



BENEMÉRITA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE PUEBLA

INSTITUTO DE FÍSICA "LUIS RIVERA TERRAZAS"

**"CÁLCULO DE FUNCIONES DE DISPERSIÓN Y
SU ANÁLISIS USANDO LA TEORÍA DE LA
MATRIZ REACCIÓN (TMR)"**

TESIS

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE

**MAESTRO EN CIENCIAS
(FÍSICA)**

PRESENTA:

WILLIAM JAVIER RODRÍGUEZ CRUZ

ASESOR(ES):

GERMÁN AURELIO LUNA ACOSTA

JULIO DE 2017

**Benemérita Universidad Autónoma de Puebla
Instituto de Física “Luis Rivera Terrazas”**

**“Cálculo de funciones de dispersión y su análisis
usando la Teoría de Matriz Reacción (TMR)”**

Tesis presentada por

William Javier Rodríguez Cruz

para obtener el grado de

**Maestro en Ciencias
(Física)**

Dirigida por

Dr. Germán Aurelio Luna Acosta

Puebla, México
Julio 2017.

©2017. - William Javier Rodríguez Cruz

Derechos Reservados

Agradecimientos

Agradezco al Doctor Germán Aurelio Luna Acosta por su constante disposición en el desarrollo de esta tesis, consejos y exigencia.

Al Doctor Emerson Sadurní por contribución en el formalismo matemático de los estados subterráneos y elaboración experimental de estos.

A mi novia Diana Milena Uriza Prias por su constante colaboración, paciencia y berraquera para afrontar y llevar a cabo este proyecto que emprendimos y culminamos juntos.

A mis viejos por sus palabras de aliento, resalto el optimismo de mi padre y le fé de mi madre.

Al IFUAP y el CONACYT por permitirme estudiar la maestría en Ciencias Física.

Agradezco a los compañeros de mi generación en especial a la parcera Monse, Arturo, Alejo y el viejo Diego por los momentos compartidos.

A los directivos en especial Mony y Lucre por su constante disposición en todos los trámites necesarios y palabras de motivación.

Al Doctor Jonathan Torres y Pedro Negrín por su apoyo en el desarrollo de la programación.

A los sinodales en especial al Dr Mauricio Torres, por sus excelentes correcciones y disposición para la lectura de las tesis.

A mi hermana, sobrinos y tía Blanca por sus palabras de motivación y esas buenas conversaciones con Gabys.

Cálculo de funciones de dispersión y su análisis usando la Teoría de Matriz Reacción (TMR)

Resumen

En este trabajo empleamos la Teoría de la Matriz de Reacción (TMR), aplicada a potenciales con simetría esférica, con el propósito de obtener un mejor entendimiento entre las características de las funciones de dispersión y las características espectrales del potencial dispersivo.

El ingrediente principal de la TMR es la separación del espacio de configuración en dos regiones: la región de interacción (o reacción) y la región asintótica. La función de onda dispersada en la región de interacción se expande en la base de los eigenestados del Hamiltoniano de reacción con condiciones de frontera homogéneas caracterizadas por el parámetro de frontera B . Resulta entonces conveniente hacer un análisis del espectro y de las eigenfunciones del sistema desacoplado.

Como ejemplo básico e ilustrativo de sistemas desacoplados, consideramos el de una partícula en una caja con una barrera o pozo en su interior para diferentes valores de B . El sistema más sencillo, el de la “caja vacía”, muestra ya la existencia del eigenestado con energías por debajo del fondo del potencial. A este nuevo tipo de estados los denominamos “estados subterráneos” para distinguirlos de los estados comunes con energías iguales o superiores al fondo del potencial. Mostramos la existencia de estos estados para varios rangos de parámetros que caracterizan la barrera dentro de la caja.

Cuando acoplamos estos sistemas al continuo observamos que la función de onda para energías resonantes, bajo ciertos parámetros, obedece condiciones de frontera que generan estados subterráneos. Mostramos que la inclusión de estos estados es fundamental para obtener, a través de la TMR, una expresión analítica a un nivel que describe correctamente la función de onda en la región de interacción, así como también la matriz de reacción. La correcta aproximación a un nivel se apoya en la determinación del parámetro de frontera B asociado a la resonancia y permite una mejor comprensión del fenómeno de dispersión.

Finalmente, enfatizamos que las resonancias, definidas por los máximos locales del tiempo de demora, generalmente no coinciden con los máximos de la sección eficaz, como lo establece fórmula de Breit-Wigner.

Contenido

1	Introducción	1
2	Teoría de Matriz Reacción (TMR) y funciones de dispersión	3
2.1	Descripción del sistema	3
2.1.1	Región de reacción	4
2.1.2	Región asintótica	5
2.1.3	Conexión por continuidad	6
2.2	Funciones de dispersión	6
2.2.1	Tiempo de demora y recorrido efectivo	6
2.2.2	Probabilidad de atrapamiento	7
2.2.3	Seccion eficaz	7
3	Sistemas cerrados	9
3.1	Sistema caja vacía con condiciones de frontera de Robin	9
3.2	Estados subterráneos	12
3.3	Sistema caja con barrera	16
3.3.1	Solución por el método directo	17
3.3.2	Solución por el método de diagonalización	18
3.4	Resultados del sistema caja con barrera	20
4	Sistemas abiertos	24
4.1	El potencial de dispersión	24
4.2	Funciones de dispersión para los sistemas pozo de potencial plano y caja con barrera	25
4.3	Cálculo del parámetro de frontera natural en resonancia B^*	28
4.3.1	Panorama de los parámetros B^* en el sistema caja con barrera y sus variantes	29
4.4	Funciones de onda para los sistemas pozo de potencial plano y caja con barrera	32
4.4.1	Sistema caja con barrera	32
4.4.2	Pozo de potencial plano	33

4.5 Aproximación a un solo nivel en la función de reacción y la densidad de probabilidad	37
5 Conclusiones	41
A Cálculo del eigenespectro para el sistema caja con barrera por el método directo	44
B Cálculo de los coeficientes de la función de onda del sistema caja con barrera	46
C Cálculo de la matriz Hamiltoniana $H_{B,mn}$ para el sistema caja con barrera	48
Bibliografía	52

Capítulo 1

Introducción

La descripción de fenómenos de dispersión cuántica generalmente requiere de la solución de la ecuación de Schrödinger. Estos encuentran aplicación en muchas ramas de la física, desde física nuclear y de partículas hasta sistemas mesoscópicos [1]

Existen pocos potenciales para los cuales la ecuación de Schrödinger con Hamiltoniano autónomo, puede resolverse de manera analítica y exacta, aún para sistemas en una dimensión. Aparte de los potenciales bien conocidos, como el potencial de Coulomb, partícula en una caja, oscilador armónico, potencial lineal y el de la partícula libre, existen otros potenciales que también permiten soluciones exactas, en términos de funciones hipergeométricas ordinarias o confluentes. Ver, por ejemplo [2]

Para los potenciales que no existen soluciones analíticas exactas, es necesario utilizar métodos numéricos o bien analíticos bajo ciertas aproximaciones. Algunos métodos numéricos están basados en la discretización de la ecuación de Schrödinger; otros métodos empleados son el variacional, de elemento finito y el de “shooting” (método de error y prueba) [3]. Una gran clase de problemas pueden también resolverse a través de la diagonalización del Hamiltoniano en una base apropiada.

En la actualidad, existen paquetes de software que resuelven la ecuación de onda de Schrödinger con la precisión numérica requerida y para potenciales arbitrarios [4]. Sin embargo, para que las soluciones numéricas nos proporcionen un entendimiento del sistema, usualmente es necesario hacer un muestreo de las soluciones como función de los parámetros del sistema. Para profundizar en el entendimiento de las propiedades de un sistema dado es de gran utilidad complementar las soluciones numéricas con resultados analíticos aproximados.

La Teoría de la Matriz de Reacción desarrollada por Wigner [5] para la descripción de reacciones nucleares permite hacer cálculos numéricos con bastante precisión y también da la posibilidad de hacer aproximaciones analíticas.

En este trabajo se utilizará la matriz de reacción para obtener los niveles de energía de los estados ligados y el tiempo de demora para el continuo. También se establecerá un proceso que permita obtener modelos a un nivel de la matriz de reacción que describan correctamente la dispersión en la vecindad de las resonancias.

El objetivo principal de este trabajo es emplear la teoría de la matriz de reacción, aplicada a potenciales centrales para obtener un mayor entendimiento entre las características de las funciones de dispersión y las características espectrales del potencial dispersivo.

Para lograr nuestro propósito planteamos los siguientes objetivos específicos:

1. Describir el método de la teoría de reacción para potenciales **centrales** dispersivos con radio de interacción bien definido.
2. Estudiar los potenciales centrales con radio de interacción bien definido sin acoplar al continuo. Considerando condiciones de frontera homogéneas o de Robin.
3. Comprender la importancia de los estados subterráneos en la solución de potenciales centrales cuyas condiciones de frontera homogéneas lo requieran.
4. Obtener las funciones de dispersión sección eficaz $\sigma(k)$, tiempo de demora $\tau(E)$ y probabilidad de atrapamiento $P(k)$, para el pozo de potencial plano y el sistema caja con barrera.
5. Obtener una expresión analítica a un nivel para la función de onda en resonancia, para los sistemas pozo de potencial plano y caja con barrera. Comparar con los cálculos exactos.

Durante el desarrollo de esta tesis nos encontramos con un comportamiento inesperado en el espectro de energía y la función de onda del estado fundamental, la cual exhibe un nodo para ciertas condiciones de frontera homogéneas. El nodo en el supuesto estado fundamental contradice el Teorema de Sturm-Liouville [18–20] que establece la no existencia de nodos en el estado de mínima energía. Dicho comportamiento ocasiona que los resultados obtenidos con la TMR sean incorrectos. Descubrimos que los resultados se corrigen al reconocer la existencia del estado fundamental por debajo del fondo del potencial que llamaremos Estados Subterráneos (ES).

Organización del trabajo.

El trabajo está organizado de la siguiente forma. En el Capítulo 2 describimos el formalismo de la TMR y deducimos de forma sencilla las funciones de dispersión. En el Capítulo 3 estudiamos el sistema caja vacía sin acoplar al exterior, encontrando que para condiciones de fronteras intermedias entre Neumann y Dirichlet se presenta una paradoja que contradice el teorema de Sturm Liouville, en el sentido de que el estado de mínima energía exhibe un nodo. Posteriormente corregimos dicha anomalía y aplicamos esta corrección al sistema caja con barrera. En el Capítulo 4 conectamos los sistemas pozo y caja con barrera al continuo, calculamos la matriz reacción, las funciones de dispersión y obtenemos una expresión analítica a un nivel para la función de onda en resonancia. En el capítulo 5 se presentan las conclusiones.

Capítulo 2

Teoría de Matriz Reacción (TMR) y funciones de dispersión

En este capítulo se describe la aplicación de la TMR para solucionar potenciales cuánticos unidimensionales semi-infinitos con radio de interacción bien definido, y presentamos una deducción sencilla de las funciones dispersivas que se van a utilizar en el desarrollo de este trabajo.

2.1 Descripción del sistema

Consideremos un potencial arbitrario localizado en la región I (reacción), ver Fig. 2.1, la línea segmentada en $x = d$ representa una frontera virtual que separa la región de reacción de la región II (asintótica). Para solucionar el problema es necesario conectar las regiones I y II usando la continuidad de la función de onda y su derivada evaluada en la frontera virtual, por lo tanto es necesario conocer la función de onda en la región de reacción y en la región asintótica.

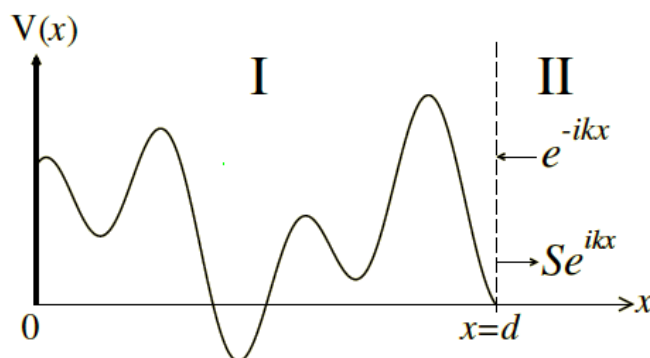


Figura 2.1: Potencial arbitrario con radio de interacción bien definido, la línea discontinua separa el espacio de configuración en dos regiones, reacción y asintótica respectivamente.

2.1.1 Región de reacción

La ecuación de Schrödinger para el sistema descrito está dada por

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2\mu} \partial_x^2 + V(x) \right] \psi(k; x) = \frac{\hbar^2}{2\mu} k^2 \psi(k; x), \quad x \in [0, \infty). \quad (2.1)$$

La función de onda dispersada $\psi(k, x)$ que satisface la ecuación (2.1), se obtiene expandiendo en una base ortogonal completa, $\{\Phi_{B,\lambda}(x)\}$, que se denominará eigenfunción de reacción,

$$\psi(k; x) = \sum_{\lambda=1}^{\infty} A_{\lambda}^B(k) \Phi_{B,\lambda}(x), \quad x \in [0, d]. \quad (2.2)$$

Las eigenfunciones $\{\Phi_{B,\lambda(x)}\}$ son las soluciones del Hamiltoniano en la región de reacción

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2\mu} \partial_x^2 + V(x) \right] \Phi_{B,\lambda}(x) = \frac{\hbar^2}{2\mu} k_{B,\lambda}^2 \Phi_{B,\lambda}(x), \quad x \in [0, d], \quad (2.3)$$

que está sujeto a condiciones de frontera de Dirichlet en $x = 0$ y homogéneas o de Robin en $x = d$, la última condición se fija con el parámetro de frontera B , cuyo valor es constante e independiente de λ , la cual etiqueta el nivel de energía. La condición de Robin se define como

$$\Phi'_{B,\lambda}(x = d) = B \Phi_{B,\lambda}(x = d). \quad (2.4)$$

Los eigenvalores que arroja la solución de la ec. (2.3) son el eigenespectro energético $\frac{2\mu}{\hbar^2} E_{B,\lambda} = k_{B,\lambda}^2$.

Los coeficientes de expansión $A_{\lambda}^B(k)$ están dados por

$$A_{\lambda}^B(k) = \frac{\Phi_{B,\lambda}^*(d) \psi'(k; d) - \Phi'_{B,\lambda}(d) \psi(k; d)}{k_{B,\lambda}^2 - k^2}, \quad (2.5)$$

ver la referencia [6]. Sustituyendo el complejo conjugado de la ec. (2.4), en el segundo término de la ecuación la ec. (2.5), se obtiene

$$A_{\lambda}^B(k) = \frac{\psi'(k; d) - B \psi(k; d)}{k_{B,\lambda}^2 - k^2} \Phi_{B,\lambda}^*(d). \quad (2.6)$$

Sustituyendo ec. (2.6) en ec. (2.2) y evaluando en $x = d$ se consigue

$$\psi(k; d) = [\psi'(k; d) - B \psi(k; d)] R_B(k), \quad (2.7)$$

donde

$$R_B(k) = \sum_{\lambda=1}^{\infty} \frac{|\Phi_{B,\lambda}(d)|^2}{k_{B,\lambda}^2 - k^2}, \quad (2.8)$$

es la matriz de reacción. Es interesante notar que la ec. (2.8) se obtiene sólo con información de la región de reacción. Consideremos el caso particular $B = 0$, entonces la matriz de reacción se transforma en el recíproco de la derivada logarítmica

$$R_0(k) = \frac{\psi(k, d)}{\psi'(k, d)}. \quad (2.9)$$

Dividiendo la ec. (2.7) a ambos lados del igual entre $\psi'(k, d)$ y utilizando el resultado de $R_0(k)$,

$$R_0^{-1}(k) = R_B^{-1}(k) + B, \quad (2.10)$$

obtenemos una identidad útil para la aplicación de la TMR.

2.1.2 Región asintótica

La forma de la función de onda en la región asintótica está dada como

$$\psi_{out}(k, x > d) = e^{-ikx} + S e^{ikx}, \quad \text{con } V(x) = 0, \quad (2.11)$$

S etiqueta la matriz de dispersión y se obtiene de forma explícita aplicando la derivada logarítmica a la ec. (2.11) y evaluando en $x = d$

$$S = -e^{-2ikd} \frac{1 + ik\psi(k; d)/\psi'(k; d)}{1 - ik\psi(k; d)/\psi'(k; d)}, \quad (2.12)$$

en virtud de la propiedad de unitariedad que se manifiesta en la anterior expresión, S se puede escribir en términos del corrimiento de fase θ

$$S \equiv -e^{-2ikd} e^{2i\phi} = -e^{-2i\theta}. \quad (2.13)$$

kd , corresponde a la fase de la esfera dura [7,8] independiente del potencial dispersivo siempre y cuando el radio de interacción d no se modifique. ϕ es la *fase resonante*:

$$\phi = \tan^{-1} \left(k \frac{\psi(k; d)}{\psi'(k; d)} \right). \quad (2.14)$$

Sustituyendo la ec. (2.13) en la ec. (2.11) y evaluando en la frontera d , se obtiene

$$\psi(k, d) = -2ie^{i\theta} \sin \phi. \quad (2.15)$$

La ec. (2.15) nos indica que la condición de frontera de la función de onda está determinada por el valor de $\phi(k)$. En particular, la función de onda dispersada cumple condiciones de frontera de Dirichlet (Neumann) cuando $\phi(k)$ es igual a 0 ($\frac{\pi}{2}$), modulo π .

2.1.3 Conexión por continuidad

El acoplamiento entre la región de reacción y asintótica en la frontera virtual, se consigue sustituyendo la ecuación (2.9), en las ecuaciones (2.12) y (2.14), respectivamente

$$S = -e^{-2ikd} \frac{1 + ikR_0(k)}{1 - ikR_0(k)}, \quad (2.16)$$

y

$$\tan(\phi) = kR_0(k) = \frac{k}{R_B^{-1}(k) + B}. \quad (2.17)$$

En ambas ecuaciones es evidente la importancia de calcular R_0 , que en pocos sistemas es posible obtener de forma analítica y por ende se utiliza la expansión

$$R_0(k) = \sum_{\lambda=1}^{\infty} \frac{|\Phi_{0,\lambda}(d)|^2}{k_{0,\lambda}^2 - k^2}. \quad (2.18)$$

Sustituyendo la ec. (2.11) en (2.6), los coeficientes $A_\lambda^B(k)$ se pueden escribir como:

$$A_\lambda^B(k) = -2ike^{-ikd} \frac{1 - BR_0(k)}{1 - ikR_0(k)} \times \frac{\Phi_{B,\lambda}(d)}{k_{B,\lambda}^2 - k^2} \quad (2.19a)$$

$$= -\frac{2ike^{-ikd}}{1 + (B - ik)R_B(k)} \times \frac{\Phi_{B,\lambda}(d)}{k_{B,\lambda}^2 - k^2} \quad (2.19b)$$

2.2 Funciones de dispersión

2.2.1 Tiempo de demora y recorrido efectivo

El tiempo de demora también se emplea para caracterizar resonancias [10–13]. En una dimensión se conoce como tiempo de demora de Wigner-Smith. Se interpreta como el tiempo que tarda una partícula en visitar la región de reacción. Un tiempo de demora positivo indica un “atrapamiento” de la partícula en la región de reacción y un tiempo de demora negativo significa que la partícula es acelerada al pasar por la región interna [15, 16]. Dicha función en términos de la matriz de dispersión está dada por:

$$\tau(E) = 2\hbar \frac{\partial \theta}{\partial E}. \quad (2.20)$$

Recordando que θ está dividido en la fase de la esfera dura y la fase resonante ϕ , y tomando las derivadas respecto al número de onda k , obtenemos

$$\begin{aligned} \tau(k) &= 2\hbar \left(-d \frac{dk}{dE} + \frac{d\phi(k)}{dk} \frac{dk}{dE} \right) \\ &= \frac{\mu}{k\hbar} (l(k) - 2d), \end{aligned} \quad (2.21)$$

donde

$$l(k) = 2 \frac{d\phi(k)}{dk} \quad (2.22)$$

se conoce como el recorrido efectivo de una partícula a una velocidad igual a la de una partícula libre $\frac{\mu}{\hbar k}$ en la región de reacción en presencia de un potencial, el cual causa un estiramiento en la fase resonante $\phi(k)$.

2.2.2 Probabilidad de atrapamiento

Por definición esta función en la región de reacción está dada por,

$$P(k) \equiv \frac{1}{d} \int_{\text{reac}} |\psi(k; x)|^2 dx \quad (2.23)$$

Expandiendo en términos de la eigenfunción de reacción $\Phi_{B,\lambda}$

$$\begin{aligned} P(k) &= \int_{\text{reac}} \sum_{\lambda\lambda'}^{\infty} (A_{\lambda}^{*B}(k) \Phi_{B,\lambda}^*(x)) (A_{\lambda'}^B(k) \Phi_{B,\lambda'}(x)) dx \\ &= \sum_{\lambda\lambda'}^{\infty} A_{\lambda}^{*B}(k) A_{\lambda'}^B(k) \int_{\text{reac}} \Phi_{B,\lambda}^*(x) \Phi_{B,\lambda'}(x) dx \\ &= \sum_{\lambda}^{\infty} |A_{\lambda}^B(k)|^2 \end{aligned} \quad (2.24)$$

Escribiendo $A_{\lambda}^B(k)$ en términos de la matriz reacción y haciendo los respectivos cálculos, conseguimos

$$P(k) = \frac{1}{d} \left(l(k) - \frac{\sin(2\phi)}{k} \right) \quad (2.25)$$

2.2.3 Sección eficaz

La sección eficaz es la función de dispersión más común usada en física nuclear, atómica y de partículas para caracterizar las resonancias. Está dada por:

$$\sigma(k) = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2(\theta). \quad (2.26)$$

Siendo rigurosos la sección eficaz no tiene significado físico en sistemas semi-infinitos unidimensionales. Sin embargo si lo tiene para partículas dispersadas con momentum angular $l = 0$ con simetría esférica. Por otro lado la densidad de probabilidad de encontrar a la partícula en $x = d$, la calculamos con la ecuación (2.15)

$$|\psi(k; d)|^2 = 4 \sin^2(\phi) \quad (2.27)$$

que indica que el acoplamiento no depende de la fase total θ sino de su parte resonante solamente. En el Capítulo 4 profundizaremos en este indicio, calculando la sección transversal σ_θ y su parte resonante σ_ϕ , ambas escaladas.

$$\sigma_\theta \equiv \sin^2 \theta \tag{2.28}$$

$$\sigma_\phi \equiv \sin^2 \phi. \tag{2.29}$$

Note que la sección eficaz escalada ec. (2.29) es proporcional a la densidad de probabilidad en la frontera.

Capítulo 3

Sistemas cerrados

En este capítulo primero se calcula el eigenespectro y la función de onda para una partícula en una caja vacía sujeta a condiciones de frontera homogéneas en $x = d$. Luego se muestra que los resultados obtenidos respecto a la caja vacía presentan aparentes anomalías, tanto en su eigenespectro como en su función de onda, las cuales solucionamos al considerar energías por debajo del fondo del potencial. Posteriormente obtenemos el eigenespectro y las eigenfunciones para el sistema compuesto por una caja con una barrera en su interior. Por último mostramos la importancia de las energías por debajo del fondo del potencial en el resultado correcto de la función de reacción.

3.1 Sistema caja vacía con condiciones de frontera de Robin

Consideremos el sistema de la caja vacía

$$V(x) = \begin{cases} \infty, & x \leq 0 \text{ y } x > d \\ 0, & 0 < x \leq d. \end{cases} \quad (3.1)$$



Figura 3.1: Sistema caja vacía de ancho d que cumple condiciones de frontera de Dirichlet en $x = 0$ y de Robin en $x = d$. Note que el fondo del potencial está en $E = 0$.

El sistema caja vacía está descrito por el Hamiltoniano

$$H_0 u_{B,m}(x) = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dx^2} u_{B,m}(x) = \frac{\hbar^2}{2\mu} q_{B,m}^2 u_{B,m}(x) \quad 0 \leq x \leq d, \quad (3.2)$$

sujeto a condiciones de frontera de Dirichlet y de Robin respectivamente

$$u_{B,m}(x)|_0 = 0 \quad (3.3)$$

y

$$\left. \frac{u'_{B,m}(x)}{u_{B,m}(x)} \right|_d = B = q_{B,m} \cot(q_{B,m}d). \quad (3.4)$$

Aquí

$$q_{B,m}^2 \equiv \frac{2\mu E_{B,m}}{\hbar^2}, \quad \frac{\mu}{\hbar^2} = 1 \\ (q_{B,m}d)^2 = 2E_{B,m}d^2 = 2\bar{E}_{B,m}.$$

La solución a la ec. (3.2) es la función de onda $u_{B,m}(x)$ que denominaremos **base primaria** y el subíndice m etiqueta el nivel del estado

$$u_{B,m}(x) = N_{B,m} \sin(q_{B,m}x), \quad m = 0, 1, 2, 3 \dots, \quad (3.5)$$

siendo $m = 0$ el estado fundamental de energía y $N_{B,m}$ la constante de normalización

$$N_{B,m} = \sqrt{\frac{4q_{B,m}}{2dq_{B,m} - \sin(2dq_{B,m})}}. \quad (3.6)$$

De acuerdo a la ec. (3.4) notamos que las condiciones de frontera de Dirichlet $u_{B,m}(d) = 0$ corresponden a $B \rightarrow -\infty$ y las de Neumann $u'_{B,m}(d) = 0$ corresponden a $B = 0$.

El eigenespectro de la caja vacía se obtiene calculando las raíces $\{q_{B,m}\}$ de la ecuación trascendente (3.4) para un determinado valor real de B . Considerando diferentes valores de B obtenemos la Fig. 3.2 en la que se observa que $Bd = 1$ es un punto crítico donde los niveles de energía manifiestan un salto, indicado por la línea vertical segmentada. Centrando nuestra atención en el estado fundamental de energía en la Fig. 3.3 se observa que para valores menores o iguales al punto crítico las raíces $\{q_{B,0}\}$ se encuentran antes de la primera singularidad ($qd = \pi$) de la función $qd \cot(qd)$, mientras que para $Bd > 1$ las raíces se localizan después de la primer singularidad.

Las raíces $\{q_{B,m}\}$ para $Bd > 1$ exhiben un nodo en el supuesto estado fundamental de energía, debido a que $q_{B,m}d \geq \pi$ ver Fig. 3.4. Lo anterior no es consistente con el Teorema de Sturm-Liouville [18–20], que especifica que la n -ésima eigenfunción tiene m nodos. En particular el estado fundamental ($m = 0$) no debe exhibir ningún

nodo. Tomando el teorema de Sturm-Liouville como cierto consideramos que esta inconsistencia se debe a que el estado fundamental está oculto y por lo tanto las funciones de onda para $Bd > 1$ mostradas en la Fig. 3.4, en realidad deberían corresponder al primer y quinto nivel de excitación.

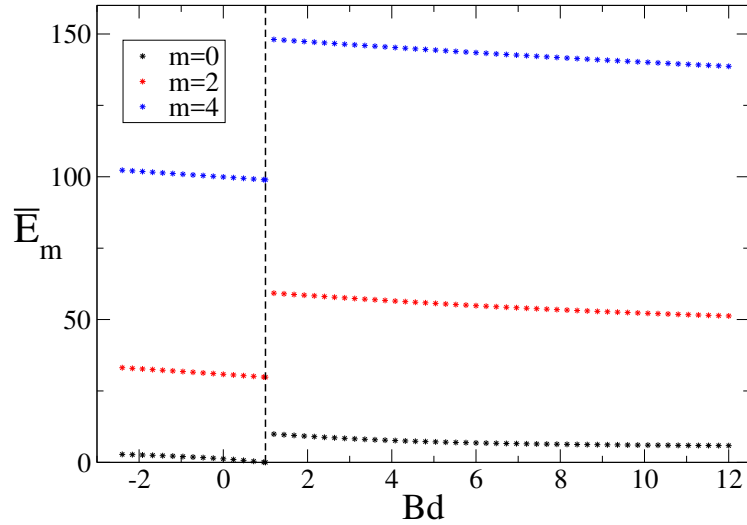


Figura 3.2: Eigenespectro en términos de la energía para los niveles 0, 2 y 4 del sistema caja vacía, representados por las líneas de color negro, rojo y azul respectivamente. La línea vertical discontinua indica el punto $Bd = 1$ en el que se presenta el salto.

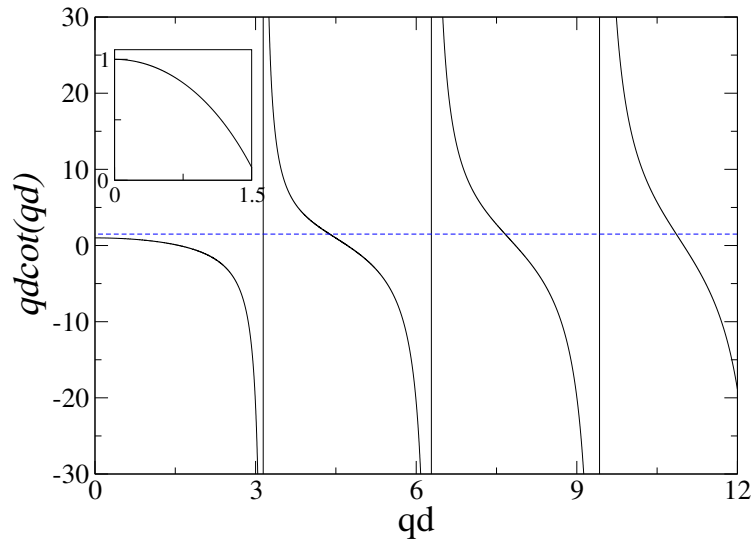


Figura 3.3: Función $qd \cot(qd)$. El punto de corte con la ordenada es exactamente en el punto crítico $Bd = 1$. En la parte superior izquierda se presenta una ampliación de la zona localizada antes de la primera singularidad $qd = \pi$, en la que no es posible encontrar soluciones para $Bd > 1$ como lo indica las intersecciones de la línea discontinua con la función $qd \cot(qd)$.

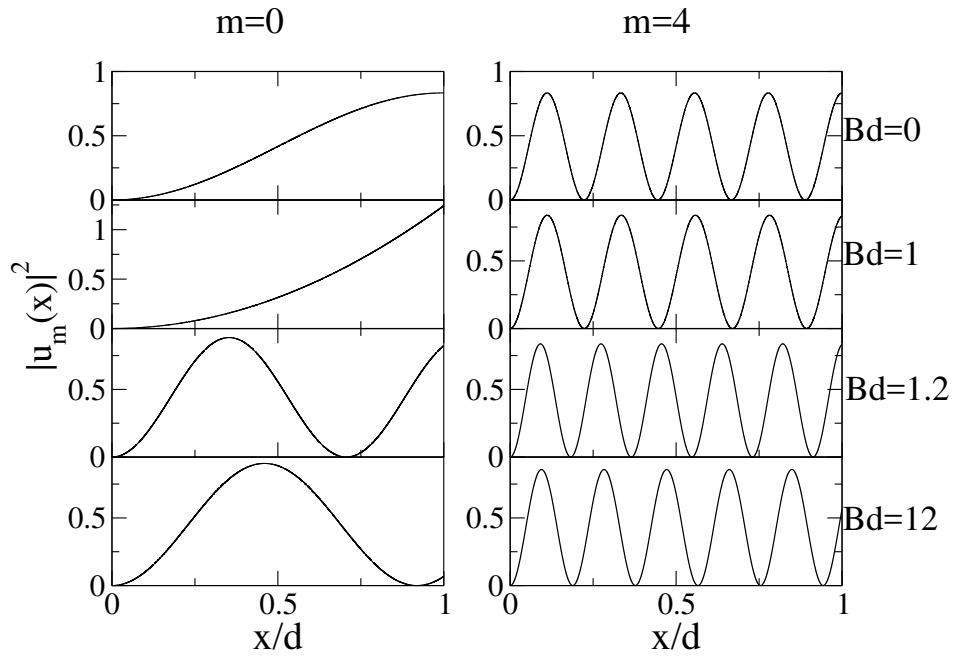


Figura 3.4: Densidades de probabilidad para el estado fundamental y el cuarto nivel de excitación del sistema caja vacía, considerando valores de $Bd = 0, 1, 1.2, 12$.

3.2 Estados subterráneos

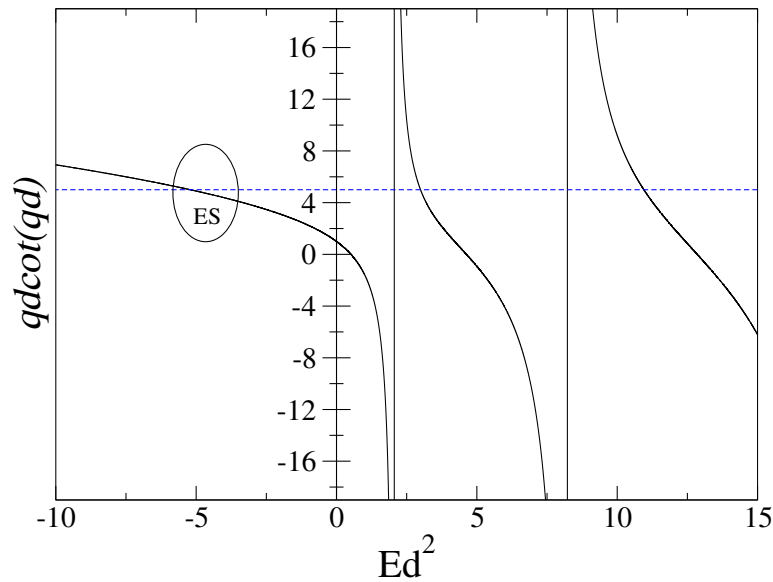


Figura 3.5: Representación gráfica de $qd \cot(qd)$ en función de la energía. Las intersecciones de la línea azul con la función $qd \cot(qd)$ indican las raíces encontradas para un determinado valor de B . La elipse indica el estado subterráneo cuya energía siempre es negativa

En la Fig. 3.5 notamos que cuando $Ed = 0$ la función $qd \cot(qd) = 1$ por lo tanto el estado fundamental para $Bd = 1$ tiene energía $E = 0$. De modo que la función de onda del estado fundamental tiene un comportamiento lineal, es decir

$$u_{\frac{1}{d},0}(x) = N_{\frac{1}{d},0}x, \quad q_{\frac{1}{d},0} = E_{\frac{1}{d},0} = 0 \quad \text{y} \quad \frac{u'(d)}{u(d)} = \frac{1}{d}. \quad (3.7)$$

Usando la ec. (3.6) obtenemos la constante de normalización

$$N_{\frac{1}{d},0} = \sqrt{\frac{2}{d}}. \quad (3.8)$$

Se aprecia también que para $Bd > 1$ la energía del estado base es $E < 0$, lo que significa que el estado fundamental de energía siempre se localiza por debajo del fondo del potencial y lo denominamos estado subterráneo! Energías por debajo del fondo del sistema implican que el número de onda $q_{B,m}$ sea imaginario para $m = 0$

$$q_{B,0} = \sqrt{-2|E_{B,0}|} = iQ_{B,0}, \quad Q_{B,0} \equiv \sqrt{2|E_{B,0}|},$$

donde

$$u_{B,0}(x)|_0 = 0, \quad \left. \frac{u'_{B,0}(x)}{u_{B,0}(x)} \right|_d = B = Q_{B,0} \coth(Q_{B,0}d) \quad (3.9)$$

y la función de onda de este estado es

$$u_{B,0}(x) = \aleph_{B,0} \sinh(Q_{B,0}x), \quad (3.10)$$

con factor de normalización

$$\aleph_{B,0} = \sqrt{\frac{4Q_{B,0}}{\sinh 2Q_{B,0}d - 2Q_{B,0}d}}. \quad (3.11)$$

La inclusión del estado subterráneo en el conjunto de eigenestados elimina el salto en el eigenespectro observado en la Fig.3.2, ver Fig. 3.6, resolviendo el conflicto con el teorema de Sturm-Liouville pues ahora el verdadero estado fundamental no tiene nodos como lo muestra la Fig 3.7.

En resumen, existen tres tipos de estados fundamentales para la caja vacía, dependiendo del valor del parámetro de frontera B :

$$u_{B,0}(x) = \begin{cases} N_{B,0} \sin(q_{B,0}x) & q_{B,0} \text{ es la primer raíz de } q_{B,m} \cot(q_{B,m}d) = Bd < 1, \\ Nx & \text{para } Bd = 1, \quad q_{B,0} = 0, \\ \aleph_{B,0} \sinh(Q_{B,0}x) & Q_{B,0} \text{ es la única raíz de } Q_{B,0} \coth(Q_{B,0}d) = Bd > 1, \end{cases} \quad (3.12)$$

Notemos que las condiciones de frontera de Neumann $B = 0$ y Dirichlet $B \rightarrow -\infty$ están contenidas en la primera solución. Aclaremos que para $Bd \rightarrow \infty$ no tienen

lugar las condiciones de frontera de Dirichlet pues la función de onda se adhiere por completo a la pared derecha del sistema, es decir que la función de onda en $x = d$ no es cero.

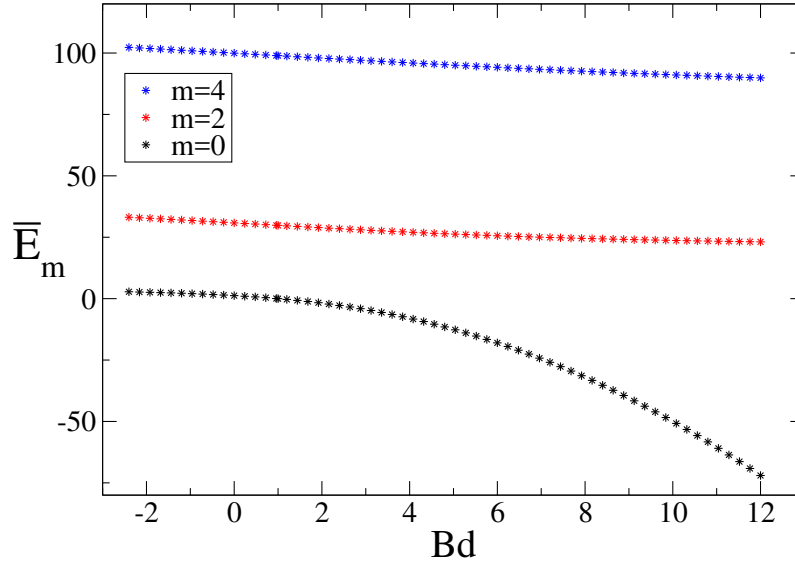


Figura 3.6: Eigenespectro en términos de la energía para el sistema caja vacía incluyendo el estado subterráneo. Las líneas de color negro, rojo y azul corresponden a los niveles 0, 2 y 4 respectivamente.

De acuerdo con los razonamientos que se han venido realizando es oportuno investigar el efecto del estado subterráneo en el cálculo de la función de reacción $R_B(q)$. Para ello primero calculamos $R_B(q)$ de forma exacta por medio de la ec. (2.10) en la que es necesario determinar $R_0(q)$ que se obtiene al aplicar el recíproco de la derivada logarítmica a la base primaria evaluada en $x = d$,

$$R_0(q) = \frac{\tan(qa)}{q}. \quad (3.13)$$

Luego comparamos el resultado exacto con el obtenido a través de la expansión dada por la ec. (2.8) en la que ignoramos el estado subterráneo. En el panel superior de la Fig. 3.8 se observa que los resultados obtenidos con la expansión no coinciden con el resultado exacto (curva negra), lo cual se corrige al incluir el estado subterráneo como se aprecia en la Fig. 3.9.

Adicionalmente calculamos la densidad de probabilidad $|u_{B,m}(x)|^2$ de forma exacta, sustituyendo el valor de $q_{B,m}$ correspondiente al primer nivel de excitación en la ec. (3.5). Este resultado lo comparamos con el determinado de forma aproximada usando la ec. (2.2) para un número N de términos en la suma. El panel inferior de la Fig. 3.8 nos muestra la densidad de probabilidad calculada de forma aproximada prescindiendo del estado subterráneo y la densidad de probabilidad obtenida de manera exacta (línea discontinua), es evidente que los resultados aproximados no

reproducen el resultado exacto que solo se consigue al reconocer la existencia del estado subterráneo como se observa en la Fig. 3.9.

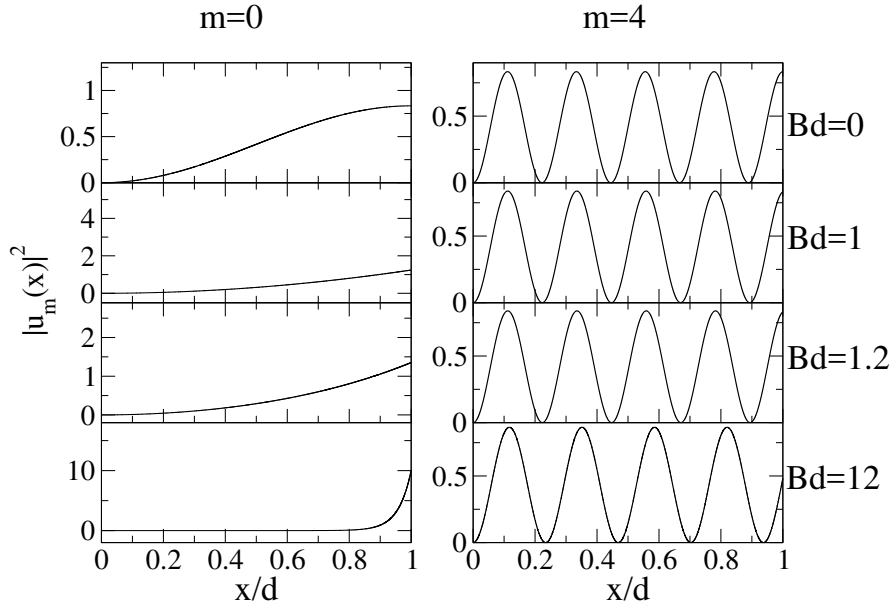


Figura 3.7: Densidades de probabilidad para el sistema caja vacía considerando el estado subterráneo, para los niveles $m = 0$ y $m = 4$ con valores de $Bd = 0, 1, 1.2, 12$

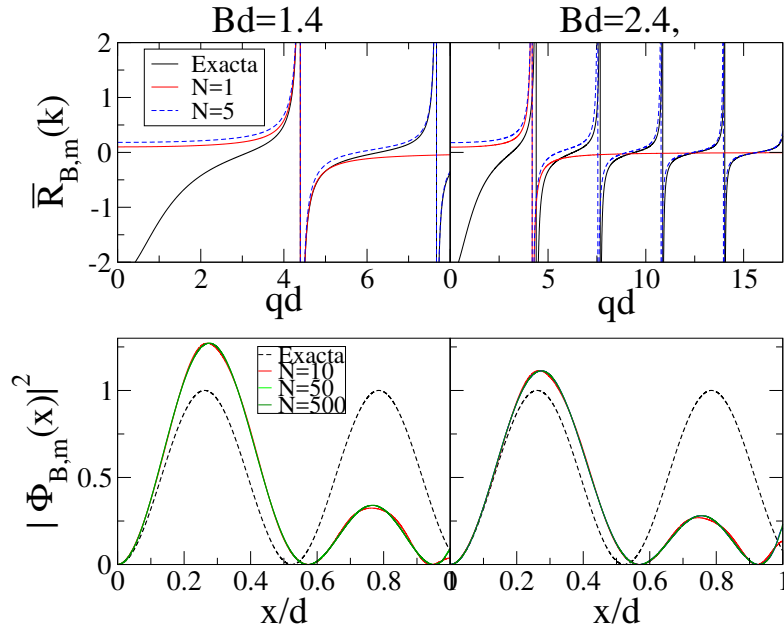


Figura 3.8: Función de reacción R_B y densidad de probabilidad para $m = 1$ del sistema caja vacía, ignorando el estado subterráneo con valores de $Bd = 1.4, 2.4$. N es el número de términos considerados en la sumatoria (2.2).

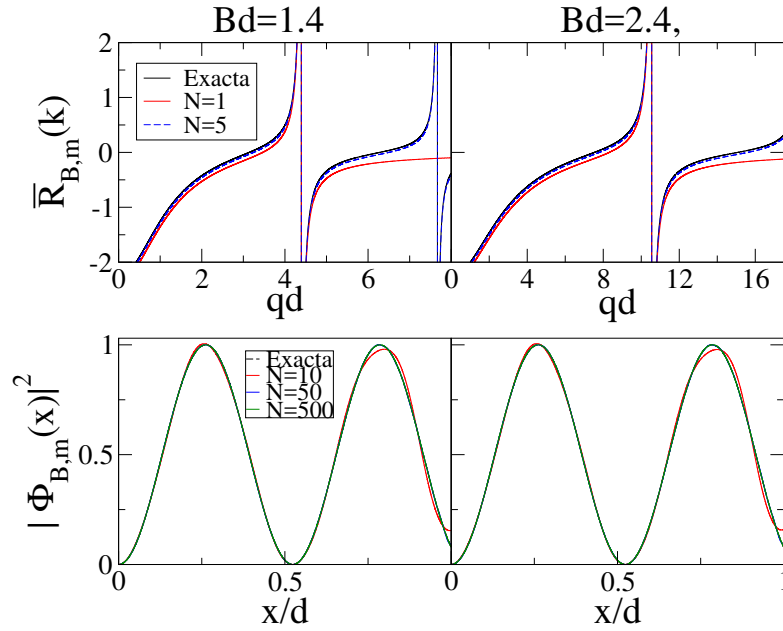


Figura 3.9: Función de reacción R_B y densidad de probabilidad para $m = 1$ del sistema caja vacía, considerando el estado subterráneo con valores de $Bd = 1.4, 2.4$. N es el número de términos considerados en la sumatoria (2.2).

3.3 Sistema caja con barrera

Con el propósito de investigar si los estados subterráneos existen también para otros sistemas, analizaremos el sistema de una barrera de potencial dentro de la caja estudiada en la sección anterior. Obtendremos el eigenespectro y eigenfunciones de dos maneras; el método directo y el método de diagonalización.

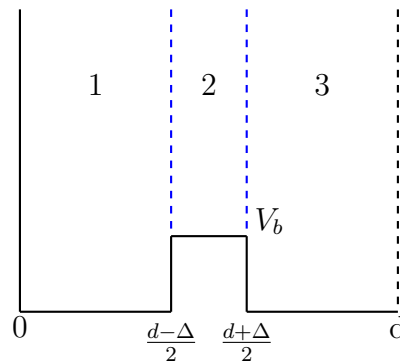


Figura 3.10: Caja con una barrera de longitud Δ y altura V_b . El fondo de la caja esta en $E = 0$. Las líneas azules segmentan el sistema en tres regiones.

3.3.1 Solución por el método directo

Eigenespectro

Segmentando el sistema caja con barrera en tres regiones como se ilustra en Fig. 3.10 la función de onda correspondiente a cada región está dada por

$$\psi_1 = A_1 \sin(k_1 x), \quad (3.14)$$

$$\psi_2 = C e^{-iqx} + D e^{iqx}, \quad (3.15)$$

$$\psi_3 = A_2 \sin k_1(x - d) + A_3 \cos k_1(x - d), \quad (3.16)$$

donde

$$q = \sqrt{k_1^2 - 2V_B}, \quad k_1 = \sqrt{2E}. \quad (3.17)$$

Imponiendo condiciones de frontera de Robin en la región 3 y evaluando en $x = d$

$$\frac{\psi'(d)}{\psi(d)} = k_1 \frac{A_2}{A_3} = R_0(k)^{-1} \quad (3.18)$$

Imponiendo continuidad en las fronteras $x = \frac{d-\Delta}{2}$ y $x = \frac{d+\Delta}{2}$, se obtiene

$$-iq(-A_2\alpha + A_3\beta) + k_1(A_2\beta + A_3\alpha) = A_1 e^{-iq\Delta} (k_1\beta - iq\alpha) \quad (3.19)$$

$$iq(-A_2\alpha + A_3\beta) + k_1(A_2\beta + A_3\alpha) = A_1 e^{iq\Delta} (k_1\beta + iq\alpha), \quad (3.20)$$

donde

$$\alpha = \sin \left[k_1 \frac{(a - \Delta)}{2} \right] \quad \text{y} \quad \beta = \cos \left[k_1 \frac{(a - \Delta)}{2} \right].$$

Dividiendo la ec. (3.20) entre la ec. (3.19) se obtiene

$$\frac{A_2}{A_3} = \frac{ZW^* e^{2iq\Delta} - WZ^*}{Z^{*2} - Z^2 e^{2iq\Delta}} \quad (3.21)$$

donde

$$Z = k_1\beta + iq\alpha \quad \text{y} \quad W = k_1\alpha + iq\beta, \quad (3.22)$$

sustituyendo la ecuación (3.21) en la ec. (3.18), obtenemos la ecuación trascendente general para calcular el eigenespectro,

$$\boxed{R_0^{-1} = k_1 \frac{ZW^* e^{2iq\Delta} - WZ^*}{Z^{*2} - Z^2 e^{2iq\Delta}}}. \quad (3.23)$$

Consideremos por separado los casos, $E \geq 0$ y $E < 0$. Para $E > 0$, el número de onda q es real si $E \geq V_B$, como se aprecia en (3.17), mientras que para $E < V_B$ tiene

lugar el fenómeno de tunelamiento y por ende, q adopta la forma $q = i\tilde{Q}$. Para $E < 0$ los números de onda k_1 y q , junto con las cantidades Z y W toman la forma

$$ik_0 \quad y \quad q_0 = \sqrt{2|E| + 2V_B}. \quad (3.24)$$

$$Z_0 = -q_0\alpha + ik_0\beta \quad y \quad W_0 = -q_0\beta + ik_0\alpha, \quad (3.25)$$

donde el subíndice 0 etiqueta el estado subterráneo. En el apéndice A se presenta la deducción de la ecuación (3.23).

Función de onda

Para calcular la función de onda, es necesario conocer los coeficientes de las ecuaciones (3.14)-(3.16) los cuales están definidos por (ver apéndice B),

$$A_1 = \frac{-2iqCe^{-iq(\frac{d-\Delta}{2})}}{Z^*}, \quad (3.26)$$

$$A_3 = \frac{-2iqkCe^{-iq(\frac{d+\Delta}{2})}}{BZ + k_1W^*}, \quad (3.27)$$

$$A_2 = \frac{BA_3}{k_1}, \quad (3.28)$$

$$D = \frac{A_1Z}{2iq}e^{-iq(\frac{d-\Delta}{2})}, \quad (3.29)$$

el sistema de ecuaciones se soluciona, si determinamos el coeficiente C que se consigue normalizando la función de onda

$$|C|^2 = \left\{ \frac{q^2}{k_1|Z|^2} (k_1(d - \Delta) - 2\alpha\beta) + 2\Delta - \frac{\sin(q\Delta)}{q} \left(\frac{Z}{Z^*}e^{iq\Delta} + \frac{Z^*}{Z}e^{-iq\Delta} \right) + \frac{2q^2}{(BZ + k_1W^*)(BZ^* + k_1W)} \left[\frac{(B^2 - k_1^2)(k_1(d - \Delta) - 2\alpha\beta)}{2k_1} - k_1^2(d - \Delta) - 2B\alpha^2 \right] \right\}^{-1}. \quad (3.30)$$

3.3.2 Solución por el método de diagonalización

Las expresiones para la matriz hamiltoniana

$$H_{B,mn} = \langle u_{B,m} | H | u_{B,n} \rangle \quad (3.31)$$

dependerán del tipo de estado fundamental de la base primaria $\{u_{B,m}\}$, con condiciones de frontera ec. (3.12).

Tipo $Bd < 1$

$$H_{B,mm} = F_{B,w} + \frac{N_{B,m}^2 V_b}{2} \left[\Delta - \frac{\cos(q_{B,m}d) \sin(q_{B,m}\Delta)}{q_{B,m}} \right], \quad (3.32)$$

$$H_{B,mn} = A_{B,mn} V_b \left[\frac{\sin\left(\frac{\theta_{B,mn}\Delta}{2}\right) \cos\left(\frac{\theta_{B,mn}d}{2}\right)}{\theta_{B,mn}} - \frac{\sin\left(\frac{\zeta_{B,mn}\Delta}{2}\right) \cos\left(\frac{\zeta_{B,mn}d}{2}\right)}{\zeta_{B,mn}} \right] \quad (3.33)$$

con

$$F_{B,w} = \frac{\hbar^2}{2\mu} q_{B,n}^2 - |V_w|,$$

donde V_b etiqueta la altura de la barrera y V_w la profundidad del pozo, que en este caso es cero y

$$\begin{aligned} A_{B,mn} &= N_{B,m} N_{B,n} \\ \theta_{B,mn} &= q_{B,m} - q_{B,n} \\ \zeta_{B,mn} &= q_{B,m} + q_{B,n}. \end{aligned}$$

Para el tipo $Bd = 1$ es necesario usar la base primaria que adopta la forma de la ec. (3.7). En el tipo $Bd > 1$ los elementos matriciales correspondientes a $m = 0$ son

$$H_{B,00} = F_{B,w}^{ES} + \frac{N_{B,0}^2 V_b}{2} \left[\frac{\sinh(Q_{B,0}\Delta) \cosh(Q_{B,0}d)}{Q_{B,0}} + \Delta \right], \quad (3.34)$$

donde

$$F_{B,w}^{ES} = -\frac{Q_{B,0}^2}{2} - |V_w| \quad (3.35)$$

$$\begin{aligned} H_{B0,n} &= \frac{N_{B,0} N_{B,n} V_b}{Q_{B,0}^2 + q_{B,n}^2} \left\{ Q_{B,0} \left[\cosh\left(\frac{Q_{B,0}(a+\Delta)}{2}\right) \sin\left(\frac{q_{B,n}(a+\Delta)}{2}\right) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \cosh\left(\frac{Q_{B,0}(a-\Delta)}{2}\right) \sin\left(\frac{q_{B,n}(a-\Delta)}{2}\right) \right] \right. \\ &\quad \left. + q_{B,n} \left[\sinh\left(\frac{Q_{B,0}(a-\Delta)}{2}\right) \cos\left(\frac{q_{B,n}(a-\Delta)}{2}\right) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \sinh\left(\frac{Q_{B,0}(a+\Delta)}{2}\right) \cos\left(\frac{q_{B,n}(a+\Delta)}{2}\right) \right] \right\} \quad (3.36) \end{aligned}$$

Los demás elementos matriciales se obtienen aplicando el mismo procedimiento del tipo $Bd < 1$.

Las raíces $\{q_{B,n}\}$ y $Q_{B,0}$ se calculan utilizando las ecuaciones trascendentes (3.4) y (3.9) respectivamente. Dichas raíces permiten construir la matriz simétrica H_{mn} , que se diagonaliza con el propósito de obtener el eigenespectro $k_{B,n}$ y sus respectivos

eigenvectores. La función de onda $\Phi_{B,\lambda}(x)$ se consigue expandiendo los coeficientes $C_{B,m}^\lambda$ en términos de la base primaria,

$$\Phi_{B,\lambda}(x) = \sum_m C_{B,m}^\lambda u_{B,m}(x), \quad m = 0, 1, 2, \dots \quad (3.37)$$

m etiqueta la m -ésima componente del eigenvector y λ el nivel de energía bajo estudio.

Un caso particular del tipo $Bd < 1$ es $Bd = 0$ (condición de frontera de Neumann). Las raíces las conocemos de forma exacta y los estados subterráneos no se manifiestan pues $Bd < 1$

$$u_{0,m}(x) \Big|_0 = 0 \quad (3.38)$$

$$\begin{aligned} \frac{u'_{0,m}(x)}{u_{0,m}(x)} \Big|_d &= q_{0,m} \cot(q_{0,m}d) = 0 \\ \therefore q_{0,m} &= \left(\frac{2m-1}{2d} \right) \pi, \quad m = 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (3.39)$$

De la ecuación (3.6), es fácil ver que la constante de normalización es

$$N_{0,m} = \sqrt{\frac{2}{d}}, \quad (3.40)$$

sustituyendo las ecuaciones (3.39) y (3.40) en (3.32) y (3.33), conseguimos las expresiones exactas para $E \geq 0$

$$H_{0,mm} = F_w + \frac{\Delta V_b}{d}, \quad (3.41)$$

$$H_{0,mn} = \frac{2V_b}{\pi} \left[\frac{\cos\left(\frac{\pi(m-n)}{2}\right) \sin\left(\frac{(m-n)\pi\Delta}{2a}\right)}{m-n} + \frac{\cos\left(\frac{\pi(m+n-1)}{2}\right) \sin\left(\frac{(m+n-1)\pi\Delta}{2a}\right)}{m+n-1} \right]. \quad (3.42)$$

3.4 Resultados del sistema caja con barrera

En el sistema bajo estudio la altura y ancho de la barrera sin dimensiones son respectivamente, $2|V_b|d^2 = 11.5$ y $\frac{\Delta}{d} = \frac{1}{2}$. La Fig. 3.11 nos muestra el espectro de energía del sistema caja con barrera para diferentes valores de B . A partir del cuarto nivel de excitación el espectro de energía de este sistema es muy similar al del sistema caja vacía de hecho las funciones de onda son idénticas como se observa en la Fig. 3.12. Mientras que las funciones de onda del estado de mínima energía son bien diferenciadas de las calculadas en el sistema caja vacía excepto cuando $Bd = 12$, en este caso las funciones de onda son idénticas ya que el estado subterráneo está tan enterrado que ignora el efecto de la barrera.

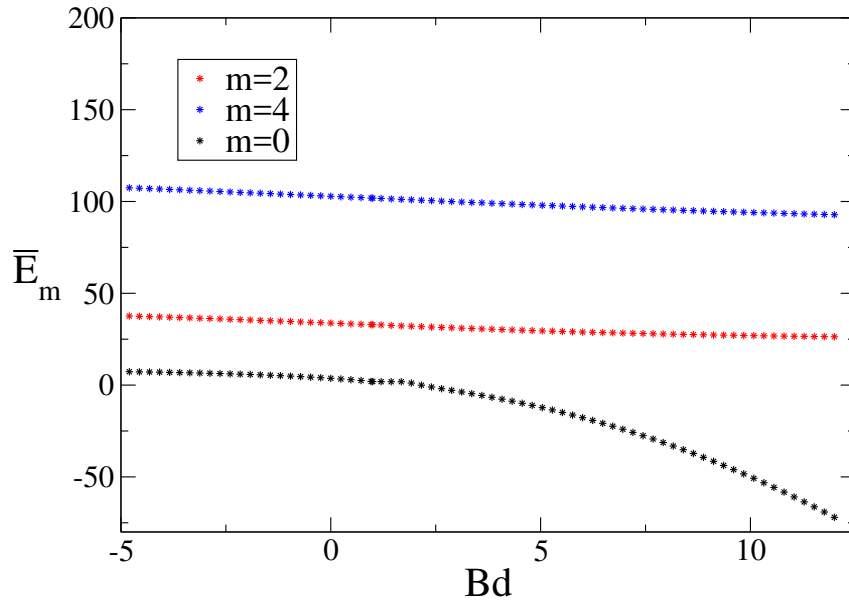


Figura 3.11: Espectro de energía para el sistema caja con barrera, las líneas punteadas de color negro, azul y rojo representan los niveles 0, 2 y 4.

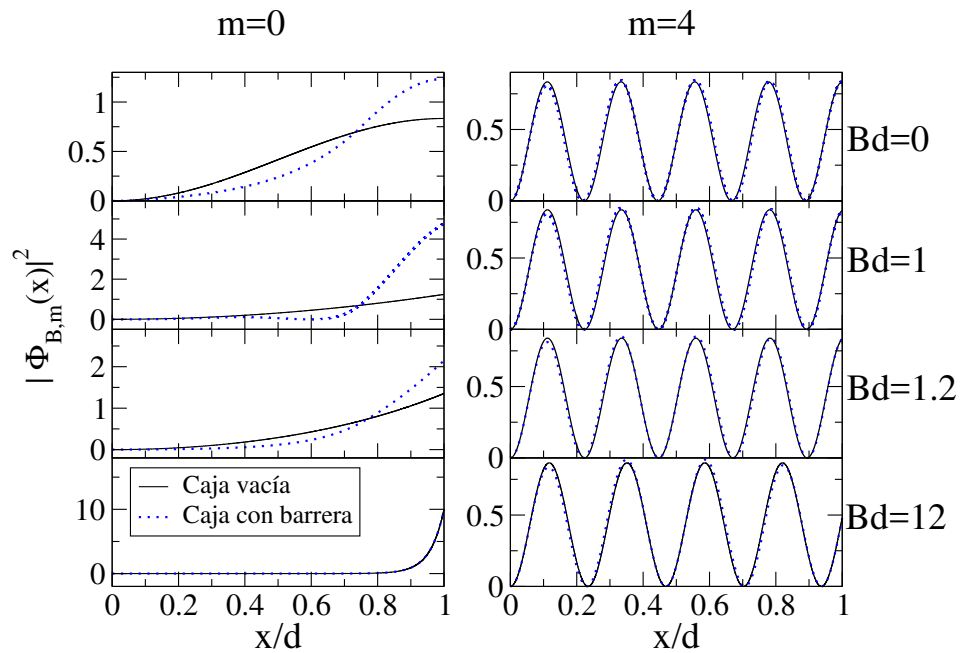


Figura 3.12: Densidades de probabilidad para el estado fundamental y el cuarto nivel de excitación considerando valores de $Bd = 0, 1, 1.2, 12$. La línea segmentada de color azul representa el sistema caja vacía y la línea continua negra el sistema caja con barrera.

En la expansión (3.37) la componente m de los coeficientes $C_{B,m}^\lambda$ que exhibe mayor participación en la formación de un estado corresponde al nivel energético λ selec-

cionado, como se observa en la Fig. 3.13 lo cual indica que la base primaria es correcta. Notemos que la participación de las demás componentes se reduce a medida que Bd o el nivel de excitación aumenta.

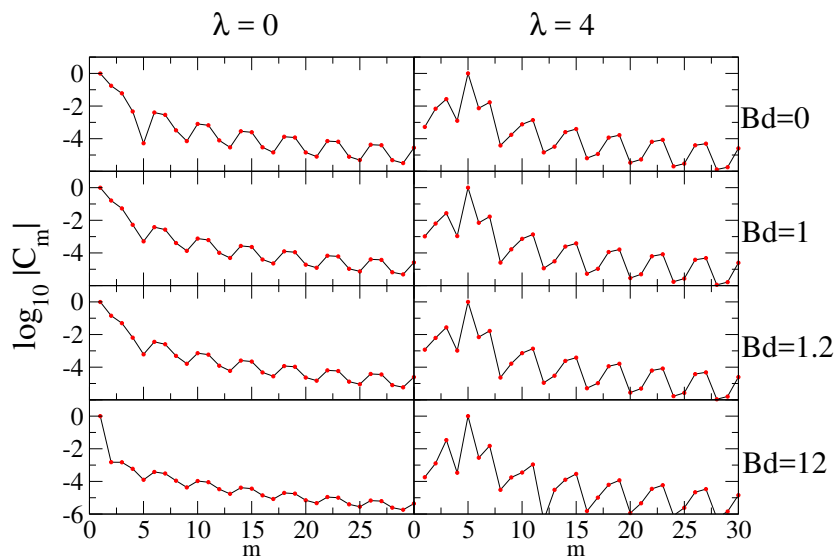


Figura 3.13: Participación de los coeficientes $C_{B,m}^\lambda$ en la formación del estado fundamental y el cuarto nivel de excitación para valores de $Bd=0, 1, 1.2$ y 12 . Los puntos rojos representan la participación de cada componente.

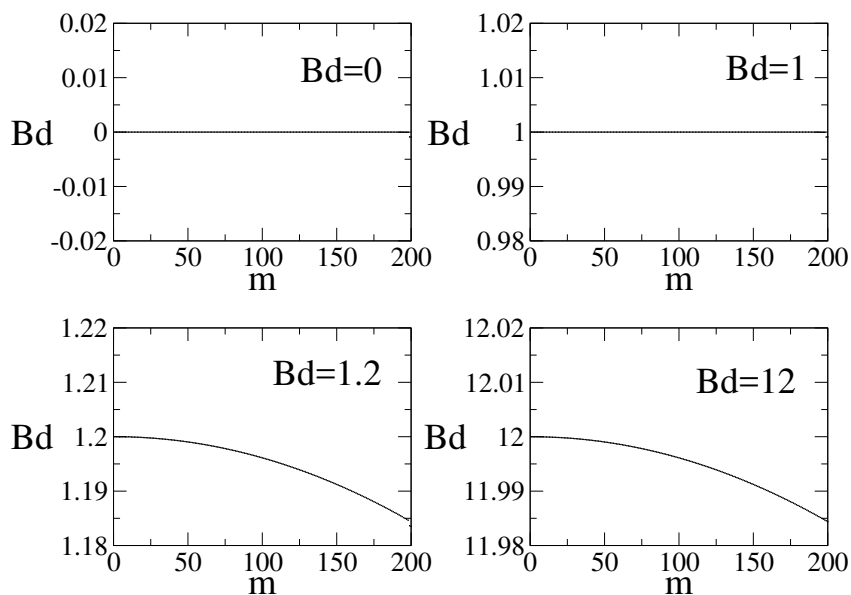


Figura 3.14: Comparación de los métodos directo y diagonalización. La gráfica muestra que los primeros 50 eigenvalores m obtenidos en el método de diagonalización coinciden con el valor estipulado del parámetro de frontera B .

Para confirmar que los resultados obtenidos con el método de diagonalización son correctos, calculamos el eigenespectro de reacción $\{k_{B,m}\}$ para diferentes parámetros de frontera B diagonalizando la matriz Hamiltoniana $H_{m,n}$. Dichos eigenespectros de reacción los sustituimos en la ec. (3.23) donde $k_1=k_{B,m}$, encontrando que para una matriz de tamaño 200×200 los primeros 50 eigenvalores satisfacen el valor asignado del parámetro B , como se observa en la Fig. 3.14. Lo que significa que trabajar con los primeros 50 eigenvalores garantiza un análisis correcto del potencial bajo estudio. Comentamos que al considerar matrices de tamaño superior a 200×200 el número de eigenvalores que coinciden con B aumenta.

Capítulo 4

Sistemas abiertos

En este capítulo acoplamos el sistema caja con barrera con el exterior, explicamos como obtener el parámetro de frontera natural en resonancia, y graficamos un panorama en el que mostramos los parámetros de frontera naturales en resonancia que son realizables en el sistema caja con barrera. Posteriormente calculamos las funciones de dispersión, el espectro de energía y las funciones de onda para un pozo de potencial plano y el sistema caja con barrera en el cual es necesario usar los estados subterráneos para un obtener un análisis correcto.

4.1 El potencial de dispersión

El potencial de dispersión que estudiaremos en este capítulo consiste en un pozo o barrera dentro de un pozo de potencial plano. Ver Figs. 4.1 y 4.2. Este sistema se puede resolver de manera exacta. Usando la misma nomenclatura para los números de onda k_1 , q y k , definidos en la región 1, 2 y 4 respectivamente

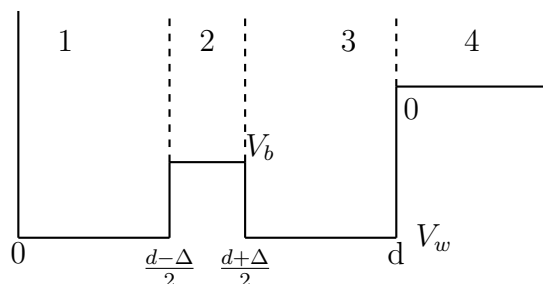


Figura 4.1: Sistema caja con barrera acoplado con el exterior. V_w y V_b etiquetan la profundidad de la caja y la altura de la barrera cuya anchura es Δ .

$$\begin{aligned} k_1 &= \sqrt{k^2 + 2|V_w|}, & \bar{k}_1 &= \sqrt{k^2 + \eta^2} \\ q &= \sqrt{k^2 + 2(|V_w| - V_b)}, & \bar{q} &= \sqrt{k^2 + \xi^2}, \end{aligned} \quad (4.1)$$

donde

$$\eta^2 = 2|V_w|d^2 \quad \text{y} \quad \xi^2 = 2(|V_w| - V_b)d^2.$$

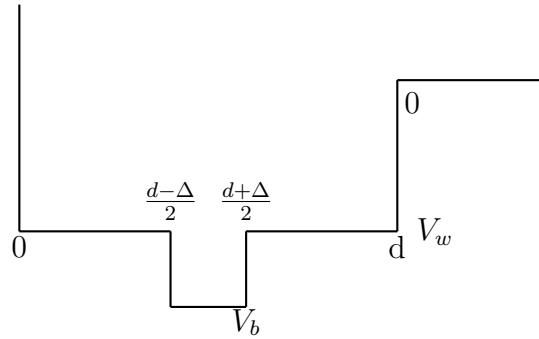


Figura 4.2: Sistema caja con pozo acoplado con el exterior. El parámetro V_b en éste sistema especifica la profundidad del pozo de ancho Δ y V_w representa la profundidad de la caja.

4.2 Funciones de dispersión para los sistemas pozo de potencial plano y caja con barrera

La fase resonante $\tan^{-1} KR_0$ es esencial para calcular las funciones de dispersión y requiere de la matriz de reacción $R_0(k)$, para el sistema caja barrera está dada por el inverso de la ec. (3.25)

$$R_0^b(k) = k_1 \frac{Z^{*2} - Z^2 e^{2iq\Delta}}{ZW^* e^{2iq\Delta} - WZ^*}, \quad (4.2)$$

donde Z y W están dadas en la ec. (3.22). Si consideramos $V_b = 0$, obtenemos $R_0^p(k)$. Los supeíndices b y p etiquetan las matrices de reacción para los sistemas caja con barrera y pozo de potencial plano respectivamente,

$$R_0^p(k) = \frac{\tan(k_1 d)}{k_1}, \quad (4.3)$$

En las figuras 4.3 y 4.4, mostramos las matrices de reacción, $R_0^p(k)$ y $R_0^b(k)$, calculadas para los sistemas seleccionados usando el método directo y la expansión (2.18). Se observa que al considerarse más términos de la expansión dicho resultado mejora y con 1000 términos resulta ser idéntico al obtenido por el método directo.

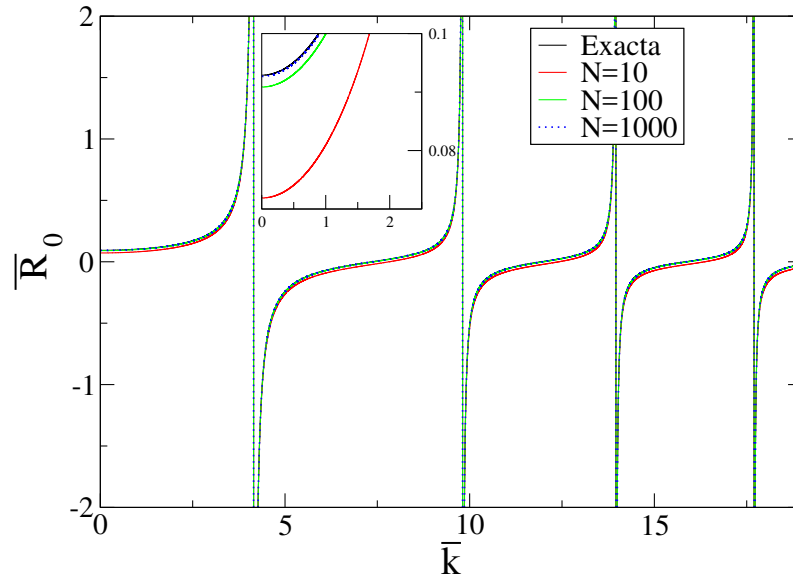


Figura 4.3: Cálculo de la matriz reacción $R_0(k)$ de forma exacta y aproximada en la vecindad de la primer resonancia para el pozo de potencial plano con $\xi = \eta$. N es el número de términos considerados en la serie, la línea negra especifica el cálculo exacto y los tres colores restantes representan el cálculo aproximado. En la parte superior se muestra una ampliación del primer polo de $R_0^p(k)$ con el propósito de observar con más detalle la convergencia del resultado aproximado al exacto.

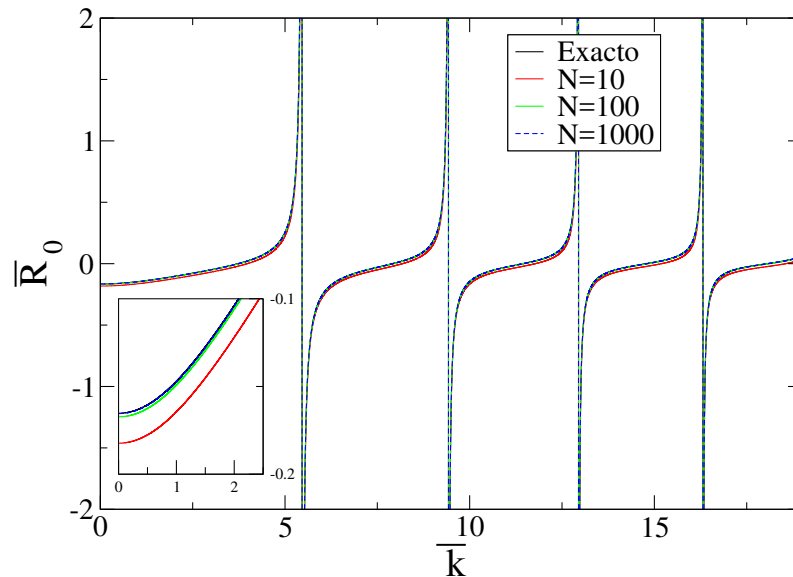


Figura 4.4: Cálculo de la matriz reacción $R_0^b(k)$ de forma exacta y aproximada para el sistema caja con barrera con $\xi = -64.1y \frac{\Delta}{a} = 0.5$. N es el número de términos considerados de la serie, la línea negra especifica el cálculo exacto y los tres colores restantes representan el cálculo aproximado. En la parte inferior izquierda se muestra una ampliación del primer polo con el propósito de observar con mas detalle la convergencia del resultado aproximado al exacto.

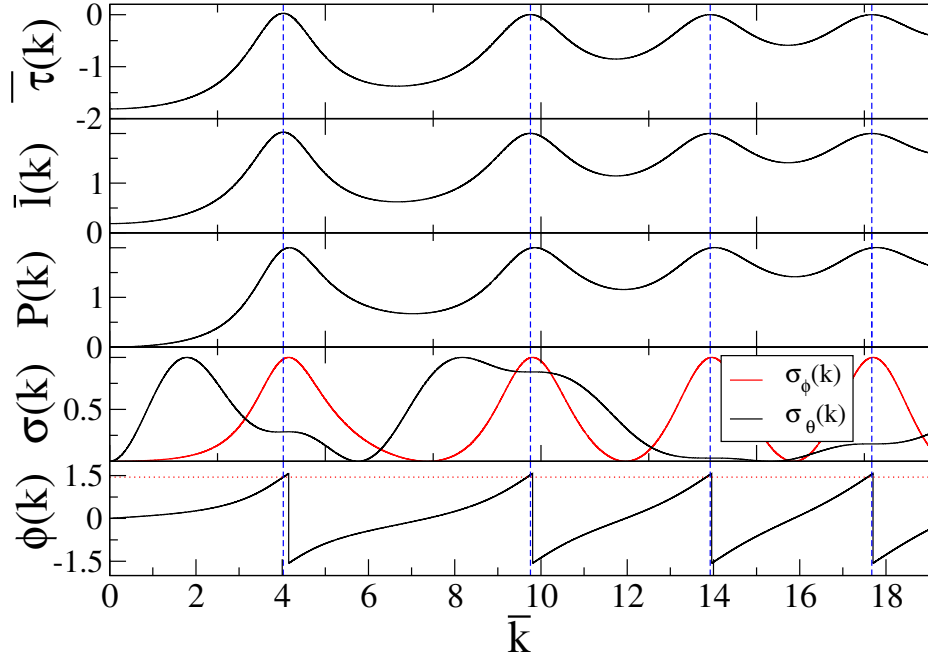


Figura 4.5: Funciones de dispersión para el pozo de potencial plano. Las líneas discontinuas verticales indican el valor máximo en $\tau(k)$ y la línea horizontal roja especifica $\phi = \frac{\pi}{2}$ es decir condiciones de frontera de Neumann

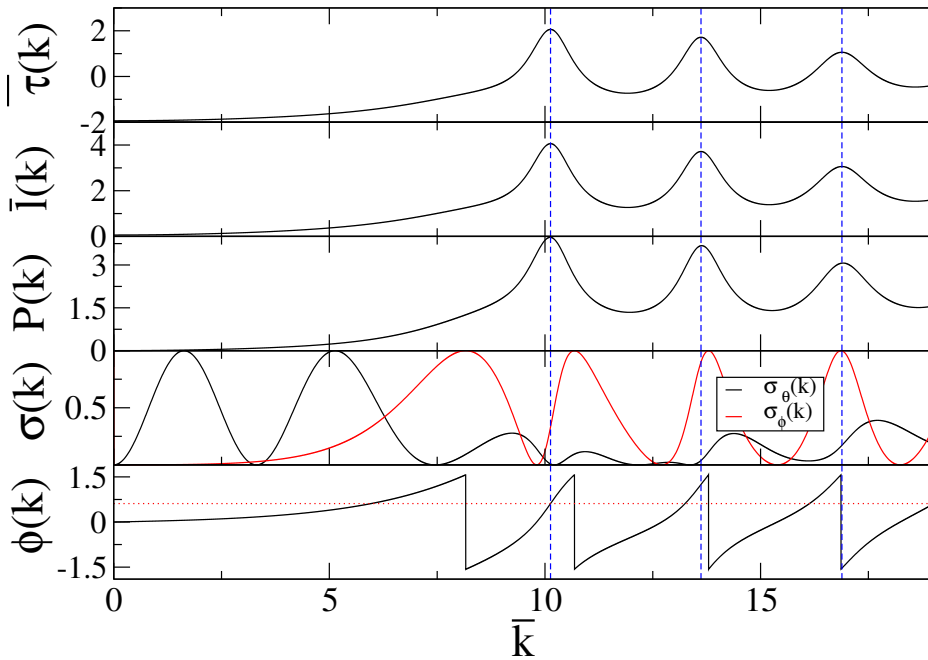


Figura 4.6: Funciones de dispersión para el sistema caja con barrera. Las líneas discontinuas verticales indican el valor máximo en $\tau(k)$ y la línea horizontal roja especifica el valor de ϕ en el que tiene lugar la primer resonancia, aproximadamente $\phi = \frac{\pi}{4}$.

En las figuras 4.5 y 4.6 graficamos las funciones de dispersión $\tau(k)$, $l(k)$, $P(k)$, $\sigma_\theta(k)$ y $\sigma_\phi(k)$ para los sistemas pozo de potencial plano y caja con barrera, respectivamente. Dichas cantidades fueron calculadas con las expresiones de la Sección 2.2. Los resultados en ambos sistemas muestran que las cantidades $\tau(k)$, $l(k)$ y $P(k)$ exhiben sus máximos locales aproximadamente en el mismo punto indicado por las líneas discontinuas azules.

En el pozo de potencial plano, todos los máximos locales correspondientes a $l(k)$ y $\tau(k)$ ocurren aproximadamente en $\phi = \frac{\pi}{2}$ como lo especifica la línea horizontal roja, es decir cercano a condiciones de frontera de Neumann. El primer máximo del sistema caja con barrera representado por la línea horizontal punteada se encuentra en $\phi \approx \frac{\pi}{4}$. Es decir el estado resonante cumple condiciones cercanas a Neumann, como en el caso de la caja vacía. Ahondaremos en este punto en las siguientes secciones. Notemos que los demás máximos locales se desplazan hacia $\phi = \frac{\pi}{2}$.

La diferencia notable que exhiben $\sigma_\theta(k)$ y $\sigma_\phi(k)$ (curvas de color negro y rojo respectivamente), es normal [7–11, 14] se debe a que $\sigma_\theta(k)$ incluye la fase de la esfera dura y $\sigma_\phi(k)$ solo contiene la parte resonante. Los máximos de $\sigma_\phi(k)$ para el pozo de potencial plano ocurren en $\phi = \frac{\pi}{2}$, lo cual está de acuerdo con lo establecido en la teoría del Breit-Wigner que afirma que los cambios abruptos en la sección eficaz suceden para múltiplos enteros de $\phi = \frac{n\pi}{2}$.

4.3 Cálculo del parámetro de frontera natural en resonancia B^*

En física atómica, nuclear y de partículas, con frecuencia encontramos la situación donde la sección transversal dispersada de una onda parcial exhibe un pico pronunciado o un cambio rápido y apreciable en la amplitud de dispersión con la energía de la partícula. Dicho pico o cambio abrupto se le denomina resonancia dispersada [7, 8]. Comúnmente las resonancias son caracterizadas usando la sección transversal, específicamente la parte resonante σ_ϕ , que siempre manifiesta sus máximos en $(n\pi)/2$ lo que significa que las resonancias solo tienen lugar para esos valores.

En este trabajo caracterizamos las resonancias usando el tiempo de demora $\tau(k)$, que está directamente conectado con la existencia de los estados meta estables o la captura temporal del proyectil en la región de reacción [15, 17]

$$\tau(k) = \frac{\mu}{\hbar k}(l(k) - 2d), \quad l(k) \equiv 2\frac{d\phi}{dk}.$$

Específicamente determinamos las resonancias usando el recorrido efectivo $l(k)$, debido a que prácticamente depende de la fase resonante ϕ y sus máximos locales con el número de onda k son los mismos que ocurren en $\tau(k)$.

Definimos el parámetro de frontera natural como el valor de la derivada logarítmica de la función de onda $\psi(k; x)$ en $x = d$ en resonancia, es decir cuando $l(k)$ alcanza

su máximo local. Denotaremos con k_n^* al valor del número de onda en la resonancia número n . El cálculo de dicho parámetro está relacionado directamente con R_0 que se puede determinar de forma exacta si el sistema bajo estudio permite usar el método directo, de lo contrario se usa la expansión (2.17). Concretamente el cálculo de B^* se sintetiza en dos pasos,

1. Calcular la fase

$$\phi(k) = \tan^{-1}(kR_0(k)),$$

usarla para calcular $l(k)$ e identificar k^* que corresponde al valor donde $l(k)$ alcanza un máximo local.

2. Despejar B^* en

$$B^* = \frac{1}{R_0(k^*)}.$$

Si $B^*d > 1$ es necesario utilizar el estado subterráneo.

4.3.1 Panorama de los parámetros B^* en el sistema caja con barrera y sus variantes

Usando las expresiones $R_0(k)$ y el procedimiento descrito para calcular B^* , se obtiene el panorama de la Fig. 4.7, el cual nos muestra los parámetros de frontera en resonancia que ocurren en el sistema caja con barrera y sus dos variantes en función de los parámetros $\frac{\Delta}{d}$ y ξ .

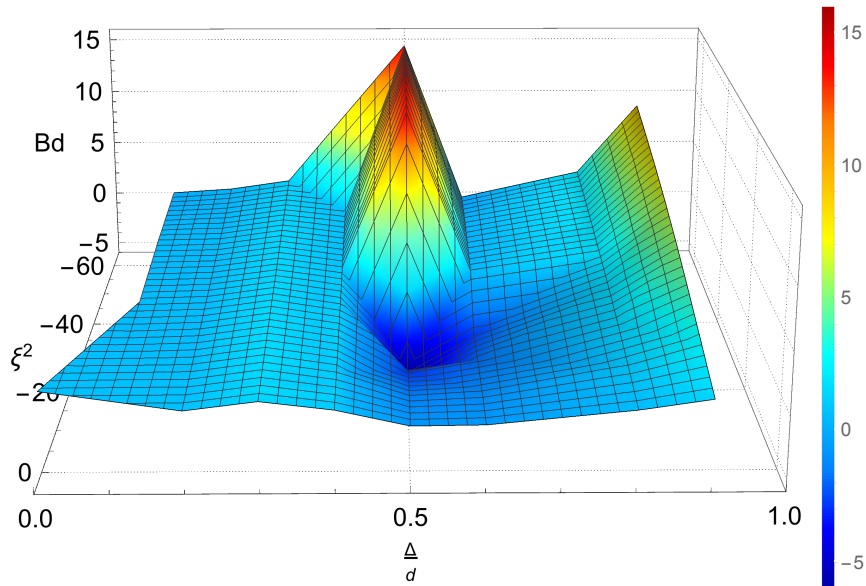


Figura 4.7: Panorama frontal. La barra vertical “térnica” ilustra el cambio del parámetro de frontera natural en resonancia B^* en función de los parámetros ξ^2 y Δ/d .

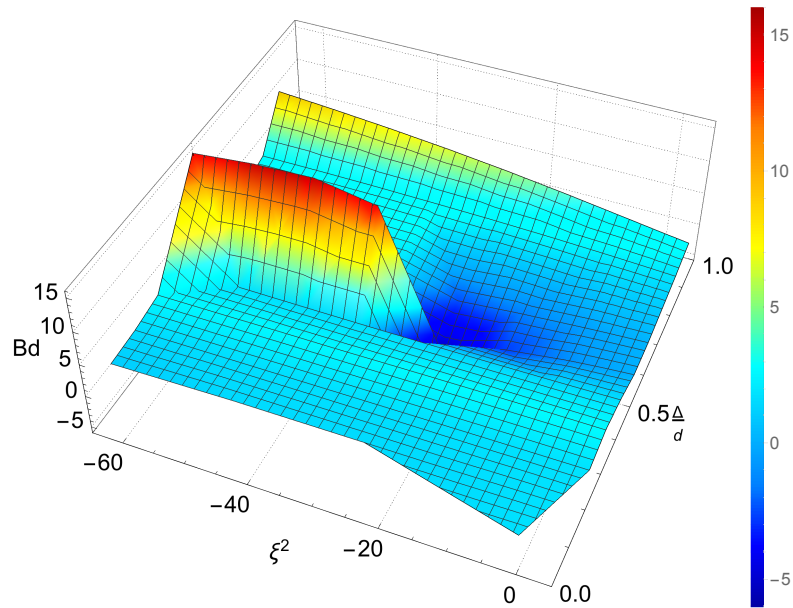


Figura 4.8: Otra perspectiva del panorama de parámetros naturales B supercríticos localizados en la “montaña”.

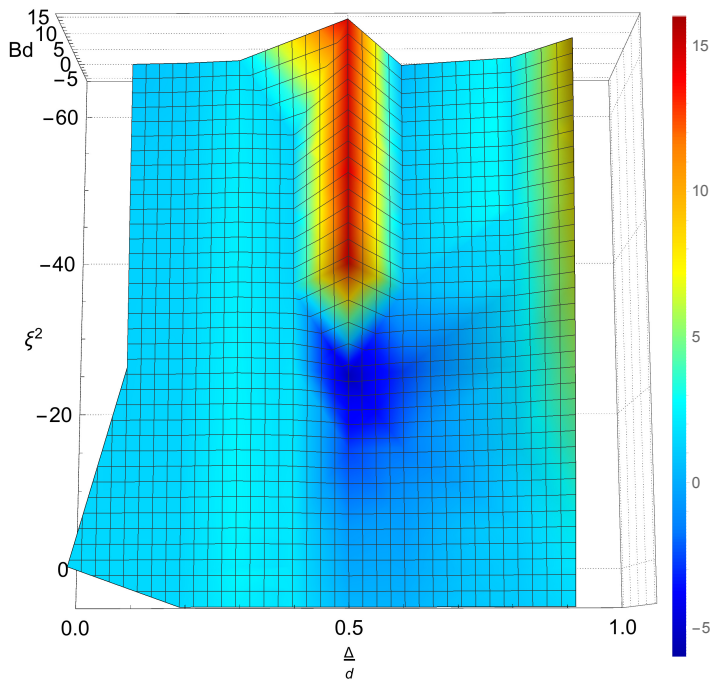


Figura 4.9: Panorama visto desde arriba.

El panorama está dividido en cinco regiones que son fáciles de distinguir en la Fig. 4.7 y denominaremos de la siguiente forma:

- Roja o Supercrítica: Se localizan los parámetros de frontera naturales $Bd \gg 1$.
- Amarilla-verde: Contiene valores $Bd > 1$.
- Aguamarina o crítica: Sobresalen los parámetros de frontera aproximadamente iguales al punto crítico.
- Azul celeste o subcrítico: Se ubican los sistemas que aproximadamente obedecen condiciones de frontera de Neumann.
- Azul oscuro: Incluye todos los parámetros de frontera negativos.

Además, esta figura permite observar la diferencia entre los tonos aguamarina y celeste, siendo el último color el que domina el área del panorama, lo que significa que la mayoría de sistemas se aproximan a condiciones de frontera de Neumann. Destacando que tienen lugar en todo el dominio de ξ^2 y Δ/d .

Los parámetros de frontera supercríticos, ocurren en la vecindad de $\frac{\Delta}{d} = 0.5$; dichos parámetros sólo son posibles en el sistema caja con barrera, con la altura de la barrera superior a la magnitud del pozo, como se observa en la Fig. 4.8. Igualmente las regiones aguamarina y amarillo-verde son poco abundantes, ocurren aproximadamente para $\xi^2 < -20$ y alrededor de $\frac{\Delta}{d} = 0.5$ y 1.

El panorama presentado nos provee de una gran variedad de valores de B^* , de los cuales seleccionamos dos sistemas representativos. El primero es el pozo de potencial plano cuyo B^* está por debajo del punto crítico y el segundo es el sistema caja con barrera, ilustrado en la Fig. 4.10 en el que es necesario aplicar los estados subterráneos. Ambos sistemas se localizan respectivamente en el pico azul aguamarina y la región roja de la 4.8, sus parámetros están registrados en la Tab. 4.1.

Sistema	ξ^2	$\frac{\Delta}{d}$	\bar{k}^*	B^*d
Pozo de potencial plano	η^2	0	4.0251	0.51
Caja con barrera	-64.1	0.5	10.1294	14.16

Tabla 4.1: Parámetros ξ^2 , $\frac{\Delta}{d}$, k^* y B^*d para los sistemas seleccionados pozo de potencial plano y caja con barrera.

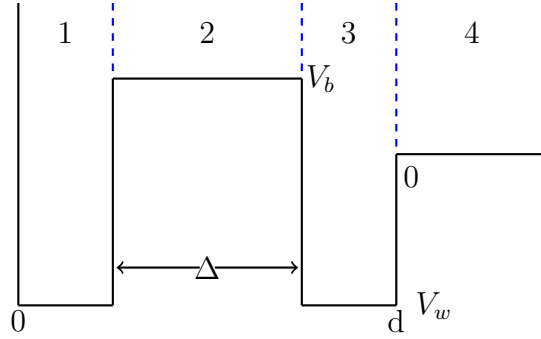


Figura 4.10: Sistema caja con barrera seleccionado del panorama. La barrera tiene una altura V_b superior a la magnitud de la profundidad $|V_w|$ y su ancho Δ corresponde a la mitad del ancho d de la caja.

4.4 Funciones de onda para los sistemas pozo de potencial plano y caja con barrera

4.4.1 Sistema caja con barrera

Método directo

La función de onda en la región 4 o externa, ver Fig. 4.10, tiene la forma

$$\psi_4(x) = e^{-ikx} + Se^{ikx}. \quad (4.4)$$

Haciendo continuidad en la frontera, $x = d$, para las funciones de onda de las regiones 3 y 4; y sus correspondientes derivadas se obtiene

$$\begin{aligned} \psi_3(d) &= \psi_4(d) \\ A_3 &= e^{-ikd} + Se^{ikd}, \end{aligned} \quad (4.5)$$

$$\begin{aligned} \psi'_3(d) &= \psi'_4(d) \\ k_1 A_2 &= -ik(e^{-ikd} - se^{ikd}), \end{aligned} \quad (4.6)$$

usando la derivada logarítmica

$$\begin{aligned} \frac{\psi'_3(a)}{\psi_3(a)} &= \frac{\psi'_4(a)}{\psi_4(a)} \\ \frac{k_1 A_2}{A_3} &= \frac{-ik(e^{-ikd} - Se^{ikd})}{e^{-ikd} + e^{ikd}} \end{aligned} \quad (4.7)$$

y despejando S e identificando que la razón del lado izquierdo del igual es $R_0^{-1}(k)$, obtenemos

$$S = e^{-2ikd} \left(\frac{1 + ikR_0(k)}{1 - ikR_0(k)} \right). \quad (4.8)$$

El resultado anterior, coincide con la ec. (2.16) de la TMR. Los coeficientes A_3 y A_2 se obtienen sustituyendo S en las ec.s (4.5) y (4.6),

$$A_3 = e^{-ikd} + Se^{ikd} \quad (4.9)$$

$$A_2 = -\frac{ik}{k_1} (e^{-ikd} - Se^{ikd}). \quad (4.10)$$

Sustituyendo estos coeficientes en las ecuaciones (B.7), (B.5) y (B.8), se obtienen los tres coeficientes restantes, que están dados por

$$C = \frac{e^{iq\frac{a+\Delta}{2}}}{2} \left[-\alpha + k\beta R_0 - \frac{k}{iq} (\beta + kR_0\alpha) \right], \quad (4.11)$$

$$D = \frac{e^{-iq\frac{a+\Delta}{2}}}{2} \left[-\alpha + k\beta R_0 + \frac{k}{iq} (\beta + kR_0\alpha) \right], \quad (4.12)$$

$$A_1 = \frac{2iqCe^{-iq(\frac{a-\Delta}{2})}}{Z^*}. \quad (4.13)$$

Introduciendo estos coeficientes en las ecuaciones (3.14), (3.15) y (3.16) se obtiene la función de onda.

Método TMR

En este método la función de onda $\psi(k; x)$ se calcula expandiendo los coeficientes $A_\lambda^B(k)$, en términos de la eigenfunción reacción $\Phi_{B,\lambda}(x)$ que se determinó aplicando el método de diagonalización descrito en la Sección 3.3.

$$\psi(k; x) = \sum_{\lambda=1} A_\lambda^B(k) \Phi_{B,\lambda}(x), \quad (4.14)$$

los coeficientes $A_\lambda^B(k)$ se determinan sustituyendo la información correspondiente en (2.19); comentamos que los coeficientes $A_\lambda^B(k)$ también se pueden determinar usando la ec. (3.16) debido que el sistema es soluble de forma exacta. Es importante apreciar que la función de onda en ambos métodos se obtuvo utilizando la matriz de reacción.

4.4.2 Pozo de potencial plano

Para este sistema el procedimiento es sencillo, en el método directo la función de onda está dada por

$$\psi = A_1 \sin(k_1 x). \quad (4.15)$$

Haciendo continuidad en $x = d$ y sustituyendo la ec. (4.8) que es un resultado general independiente del sistema, obtenemos el coeficiente A_1

$$\begin{aligned} A_1 &= \frac{e^{-ik_1d} + S e^{ik_1d}}{\sin(k_1d)} \\ &= -2i \frac{(k/k_1)e^{-ikd}}{\cos(k_1d) - i(k/k_1)\sin(k_1d)} \end{aligned} \quad (4.16)$$

La eigenfunción de reacción en este sistema corresponde a la base primaria ec. (3.5), por lo tanto la función de onda está dada por

$$\psi(k; x) = \sum_{\lambda=1} A_{\lambda}^B(k) u_{B,\lambda}(x) \quad (4.17)$$

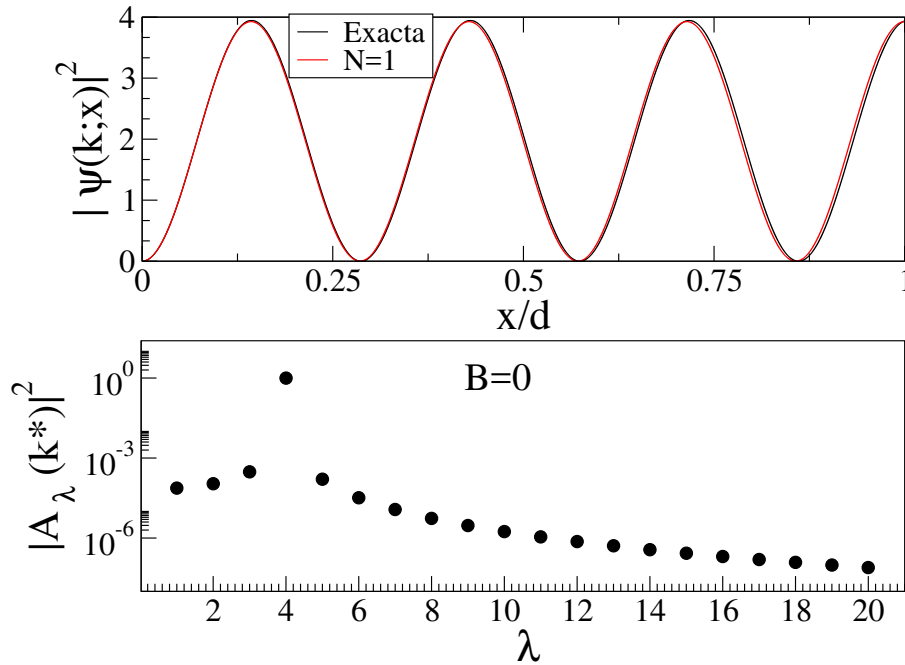


Figura 4.11: Densidad de probabilidad y participación para el pozo de potencial plano. En el panel superior se grafican las funciones de onda para $B = 0$, aplicando los métodos, directo y TMR. En el panel inferior se muestra la participación de los coeficientes $A_{\lambda}(k)$ en la formación del estado resonante que corresponde a $m=3$.

La fórmula del Breit-Wigner estipula que las funciones de onda en resonancia siempre cumplen condiciones de frontera de Neumann, es decir $B = 0$. En ese sentido proponemos calcular las funciones de onda resonantes para ambos sistemas usando la TMR y los parámetros de la Tab. 4.1, excepto B^* que supondremos cero. Para verificar si los resultados obtenidos son correctos comparamos con los resultados obtenidos

aplicando el método directo en el que consideramos el valor de k^* correspondiente a cada sistema.

Los paneles superiores de las figuras 4.11 y 4.12 nos muestran las funciones de onda para el pozo de potencial plano y el sistema caja con barrera, ambas funciones entran en resonancia en el tercer nivel de excitación. En las figuras 4.13 y 4.14, presentamos el espectro de energía para cada sistema respectivamente. La función de onda obtenida por el método directo para el pozo de potencial plano es muy similar a la determinada con la ec. (4.17) de la cual solo consideramos el término resonante, $\lambda = 4$. Dicho parecido ocurre debido a que el verdadero B^* de este sistema es muy cercano a cero. En el sistema caja con barrera las funciones de onda obtenidas con $B^* = 0$, requieren una cantidad considerable de términos de la expansión (4.14), debido a que B^* no cumple condiciones de frontera de Neumann y $B^*d \gg 1$, lo que hace necesario considerar los estados subterráneos.

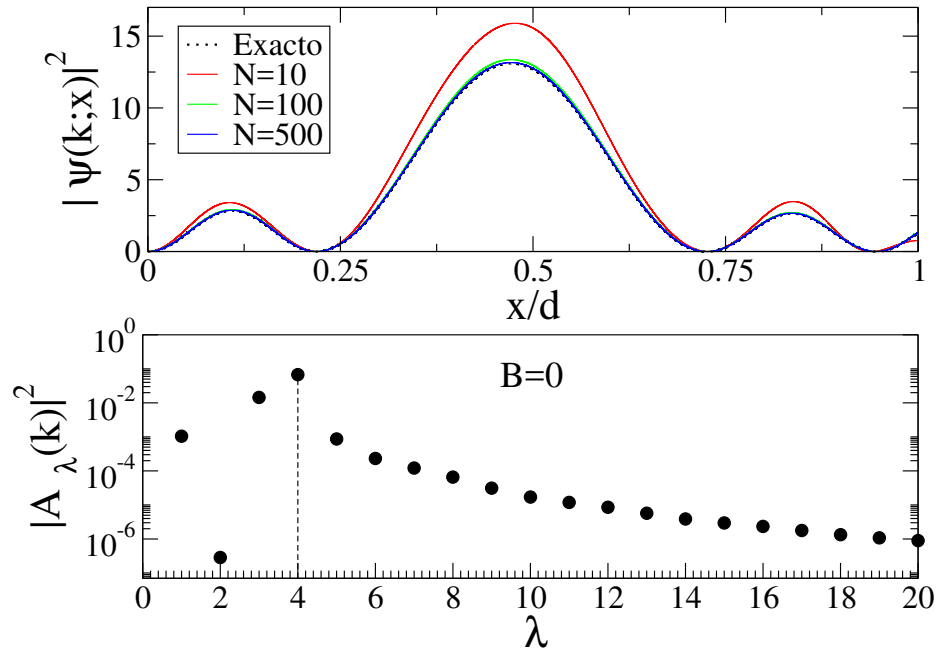


Figura 4.12: Densidad de probabilidad y participación para el sistema caja con barrera. En el panel superior se grafican las funciones de onda para $B = 0$, aplicando los métodos, directo y TMR. En el panel inferior se muestra la participación de los coeficientes $A_\lambda(k)$ en la formación del estado resonante correspondiente al nivel $m=3$.

En los paneles inferiores de las figuras, 4.11 4.12, mostramos la participación de los coeficientes $A_\lambda(k)$ en la formación del tercer estado de excitación. La cuarta componente de ambos sistemas es la que manifiesta mayor contribución. Respecto al pozo de potencial plano la participación de las demás componentes es casi nula y es correcto afirmar que solo las primeras 10 componentes contribuyen en la formación del estado. En el sistema caja con barrera es evidente que la segunda componente no par-

tipica, pero las demás componentes sí contribuyen en la formación del estado, lo cual significa que si $B = 0$ es necesario considerar una cantidad de términos considerable para reproducir el resultado exacto.

Los resultados obtenidos considerando $B^* = 0$ indican que la suposición $B = 0$, es funcional solo para sistemas con B^* cercana a condiciones de frontera de Neumann, en los demás sistemas dicha suposición repercute en considerar un número gigante de términos de la expansión (4.14), lo cual se reduce a un resultado numérico que nos lleva a una comprensión limitada del sistema bajo estudio.

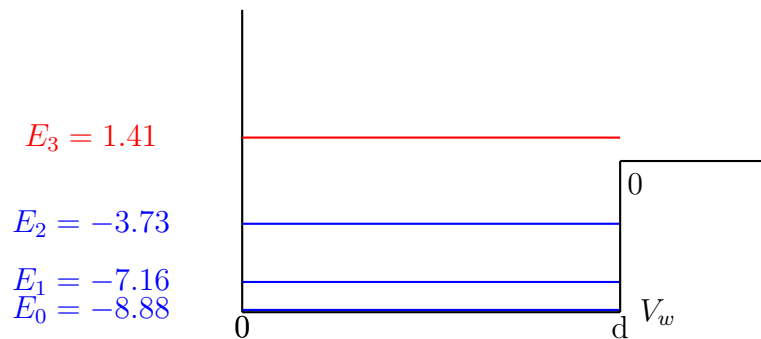


Figura 4.13: Espectro de energía para el pozo de potencial plano. Las líneas horizontales especifican los niveles energéticos del sistema, la línea de color rojo representa el nivel resonante.

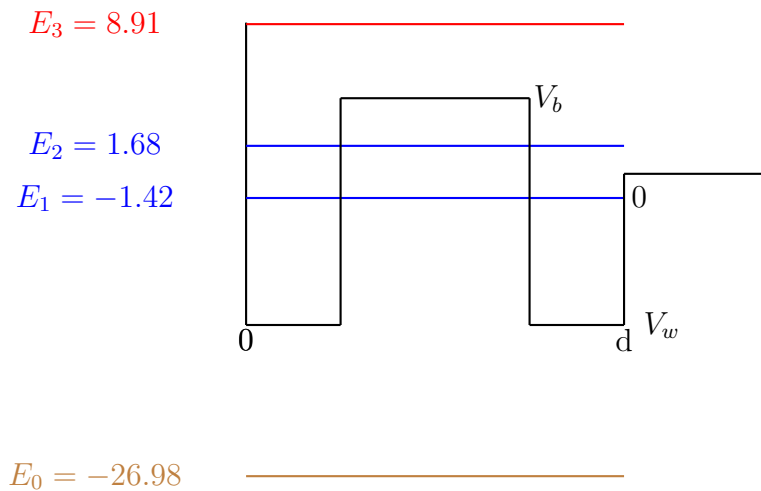


Figura 4.14: Espectro de energía para el sistema caja con barrera. Las líneas horizontales especifican los niveles energéticos, las líneas roja y marrón representan el estado resonante y el estado subterráneo respectivamente.

4.5 Aproximación a un solo nivel en la función de reacción y la densidad de probabilidad

En la vecindad de una resonancia k^* la función de reacción $R_B(k)$ con un B^* se puede aproximar a un solo término λ que coincide con $k^* = k_{B^*,\lambda}$. Por lo tanto podemos escribir

$$R_B(k) = R_B^{(1)}(k) + r_\lambda(k) \quad (4.18)$$

donde

$$R_B^{(1)} = \frac{|\Phi_{B,\lambda}(d)|^2}{k_{B,\lambda}^2 - k^2}. \quad (4.19)$$

y $r_\lambda(k)$ representa el resto de términos de la expansión (2.8). La aproximación a un nivel para la función $R_B(k)$ en el pozo de potencial plano es bastante similar al resultado exacto. En el sistema caja con barrera el resultado solo coincide en la vecindad de la resonancia que tiene lugar en $k^* = 10.129$ como se muestra en la Fig. 4.15.

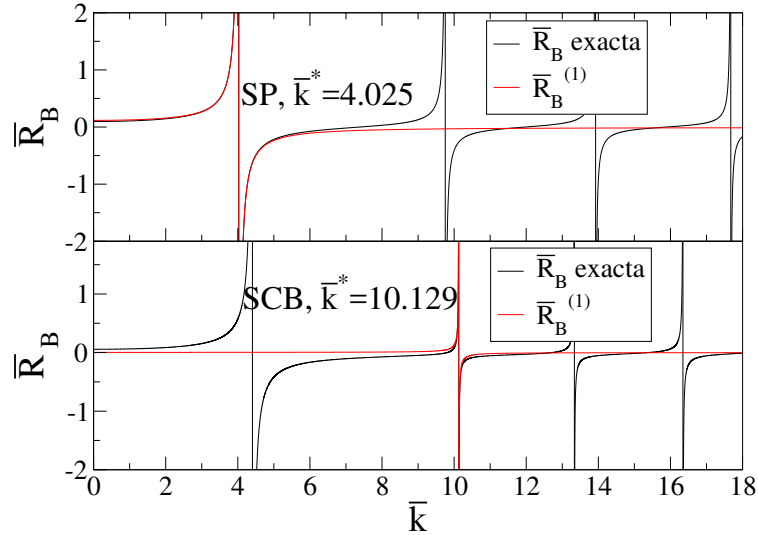


Figura 4.15: Aproximación a un nivel de la función de reacción $R_B^{(1)}$ para el pozo de potencial plano y el sistema caja con barrera, la línea roja indica el cálculo aproximado y la línea de color negro el cálculo exacto. Los valores de k^* corresponde a la resonancia.

Si el número de onda k coincide con uno de los eigenvalores de reacción, es decir $k_{B,\nu}$. Entonces en la expansión de los coeficientes $A_\lambda^B(k)$ solo sobrevive el término resonante. Entoces la ecuación (2.20b) adopta la forma:

$$A_\lambda^B(k \approx k_{B,\nu}) \approx \frac{-2ike^{-ikd}}{1 + (B - ik)[R_B^{(1)}(k) + r_\lambda(k)]} \times \frac{\Phi_{B,\lambda}(d)}{k_{B,\lambda}^2 - k^2} \quad (4.20)$$

Sustituyendo la ec. 4.19 en el primer factor de (4.20), con $k = k_{B,\nu}$ y haciendo algebra sencilla obtenemos

$$A_\lambda^B(k_{B,\nu}) = \frac{-2ik_{B,\lambda}e^{-ik_{B,\lambda}d}}{(B - ik_{B,\lambda})\Phi_{B,\lambda}(d)}\delta_{\lambda,\nu}. \quad (4.21)$$

Introduciendo (4.18) en (2.2), la densidad de probabilidad de la función de onda dispersada resonante en la región de reacción está dada por

$$|\psi(k_{B,\lambda}, d)|^2 = |A_\lambda^B\Phi_{B,\lambda}(d)|^2 = \frac{4k_{B,\lambda}}{B^2 + k_{B,\lambda}^2} \quad (4.22)$$

Dicha aproximación es correcta y lo confirman los resultados mostrados en las Figs. 4.16 y 4.17 en los que el estado resonante corresponde a $\lambda = 3$, las densidades de probabilidad son idénticas a las calculadas con el método directo, lo que indica que es de suma importancia identificar el B^* y desechar la suposición tradicional de que las funciones de onda en resonancia siempre cumplen condiciones de frontera de Neumann. Por otro lado el uso de esta aproximación nos ofrece una mayor comprensión del sistema bajo estudio, debido a que un solo término de la suma se traduce en una expresión analítica aproximada que podemos manipular.

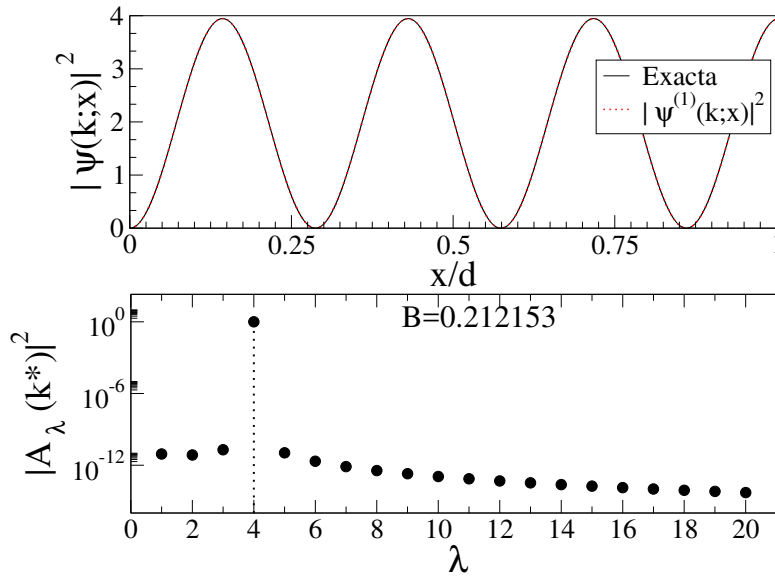


Figura 4.16: Densidad de probabilidad y participación para el pozo de potencial plano considerando el parámetro de frontera natural en resonancia B^* . En el panel superior se muestran las densidades de probabilidad calculadas por el método exacto y la aproximación a un nivel para $m = 3$. En el panel inferior se muestra la participación en la formación del estado resonante.

En los paneles inferiores de las figuras, 4.16 y 4.17, se observa que la participación de los coeficientes $A_\lambda(k)$ en la formación del estado resonante, solo se manifiesta en la cuarta componente que exhibe un aumento relevante respecto a las participaciones

presentadas en la sección anterior, este hecho reafirma la importancia de identificar B^* .

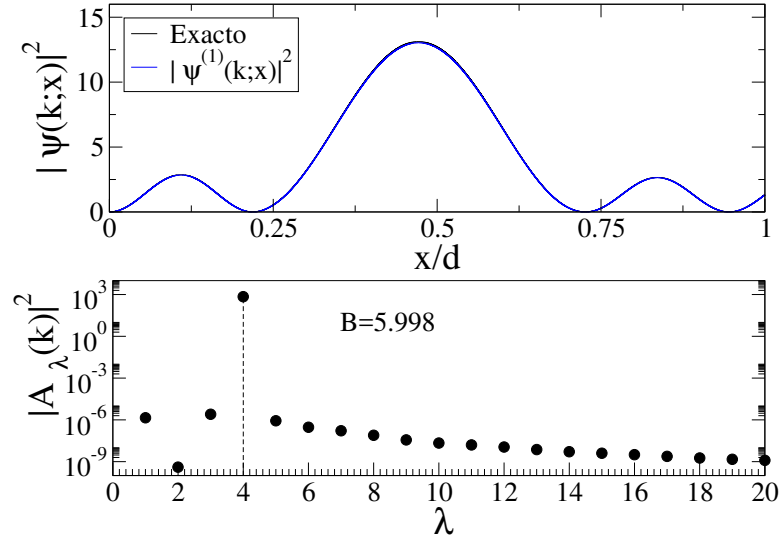


Figura 4.17: Densidad de probabilidad y participación para el sistema caja con barrera considerando el parámetro de frontera natural en resonancia B^* y el estado subterráneo. En el panel superior se muestran las amplitudes de probabilidad calculadas por el método exacto y la aproximación a un nivel para $m = 3$. En el panel inferior se muestra la participación en la formación del estado resonante.

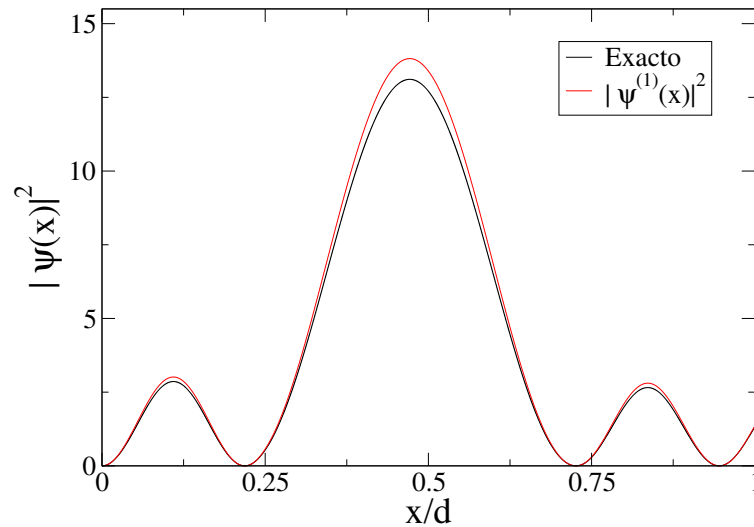


Figura 4.18: Densidad de probabilidad y participación para el sistema caja con barrera considerando el parámetro de frontera natural en resonancia B^* e ignorando el estado subterráneo.

La existencia del estado subterráneo completa la base primaria $\{u_{B,m}\}$, en la que se expande la eigenfunción de reacción $\Phi_B^\lambda(x)$. Si ignoramos el estado subterráneo el

espectro sufre una reorganización en la que el primer estado de excitación, ocupará el lugar del estado fundamental de energía y su función de onda exhibirá un nodo lo cual contradice el Teorema de Sturm-Liouville. Para ilustrar lo descrito, en la Fig. 4.18 mostramos la función de onda para el nivel resonante que corresponde a $\lambda = 2$ sin el estado subterráneo. Se observa que la función de onda de color rojo se aproxima al resultado exacto pues el estado subterráneo está muy enterrado y su contribución en la formación del estado resonante es mínima pero no despreciable.

Capítulo 5

Conclusiones

En este trabajo hemos empleado la teoría de la matriz de reacción en potenciales centrales para obtener un mejor entendimiento entre las características de las funciones de dispersión y las características espectrales del potencial dispersivo. Para este efecto en el Capítulo 2 hacemos una revisión del formalismo de la teoría de matriz de reacción. Una particularidad de nuestro trabajo es la consideración de condiciones de frontera de Robin especificadas por el parámetro de frontera B . El recíproco de la derivada logarítmica evaluada en la frontera virtual es la función de reacción R_0 que conecta la región interna con la región asintótica, de este modo es una función imprescindible para obtener la fase resonante ϕ , las funciones dispersivas, el espectro de energía y la función de onda en resonancia.

En el Capítulo 3 centramos nuestra atención en los sistemas cerrados. La libertad de trabajar con condiciones de frontera de Robin, nos permitió considerar en el contexto matemático diferentes valores de B , observando que para valores $Bd > 1$, el eigenspectro presentaba un salto y la función de onda de mínima energía exhibía un nodo; hecho que contradice el Teorema de Sturm-Liouville el cual determina que la función de onda correspondiente al estado de mínima energía no debe tener nodos. Cierta paradoja se soluciona considerando energías por debajo del fondo del potencial.

En el Capítulo 4 trabajamos con sistemas abiertos; en concreto analizamos el pozo de potencial plano y el sistema caja con barrera. Inicialmente calculamos las funciones de dispersión. En las Figs. 4.5 y 4.6, se observó que los máximos locales del tiempo de demora y el recorrido efectivo ocurren aproximadamente en el mismo punto y no coinciden con los máximos de la sección eficaz de la fase resonante, cuya fase ϕ es $\frac{n\pi}{2}$ tal y como lo establece la fórmula de Breit-Wigner. Nosotros consideramos que una resonancia se puede definir como un cambio abrupto y apreciable en el tiempo de demora, y demostramos numéricamente que no ocurre siempre en $\phi = \frac{n\pi}{2}$.

Posteriormente, elaboramos un panorama en el que se mostraron los parámetros de frontera naturales en resonancia realizables en el sistema caja con barrera y sus dos variantes. Observando que la mayoría de las funciones de onda en resonancia cumplen de forma aproximada condiciones de frontera de Neumann. Es interesante

notar que en la vecindad de $\frac{\Delta}{d} = \frac{1}{2}$ se encuentran parámetros de frontera naturales mayores, menores e iguales al punto crítico. En concreto los potenciales con $B^*d > 1$ corresponden al sistema caja con barrera cuya barrera siempre está por fuera de la caja, mientras que la barrera contenida en la caja obedece condiciones de frontera de Neumann y el sistema caja con pozo tiene lugar para $B^*d < 0$.

En la Sección 4.2 usamos la función de dispersión $l(k)$ para determinar el parámetro de frontera natural B^* que especifica la condición de frontera con la que se acopla la onda dispersada. Dicho parámetro es indispensable para obtener una expresión analítica aproximada a un nivel en la que solo se considera el estado resonante. Con la aproximación a un nivel estudiamos el pozo de potencial plano y el sistema caja con barrera que incluye el estado subterráneo, para los cuales calculamos la función R_B y su respectiva función de onda encontrando que estos resultados coinciden con los cálculos exactos como se observa en las Figs. 4.15, 4.16 y 4.17. Es evidente entonces que la aproximación a un nivel facilita la comprensión del potencial bajo estudio.

En concreto concluimos que:

- La Teoría de la Matriz de Reacción es útil para lograr un entendimiento básico del fenómeno de dispersión cuántica.
- La energía de resonancia es igual a la energía para la cual el tiempo de demora es un máximo local. Estos máximos en general no coinciden con los máximos de la parte resonante de la sección eficaz, en conflicto con lo que usualmente se piensa.
- Para obtener expresiones analíticas a **un nivel** de la matriz de reacción elegimos el valor de B igual al que obedece la función de onda dispersada en su primera resonancia, haciendola coincidir con uno de los eigenestados de reacción.
- Cálculos a un nivel coinciden bastante bien con los exactos siempre y cuando el valor de B sea menor que un valor crítico B_c . Para B mayor a B_c el estado fundamental de reacción mostraba un nodo, en contradicción con el **Teorema de Sturm-Liouville**.
- Resolvimos la contradicción notando que para B mayores a B_c la ecuación de Schrödinger permite una solución con eigenenergía por debajo del fondo del potencial. Para $B = B_c$ la energía del estado fundamental es cero. La inclusión de estos **nuevos estados fundamentales** completan el conjunto de eigenestados de reacción y permiten obtener expresiones a un nivel que corresponden muy bien con las exactas.

Trabajo a futuro

- ¿Se pueden realizar experimentalmente los nuevos estados fundamentales en sistemas cerrados?

-
- Explorar un realización experimental propuesta por el prof. Sadurní de estados subterráneos y de energía cero en el ámbito de cavidades electromagnéticas.
 - Aplicar el formalismo a potenciales paradigmáticos en la física nuclear. ejem., Wood-Saxon, Pösch Teller, Morse, etc.
 - ¿Implicaciones físicas de estados fundamentales críticos y subterráneos?

Apéndice A

Cálculo del eigenespectro para el sistema caja con barrera por el método directo

Resumen: En este apéndice se detalla el procedimiento matemático, para obtener la ecuación trascendental (3.23).

Recordemos que las funciones de onda para cada una de las tres regiones están dadas por

$$\psi_1 = A_1 \sin(k_1 x), \quad (\text{A.1})$$

$$\psi_2 = C e^{-iqx} + D e^{iqx}, \quad (\text{A.2})$$

$$\psi_3 = A_2 \sin[k_1(x - d)] + A_3 \cos[k_1(x - d)]. \quad (\text{A.3})$$

Haciendo continuidad en $x = \frac{d-\Delta}{2}$ para las funciones de onda ψ_1 , ψ_2 y sus correspondientes derivadas

$$\begin{aligned} \psi_1(x) \Big|_{\frac{d-\Delta}{2}} &= \psi_2(x) \Big|_{\frac{d-\Delta}{2}} \\ -iqA_1\alpha &= -iq \left[C e^{-iq\left(\frac{d-\Delta}{2}\right)} + D e^{iq\left(\frac{d-\Delta}{2}\right)} \right], \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

$$\begin{aligned} \psi_1'(x) \Big|_{\frac{d-\Delta}{2}} &= \psi_2'(x) \Big|_{\frac{d-\Delta}{2}} \\ k_1 A_1 \beta &= -iq \left[C e^{-iq\left(\frac{d-\Delta}{2}\right)} - D e^{iq\left(\frac{d-\Delta}{2}\right)} \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

Aplicando el mismo procedimiento en $x = \frac{d+\Delta}{2}$, se obtiene

$$\begin{aligned} \psi_2(x) \Big|_{\frac{d+\Delta}{2}} &= \psi_3(x) \Big|_{\frac{d+\Delta}{2}} \\ -iq \left[Ce^{-iq(\frac{d+\Delta}{2})} + De^{iq(\frac{d+\Delta}{2})} \right] &= -iq[-A_2\alpha + A_3\beta], \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

$$\begin{aligned} \psi_2'(x) \Big|_{\frac{d+\Delta}{2}} &= \psi_3'(x) \Big|_{\frac{d+\Delta}{2}} \\ -iq \left[Ce^{-iq(\frac{d+\Delta}{2})} + De^{iq(\frac{d+\Delta}{2})} \right] &= -iq[A_2\beta + A_3\alpha]. \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

Sumando y restando las ecuaciones (A.4) y (A.5), se consigue respectivamente

$$A_1(-iq\alpha + k_1\beta) = -2iqCe^{-iq(\frac{d-\Delta}{2})}, \quad (\text{A.8})$$

$$A_1(-iq\alpha - k_1\beta) = -2iqDe^{iq(\frac{d-\Delta}{2})}. \quad (\text{A.9})$$

Sumando y restando las ecuaciones (A.6) y (A.7)

$$-iq(-A_2\alpha + A_3\beta) + k_1(A_2\beta + A_3\alpha) = -2iqCe^{-iq(\frac{d+\Delta}{2})}, \quad (\text{A.10})$$

$$-iq(-A_2\alpha + A_3\beta) - k_1(A_2\beta + A_3\alpha) = -2iqDe^{iq(\frac{d+\Delta}{2})}. \quad (\text{A.11})$$

Dividiendo (A.10) entre (A.8) y (A.11) entre (A.9), obtenemos respectivamente

$$-iq(-A_2\alpha + A_3\beta) + k_1(A_2\beta + A_3\alpha) = A_1(-iq\alpha + k\beta)e^{-iq\Delta}, \quad (\text{A.12})$$

$$-iq(-A_2\alpha + A_3\beta) - k_1(A_2\beta + A_3\alpha) = A_1(-iq\alpha - k\beta)e^{iq\Delta}. \quad (\text{A.13})$$

Dividiendo la Ec.(A.13) entre (A.12)

$$-e^{2iq\Delta} \left(\frac{k_1\beta + iq\alpha}{k\beta - iq\alpha} \right) = \frac{iqA_2\alpha - iqA_3\beta - k_1A_2\beta - k_1A_3\alpha}{iqA_2\alpha - iqA_3\beta + k_1A_2\beta + k_1A_3\alpha}, \quad (\text{A.14})$$

recordando que

$$B = k_1 \frac{A_2}{A_3}, \quad (\text{A.15})$$

y dividiendo el numerador y denominador de la ec.(A.14), entre A_3 , se obtiene

$$-e^{2iq\Delta} \left(\frac{k_1\beta + iq\alpha}{k\beta - iq\alpha} \right) = \frac{iq(A_2/A_3)\alpha - iq\beta - k_1(A_2/A_3)\beta - k_1\alpha}{iq(A_2/A_3)\alpha - iq\beta + k_1(A_2/A_3)\beta + k_1\alpha}, \quad (\text{A.16})$$

despejando la razón (A_2/A_3) y sustituyendo en la ec.(A.15), obtenemos la ecuación trascendental

$$B = k_1 \frac{ZW^*e^{2iq\Delta} - WZ^*}{Z^{*2} - Z^2e^{2iq\Delta}}. \quad (\text{A.17})$$

Apéndice B

Cálculo de los coeficientes de la función de onda del sistema caja con barrera

Aplicando la normalización tradicional:

$$\int_0^{\frac{d-\Delta}{2}} \langle \psi_1(x) | \psi_1(x) \rangle dx + \int_{\frac{d-\Delta}{2}}^{\frac{d+\Delta}{2}} \langle \psi_2(x) | \psi_2(x) \rangle dx + \int_{\frac{d+\Delta}{2}}^d \langle \psi_3(x) | \psi_3(x) \rangle dx = 1, \quad (\text{B.1})$$

sustituyendo las funciones de onda correspondientes a cada región

$$\begin{aligned} & \int_0^{\frac{d-\Delta}{2}} (A_1^* \sin k_1 x)(A_1 \sin k_1 x) dx + \int_{\frac{d-\Delta}{2}}^{\frac{d+\Delta}{2}} (C^* e^{iqx} + D^* e^{-iqx})(C e^{-iqx} + D e^{iqx}) dx \\ & + \int_{\frac{d+\Delta}{2}}^d (A_2^* \sin k_1(x-d) + A_3^* \cos k_1(x-d))(A_2 \sin k_1(x-d) + A_3 \cos k_1(x-d)) dx = 1, \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

reescribiendo

$$\begin{aligned} & |A_1|^2 \int_0^{\frac{d-\Delta}{2}} \sin^2 k_1 x dx + (|C|^2 + |D|^2) \int_{\frac{d-\Delta}{2}}^{\frac{d+\Delta}{2}} dx + C^* D \int_{\frac{d-\Delta}{2}}^{\frac{d+\Delta}{2}} e^{2iqx} dx \\ & + D^* C \int_{\frac{d-\Delta}{2}}^{\frac{d+\Delta}{2}} e^{-2iqx} dx + (|A_2|^2 - |A_3|^2) \int_{\frac{d+\Delta}{2}}^d \sin^2 k_1(x-d) dx - |A_3|^2 \int_{\frac{d+\Delta}{2}}^d dx \\ & + (A_2^* A_3 + A_3^* A_2) \int_{\frac{d+\Delta}{2}}^d \cos k_1(x-d) \sin k_1(x-d) dx = 1, \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

realizando las integrales y evaluando en los límites correspondientes

$$\begin{aligned} & \frac{|A_1|^2}{4k_1} (k_1(d - \Delta) - 2\alpha\beta) + (|C|^2 + |D|^2)\Delta + \frac{\sin q\Delta}{q} (C^*De^{iqa} + D^*Ce^{-iqd}) \\ & + \frac{|A_2|^2 - |A_3|^2}{2k_1} \left[\frac{(d - \Delta)k_1}{2} - \alpha\beta \right] - \frac{|A_3|^2(d - \Delta)}{2} - \frac{\alpha^2}{2k_1} (A_2^*A_3 + A_3^*A_2) = 1. \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

De la ec.(A.8) y la derivada logarítmica evaluada en $x = d$, se obtiene respectivamente

$$A_1 = \frac{-2iqCe^{-iq(\frac{d-\Delta}{2})}}{Z^*}, \quad (\text{B.5})$$

$$A_2 = \frac{BA_3}{k_1}, \quad (\text{B.6})$$

Despejando A_3 , y D de las ecuaciones (A.9) y (A.12), se consigue respectivamente

$$A_3 = \frac{-2iqkCe^{-iq(\frac{d+\Delta}{2})}}{BZ + k_1W^*}, \quad (\text{B.7})$$

$$D = \frac{A_1Z}{2iq}e^{-iq(\frac{d-\Delta}{2})}. \quad (\text{B.8})$$

Usando los anteriores coeficientes, haciendo los cálculos necesarios en la ec. (3.3) y despejando a $|C|^2$

$$\begin{aligned} |C|^2 = & \left\{ \frac{q^2}{k_1|Z|^2} (k_1(d - \Delta) - 2\alpha\beta) + 2\Delta - \frac{\sin(q\Delta)}{q} \left(\frac{Z}{Z^*}e^{iq\Delta} + \frac{Z^*}{Z}e^{-iq\Delta} \right) + \right. \\ & \left. \frac{2q^2}{(BZ + k_1W^*)(BZ^* + k_1W)} \left[\frac{(B^2 - k_1^2)(k_1(d - \Delta) - 2\alpha\beta)}{2k_1} - k_1^2(d - \Delta) - 2B\alpha^2 \right] \right\}^{-1}, \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

Finalmente se introduce el valor calculado de C en las ecuaciones (B.5) y (B.7), información que es suficiente para determinar los dos coeficientes restantes.

Apéndice C

Cálculo de la matriz Hamiltoniana $H_{B,mn}$ para el sistema caja con barrera

Solución para $E > 0$

El Hamiltoniano se puede escribir como:

$$\begin{aligned} H_{B,mn} &= H_{B,mn}^{(1)} + H_{B,mn}^{(2)} + H_{B,mn}^{(3)} \\ H_{B,mn} &= \int_0^{\frac{d-\Delta}{2}} u_{B,m}^*(x) F_{B,w} u_{B,n}(x) dx + \int_{\frac{d-\Delta}{2}}^{\frac{d+\Delta}{2}} u_{B,m}^*(x) (F_{B,w} + V_b) u_{B,n}(x) dx \quad (\text{C.1}) \\ &\quad + \int_{\frac{d+\Delta}{2}}^d u_{B,m}^*(x) F_{B,w} u_{B,n}(x) dx. \end{aligned}$$

Para la solución del problema consideramos dos casos ($m = n$ y $m \neq n$). Primero trabajamos para el caso $m = n$.

$$\begin{aligned} H_{B,nn}^{(1)} &= \int_0^{\frac{d-\Delta}{2}} u_{B,n}^*(x) F_{B,w} u_{B,n}(x) dx \\ &= F_{B,w} N_{B,n}^2 \int_0^{\frac{d-\Delta}{2}} \sin^2(q_{B,n}x) dx \\ &= N_{B,n}^2 F_{B,w} \left[\frac{x}{2} - \frac{\sin(2q_{B,n}x)}{4q_{B,n}} \right]_0^{\frac{d-\Delta}{2}} \quad (\text{C.2}) \\ &= N_{B,n}^2 F_{B,w} \left[\frac{d-\Delta}{4} - \frac{\sin(q_{B,n}(d-\Delta))}{4q_{B,n}} \right], \end{aligned}$$

De igual manera;

$$\begin{aligned} H_{B,nn}^{(2)} &= N_{B,n}^2 (F_{B,w} + V_b) \int_{\frac{d-\Delta}{2}}^{\frac{d+\Delta}{2}} \sin^2(q_{B,n}x) dx \\ &= N_{B,n}^2 (F_{B,w} + V_b) \left[\frac{\Delta}{2} - \frac{\sin(q_{B,n}(d+\Delta))}{4q_{B,n}} + \frac{\sin(q_{B,n}(d-\Delta))}{4q_{B,n}} \right], \end{aligned} \quad (C.3)$$

$$\begin{aligned} H_{B,nn}^{(3)} &= N_{B,n}^2 F_{B,w} \int_{\frac{d+\Delta}{2}}^d \sin^2(q_{B,n}x) dx \\ &= N_{B,n}^2 F_{B,w} \left[\frac{d-\Delta}{4} - \frac{\sin(2q_{B,n}d)}{4q_{B,n}} + \frac{\sin(q_{B,n}(d+\Delta))}{4q_{B,n}} \right]. \end{aligned} \quad (C.4)$$

Sumando los resultados de las ecuaciones (C.2), (C.3) y (C.4)

$$H_{B,nn} = F_{B,w} N_{B,n}^2 \left[\frac{d}{2} - \frac{\sin(2q_{B,n}d)}{4q_{B,n}} \right] + N_{B,n}^2 V_b \left[\frac{\Delta}{2} - \frac{\sin(q_{B,n}(d+\Delta))}{4q_{B,n}} + \frac{\sin(q_{B,n}(d-\Delta))}{4q_{B,n}} \right], \quad (C.5)$$

usando la identidad trigonométrica $\sin(A \pm B) = \sin A \cos B \pm \cos A \sin B$ y aplicando álgebra, obtenemos

$$H_{B,nn} = F_{B,w} + \frac{N_{B,n}^2 V_b}{2} \left[\Delta - \frac{\cos(q_{B,n}d) \sin(\Delta q_{B,n})}{q_{B,n}} \right]. \quad (C.6)$$

Para el caso $m \neq n$, aplicamos el mismo procedimiento descrito en el caso $m = n$, la única diferencia radica en la solución de la integral, entonces

$$\begin{aligned} H_{B,mn}^{(1)} &= A_{B,mn} F_{B,w} \int_0^{\frac{d-\Delta}{2}} \sin(q_{B,m}x) \sin(q_{B,n}x) dx \\ &= \frac{A_{B,mn} F_{B,w}}{2} \left[\frac{\sin((q_{B,m} - q_{B,n})x)}{q_{B,m} - q_{B,n}} - \frac{\sin((q_{B,m} + q_{B,n})x)}{q_{B,m} + q_{B,n}} \right]_0^{\frac{d-\Delta}{2}} \\ &= \frac{A_{B,mn} H_w}{2} \left[\frac{\sin \left[\frac{\theta_{B,mn}(d-\Delta)}{2} \right]}{\theta_{B,mn}} - \frac{\sin \left[\frac{\zeta_{B,mn}(d-\Delta)}{2} \right]}{\zeta_{B,mn}} \right] \end{aligned} \quad (C.7)$$

$$\begin{aligned} H_{B,mn}^{(2)} &= A_{B,mn} (F_{B,w} + V_b) \int_{\frac{d-\Delta}{2}}^{\frac{d+\Delta}{2}} \sin(q_{B,m}x) \sin(q_{B,n}x) dx \\ &= \frac{A_{B,mn} (F_{B,w} + V_b)}{2} \left[\frac{\sin \left[\frac{\theta_{B,mn}(d+\Delta)}{2} \right]}{\theta_{B,mn}} - \frac{\sin \left[\frac{\zeta_{B,mn}(d+\Delta)}{2} \right]}{\zeta_{B,mn}} - \frac{\sin \left[\frac{\theta_{B,mn}(d-\Delta)}{2} \right]}{\theta_{B,mn}} \right. \\ &\quad \left. + \frac{\sin \left[\frac{\zeta_{B,mn}(d-\Delta)}{2} \right]}{\zeta_{B,mn}} \right] \end{aligned} \quad (C.8)$$

$$\begin{aligned}
H_{B,mn}^{(3)} &= A_{B,mn} F_{B,w} \int_{\frac{d+\Delta}{2}}^d \sin(q_{B,m}x) \sin(q_{B,n}x) dx \\
&= \frac{A_{B,mn} F_{B,w}}{2} \left[\frac{\sin(\theta_{B,mn}d)}{\theta_{B,mn}} - \frac{\sin(\zeta_{B,mn}d)}{\zeta_{B,mn}} - \frac{\sin\left[\frac{\theta_{B,mn}(d+\Delta)}{2}\right]}{\theta_{B,mn}} + \frac{\sin\left[\frac{\zeta_{B,mn}(d+\Delta)}{2}\right]}{q_{B,m} + q_{B,n}} \right].
\end{aligned} \tag{C.9}$$

Sumando lo últimos tres resultados y usando identidades trigonométricas

$$\begin{aligned}
H_{B,mn} &= \frac{A_{B,mn} F_{B,w}}{2} \left[\frac{\sin(q_{B,m}d) \cos(q_{B,n}d) - \cos(q_{B,m}d) \sin(q_{B,n}d)}{\theta_{B,mn}} \right. \\
&\quad \left. - \frac{\sin(q_{B,m}d) \cos(q_{B,n}d) + \cos(q_{B,m}d) \sin(q_{B,n}d)}{\zeta_{B,mn}} \right] \\
&\quad + \frac{N_{B,m} N_{B,n} V_0}{2} \left[\frac{\sin((q_{B,m} - q_{B,n})(a + \Delta))}{q_{B,m} - q_{B,n}} - \frac{\sin((q_{B,m} + q_{B,n})(a + \Delta))}{q_{B,m} + q_{B,n}} \right] \\
&\quad + \frac{A_{B,mn} V_b}{2} \left[\frac{\sin\left[\frac{\theta_{B,mn}(d+\Delta)}{2}\right]}{\theta_{B,mn}} - \frac{\sin\left[\frac{\zeta_{B,mn}(d+\Delta)}{2}\right]}{\zeta_{B,mn}} - \frac{\sin\left[\frac{\theta_{B,mn}(d-\Delta)}{2}\right]}{\theta_{B,mn}} + \frac{\sin\left[\frac{\zeta_{B,mn}(d-\Delta)}{2}\right]}{\zeta_{B,mn}} \right].
\end{aligned} \tag{C.10}$$

El factor que multiplica a $\frac{A_{B,mn} F_{B,w}}{2}$, es cero, lo cual se comprueba sustituyendo

$$\begin{aligned}
B &= q_{B,m} \cot(q_{B,m}d) \\
B \sin(q_{B,m}d) &= q_{B,m} \cos(q_{B,m}d)
\end{aligned}$$

en la anterior expresión y por lo tanto el resultado final es

$$H_{B,mn} = A_{B,mn} V_b \left[\frac{\sin\left(\frac{\theta_{B,mn}\Delta}{2}\right) \cos\left(\frac{\theta_{B,mn}d}{2}\right)}{\theta_{B,mn}} - \frac{\sin\left(\frac{\zeta_{B,mn}\Delta}{2}\right) \cos\left(\frac{\zeta_{B,mn}d}{2}\right)}{\zeta_{B,mn}} \right] \tag{C.11}$$

Solución para el estado subterráneo

Escribiendo el Hamiltoniano

$$\begin{aligned}
H_{B,0n} &= H_{B,0n}^{(1)} + H_{B,0n}^{(2)} + H_{B,0n}^{(3)} \\
H_{B,0n} &= \int_0^{\frac{d-\Delta}{2}} u_{B,0}^*(x) F_{w0} u_{B,n}(x) dx + \int_{\frac{d-\Delta}{2}}^{\frac{d+\Delta}{2}} u_{B,0}^*(x) (F_{B,w}^{ES} + V_b) u_{B,n}(x) dx \\
&\quad + \int_{\frac{d+\Delta}{2}}^d u_{B,0}^*(x) F_{B,w}^{ES} u_{B,n}(x) dx.
\end{aligned} \tag{C.12}$$

El procedimiento matemático es similar al descrito en $E > 0$, la diferencia es que la ecuación trascendental se transforma en (3.11), debido a la presencia de energías

negativas y sólo arroja una raíz $Q_{B,0}$. Solucionando las integrales, se obtiene para el caso $m = n$ y $m \neq n$ respectivamente:

$$H_{B,00} = F_{B,w}^{ES} + \frac{N^2 B, 0V_b}{2} \left[\frac{\sinh(Q_{B,0}\Delta) \cosh(Q_{B,0}\Delta)}{Q_{B,0}} + \Delta \right], \quad (C.13)$$

y

$$H_{B,0n} = \frac{N_{B,0}N_{B,n}V_b}{Q_{B,0}^2 + q_{B,n}^2} \left\{ Q_{B,0} \left[\cosh\left(\frac{Q_{B,0}(a+\Delta)}{2}\right) \sin\left(\frac{q_{B,n}(a+\Delta)}{2}\right) - \cosh\left(\frac{Q_{B,0}(a-\Delta)}{2}\right) \sin\left(\frac{q_{B,n}(a-\Delta)}{2}\right) \right] + q_{B,n} \left[\sinh\left(\frac{Q_{B,0}(a-\Delta)}{2}\right) \cos\left(\frac{q_{B,n}(a-\Delta)}{2}\right) - \sinh\left(\frac{Q_{B,0}(a+\Delta)}{2}\right) \cos\left(\frac{q_{B,n}(a-\Delta)}{2}\right) \right] \right\}. \quad (C.14)$$

Notemos que $H_{B,00}$, solo nos provee un elemento matricial y $H_{B,0n}$ contiene los demás elementos correspondientes al estado subterráneo.

Bibliografía

- [1] Física de fulerenos; A.S. Baltenkov, J.Phys.B, **32**, 2745 (1999); Física Atómica: Philip G. Burke, R-Matrix Theory of Atomic Collisions, Springer Series on Atomic, Optical and Plasma Physics [Springer-Verlag Berlin, 2011] Nuclear Physics: H. Feshbach, Annals of Physics, **5**, 357 (1958).
- [2] A.M. Ishkhanyan, European Physics Letter, **112**, 10006 (2015) y A.M. Ishkhayan Phys. Lett. A, **380**, 640 (2016).
- [3] Algoritmos multi-pasos tipo Numerov; L.Gr. Ixaru and M.Rizea, Computer Physics Communications. **38**, 329 (1985); El método de modificación; M.R. Pahlavani, J. Sadegh and M. Ghezelbash, APPS, Applied Sciences, **11**, 106 (2009); método de elemento finito: Ciarlet P G, The Finite Element Method for Elliptic Problem (Amsterdam: North-Holland, 1978) y Ram-Moham L R, Finite Element and Boundary Element Applications in Quantum Mechanics (New York: Oxford University Press, 2002). Varios métodos de solución numérica: <http://physics.weber.edu/schroeder/quantum/Numerical.pdf>.
- [4] Nikiforov-Uvarov A.F. Nikiforov and V.B.Uvarov, Special Functions of Mathematical Physics (Birkhausser, Basel, 1988); C. Berkdemir, A. Berkdemir, and R. Sever, Physical Review C, vol. 72 (2005) 027001; <http://physics.bu.edu/py502/lectures4/schrod.pdf>.
- [5] E. P. Wigner and L. Eisenbud, Phys. Rev. **72**, 29 (1947) y E.P. Wigner, Phys. Rev. **70**, 606 (1946).
- [6] A. A. Fernández, *Dispersión de ondas en una y cuasi una dimensión. Métodos de la matriz reacción, de transferencia y del Hamiltoniano efectivo*, Tesis Doctoral, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, México (2014).
- [7] *Quantum Mechanics*, E. Merzbacher (John Wiley and Sons, New York, 1970).
- [8] *Modern Quantum Mechanics*, J. J. Sakurai y J. Napolitano (Pearson Education, 2011).
- [9] *Introduction to Quantum Mechanics*, D. J. Griffiths (Pearson Prentice Hall, USA, 2005).

-
- [10] *R-Matrix Theory of Atomic Collisions: Application to Atomic, Molecular and Optical Processes*, P. G. Burke (Berlin: Springer, 2011).
- [11] *Scattering Theory*, J.R. Taylor (John Wiley and Sons, New York, 1972).
- [12] *Scattering Theory of Waves and Particles*, R. G. Newton (Springer-Verlag, New York, 1982), 2nd ed.
- [13] *Quantum Collision Theory*, C. J. Joachain (North-Holland, Amsterdam, 1987).
- [14] *Quantum Mechanics. Foundations and applications*, A. Böhm (Springer Science Business Media, New York, 1986).
- [15] E. P. Wigner, Phys. Rev. *98*, 145 (1955).
- [16] F. T. Smith, Phys. Rev. *118*, 349 (1960).
- [17] G. A. Luna, A. A. Fernández, J. A. Méndez y C. Poli, Phys. Let. A **380**, 2494 (2016).
- [18] *Mathematical Methods for Physicists*, G. B. Arfken, H. J. Weber y F. E. Harris (Academic Press, USA, 2013).
- [19] *Boundary Value Problems*, D. L. Powers (Academic Press, USA, 1999).
- [20] *Ecuaciones Diferenciales con aplicaciones*, W. R. Derrick y S. I. Grossman (Fondo Educativo, México, D. F., 1984).
- [21] *Practical Quantum Mechanics*, S. Flügge (Springer, Berlin, 1994).