intensidad del potencial delta variable, aquí, estos niveles también satisfacen la Ec. (3.64), que no es de sorprenderse, pues aquí se está variando sólo la intensidad de un potencial delta mantieniendo fijo su posición, esto no ocurre en la Fig. 4.3, donde al variar β_2, (dejando fijo β_1, λ_1 y λ_2) varían todos los niveles de energía.

Siguiendo con nuestro análisis, consideremos el sistema con 25 deltas para analizar los casos con desorden parcial en la red cristalina, para ello, fijemos la longitud de la caja de potencial en $26a$ haciendo $\beta_{26} = 26$ y elijamos aleatoriamente como máximo a cuatro potenciales para los cuales variaremos también de manera aleatoria sus respectivas intensidades y posiciones. Así, para este sistema, consideremos los siguientes casos:

1. Representemos impurezas (átomos distintos del resto) y vacancias en el arreglo mediante variaciones en las intensidades de algunos de los potenciales delta elegidos al azar, conservando una intensidad común para el resto de los potenciales. Haciendo $\beta_1 = 1$, $\beta_2 = 2, \ldots, \beta_{25} = 25$ determinamos las respectivas posiciones de los potenciales delta en a, $2a, \ldots, 25a$, elijamos $\lambda = 6$ la intensidad común de estos potenciales excepto para los de intensidades λ_5, λ_{12}, λ_{18} y λ_{21}, para los cuales, asignemos sus respectivas intensidades de a) $\lambda_5 = 6$, $\lambda_{12} = 6$, $\lambda_{18} = 0$, $\lambda_{21} = 6$ b) $\lambda_5 = 0$, $\lambda_{12} = 6$, $\lambda_{18} = 0$, $\lambda_{21} = 6$ c) $\lambda_5 = 11$, $\lambda_{12} = 54$, $\lambda_{18} = 113$, $\lambda_{21} = 6$ y d) $\lambda_5 = 110$, $\lambda_{12} = 8$, $\lambda_{18} = 45$, $\lambda_{21} = 23$.

2. Representemos imperfecciones en el sistema variando las posiciones de los potenciales delta elegidos al azar. Asignemos a todos estos potenciales una intensidad de $\lambda = 6$, tomemos sus respectivas posiciones en a, $2a, \ldots, 25a$, excepto para los potenciales con intensidades λ_5, λ_{12}, λ_{18} y λ_{21} cuyas posiciones las tomaremos en $(5 + \delta\beta_5)a$, $(12 + \delta\beta_{12})a$, $(18 + \delta\beta_{18})a$ y $(21 + \delta\beta_{21})a$ respectivamente, siendo a) $\delta\beta_5 = 0$, $\delta\beta_{12} = 0$, $\delta\beta_{18} = 0.105$, $\delta\beta_{21} = 0$, b) $\delta\beta_5 = 0.0157$, $\delta\beta_{12} = 0$, $\delta\beta_{18} = 0.034$, $\delta\beta_{21} = 0$, c) $\delta\beta_5 = 0.07$, $\delta\beta_{12} = 0.015$, $\delta\beta_{18} = -0.011$, $\delta\beta_{21} = 0$ y d) $\delta\beta_5 = 0.105$, $\delta\beta_{12} = -0.05$, $\delta\beta_{18} = -0.019$, $\delta\beta_{21} = 0.09$.

3. Configuremos al sistema combinando los tres tipos de desorden de los dos casos anteriores, así, fijemos una intensidad común a todos los potenciales delta de $\lambda = 6$ y fijemos sus respectivas posiciones en a, $2a, \ldots, 25a$, excepto para los potenciales con intensidades λ_5, λ_{12}, λ_{18} y λ_{21} para los cuales, sus respectivas intensidades y posiciones serán de a) $\lambda_5 = 6$, $\lambda_{12} = 6$, $\lambda_{18} = 0$, $\lambda_{21} = 6$ y $5a$, $12a$, $18.105a$, $21a$, b) $\lambda_5 = 0$, $\lambda_{12} = 6$, $\lambda_{18} = 0$, $\lambda_{21} = 6$ y $5.0157a$, $12a$, $18.034a$, $21a$, c) $\lambda_5 = 11$, $\lambda_{12} = 54$, $\lambda_{18} = 113$, $\lambda_{21} = 6$ y $5.07a$, $12.015a$, $17.989a$, $21a$, y d) $\lambda_5 = 110$, $\lambda_{12} = 8$, $\lambda_{18} = 45$, $\lambda_{21} = 23$ y $5.105a$, $11.95a$, $17.981a$, $21.09a$.

Así, para cada caso expuesto se tienen 4 configuraciones distintas del sistema. Para cada configuración, podemos obtener, graficar y analizar su respectivo espectro de energías y hacer comparaciones entre ellos.

En la Fig. 4.4 graficamos el espectro de energías de una partícula dentro del sistema con 25 potenciales delta manteniendo sus posiciones ordenadas en a, $2a$, $\ldots$, $25a$ y manteniendo una intensidad común de $\lambda = 6$ excepto para los potenciales con intensidades λ_5, λ_{12}, λ_{18} y λ_{21} para los cuales, sus respectivas intensidades son a) $\lambda_5 = 6$, $\lambda_{12} = 6$, $\lambda_{18} = 0$, $\lambda_{21} = 6$ b) $\lambda_5 = 0$, $\lambda_{12} = 6$, $\lambda_{18} = 0$, $\lambda_{21} = 6$ c) $\lambda_5 = 11$, $\lambda_{12} = 54$, $\lambda_{18} = 113$, $\lambda_{21} = 6$ y d) $\lambda_5 = 110$, $\lambda_{12} = 8$, $\lambda_{18} = 45$, $\lambda_{21} = 23$.

En la Fig. 4.5 graficamos el espectro de energías de una partícula dentro del sistema con 25 potenciales delta manteniendo una intensidad común de $\lambda = 6$ con $\beta_1 = 1$, $\beta_2 = 2$, $\ldots$, $\beta_{25} = 25$ excepto β_5, β_{12}, β_{18} y β_{21} con valores numéricos de a) $\beta_5 = 5$, $\beta_{12} = 12$, $\beta_{18} = 18.105$, $\beta_{21} = 21$, b) $\beta_5 = 5.0157$, $\beta_{12} = 12$, $\beta_{18} = 18.034$, $\beta_{21} = 21$, c) $\beta_5 = 5.07$, $\beta_{12} = 12.015$, $\beta_{18} = 17.989$, $\beta_{21} = 21$ y d) $\beta_5 = 5.105$, $\beta_{12} = 11.95$, $\beta_{18} = 17.981$, $\beta_{21} = 21.09$.

En la Fig. 4.6 graficamos el espectro de energías de una partícula dentro del sistema con 25 potenciales delta en las posiciones a, $2a$, $\ldots$, $25a$ y manteniendo todos una intensidad común de $\lambda = 6$, excepto para los potenciales con intensidades λ_5, λ_{12}, λ_{18} y λ_{21} cuyas respectivas posiciones e intensidades son a) $\lambda_5 = 6$, $\lambda_{12} = 6$, $\lambda_{18} = 0$, $\lambda_{21} = 6$ y $5a$, $12a$, $18.105a$, $21a$, b) $\lambda_5 = 0$, $\lambda_{12} = 6$, $\lambda_{18} = 0$, $\lambda_{21} = 6$ y $5.0157a$, $12a$, $18.034a$, $21a$, c) $\lambda_5 = 11$, $\lambda_{12} = 54$, $\lambda_{18} = 113$, $\lambda_{21} = 6$ y $5.07a$, $12.015a$, $17.989a$, $21a$, y d) $\lambda_5 = 110$, $\lambda_{12} = 8$, $\lambda_{18} = 45$, $\lambda_{21} = 23$ y $5.105a$, $11.95a$, $17.981a$, $21.09a$.

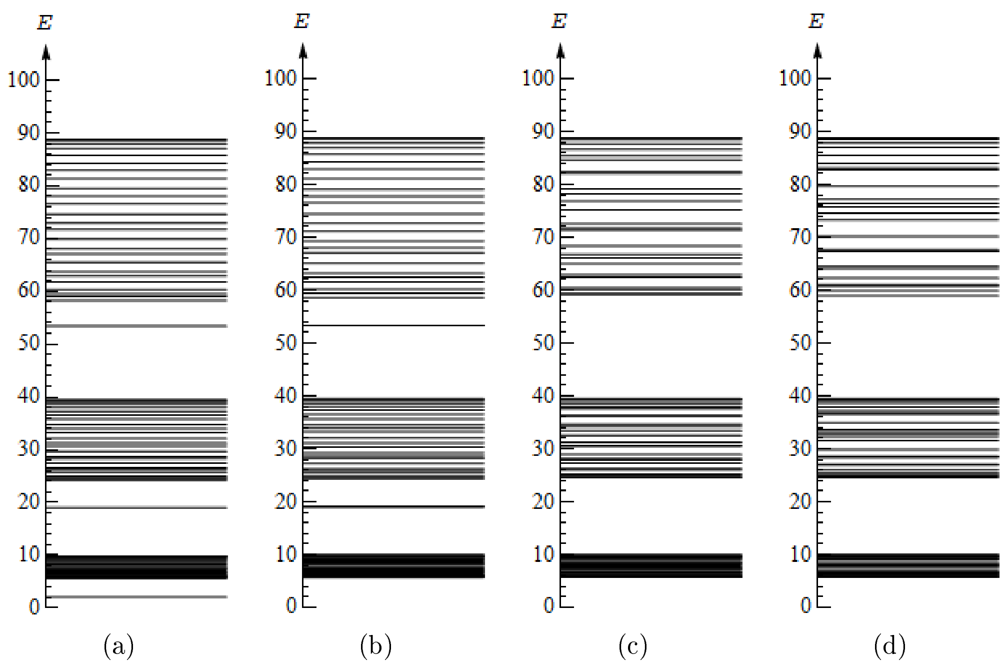


Figura 4.4: Niveles de energía en unidades de $\hbar^2/2ma^2$ de una partícula dentro de una caja de paredes infinitas con 25 potenciales delta y longitud $26a$, siendo a la separación de los potenciales y manteniendo una intensidad común de $\lambda = 6$ excepto para los potenciales con intensidades λ_5, λ_{12}, λ_{18} y λ_{21} cuyas respectivas intensidades son de (a) 6, 6, 0, 6 (b) 0, 6, 0, 6 (c) 11, 54, 113, 6 y (d) 110, 8, 45, 23.

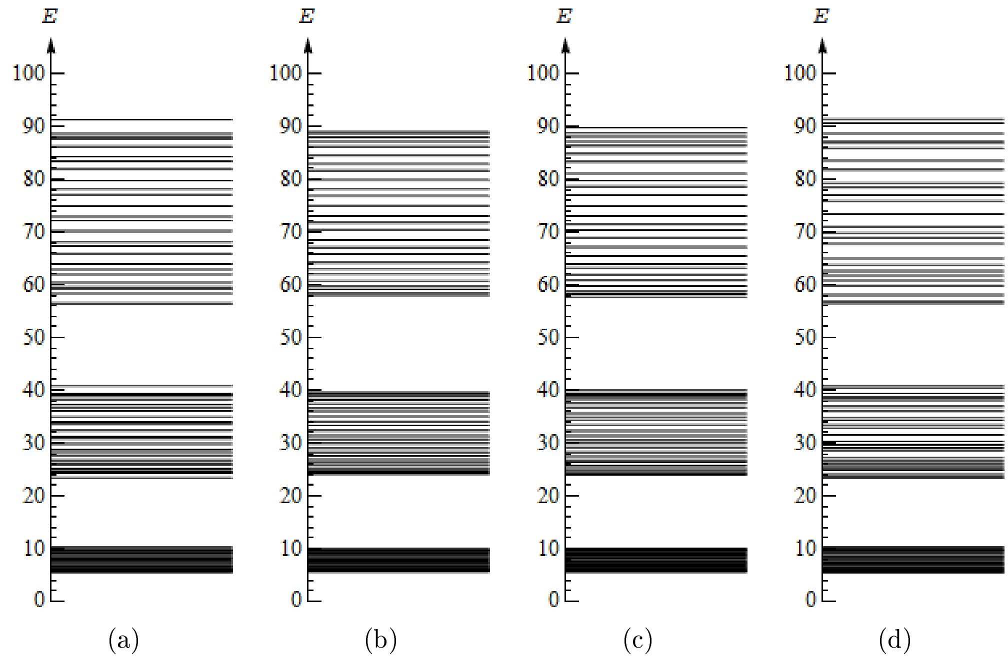


Figura 4.5: Niveles de energía en unidades de $\hbar^2/2ma^2$ de una partícula dentro de una caja de paredes infinitas con 25 potenciales delta y longitud $26a$, con $\lambda = 6$ y con $\beta_1 = 1$, $\beta_2 = 2$, $\ldots$, $\beta_{25} = 25$ excepto β_5, β_{12}, β_{18} y β_{21} cuyos respectivos valores son de (a) 5, 12, 18.105, 21, b) 5.0157, 12, 18.034, 21, c) 5.07, 12.015, 17.989, 21 y d) 5.105, 11.95, 17.981, 21.09.

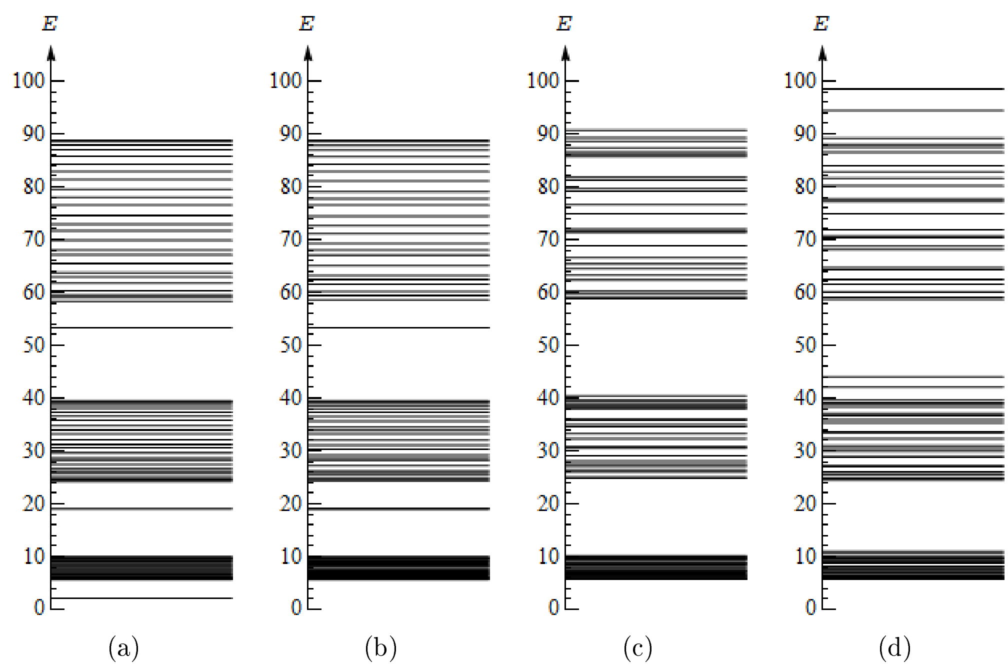


Figura 4.6: Niveles de energía en unidades de $\hbar^2/2ma^2$ de una partícula dentro de una caja de paredes infinitas con 25 potenciales delta y longitud $26a$, con $\beta_1 = 1$, $\beta_2 = 2$, $\ldots$, $\beta_{25} = 25$ y $\lambda = 6$ excepto para los potenciales con intensidades λ_5, λ_{12}, λ_{18} y λ_{21} cuyas intensidades y posiciones son de (a) 6, 6, 0, 6 y 5, 12, 18.105, 21, b) 0, 6, 0, 6 y 5.0157, 12, 18.034, 21, c) 11, 54, 113, 6 y 5.07, 12.015, 17.989, 21, y d) 110, 8, 45, 23 y 5.105, 11.95, 17.981, 21.09.

Si del sistema con 25 potenciales delta se elimina un potencial elegido al azar, en el espectro de energías para esta configuración (Fig. 4.4a), aparece un nivel de energía particularmente interesante en cada banda de energía. Este nivel toma el valor mínimo de la banda separándose considerablemente de ella. En cada una de estas bandas aparecen 26 niveles de energía, es decir, no se altera el número de niveles de energía de cada banda debido a la eliminación de un potencial delta del sistema. Si en lugar de uno, eliminamos dos potenciales delta de nuestro sistema, en el espectro de energías para esta nueva configuración (Fig. 4.4b), aparecen sólo 24 niveles de energía en la primera banda, pero en las dos bandas siguientes aparecen los 26 niveles de energía conteniendo en cada uno de ellos un nivel mínimo que también se separa considerablemente de la banda. Cuando variamos aleatoriamente las intensidades de 3 y de 4 potenciales delta, en sus respectivos espectros de energías (Figs. 4.4c y 4.4d), no aparecen niveles sobresalientes y se mantiene en 26 el número de niveles de energía en cada banda, aquí solo notamos que este desorden aleatorio se refleja en cada banda de energía. Comparando estos 4 espectros de energías, notamos que los máximos niveles de energías de cada banda también se mantienen en $\pi^2 E_u$, $4\pi^2 E_u$ y $9\pi^2 E_u$, independientemente de la configuración específica del sistema.

Ahora bien, cuando fijamos una intensidad constante para todos los potenciales delta y variamos aleatoriamente (en una cantidad pequeña alrededor de sus posiciones ordenadas) 1, 2, 3 y 4 potenciales delta, no aparecen niveles particularmente interesantes en los espectros de energías de estas configuraciones (Figs. 4.5a, 4.5b, 4.5c y 4.5d), pero sí hay desorden en cada banda de energía, es decir, el espaciamiento entre los niveles de energías en cada banda es irregular, y se mantiene en 26 el número de niveles de energía en cada una de estas bandas. A diferencia del caso donde sólo variamos las intensidades de algunos potenciales delta, aquí los máximos de cada banda también varían en cada configuración y no existen niveles de energía invariantes.

Cuando variamos aleatoriamente tanto las intensidades como las posiciones de los potenciales delta elegidos, en los espectros de energías para las dos primeras configuraciones (Figs. 4.6a y 4.6b), aparecen los niveles constantes en banda de energía, ya que estas configuraciones son equivalentes a las dos primeras configuraciones del caso donde sólo se varían las intensidades de los potenciales delta elegidos al azar, pues aquí se varían las posiciones de los potenciales delta cuyas intensidades son cero. Para las dos últimas configuraciones de este caso, vemos de sus respectivos espectros de energías (Figs. 4.6c y 4.6d), que en cada banda se acentúan los desórdenes, no habiendo ningún nivel de energía constante en ambas gráficas y también se mantiene en 26 el número de niveles de energía para cada banda.

Continuando con nuestro análisis de los sistemas elegidos, para el sistema con 50 potenciales delta fijemos la longitud total de la caja de potencial en $51a$ y obtengamos y analicemos su espectro de energías cuando:

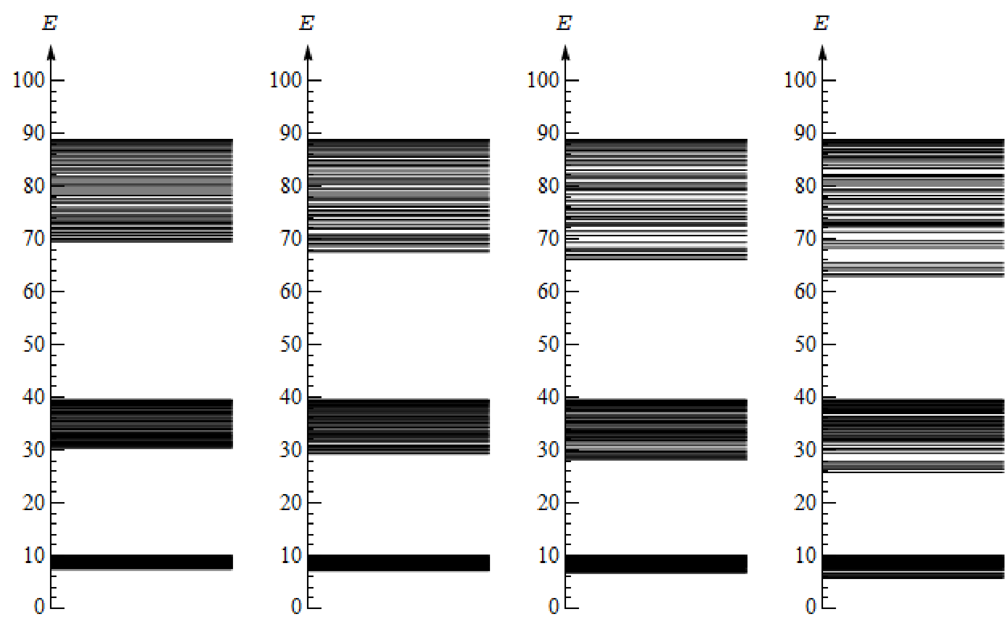
1. El sistema presenta desorden composicional. Las posiciones de los potenciales delta se encuentran en a, $2a$, $\ldots$, $50a$, respectivamente y sus respectivas intensidades toman los valores de $15 + \delta\lambda_1$, $15 + \delta\lambda_2$, $\ldots$, $15 + \delta\lambda_{50}$, siendo $\delta\lambda_1$, $\delta\lambda_2$,

... , $\delta\lambda_{50}$ números aleatorios, para este caso consideremos los intervalos $[\![-3,3]\!]$, $[\![-6,6]\!]$, $[\![-9,9]\!]$ y $[\![-12,12]\!]$ para la generación de estos números aleatorios.

2. El sistema presenta desorden estructural. Las intensidades de todos los potenciales delta se mantienen en $\lambda = 15$. Tomemos sus respectivas posiciones en $(1+\delta\beta_1)a$, $(2+\delta\beta_2)a$, ... , $(50+\delta\beta_{50})a$, donde $\delta\beta_1$, $\delta\beta_2$, ... , $\delta\beta_{50}$ son números aleatorios pequeños, consideremos los intervalos $[\![-0.01,0.01]\!]$, $[\![-0.02,0.02]\!]$, $[\![-0.03,0.03]\!]$ y $[\![-0.04,0.04]\!]$ para la generación de estos números aleatorios.

3. El sistema presenta desorden total. Tomemos las posiciones de los potenciales delta en $(1+\delta\beta_1)a$, $(2+\delta\beta_2)a$, ... , $(50+\delta\beta_{50})a$ y sus respectivas intensidades en $15+\delta\lambda_1$, $15+\delta\lambda_2$, ... , $15+\delta\lambda_{50}$. Conservemos los intervalos $[\![-3,3]\!]$, $[\![-6,6]\!]$, $[\![-9,9]\!]$, $[\![-12,12]\!]$ y $[\![-0.01,0.01]\!]$, $[\![-0.02,0.02]\!]$, $[\![-0.03,0.03]\!]$, $[\![-0.04,0.04]\!]$ para elegir los números aleatorios relacionados con las intensidades y posiciones respectivamente, de estos potenciales delta.

En la Fig. 4.7 graficamos el espectro de energías de una partícula dentro del sistema con 50 potenciales delta con desorden composicional manteniendo sus respectivas posiciones en a, $2a$, ... , $50a$ y variando aleatoriamente sus intensidades alrededor de una intensidad común de $\lambda = 15$ en intervalos de a) $[\![-3,3]\!]$, b) $[\![-6,6]\!]$, c) $[\![-9,9]\!]$ y d) $[\![-12,12]\!]$.



(a) (b) (c) (d)

Figura 4.7: Niveles de energía en unidades de $\hbar^2/2ma^2$ de una partícula dentro de una caja de paredes infinitas de longitud $51a$ con 50 potenciales delta y con desorden composicional, manteniendo fijo sus posiciones y variando aleatoriamente sus intensidades alrededor de $\lambda = 15$ en (a) $[\![-3,3]\!]$, (b) $[\![-6,6]\!]$, (c) $[\![-9,9]\!]$ y (d) $[\![-12,12]\!]$.

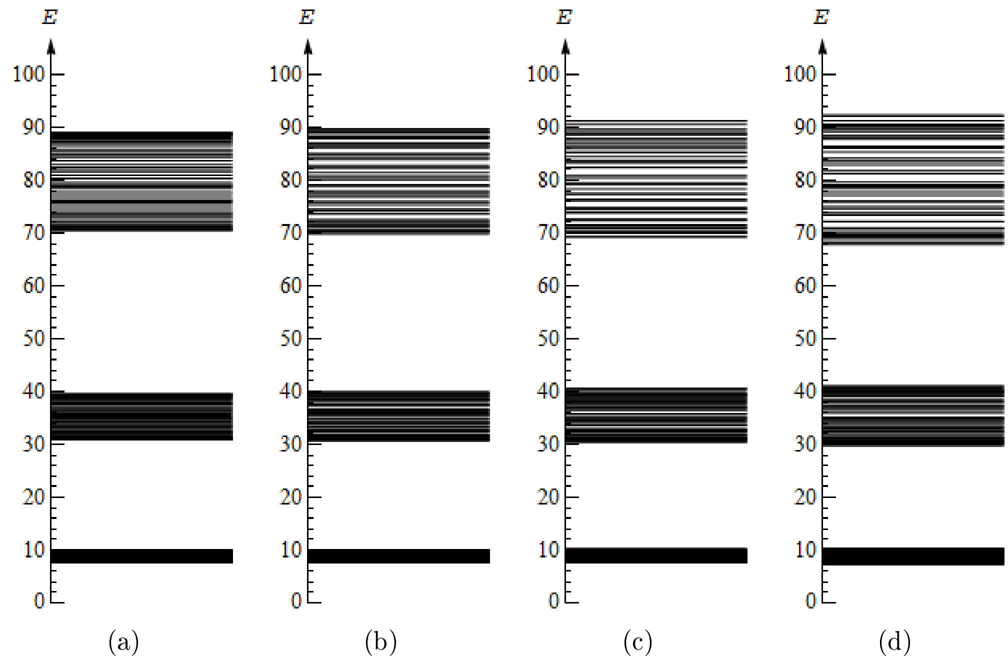


Figura 4.8: Niveles de energía en unidades de $\hbar^2/2ma^2$ de una partícula dentro de una caja de paredes infinitas y longitud $51a$ con 50 potenciales delta y con desorden estructural, con $\lambda = 15$ y variando aleatoriamente sus respectivas posiciones alrededor de sus posiciones ordenadas en intervalos de (a) $[\![-0.01, 0.01]\!]$, (b) $[\![-0.02, 0.02]\!]$, (c) $[\![-0.03, 0.03]\!]$ y (d) $[\![-0.04, 0.04]\!]$.

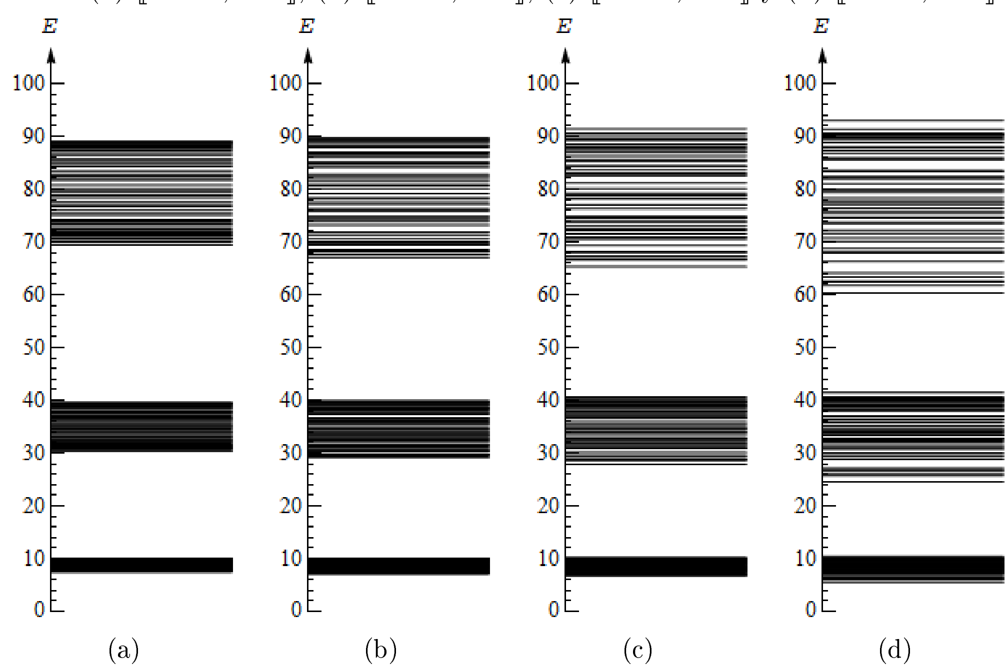


Figura 4.9: Niveles de energía en unidades de $\hbar^2/2ma^2$ de una partícula dentro de una caja de paredes infinitas y longitud $51a$ con 50 potenciales delta y con desorden total, donde se varían aleatoriamente sus intensidades y posiciones alrededor de $\lambda = 15$ y de (a, $2a$, $\ldots$, $50a$) en intervalos de (a) $[\![-3, 3]\!]$ y $[\![-0.01, 0.01]\!]$, (b) $[\![-6, 6]\!]$ y $[\![-0.02, 0.02]\!]$, (c) $[\![-9, 9]\!]$ y $[\![-0.03, 0.03]\!]$, (d) $[\![-12, 12]\!]$ y $[\![-0.04, 0.04]\!]$.

En la Fig. 4.8 graficamos el espectro de energías de una partícula dentro del sistema con 50 potenciales delta con desorden composicional manteniendo una intensidad común de $\lambda = 15$ pero variando aleatoriamente sus posiciones alrededor de sus respectivas posiciones de equilibrio en intervalos de a) $[\![-0.01, 0.01]\!]$, b) $[\![-0.02, 0.02]\!]$, c) $[\![-0.03, 0.03]\!]$ y d) $[\![-0.04, 0.04]\!]$.

En la Fig. 4.9 graficamos el espectro de energías de una partícula dentro del sistema con 50 potenciales delta con desorden total, variando aleatoriamente tanto las intensidades (alrededor de una intensidad común de $\lambda = 15$) como las posiciones (alrededor de sus respectivas posiciones de equilibrio a, $2a$, $\ldots$, $25a$) en intervalos de a) $[\![-3, 3]\!]$ y $[\![-0.01, 0.01]\!]$, b) $[\![-6, 6]\!]$ y $[\![-0.02, 0.02]\!]$, c) $[\![-9, 9]\!]$ y $[\![-0.03, 0.03]\!]$, d) $[\![-12, 12]\!]$ y $[\![-0.04, 0.04]\!]$.

Cuando el sistema presenta desorden composicional, se refleja el desorden en los espectros de energías de estas configuraciones (Fig. 4.7), mientras más grande sea el rango de variación aleatoria de las intensidades de los potenciales delta, se dispersan más las bandas de energías. En este caso también aparecen niveles de energías comunes a todas las configuraciones, siendo éstos los máximos de cada banda cuyos valores son de $E_{51} = \pi^2 E_u$, $E_{102} = 4\pi^2 E_u$ y $E_{153} = 9\pi^2 E_u$, satifaciendo una vez más la Ec. (3.64).

Si el sistema presenta desorden estructural, también se refleja este desorden en las bandas de energías de estas configuraciones (Fig. 4.8). En este caso tampoco hay niveles de energía que permanezcan constantes, independientes de las configuraciones del sistema.

Cuando el sistema presenta desorden total, es decir, cuando variamos aletoriamente tanto las intensidades como las posiciones de los potenciales delta, también hay desorden en las bandas de energías de estas configuraciones (Fig. 4.9), aquí tampoco se observan niveles de energías invariantes.

4.2.2. Análisis estadístico de los niveles de energías en sistemas con números pares e impares de potenciales delta

Consideremos un sistema con N potenciales delta. Partiendo del caso ordenado, es decir, dando igual espaciamiento a las posiciones de los potenciales delta y definiendo una intensidad común para todos ellos, como se sabe, con el algoritmo del Apéndice B.1 se puede obtener el espectro de energías de ese sistema. Ampliando nuestro análisis de los espectros de energías, para cada potencial delta, podemos elegir varias posiciones aleatorias cercanas de su posición ordenada, también podemos elegir varias intensidades aleatorias cercanas a la intensidad de este potencial. Así, eligiendo posición e intensidad aleatoria para cada potencial delta, obtenemos una configuración específica del sistema, con otra posición e intensidad aleatoria de cada potencial delta, obtenemos otra configuración del mismo sistema. Como se sabe, utilizando el algoritmo B.3, se puede obtener el espectro de energías para cada configuración del sistema.

Así, para un sistema en particular, eligiendo un conjunto de M configuraciones distintas para algún tipo de desorden (ya sea composicional, estructural o total), podemos hacer un análisis estadístico calculando:

1. $\bar{E}_1$, $\bar{E}_2$, $\bar{E}_3$, $\ldots$, es decir, los promedios de cada nivel de energía, esto puede hacerse, ya que para un sistema con un determinado número de potenciales delta, en un cierto intervalo $[\![\phi_i, \phi_f]\!]$ (con $\phi_i > 0$), se obtiene siempre un número fijo de niveles de energías, siempre y cuando las variaciones alrededor de las posiciones periódicas de estos de estos potenciales sean pequeñas.

2. $\sigma E_1, \sigma E_2, \sigma E_3, \ldots$, donde $\sigma E_n = \sqrt{\sum_{i=1}^{M}(E_{n,i} - \bar{E}_n)^2/M}$, es decir, la desviación estándar [17] de cada nivel de energía y obtener así una medida del grado de dispersión de los niveles de energía con respecto a su valor promedio.

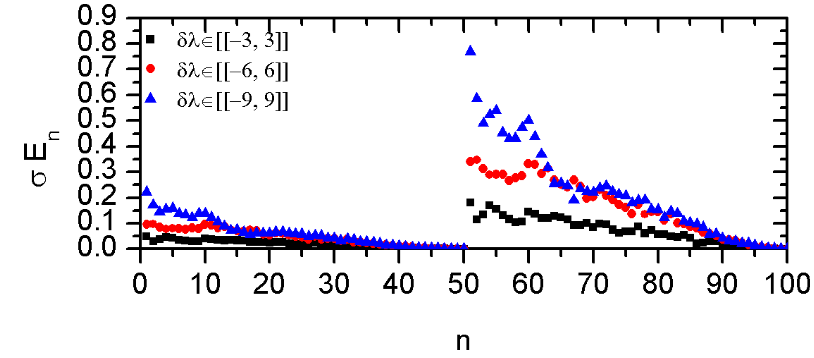
Siguiendo con el análisis, consideremos cuatro sistemas agrupados en pares: el par con 49 y 50 potenciales delta y el par con 99 y 100 potenciales delta. Para cada sistema, elijamos varias configuraciones con desorden composicional, estructural y total atendiendo los siguientes casos:

1. Cuando los sistemas presentan desorden composicional, mantengamos fijos las posiciones de los potenciales delta en a, $2a$, $\ldots$, Na, elijamos sus respectivas intensidades en $15 + \delta\lambda_1$, $15 + \delta\lambda_2$, $\ldots$, $15 + \delta\lambda_N$, siendo $\delta\lambda_1$, $\delta\lambda_2$, $\ldots$, $\delta\lambda_N$ números aleatorios. Consideraremos los intervalos $[\![-3, 3]\!]$, $[\![-6, 6]\!]$ y $[\![-9, 9]\!]$ para las elecciones de estos números aleatorios y para cada intervalo consideraremos 25 configuraciones distintas para las intensidades de estos potenciales.

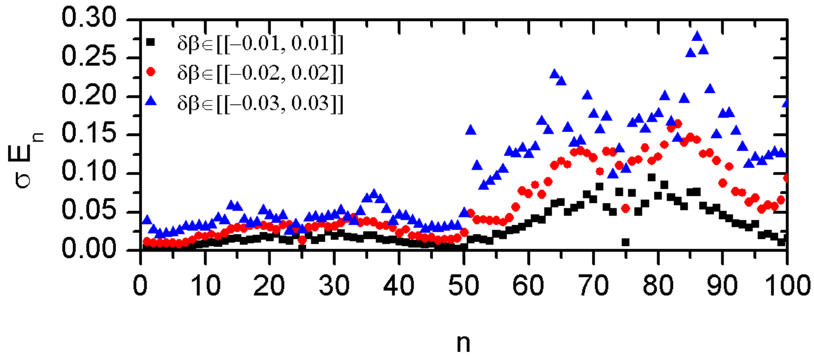
2. Cuando los sistemas presentan desorden estructural, mantengamos fijo las intensidades de todos los potenciales delta en $\lambda_1 = \lambda_2 = \cdots = \lambda_N = 15$, tomemos sus respectivas posiciones en $(1 + \delta\beta_1)a$, $(2 + \delta\beta_2)a$, $\ldots$, $(N + \delta\beta_N)a$, donde $\delta\beta_1$, $\delta\beta_2$, $\ldots$, $\delta\beta_N$ son números aleatorios pequeños. Consideraremos los intervalos $[\![-0.01, 0.01]\!]$, $[\![-0.02, 0.02]\!]$ y $[\![-0.03, 0.03]\!]$ para las elecciones de estos números aleatorios, para cada intervalo también consideraremos 25 configuraciones distintas para las posiciones de estos potenciales.

3. Cuando los sistemas presentan desorden total, consideraremos las posiciones de los potenciales delta en $(1+\delta\beta_1)a$, $(2+\delta\beta_2)a$, $\ldots$, $(N+\delta\beta_N)a$ y sus respectivas intensidades en $15+\delta\lambda_1$, $15+\delta\lambda_2$, $\ldots$, $15+\delta\lambda_N$, conservemos los mismos intervalos para elegir los números aleatorios relacionados con sus posiciones e intensidades, consideraremos también 25 configuraciones distintas para las posiciones e intensidades de estos potenciales.

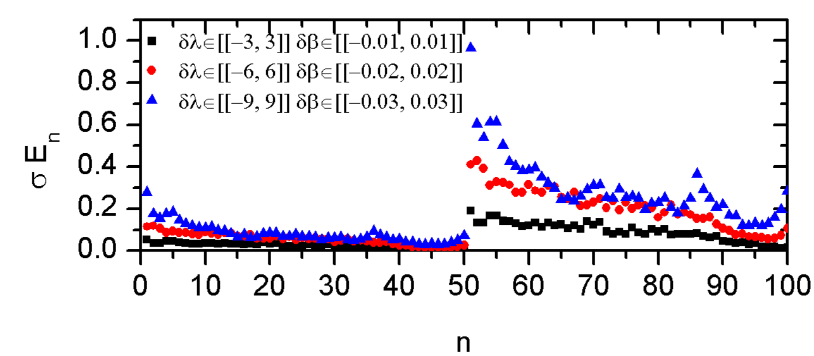
Para todos los sistemas, nos limitaremos al intervalo $0.001 \leq \phi \leq 10$ para obtener los niveles de energía para todas las configuraciones de cada intervalo de variación de λ o β o ambos. Promediando cada nivel de energía sobre un conjunto de 25 muestras (debido al número de configuraciones), obtendremos la desviación estándar de cada nivel de energía y las graficaremos en función de n, el número de nivel de energía.



(a)

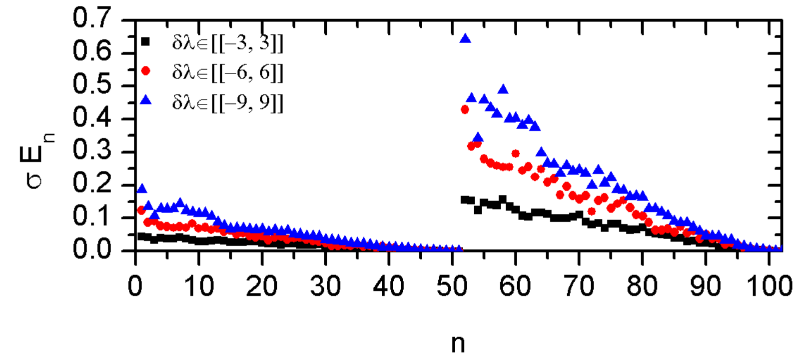


(b)

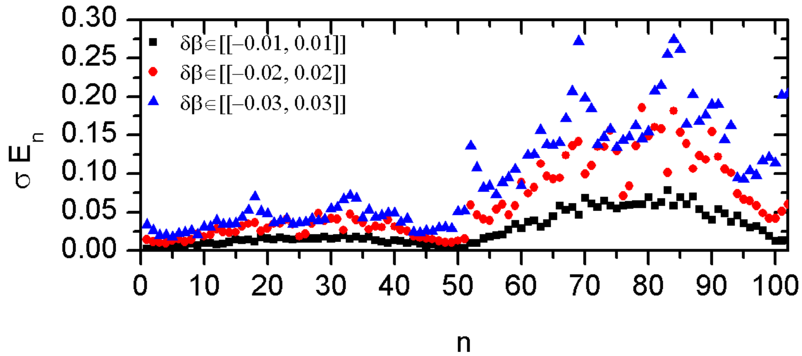


(c)

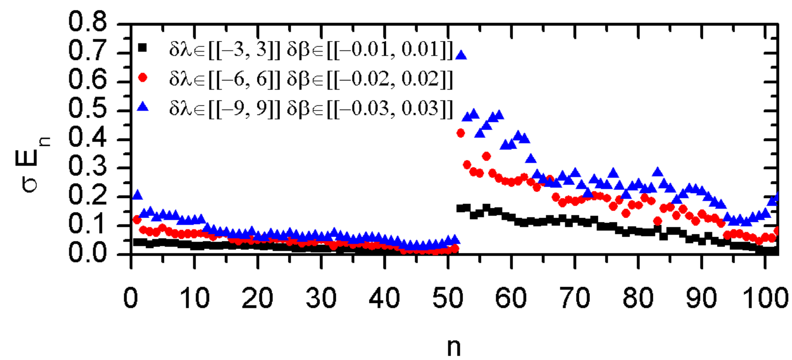
Figura 4.10: Desviación estándar de los niveles de energía para las dos primeras bandas para el sistema con 49 potenciales delta con (a) desorden composicional, (b) desorden estructural, (c) desorden total.



(a)

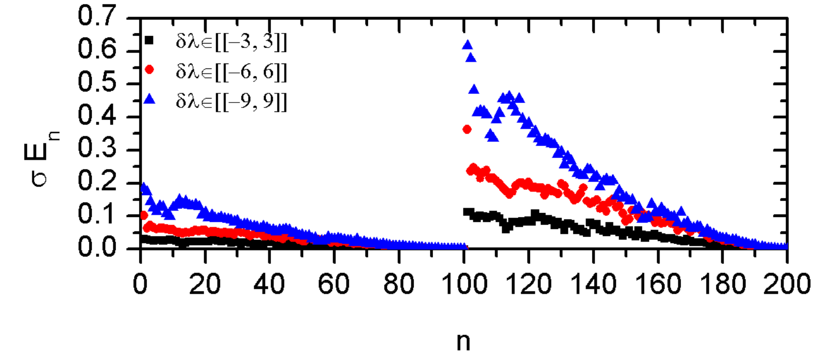


(b)

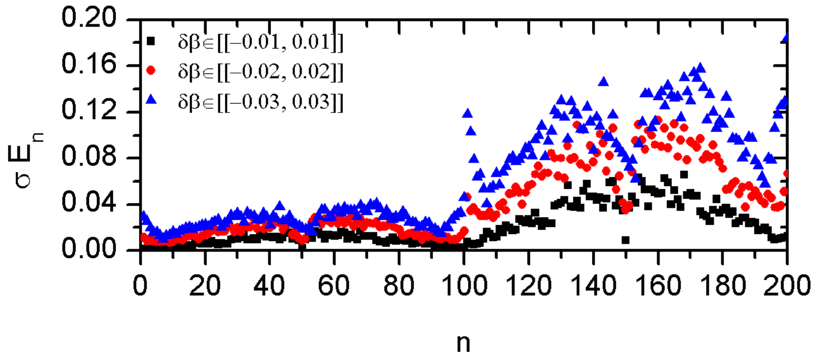


(c)

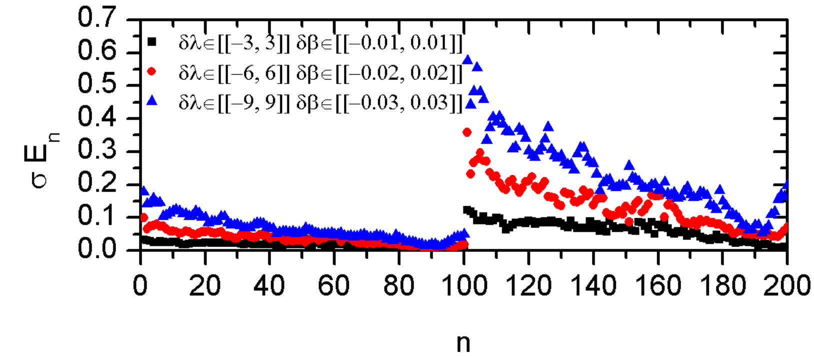
Figura 4.11: Desviación estándar de los niveles de energía para las dos primeras bandas para el sistema con 50 potenciales delta con (a) desorden composicional, (b) desorden estructural, (c) desorden total.



(a)

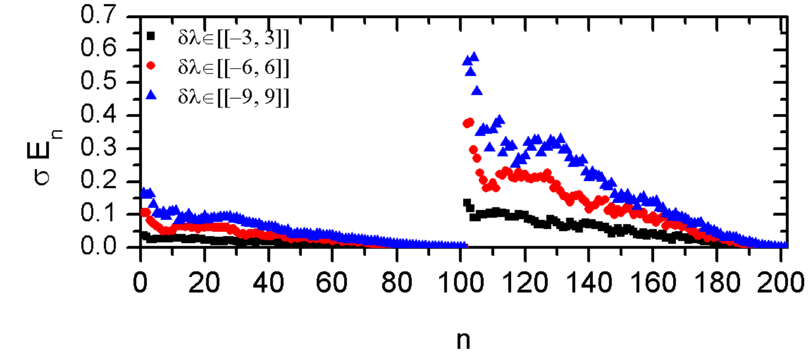


(b)

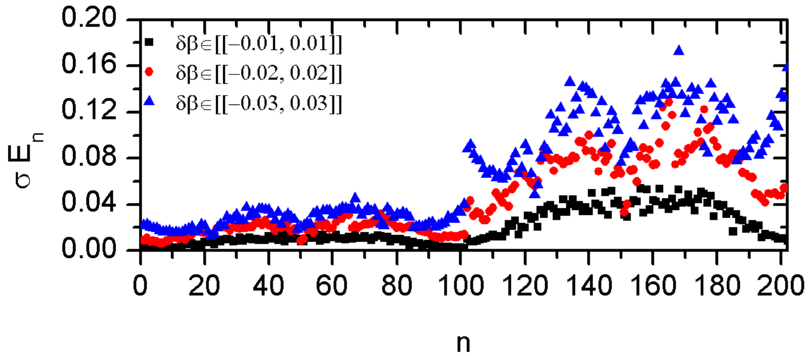


(c)

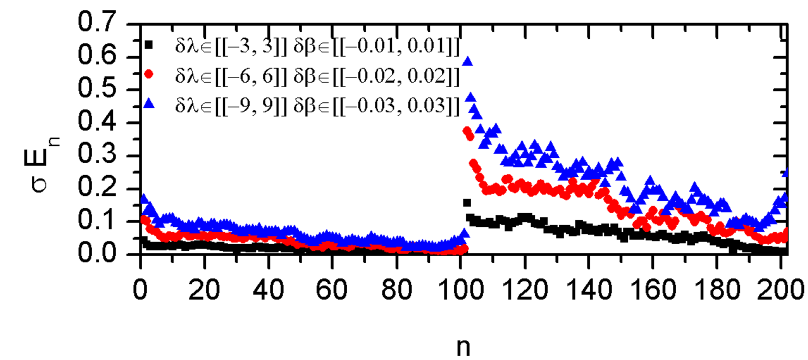
Figura 4.12: Desviación estándar de los niveles de energía para las dos primeras bandas para el sistema con 99 potenciales delta con (a) desorden composicional, (b) desorden estructural, (c) desorden total.



(a)



(b)



(c)

Figura 4.13: Desviación estándar de los niveles de energía para las dos primeras bandas para el sistema con 100 potenciales delta con (a) desorden composicional, (b) desorden estructural, (c) desorden total.

En las Figs. 4.10, 4.11, 4.12 y 4.13 graficamos la desviación estándar de los niveles de energía de las dos primeras bandas de energía en función del número de nivel de energía n para los sistemas con 49, 50, 99 y 100 potenciales delta, cuando presentan (a) desorden composicional, manteniendo sus respectivas posiciones en a, $2a$, $\cdots$, Na y eligiendo sus intensidades en $\lambda = 15 + \delta\lambda$, donde $\delta\lambda \in [\![-3, 3]\!]$ para las curvas en negro, $\delta\lambda \in [\![-6, 6]\!]$ para las curvas en rojo y $\delta\lambda \in [\![-9, 9]\!]$ para las curvas en azul, (b) desorden estructural, mantenemos fijo la intensidad común de $\lambda = 15$ y variando aleatoriamente sus posiciones alrededor de sus respectivas posiciones ordenadas en intervalos de $\delta\beta \in [\![-0.01, 0.01]\!]$ para las curvas en negro, $\delta\beta \in [\![-0.02, 0.02]\!]$ para las curvas en rojo y $\delta\beta \in [\![-0.03, 0.03]\!]$ para las curvas en azul, (c) desorden total, variando aleatoriamente sus posiciones e intensidades alrededor de a, $2a$, $\ldots$, Na y de $\lambda = 15$ en intervalos de $\delta\beta \in [\![-0.01, 0.01]\!]$ y $\delta\lambda \in [\![-3, 3]\!]$ para las curvas en negro, $\delta\beta \in [\![-0.02, 0.02]\!]$ y $\delta\lambda \in [\![-6, 6]\!]$ para las curvas en rojo y $\delta\beta \in [\![-0.03, 0.03]\!]$ y $\delta\lambda \in [\![-9, 9]\!]$ para las curvas en azul.

Cuando los sistemas presentan desorden composicional variando aleatoriamente las intensidades de los potenciales delta dentro de los intervalos $[\![12, 18]\!]$, $[\![9, 21]\!]$ y $[\![6, 24]\!]$, la desviación estándar de los niveles de energía en todos los sistemas analizados (Figs. 4.10a, 4.11a, 4.12a y 4.13a) toma el valor máximo para el primer nivel de energía de cada banda disminuyendo paulatinamente su valor hasta anularse en el último nivel de energía de la banda. Este resultado no es nada nuevo, pues como se sabe de la subsecciones 4.2.1, cuando variamos aleatoriamente sólo las intensidades de los potenciales delta, los niveles de energía máximos de cada banda permanecen constantes, luego entonces su desviación estándar es cero.

Cuando los sistemas presentan desorden estructural variando aleatoriamente las posiciones de los potenciales delta en los intervalos $[\![-0.01, 0.01]\!]$, $[\![-0.02, 0.02]\!]$ y $[\![-0.03, 0.03]\!]$ alrededor de sus respectivas posiciones ordenadas a, $2a$, $\ldots$, $\beta_N a$, la desviación estándar de los niveles de energía para los sistemas analizados (Figs. 4.10b, 4.11b, 4.12b y 4.13b) toma sus valores mínimos en los primeros y últimos niveles de energía de cada banda si se trata de un sistema con un número par de potenciales delta, si el sistema contiene un número impar de potenciales delta entonces la desviación estándar toma su valor mínimo para el nivel de energía que se encuentra a la mitad de cada banda, este es un caso interesante, pues sólo ocurre en los sistemas impares.

En el último caso, cuando los sistemas presentan desorden total, cuando se varían aleatoriamente las intensidades y las posiciones de los potenciales delta (Figs. 4.10c, 4.11c, 4.12c y 4.13c), la desviación estándar es mayor en los primeros niveles de energía de cada banda y disminuye gradualmente hasta alcanzar valores mínimos para los últimos niveles de energía de la banda. Aquí, es evidente que domina el caso cuando los sistemas presentan desorden composicional.

Capítulo 5

Densidad de probabilidad y coeficientes de transmisión y reflexión

En los capítulos anteriores se han analizado los espectros de energías de una partícula sujeto a potenciales delta confinados en una caja de paredes infinitas (Fig. 4.1). Siguiendo con el análisis, en este capítulo obtendremos la probabilidad de encontrar una partícula en función de su posición dentro de estas estructuras. Si eliminamos la restricción de confinamiento (paredes infinitas en los extremos del sistema) y suponemos ahora que esta partícula, para $x < \beta_1 a$ incide de izquierda a derecha y se refleja de derecha a izquierda y para $x > \beta_N a$, sólo hay transmisión de izquierda a derecha (después de atravesar el arreglo de potenciales delta), haremos el análisis de estos sistemas calculando los coeficientes de transmisión y de reflexión a partir de las respectivas funciones de onda para $x < \beta_1 a$ y $x > \beta_N a$.

5.1. Densidad de probabilidad en sistemas confinados

De acuerdo a la Fig. 4.1 y a la Ec. (4.2), para el intervalo $\beta_n a < x < \beta_{n+1} a$, $\psi_n(x) = A_n e^{ikx} + B_n e^{-ikx}$, pero $k = \phi/a$ ya que $\phi = ka$ y definiendo una nueva variable adimensional $\tau = x/a$, podemos reescribir $\psi_n(x)$ en términos de esta nueva variable como

$$\psi_n(\tau) = A_n e^{i\phi\tau} + B_n e^{-i\phi\tau} \qquad \beta_n < \tau < \beta_{n+1}, \tag{5.1}$$

multiplicando esta función de onda por su complejo conjugado obtenemos

$$|\psi_n(\tau)|^2 = |A_n|^2 + |B_n|^2 + 2\mathrm{Re}(A_n^* B_n e^{-2i\phi\tau}) \qquad \beta_n < \tau < \beta_{n+1}, \tag{5.2}$$

la ecuación anterior nos da la densidad de probabilidad de encontrar a la partícula dentro del intervalo $\beta_n < \tau < \beta_{n+1}$. Como puede verse, tal ecuación depende de los parámetros A_n, B_n y ϕ.

Debido a las condiciones de frontera de nuestro sistema, $\psi_0(0) = \psi_N(\beta_{N+1} a) = 0$, como se hizo en la Sección 4.1 del capítulo anterior, aplicando estas condiciones a estas funciones de onda definidas en los intervalos $0 < x < \beta_1 a$ y $\beta_N a < x < \beta_{N+1} a$, se llegan a las Ecs. (4.28) y (4.29) dadas en el capítulo anterior. Reescribiendo estas ecuaciones en términos de ϕ y τ y multiplicándolas por sus respectivos complejos conjugados obtenemos

$$|\psi_0(\tau)|^2 = 2|A_0|^2(1 - \mathrm{Re}(e^{2i\phi\tau})) \qquad 0 < \tau < \beta_1, \tag{5.3}$$

y

$$|\psi_N(\tau)|^2 = 2|A_N|^2(1 - \mathrm{Re}(e^{2i\phi(\beta_{N+1}-\tau)})) \qquad \beta_N < \tau < \beta_{N+1}, \tag{5.4}$$

así, de manera general, podemos escribir el módulo al cuadrado de la función de onda en función de la posición de la partícula para todo nuestro sistema, como

$$|\psi(\tau)|^2 = \begin{cases} 2|A_0|^2(1 - \mathrm{Re}(e^{2i\phi\tau})) & 0 < \tau < \beta_1 \\ |A_1|^2 + |B_1|^2 + 2\mathrm{Re}(A_1^* B_1 e^{-2i\phi\tau}) & \beta_1 < \tau < \beta_2 \\ \vdots & \\ |A_n|^2 + |B_n|^2 + 2\mathrm{Re}(A_n^* B_n e^{-2i\phi\tau}) & \beta_n < \tau < \beta_{n+1} \\ \vdots & \\ |A_{N-1}|^2 + |B_{N-1}|^2 + 2\mathrm{Re}(A_{N-1}^* B_{N-1} e^{-2i\phi\tau}) & \beta_{N-1} < \tau < \beta_N \\ 2|A_N|^2(1 - \mathrm{Re}(e^{2i\phi(\beta_{N+1}-\tau)})) & \beta_N < \tau < \beta_{N+1} \end{cases}, \tag{5.5}$$

con ayuda de la matriz de transferencia $\mathbf{P}_{n+1}(\phi, \beta_{n+1}, \lambda_{n+1})$ (Ec. (4.18) del capítulo anterior), podemos obtener los valores de las constantes A_n y B_n para cada uno de estos intervalos. Por ejemplo, ya que para el intervalo $\beta_{N-1} < \tau < \beta_N$ las relaciones entre las constantes A_{N-1}, B_{N-1}, A_N y B_N pueden expresarse por

$$\begin{pmatrix} A_{N-1} \\ B_{N-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 + i\frac{\lambda_N}{\phi} & i\frac{\lambda_N}{\phi} e^{-2i\beta_N\phi} \\ -i\frac{\lambda_N}{\phi} e^{2i\beta_N\phi} & 1 - i\frac{\lambda_N}{\phi} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_N \\ -A_N e^{2i\beta_{N+1}\phi} \end{pmatrix}, \tag{5.6}$$

donde debido a la Ec. (4.29) $B_N = -A_N e^{2i\beta_{N+1}\phi}$. Al realizar el producto de las matrices del lado derecho de la Ec. (5.5) se sigue inmediatamente que

$$A_{N-1} = [1 + i\frac{\lambda_N}{\phi}(1 - e^{2i(\beta_{N+1}-\beta_N)\phi})]A_N, \tag{5.7}$$

$$B_{N-1} = [i\frac{\lambda_N}{\phi}(1 - e^{2i(\beta_N-\beta_{N+1})\phi}) - 1)e^{2i\beta_{N+1}\phi}]A_N. \tag{5.8}$$

Para el intervalo $\beta_{N-2} < \tau < \beta_{N-1}$, podemos determinar las constantes A_{N-2} y B_{N-2} en términos de A_{N-1} y B_{N-1}, pues

$$\begin{pmatrix} A_{N-2} \\ B_{N-2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 + i\frac{\lambda_{N-1}}{\phi} & i\frac{\lambda_{N-1}}{\phi} e^{-2i\beta_{N-1}\phi} \\ -i\frac{\lambda_{N-1}}{\phi} e^{2i\beta_{N-1}\phi} & 1 - i\frac{\lambda_{N-1}}{\phi} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{N-1} \\ B_{N-1} \end{pmatrix}, \tag{5.9}$$

sustituyendo las Ecs. (5.7) y (5.8) en la Ec. (5.9) y luego de realizar el producto de las matrices del lado derecho de la misma Ec. (5.9) obtenemos

$$\begin{aligned} A_{N-2} &= [(1+i\frac{\lambda_{N-1}}{\phi})(1+i\frac{\lambda_N}{\phi}(1-e^{2i(\beta_{N+1}-\beta_N)\phi})) \\ &+ (i\frac{\lambda_{N-1}}{\phi})(i\frac{\lambda_N}{\phi}(1-e^{2i(\beta_N-\beta_{N+1})\phi})-1)e^{2i(\beta_{N+1}-\beta_{N-1})\phi}]A_N, \end{aligned} \tag{5.10}$$

$$\begin{aligned} B_{N-2} &= [(-i\frac{\lambda_{N-1}}{\phi}e^{2i\beta_{N-1}\phi})(1+i\frac{\lambda_N}{\phi}(1-e^{2i(\beta_{N+1}-\beta_N)\phi})) \\ &+ (1-i\frac{\lambda_{N-1}}{\phi})(i\frac{\lambda_N}{\phi}(1-e^{2i(\beta_N-\beta_{N+1})\phi})-1)e^{2i\beta_{N+1}\phi}]A_N \end{aligned} \tag{5.11}$$

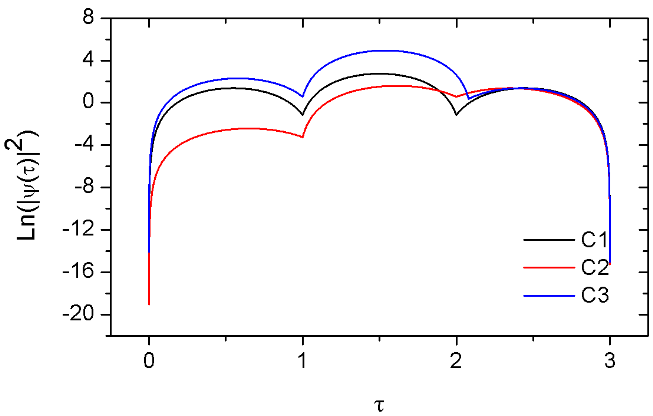
de estas dos últimas ecuaciones vemos que los coeficientes A_{N-2} y B_{N-2} se relacionan con el coeficiente A_N, coeficiente de la función de onda $\psi_N(\tau)$. En general, los coeficientes de la función de onda $\psi_n(\tau)$, A_n y B_n, se relacionan con el coeficiente A_N y pueden ser calculados haciendo el producto de las $N-n$ matrices correspondientes. Fijando el valor de A_N en la unidad y conociendo los valores de λ_n y ϕ, obtenemos los valores numéricos de los coeficientes A_n y B_n, que al sustituirlos en la Ec. (5.5), obtenemos la probabilidad de encontrar a la partícula en función de τ.

5.1.1. Análisis de la densidad de probabilidad para algunos sistemas confinados

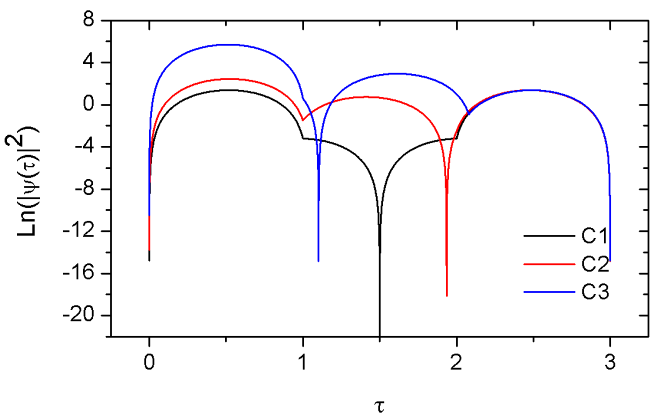
Utilizando el algoritmo del Apéndice B.4 podemos graficar la Ec. (5.5) en función de τ para cualquier sistema confinado. Elijamos algunos sistemas analizados en los dos capítulos anteriores para obtener ahora la densidad de probabilidad de una partícula dentro de estos sistemas. Elijamos los sistemas con 2, con 25 y con 50 potenciales delta.

Para el sistema con 2 potenciales delta, consideremos tres configuraciones distintas cuyos espectros de energías se muestran en las Figs. 3.6d, 4.2a y 4.3d. En la primera configuración se tiene el sistema ordenado, los potenciales delta tienen una intensidad común $\lambda_1=\lambda_2=15$ y dado que se encuentran en las posiciones a y $2a$ respectivamente, $\beta_1=1$ y $\beta_2=2$. En la segunda configuración, la intensidad del primer potencial sigue siendo $\lambda_1=15$ y la del segundo ahora es de $\lambda_2=3$, y se siguen manteniendo β_1 en 1 y β_2 en 2. Por último, en la tercera configuración, los potenciales vuelven a tener una intensidad común de $\lambda_1=\lambda_2=15$, $\beta_1=1$ pero ahora $\beta_2=2.08$. En estas tres configuraciones, la caja de paredes infinitas tiene una longitud fija de $3a$.

En la Fig. 5.1 graficamos el logaritmo natural de la densidad de probabilidad $|\psi(\tau)|^2$ para las tres distintas configuraciones del sistema con 2 potenciales delta donde C1, C2 y C3 son las gráficas de la primera, de la segunda y de la tercera configuración respectivamente, utilizando (a) el primer nivel de energía, (b) el segundo nivel de energía.



(a)

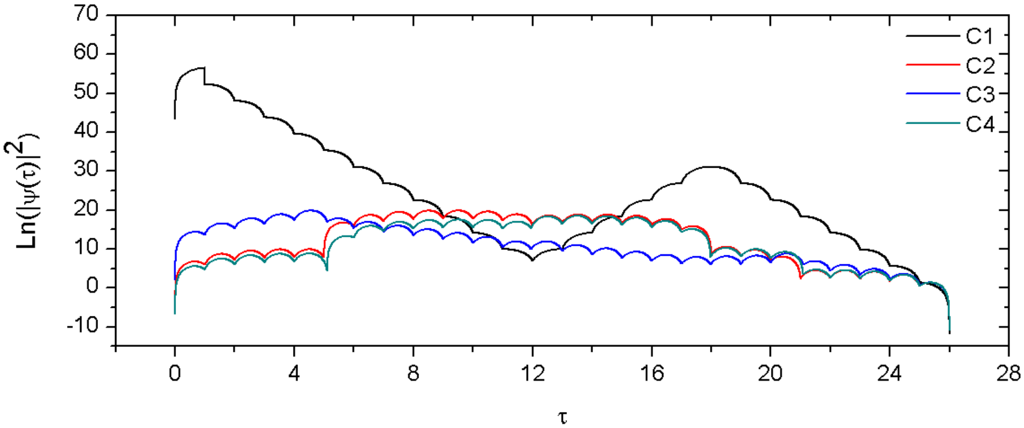


(b)

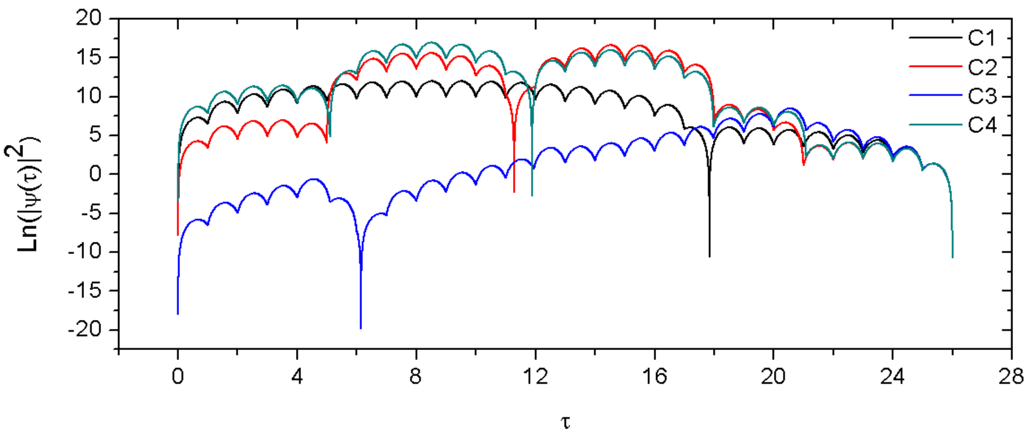
Figura 5.1: Gráficas del logaritmo natural de la densidad de probabilidad de una partícula dentro de una caja de paredes infinitas de longitud $3a$ y con 2 potenciales delta donde en C1, $\lambda_1 = \lambda_2 = 15$, siendo $\beta_1 = 1$ y $\beta_2 = 2$; en C2, $\lambda_1 = 15$, $\lambda_2 = 3$ y permaneciendo β_1 en 1 y β_2 en 2; en C3, $\lambda_1 = \lambda_2 = 15$, $\beta_1 = 1$ pero $\beta_2 = 2.08$ para (a) el primer nivel de energía, (b) el segundo nivel de energía.

Para el sistema con 25 potenciales delta, consideremos 4 configuraciones distintas cuyos espectros de energías se muestran en las Figs. 4.4a, 4.4d, 4.5d y 4.6d. En este sistema, la caja de potencial tiene una longitud fija de $26a$ siendo $\beta_1 = 1$, $\beta_2 = 2$, $\ldots$, $\beta_{25} = 25$ y $\lambda_1 = \lambda_2 = \cdots = \lambda_{25} = 6$, excepto que en la primera configuración tenemos una vacancia pues $\lambda_{18} = 0$; en la segunda configuración $\lambda_5 = 110$, $\lambda_{12} = 8$, $\lambda_{18} = 45$ y $\lambda_{21} = 23$; en la tercera configuración $\beta_5 = 5.105$, $\beta_{12} = 11.95$, $\beta_{18} = 17.981$ y $\beta_{21} = 21.09$; y en la cuarta configuración $\lambda_5 = 110$, $\lambda_{12} = 8$, $\lambda_{18} = 45$, $\lambda_{21} = 23$ y $\beta_5 = 5.105$, $\beta_{12} = 11.95$, $\beta_{18} = 17.981$, $\beta_{21} = 21.09$.

En la Fig. 5.2 graficamos el logaritmo natural de la densidad de probabilidad $|\psi_1(\tau)|^2$ para las cuatro distintas configuraciones del sistema con 25 potenciales delta. C1, C2, C3 y C4 son las gráficas correspondientes a la primera, a la segunda, a la tercera y a la cuarta configuración, respectivamente, para (a) el primer nivel de energía, (b) el segundo nivel de energía.



(a)

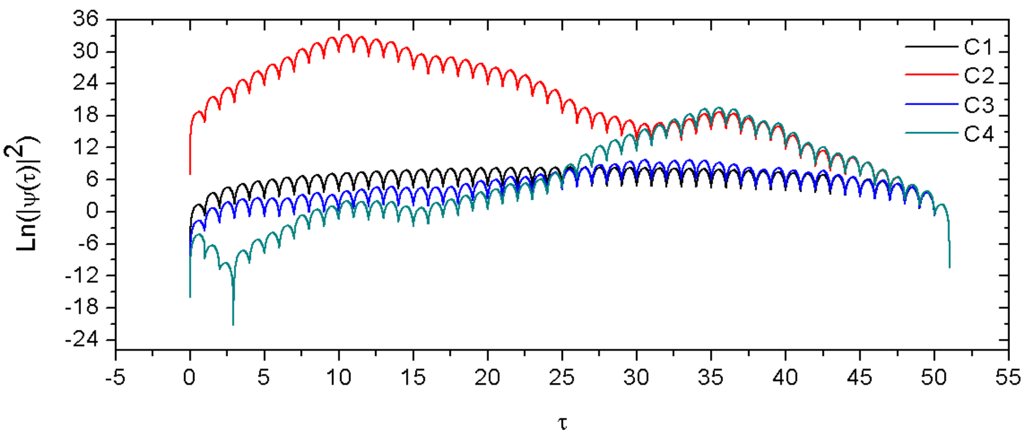


(b)

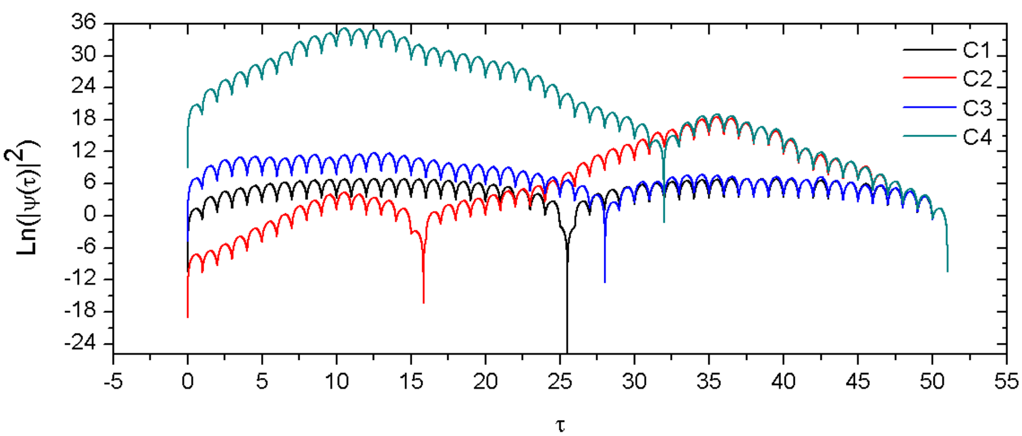
Figura 5.2: Gráficas del logaritmo natural de la densidad de probabilidad de una partícula dentro de una caja de paredes infinitas de longitud $26a$ con 25 potenciales delta con $\lambda_1 = \lambda_2 = \cdots = \lambda_{25} = 15$ y $\beta_1 = 1$, $\beta_2 = 2$, ... , $\beta_{25} = 25$ excepto que en C1, $\lambda_{18} = 0$; en C2, $\lambda_5 = 110$, $\lambda_{12} = 12$, $\lambda_{18} = 45$ y $\lambda_{21} = 23$; en C3, $\beta_5 = 5.105$, $\beta_{12} = 11.95$, $\beta_{18} = 17.981$ y $\beta_{21} = 21.09$; en C4, $\lambda_5 = 110$, $\lambda_{12} = 8$, $\lambda_{18} = 45$ $\lambda_{21} = 23$ y $\beta_5 = 5.105$, $\beta_{12} = 11.95$, $\beta_{18} = 17.981$, $\beta_{21} = 21.09$ para (a) el primer nivel de energía, (b) el segundo nivel de energía.

Por último, para el sistema con 50 potenciales delta, consideremos las configuraciones para las cuales sus espectros de energías se muestran en las Figs. 3.8d, 4.7a, 4.8a y 4.9a. En este sistema, la caja de potencial tiene una longitud fija de $51a$.

En la primera configuración se tiene el sistema ordenado siendo $\beta_1 = 1$, $\beta_2 = 2$, ... , $\beta_{50} = 50$ y $\lambda_1 = \lambda_2 = \cdots = \lambda_{50} = 15$. En la segunda configuración se tiene el sistema con desorden composicional siendo $\beta_1 = 1$, $\beta_2 = 2$, ... , $\beta_{50} = 50$ y $\lambda_1 = 15 + \delta\lambda_1$, $\lambda_2 = 15 + \delta\lambda_2$, ... , $\lambda_{50} + \delta\lambda_{50}$, donde $\delta\lambda_1$, $\delta\lambda_2$, ... , $\delta\lambda_{50}$ son números aleatorios dentro del intervalo $[\![-3, 3]\!]$. En la tercera configuración el sistema presenta desorden estructural donde $\lambda_1 = \lambda_2 = \cdots = \lambda_{50} = 15$ y $\beta_1 = 1 + \delta\beta_1$, $\beta_2 = 2 + \delta\beta_2$, ... , $\beta_{50} = 50 + \delta\beta_{50}$, siendo $\delta\beta_1$, $\delta\beta_2$, ... , $\delta\beta_{50}$ números aleatorios dentro del intervalo $[\![-0.01, 0.01]\!]$. En la última configuración se tiene el sistema con desorden total con $\lambda_1 = 15 + \delta\lambda_1$, $\lambda_2 = 15 + \delta\lambda_2$, ... , $\lambda_{50} + \delta\lambda_{50}$ y $\beta_1 = 1 + \delta\beta_1$, $\beta_2 = 2 + \delta\beta_2$, ... , $\beta_{50} = 50 + \delta\beta_{50}$, donde los números aleatorios $\delta\lambda_1$, $\delta\lambda_2$, ... , $\delta\lambda_{50}$ y $\delta\beta_1$, $\delta\beta_2$, ... , $\delta\beta_{50}$ se encuentran en los intervalos $[\![-3, 3]\!]$ y $[\![-0.01, 0.01]\!]$ respectivamente.



(a)



(b)

Figura 5.3: Gráficas del logaritmo natural de la densidad de probabilidad de una partícula dentro de una caja de paredes infinitas de longitud $51a$ con 50 potenciales delta donde en C1, $\lambda_1 = \lambda_2 = \cdots = \lambda_{50} = 15$ y $\beta_1 = 1$, $\beta_2 = 2$, ... , $\beta_{50} = 50$; en C2, λ_1, λ_2, ... , $\lambda_{50} \in [\![12, 18]\!]$ y $\beta_1 = 1$, $\beta_2 = 2$, ... , $\beta_{50} = 50$; en C3, $\lambda_1 = \lambda_2 = \cdots = \lambda_{50} = 15$ y $\beta_1 = 1 + \delta\beta_1$, $\beta_2 = 2 + \delta\beta_2$, ... , $\beta_{50} = 50 + \delta\beta_{50}$, donde $\delta\beta_1$, $\delta\beta_2$, ... , $\delta\beta_{50} \in [\![-0.01, 0.01]\!]$ y en C4, λ_1, λ_2, ... , $\lambda_{50} \in [\![12, 18]\!]$ y $\beta_1 = 1 + \delta\beta_1$, $\beta_2 = 2 + \delta\beta_2$, ... , $\beta_{50} = 50 + \delta\beta_{50}$, donde $\delta\beta_1$, $\delta\beta_2$, ... , $\delta\beta_{50} \in [\![-0.01, 0.01]\!]$ para (a) el primer nivel de energía, (b) el segundo nivel de energía.

En la Fig. 5.3 graficamos el logaritmo natural de la densidad de probabilidad $|\psi_1(\tau)|^2$ para las cuatro configuraciones distintas del sistema con 50 potenciales delta.

Las gráficas C1, C2, C3 y C4 corresponden respectivamente a la primera, a la segunda, a la tercera y a la cuarta configuración del sistema utilizando en (a) el primer nivel de energía, en (b) el segundo nivel de energía.

Analicemos ahora las gráficas para el primer nivel de energía obtenidas en los tres sistemas elegidos. En éstas, no se graficó directamente $|\psi(\tau)|^2$ en función de τ, sino $\mathrm{Ln}(|\psi(\tau)|^2)$, esto se debe a que $|\psi(\tau)|^2$ toma valores muy grandes.

Así, para el sistema con 2 potenciales delta, en la primera configuración $\mathrm{Ln}(|\psi(\tau)|^2)$ alcanza su máximo en el intervalo $1 < \tau < 2$ decayendo simétricamente en los intervalos $0 < \tau < 1$ y $2 < \tau < 3$, en la segunda configuración, podemos ver que $\mathrm{Ln}(|\psi(\tau)|^2)$ es más grande en los intervalos $1 < \tau < 2$ y $2 < \tau < 3$, intervalos alrededor de la posición del potencial cuya intensidad se está variando, en la tercera configuración $\mathrm{Ln}(|\psi(\tau)|^2)$ también alcanza su máximo dentro del intervalo $1 < \tau < 2$ y el pico de discontinuidad se desplaza a $\tau = 2.08$ que es la posición del segundo potencial delta de esa configuración.

Para el sistema con 25 potenciales delta, la gráfica de $\mathrm{Ln}(|\psi(\tau)|^2)$ para la primera configuración sobresale del resto, pues en ésta $\mathrm{Ln}(|\psi(\tau)|^2)$ alcanza su máximo absoluto dentro del intervalo $1 < \tau < 2$ muy por encima de cualquier otro máximo para las otras configuraciones. En esta gráfica también existe un máximo relativo, sin embargo, éste puede entenderse fácilmente ya que ese máximo se alcanza en la posición donde se ha hecho la vacancia, en $\tau = 18$. Ahora bien, las gráficas de la segunda y de la cuarta configuración son muy parecidas, el efecto de variar las intensidades de los potenciales delta es muy similar al de variar tanto sus intensidades como sus posiciones. Por último, en la gráfica de la tercera configuración notamos nuevamente que sólo dentro de intervalo $4 < \tau < 5$, $\mathrm{Ln}(|\psi(\tau)|^2)$ alcanza su máximo absoluto, aunque este máximo es mucho menor que el que se presenta en la gráfica de la primera configuración.

Para el sistema con 50 potenciales delta, en el caso ordenado nuevamente se observa la simetría de la gráfica de $\mathrm{Ln}(|\psi(\tau)|^2)$, sin embargo, si presenta desorden composicional, $\mathrm{Ln}(|\psi(\tau)|^2)$ es mucho mayor en una región específica del sistema, dicha región es meramente aleatoria, es decir, $\mathrm{Ln}(|\psi(\tau)|^2)$ se localiza [18] aleatoriamente dentro del sistema, a diferencia de si presenta desorden estructural, en ese caso no se nota claramente ese efecto. Cuando el sistema presenta desorden total el efecto de localización también se nota.

Por otra parte, en las gráficas de $\mathrm{Ln}(|\psi(\tau)|^2)$ para el segundo nivel de energía, también se presenta el efecto de localización en las mismas configuraciones que cuando se usa el primer nivel de energía, aunque las regiones en donde $\mathrm{Ln}(|\psi(\tau)|^2)$ alcanza su máximo no son las mismas.

5.2. Coeficientes de transmisión y reflexión

Supongamos ahora que el sistema mostrado en la Fig. 4.1 no está confinado y que un haz incide desde $-\infty$ hasta encontrarse con el primer potencial localizado en $\beta_1 a$. La función de onda de este haz incidente puede expresarse en función de τ como

$$\psi_0(\tau) = e^{i\phi\tau} + Re^{-i\phi\tau} \qquad \tau < \beta_1, \tag{5.12}$$

donde $e^{i\phi\tau}$ representa la onda que viaja de izquierda a derecha del sistema y $Re^{-i\phi\tau}$ representa la onda que viaja de derecha a izquierda, es decir, la parte reflejada del haz incidente, siendo R el coeficiente de reflexión. Dependiendo de las características del arreglo de potenciales y del haz incidente, existe la posibilidad de que parte de este haz incidente pueda atravesar todo el arreglo. La función de onda del haz transmitido se expresa como

$$\psi_N(\tau) = Te^{i\phi\tau} \qquad \tau > \beta_N, \tag{5.13}$$

siendo T el coeficiente de transmisión.

Usando la matriz de transferencia dada en la Ec. 4.31, podemos establecer las relaciones entre los coeficientes de transmisión y de reflexión, es decir, podemos establecer que

$$\begin{pmatrix} 1 \\ \\ R \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} W_T & Z_T \\ \\ Z_T^* & W_T^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T \\ \\ 0 \end{pmatrix}, \tag{5.14}$$

de la ecuación anterior se sigue que

$$T = \frac{1}{W_T}, \qquad R = \frac{Z_T^*}{W_T}. \tag{5.15}$$

Multiplicando T y R por sus respectivos complejos conjugados y sumando ambos términos se tiene

$$\left(\frac{1}{W_T}\right)\left(\frac{1}{W_T^*}\right) + \left(\frac{Z_T^*}{W_T}\right)\left(\frac{Z_T}{W_T^*}\right) = \frac{1}{|W_T|^2}(1 + |Z_T|^2), \tag{5.16}$$

ya que de la Ec. 4.33 $|W_T|^2 - |Z_T|^2 = 1$, podemos reescribir la Ec. (5.16) como

$$\frac{|W_T|^2}{|W_T|^2} = 1, \tag{5.17}$$

así, dado que $TT^* = |T|^2$ y $RR^* = |R|^2$ se cumple que

$$|T|^2 + |R|^2 = 1, \tag{5.18}$$

como debe ser por conservación de la probabilidad.

Ahora bien, en general los términos W_T y Z_T, son funciones de la energía, las intensidades y las posiciones de los potenciales delta. Así, para una configuración dada de nuestro sistema, es decir, para un conjunto fijo de las posiciones y las intensidades de los potenciales delta, podemos graficar tanto $|T|$ como $|R|$ en función de ϕ, que ahora es una variable continua porque ya no tenemos al sistema encerrado dentro de una caja de paredes infinitas.

5.2.1. Análisis de $|T|$ y $|R|$ para algunos sistemas desordenados

Para una configuración específica de un sistema con un determinado número de potenciales delta, usando el algoritmo del Apéndice B.5, podemos graficar $|T|$ y $|R|$ en función de ϕ, siendo ésta una variable relacionada con la energía. Al igual que en la sección anterior, elijamos algunas configuraciones de los sistemas con 2, 25 y 50 potenciales delta. Para cada uno de estos sistemas, elijamos varias configuraciones distintas para obtener las gráficas de $|T|$ y $|R|$.

Para el sistema con 2 potenciales delta consideremos las mismas configuraciones que elegimos en la sección anterior, teniendo en cuenta ahora que ya no están confinadas dentro de la caja de paredes infinitas.

En la Fig. 5.4 graficamos $|T|$ y $|R|$ para el sistema con 2 potenciales delta donde la gráfica C1 corresponde al sistema ordenado siendo $\lambda_1 = \lambda_2 = 15$, $\beta_1 = 1$ y $\beta_2 = 2$, la gráfica C2 corresponde a la configuración en la que $\lambda_1 = 15$, $\lambda_2 = 3$, $\beta_1 = 1$ y $\beta_2 = 2$, y en C3 $\lambda_1 = \lambda_2 = 15$, $\beta_1 = 1$ y $\beta_2 = 2.08$.

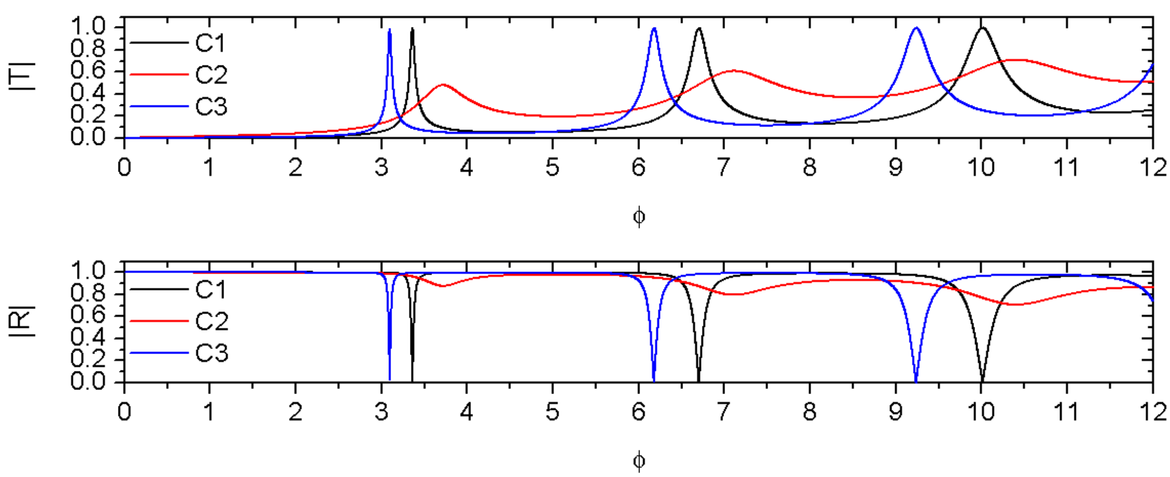


Figura 5.4: Gráficas de $|T|$ y de $|R|$ para el sistema con dos potenciales delta. En C1 $\lambda_1 = \lambda_2 = 15$, $\beta_1 = 1$ y $\beta_2 = 2$, en C2 $\lambda_1 = 15$, $\lambda_2 = 3$, $\beta_1 = 1$ y $\beta_2 = 2$ y en C3 $\lambda_1 = \lambda_2 = 15$, $\beta_1 = 1$ y $\beta_2 = 2.08$.

Para el sistema con 25 deltas también consideremos las mismas configuraciones que elegimos en la sección anterior y agreguemos una más, la del sistema ordenado.

Graficando $|T|$ y $|R|$ para las configuraciones elegidas tenemos la Fig. 5.5 que corresponde al sistema ordenado donde $\lambda_1 = \lambda_2 = \cdots = \lambda_{25} = 6$ y $\beta_1 = 1$, $\beta_2 = 2$, $\ldots$, $\beta_{25} = 25$, la Fig. 5.6 en donde $\beta_1 = 1$, $\beta_2 = 2$, $\ldots$, $\beta_{25} = 25$ y $\lambda_1 = \lambda_2 = \cdots = \lambda_{25} = 6$ excepto $\lambda_{18} = 0$, la Fig. 5.7 donde $\beta_1 = 1$, $\beta_2 = 2$, $\ldots$, $\beta_{25} = 25$ y $\lambda_1 = \lambda_2 = \cdots = \lambda_{25} = 6$ excepto $\lambda_5 = 110$, $\lambda_{12} = 8$, $\lambda_{18} = 45$ y $\lambda_{21} = 23$, la Fig. 5.8 donde $\lambda_1 = \lambda_2 = \cdots = \lambda_{25} = 6$ y $\beta_1 = 1$, $\beta_2 = 2$, $\ldots$, $\beta_{25} = 25$ excepto $\beta_5 = 5.105$, $\beta_{12} = 11.95$, $\beta_{18} = 17.981$, $\beta_{21} = 21.09$ y la Fig. 5.9 donde $\lambda_1 = \lambda_2 = \cdots = \lambda_{25} = 6$, $\beta_1 = 1$, $\beta_2 = 2$, $\ldots$, $\beta_{25} = 25$ excepto $\lambda_5 = 110$, $\lambda_{12} = 8$, $\lambda_{18} = 45$, $\lambda_{21} = 23$, $\beta_5 = 5.105$, $\beta_{12} = 11.95$, $\beta_{18} = 17.981$ y $\beta_{21} = 21.09$.

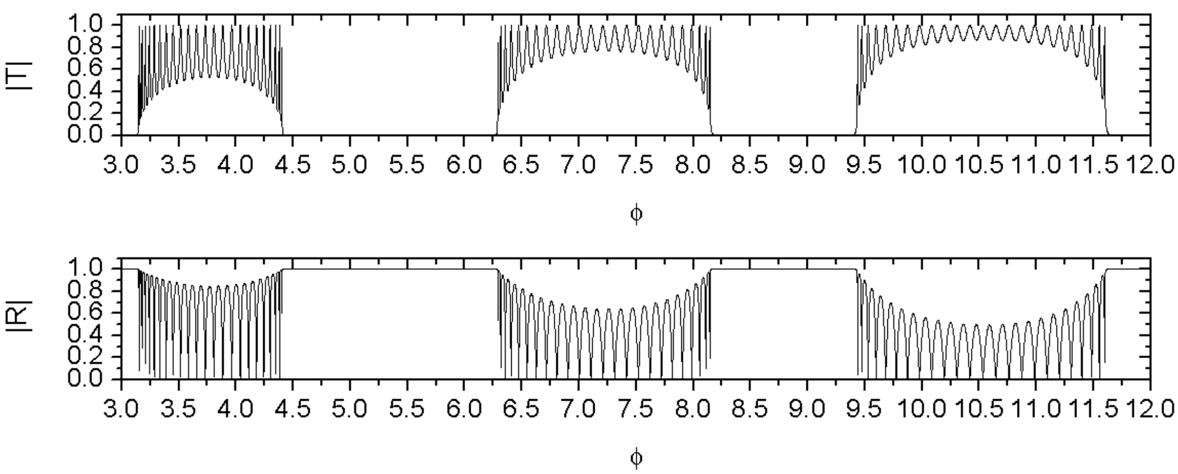


Figura 5.5: Gráficas de $|T|$ y de $|R|$ para el sistema ordenado con 25 potenciales delta donde $\lambda_1 = \lambda_2 = \cdots = \lambda_{25} = 6$ y $\beta_1 = 1$, $\beta_2 = 2$, ... , $\beta_{25} = 25$.

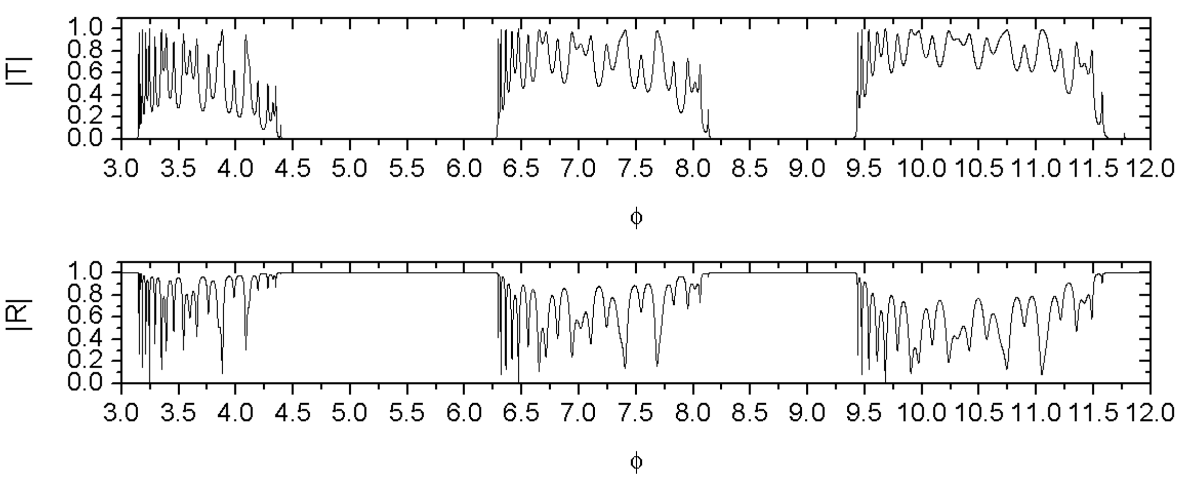


Figura 5.6: Gráficas de $|T|$ y de $|R|$ para el sistema con 25 potenciales delta con $\beta_1 = 1$, $\beta_2 = 2$, ... , $\beta_{25} = 25$ y $\lambda_1 = \lambda_2 = \cdots = \lambda_{25} = 6$ excepto $\lambda_{18} = 0$.

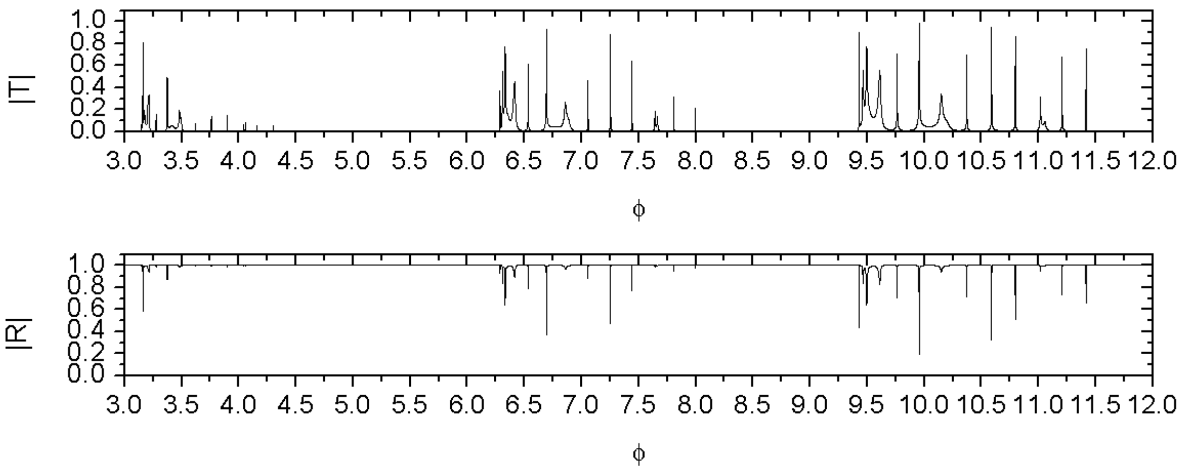


Figura 5.7: Gráficas de $|T|$ y de $|R|$ para el sistema con 25 potenciales delta donde $\beta_1 = 1$, $\beta_2 = 2, \ldots, \beta_{25} = 25$ y $\lambda_1 = \lambda_2 = \cdots = \lambda_{25} = 6$ excepto $\lambda_5 = 110$, $\lambda_{12} = 8$, $\lambda_{18} = 45$ y $\lambda_{21} = 23$.

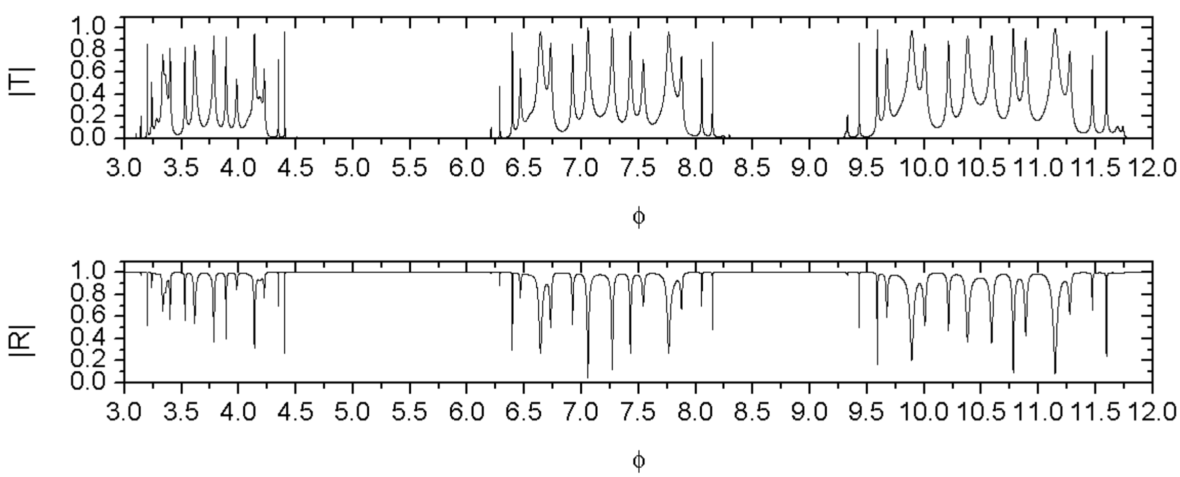


Figura 5.8: Gráficas de $|T|$ y de $|R|$ para el sistema con 25 potenciales delta siendo $\lambda_1 = \lambda_2 = \cdots = \lambda_{25} = 6$ y $\beta_1 = 1$, $\beta_2 = 2, \ldots, \beta_{25} = 25$ excepto $\beta_5 = 5.105$, $\beta_{12} = 11.95$, $\beta_{18} = 17.981$, $\beta_{21} = 21.09$.

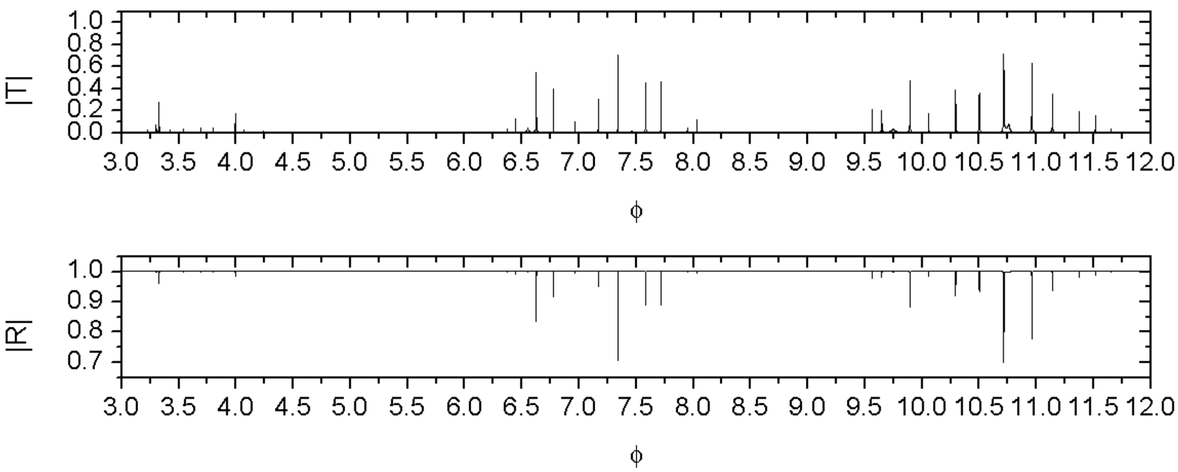


Figura 5.9: Gráficas de $|T|$ y de $|R|$ para el sistema con 25 potenciales delta donde $\lambda_1 = \lambda_2 = \cdots = \lambda_{25} = 6$, $\beta_1 = 1$, $\beta_2 = 2, \ldots, \beta_{25} = 25$ excepto $\lambda_5 = 110$, $\lambda_{12} = 8$, $\lambda_{18} = 45$, $\lambda_{21} = 23$, $\beta_5 = 5.105$, $\beta_{12} = 11.95$, $\beta_{18} = 17.981$ y $\beta_{21} = 21.09$.

Por último, para el sistema con 50 potenciales delta también analicemos los coeficientes de transmisión y reflexión para las mismas configuraciones que elegimos en la sección anterior.

Graficando $|T|$ y $|R|$ en función de ϕ tenemos la Fig. 5.10 que corresponde al sistema ordenado donde $\lambda_1 = \lambda_2 = \cdots = \lambda_{50} = 15$ y $\beta_1 = 1$, $\beta_2 = 2, \ldots, \beta_{50} = 50$; la Fig. 5.11 que corresponde al sistema con desorden composicional siendo $\beta_1 = 1$, $\beta_2 = 2, \ldots, \beta_{50} = 50$ y $\lambda_1 = 15 + \delta\lambda_1$, $\lambda_2 = 15 + \delta\lambda_2, \ldots, \lambda_{50} + \delta\lambda_{50}$, donde los números aleatorios $\delta\lambda_1, \delta\lambda_2, \ldots, \delta\lambda_{50}$ se encuentran dentro del intervalo $[\![-3, 3]\!]$; la Fig. 5.12 que corresponde al sistema con desorden estructural siendo $\lambda_1 = \lambda_2 = \cdots = \lambda_{50} = 15$ y $\beta_1 = 1 + \delta\beta_1$, $\beta_2 = 2 + \delta\beta_2, \ldots, \beta_{50} = 50 + \delta\beta_{50}$, donde los números aleatorios $\delta\beta_1, \delta\beta_2, \ldots, \delta\beta_{50}$ se encuentran dentro del intervalo $[\![-0.01, 0.01]\!]$; y la Fig. 5.13 que corresponde al sistema con desorden total siendo $\lambda_1 = 15 + \delta\lambda_1$, $\lambda_2 = 15 + \delta\lambda_2, \ldots, \lambda_{50} + \delta\lambda_{50}$ y $\beta_1 = 1 + \delta\beta_1$, $\beta_2 = 2 + \delta\beta_2, \ldots, \beta_{50} = 50 + \delta\beta_{50}$, donde los números aleatorios $\delta\lambda_1, \delta\lambda_2, \ldots, \delta\lambda_{50}$ y $\delta\beta_1, \delta\beta_2, \ldots, \delta\beta_{50}$ se encuentran dentro de los intervalos $[\![-3, 3]\!]$ y $[\![-0.01, 0.01]\!]$ respectivamente.

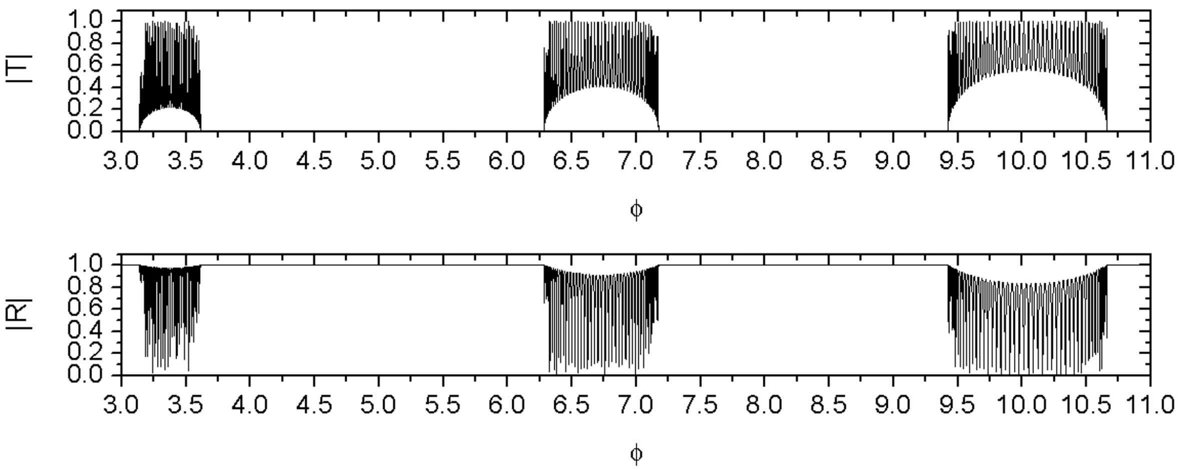


Figura 5.10: Gráficas de $|T|$ y de $|R|$ para el sistema ordenado con 50 potenciales delta donde $\lambda_1 = \lambda_2 = \cdots = \lambda_{25} = 15$ y $\beta_1 = 1$, $\beta_2 = 2$, $\ldots$, $\beta_{50} = 50$.

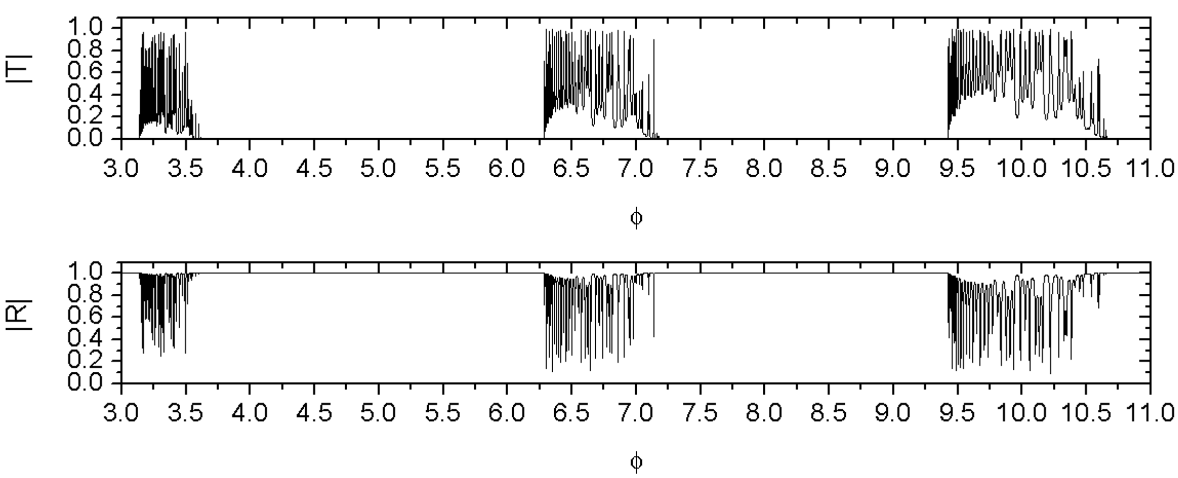


Figura 5.11: Gráficas de $|T|$ y de $|R|$ para el sistema con 50 potenciales delta con desorden composicional siendo $\beta_1 = 1$, $\beta_2 = 2$, $\ldots$, $\beta_{50} = 50$ y $\lambda_1 = 15 + \delta\lambda_1$, $\lambda_2 = 15 + \delta\lambda_2$, $\ldots$, $\lambda_{50} + \delta\lambda_{50}$, donde los números aleatorios $\delta\lambda_1$, $\delta\lambda_2$, $\ldots$, $\delta\lambda_{50}$ se encuentran dentro del intervalo $[\![-3, 3]\!]$.

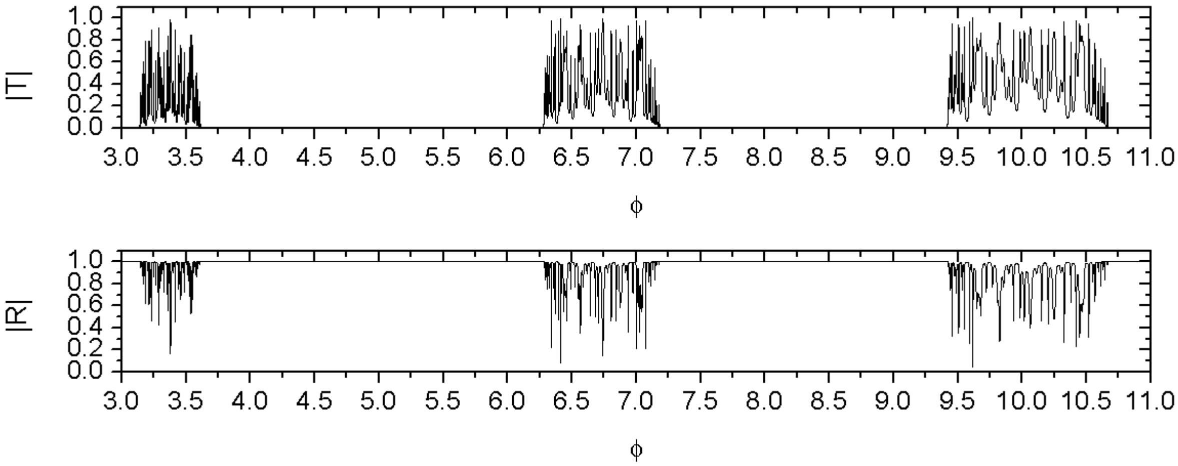


Figura 5.12: Gráficas de $|T|$ y de $|R|$ para el sistema con 50 potenciales delta con desorden estructural siendo $\lambda_1 = 1$, $\lambda_2 = 2$, ... , $\lambda_{50} = 50$ y $\beta_1 = 1 + \delta\beta_1$, $\lambda_2 = 15 + \delta\beta_2$, ... , $\beta_{50} + \delta\beta_{50}$, donde los números aleatorios $\delta\beta_1$, $\delta\beta_2$, ... , $\delta\beta_{50}$ se encuentran dentro del intervalo $[\![-0.01, 0.01]\!]$.

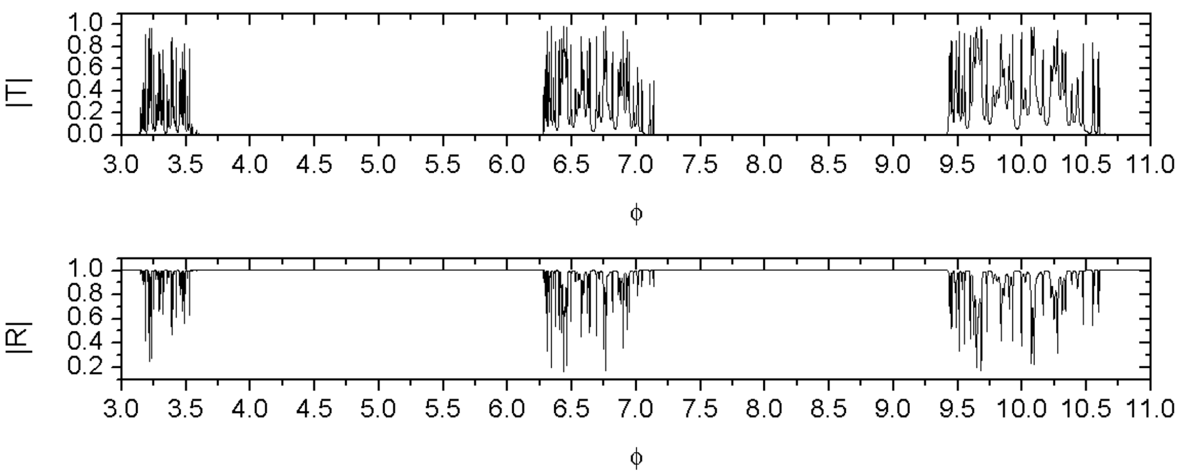


Figura 5.13: Gráficas de $|T|$ y de $|R|$ para el sistema con 50 potenciales delta con desorden total siendo $\beta_1 = 1+\delta\beta_1$, $\beta_2 = 2+\delta\beta_2$, ... , $\beta_{50} = 50+\delta\beta_{50}$ y $\lambda_1 = 15+\delta\lambda_1$, $\lambda_2 = 15+\delta\lambda_2$, ... , $\lambda_{50} = 15+\delta\lambda_{50}$ donde $\delta\beta_1$, $\delta\beta_2$, ... , $\delta\beta_{50}$ y $\delta\lambda_1$, $\delta\lambda_2$, ... , $\delta\lambda_{50}$ se encuentran respectimente en los intervalos $[\![-0.01, 0.01]\!]$ y $[\![-3, 3]\!]$.

Analicemos las gráficas de $|T|$ y $|R|$ presentadas anteriormente. En general, al graficar $|T|$ en función de ϕ, vemos que hay intervalos de ϕ en los cuales $|T|$ toma valores muy pequeños (para el caso del sistema con 2 potenciales delta) o se anula (para los sistemas con 25 y 50 deltas), alternándose con intervalos donde $|T|$ no se anula.

Para cada intervalo de energías donde $|T|$ no se anula, en los sistemas ordenados, las gráficas de $|T|$ presentan $N-1$ picos muy regulares entre sí, siendo N el número de potenciales delta presentes en el sistema. Estos picos alcanzan valores de alrededor de 0.9, muy grandes si consideramos que el haz se transmite totalmente cuando $|T| = 1$.

Cuando se desordenan los sistemas, también existen intervalos de energías para las cuales no hay transmisión y otros para los que sí las hay. La gráficas de $|T|$ en estos intervalos también presentan picos muy irregulares entre sí, además, éstos ya no alcanzan valores cercanos a la unidad. Aquí ocurre un caso interesante cuando sobre el sistema ordenado (de 25 potenciales delta) introducimos imperfecciones e impurezas, pues los picos que presenta $|T|$ (en los intervalos donde sí hay transmisión), toman valores pequeños, alrededor de 0.3.

Así, en general, de las gráficas podemos decir que aún cuando ya no tenemos a la partícula confinada dentro de la caja de paredes infinitas, para ciertos intervalos de energías de la partícula, ésta no puede atravesar el sistema, mientras que para otros intervalos, la partícula puede filtrarse a través del sistema, existiendo valores dentro de ese intevalo donde la probabilidad de atravesar el sistema, es muy alta. Luego, una configuración específica con N potenciales delta, puede utilizarse para filtrar partículas con ciertas energías sobre un conjunto de partículas con un amplio intervalo de energías.

Capítulo 6

Conclusiones

En esta tesis, al analizar los sistemas finitos unidimensionales ordenados y desordenados, se han obtenido importantes resultados que sin duda nos ayudarán a entender mejor estos sistemas.

En los sistemas ordenados, si el espaciamiento entre los potenciales delta es de a unidades de longitud, al analizar sus espectros de energías, se encuentra que conforme se incrementa el número de potenciales delta (incrementando también la logitud total del sistema), los niveles discretos de energía comienzan a formar alternadamente estructuras de bandas de energías permitidas y bandas prohibidas. Se encuentra que las bandas prohibidas se ensanchan conforme aumentamos la intensidad común de los potenciales delta. Aquí se observa un caso interesante en las bandas de energía, pues los niveles de energía máximos de cada banda permanecen invariantes, independientemente de la intensidad común de los potenciales delta, explícitamente estos valores invariantes son π^2, $4\pi^2$, $9\pi^2$, $\ldots$, (en unidades de $\hbar^2/2ma^2$). Sin embargo, si modificamos el espaciamiento de los potenciales delta se encuentra que estos valores ya no permanecen invariantes. Si analizamos nuevamente los niveles de energías cuando el espaciamiento entre los potenciales delta no se mantiene en a unidades, se encuentra que los máximos de cada banda también se mantienen fijos y no dependen de la intensidad común de los potenciales delta. Por lo que podemos decir que los máximos de cada banda siempre se mantienen constantes independientes de la intensidad común de los potenciales delta pero dependientes del espaciamiento entre estos potenciales, es decir, dependen de la longitud total del sistema. También, cabe mencionarse que en cada banda de energía permitida, se encontró que existen $N+1$ niveles de energía, donde N el número de potenciales delta del sistema. Otro caso interesante ocurre en los valores límites de la intensidad de los potenciales delta, pues si es cero, entonces los niveles de energía son debido a la caja de paredes infinitas, si tiende a infinito se presenta el caso degenerado en el que se tiene $N+1$ niveles de energía con los mismos valores, siendo éstos los máximos de cada banda de energía permitida.

Cuando pasamos de los sistemas ordenados a los desordenados, encontramos nuevas propiedades interesantes. Si el sistema ordenado presenta una vacancia, entonces, en las dos primeras bandas prohibidas aparece un nivel de energía, siendo éste el mínimo de las bandas de energía (ya que al considerarla con los demás niveles de la banda de energía obtenemos precisamente $N+1$ niveles). Es éste el efecto (sobre las bandas de energías) de introducir una vacancia en el sistema. Se observa también que se siguen manteniendo constantes los máximos de cada banda. Cuando se introducen aleatoriamente imperfecciones al sistema, desaparece la invariancia de los máximos de cada banda. Si el desorden lo extendemos a las intensidades de todos los potenciales delta, es decir, si configuramos el sistema con desorden composicional, entonces los máximos de cada banda vuelven ser invariantes, independientes de las intensidades de los potenciales delta. En los casos de los sistemas con desorden estructural y total, nuevamente desaparece esta invariancia de estos bordes superiores de las bandas de energía permitidas. A diferencia del sistema ordenado, aquí las bandas de energía también sufren un desorden, existiendo regiones dentro de ellas donde los niveles de energía se aglomeran y otras en donde se separan, siendo éstas puramente aleatorias.

Cuando se realizaron los promedios y las desviaciones estándar de cada nivel de energía sobre conjuntos de configuraciones con desorden composicional, estructural y total, aparecieron también efectos interesantes. Para los sistemas con desorden composicional, los primeros niveles de energía de cada banda de energía son los que presentan mayor desviación estándar, luego, ésta disminuye paulatinamente hasta anularse para los máximos niveles de energía de cada banda de energía, este resultado refuerza lo obtenido para las configuraciones aisladas. En los sistemas con desorden composicional, si el sistema consta de un número par de potenciales delta entonces los niveles iniciales y finales de cada banda de energía, son los que presentan menor desviación estándar, aumentando gradualmente para los niveles de energía centrales. Si el sistema consta de un número impar de deltas, también los niveles iniciales y finales presentan menor dispersión y además, el nivel central de cada banda de energía. Este resultado es curioso, ya que los niveles adjuntos a este nivel de energía central, presentan una desviación estándar mucho mayor, sólo en este nivel es donde decae abruptamente la desviación estándar. Finalmente, en los sistemas con desorden total, nuevamente niveles de menor energía de cada banda son los que más se dispersan de su promedio, decayendo gradualmente hasta tomar valores mínimos en los últimos niveles de cada banda, sin embargo, a diferencia de los sistemas con desorden composicional, aquí la desviación estándar ya no alcanza su valor mínimo en el último nivel de energía de cada banda de energía.

También, cuando se obtuvieron las densidades de probabilidad para los sistemas confinados parcialmente desordenados y desordenados, se encontraron características interesantes. Se encontró que para los sistemas ordenados, la densidad de probabilidad alcanza su máximo a la mitad de la longitud total de estos sistemas, decayendo simétricamente en sus extremos, en cambio, cuando los sistemas presentan vacancias, imperfecciones o impurezas, la densidad de probabilidad pierde su simetría respecto a la mitad del sistema, y alcanza su máximo en alguna región desplazada del centro. Aquí, la densidad de probabilidad sobresale cuando el sistema presenta una vacancia pues su máximo supera a los máximos de las demás configuraciones. Cuando se generaliza el desorden a todos los potenciales delta y el sistema presenta desorden composicional, también su densidad de probabilidad máxima se localiza en alguna región desplazada de la mitad del sistema, siendo este máximo mucho mayor que los máximos de las densidades de probabilidad para los sistema con desorden estructural y total que también se localizan en otras regiones desplazadas del centro del sistema. Así pues, resumiendo, se encontró que cuando se desordenan los sistemas de potenciales delta, las funciones de onda y por lo tanto sus densidades de probabilidad, se localizan aleatoriamente en alguna región dentro del sistema.

Cuando analizamos los sistemas no confinados obteniendo sus coeficientes de transmisión y de reflexión en un cierto intervalo de energías, se encontró que en los sistemas ordenados existen intervalos de energías donde los coeficientes de transmisión se anulan, alternándose con intervalos donde $|T|$ no se anula. Para cada intervalo donde existe transmisión, se observan $N-1$ picos regulares, siendo N es el número de potenciales delta presentes en el sistema. Cabe mencionarse que estos picos alcanzan valores muy cercanos a la unidad (alrededor de 0.9). Si los sistema presentan vacancias, imperfecciones o impurezas, también hay intervalos alternados de transmisión y no transmisión de T, también hay picos en los intervalos donde hay transmisión, sin embargo, aquí los picos son muy irregulares y en promedio no alcanzan ya el valor de 0.9 como sucede en el caso ordenado. Algo interesante ocurre en un sistema con imperfecciones e impurezas, aquí, en los intervalos de energía donde hay transmisión, también se observan picos de $|T|$ sin embargo, éstos alcanzan valores muy pequeños alrededor de 0.3. Finalmente, en los sistemas con desorden composicional, estructural y total, también se encuentran intervalos permitidos y no permitidos para $|T|$. Dentro de los intervalos permitidos, los valores de las energías para los cuales $|T|$ toma valores máximos abruptos, es decir picos, se presenta de manera muy irregular, lo cual evidentemente se relaciona con el desorden del sistema en cuestión.

Así, de manera general, podemos concluir que en el estudio de los sistemas finitos con N potenciales delta (ya sean ordenados o desordenados), las energías que puede tomar una partícula dentro de estos sistemas, se agrupan formando bandas de energía y bandas vacías, cuyas cacterísticas dependen de la configuración específica del sistema. En las bandas de energías pueden existir niveles inalterables para ciertas configuraciones del sistema o pueden no existir estos niveles para otras configuraciones, sin embargo, la estructura de bandas aparece siempre. Asimismo, la densidad de probabilidad, puede localizarse en alguna región del sistema si éste es desordenado, a diferencia de cuando el sistema es ordenado, pues en este caso su densidad de probabilidad presenta simetría con respecto a la mitad del sistema y no se observa ningún pico. Finalmente, cuando se elimina la restricción de confinamiento de la partícula, al graficar $|T|$ y $|R|$ para estos sistemas, aparecen intervalos de energías para los cuales la partícula puede atravesar el sistema y otros en los cuales esta partícula es opaco al sistema.

Apéndice A

Métodos numéricos para encontrar raíces

A.1. Método de la falsa posición

Sea f una función tal que $f \in C^2[a,b]$ y p es tal que $f(p) = 0$. Sea $\overline{x} \in [a,b]$ una aproximación a p tal que $f'(\overline{x}) \neq 0$ y $|p - \overline{x}|$ sea "pequeño". Consideremos el primer polinomio de Taylor para $f(x)$ expandido alrededor de $\overline{x}$, esto es

$$f(x) = f(\overline{x}) + (x - \overline{x})f'(\overline{x}) + \frac{(x - \overline{x})^2}{2} f''(\xi(x)) = 0, \tag{A.1}$$

donde $\xi(x)$ está entre x y $\overline{x}$. Como $f(p) = 0$, en particular cuando $x = p$, la ecuación anterior se convierte en

$$0 = f(\overline{x}) + (p - \overline{x})f'(\overline{x}) + \frac{(p - \overline{x})^2}{2} f''(\xi(p)), \tag{A.2}$$

como $|p - \overline{x}|$ es tan pequeño, el término que contiene $(p - \overline{x})^2$ es mucho menor, así, podemos aproximar la ecuación anterior como

$$0 \approx f(\overline{x}) + (p - \overline{x})f'(\overline{x}), \tag{A.3}$$

o bien, despejando p obtenemos

$$p \approx \overline{x} - \frac{f(\overline{x})}{f'(\overline{x})}. \tag{A.4}$$

La ecuación anterior motiva la elección de la función de iteración para construir la sucesión de aproximaciones

$$x_n = x_{n-1} - \frac{f(x_{n-1})}{f'(x_{n-1})} \qquad n \geq 1, \tag{A.5}$$

y como por definición

$$f'(x_{n-1}) = \lim_{x \to x_{n-1}} \frac{f(x) - f(x_{n-1})}{x - x_{n-1}}, \tag{A.6}$$

haciendo $x = x_{n-2}$, tenemos

$$f'(x_{n-1}) \approx \frac{f(x_{n-2}) - f(x_{n-1})}{x_{n-2} - x_{n-1}} = \frac{f(x_{n-2}) - f(x_{n-1})}{x_{n-1} - x_{n-2}}. \tag{A.7}$$

Aplicando la aproximación para $f'(x_n)$ a la Ec. (A.5) se obtiene

$$x_n = x_{n-1} - \frac{f(x_{n-1})(x_{n-1} - x_{n-2})}{f(x_{n-1}) - f(x_{n-2})}, \tag{A.8}$$

para usar la fórmula anterior, primero debemos elegir aproximaciones iniciales a la raíz.

Apéndice B

Código fuente

B.1. Programa para obtener el espectro de energías en los sistemas ordenados

```
(*
Parámetros
nd: número de potenciales delta,
intl: intensidad común de los potenciales delta,
ro : tamaño del espaciamiento en unidades de a entre las
     posiciones de los potenciales delta,
fii: extremo inicial del intervalo fi,
fif: extremo final del intervalo fi,
deltafi: tamaño de la partición en el intervalo fi,
gr: gráfica del espectro de energías,
EscNum: tamaño de la escala numerada para la gráfica del
        espectro de energías
EscNoNum: tamaño de la escala no numerada para la gráfica del
          espectro de energías
*)

(*Selecciona el directorio de los archivos de datos en el
directorio del Notebook*)
SetDirectory[NotebookDirectory[]];

FipCO[nd_, intl_, ro_,  fii_, fif_, deltafi_, gr_, EscNum_,
EscNoNum_]:= Module[{w, z, EcDisp, Mfp, pfi, pffi, pffics, fip,
CeroEcDisp, j, dR, pCerosEcDisp, ep, ep2List, ticks, g, fi},
If[gr != 0, Goto["uno"]];

(*Se define la ecuación de dispersión del sistema ordenado
con N potenciales delta encerrados dentro de la caja de paredes
```

```
infinitas*)

EcDisp[fi_, l_] := ((fi + l Sin[2 fi]) Sin[fi (1 + ro)] +
l (Cos[2 fi] - 1) Cos[fi (1 + ro)]) ChebyshevU[nd - 1,
1/fi (fi Cos[ro fi] + l Sin[ro fi])] - fi Sin[fi] ChebyshevU[nd
- 2, 1/fi (fi Cos[ro fi] + l Sin[ro fi])];

(*La siguiente función, encuentra la raíz de la ecuación de
dispersión usando dos aproximaciones iniciales*)

Mfp[f_, points_] :=
Module[{maxiter, iter, xa, xb, fa, fb, fmax, x, fx, tol},
maxiter = 100;
iter = 1;
(*Se definen las dos aproximaciones iniciales de la raíz,
en éstas, la ecuación de dispersión cambia de signo*)
xa = points[[1]];
xb = points[[2]];
(*Se evalúa la ecuación de dispersión en las aproximaciones
iniciales dadas*)
fa = f[xa];
fb = f[xb];
fmax = Max[fa, fb];
x = xb - (fb*(xb - xa))/(fb - fa);
If[fa == fb,
  Return[xb];
  ];
fx = f[x];
tol = 10.0^(-$MachinePrecision/2.0);

(*Se implementa el método de la falsa posición para encontrar
la raíz*)

While[Abs[fx/fmax] >= tol && iter <= maxiter,
      x = xb - (fb* (xb - xa))/(fb - fa);
      If[fa == fb,
         Return[x];
         Break[];
         ];

      fx = f[x];

      If[f[x]*f[xb] < 0,
         xa = x; xb = xb;
         ,
```

```
        xa = xa; xb = x;
        ];

    iter += 1;
    ];
Return[x];
];

(*Particiona el intervalo [fii, fif] en incrementos de
deltafi*)
pfi = Map[# &, Range[fii, fif, deltafi]];
(*Evalúa los puntos pfi en la ecuación de dispersión*)
pffi = Map[EcDisp[#, intl] &, pfi];
(*Encuentra pares contiguos de puntos pfi en los cuales la
ecuación de dispersión evaluada en estos dos puntos, cambia
de signo*)
pffics = {};
For[j = 1, j <= Length[pffi] - 1, j++,
   If[pffi[[j]]*pffi[[j + 1]] < 0,
     AppendTo[pffics, {pfi[[j]], pfi[[j + 1]]}]
     ];
   ];
(*Encuentra los valores de fi raíces de la ecuación de
dispersión*)
dR[k_] := EcDisp[fi, intl];
fip = {};
For[j = 1, j <= (Length[pffics]), j++,
   CeroEcDisp = Mfp[dR, {pffics[[j]][[1]], pffics[[j]][[2]]}];
   AppendTo[fip, {CeroEcDisp}];
   ];
Label["uno"];
(*Construye el nombre del archivo para guardar los valores
permitidos de fi para el caso ordenado en las intensidades
y posiciones de los potenciales delta*)
pCerosEcDisp = "fip_"<>ToString[nd]<>"d_li"<>ToString[intl]<>
"_ro"<>ToString[ro]<>".dat";
If[gr != 0, Goto["dos"]];
(*Guarda esos valores en el archivo*)
Export[pCerosEcDisp, fip];
Label["dos"];
ep = Import[pCerosEcDisp];
(*Crea una lista en dos columnas de las raíces de la ecuación
de dispersión*)
ep2List = {};
For[j = 1, j <=Length[ep], j++,
```

```
    AppendTo[ep2List, {(ep[[j]][[1]])^2, (ep[[j]][[1]])^2}]
    ];

(*En la siguiente función se definen las longitudes de las
escalas numeradas y no numeradas en la gráfica del espectro
de energías*)
ticks[min_, max_] :=
Join[Table[{i, Style[i, 14], {.065, 0}}, {i, Ceiling[min],
Floor[max], EscNum}], Table[{j + EscNoNum, , {.030, 0}},
{j, Round[min], Round[max - 1], EscNoNum}]];

(*Grafica el espectro de energías del sistema*)
g = ListPlot[ep2List, DataRange -> All, AxesOrigin -> {1, 0},
Joined -> True, Axes -> {False, True}, AxesStyle ->
{Arrowheads[.03], Arrowheads[0.09]}, PlotStyle ->
RGBColor[0, 0, 0], AxesLabel -> {"X␣value", "E"},
AspectRatio -> 3, PlotRange -> {0, Max[ep2List] +
Max[ep2List]/5}, Ticks -> ticks];

(*Devuelve en pantalla la gráfica del espectro de energías*)
Return[g];

]
```

B.2. Programa para generar números aleatorios

```
(*
Parámetros
nd: número de potenciales delta,
vl: variación aleatoria máxima de la intensidad común de los
    potenciales,
vbeta: variación aleatoria máxima de las posiciones ordenadas
       de los potenciales,
numarcgen: número de archivos a generar
*)

(*Selecciona el directorio de los archivos de datos en el
directorio del Notebook*)
SetDirectory[NotebookDirectory[]];

(*Generador de números aleatorios para las intensidades de los
potenciales delta*)

Grl[nd_, vl_, numarcgen_] := Module[{rl, arcrl, j},
```

```
    For[j = 1, j <= numarcgen, j++,
        (*Genera nd números aleatorios dentro del intervalo
        [-vl, vl]*)
        rl = Map[RandomReal[{-vl, vl}] &, Range[nd]];
        (*Crea el archivo que contendrá las variaciones
        aleatorias para las intensidades de los potenciales
        delta*)
        arcrl = ToString[nd]<>"d_rl"<>ToString[vl]<>"_arc"<>
        ToString[j]<>".dat";
        (*Guarda los nd números aleatorios en el archivo creado*)
        Export[arcrl, rl]
        ];
(*Imprime en pantalla*)
Print[‘‘En el directorio ’’<>
      ToString[SetDirectory[NotebookDirectory[]]]<>‘‘ se
      generaron ’’<>ToString[numarcgen]<>‘‘ archivos,
      conteniendo en cada archivo ’’<>ToString[nd]<>‘‘ números
      aleatorios, los cuales se encuentran dentro del
      intervalo [’’<>ToString[-vl]<>‘‘,’’<>
      ToString[vl]<>‘‘]’’
      ]
]

(*Generador de números aleatorios para las posiciones de los
potenciales delta*)

Gra[nd_, vbeta_, numarcgen_] := Module[{rbeta, arcrbeta, j},
For[j = 1, j <= numarcgen, j++,
    (*Genera nd números aleatorios dentro del intervalo
    [-vbeta, vbeta]*)
    rbeta = Map[RandomReal[{-vbeta, vbeta}] &, Range[nd]];
    (*Crea el archivo que contendrá las variaciones aleatorias
    para las posiciones de los potenciales delta*)
    arcrbeta = ToString[nd]<>"d_rbeta"<>ToString[vbeta]<>"_arc"<>
    ToString[j]<>".dat";
    (*Guarda los nd números aleatorios en el archivo creado*)
    Export[arcrbeta, rbeta];
    ];
(*Imprime en pantalla*)
Print[‘‘En el directorio ’’<>
      ToString[SetDirectory[NotebookDirectory[]]]<>‘‘ se
      generaron ’’<>ToString[numarcgen]<>‘‘ archivos,
      conteniendo en cada archivo ’’<>ToString[nd]<>‘‘ números
      aleatorios, los cuales se encuentran dentro del
      intervalo [’’<>ToString[-vbeta]<>‘‘,’’<>
```

```
        ToString[vbeta]<>``]
        ]
]
```

B.3. Programa para obtener el espectro de energías en los sistemas desordenados

```
(*
Parámetros
nd: número de potenciales delta,
intl: intensidad común de los potenciales delta,
plv: posiciones de los potenciales delta con intensidades
     distintas de intl,
intlv: intensidades de los potenciales delta situados en las
       posiciones plv,
vl: variación aleatoria máxima alrededor de la intensidad común
    intl de los potenciales delta,
sepbeta: distancia entre las posiciones beta,
pbetav: posiciones de los potenciales delta desordenados,
vbeta: variación aleatoria máxima alrededor de las posiciones
       periódicas de los potenciales delta,
arci: archivo inicial,
arcf: archivo final,
fii: extremo inicial del intervalo fi,
fif: extremo final del intervalo fi,
deltafi: tamaño de la partición en el intervalo fi,
gfi: gráfica del espectro de energías y de la desviación
     estándar,
nb: número de bandas del espectro de energías a graficar,
EscNum: tamaño de la escala numerada para la gráfica del
        espectro de energías,
EscNoNum: tamaño de la escala no numerada para la gráfica del
          espectro de energías
*)

(*Selecciona el directorio de los archivos de datos en el
directorio del Notebook*)
SetDirectory[NotebookDirectory[]];

FipCD[nd_, intl_, plv_, intlv_, vl_, sepbeta_, pbetav_, vbeta_,
arci_, arcf_, fii_, fif_, deltafi_, gfi_, nb_, EscNum_,
EscNoNum_] :=
Module[{l, beta, i, j, fip, s, MatrizTransferencia, DispRelA,
```

```
Matx, pfi, pffi, pffics, dR, zero, arcfip, arcrl, readrl,
arcrbeta, readrbeta, temp1, temp11, temp111, temp2, temp22,
temp222, fib, ep, Mfp, m, epp1List, epp2List, vare, fipp, epp,
varianza, arcep, varer},

(*La siguiente función, encuentra la raíz de la ecuación de
dispersión usando dos aproximaciones iniciales*)
Mfp[f_, points_] :=
Module[{maxiter, iter, xa, xb, fa, fb, fmax, x, fx, tol},
maxiter = 100;
iter = 1;
(*Se definen las dos aproximaciones iniciales de la raíz,
en éstas, la ecuación de dispersión cambia de signo*)
xa = points[[1]];
xb = points[[2]];
(*Se evalúa la ecuación de dispersión en las dos aproximaciones
iniciales dadas*)
fa = f[xa];
fb = f[xb];
fmax = Max[fa, fb];
x = xb - (fb*(xb - xa))/(fb - fa);
If[fa == fb,
  Return[xb]
  ];
fx = f[x];
tol = 10.0^(-$MachinePrecision/2.0);

(*Se implementa el método de la falsa posición para encontrar
la raíz*)

While[Abs[fx/fmax] >= tol && iter <= maxiter,
      x = xb - (fb* (xb - xa))/(fb - fa);
      If[fa == fb,
        Return[x];
        Break[]
        ];

      fx = f[x];

      If[f[x]*f[xb] < 0,
        xa = x; xb = xb;
        ,
        xa = xa; xb = x;
        ];

```

```
      iter += 1;
      ];
Return[x];
];

If[arci == arcf == 0, s = 1];
If[arci != 0 && arcf != 0, s = 0];

If[fii == 0, fib = deltafi];
If[fii != 0, fib = 0];

For[i = arci + s, i <= arcf + s, i++,
   If[gfi != 0, Goto[grap]];
   (*Se eligen las intensidades de los potenciales delta*)
   l = Range[nd];
   If[vl == 0, Goto[uno]];
   (*Construye el nombre del archivo que contiene las
   variaciones aleatorias para las intensidades de los
   potenciales delta*)
   arcrl = ToString[nd]<>"d_rl"<>ToString[vl]<>"_arc"<>
   ToString[i]<>".dat";
   (*Importa a este programa el contenido del archivo*)
   readrl = Import[arcrl];
   (*En el caso con desorden aleatorio en las intensidades de
   los potenciales delta, fija la intensidad total de cada
   potencial delta*)
   For[j = 1, j <= nd, j++,
      l[[j]] = intl + readrl[[j]][[1]];
      ];
   Goto[dos];
   Label[uno];
   (*En el caso ordenado en las intensidades de los potenciales
   delta, fija la intensidad común de todos estos potenciales*)
   For[j = 1, j <= nd, j++,
      l[[j]] = intl
      ];
   (*En el caso con desorden parcial en las intensidades de los
   potenciales delta, fija las intensidades de los potenciales
   distintas a las del resto*)
   If[plv == intlv == 0, Goto[dos]];
   For[j = 1, j <= Length[intlv], j++,
      l[[plv[[j]]]] = intlv[[j]];
      ];
   (*Se eligen las posiciones de los potenciales delta*)
   Label[dos];
```

```
beta = Range[nd + 1];
If[vbeta == 0, Goto[tres] ];
(*Construye el nombre del archivo que contiene las
variaciones aleatorias para las posiciones de los
potenciales delta*)
arcrbeta = ToString[nd]<>"d_rbeta"<>ToString[vbeta]<>"_arc"
<>ToString[i]<>".dat";
(*Importa a este programa el contenido del archivo*)
readrbeta = Import[arcrbeta];
(*En el caso con desorden aleatorio en las posiciones de los
potenciales delta, fija la posición aleatoria de cada
potencial delta*)
For[j = 1, j <= nd, j += sepbeta,
    beta[[j]] = j + readrbeta[[j]][[1]];
    ];
Goto[cuatro];
Label[tres];
(*En el caso ordenado en las posiciones de los potenciales
delta, fija las posiciones ordenadas de potenciales*)
For[j = 1, j <= nd, j += sepbeta,
    beta[[j]] = j;
    ];
If[pbetav == 0, Goto[cuatro]];
(*En el caso con desorden parcial en las posiciones de los
potenciales delta, fija las posiciones desordenadas de estos
potenciales*)
For[j = 1, j <= Length[pbetav], j++,
    beta[[Round[pbetav[[j]]]]] = pbetav[[j]];
    ];
Label[cuatro];
beta[[nd + 1]] = nd + 1;
(*Se define la matriz de transferencia para el potencial
delta en la posición beta[m]*)
MatrizTransferencia[fi_, l_, beta_, m_] :=
1/fi {{fi + I l[[m]], I l[[m]] Exp(-2 I beta[[m]] fi)},
{-I l[[m]] Exp(2 I beta[[m]] fi), fi - I l[[m]]}};
(*La siguiente función devuelve el valor de la ecuación de
dispersión al darle un valor específico de fi*)
DispRelA[fi_] :=
(
Matx = IdentityMatrix[2];
For[m = 1, m <= nd, m++,
    Matx = Matx.MatrizTransferencia[fi, l, beta, m]
    ];
(*Se define la ecuación de dispersión del sistema con N
```

```
    potenciales deltas dentro de la caja de paredes infinitas*)
    Return[(Re[Matx[[1, 1]]] + Re[Matx[[1, 2]]]) Sin[beta[[nd +
    1]] fi] + (Im[Matx[[1, 2]]] - Im[Matx[[1, 1]]]) Cos[beta[[nd
    + 1]] fi]];
    );
    (*Particiona el intervalo [fii, fif] en incrementos de
    deltafi*)
    pfi = Map[# &, Range[fii + fib, fif, deltafi]];
    (*Evalúa los puntos pfi en la ecuación de dispersión*)
    pffi = Map[DispRelA[#] &, pfi];
    (*Encuentra pares contiguos de pfi en los cuales la ecuación
    de dispersión evaluada en estos dos puntos, cambia de
    signo*)
    pffics = {};
    For[j = 1, j <= Length[pffi] - 1, j++,
        If[pffi[[j]]*pffi[[j + 1]] < 0,
          AppendTo[pffics, {pfi[[j]], pfi[[j + 1]]}];
          ];
        ];
    (*Encuentra los valores de fi raíces de la ecuación de
    dispersión*)
    dR[fi_] := DispRelA[fi];
    fip = {};
    For[j = 1, j <= (Length[pffics]), j++,
        (*Se usa el método de la falsa posición para encontrar la
        raíz dentro intervalo cuyos extremos son el par contiguo
        de pfi*)
        zero = Mfp[dR, {pffics[[j]][[1]], pffics[[j]][[2]]}];
        AppendTo[fip, {zero}];
        ];
    Print[fip];
    If[vl == 0 && vbeta == 0, Goto[cinco]];
    (*Construye el nombre del archivo que contendrá los valores
    permitidos de fi para el caso con desorden aleatorio en las
    intensidades y/o posiciones de los potenciales delta*)
    arcfip = "fip_"<>ToString[nd]<>"d_li"<>ToString[intl]<>"r"<>
    ToString[vl]<>"_sbeta"<>ToString[sepbeta]<>"r"<>
    ToString[vbeta]<>"_arc"<>ToString[i]<>".dat";
    (*Guarda esos valores en el archivo*)
    Export[arcfip, fip];
    Goto[f1];
    Label[cinco];
    If[plv == 0 && pbetav == 0, Goto[seis]];
    (*Construye fragmentos del nombre del archivo que contendrá
    los valores permitidos de fi para el caso con desorden
```

```
    parcial en las intensidades y/o posiciones de los potenciales
    delta*)
    temp11 = {};
    For[j = 1, j <= Length[intlv], j++,
        temp1 = "lp"<>ToString[plv[[j]]]<>"_i"<>
        ToString[intlv[[j]]]<>"_";
        AppendTo[temp11, temp1];
        ];
        temp111 = StringJoin[temp11];
        temp22 = {};
        For[j = 1, j <= Length[pbetav], j++,
            temp2 = "_betap"<>ToString[pbetav[[j]]];
            AppendTo[temp22, temp2];
            ];
        temp222 = StringJoin[temp22];
    (*Construye el nombre completo del archivo que contendrá los
    valores de fi permitidos para el caso con desorden parcial
    en las intensidades y/o posiciones de los potenciales
    delta*)
    arcfip = "fip_"<>ToString[nd]<>"d_li"<>ToString[intl]<>"_"<>
    ToString[temp111]<>"sbeta"<>ToString[sepbeta]<>
    ToString[temp222]<>".dat";
    (*Guarda esos valores en el archivo*)
    Export[arcfip, fip];
    Goto[f1];
    Label[seis];
    (*Construye el nombre del archivo que contendrá los valores
    permitidos de fi para el caso ordenado en las intensidades
    y las posiciones de los potenciales delta*)
    arcfip = "fip_"<>ToString[nd]<>"d_li"<>ToString[intl]<>
    "_sbeta"<>ToString[sepbeta]<>".dat";
    (*Guarda esos valores en el archivo*)


    Export[arcfip, fip];
    Label[f1];
    ];

Label[grap];

If[plv == intlv == vl == pbetav == vbeta == arci == arcf == 0,
  Goto[siete]];
If[arci != 0 && arcf != 0, Goto[ocho]];

(*Construye fragmentos del nombre del archivo que contiene los
```

```
valores permitidos de fi para el caso con desorden parcial en
las intensidades y/o posiciones de los
potenciales delta*)
temp11 = {};
For[j = 1, j <= Length[intlv], j++,
    temp1 = "lp"<>ToString[plv[[j]]]<>"_i"<>
    ToString[intlv[[j]]]<>"_";
    AppendTo[temp11, temp1];
    ];
temp111 = StringJoin[temp11];
temp22 = {};
For[j = 1, j <= Length[pbetav], j++,
    temp2 = "_betap"<>ToString[pbetav[[j]]];
    AppendTo[temp22, temp2];
    ];
temp222 = StringJoin[temp22];
(*Construye el nombre completo del archivo que contiene los
valores de fi permitidos para el caso con desorden parcial
en las intensidades y/o posiciones de los potenciales delta*)
arcfip = "fip_"<>ToString[nd]<>"d_li"<>ToString[intl]<>"_"<>
ToString[temp111]<>"sbeta"<>ToString[sepbeta]<>
ToString[temp222] <> ".dat";
(*Importa a este programa el contenido del archivo*)
fip = Import[arcfip];
Goto[nueve];

Label[siete];
 (*Construye el nombre del archivo que contiene los valores
permitidos de fi para el caso ordenado en las intensidades y
las posiciones de los potenciales delta*)
arcfip = "fip_"<>ToString[nd]<>"d_li"<>ToString[intl]<>
"_sbeta"<>ToString[sepbeta]<>".dat";
(*Importa a este programa el contenido del archivo*)
fip = Import[arcfip];
Goto[nueve];
Label[ocho];
For[i = arci, i <= arcf, i++,
    (*Construye el nombre del archivo que contiene los valores
    permitidos de fi para el caso con desorden aleatorio en las
    intensidades y/o posiciones de los potenciales delta*)
    arcfip[i_] := "fip_"<>ToString[nd]<>"d_li"<>ToString[intl]<>
    "r"<>ToString[vl]<>"_sbeta"<>ToString[sepbeta]<>"r"<>
    ToString[vbeta]<>"_arc"<>ToString[i]<>".dat";
    (*Importa a este programa el contenido del archivo*)
    fip[i] = Import[arcfip[i]];
```

```
    ];
epp1List = {};
vare = {};
(*Para el caso de un sistema con varias configuraciones
distintas, se obtiene el promedio y la desviación estándar de
cada nivel de energía*)
For[j = 1, j <= nd*nb + nb, j++,
    fipp = (Sum[fip[i][[j]], {i=arci, arcf}])/(arcf-arci+1);
    epp = ( fipp)^2;
    varianza =
    Sqrt[(Sum[((fip[i][[j]])^2 - epp)^2, {i=arci, arcf}])/(arcf
    - arci + 1)];
    AppendTo[epp1List, epp];
    AppendTo[vare, varianza[[1]]]
    ];

(*Construye el nombre del archivo que contendrá los promedios
de los niveles de energía permitidos de fi, para el caso con
desorden aleatorio en las intensidades y/o posiciones de los
potenciales delta*)
arcep = "epp_"<>ToString[nd]<>"d_li"<>ToString[intl]<>"r"<>
ToString[vl]<>"_sbeta"<>ToString[sepbeta]<>"r"<>
ToString[vbeta]<>"_"<>ToString[arcf]<>"arc.dat";
(*Guarda esos valores en el archivo*)
Export[arcep, epp1List];
(*Construye el nombre del archivo que contendrá la desviación
estándar de los niveles de energía permitidos de fi, para el
caso con desorden aleatorio en las intensidades y/o posiciones
de los potenciales delta*)
varer = "vare_"<>ToString[nd]<>"d_li"<>ToString[intl]<>"r"<>
ToString[vl]<>"_sbeta"<>ToString[sepbeta]<>"r"<>
ToString[vbeta]<>"_"<>ToString[arcf]<>"arc.dat";
(*Guarda esos valores en el archivo*)
Export[varer, vare];
(*Crea una lista en dos columnas de los niveles de energía
permitidos de fi*)
epp2List = {};
For[i = 1, i <= nd*nb + nb, i++,
    AppendTo[epp2List, {epp1List[[i]][[1]],
    epp1List[[i]][[1]]}];
    ];
(*Grafica la desviación estándar de cada nivel de energía en
función de n, el número cuántico principal*)
h = ListPlot[vare, Filling -> Axis,
AxesStyle -> {Arrowheads[.03], Arrowheads[0.03]},
```

```
PlotStyle -> RGBColor[0, 0, 0], AxesLabel -> {"n",
"\[Sigma]E"}, PlotRange -> {{0, nd*nb + nb + 2},
{0, Max[vare] + Max[vare]/4}}, AspectRatio -> .35];

Print[h];

Goto[diez];

Label[nueve];
(*Crea una lista en dos columnas de los niveles de energía
permitidos de fi*)
epp2List = {};
ep = (fip)^2;
For[i = 1, i <= nd*nb + nb, i++,
    AppendTo[epp2List, {ep[[i]][[1]], ep[[i]][[1]]}]
    ];

Label[diez];
(*En la siguiente función se definen las longitudes de las
escalas numeradas y no numeradas en la gráfica del espectro
de energías*)
ticks[min_, max_] :=
Join[Table[{i, Style[i, 14], {.065, 0}}, {i, Ceiling[min],
Floor[max], EscNum}], Table[{j + EscNoNum, , {.030, 0}},
{j, Round[min], Round[max - 1], EscNoNum}]];

(*Grafica el espectro de energías del sistema*)
g = ListPlot[epp2List, DataRange -> All, AxesOrigin -> {1, 0},
Joined -> True, Axes -> {False, True}, AxesStyle ->
{Arrowheads[.03], Arrowheads[0.09]}, PlotStyle ->
RGBColor[0, 0, 0], AxesLabel -> {"X value", "E"},
AspectRatio -> 3, PlotRange -> {0, Max[epp2List] +
Max[epp2List]/5}, Ticks -> ticks];
(*Devuelve en pantalla la gráfica del espectro de energías*)
Return[g];

]
```

B.4. Programa para graficar $|\psi(\tau)|^2$ en función de τ

```
(*
Parámetros
nd: número de potenciales delta,
intl: intensidad común de los potenciales delta,
```

```
plv: posiciones de los potenciales delta con intensidades
     distintas de intl,
intlv: intensidades de los potenciales delta situados en las
       posiciones plv,
vl: variación aleatoria máxima alrededor de la intensidad común
    intl de los potenciales delta,
sepbeta: distancia entre las posiciones beta,
pbetav: posiciones de los potenciales delta desordenados,
vbeta: variación aleatoria máxima alrededor de las posiciones
       periódicas de los potenciales delta,
arcnum: número de archivo con niveles de energías permitidos,
nfip: número de nivel de energía permitido,
deltatau: tamaño de la partición en el intervalo tau,
g: gráfica de Ln(|AmpProb[tau]|)
*)

(*Selecciona el directorio del archivo de datos en el
directorio del Notebook*)
SetDirectory[NotebookDirectory[]];

Gmodcuadpsivstau[nd_, intl_, plv_, intlv_, vl_, sepbeta_,
pbetav_, vbeta_, arcnum_, nfip_, deltatau_, g_]:= Module[{l,
beta, MatTransf, Mat, j, ConjMatTransf, arcrl, arcrbeta,
readrl, readrbeta, M11, M12, M21, M22, CoefA, CoefB, wavePsi,
prodMatrixTransf, psiGenerator, psiPart, psiFunc, AmpProb,
arcfip, fip, fips, fips1, temp1, temp11, temp111, temp2,
temp22, temp222, temp3, temp33, temp333, temp4, temp44,
temp444, temp5, temp55, temp555, temp6, temp66, temp666,
arcpmodcuadpsi, modcuadpsiimp, ptau, tauimp, pAmpProb, i,
arctau, pmodcuadpsi, gmodcuadpsi},

If[g != 0, Goto[grap]];

(*Se eligen las intensidades de los potenciales delta*)
l = Range[nd];
If[vl==0,Goto[uno]];
(*Construye el nombre del archivo que contiene las variaciones
aleatorias para las intensidades de los potenciales delta*)
arcrl = ToString[nd]<>"d_rl"<>ToString[vl]<>"_arc"
<>ToString[arcnum]<>".dat";
(*Importa a este programa el contenido del archivo*)
readrl=Import[arcrl];
(*En el caso con desorden aleatorio de las intensidades de los
potenciales delta, fija la intensidad total de cada potencial
delta*)
```

```
For[j=1, j<=nd, j++,
    l[[j]]=intl+readrl[[j]][[1]];
    ];
Goto[dos];
Label[uno];
(*En el caso ordenado en las intensidades de los potenciales
delta, fija la intensidad común de todos estos potenciales*)
For[j = 1, j <= nd, j++,
    l[[j]] = intl
    ];
(*En el caso con desorden parcial en las intensidades de los
potenciales delta, fija las intensidades de los potenciales
distintas a las del resto*)
If[plv == intlv == 0, Goto[dos]];
For[j = 1, j <= Length[intlv], j++,
    l[[plv[[j]]]] = intlv[[j]];
    ];

(*Se eligen las posiciones de los potenciales delta*)
Label[dos];
beta = Range[nd + 1];
If[vbeta == 0, Goto[tres] ];
(*Construye el nombre del archivo que contiene las variaciones
aleatorias para las posiciones de los potenciales delta*)
arcrbeta = ToString[nd]<>"d_rbeta"<>ToString[vbeta]<>"_arc"
<>ToString[arcnum]<>".dat";
(*Importa a este programa el contenido del archivo*)
readrbeta = Import[arcrbeta];
(*En el caso con desorden aleatorio en las posiciones de los
potenciales delta, fija la posición aleatoria de cada potencial
delta*)
For[j = 1, j <= nd, j += sepbeta,
    beta[[j]] = j + readrbeta[[j]][[1]];
    ];
Goto[cuatro];
Label[tres];
(*En el caso ordenado en las posiciones de los potenciales
delta, fija las posiciones ordenadas de potenciales*)
For[j = 1, j <= nd, j += sepbeta,
    beta[[j]] = j;
    ];
If[pbetav == 0, Goto[cuatro]];
(*En el caso con desorden parcial en las posiciones de los
potenciales delta, fija las posiciones desordenadas de estos
potenciales*)
```

```
For[j = 1, j <= Length[pbetav], j++,
    beta[[Round[pbetav[[j]]]]] = pbetav[[j]];
    ];
Label[cuatro];
beta[[nd + 1]] = nd + 1;

If[vl == 0 && vbeta == 0, Goto[cinco]];
(*Construye el nombre del archivo que contiene los valores
permitidos de fi para el caso con desorden aleatorio en las
intensidades y/o posiciones de los potenciales delta*)
arcfip = "fip_"<>ToString[nd]<>"d_li"<>ToString[intl]<>"r"<>
ToString[vl]<>"_sbeta"<>ToString[sepbeta]<>"r"<>
ToString[vbeta]<>"_arc"<>ToString[arcnum]<>".dat";
(*Importa a este programa el contenido del archivo*)
fip = Import[arcfip];
Goto[siete];
Label[cinco];
If[plv == 0  && pbetav == 0, Goto[seis]];
(*Construye fragmentos del nombre del archivo que contiene los
valores permitidos de fi para el caso con desorden parcial en
las intensidades y/o posiciones de los potenciales delta*)
temp11 = {};
For[j = 1, j <= Length[intlv], j++,
    temp1 = "lp"<>ToString[plv[[j]]]<>"_i"<>ToString[intlv[[j]]]
    <>"_";
    AppendTo[temp11, temp1];
    ];
temp111 = StringJoin[temp11];
temp22 = {};
For[j = 1, j <= Length[pbetav], j++,
    temp2 = "_ap"<>ToString[pbetav[[j]]];
    AppendTo[temp22, temp2];
    ];
temp222 = StringJoin[temp22];
(*Construye el nombre completo del archivo que contiene los
valores permitidos de fi para el caso con desorden parcial en
las intensidades y/o posiciones de los potenciales delta*)
arcfip = "fip_"<>ToString[nd]<>"d_li"<>ToString[intl]<>"_"<>
ToString[temp111]<>"sbeta"<>ToString[sepbeta]
<>ToString[temp222]<>".dat";
fip = Import[arcfip];
Goto[siete];
Label[seis];
(*Construye el nombre del archivo que contiene los valores
permitidos de fi para el caso ordenado en las intensidades y
```

```
las posiciones de los potenciales delta*)
arcfip = "fip_"<>ToString[nd]<>"d_li"<>ToString[intl]<>"_sbeta"
<>ToString[sepbeta]<>".dat";
(*Importa a este programa el contenido del archivo*)
fip = Import[arcfip];
Label[siete];

(*Se imprimen en pantalla los valores permitidos de fi para el
sistema elegido*)
Print[fip];

(*Permite elegir un valor permitido de fi, para
sustituirlo en la matriz de transferencia*)
fips1 = {};
For[j = 1, j <= nfip, j++,
    fips = fip[[j]][[1]];
    AppendTo[fips1, fips];
    ];

(*Se define la matriz de transferencia para el potencial delta
en la posición beta[n]*)
MatTransf[fi_, n_] :=
1/fi {{fi + I l[[n]], I l[[n]] Exp(-2 I beta[[n]] fi)},
{- I l[[n]] Exp(2 I beta[[n]] fi), fi - I l[[n]]}};

ConjMatTransf = Range[nd];
(*Se define una matriz identidad de 2x2*)
Mat = IdentityMatrix[2];
(*Realiza el producto de las matrices de transferencia
comenzando de derecha a izquierda del sistema, en este proceso
se obtienen nd matrices, siendo la primera matriz simplemente
MatTransf[fips1[[nfip]], nd], la segunda matriz el producto
de MatTransf[fips1[[nfip]],nd].MatTransf[fips1[[nfip]], nd-1],
así sucesivamente, la última matriz es el producto de
MatTransf[sp, nd].MatTransf[sp, nd-1]...MatTransf[sp, 1], donde
sp = fips1[[nfip]] *)
For[j = nd, j >= 1, j--,
    Mat = MatTransf[fips1[[nfip]], j].Mat;
    ConjMatTransf[[j]] = Mat;
    ];
(*Se definen listas con nd elementos, éstos se reemplazarán por
los elementos de las matrices productos de las matrices de
transferencia*)
M11 = Range[nd];
M12 = Range[nd];
```

```
M21 = Range[nd];
M22 = Range[nd];
(*Se definen listas con nd + 1 elementos que se reemplazarán
por los valores de los coeficientes de las funciones de onda*)
CoefA = Range[nd + 1];
CoefB = Range[nd + 1];

(*Se asignan los valores de los elementos de las matrices que
resultan al multiplicar las matrices de transferencia*)
For[j = nd, j >= 1, j--,
    {{M11[[j]], M12[[j]]}, {M21[[j]], M22[[j]]}} =
    ConjMatTransf[[j]];
    ];

(*Se asignan los valores de los coeficientes de las funciones
de onda*)
For[j = 1,  j <= nd, j++,
    CoefA[[j]] = (M11[[j]])*(1) -
    (M12[[j]])*Exp(2 I fips1[[nfip]] beta[[nd + 1]])
    ];
CoefB[[1]] = -CoefA[[1]];
For[j = 2,  j <= nd, j++,
    CoefB[[j]] = (M21[[j]])*(1) -
    (M22[[j]])*Exp(2 I fips1[[nfip]] beta[[nd + 1]])
    ];

(*Se asignan los valores de los coeficientes de última
función de onda, la definida en el intervalo
beta[[nd]]<tau<beta[[nd+1]], nótese que se ha normalizado
el coeficiente A[[nd+1]]*)
CoefA[[nd + 1]] = 1;
CoefB[[nd + 1]] = -Exp(2 I fips1[[nfip]] beta[[nd + 1]]);

(*
La siguiente función asigna los valores numéricos de los
coeficientes de la función de onda definida en el intervalo
beta[[n]]<tau<beta[[n+1]], dejándola expresada sólo en función
de la posición tau*)
psiPart[tau_, l_] :=
(
If[l > 1,
          If[tau < beta[[l - 1]] || beta[[l]] <= tau,
            wavePsi = 0.;
            ,
            (*else*)
```

```
            wavePsi = ((CoefA[[l]])*Exp(I fips1[[nfip]] tau) +
                      (CoefB[[l]])*Exp(-I fips1[[nfip]] tau ));
            ];
            ,
            (*else*)
          If[tau < 0 || beta[[1]] <= tau,
            wavePsi = 0.;
            ,
            wavePsi = ((CoefA[[l]])*Exp(I fips1[[nfip]] tau) +
                      (CoefB[[l]])*Exp(-I fips1[[nfip]] tau));
            ];
    ];
Return[wavePsi];
);

(*La siguiente función regresa el valor numérico de la función
para cualquier valor de tau dentro de la caja de parede
infinitas*)
psiFunc[tau_] := Sum[psiPart[tau, j], {j, 1, (nd+1)}];

(*Se define la amplitud de probabilidad de la función de onda
en función de la posición tau*)
AmpProb[tau_] := psiFunc[tau]*Conjugate[psiFunc[tau]];

(*Se generan las particiones de tau *)
ptau = Table[i, {i, 0, nd + 1, deltatau}];
(*Construye el nombre del archivo para guardar las particiones
de tau*)
arctau = "ptau_"<>ToString[nd]<>"d_nfip"<>ToString[nfip]<>
"_incr"<>ToString[deltatau] <> ".dat";
(*Guarda en el archivo las particiones de tau*)
Export[arctau, ptau];
(*Se obtiene el logaritmo natural de la función AmpProb[tau]
para el intervalo [0, nd+1]*)
pAmpProb =
Table[Re[Log[AmpProb[tau]]], {tau, 0, nd + 1, deltatau}];

If[vl == 0 && vbeta == 0, Goto[ocho]];

(*Construye el nombre del archivo para guardar los valores del
logaritmo natural de la función AmpProb[tau] para el caso con
desorden aleatorio en las intensidades y/o posiciones de los
potenciales delta*)
arcpmodcuadpsi = "psimodcuad_"<>ToString[nd]<>"d_li"<>
ToString[intl]<>"r"<>ToString[vl]<>"_sbeta"<>
```

```
ToString[sepbeta]<>"r"<>ToString[vbeta]<>"_nfip"<>
ToString[nfip]<>"_deltatau"<>ToString[deltatau]<>
"_arc"<> ToString[arcnum]<>".dat";
(*Guarda en el archivo los valores de AmpProb[tau]*)
Export[arcpmodcuadpsi, pAmpProb];
Goto[qq1];

Label[ocho];
If[plv == 0  && pbetav == 0, Goto[nueve]];
(*Construye fragmentos del nombre del archivo para guardar los
valores del logaritmo natural de la función AmpProb[tau] para
el caso con desorden parcial en las intensidades y/o posiciones
de los potenciales delta*)
temp3 = {};
For[j = 1, j <= Length[intlv], j++,
    temp33 = "lp"<>ToString[plv[[j]]]<>"_i"<>
    ToString[intlv[[j]]]<>"_";
    AppendTo[temp3, temp33];
    ];
temp333 = StringJoin[temp3];
temp4 = {};
For[j = 1, j <= Length[pbetav], j++,
    temp44 = "_betap"<>ToString[pbetav[[j]]];
    AppendTo[temp4, temp44];
    ];
temp444 = StringJoin[temp4];
(*Construye el nombre completo del archivo para guardar los
valores del logaritmo natural de la función AmpProb[tau] para
el caso con desorden parcial en las intensidades y/o posiciones
de los potenciales delta*)
arcpmodcuadpsi = "pmodcuadpsi_"<>ToString[nd]<>"d_li"<>
ToString[intl]<>"_"<>ToString[temp333]<>"sbeta"<>
ToString[sepbeta]<>ToString[temp444]<>"_nfip"<>ToString[nfip]<>
"_deltatau"<>ToString[deltatau]<>".dat";
(*Guarda en el archivo los valores de AmpProb[tau]*)
Export[arcpmodcuadpsi, pAmpProb];
Goto[qq1];

Label[nueve];
(*Construye el nombre del archivo para guardar los valores del
logaritmo natural de la función AmpProb[tau]para el caso
ordenado en las intensidades y las posiciones de los
potenciales delta*)
arcpmodcuadpsi = "pmodcuadpsi_"<>ToString[nd]<>"d_li"<>
ToString[intl]<>"_sbeta"<>ToString[sepbeta]<>"_nfip"<>
```

```
ToString[nfip]<>"_deltatau"<> ToString[deltatau]<>".dat";
(*Guarda en el archivo los valores de AmpProb[tau]*)
Export[arcpmodcuadpsi, pAmpProb];

Label[qq1];

Label[grap];
(*Construye el nombre del archivo que contiene las particiones
de tau*)
arctau = "ptau_"<>ToString[nd]<>"d_nfip"<>ToString[nfip]<>
"_incr"<>ToString[deltatau]<>".dat";
(*Importa a este programa el contenido del archivo*)
tauimp = Import[arctau];

pmodcuadpsi = {};
If[vl == 0 && vbeta == 0, Goto[diez]];

(*Construye el nombre del archivo que contiene los valores del
logaritmo natural de la función AmpProb[tau]para el caso con
desorden aleatorio en las intensidades y/o posiciones de los
potenciales delta*)
arcpmodcuadpsi = "psimodcuad_"<>ToString[nd]<>"d_li"<>
ToString[intl]<>"r"<>ToString[vl]<>"_sbeta"<>
ToString[sepbeta]<>"r"<>ToString[vbeta]<>"_nfip"<>
ToString[nfip]<>"_deltatau"<>ToString[deltatau]<>
"_arc"<> ToString[arcnum]<>".dat";
(*Importa a este programa el contenido del archivo*)
modcuadpsiimp = Import[arcpmodcuadpsi];

Goto[qq2];

Label[diez];
If[plv == 0  && pbetav == 0, Goto[once]];

(*Construye fragmentos del nombre del archivo que contiene los
valores del logaritmo natural de la función AmpProb[tau] para
el caso con desorden parcial en las intensidades y/o posiciones
de los potenciales delta*)
temp5 = {};
For[j = 1, j <= Length[intlv], j++,
    temp55 = "lp"<>ToString[plv[[j]]]<>"_i"<>
    ToString[intlv[[j]]]<>"_";
    AppendTo[temp5, temp55];
    ];
temp555 = StringJoin[temp5];
```

```
temp6 = {};
For[j = 1, j <= Length[pbetav], j++,
    temp66 = "_betap" <> ToString[pbetav[[j]]];
    AppendTo[temp6, temp66];
    ];
temp666 = StringJoin[temp6];
(*Construye el nombre completo del archivo que contiene los
valores del logaritmo natural de la función AmpProb[tau] para
el caso con desorden parcial en las intensidades y/o posiciones
de los potenciales delta*)
arcpmodcuadpsi = "pmodcuadpsi_"<>ToString[nd]<>"d_li"<>
ToString[intl]<>"_"<>ToString[temp555]<>"sbeta"<>
ToString[sepbeta]<>ToString[temp666]<>"_nfip"<>
ToString[nfip]<>"_deltatau"<>ToString[deltatau]<>".dat";
(*Importa a este programa el contenido del archivo*)
modcuadpsiimp = Import[arcpmodcuadpsi];

Goto[qq2];

Label[once];
(*Construye el nombre del archivo que contiene los valores del
logaritmo natural de la función AmpProb[tau]para el caso
ordenado en las intensidades y las posiciones de los
potenciales delta*)
arcpmodcuadpsi = "pmodcuadpsi_"<>ToString[nd]<>"d_li"<>
ToString[intl]<>"_sbeta"<>ToString[sepbeta]<>"_nfip"<>
ToString[nfip]<>"_deltatau"<> ToString[deltatau]<>".dat";
(*Importa a este programa el contenido del archivo*)
modcuadpsiimp = Import[arcpmodcuadpsi];

Label[qq2];

(*Guarda en pmodcuadpsi los pares (tau, Ln[AmpProb[tau]]) para
graficarlos*)
For[j = 2, j <= Length[tauimp] - 1, j++,
    AppendTo[pmodcuadpsi, {tauimp[[j]][[1]],
    modcuadpsiimp[[j]][[1]]}];
    ];
(*Grafica los pares (tau, Ln[AmpProb[tau]]) definiendo también
el estilo de la gráfica*)
gmodcuadpsi = ListPlot[{pmodcuadpsi}, Joined -> True,
AxesLabel -> {"tau", "Ln(AmpProb[tau])"},
TicksStyle -> Directive[12], AxesStyle ->
{Arrowheads[.020], Arrowheads[0.020]}];

```

```
(*Devuelve la función principal la gráfica de
Ln[AmpProb[tau]]*)
Return[{gmodcuadpsi}];
]
```

B.5. Programa para graficar $|T|^2$, $|R|^2$ y $|T|^2 + |R|^2$ en función de ϕ

```
(*
Parámetros
nd: número de potenciales delta,
intl: intensidad común de los potenciales delta,
plv: posiciones de los potenciales delta con intensidades
     distintas de intl,
intlv: intensidades de los potenciales delta situados en las
       posiciones plv,
vl: variación aleatoria máxima alrededor de la intensidad común
    intl de los potenciales delta,
sepbeta: distancia entre las posiciones beta,
pbetav: posiciones de los potenciales delta desordenados,
vbeta: variación aleatoria máxima alrededor de las posiciones
       periódicas de los potenciales delta,
fii: extremo inicial del intervalo fi,
fif: extremo final del intervalo fi,
deltafi: tamaño de la partición en el intervalo fi,
arcnum: número de archivo que contiene variaciones aleatorias
        en las intensidades o posiciones de los potenciales
        delta,
g: gráfica del espectro de energías y de la desviación
   estándar
*)

MatrixTransfT[nd_, intl_, plv_, intlv_, vl_, sepbeta_,
pbetav_, vbeta_, fii_, fif_, deltafi_, arcnum_, g_] :=
Module[{MatTransf, ProdMatTransf, tNum, rNum, n, h, fiValores,
fiCantidadValores, tValores, rValores, gt, gr, gtr, fi,
MatTot, fib, s, l, arcrl, readrl, beta, arcrbeta, readrbeta,
i, j, temp1, temp11, temp111, temp2, temp22, temp222, temp3,
temp33, temp333, temp4, temp44, temp444, t, r, tr, pfit, ppt,
ppr, pptr, arcfi, arct, arcr, arctr, arctp, arcrp, arctrp,
fiimp, timp, rimp, trimp, tabsValores, rabsValores,
trabsValores, pfiabst, pfiabsr, pficuadabstr},

```

```
If[fii == 0, fib = deltafi];
If[fii != 0, fib = 0];

If[g != 0, Goto[grap]];

(*Se eligen las intensidades de los potenciales delta*)
l = Range[nd];
If[vl==0,Goto[uno]];
(*Construye el nombre del archivo que contiene las variaciones
aleatorias para las intensidades de los potenciales delta*)
arcrl = ToString[nd]<>"d_rl"<>ToString[vl]<>"_arc"
<>ToString[arcnum]<>".dat";
(*Importa a este programa el contenido del archivo*)
readrl=Import[arcrl];
(*En el caso con desorden aleatorio en las intensidades de los
potenciales delta, fija la intensidad total de cada potencial
delta*)
For[j=1, j<=nd, j++,
    l[[j]]=intl+readrl[[j]][[1]];
    ];
Goto[dos];
Label[uno];
(*En el caso ordenado en las intensidades de los potenciales
delta, fija la intensidad común de todos estos potenciales*)
For[j = 1, j <= nd, j++,
    l[[j]] = intl
    ];
(*En el caso con desorden parcial en las intensidades de los
potenciales delta, fija las intensidades de los potenciales
distintas a las del resto*)
If[plv == intlv == 0, Goto[dos]];
For[j = 1, j <= Length[intlv], j++,
    l[[plv[[j]]]] = intlv[[j]];
    ];

(*Se eligen las posiciones de los potenciales delta*)
Label[dos];
beta = Range[nd + 1];
If[vbeta == 0, Goto[tres] ];
(*Construye el nombre del archivo que contiene las variaciones
aleatorias para las posiciones de los potenciales delta*)
arcrbeta = ToString[nd]<>"d_rbeta"<>ToString[vbeta]<>"_arc"
<>ToString[arcnum]<>".dat";
(*Importa a este programa el contenido del archivo*)
readrbeta = Import[arcrbeta];
```

```
(*En el caso con desorden aleatorio en las posiciones de los
potenciales delta, fija la posición aleatoria de cada potencial
delta*)
For[j = 1, j <= nd, j += sepbeta,
    beta[[j]] = j + readrbeta[[j]][[1]];
    ];
Goto[cuatro];
Label[tres];
(*En el caso ordenado en las posiciones de los potenciales
delta, fija las posiciones ordenadas de potenciales*)
For[j = 1, j <= nd, j += sepbeta,
    beta[[j]] = j;
    ];
If[pbetav == 0, Goto[cuatro]];
(*En el caso con desorden parcial en las posiciones de los
potenciales delta, fija las posiciones desordenadas de estos
potenciales*)
For[j = 1, j <= Length[pbetav], j++,
    beta[[Round[pbetav[[j]]]]] = pbetav[[j]];
    ];
Label[cuatro];
beta[[nd + 1]] = nd + 1;

(*La siguiente función devuelve una matriz producto de
multiplicar todas las matrices de transferencia de todos
los potenciales delta del sistema*)
ProdMatTransf[fi_] :=
(
(*Se define la matriz de transferencia para el potencial delta
en la posición beta[n]*)
MatTransf[n_] :=
1/fi {{fi + I l[[n]], I l[[n]] Exp(-2 I beta[[n]] fi)},
{-I l[[n]] Exp(2 I beta[[n]] fi), fi - I l[[n]]}};
MatTot = IdentityMatrix[2];
For[n = 1,  n <= nd, n++,
    MatTot = MatTransf[n].MatTot;
    ];
Return[MatTot];
);

(*Se generan las particiones de fi*)
fiValores = Range[fii + fib, fif, deltafi];
fiCantidadValores = Length[fiValores];
(*Las siguientes funciones devuelven los valores numéricos de
los coeficientes de transmisión y de reflexión para un valor
```

```
específico de fi*)
tNum[fi_] := 1/ProdMatTransf[fi][[1, 1]];
rNum[fi_] :=
ProdMatTransf[fi][[2, 1]]/ProdMatTransf[fi][[1, 1]];

(*Se generan los valores de los coeficientes de transmisión
y de reflexión para un cierto intervalo [fi, fif]*)
tValores = Map[tNum, fiValores];
rValores = Map[rNum, fiValores];
(*Se generan los valores absolutos de los coeficientes de
transmisión, de reflexión y la suma de los cuadrados de los
valores absolutos de estos dos coeficientes para un cierto
intervalo [fii, fif]*)
tabsValores =
Map[Abs[tValores[[#]]] &, Range[1, fiCantidadValores]];
rabsValores =
Map[Abs[rValores[[#]]] &, Range[1, fiCantidadValores]];
trabsValores =
Map[Abs[tValores[[#]]]^2 + Abs[rValores[[#]]]^2 &,
Range[1, fiCantidadValores]];

(*Construye el nombre del archivo para guardar las particiones
de fi*)
arcfi = "pfi_"<>ToString[nd]<>"d_fii"<>ToString[fii]<>"_fif"<>
ToString[fif]<>"_incr"<>ToString[deltafi]<>".dat";
(*Guarda en el archivo las particiones de fi*)
Export[arcfi, fiValores];

If[vl == 0 && vbeta == 0, Goto[cinco]];

(*Construye los nombres de los archivos para guardar,
respectivamente, los valores absolutos de los coeficientes
de transmisión, de reflexión y la suma de los cuadrados de
los valores absolutos de estos dos coeficientes para el caso
con desorden aleatorio en las intensidades y/o posiciones
de los potenciales delta*)
arct = "t_"<>ToString[nd]<>"d_li"<>ToString[intl]<>"r"<>
ToString[vl]<>"_sbeta"<>ToString[sepbeta]<>"r"<>
ToString[vbeta]<>"_fii"<>ToString[fii]<>"_fif"<>
ToString[fif]<>"_arc"<>ToString[arcnum]<>".dat";
arcr = "r_"<>ToString[nd]<>"d_li"<>ToString[intl]<>"r"<>
ToString[vl]<>"_sbeta"<>ToString[sepbeta]<>"r"<>
ToString[vbeta]<>"_fii"<>ToString[fii]<>"_fif"<>
ToString[fif]<>"_arc"<>ToString[arcnum]<>".dat";
arctr = "tr_"<>ToString[nd]<>"d_li"<>ToString[intl]<>"r"<>
```

```
ToString[vl]<>"_sbeta"<>ToString[sepbeta]<>"r"<>
ToString[vbeta]<>"_fii"<>ToString[fii]<>"_fif"<>
ToString[fif]<>"_arc"<>ToString[arcnum]<>".dat";
(*Guarda tales valores en los archivo creados*)
Export[arct, tabsValores];
Export[arcr, rabsValores];
Export[arctr, trabsValores];
Goto[f1];

Label[cinco];
If[plv == 0  && pbetav == 0, Goto[seis]];
(*Construye fragmentos del nombre del archivo para guardar,
respectivamente, los valores absolutos de los coeficientes de
transmisión, de reflexión y la suma de los cuadrados de los
valores absolutos de estos dos coeficientes para el caso con
desorden parcial en las intensidades y/o posiciones de los
potenciales delta*)
temp11 = {};
For[j = 1, j <= Length[intlv], j++,
    temp1 = "lp"<>ToString[plv[[j]]]<>"_i"<>
    ToString[intlv[[j]]] <> "_";
    AppendTo[temp11, temp1];
    ];
temp111 = StringJoin[temp11];
temp22 = {};
For[j = 1, j <= Length[pbetav], j++,
    temp2 = "_betap" <> ToString[pbetav[[j]]];
    AppendTo[temp22, temp2];
    ];
temp222 = StringJoin[temp22];
(*Construye los nombres completos de los archivos para guardar,
respectivamente, los valores absolutos de los coeficientes de
transmisión, de reflexión y la suma de los cuadrados de los
valores absolutos de estos dos coeficientes para el caso con
desorden parcial en las intensidades y/o posiciones de los
potenciales delta*)
arct = "t_"<>ToString[nd]<>"d_li"<>ToString[intl]<>"_"<>
ToString[temp111]<>"sbeta"<>ToString[sepbeta]<>
ToString[temp222]<>"_fii"<>ToString[fii]<>"_fif"<>
ToString[fif]<>".dat";
arcr = "r_"<>ToString[nd]<>"d_li"<>ToString[intl]<>"_"<>
ToString[temp111]<>"sbeta"<>ToString[sepbeta]<>
ToString[temp222]<>"_fii"<>ToString[fii]<>"_fif"<>
ToString[fif]<>".dat";
arctr = "tr_"<>ToString[nd]<>"d_li"<>ToString[intl]<>"_"<>
```

```
ToString[temp111]<>"sbeta"<>ToString[sepbeta]<>
ToString[temp222]<>"_fii"<>ToString[fii]<>"_fif"<>
ToString[fif]<>".dat";
(*Guarda tales valores en los archivo creados*)
Export[arct, tabsValores];
Export[arcr, rabsValores];
Export[arctr, trabsValores];
Goto[f1];

Label[seis];
(*Construye los nombres de los archivos para guardar,
respectivamente, los valores absolutos de los coeficientes
de transmisión, de reflexión y la suma de los cuadrados de
los valores absolutos de estos dos coeficientes para el caso
ordenado en las intensidades y/o posiciones de los potenciales
delta*)
arct = "t_"<>ToString[nd]<>"d_li"<>ToString[intl]<>"_sbeta"<>
ToString[sepbeta]<>"_fii"<>ToString[fii]<>"_fif"<>
ToString[fif]<>".dat";
arcr = "r_"<>ToString[nd]<>"d_li"<>ToString[intl]<>"_sbeta"<>
ToString[sepbeta]<>"_fii"<>ToString[fii]<>"_fif"<>
ToString[fif]<>".dat";
arctr = "tr_"<>ToString[nd]<>"d_li"<>ToString[intl]<>"_sbeta"<>
ToString[sepbeta]<>"_fii"<>ToString[fii]<>"_fif"<>
ToString[fif]<>".dat";
(*Guarda tales valores en los archivo creados*)
Export[arct, tabsValores];
Export[arcr, rabsValores];
Export[arctr, trabsValores];
Label[f1];

Label[grap];

(*Construye el nombre del archivo que contiene las
particiones de fi*)
arcfi = "pfi_"<>ToString[nd]<>"d_fii"<>ToString[fii]<>"_fif"<>
ToString[fif]<>"_incr"<>ToString[deltafi]<>".dat";
(*Importa a este programa el contenido del archivo*)
fiimp = Import[arcfi];

If[plv == intlv == vl == pbetav == vbeta == 0, Goto[siete]];
If[arcnum != 0, Goto[ocho]];

(*Construye fragmentos del nombre del archivo que contiene
los valores absolutos de los coeficientes de transmisión,
```

```
de reflexión y la suma de los cuadrados de los valores
absolutos de estos dos coeficientes para el caso con desorden
parcial en las intensidades y/o posiciones de los potenciales
delta*)
temp33 = {};
For[j = 1, j <= Length[intlv], j++,
    temp3 = "lp"<>ToString[plv[[j]]]<>"_i"<>
    ToString[intlv[[j]]]<>"_";
    AppendTo[temp33, temp3];
    ];
temp333 = StringJoin[temp33];
temp44 = {};
For[j = 1, j <= Length[pbetav], j++,
    temp4 = "_betap" <> ToString[pbetav[[j]]];
    AppendTo[temp44, temp4];
    ];
temp444 = StringJoin[temp44];
(*Construye los nombres completos de los archivos que contienen
respectivamente, los valores absolutos de los coeficientes de
transmisión, de reflexión y la suma de los cuadrados de los
valores absolutos de los coeficientes de transmisión y
reflexión para el caso con desorden parcial en las intensidades
y/o posiciones de los potenciales delta*)
arct = "t_"<>ToString[nd]<>"d_li"<>ToString[intl]<>"_"<>
ToString[temp333]<>"sbeta"<>ToString[sepbeta]<>
ToString[temp444]<>"_fii"<>ToString[fii]<>"_fif"<>
ToString[fif]<>".dat";
arcr = "r_"<>ToString[nd]<>"d_li"<>ToString[intl]<>"_"<>
ToString[temp333]<>"sbeta"<>ToString[sepbeta]<>
ToString[temp444]<>"_fii"<>ToString[fii]<>"_fif"<>
ToString[fif]<>".dat";
arctr = "tr_"<>ToString[nd]<>"d_li"<>ToString[intl]<>"_"<>
ToString[temp333]<>"sbeta"<>ToString[sepbeta]<>
ToString[temp444]<>"_fii"<>ToString[fii]<>"_fif"<>
ToString[fif]<>".dat";
(*Importa a este programa los contenidos de los archivos
anteriores*)
timp = Import[arct];
rimp = Import[arcr];
trimp = Import[arctr];
Goto[nueve];

Label[siete];
(*Construye los nombres de los archivos que contienen,
respectivamente, los valores absolutos de los coeficientes
```

```
de transmisión, de reflexión y la suma de los cuadrados de
los valores absolutos de los coeficientes de transmisión y
reflexión para el caso ordenado en las intensidades y las
posiciones de los potenciales delta*)
arct = "t_"<>ToString[nd]<>"d_li"<>ToString[intl]<>"_sbeta"<>
ToString[sepbeta]<>"_fii"<>ToString[fii]<>"_fif"<>
ToString[fif]<>".dat";
arcr = "r_"<>ToString[nd]<>"d_li"<>ToString[intl]<>"_sbeta"<>
ToString[sepbeta]<>"_fii"<>ToString[fii]<>"_fif"<>
ToString[fif]<>".dat";
arctr = "tr_"<>ToString[nd]<>"d_li"<>ToString[intl]<>"_sbeta"<>
ToString[sepbeta]<>"_fii"<>ToString[fii]<>"_fif"<>
ToString[fif]<>".dat";
(*Importa a este programa los contenidos de los archivos
anteriores*)
timp = Import[arct];
rimp = Import[arcr];
trimp = Import[arctr];
Goto[nueve];

Label[ocho];

(*Construye los nombres de los archivos que contienen
respectivamente, los valores absolutos de los coeficientes
de transmisión, de reflexión y la suma de los cuadrados de
los valores absolutos de estos dos coeficientes para el caso
con desorden aleatorio en las intensidades y/o posiciones de
los potenciales delta*)
arct = "t_"<>ToString[nd]<>"d_li"<>ToString[intl]<>"r"<>
ToString[vl]<>"_sbeta"<>ToString[sepbeta]<>"r"<>
ToString[vbeta]<>"_fii"<>ToString[fii]<>"_fif"<>
ToString[fif]<>"_arc"<>ToString[arcnum]<>".dat";
arcr = "r_"<>ToString[nd]<>"d_li"<>ToString[intl]<>"r"<>
ToString[vl]<>"_sbeta"<>ToString[sepbeta]<>"r"<>
ToString[vbeta]<>"_fii"<>ToString[fii]<>"_fif"<>
ToString[fif]<>"_arc"<>ToString[arcnum]<>".dat";
arctr = "tr_"<>ToString[nd]<>"d_li"<>ToString[intl]<>"r"<>
ToString[vl]<>"_sbeta"<>ToString[sepbeta]<>"r"<>
ToString[vbeta]<>"_fii"<>ToString[fii]<>"_fif"<>
ToString[fif]<>"_arc"<>ToString[arcnum]<>".dat";
(*Importa a este programa los contenidos de los archivos
anteriores*)
timp = Import[arct];
rimp = Import[arcr];
trimp = Import[arctr];
```

```

Label[nueve];

pfiabst = {};
pfiabsr = {};
pficuadabstr = {};
(*Se cargan respectivamente |T|^2, |R|^2 y |T|^2 + |R|^2
en pfiabst, pfiabsr y pficuadabstr*)
For[j = 1, j <= Length[fiimp] - 1, j++,
    AppendTo[pfiabst, {fiimp[[j]][[1]], timp[[j]][[1]]}];
    AppendTo[pfiabsr, {fiimp[[j]][[1]], rimp[[j]][[1]]}];
    AppendTo[pficuadabstr, {fiimp[[j]][[1]], trimp[[j]][[1]]}]
    ];
(*Grafica el valor absoluto del coeficiente de transmisión del
sistema*)
gt = ListPlot[{pfiabst}, Joined -> True, AxesLabel ->
{"fi", "|t(fi)|"}, TicksStyle -> Directive[12],
AxesStyle -> {Arrowheads[.020], Arrowheads[0.020]},
PlotRange -> {0, 1}];

(*Grafica el valor absoluto del coeficiente de reflexión del
sistema*)
gr = ListPlot[{pfiabsr}, Joined -> True, AxesLabel ->
{"fi", "|r(fi)|"}, TicksStyle -> Directive[12],
AxesStyle -> {Arrowheads[.020], Arrowheads[0.020]},
PlotRange -> {0, 1}];

(*Grafica la suma de los cuadrados de los valores absolutos de
los coeficientes de transmisión y reflexión del sistema*)
gtr = ListPlot[{pficuadabstr}, Joined -> True, AxesLabel ->
{"fi", "|t(fi)|^2 + |r(fi)|^2"}, TicksStyle -> Directive[12],
AxesStyle -> {Arrowheads[.020], Arrowheads[0.020]},
PlotRange -> {0, 1}];

(*Devuelve la función principal las gráficas de |T|^2, |R|^2 y
de |T|^2 + |R|^2*)
Return[{gt, gr, gtr}];

];
```

Bibliografía

[1] P. V. Pavplov, *Física del Estado Sólido* (Editorial Mir, Moscú, 1987).

[2] D. A. McQuarry, "The Kroning-Penney Model. A Single Lecture Illustrating the Band Structure of Solids", The Chemical Educator **1**, 1 (1960).

[3] E. Cota, J. Flores and G. Monsivais, "A simple way to understand the origin of the electron band structure", Am. J. Phys. **56**, 366 (1988).

[4] Charles P. Poole Jr., Frank J. Owens, *Introduction to Nanotechnology* (John Wiley & Sons, Inc., USA, 2003).

[5] Edward L. Wolf, *Nanophysics and Nanotechnology* (Wiley-Vch Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, 2004).

[6] Wenceslao González-Viñas, Héctor L. Mancini, *Ciencia de los materiales* (Editorial Ariel, S. A., Barcelona, 2003).

[7] Eugene Butkov, *Mathematical Physics* (Addison-Wesley Publishing Company, USA, 1968).

[8] J. C. Hernández Herrejón, F. M. Izrailev, L. Tessieri, "Anomalous properties of the Kronig-Penney model with compositional and structural disorder", Physica E **40**, 3137 (2008).

[9] G. Roati, C. D'Errico, L. Fallani, M. Fattori, C. Fort, M. Zaccanti, G. Modugno, M. Modugno and M. Inguscio, "Anderson localization of a non-interacting Bose-Einstein condensate", Nature **453**, 895 (2008).

[10] Marcelo Alonso, Edward J. Finn, *Volumen III: Fundamentos Cuánticos y Estadísticos* (Addison-Wesley Iberoamericana, México D. F. 1986).

[11] D. J. Griffiths, *Introduction to Quantum Mechanics* (Prentice Hall, Inc., USA, 1995).

[12] D. J. Griffiths and C. A. Steinke, "Waves in locally periodic media", Am. J. Phys. **69**, 137 (2001).

[13] Stephen Gasiorowicz, *Quantum Physics*, 2ª Ed. (John Wiley & Sons, Inc., USA, 1995).

[14] Stephen H. Friedberg, Arnold J. Insel, Lawrence E. Spence, *Álgebra Lineal* (Publicaciones Cultural, S. A., México, 1982).

[15] George Arfken, *Mathematical Methods for Physicists*, 3ª Ed. (Academic Press, Inc., USA, 1985).

[16] Manuel de Llano, *Mecánica Cuántica*, 2ª Ed. (Coordinación de Servicios Editoriales, Facultad de Ciencias, UNAM, México, 2002).

[17] D. C. Baird, *Experimentation: An Introduccion to Measurement Theory and Experiment Desing*, 3ª Ed. (Prentice Hall, New York, 1995).

[18] B. Kramer and A. MacKinnon, "Localization: theory and experiment", Rep. Prog. Phys. **56**, 1469 (1993).