



Simulador de un Sistema Multibarreras con
pendiente y campo externo

Miguel Angel Vargas Lomelí

Tesis de Maestría en Ciencias de la
Computación

Asesor: Dr. Manuel Isidro Martín Ortíz

PUEBLA 2014

Índice general

1. Potenciales de Barrera Rectangulares	5
1.1. Teoría de Schrödinger de la mecánica cuántica	5
1.2. La ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo	7
1.3. La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo	9
1.4. Cuantización de la energía en la teoría de Schrödinger	11
1.5. Potenciales de barrera	12
1.6. Método de la Matriz de Transferencia	17
1.7. Algoritmo del MMT para hallar la transmisividad y reflectividad de un sistema multibarreras	20
2. Potenciales de Barrera Rectangulares con campo externo y Trapezoidales con funciones de Airy	25
2.1. Teoría de Floquet	25
2.2. Potenciales de barrera con campo externo	28
2.3. Potencial de barrera con funciones de Airy	32
2.3.1. Cálculo del coeficiente de transmisividad	33
3. Implementaciones	37
3.1. Introducción	37
3.2. Ejemplos implementados	40
3.2.1. Ejemplo 1:	40
3.2.2. Ejemplo 2:	42
3.2.3. Ejemplo 3:	43
3.2.4. Ejemplo 4:	44
3.2.5. Ejemplo 5:	45
3.2.6. Ejemplo 6:	46
3.2.7. Ejemplo 7:	47
3.2.8. Ejemplo 8:	48
3.2.9. Ejemplo 9:	49
3.2.10. Ejemplo 10:	51
3.2.11. Ejemplo 11:	53
3.2.12. Ejemplo 12:	55
4. Conclusiones	57

A. Unidades Atómicas	59
B. Manual del Usuario del Sistema Multi-Barreras	60
C. Código fuente del programa para hallar T en una barrera	68
D. Código fuente del programa para hallar T por el MMT para un valor de energía	70
E. Código fuente del programa para hallar T por el MMT para múltiples valores de energía	75

Índice de figuras

1.1. Modelo de un potencial de barrera	12
1.2. Modelo de un potencial de barrera donde $E < V_0$	14
1.3. Modelo de un potencial de barrera donde $E > V_0$	15
1.4. Modelo de múltiples potenciales de barrera	19
2.1. Modelo de un potencial de barrera con campo externo	28
2.2. Potencial arbitrario lineal con inclinaciones	32
2.3. Potencial arbitrario lineal con pendiente	34
3.1. Pantalla principal del Sistema Multi-Barreras (SMB)	38
3.2. Pantalla de la gráfica de T en el Sistema Multi-Barreras (SMB)	39
3.3. Gráfica de T con campo del ejemplo 1	41
3.4. Gráfica de T sin campo del ejemplo 1	41
3.5. Gráfica de T del ejemplo 2	42
3.6. Gráfica de T del ejemplo 3	43
3.7. Gráfica de T del ejemplo 4	44
3.8. Gráfica de T del ejemplo 5	45
3.9. Gráfica de T del ejemplo 6	46
3.10. Gráfica de T del ejemplo 7	47
3.11. Gráfica de T del ejemplo 8	48
3.12. Gráfica de T del ejemplo 9	50
3.13. Gráfica de T del ejemplo 10	52
3.14. Gráfica de T sin campo del ejemplo 11	54
3.15. Gráfica de T con campo del ejemplo 11	54
3.16. Gráfica de T sin campo del ejemplo 12	56
3.17. Gráfica de T con campo del ejemplo 12	56
B.1. Tabla de inserción de barreras del Sistema Multi-Barreras	61
B.2. Datos a insertar en el Sistema Multi-Barreras	61
B.3. Opciones referente al modelo de barreras en el Sistema Multi-Barreras	62
B.4. Menú Archivo del Sistema Multi-Barreras	62
B.5. Menú Edición del Sistema Multi-Barreras	63
B.6. Menú Barrera del Sistema Multi-Barreras	64
B.7. Menú Ayuda del Sistema Multi-Barreras	65
B.8. Barra de Herramientas del Sistema Multi-Barreras	65
B.9. Barra de Estado del Sistema Multi-Barreras	66
B.10. Opciones referente a la gráfica de T en el Sistema Multi-Barreras	66

Introducción

El estudio de la transmisividad de un sistema multibarreras cuántico unidimensional con pendiente y campo externo, tiene diversas aplicaciones en Física, Química y Electrónica; por lo que aprovechando las nuevas herramientas computacionales se diseñó un modelo operativo basado en el método de la Matriz de Transferencia para obtener los coeficientes de transmisividad en barreras rectangulares y trapezoidales.

La aplicación resultante servirá a los investigadores y estudiantes en áreas afines para que elaboren de una manera sencilla experimentos complejos o académicos y analicen sus resultados.

La falta de software especializado para hallar la transmisividad de sistemas multibarreras cuánticas con inclinación (trapezoidales) y campo externo, originó la realización de este proyecto, el cual aprovecha el método de la Matriz de Transferencia para usarlo como método numérico, se podrá implementar en una computadora personal; por lo tanto el proyecto final podrá ser utilizado como herramienta de simulación para la formación académica en la mecánica cuántica.

En el campo de las ciencias de la computación, se programaron las soluciones de la ecuación de Schrödinger para sus diferentes casos, usando modelos numéricos de álgebra lineal teniendo como base el método de la Matriz de Transferencia, así como la interpolación de funciones. Además del uso de la visualización por computadora para poder realizar un mejor análisis global de los resultados.

Capítulo 1

Potenciales de Barrera Rectangulares

1.1. Teoría de Schrödinger de la mecánica cuántica

El desarrollo de la teoría de la mecánica cuántica se inició con una idea que es de extrema importancia, expuesta por De Broglie en su tesis doctoral (1924), que trata de lo siguiente: en la física clásica se considera que la radiación electromagnética es un fenómeno netamente de propagación ondulatoria, pero lo relevante es que propone que la materia poseía propiedades tanto ondulatorias como corpusculares. Por otra parte, las investigaciones de Einstein y Compton mostraron que en ciertas circunstancias manifiesta una característica de las partículas (cuantos). Cuando se investiga la interacción de la radiación con la materia se pone de manifiesto la naturaleza corpuscular de la radiación electromagnética, mientras que su naturaleza ondulatoria se revela cuando se considera la forma en que se propaga, a esta propiedad se le llama “dualidad onda-partícula”.

El principio de dualidad sirvió de punto de partida en los años previos al desarrollo afortunado de la mecánica cuántica de Schrödinger, con esta idea se puede observar que la cantidad con que está relacionada la mecánica cuántica es la *función de onda* Ψ de una partícula. Aunque Ψ no tiene interpretación física, el cuadrado de su valor absoluto $|\Psi|^2$ (o $\Psi\Psi^*$ si Ψ es compleja) calculado para un punto y en un instante determinado es proporcional a la probabilidad de encontrar experimentalmente a la partícula ahí y en ese instante. Incluso antes de considerar el cálculo real de Ψ , podemos establecer algunos requisitos que siempre se deben de cumplir. En primer lugar ya que $|\Psi|^2$ es proporcional a la probabilidad \mathbf{P} de encontrar el cuerpo descrito por Ψ , la integral de $|\Psi|^2$ sobre todo el espacio debe ser finita, ya que el cuerpo está en una parte. Si

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 dV$$

es 0, la partícula no existe y la integral evidentemente no puede ser ∞ y tener cierto significado; $|\Psi|^2$ no puede ser negativa o compleja a causa del camino seguido para definirla, y así la única posibilidad dada es que su integral sea una cantidad finita para que Ψ describa apropiadamente un objeto real.

Generalmente es conveniente tener $|\Psi|^2$ igual a la probabilidad \mathbf{P} de encontrar la partícula descrita por Ψ , en lugar de ser simplemente proporcional a \mathbf{P} . Para que $|\Psi|^2$ sea igual a \mathbf{P} se tiene que cumplir la siguiente relación

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 dV = 1 \quad (1.1)$$

ya que

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{P} dV = 1$$

es la afirmación matemática de que la partícula existe en algún lugar en todo momento. Una función de onda que obedezca a la ecuación (1.1) se dice que está **normalizada**. Además de ser normalizada, Ψ debe tener un solo valor, ya que \mathbf{P} debe tener un valor único en un tiempo y un lugar determinado. Otra condición que Ψ debe obedecer es que **ella y sus derivadas parciales deben ser continuas** en cualquier lugar. Estas condiciones son importantes para la construcción de la ecuación de Schrödinger. Antes de abordar esta ecuación, se introducirá *la ecuación de onda general*

$$\frac{\partial^2 y}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 y}{\partial t^2} \quad (1.2)$$

que gobierna a una onda cuya cantidad variable es y , que se propaga en la dirección de x , con velocidad v y en un tiempo t .

En el caso de una onda en una cuerda tensa, y es el desplazamiento de la cuerda medido desde el eje x ; en el caso de una onda sonora, y es la diferencia de presión; en el caso de una onda luminosa y es la magnitud del campo eléctrico o la del campo magnético. La ecuación de onda general y sus soluciones se muestra en libros de mecánica para ondas mecánicas y en los de electricidad y magnetismo para ondas electromagnéticas [Beiser][Eisberg], por lo que se omitirán sus construcciones. Todas las soluciones de la ecuación de onda deben ser de la forma

$$y = F\left(t \pm \frac{x}{v}\right),$$

donde F es cualquier función que puede ser diferenciada. Las soluciones $F(t - x/v)$ representan ondas que viajan el sentido $+x$, y las soluciones $F(t + x/v)$ representan ondas que viajan en el sentido $-x$. Aquí nos interesa el equivalente ondulatorio de una “partícula libre”, es decir una partícula que no esté bajo la influencia de alguna fuerza y que, por tanto, viaja a una velocidad constante. Este equivalente corresponde a la solución general de la ec. (1.2) para ondas armónicas no amortiguadas (es decir, de amplitud constante A) y monocromáticas (de frecuencia angular w constante) en la dirección $+x$,

$$y = Ae^{-iw(t-x/v)}. \quad (1.3)$$

En esta fórmula, y es una cantidad compleja, con parte real e imaginaria. Como

$$e^{-i\theta} = \cos \theta - i \operatorname{sen} \theta,$$

la ecuación (1.3) se puede escribir en la forma

$$y = A \cos w \left(t - \frac{x}{v} \right) - iA \operatorname{sen} w \left(t - \frac{x}{v} \right). \quad (1.4)$$

Únicamente la parte real de la ec. (1.4) tiene significado para el caso en una cuerda en tensión, donde y representa el desplazamiento de la cuerda con respecto a su posición normal, en este caso la parte imaginaria se descarta porque no se puede aplicar.

1.2. La ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo

En la mecánica cuántica, la función de onda Ψ corresponde a la variable de onda y del movimiento ondulatorio general. Sin embargo, Ψ a diferencia de y no es una cantidad mensurable en sí misma y puede por tanto, ser compleja, por esta razón supondremos que Ψ está especificada en la dirección x y tiempo t , por lo que la ecuación (1.3) queda de la siguiente manera:

$$\Psi(x, t) = Ae^{-iw(t-x/v)}. \quad (1.5)$$

Ahora bien, Schrödinger adoptó las dos ecuaciones de De Broglie¹

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{2\pi\hbar}{p},$$

$$E = h\nu = 2\pi\hbar\nu.$$

Cuando se sustituye en la fórmula (1.5) w por $2\pi\nu$ y v por λ , obtenemos

$$\Psi(x, t) = Ae^{-2\pi i(\nu t - x/\lambda)}, \quad (1.6)$$

que es conveniente, porque ν y λ están en función de la energía total E y del momento p de la partícula descrita por $\Psi(x, t)$. Ahora bien, nos conviene despejar las ecuaciones de De Broglie de la siguiente manera:

$$E = h\nu \Rightarrow \nu = E/h$$

y

$$\lambda = \frac{h}{p} = 2\pi \frac{\hbar}{p} \Rightarrow 2\pi = \frac{h}{\hbar}.$$

Sustituyendo y reduciendo en la ecuación (1.6) obtenemos

$$\Psi(x, t) = Ae^{-(i/\hbar)(Et - px)} \quad (1.7)$$

¹De Broglie postuló que la longitud de onda λ y la frecuencia ν de las ondas asociadas con una partícula de momentum (impulso) p y energía relativista total E , que están dadas por:

$$\lambda = h/p$$

$$\nu = E/h$$

que es una descripción matemática de la onda equivalente a una partícula libre, de energía total E y momentum p , pero estamos más interesados en situaciones donde el momentum de una partícula está sujeto a varias restricciones. Lo que debemos hacer ahora es obtener la ecuación diferencial fundamental para Ψ .

Comenzamos con la diferenciación de la ec. (1.7) dos veces respecto a x :²

$$\frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} = \frac{-p^2}{\hbar^2} \Psi(x, t) \quad (1.8)$$

y una vez respecto a t :³

$$\frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = \frac{-iE}{\hbar} \Psi(x, t) . \quad (1.9)$$

A velocidades pequeñas comparadas con la de la luz, la energía total E de una partícula es la suma de su energía cinética $p^2/2m$ y de su energía potencial V , donde V es una función general de la posición x y del tiempo t :

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(x, t) .$$

Multiplicando ambos miembros de esta ecuación por la función de onda $\Psi(x, t)$

$$E\Psi(x, t) = \frac{p^2\Psi(x, t)}{2m} + V(x, t)\Psi(x, t) \quad (1.10)$$

de las ecuaciones (1.8) y (1.9) vemos que

$$E\Psi(x, t) = \frac{-\hbar}{i} \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} ,$$

²Para mayor claridad, observamos que

$$\Psi(x, t) = Ae^{-(i/\hbar)(Et-px)}$$

al derivarla parcialmente con respecto a x , obtenemos

$$\frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} = Ae^{-(i/\hbar)Et} p(i/\hbar)e^{(i/\hbar)px}$$

posteriormente hallamos

$$\frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} = Ae^{-(i/\hbar)(Et-px)} \left\{ \frac{i^2}{\hbar^2} \right\} p^2 = \frac{-p^2}{\hbar^2} \Psi(x, t)$$

³Derivando

$$\Psi(x, t) = Ae^{-(i/\hbar)(Et-px)}$$

con respecto a t , obtenemos

$$\frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = \frac{-iE}{\hbar} Ae^{-(i/\hbar)(Et-px)} = \frac{-iE}{\hbar} \Psi(x, t)$$

$$p^2\Psi(x, t) = -\hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} .$$

Sustituyendo estas expresiones de $E\Psi(x, t)$ y $p^2\Psi(x, t)$ en la ecuación (1.10) obtenemos

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x, t)\Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} \quad (1.11)$$

que es la **ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo**.

1.3. La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo

La ecuación (1.11) es una ecuación en derivadas parciales para Ψ en función de x y t en una dimensión. La técnica normal para resolverla es proponer soluciones que sean el producto de una función de x por una función de t , esto es, soluciones que tengan la forma

$$\Psi(x, t) = \psi(x)\phi(t) \quad (1.12)$$

donde este tipo de soluciones son posibles si *la energía potencial sólo es una función de x* . Entonces el problema se reduce a la solución de dos ecuaciones diferenciales ordinarias.

Al sustituir (1.12) en (1.11), suponiendo que $V(x, t) = V(x)$, obtenemos,

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x)\phi(t) + V(x)\psi(x)\phi(t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x)\phi(t)$$

ahora bien,

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x)\phi(t) = \phi(t) \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) = \phi(t) \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2}$$

La notación $\partial^2 \Psi(x)/\partial x^2$ es inadecuada ya que $\Psi(x)$ es una función de x solamente. De modo semejante tenemos

$$\frac{\partial}{\partial t} \psi(x)\phi(t) = \psi(x) \frac{d\phi(t)}{dt}$$

y la ecuación se puede escribir como

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

Dividiendo ambos miembros entre $\psi(x)\phi(t)$, obtenemos

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

El miembro izquierdo depende solamente de la variable x y el derecho solamente de la variable t . Ya que x y t son variables independientes, ambos miembros deben ser iguales a una cantidad que no dependa ni de x ni de t , de manera que sea cierta la igualdad para

todos los valores de las variables. Así, ambos miembros deben ser iguales a la misma *constante C de separación*. Esto es,

$$\frac{1}{\psi(x)} \left\{ \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) \right\} = C \quad (1.13)$$

y

$$i\hbar \frac{1}{\phi(t)} \frac{d\phi(t)}{dt} = C. \quad (1.14)$$

La ecuación (1.14) es una ecuación diferencial de primer orden para ϕ como función de t . Su solución es:⁴

$$\phi(t) = e^{-iCt/\hbar}. \quad (1.15)$$

La función $\phi(t)$ es una función compleja oscilatoria del tiempo

$$\phi(t) = e^{-iCt/\hbar} = \cos(Ct/\hbar) - i \operatorname{sen}(Ct/\hbar)$$

con la frecuencia ν dada por $2\pi\nu = C/\hbar$. O sea $\nu = C/2\pi\hbar = C/h$. Conforme a las ecuaciones de De Broglie debemos tener que $\nu = E/h$ donde E es la energía total de la partícula, ya que $\phi(t)$ contiene la dependencia respecto a t de $\Psi(x, t)$. Así C debe ser igual a la energía total E . Tomando esto en cuenta, podemos escribir la ecuación (1.13) en la forma

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (1.16)$$

que es la **ecuación de Schrödinger independiente del tiempo**. Como $C = E$, de la ecuación (1.12) y (1.15) podemos escribir la solución a la ecuación de Schrödinger como

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

donde $\psi(x)$ es una solución a la ecuación (1.16). Ahora bien, las soluciones $\psi_n(x)$ reciben el nombre de **funciones propias (eigenfunciones)** y los valores de energía E_n para los que se puede resolver la ecuación de Schrödinger reciben el nombre de **valores propios (eigenvalores)**.

Puede consultar [Levine] para revisar otros enfoques en la construcción de la ecuación de Schrödinger.

⁴Podemos verificar que

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

es una solución, derivamos con respecto a t y sustituyendo en la ecuación (1.14):

$$\frac{d\phi(t)}{dt} = \frac{-iC}{\hbar} e^{-iCt/\hbar} = \frac{-iC}{\hbar} \phi(t)$$

con lo que se tiene

$$i\hbar \frac{1}{\phi(t)} \frac{d\phi(t)}{dt} = i\hbar \frac{1}{\phi(t)} \left(\frac{-iC}{\hbar} \phi(t) \right) \equiv C$$

1.4. Cuantización de la energía en la teoría de Schrödinger

La cuantización de la energía aparece en una forma muy natural en la teoría de Schrödinger. En esta sección se hará una descripción cualitativa de cómo es que esto sucede, en la siguiente sección se presentará un ejemplo cuantitativo.

Considere una partícula de masa m que se mueve bajo la influencia de la fuerza $F(x, t)$. La energía potencial asociada a esta fuerza es $V(x, t)$. Ambas están relacionadas por la ecuación

$$F(x, t) = -\frac{\partial V(x, t)}{\partial x}.$$

Para determinar el movimiento de la partícula a partir de la teoría de Schrödinger, debemos resolver la ecuación de Schrödinger con el potencial $V(x, t)$. Consideremos la clase de problemas cuando el potencial dependiente del tiempo es una función de x solamente. Sabemos que cuando el potencial es independiente del tiempo las soluciones tienen la forma $\Psi(x, t) = \psi(x)\phi(t)$. Ya que la ecuación (1.15) se ha evaluado $\phi(t)$, el problema de encontrar la solución se reduce al de encontrar las soluciones $\psi(x)$ a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para el potencial $V(x)$. Las funciones $\Psi(x, t)$ especifican el comportamiento del sistema a través de los siguientes **postulados**:

- Si, al tiempo t , se efectúa una medida para ubicar la partícula asociada con la función de onda $\Psi(x, t)$, entonces la probabilidad $P(x, t)dx$ de que el valor de la coordenada se encuentre entre x y $x + dx$ es

$$P(x, t)dx = \Psi^*(x, t)\Psi(x, t)dx$$

donde a $P(x, t)$ le denominaremos la **densidad de probabilidad** y el símbolo $\Psi^*(x, t)$ significa el complejo conjugado de $\Psi(x, t)$.

- La probabilidad por unidad de tiempo de que la partícula asociada con la función de onda $\Psi(x, t)$ pase por el punto x se le denominará **flujo de probabilidad**⁵ que se define como

$$S(x, t) = -\frac{i\hbar}{2m} \left[\Psi^*(x, t) \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} - \Psi(x, t) \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial x} \right]$$

donde se puede encontrar una expresión para $S(x, t)$ que nos permite validar la conservación de probabilidad en la mecánica cuántica.

Las justificaciones de estos postulados las podemos hallar en [Eisberg].

La cuantización de la energía se presenta al observar que la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo tiene *soluciones aceptables* sólo para ciertos valores de la energía total E .

⁵El flujo de probabilidad $S(x, t)$ siempre es un número real lo cual se deduce de su definición.

Para que la función propia $\psi(x)$ sea una solución aceptable, se deberán cumplir las siguientes condiciones para todos los valores de x :

1. $\psi(x)$ debe ser finita
2. $\frac{d\psi(x)}{dx}$ debe ser finita
3. $\psi(x)$ debe ser continua
4. $\frac{d\psi(x)}{dx}$ debe ser continua

Si $\psi(x)$ o $\frac{d\psi(x)}{dx}$ violaran alguno de los requisitos, tanto la densidad como el flujo de probabilidad no estarían bien definidos, es decir, no tendrían valores finitos y definidos para todos los valores de la variable x . Esto no es posible, ya que tanto $P(x, t)$ como $S(x, t)$ describen el comportamiento de una partícula física real y deben estar bien definidos. Además si los valores de $V(x)$, E y $\psi(x)$ son finitos, entonces $d^2\psi(x)/dx^2$ será finita, dado que estos términos aparecen en la ecuación de Schrödinger, entonces esta última estará bien definida.

1.5. Potenciales de barrera

En esta sección vamos a describir, de acuerdo con la mecánica cuántica, el movimiento de una partícula cuya energía potencial $V(x)$ cambia discontinuamente para algunos valores de x , permaneciendo constante en los demás puntos. Este potencial puede ser descrito matemáticamente de la siguiente manera:

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & 0 < x < a \\ 0 & x < 0, x > a \end{cases}$$

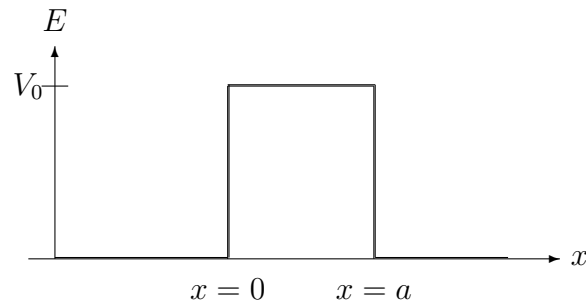


Figura 1.1: Un potencial de barrera

Si una partícula con energía total E , proviene de la región $x < 0$, incide sobre la barrera, de acuerdo con la mecánica clásica tendrá una probabilidad igual a uno de ser reflejada si $E < V_0$. Estas conclusiones no son válidas en la mecánica cuántica.

Para este potencial *existen soluciones aceptables de la ecuación de Schrödinger para toda* $E \geq 0$, es decir, cumplen las cuatro restricciones discutidas en la sección anterior⁶. La ecuación se separa en tres ecuaciones para cada una de las regiones: $x < 0$, $0 < x < a$ y $x > a$. En las regiones primera y tercera la ecuación es la de la partícula libre de energía E . Para encontrar el comportamiento predicho por la mecánica cuántica, resolveremos la ecuación de Schrödinger con $V(x, t) = 0$; puesto que la energía potencial no es una función de t , sólo será necesario resolver la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo. Para $V(x, t) = 0$ esta ecuación toma la forma

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x) . \quad (1.17)$$

Una solución de la ecuación diferencial anterior⁷ se puede escribir como

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

donde A y B son constantes arbitrarias y $k = \sqrt{2mE}/\hbar$. Para nuestro caso particular las soluciones tienen la forma

$$\begin{aligned} \psi(x) &= Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} & x < 0, \\ \psi(x) &= Ce^{ik_1x} + De^{-ik_1x} & x > a, \end{aligned} \quad (1.18)$$

donde $k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar$; y A , B , C y D son constantes arbitrarias.

En la segunda región, la forma de la ecuación depende si $E < V_0$ o $E > V_0$.

a) $E < V_0$

Esta situación se muestra en la figura 1.2:

En la mecánica clásica se puede afirmar que la partícula no puede penetrar la barrera, puesto que en ella

$$E = p^2/2m + V(x) < V_0$$

ó

$$p^2/2m < 0.$$

⁶Para verificar este resultado se puede consultar [Eisberg] en la sección 7.5

⁷Se puede demostrar que

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

es una solución válida calculando

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = i^2k^2Ae^{ikx} + i^2k^2Be^{-ikx} = -k^2\psi(x) = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x)$$

y sustituyendo en la ecuación (1.17):

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \left(-\frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x) \right) \equiv E\psi(x)$$

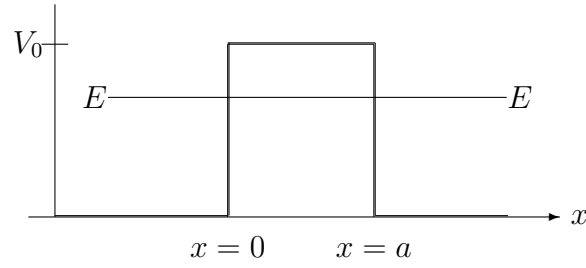


Figura 1.2: Caso donde $E < V_0$

La fuerza impulsiva cambiará el impulso de la partícula de manera que habrá de moverse en el sentido negativo del eje x , con su impulso de igual magnitud y de sentido opuesto al inicial, de manera que su energía total permanezca constante. Para describir el movimiento de la partícula de acuerdo con la mecánica cuántica, resolveremos la ecuación de Schrödinger para el potencial de la barrera cuando $0 < x < a$ y $E < V_0$, por lo que la ecuación queda de la siguiente forma

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V_0\psi(x) = E\psi(x) \quad 0 < x < a, \quad (1.19)$$

cuya solución general⁸ es

$$\psi(x) = Ge^{k_2x} + Fe^{-k_2x} \quad 0 < x < a, \quad (1.20)$$

donde $k_2 = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$ y $E < V_0$.

b) $E > V_0$

Este caso se ilustra en la figura 1.3:

Clásicamente, una partícula que se encuentra en $x < 0$ y que viaja en el sentido positivo del eje x estará sujeta a una fuerza impulsiva retardadora $F(x) = -\partial V(x)/\partial x$ en el punto $x = 0$. Esta impulsión solamente frenará a la partícula que entre a la región $0 < x < a$ continuando su movimiento en el sentido positivo del eje x . Su energía total permanecerá constante; su impulso en la región $x < 0$ es p_1 donde $E = p_1^2/2m$; para

⁸Para comprobar que:

$$\psi(x) = Ge^{k_2x} + Fe^{-k_2x} \quad 0 < x < a$$

es una solución, calculemos:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = Gk_2^2e^{k_2x} + F(-k_2)^2e^{-k_2x} = k_2^2\psi(x) = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}\psi(x)$$

y sustituyendo en la ecuación (1.19), se obtiene

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)\psi(x) + V_0\psi(x) \equiv E\psi(x)$$

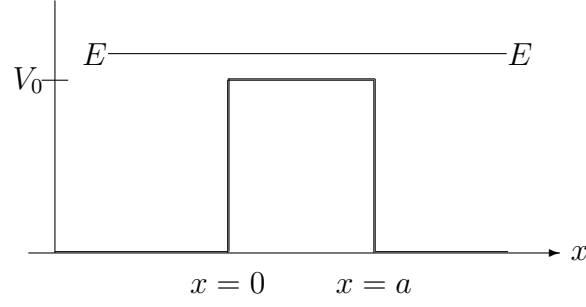


Figura 1.3: Caso donde $E > V_0$

$0 < x < a$ el impulso es p_2 , donde $E = p_2^2/2m + V_0$.

Cuánticamente, el movimiento de la partícula está descrito por la función de onda $\Psi(x, t) = e^{-iEt/\hbar}\psi(x)$, donde la función propia $\psi(x)$ para $0 < x < a$ es solución de la ecuación

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = (E - V_0)\psi(x), \quad (1.21)$$

cuya solución general⁹ es

$$\psi(x) = Fe^{-ik_3x} + Ge^{ik_3x} \quad 0 < x < a, \quad (1.22)$$

donde $k_3 = \sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar$ y $E > V_0$.

Ahora bien, como ya tenemos las soluciones de la ecuación de Schrödinger para el potencial de la barrera, el siguiente paso es hallar la **transmisividad** \mathbf{T} del sistema.

Si la partícula incide en el sentido positivo del eje x debemos poner

$$D = 0,$$

ya que sólo puede existir una onda transmitida en la región $x > a$. Por otra parte, no podemos hacer $G = 0$ en la ecuación (1.20), puesto que x es finita en la región $0 < x < a$. Tampoco podemos hacer $G = 0$ en la ecuación (1.22), ya que la discontinuidad en $x = a$ producirá reflexión.

Caso $E < V_0$

Al ensamblar $\psi(x)$ y $d\psi(x)/dx$ en los puntos $x = 0$ y $x = a$ se obtendrán las siguientes ecuaciones¹⁰ (tomando en cuenta que $D = 0$):

$$A + B = F + G,$$

⁹La comprobación es similar a la de la ecuación (1.17)

¹⁰Evaluando a

$$\begin{aligned} A(e^{ik_1x})_{x=0} + B(e^{-ik_1x})_{x=0} &= F(e^{-k_2x})_{x=0} + G(e^{k_2x})_{x=0} \\ C(e^{ik_1x})_{x=a} + D(e^{-ik_1x})_{x=a} &= F(e^{-k_2x})_{x=a} + G(e^{k_2x})_{x=a} \end{aligned}$$

y sus respectivas derivadas

$$ik_1A(e^{ik_1x})_{x=0} - ik_1B(e^{-ik_1x})_{x=0} = -k_2F(e^{-k_2x})_{x=0} + k_2G(e^{k_2x})_{x=0}$$

$$\begin{aligned}
A - B &= \frac{-k_2}{ik_1}(F - G), \\
e^{iak_1}C &= e^{-ak_2}F + e^{ak_2}G, \\
e^{iak_1}C &= \frac{-k_2}{ik_1}(e^{-ak_2}F - e^{ak_2}G),
\end{aligned}$$

que es un sistema de cuatro ecuaciones que contienen las constantes: A , B , C , F y G . Por conveniencia se tendrá que calcular B , C , F y G en términos de A , que modela a la onda que incide por la izquierda sobre la barrera. Ahora bien, el resultado más interesante del cálculo es la relación de T con la intensidad del flujo de probabilidad transmitido en la región $x > a$ y la intensidad del flujo de probabilidad incidente. De acuerdo a [Eisberg] su valor es

$$T = \frac{C^*C}{A^*A} = \left\{ 1 + \frac{\sinh^2 k_2 a}{(4E/V_0)(1 - E/V_0)} \right\}^{-1} \quad E < V_0,$$

la que es igual a

$$T = \left[1 + \frac{\sinh^2 \left\{ \sqrt{\frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2}} (1 - E/V_0) \right\}}{(4E/V_0)(1 - E/V_0)} \right]^{-1} \quad E < V_0. \quad (1.23)$$

Si el argumento del seno hiperbólico es mucho mayor que 1, el valor de T será pequeño y aproximadamente igual a

$$T \simeq 16 \frac{E}{V_0} (1 - E/V_0) e^{-2k_2 a}.$$

Aquí nos encontramos frente a la notable predicción (en contraste con la mecánica clásica), de que una partícula de masa m y energía total E , que incide sobre una barrera de altura $V_0 > E$ y de espesor a , posee una cierta *probabilidad* T de penetrar la barrera y aparecer en el otro lado. A este fenómeno se le denomina **penetración de la barrera**. Por supuesto, T es despreciable en el límite clásico, ya que en este caso la cantidad $2mV_0 a^2/\hbar^2$, que es una medida de la “opacidad” de la barrera, es extremadamente grande.

Caso $E > V_0$

Aquí se tiene que en las tres regiones las soluciones son de la ecuación de la partícula libre, aunque de mayor longitud de onda en el intervalo $0 < x < a$. Al aplicar las condiciones de continuidad en $x=0$ y $x=a$, se pueden calcular las constantes B , C , F y G . De esta forma

$$T = \frac{C^*C}{A^*A} = \left\{ 1 + \frac{\sin^2 k_3 a}{(4E/V_0)(E/V_0 - 1)} \right\}^{-1} \quad E > V_0$$

$$ik_1 C(e^{ik_1 x})_{x=a} - ik_1 D(e^{-ik_1 x})_{x=a} = -k_2 F(e^{-k_2 x})_{x=a} + k_2 G(e^{k_2 x})_{x=a}$$

que es igual a

$$T = \left[1 + \frac{\text{sen}^2 \left\{ \sqrt{\frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2}} (E/V_0 - 1) \right\}}{(4E/V_0)(E/V_0 - 1)} \right]^{-1} \quad E > V_0. \quad (1.24)$$

La forma de las funciones (1.23) y (1.24) dependen del valor de $2mV_0 a^2/\hbar^2$.

La penetración de la barrera es una manifestación del carácter ondulatorio del movimiento de la partícula; este mismo fenómeno se observa en otros tipos de movimiento ondulatorio, como ejemplo está la ecuación diferencial independiente del tiempo que gobierna la propagación de ondas en una cuerda es esencialmente igual a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo.

1.6. Método de la Matriz de Transferencia

Este método se va a utilizar para resolver la ecuación de Schrödinger para un sistema multibarreras. En la sección anterior obtuvimos las ecuaciones para una barrera, a partir de éstas podemos generalizar para múltiples potenciales de barrera y obtener la transmisividad T del sistema.

Recordando, si una partícula con energía total E , proviene de la región $x < x_1$, incide sobre la barrera, de acuerdo con la mecánica clásica tendrá una probabilidad igual a uno de ser reflejada si $E < V_0$. Estas conclusiones no son válidas en la mecánica cuántica, es decir, tenemos que hallar una *función de onda* $\Psi(x, t)$ que se obtiene de resolver la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x), \quad (1.25)$$

que tiene como solución a $\psi(x)$. Para este potencial *existen soluciones aceptables de la ecuación de Schrödinger para toda $E \geq 0$* , es decir, existe $\psi(x)$ y $\frac{d\psi(x)}{dx}$ finitas y continuas. La ecuación (1.25) se separa en tres ecuaciones para cada una de las regiones: $x < x_1$, $x_1 < x < x_2$ y $x > x_2$. Para la primera y tercera región $V(x) = 0$ y para la segunda $V(x) = V_0$. Resolviendo la ecuación de Schrödinger, tenemos las siguientes soluciones:

$$\psi_1(x) = Ae^{ik_1 x} + Be^{-ik_1 x} \quad x < x_1, \quad (1.26)$$

$$\psi_2(x) = Ce^{ik_2 x} + De^{-ik_2 x} \quad x_1 < x < x_2, \quad (1.27)$$

$$\psi_3(x) = Fe^{ik_1 x} + Ge^{-ik_1 x} \quad x > x_2, \quad (1.28)$$

donde A, B, C, D, F y G son constantes arbitrarias, $k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ y $k_2 = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}$, pero como se trabajará en unidades atómicas, entonces se asume que $\hbar = 1$, por lo que se puede omitir ésta en el denominador de las constantes k_1 y k_2 . La continuidad en $\psi(x)$ implica que deben empalmarse las soluciones (1.26) con (1.27) y (1.27) con (1.28), es decir:

$$\psi_1(x_1) = \psi_2(x_1), \quad (1.29)$$

$$\psi_2(x_2) = \psi_3(x_2); \quad (1.30)$$

ahora bien, la continuidad en la derivada requiere:

$$\psi'_1(x_1) = \psi'_2(x_1), \quad (1.31)$$

$$\psi'_2(x_2) = \psi'_3(x_2). \quad (1.32)$$

Con las ecuaciones (1.29) y (1.31) podemos formar el siguiente sistema de ecuaciones:

$$\begin{aligned} e^{ik_1x_1} A + e^{-ik_1x_1} B &= e^{ik_2x_1} C + e^{-ik_2x_1} D, \\ e^{ik_1x_1} A - e^{-ik_1x_1} B &= \frac{k_2}{k_1} e^{ik_2x_1} C - \frac{k_2}{k_1} e^{-ik_2x_1} D, \end{aligned}$$

lo que podemos denotar de la siguiente manera:

$$\widetilde{m}_1(k_1, x_1) \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \widetilde{m}_2(k_1, k_2, x_1) \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} \quad (1.33)$$

y de las ecuaciones (1.30) y (1.32) obtenemos:

$$\begin{aligned} e^{ik_2x_2} C + e^{-ik_2x_2} D &= e^{ik_1x_2} F + e^{-ik_1x_2} G, \\ e^{ik_2x_2} C - e^{-ik_2x_2} D &= \frac{k_1}{k_2} e^{ik_1x_2} F - \frac{k_1}{k_2} e^{-ik_1x_2} G \end{aligned}$$

y lo denotamos por:

$$\widetilde{m}_3(k_2, x_2) \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = \widetilde{m}_4(k_1, k_2, x_2) \begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} \quad (1.34)$$

como podemos ver \widetilde{m}_1 , \widetilde{m}_2 , \widetilde{m}_3 y \widetilde{m}_4 son matrices de 2x2 dadas por las ecuaciones de continuidad. De la ecuación (1.33) visualizamos que

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \widetilde{m}_1^{-1} \widetilde{m}_2 \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} \quad (1.35)$$

y de la ecuación (1.34)

$$\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = \widetilde{m}_3^{-1} \widetilde{m}_4 \begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix}. \quad (1.36)$$

Sustituyendo (1.36) en (1.35) nos queda:

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \widetilde{m}_1^{-1} \widetilde{m}_2 \widetilde{m}_3^{-1} \widetilde{m}_4 \begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix},$$

donde el resultado del producto de matrices lo representaremos por \widetilde{M} , entonces:

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \widetilde{M}(k_1, k_2, x_1, x_2) \begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix}, \quad (1.37)$$

donde $\widetilde{M}(k_1, k_2, x_1, x_2) = (a_{11}, a_{12} ; a_{21}, a_{22})_{2 \times 2}$, es decir, la ec. (1.37) la podemos ver como:

$$\begin{aligned} A &= a_{11} F + a_{12} G \\ B &= a_{21} F + a_{22} G. \end{aligned}$$

Para resolver este sistema de ecuaciones, se puede tomar el valor de $A = 1$ para la partícula incidente ya que garantizamos con esto que llega por la izquierda, y $G = 0$ debido a que cuando la partícula sale de la barrera no hay otra que incida por la derecha. Por lo que las incógnitas solamente son F y B , es decir, el sistema de ecuaciones queda como

$$\begin{aligned} 1 &= a_{11} F \\ B &= a_{21} F, \end{aligned}$$

por lo que las soluciones son:

$$F = \frac{1}{a_{11}} \quad \text{y} \quad B = \frac{a_{21}}{a_{11}}.$$

La transmisividad está dada por $T = FF^*$ y la reflectividad por $R = BB^*$, donde $T + R = 1$ debido a que T y R son probabilidades, es decir, se valida la conservación de probabilidad de la mecánica cuántica, por lo que la partícula se transmite o refleja, pero nunca desaparece.

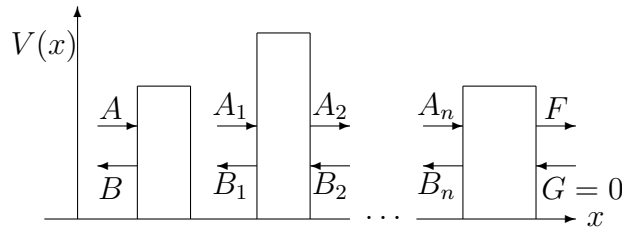


Figura 1.4: Modelo de múltiples potenciales de barrera

Para resolver múltiples barreras rectangulares, tomaremos el modelo de potenciales que se muestra en la figura 1.4. Notemos que cuando la partícula sale de la primera barrera, ésta incide a una segunda barrera por lo que existe la posibilidad de que la partícula sea reflejada por la segunda barrera, entonces no podemos hacer a $B_1 = 0$; lo mismo sucede a cada B_i , sólo hasta la última barrera se hace $G = 0$. De acuerdo a la ecuación (1.37) podemos representar la primera barrera de la siguiente forma:

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \widetilde{M}_0 \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix};$$

entonces las demás barreras quedarían

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} &= \widetilde{M}_1 \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} \\ &\vdots \end{aligned}$$

$$\begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} = \widetilde{M}_n \begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix}.$$

Sustituyendo hacia atrás las $\begin{pmatrix} A_i \\ B_i \end{pmatrix}$, obtenemos

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \widetilde{M}_0 \widetilde{M}_1 \widetilde{M}_2 \dots \widetilde{M}_n \begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix};$$

al producto de las matrices \widetilde{M}_i lo representaremos por \widetilde{M}_T , entonces la ecuación anterior quedará:

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \widetilde{M}_T \begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix},$$

que es la forma de la ecuación (1.37) y como se vio antes, ya se conoce la forma de obtener los valores de F y B para hallar el valor de la transmisividad T y la reflectividad R del sistema multibarreras.

Podemos consultar [Brennan] para ampliar los estudios de potenciales de barrera y el Método de la Matriz de Transferencia, así como aplicaciones específicas en [Martin1], [Stefano], [Esposito], [Sameer], [Wei Li] y [Ahiua]. Un estudio referente a los resultados del método en términos del Análisis Numérico consultar [Deyasi] y si requiere profundizar en los conceptos matemáticos puede consultar [McIntosh].

1.7. Algoritmo del MMT para hallar la transmisividad y reflectividad de un sistema multibarreras

Ahora vamos a explicar el algoritmo de la Matriz de Transferencia para hallar la transmisividad y reflectividad de un sistema.

Entrada: n (número de barreras), a_i donde $1 \leq i \leq n$ (ancho de la i -ésima barrera), V_i donde $1 \leq i \leq n$ (Potencial de la i -ésima barrera), c_i donde $1 \leq i \leq n$ (distancia a la siguiente barrera desde la i -ésima de éstas), E (energía de la partícula) y m (masa de la partícula).

Salida: Transmisividad T y reflectividad R del sistema.

1. Hallamos el número de discontinuidades en el sistema:

$$Ndisc = 2 * n$$

2. Hallamos las discontinuidades del sistema y las almacenamos en $X(i)$, es decir:

$$X(1) = 0$$

$$i = 2$$

$$k = 1$$

Mientras ($i < Ndisc$) hacer:

- $X(i) = X(i - 1) + a_k$
- $X(i + 1) = X(i) + c_k$
- $i = i + 2$
- $k = k + 1$

$$X(i) = X(i - 1) + a_k$$

3. Método de la Matriz de Transferencia

Se declara una matriz (MatrizDeSoluciones) que va a tener las incógnitas $\begin{pmatrix} A_i \\ B_i \end{pmatrix}$, es decir, una matriz que contiene matrices de 2x2.

- $disc = 1$
 $barrera = 1$
- Para $k = 2$ hasta $n + 1$ hacer:
 - MatrizDeSoluciones[k] = ObtieneMatrizMi($X(disc)$, $X(disc + 1)$, $V(barrera)$, E , m)
 - $disc = disc + 2$
 - $barrera = barrera + 1$
- Si ($n > 1$) entonces
 - ProductoMatrices(MatrizDeSoluciones[2], MatrizDeSoluciones[3], (devuelve) MT)
- sino
 - MT=MatrizDeSoluciones[2]
- Si ($n > 2$) entonces
 - Para $k = 4$ hasta $n + 1$ hacer:
 - ProductoMatrices(MT, MatrizDeSoluciones[k], (devuelve) MT)

4. Se resuelve el sistema de ecuaciones $\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = MT \begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix}$ donde $MT = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}$, es decir:

$$F = \frac{1}{a_{11}} \quad \text{y} \quad B = \frac{a_{21}}{a_{11}}$$

5. Se calcula la transmisividad $T = F * F^*$ y reflectividad $R = B * B^*$

Algoritmo ObtieneMatrizMi

Entrada: $x1$, $x2$, V , \widetilde{E} y m

Salida: MR (matriz \widetilde{M}_i)

Se utilizarán matrices de 2x2: MA, MB, MC, MD, MAI, MCI.

1. $k_1 = \sqrt{2mE}$
 $k_2 = \sqrt{2m(E - V)}$

$$\begin{aligned}
2. \text{ MA}[1][1] &= \text{MA}[2][1] = e^{ik_1x_1} \\
\text{MA}[1][2] &= e^{-ik_1x_1} \\
\text{MA}[2][2] &= -\text{MA}[1][2]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
3. \text{ MB}[1][1] &= e^{ik_2x_1} \\
\text{MB}[1][2] &= e^{-ik_2x_1} \\
\text{MB}[2][1] &= \frac{k_2}{k_1}e^{ik_2x_1} \\
\text{MB}[2][2] &= -\frac{k_2}{k_1}e^{-ik_2x_1}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
4. \text{ MC}[1][1] &= \text{MC}[2][1] = e^{ik_2x_2} \\
\text{MC}[1][2] &= e^{-ik_2x_2} \\
\text{MC}[2][2] &= -\text{MC}[1][2]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
5. \text{ MD}[1][1] &= e^{ik_1x_2} \\
\text{MD}[1][2] &= e^{-ik_1x_2} \\
\text{MD}[2][1] &= \frac{k_1}{k_2}e^{ik_1x_2} \\
\text{MD}[2][2] &= -\frac{k_1}{k_2}e^{-ik_1x_2}
\end{aligned}$$

6. Hallamos las inversas de MA y MC

Inversa(MA, (devuelve) MAI)

Inversa(MC, (devuelve) MCI)

7. Realizamos el producto de matrices

ProductoMatrices(MAI, MB, (devuelve) MR)

ProductoMatrices(MR, MCI, (devuelve) MR)

ProductoMatrices(MR, MD, (devuelve) MR)

8. Salida: MR

Algoritmo Inversa

Entrada: ME (matriz entrada)

Salida: MI (matriz invertida)

$$\text{DetM} = \text{ME}[1][1] * \text{ME}[2][2] - \text{ME}[2][1] * \text{ME}[1][2]$$

$$\text{MI}[1][1] = \text{ME}[2][2]/\text{DetM}$$

$$\text{MI}[1][2] = -\text{ME}[1][2]/\text{DetM}$$

$$\text{MI}[2][1] = -\text{ME}[2][1]/\text{DetM}$$

$$\text{MI}[2][2] = \text{ME}[1][1]/\text{DetM}$$

Algoritmo ProductoMatrices

Entrada: M1, M2 (matrices a multiplicar)

Salida: MP (Matriz resultante del producto de matrices)

- Para $i = 1$ hasta 2 hacer
 - Para $j = 1$ hasta 2 hacer
 - Para $k = 1$ hasta 2 hacer
$$MP[i][j] = MP[i][j] + M1[i][k] * M2[k][j]$$

Notas:

1. La multiplicación y la división tienen mayor prioridad que la suma o la resta, es decir, al realizar una operación primero se realiza la multiplicación o división y después la suma o la resta.
2. Se pueden iterar los pasos 3, 4 y 5 del algoritmo principal para hallar la transmitividad y reflectividad de un conjunto de valores de energía y así poder estudiar el comportamiento del sistema para este rango de energía.

El algoritmo anterior del MMT nos permite hallar T y R para un valor de energía, pero si deseamos estudiar el comportamiento de un sistema multibarreras para un rango de energía haciendo colisionar un número determinado de partículas, podemos realizar lo siguiente:

1. En vez de recibir un valor de E como entrada, recibimos dos valores, la energía inicial que la denotamos por E_i y la energía final que la denotamos por E_f .
2. Recibimos el dato del número de partículas a colisionar y lo almacenamos en la variable $npuntos$.
3. Seguimos los puntos 1 y 2 del algoritmo principal del MMT.
4. Definimos una variable $deltaE$ que es el factor de incremento de energía, es decir,

$$deltaE = (E_f - E_i)/(npuntos - 1).$$

5. Iteramos $npuntos$ veces el MMT, a partir de su energía inicial e incrementamos ésta con $deltaE$ en cada iteración.
 - $E = E_i$
 - $deltaE = (E_f - E_i)/(npuntos - 1)$
 - Para $i = 1$ hasta $npuntos$ hacer:
 - Pasos 3, 4 y 5 del algoritmo principal del MMT
 - $E = E + deltaE$
 - Mostramos T y R resultantes

Los pasos anteriores nos describen un algoritmo del MMT para múltiples valores de energía (de las partículas) que están en un cierto rango; notar que dichos valores están definidos por un factor de incremento δE , por lo que si el número de partículas (n_{puntos}) aumenta, entonces δE será más pequeño y nos ofrece así la posibilidad de obtener los valores resultantes de T con respecto a dichas energías, es decir, podemos definir una función $T(E)$ llamada “*coeficiente de transmisión*” que es la proporción de partículas incidentes que se transmiten (lo mismo se puede hacer con los valores de R).

Capítulo 2

Potenciales de Barrera Rectangulares con campo externo y Trapezoidales con funciones de Airy

2.1. Teoría de Floquet

Considere el sistema de ecuaciones diferenciales lineales periódicas

$$x' = A(t)x \tag{2.1}$$

donde x es un vector, $A(t)$ es una matriz de $n \times n$ continua y periódica en t en algún periodo T ; es decir, $A(t + T) = A(t)$.

El resultado fundamental para el sistema 2.1, concierne a la representación de Floquet del sistema fundamental de soluciones de 2.1, como el producto de una matriz periódica de periodo T y una matriz solución del sistema con coeficientes constantes. Esto lo podemos ver con mayor precisión en el siguiente teorema [Hale].

Teorema 1: Si $X(t)$ es un sistema fundamental de soluciones de la ecuación 2.1, entonces también lo es $X(t+T)$. Para cada sistema fundamental $X(t)$, existe una matriz periódica no singular $Q(t)$ de periodo T y una matriz constante B tal que:

$$X(t) = Q(t)e^{tB} \tag{2.2}$$

Veamos la implicación de este resultado. Primero observamos que esto implica que hay al menos una solución de 2.1 $x(t)$ de 2.2 de tal forma que:

$$x(t + T) = \rho x(t) \tag{2.3}$$

para toda t , donde $\rho \neq 0$ es una constante conveniente (real o compleja). De hecho, si $x(t)$ es una solución de 2.1, entonces existe un vector x_0 de tamaño n que es constante tal que:

$$x(t) = X(t)x_0 = Q(t)e^{tB}x_0 \tag{2.4}$$

donde $X(t)$ es un sistema fundamental de soluciones. Si $x(t)$ satisface 2.3, entonces cálculos simples muestran que μ y x_0 deben satisfacer la relación

$$(e^{TB} - \rho I)x_0 = 0$$

donde I es la matriz identidad. En consecuencia, si ρ es un eigenvalor de e^{TB} y x_0 es un correspondiente eigenvector, entonces la solución $x(t)$ definida por 2.4 se ha formado propiamente.

Los eigenvalores de la matriz e^{TB} son llamados *multiplicadores característicos* del sistema 2.1, donde podemos notar que en cada multiplicador característico ρ de 2.1 existe al menos una solución que satisface la ecuación 2.3; esto es, para cada multiplicador característico ρ de 2.1, podemos definir un *exponente característico* τ por la relación $\rho = e^{\tau T}$. Notar que los números τ no son únicos. De hecho si $T = 2\pi/\omega$, entonces τ es determinado sólo por una integral múltiple de ωi .

La matriz e^{tB} es un sistema fundamental de soluciones del sistema lineal con coeficientes constantes

$$y' = By$$

y así el comportamiento de las soluciones del sistema 2.1 es claro de 2.2.

Suponemos $X(t)$, $X(0) = I$, la identidad es un sistema fundamental de 2.1, a partir de esta podemos determinar lo siguiente:

$$\det X(T) = [\det X(0)] \exp \int_0^T \text{tr} A(t) dt = \exp \int_0^T \text{tr} A(t) dt$$

Si ρ_1, \dots, ρ_m , $m \leq n$ son multiplicadores característicos de 2.1 (es decir, los eigenvalores de e^{TB}), y τ_1, \dots, τ_m son los correspondientes exponentes característicos, entonces por 2.2, $X(T) = e^{TB}$ y esto implica las siguientes relaciones importantes:

$$\exp(\tau_1 + \dots + \tau_m)T = \rho_1 + \dots + \rho_m = \exp \int_0^T \text{tr} A(t) dt$$

$$\tau_1 + \dots + \tau_m \equiv \frac{1}{T} \int_0^T \text{tr} A(t) dt \pmod{\omega i}$$

Un número a es llamado *congruente a módulo d* y se denota como $a \equiv b \pmod{d}$ si existe un entero m tal que $a - b = md$. La representación de 2.2 también implica el siguiente resultado [Hale].

Teorema 2: Todas las soluciones del sistema 2.1 se aproximan a cero cuando $t \rightarrow \infty$ si y sólo si $|\rho_j| < 1$ para cada multiplicador característico ρ_j de 2.1. Todas las soluciones de 2.1 están acotadas por $0 \leq t < +\infty$ si y sólo si cada multiplicador característico ρ_j de 2.1 tiene $|\rho_j| \leq 1$. Si $|\rho_j| = 1$, entonces ρ_j debe tener divisores elementales simples (es decir, ρ_j es un eigenvalor de e^{TB} debe tener divisores elementales simples). El sistema 2.1 tiene una solución periódica si y sólo si existe un multiplicador característico de 2.1, el cual es igual a -1 y tiene una solución periódica con un periodo de $2T$.

Si $A = A(t, \epsilon)$ en 2.1 es una función continua de t, ϵ para toda t , $-\infty < t < \infty$ y ϵ en alguna vecindad U de $\epsilon = 0$ (ϵ puede ser complejo), entonces la matriz $B = B(\epsilon)$ en 2.2

es una función continua de ϵ en U ; donde los multiplicadores característicos $\rho_j = \rho_j(\epsilon)$ son los eigenvalores de la matriz $e^{TB(\epsilon)}$, éstos pueden ser considerados como funciones continuas de (ϵ) .

Además, uno puede elegir una representación del exponente característico $\tau_j(\epsilon)$ definido por $\rho_j(\epsilon) = \exp(T_{\tau_j}(\epsilon))$ de tal manera de que $\tau_j(\epsilon)$ es una función continua de ϵ . Si para cada $\epsilon = 0$, $A(t, 0)$ es una matriz constante cuyos eigenvalores son λ_j entonces uno puede elegir $\tau_j(\epsilon) = \lambda_j$ y define $\tau_j(\epsilon)$ como una función continua de ϵ . Si $T = \frac{2\pi}{\omega}$, $A(t, 0)$ constante y $\tau_j(0) = \lambda_j + m\omega i$ para algún entero fijo m , entonces también uno puede definir $\tau_j(\epsilon)$ como una función continua de ϵ . Si los elementos de $A(t, \epsilon)$ son funciones analíticas de ϵ , entonces cada exponente característico $\tau_j(\epsilon)$ puede ser considerado como una función analítica de alguna potencia fraccional de ϵ .

Para obtener las propiedades anteriores de exponentes y multiplicadores característicos como función de un parámetro, no es necesario asumir que $A(t, \epsilon)$ es continua en ϵ en alguna región U de $\epsilon = 0$, y existe una función $\eta(t)$, L integrable en $[0, T]$ tal que $\|A(t, \epsilon)\| \leq \eta(t)$, $0 \leq t \leq T$, ϵ en U .

Como última observación, si $A(t)$ en 2.1 es una matriz real de $n \times n$ y ρ es un multiplicador característico de 2.1, entonces el complejo conjugado $\bar{\rho}$ es también un multiplicador característico de 2.1. De hecho si $X(t)$ es un sistema fundamental de 2.1 con $X(0) = I$, la ecuación característica $\det[X(T) - \rho I] = 0$ es un polinomio de coeficientes reales.

2.2. Potenciales de barrera con campo externo

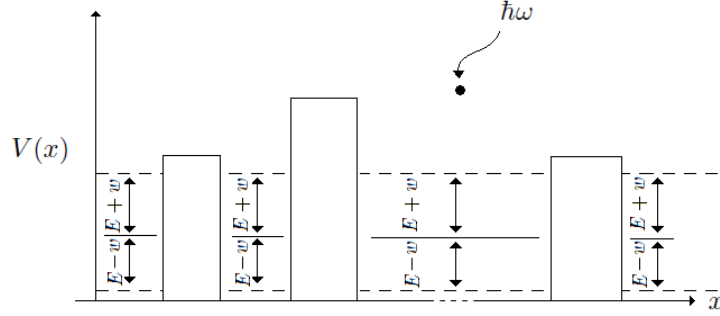


Figura 2.1: Potencial de barrera con campo externo

En esta sección se introducirá un campo externo tipo láser (ver figura 2.1), el cual se puede describir dentro de la ecuación de Schrödinger como un término periódico en el tiempo y de cierta amplitud ($A \cos(\omega t)$), el cual inducirá nuevos estados por absorción y emisión fotónica debido al acoplamiento entre el objeto de estudio y el campo externo, la forma que toma la ecuación de onda cuántica bajo esta perturbación es la siguiente:

$$\hat{H}\Psi = E\Psi,$$

donde

$$\hat{H} = -\imath \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) + \vec{\mu} \cdot \vec{E}(t).$$

Donde el término que modela la interacción con el laser $\vec{\mu} \cdot \vec{E}(t)$ se puede escribir como

$$\vec{\mu} \cdot \vec{E}(t) = A(t) \cos(\omega t),$$

considerando que la fase del campo se mantiene constante y que la amplitud no depende del tiempo, entonces en unidades atómicas

$$\hat{H} = -\imath \frac{1}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) + A \cos(\omega t).$$

Bajo éstas circunstancias es claro que la integración de la Ecuación de Schrödinger deja de ser simple, más si consideramos la solución en un ciclo del campo, es decir hacemos el promedio de la parte dependiente del tiempo en un periodo $T \in [0, 2\pi]$, la consecuencia será que la parte temporal dejará de estar presente y obtendremos los valores medios de la solución, pero por otro lado la periodicidad de la interacción nos indica que para cada periodo existe la probabilidad de que se produzca una absorción o bien emisión de un fotón de energía $\hbar\omega$. Pero dado el carácter periódico del campo, el mismo proceso se puede dar en un periodo posterior. Esto se debe a la periodicidad del campo, de donde se debe considerar que la interacción tiene el mismo periodo, es decir

$$F(t) = A \cos(\omega t) = A \cos(\omega(t + nT)) = F(t + nT),$$

donde $T = \frac{2\pi}{\omega}$.

Si consideramos el teorema de Floquet, entonces los procesos de absorción y emisión posibles se pueden modelar como el conjunto $\{E \pm n\omega\}$. Si escribimos el Hamiltoniano del sistema en éstos términos tendremos que

$$\hat{H} = -i\frac{1}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \pm n\omega.$$

Debemos considerar que para cada valor de n se creará un canal en el sistema, y no necesariamente todos estarán abiertos, es decir algunos presentarán un comportamiento periódico y otros amortiguado como es de esperarse.

Si escribimos la ecuación de dispersión para el problema de scattering sobre una discontinuidad en el Sistema Multi-Barreras (SMB), tendremos que

$$\hat{H}\Psi = E\Psi,$$

donde E es una variable que puede variar entre el mínimo y máximo admisible en el sistema mientras la energía E sea real para la onda incidente. Como es tradicional si reescribimos el problema en este esquema, tendremos que

$$-i\frac{1}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi + V(x)\Psi \pm n\omega\Psi = E\Psi,$$

entonces la dinámica del sistema de dispersión se puede determinar resolviendo el problema

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi = \frac{2m}{-i}\{-V(x) \pm n\omega + E\}\Psi,$$

definiendo como es normal el vector de onda $k(E)$ para cada sección del SMB, tendremos que

$$k_{\pm n}^2(E) = 2m(E - V(x) \pm n\omega).$$

Así dependiendo de los valores de E , $V(x)$ y $n\omega$ tendremos canales abiertos y cerrados. Podemos ahora replantear el problema de la Matriz de Transferencia (MT) para la situación con campo. En el modelo simple cuando no hay campo la forma de la MT para una discontinuidad esta dado por la forma

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} e^{ikx} & e^{-ikx} \\ ik e^{ikx} & -ik e^{-ikx} \end{pmatrix},$$

la cual debe evaluarse en cada discontinuidad considerando los cambios locales en $V(x)$, y luego conectarse.

En el caso de un campo presente, éste debe ser introducido y para cada canal fotónico debe incluirse un nuevo término, por ejemplo para el caso de $n = 1$ deberemos considerar los nuevos términos $E \pm \omega$, lo cual nos introducirá cuatro coeficientes más, dos para la continuidad de la función, dos para la continuidad en la derivada, es decir la forma de la función de onda será

$$\Psi(x) = C_1 e^{ik_1 x} + C_2 e^{-ik_1 x} + C_3 e^{ikx} + C_4 e^{-ikx} + C_5 e^{ik_1 x} + C_6 e^{-ik_1 x},$$

es decir debemos hacer la conexión de los 6 coeficientes para cada discontinuidad. Para el caso de $n = 2$ la función de onda deberá contemplar los casos $E - 2\omega, E - \omega, E, E + \omega, E + 2\omega$, lo cual derivará en una función de onda con 10 coeficientes, en general el número de elementos a determinar sigue la relación $N = 4n + 2$, donde n es el número de canales fotónicos abiertos. Por cada nivel considerado de transmisión n habrá 4 nuevos coeficientes complejos a evaluar. Así el problema de n canales nos planteará una MT de $4n + 2$ dimensiones. El mecanismo de operación será similar al caso de $n = 0$, es decir se debe resolver el problema de propagación y hallar T y R , pero ahora en un espacio de $4n + 2$ dimensiones.

Para la implementación del método de la Matriz de Transferencia, podemos reutilizar el algoritmo 1.7 y modificar el procedimiento del algoritmo ObtieneMatrizMi como a continuación se describe.

Algoritmo ObtieneMatrizMi

Entrada: x_1, x_2, V, E, m, w y $ncan$ (no. de canales)

Salida: MR (matriz \widetilde{M}_i)

$N = 4 \cdot ncan + 2$

Se utilizarán matrices de $N \times N$: MA, MB, MC, MD, MAI, MCI.

1. Obtenemos $k_1[i, j]$ y $k_2[i, j]$ (constantes k_1 y k_2 para cada canal).

- $ncan = 0, 1, 2$. (De acuerdo al experimento se elige: 0, 1 ó 2).
- $n1 = 2 * ncan + 1$
- Para $i = 1$ hasta $n1$ hacer:
 - $ll = 1 - (ncan + 1)$
 - Para $j = ll$ hasta $(-1)(ncan)$ hacer:
 - $k_1[i, j] = \sqrt{2 * m * (E + (j * (i/n1) * w))}$
 - $k_2[i, j] = \sqrt{2 * m * (E + (j * (i/n1) * w)) - V}$

2. Obtenemos la matriz MA

- $n2 = 2 * n1$
- Para $i = 1$ hasta $n1$ hacer:
 - $ll = 1 - (ncan + 1)$
 - Para $j = 1$ hasta $n2$ hacer:
 - $signo = (-1)^{j-1}$
 - $argumento = \exp(signo * ik_1[i, ll] * x_1)$
 - $MA[i, j] = argumento$
 - $MA[i + n1, j] = signo * ik_1[i, ll] * argumento$
 - si $((j \bmod 2) == 0)$ entonces $ll = ll + 1$

3. Análogo para las matrices MB con x_1 y k_2 , MC con x_2 y k_2 y MD con x_2 y k_1 .

4. Hallamos las inversas de MA y MC (usando el método de Gauss-Jordan con pivoteo parcial escalado).

Inversa(MA, (devuelve) MAI)

Inversa(MC, (devuelve) MCI)

5. Realizamos el producto de matrices

ProductoMatrices(MAI, MB, (devuelve) MR)

ProductoMatrices(MR, MCI, (devuelve) MR)

ProductoMatrices(MR, MD, (devuelve) MR)

6. Salida: MR

El tiempo de ejecución del algoritmo es a los más de $O(n^3)$ por los algoritmos del método de Gauss-Jordan y del producto de matrices.

Podemos consultar [Martin2] y [Martin3] para revisar diversos experimentos con potenciales de barrera donde tienen presente un campo oscilatorio, donde además exponen la teoría de Floquet para la solución de los modelos de barrera descritos anteriormente.

2.3. Potencial de barrera con funciones de Airy

En la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, si la función de potencial es una función lineal, es conocido que la solución (la función de onda) puede ser expresada como una combinación lineal de funciones de Airy [Fukuma]. Para ponerlo en términos analíticos, consideramos un potencial arbitrario con inclinaciones como el que se muestra en la Figura 2.2 de la siguiente manera:

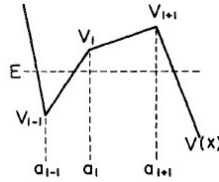


Figura 2.2: Potencial con pendiente

definiendo:

$$V(x) = -F_i(x - b_i),$$

$$b_i = a_i + \frac{V_i}{F_i},$$

$$F_i = -(V_{i+1} - V_i)/(a_{i+1} - a_i),$$

donde $i = 0, 1, 2, \dots, N$ para $a_i < x < a_{i+1}$ con V_i y a_i constantes. Aquí, F_i puede ser identificado como el campo local que atraviesa el intervalo.

La solución de la ecuación de Schrödinger que cruza el intervalo (a_i, a_{i+1}) , $u_i(x)$ estará dado por:

$$u_i(x) = C_i^1 Ai(z_i) + C_i^2 Bi(z_i),$$

con

$$z_i = r_i(c_i - x),$$

$$r_i = -(2m * F_i / \hbar)^{1/3}, \quad (2.5)$$

$$c_i = a_i + (V_i - E)/F_i,$$

donde Ai y Bi son funciones de Airy; C_i^1 y C_i^2 son coeficientes a determinar; m es la masa; E es la energía de la partícula incidente; y \hbar es la constante reducida de Planck.

En el punto a_i , la conservación de energía requiere la continuidad de la función de onda, mientras la conservación del momentum exige la continuidad de la primera derivada de la función de onda. Analíticamente, esto se interpreta como:

$$u_i(a_i) = u_{i+1}(a_i), \quad (2.6)$$

$$u'_i(a_i) = u'_{i+1}(a_i)$$

donde la primera derivada es respecto a x .

Usando las ecuaciones 2.5 y 2.6, podemos realizar un sistema de 2 ecuaciones lineales con 2 incógnitas representado de la siguiente forma:

$$M_i(z_{i,i})C_i = M_{i+1}(z_{i+1,i})C_{i+1},$$

donde $C_i = (C_i^{(1)} C_i^{(2)})^r$,

$$M_i(z) = \begin{pmatrix} Ai(z) & Bi(z) \\ -r_i Ai'(z) & -r_i Bi'(z) \end{pmatrix},$$

$$z_{i,j} = r_i(c_i - a_j),$$

$$\text{para } i, j = 0, 1, 2, \dots, N. \quad (2.7)$$

Las matrices de 2x2 M_i y M_{i+1} son definidas como matrices de transferencia en el punto $x = a_i$. De acuerdo a la ecuación 1.41 la resolución de la ecuación de Schrödinger que atraviesa N intervalos ha sido reducida a la solución de $N + 1$ matrices. Para determinar los coeficientes C exactamente, otra condición que se debe cumplir, es la normalización de la función de onda que estaremos considerando. Las ecuaciones 2.5 y 2.7 constituyen la parte exacta de la solución de la ecuación de Schrödinger para potenciales arbitrarios con inclinaciones en una dimensión.

La solución con sustitución hacia atrás, una de las formas más eficientes de resolver un conjunto de ecuaciones lineales dadas por la ecuación 2.7, es con la identidad

$$W\{Ai, Bi\} = 1/\pi,$$

donde W denota el Wronskiano de las funciones de Airy, es usado particularmente para la evaluación de la inversa de las matrices de transferencia.

2.3.1. Cálculo del coeficiente de transmisividad

Consideremos el potencial de barrera que se muestra en la figura 2.3. En la región $x < a_0$ y $x > a_N$, donde el potencial es constante, la función de onda es la solución de la ecuación de Schrödinger para la partícula libre y está dada por:

$$\begin{aligned} u_0(x) &= A \exp[ik_L(x - a_0)] + B \exp[-ik_L(x - a_0)] & x < a_0 \\ u_{N+1}(x) &= H \exp[ik_R(x - a_N)] + G \exp[-ik_R(x - a_N)] & x > a_N \end{aligned}$$

donde

$$\begin{aligned} k_L &= \sqrt{2m(E - V_L)/\hbar^2} \\ k_R &= \sqrt{2m(E - V_R)/\hbar^2} \end{aligned}$$

por lo cual A , B , G y H son coeficientes a determinar.

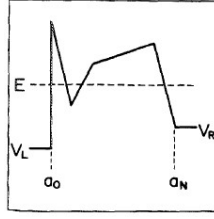


Figura 2.3: Potencial arbitrario con inclinación

Siguiendo el procedimiento de Matriz de Transferencia visto previamente para potenciales con pendiente, los coeficientes A , B , G y H pueden obtenerse usando las ecuaciones 2.6 y 2.7, de tal modo

$$M_R(AB)^T = MM_L(HG)^T,$$

donde

$$M_R = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ ik_R & -ik_R \end{pmatrix},$$

$$M_L = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ ik_L & -ik_L \end{pmatrix},$$

y

$$M = \begin{matrix} M_1(z_{1,0})M_1^{-1}(z_{1,1})M_2(z_{2,1}) \dots \\ \dots M_i^{-1}(z_{i,i})M_{i+1}(z_{i+1,i}) \dots \\ \dots M_N(z_{N,N-1})M_N^{-1}(z_{N,N}). \end{matrix}$$

Ahora bien, si no hay partícula que incida por la derecha

$$G = 0.$$

El coeficiente de transmisión está dado por:

$$T = \frac{|H|^2 k_R}{|A|^2 k_L}$$

donde el numerador denota la densidad de probabilidad de la partícula transmitida y el denominador representa la penetración (por la izquierda) de la densidad de probabilidad de la partícula.

Para la implementación del método de la Matriz de Transferencia con funciones de Airy, podemos reutilizar el algoritmo 1.7 y modificar el procedimiento del algoritmo ObtieneMatrizMi como a continuación se describe.

Algoritmo ObtieneMatrizMi

Entrada: $x_1, x_2, V, \underline{E}, m$ y pendiente

Salida: MR (matriz \widetilde{M}_i)

Se utilizarán matrices de 2x2: MA, MB, MC, MD, MAI, MCI.

1. $k_1 = \sqrt{2mE}$
 $k_2 = \sqrt{2m(E - V)}$
2. $MA[1][1] = MA[2][1] = e^{ik_1x_1}$
 $MA[1][2] = e^{-ik_1x_1}$
 $MA[2][2] = -MA[1][2]$
3. si (*pendiente* > 0)
 - $V_2 = V$
 - $b = V_2 - \textit{pendiente} * x_2$
 - $V_1 = \textit{pendiente} * x_1 + b$sino
 - $V_1 = V$
 - $b = V_1 - \textit{pendiente} * x_1$
 - $V_2 = \textit{pendiente} * x_2 + b$
4. $f = -\textit{pendiente}$
 $c = x_1 + (V_1 - E)/f$
 $r = -(2 * m * f)^{1/3}$
 $z_1 = r * (c - x_1)$
 $z_2 = r * (c - x_2)$
 $ai = Ai(z_1)$ (función de Airy Ai evaluada en z_1).
 $bi = Bi(z_1)$ (función de Airy Bi evaluada en z_1).
 $aip = Ai'(z_1)$ (función prima de Airy Ai' evaluada en z_1).
 $bip = Bi'(z_1)$ (función prima de Airy Bi' evaluada en z_1).
5. $MB[1][1] = ai$
 $MB[1][2] = bi$
 $MB[2][1] = -r *aip$
 $MB[2][2] = -r *bip$
6. $ai = Ai(z_2)$ (función de Airy Ai evaluada en z_2).
 $bi = Bi(z_2)$ (función de Airy Bi evaluada en z_2).
 $aip = Ai'(z_2)$ (función prima de Airy Ai' evaluada en z_2).
 $bip = Bi'(z_2)$ (función prima de Airy Bi' evaluada en z_2).

$$\begin{aligned}
7. \quad & \text{MC}[1][1] = ai \\
& \text{MC}[1][2] = bi \\
& \text{MC}[2][1] = -r * aip \\
& \text{MC}[2][2] = -r * bip
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
8. \quad & \text{MD}[1][1] = e^{ik_1x_2} \\
& \text{MD}[1][2] = e^{-ik_1x_2} \\
& \text{MD}[2][1] = \frac{k_1}{k_2} e^{ik_1x_2} \\
& \text{MD}[2][2] = -\frac{k_1}{k_2} e^{-ik_1x_2}
\end{aligned}$$

9. Hallamos las inversas de MA y MC
 Inversa(MA, (devuelve) MAI)
 Inversa(MC, (devuelve) MCI)

10. Realizamos el producto de matrices
 ProductoMatrices(MAI, MB, (devuelve) MR)
 ProductoMatrices(MR, MCI, (devuelve) MR)
 ProductoMatrices(MR, MD, (devuelve) MR)

11. Salida: MR

Para hallar los valores de las funciones de Airy evaluadas en z_1 y z_2 tomamos los valores de las tablas presentadas en [Abramowitz] que sirvieron de guía para la construcción de un algoritmo de interpolación (basado en el de Lagrange) para aproximarnos a los valores de las funciones de Airy evaluados de z_1 y z_2 que eran requeridos en la simulación de cada experimento.

Para mayor referencia de trabajos especializados con en el Método de la Matriz de Transferencia podemos consultar los artículos de [Fedirko1] y [Fedirko2] donde realiza una simulación del método basado en el Esquema de Diferencias de Adams y sus implicaciones numéricas. Otro estudio teniendo en cuenta la parte numérica la expone [Vatannia] para voltajes muy bajos y [Jirauschek] aplica el MMT para la solución de la Ecuación de Schrödinger de masa Efectiva usando MATLAB. En [Kyu-Tae Lee] utiliza funciones de Airy modificadas (MAF) para la solución de potenciales en forma de parábola, campana y de funciones exponenciales y compara sus resultados con el método WKB y las soluciones exactas. También [Shukhdev] utiliza MAF para potenciales lineales, parabólicos y exponenciales. En [Ghatak] presenta la solución exacta de la Ecuación de Schrödinger usando MAF. En [Björn] utiliza el MMT con funciones de Airy para la solución de cualquier potencial de pozo aplicados en materiales con la estructura $Al_xGa_{1-x}As$.

Capítulo 3

Implementaciones

3.1. Introducción

Uno de los objetivos de esta tesis es la creación de un sistema que halle la transmisividad y reflectividad de un sistema multibarreras, debido a que no existen muchos programas que resuelvan este problema. Como base de nuestro sistema se utiliza el *método de la Matriz de Transferencia* implementado en Fortran, además de la creación de un interfaz gráfica programada en Kylix 3.0 - Delphi 7.0 que da la facilidad al usuario de que cree sus propios sistemas multibarreras (incluso de una barrera) para realizar ejemplos académicos o complejos.

Este software tiene herramientas para guardar los sistemas multibarreras creados, dibujar los esquemas de éstos, guardarlos e imprimirlos, además de guardar los valores resultantes de T y R , graficar dichos resultados e imprimir sus gráficas. También se cuenta con las herramientas de edición básica (cortar, copiar, pegar, suprimir, etc.) para dar una mayor facilidad de uso al sistema. Otra ventaja es que el software es compatible con los sistemas operativos Linux y Windows, es decir, se adecuó el código fuente del programa para que al compilarlo en Kylix 3.0 - Delphi 7.0 fuera compatible en dichos programas.

En la construcción de la interfaz gráfica, utilizamos la compilación condicional¹ en Kylix 3.0 - Delphi 7.0, principalmente para los detalles del llamado a la rutina en Fortran² del MMT, debido a que las sentencias de llamado a programas externos son diferentes en Kylix 3.0 y Delphi 7.0. También se utilizó dicha compilación para la ejecución de los procedimientos de impresión del programa, dado que Linux y Windows manejan de forma diferente los servicios de impresión.

¹La compilación condicional proporciona una forma de incluir código selectivamente, dependiendo del valor de las condiciones evaluadas durante la compilación.

²El mismo código fuente en Fortran se compiló bajo Linux y Windows



Figura 3.1: Pantalla del Sistema Multi-Barreras

En la figura 3.1 se presenta la pantalla principal del software llamado “*Sistema Multi-Barreras (SMB)*” y en la figura 3.2 se muestra la pantalla de transmisividad T .

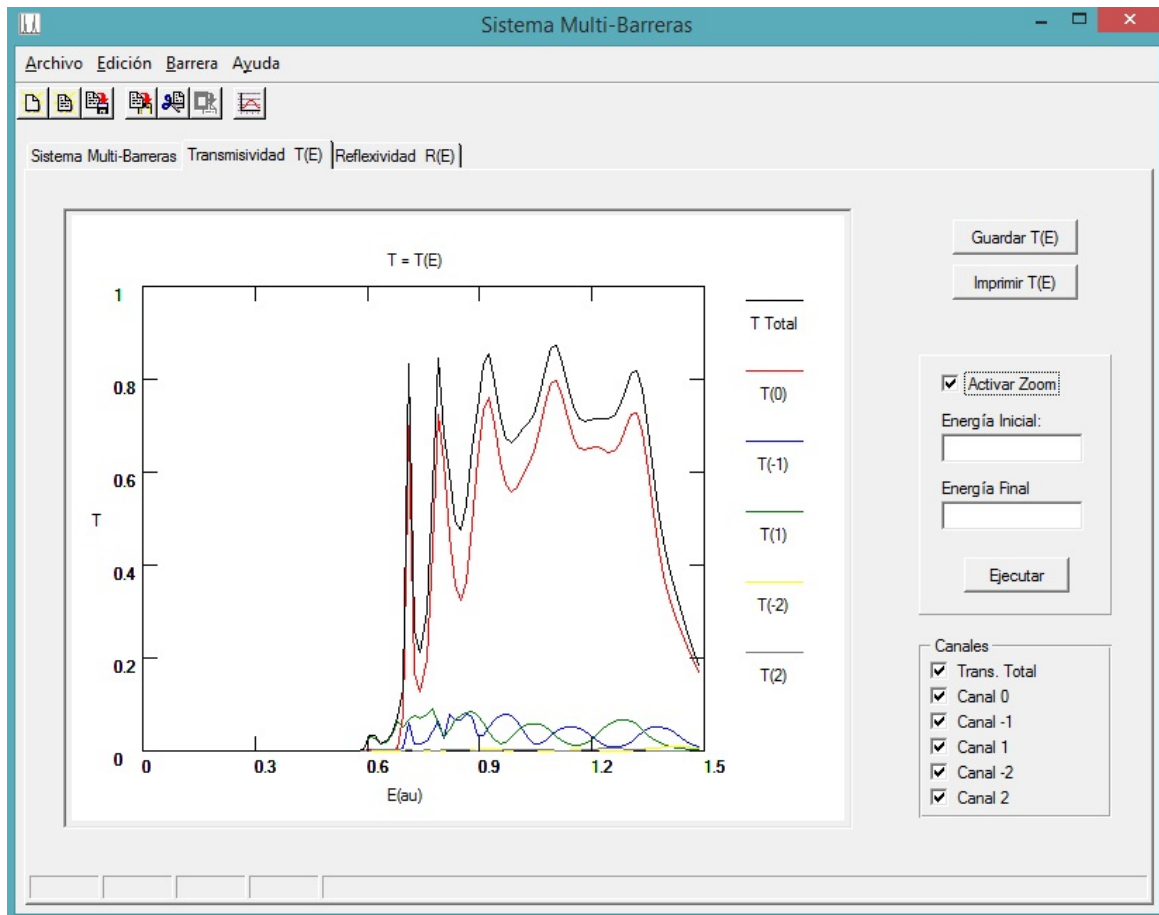


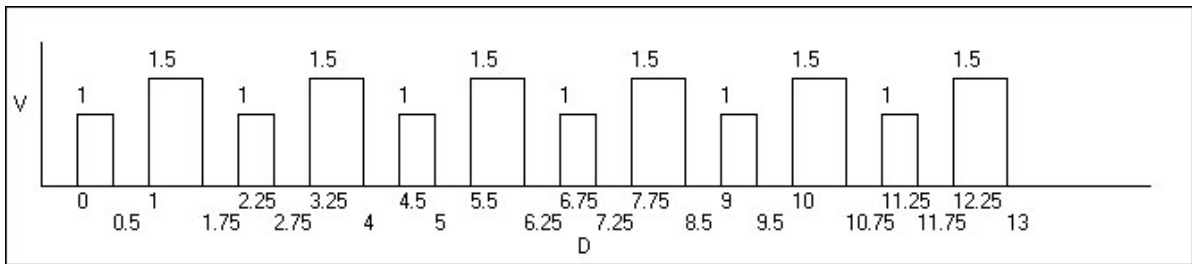
Figura 3.2: Pantalla que muestra la gráfica de T

3.2. Ejemplos implementados

3.2.1. Ejemplo 1:

Hallar la transmisividad del siguiente modelo de 12 barreras, para partículas incidentes de masa $m = 1$ con un rango de energía de $[0.0, 1.5]$, con amplitud del campo 0.005 y frecuencia de 0.1. El experimento se realizará con $n = 2$ canales.

Ancho de la barrera	Potencial	Distancia
0.5	1	0.5
0.75	1.5	0.5
0.5	1	0.5
0.75	1.5	0.5
0.5	1	0.5
0.75	1.5	0.5
0.5	1	0.5
0.75	1.5	0.5
0.5	1	0.5
0.75	1.5	0.5
0.5	1	0.5
0.75	1.5	0



La gráfica de la transmisividad con campo externo la observamos en la figura 3.3 y la gráfica sin campo en la figura 3.4.

Los picos en la Transmisividad Total (TT) en el experimento con campo están entre (0.82 y 0.85). Para el canal 0, T está entre (0.71 y 0.8) y para los demás canales T es menor a 0.1. Para el experimento sin campo los picos están en: 0.71, 0.79, 0.92, 1.09 y 1.31 a. u. donde $T = 1$.

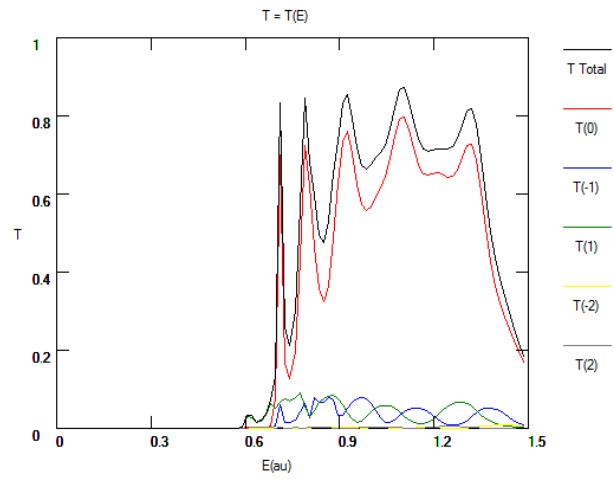


Figura 3.3: Gráfica de T con campo del ejemplo 1

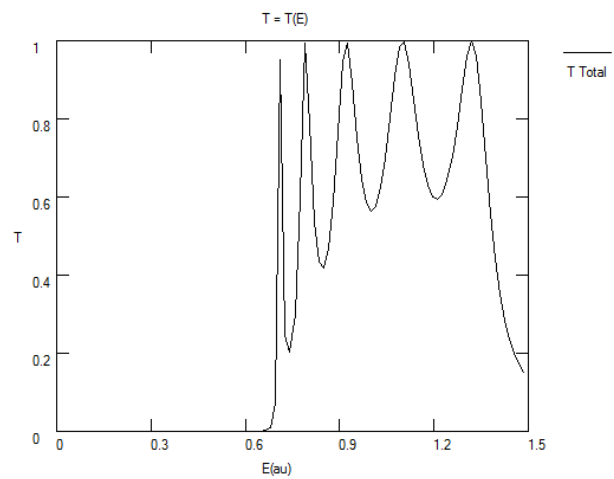


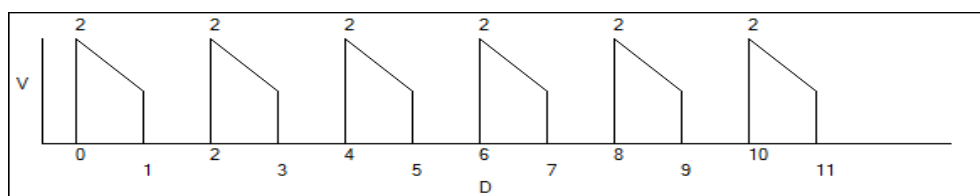
Figura 3.4: Gráfica de T sin campo del ejemplo 1

En los ejemplos del 2 al 7, trabajaremos con un modelo de 6 barreras variando su pendiente y finalizando la simulación haciendo un experimento con un campo externo.

3.2.2. Ejemplo 2:

Hallar la transmisividad del siguiente modelo de 6 barreras con una pendiente a -45 grados, para partículas incidentes de masa $m = 1$ con un rango de energía de $[0.0, 2]$.

Ancho de la barrera	Potencial	Inclinación (Grados)	Distancia
1.0	2.0	-45	1.0
1.0	2.0	-45	1.0
1.0	2.0	-45	1.0
1.0	2.0	-45	1.0
1.0	2.0	-45	1.0
1.0	2.0	-45	1.0



La gráfica de la transmisividad está en la figura 3.5.

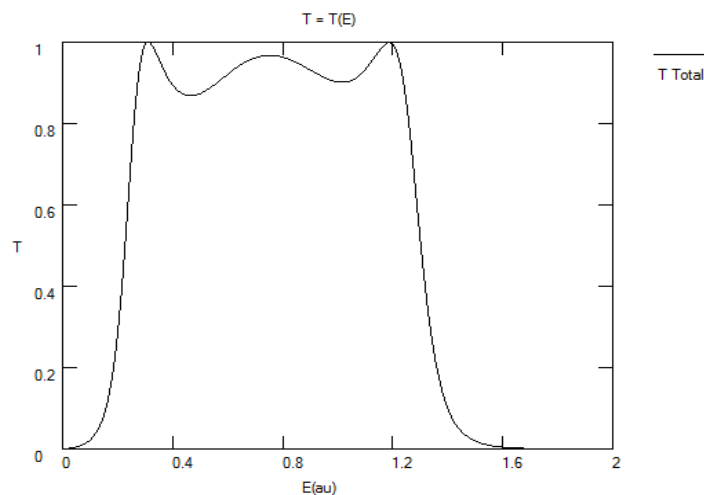


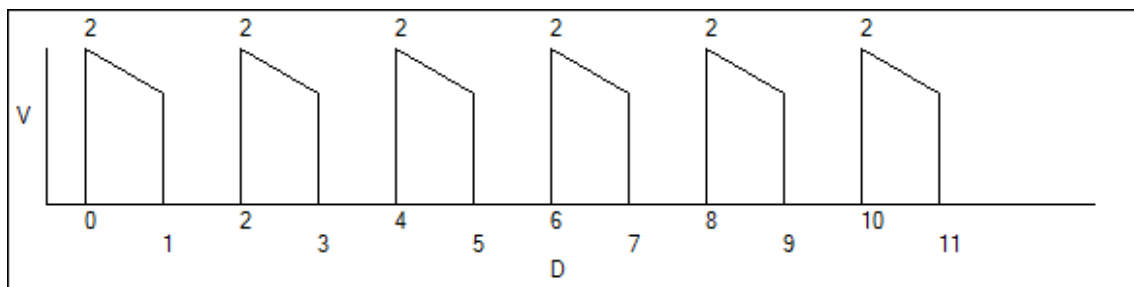
Figura 3.5: Gráfica de T del ejemplo 2

Los picos más altos están en 0.31 a. u. y 1.18 a. u. con $T = 1$, entonces en el intervalo de energía que va de $[0.31, 1.18]$ a. u. la transmisividad es muy alta que va $[0.86, 1]$, por lo que las partículas incidentes tienen mayor probabilidad de pasar por las barreras dentro del intervalo de energía mencionado anteriormente.

3.2.3. Ejemplo 3:

Hallar la transmisividad del siguiente modelo de 6 barreras con una pendiente a -30 grados, para partículas incidentes de masa $m = 1$ con un rango de energía de $[0.0, 2]$.

Ancho de la barrera	Potencial	Inclinación (Grados)	Distancia
1.0	2.0	-30	1.0
1.0	2.0	-30	1.0
1.0	2.0	-30	1.0
1.0	2.0	-30	1.0
1.0	2.0	-30	1.0
1.0	2.0	-30	1.0



La gráfica de la transmisividad es la figura 3.6.

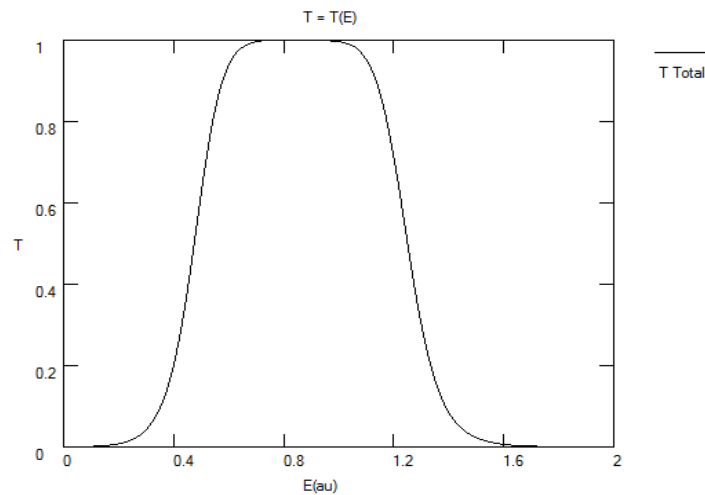


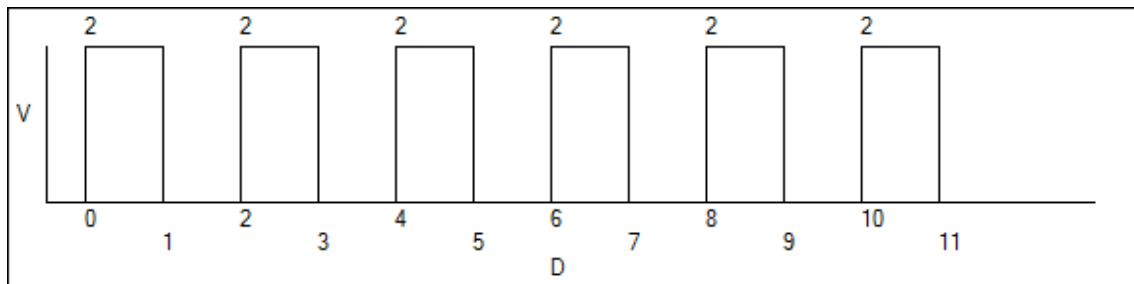
Figura 3.6: Gráfica de T del ejemplo 3

El intervalo más alto está en $[0.72, 0.97]$ a. u. con $T = 1$, entonces en el intervalo de energía que va de $[0.55, 1.17]$ a. u. la transmisividad es muy alta que va $[0.80, 1]$, por lo que las partículas incidentes tienen mayor probabilidad de pasar por las barreras dentro del intervalo de energía mencionado anteriormente.

3.2.4. Ejemplo 4:

Hallar la transmisividad del siguiente modelo de 6 barreras sin pendiente, para partículas incidentes de masa $m = 1$ con un rango de energía de $[0.0, 2]$.

Ancho de la barrera	Potencial	Inclinación (Grados)	Distancia
1.0	2.0	0	1.0
1.0	2.0	0	1.0
1.0	2.0	0	1.0
1.0	2.0	0	1.0
1.0	2.0	0	1.0
1.0	2.0	0	1.0



La gráfica de la transmisividad es la figura 3.7:

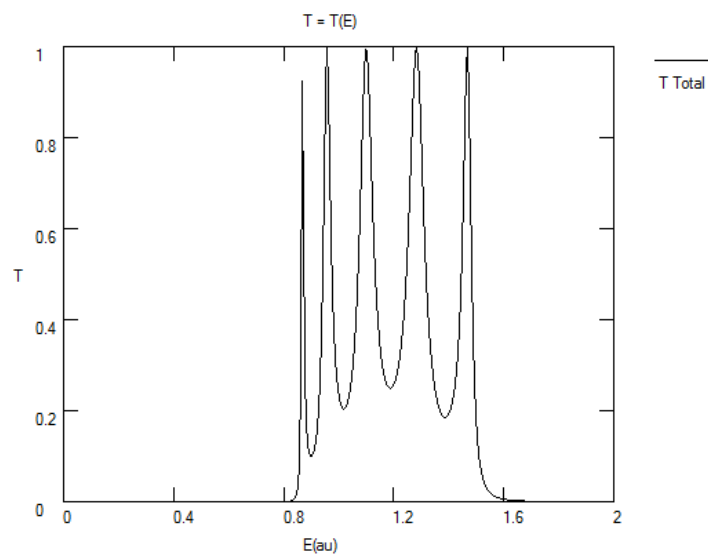


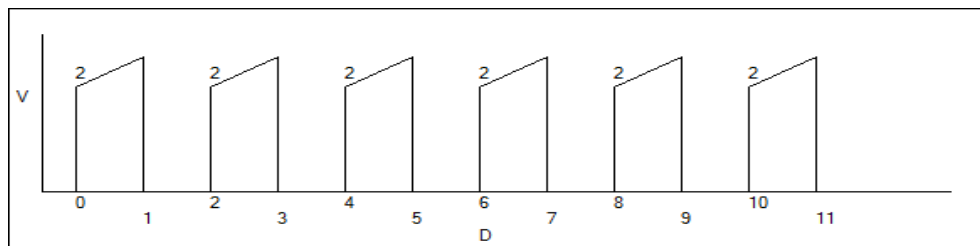
Figura 3.7: Gráfica de T del ejemplo 4

Los picos más altos están en 0.86 a. u. con $T = 0.92$ y en: 0.95, 1.09, 1.28 y 1.47 a. u. con $T = 1$.

3.2.5. Ejemplo 5:

Hallar la transmisividad del siguiente modelo de 6 barreras con una pendiente a 30 grados, para partículas incidentes de masa $m = 1$ con un rango de energía de $[0.0, 2]$.

Ancho de la barrera	Potencial	Inclinación (Grados)	Distancia
1.0	2.0	30	1.0
1.0	2.0	30	1.0
1.0	2.0	30	1.0
1.0	2.0	30	1.0
1.0	2.0	30	1.0
1.0	2.0	30	1.0



La gráfica de la transmisividad es la figura 3.8:

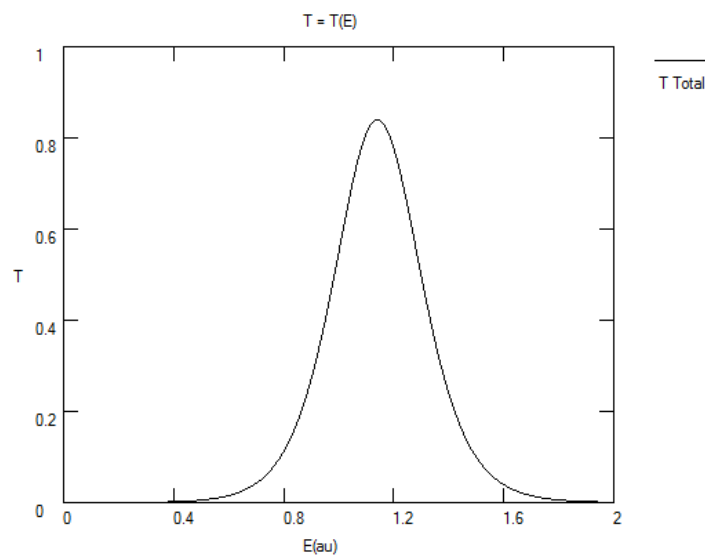


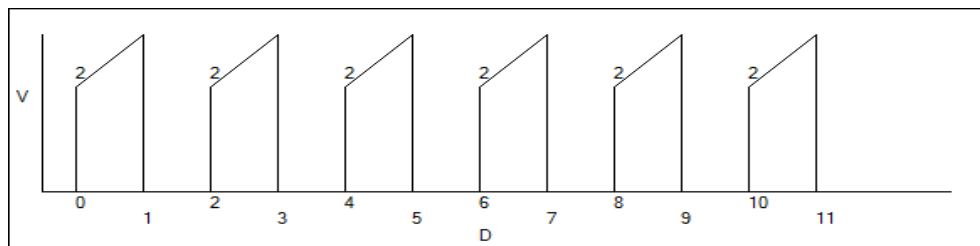
Figura 3.8: Gráfica de T del ejemplo 5

El pico más alto está en 1.13 a. u. con $T = 0.83$, en el intervalo de energía que va de $[1.02, 1.26]$ a. u. la transmisividad está entre $[0.60, 0.83]$.

3.2.6. Ejemplo 6:

Hallar la transmisividad del siguiente modelo de 6 barreras con una pendiente a 45 grados, para partículas incidentes de masa $m = 1$ con un rango de energía de $[0.0, 2]$.

Ancho de la barrera	Potencial	Inclinación (Grados)	Distancia
1.0	2.0	45	1.0
1.0	2.0	45	1.0
1.0	2.0	45	1.0
1.0	2.0	45	1.0
1.0	2.0	45	1.0
1.0	2.0	45	1.0



La gráfica de la transmisividad es la figura 3.9:

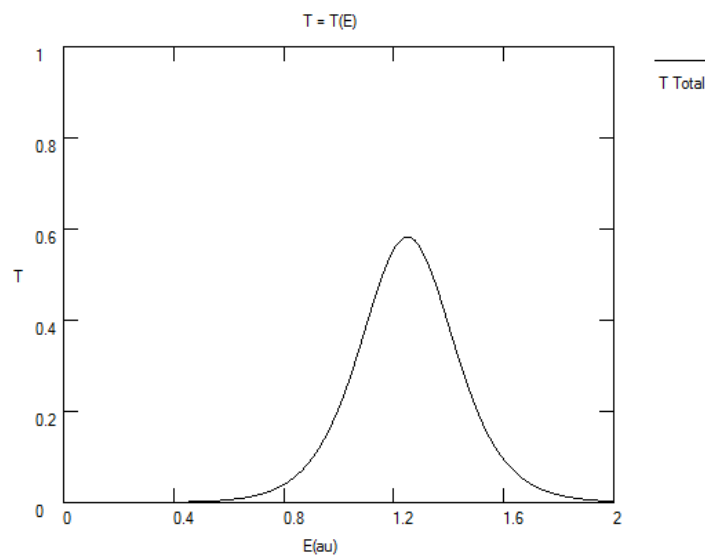


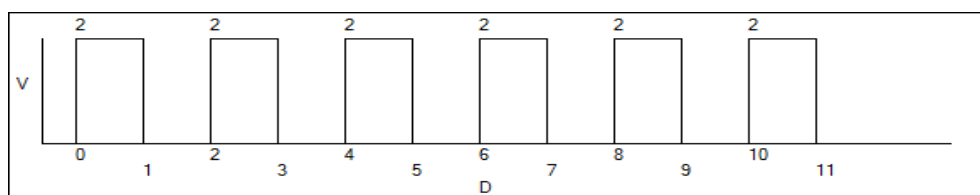
Figura 3.9: Gráfica de T del ejemplo 6

El pico más alto está en 1.25 a. u. con $T = 0.58$, en el intervalo de energía que va de $[1.10, 1.39]$ a. u. la transmisividad está entre $[0.40, 0.58]$.

3.2.7. Ejemplo 7:

Hallar la transmisividad del siguiente modelo de 6 barreras sin pendiente, para partículas incidentes de masa $m = 1$ con un rango de energía de $[0.0, 2]$ con un campo externo con una amplitud de 0.0005 a. u. y una frecuencia de campo de 0.1.

Ancho de la barrera	Potencial	Inclinación (Grados)	Distancia
1.0	2.0	0	1.0
1.0	2.0	0	1.0
1.0	2.0	0	1.0
1.0	2.0	0	1.0
1.0	2.0	0	1.0
1.0	2.0	0	1.0



La gráfica de la transmisividad es la figura 3.10:

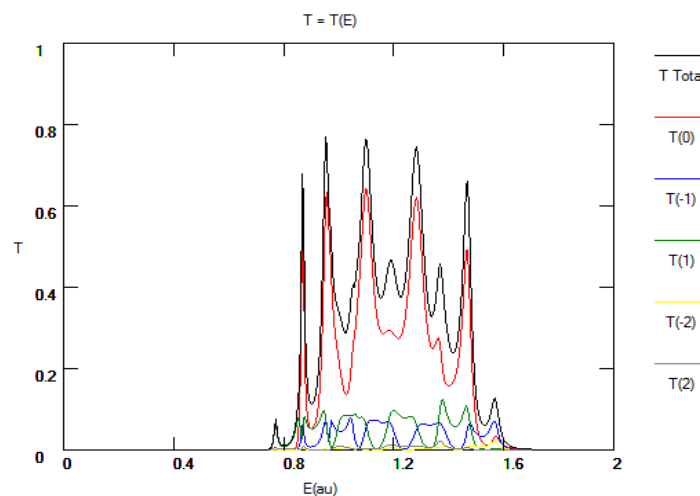


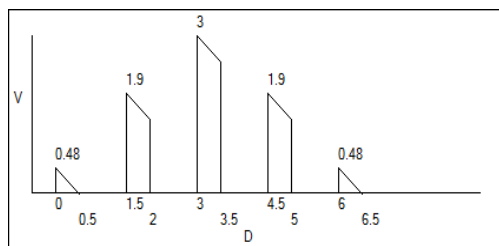
Figura 3.10: Gráfica de T del ejemplo 7

Los picos más altos están en: 0.86, 0.95, 1.10, 1.27 y 1.47 a. u. (similar al ejemplo 4) con $T = 0.67, 0.77, 0.76, 0.74$ y 0.65 para la transmisividad total. Para el canal 0 los picos están en los mismos puntos con una transmisividad de $T = 0.58, 0.63, 0.64, 0.61$ y 0.49 respectivamente. Para los canales -1 y 1 la transmisividad es muy baja y finalmente para los canales -2 y 2 la transmisividad es casi cero.

3.2.8. Ejemplo 8:

Hallar la transmisividad del siguiente modelo de 5 barreras formando un sistema de potenciales Gaussianos con una pendiente a -45 grados, para partículas incidentes de masa $m = 1$ con un rango de energía de $[0.0, 3]$.

Ancho de la barrera	Potencial	Inclinación (Grados)	Distancia
0.5	0.48495374636181	-45	1.0
0.5	1.90224311424205	-45	1.0
0.5	3.0	-45	1.0
0.5	1.90224311424206	-45	1.0
0.5	0.48495374636181	-45	1.0



La gráfica de la transmisividad es la figura 3.11:

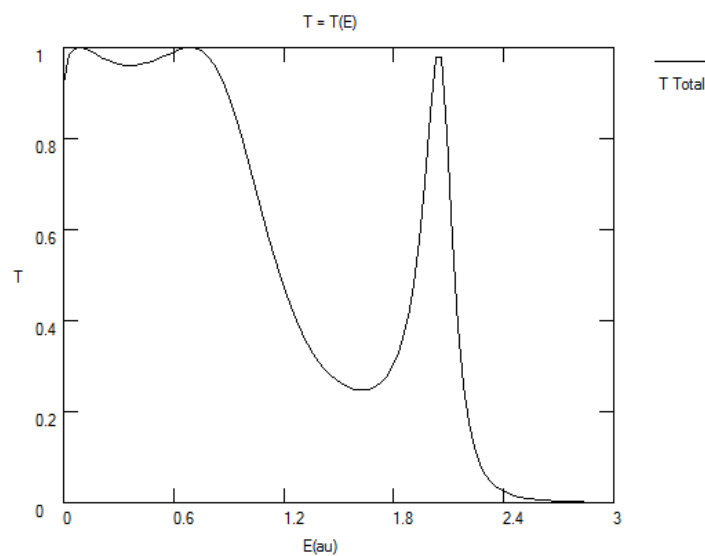


Figura 3.11: Gráfica de T del ejemplo 8

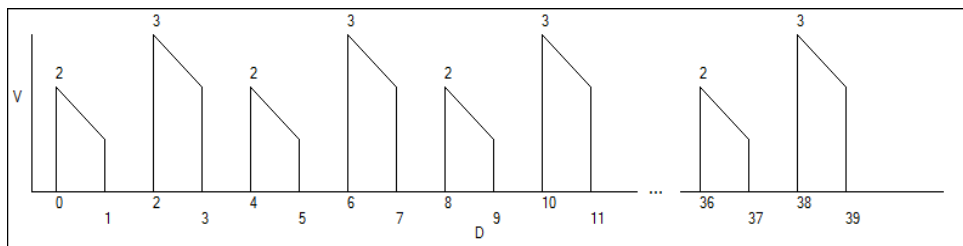
Los picos más altos están en 0.08, 0.68 y 2.04 a. u. con $T = 1, 1, 0.97$ respectivamente. También en el intervalo de energía de $[0, 0.98]$ la transmisividad es mayor a 0.8 y baja para después tener el pico en 2.04 a. u. y desciende esta rápidamente hasta llegar a cero.

3.2.9. Ejemplo 9:

Hallar la transmisividad del siguiente modelo de 20 barreras con una pendiente a -45 grados, para partículas incidentes de masa $m = 1$ con un rango de energía de $[0.0, 3]$.

Ancho de la barrera	Potencial	Inclinación (Grados)	Distancia
1.0	2.0	-45	1.0
1.0	3.0	-45	1.0
1.0	2.0	-45	1.0
1.0	3.0	-45	1.0
1.0	2.0	-45	1.0
1.0	3.0	-45	1.0
1.0	2.0	-45	1.0
1.0	3.0	-45	1.0
1.0	2.0	-45	1.0
1.0	3.0	-45	1.0
1.0	2.0	-45	1.0
1.0	3.0	-45	1.0
1.0	2.0	-45	1.0
1.0	3.0	-45	1.0
1.0	2.0	-45	1.0
1.0	3.0	-45	1.0
1.0	2.0	-45	1.0
1.0	3.0	-45	1.0
1.0	2.0	-45	1.0
1.0	3.0	-45	1.0

Los potenciales de barrera se muestran a continuación



La gráfica de la transmisividad es la figura 3.12.

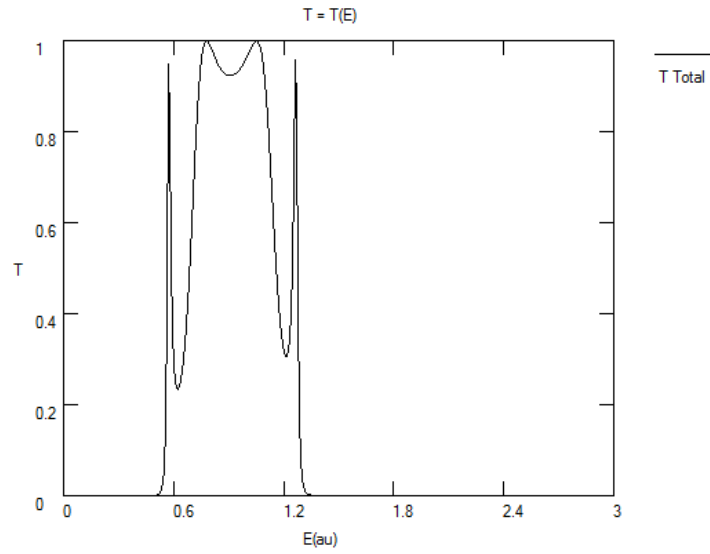


Figura 3.12: Gráfica de T del ejemplo 9

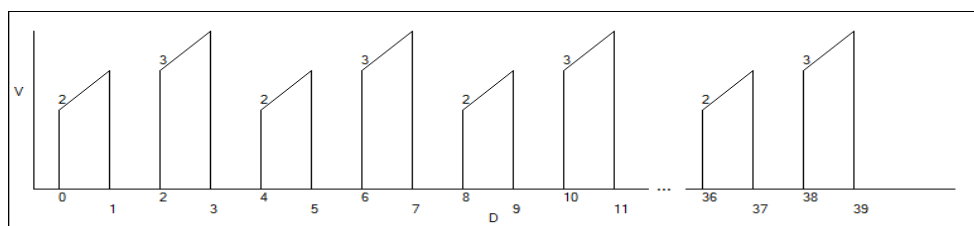
Los picos están en $E = 0.56, 0.78, 1.05$ y 1.26 a. u. con $T = 0.94, 1, 1$ y 0.95 respectivamente. Notamos que en el intervalo de energía $[0.72, 1.12]$ la transmisividad es mayor a 0.80 .

3.2.10. Ejemplo 10:

Hallar la transmisividad del siguiente modelo de 20 barreras con una pendiente a 45 grados, para partículas incidentes de masa $m = 1$ con un rango de energía de $[0.0, 3]$.

Ancho de la barrera	Potencial	Inclinación (Grados)	Distancia
1.0	2.0	45	1.0
1.0	3.0	45	1.0
1.0	2.0	45	1.0
1.0	3.0	45	1.0
1.0	2.0	45	1.0
1.0	3.0	45	1.0
1.0	2.0	45	1.0
1.0	3.0	45	1.0
1.0	2.0	45	1.0
1.0	3.0	45	1.0
1.0	2.0	45	1.0
1.0	3.0	45	1.0
1.0	2.0	45	1.0
1.0	3.0	45	1.0
1.0	2.0	45	1.0
1.0	3.0	45	1.0
1.0	2.0	45	1.0
1.0	3.0	45	1.0
1.0	2.0	45	1.0
1.0	3.0	45	1.0

Los potenciales de barrera se muestran a continuación



La gráfica de la transmisividad es la figura 3.13.

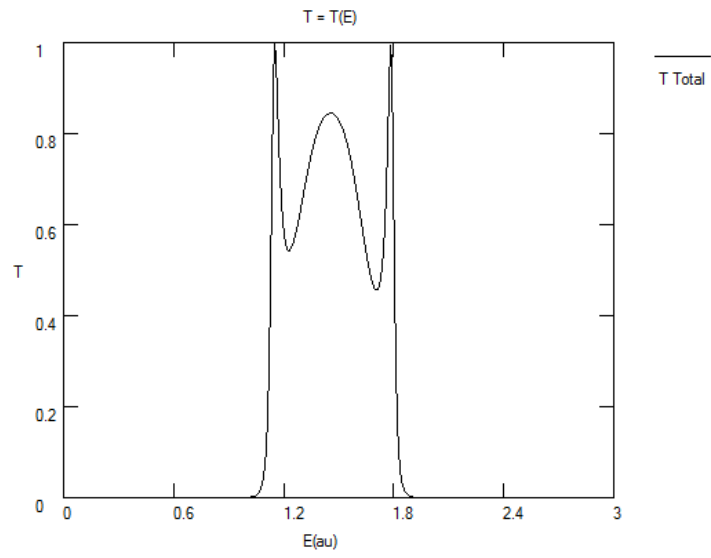


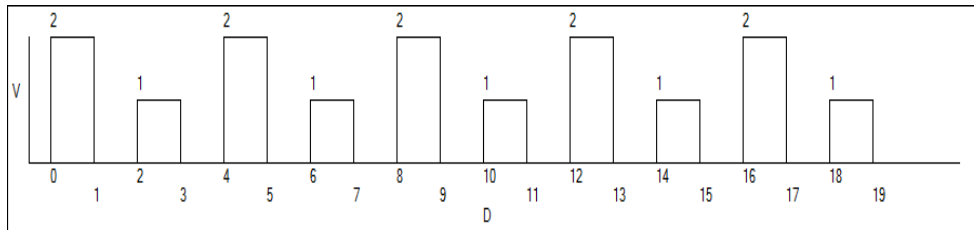
Figura 3.13: Gráfica de T del ejemplo 10

Los picos están en $E = 1.15, 1.45$ y 1.78 a. u. con $T = 1, 0.84$ y 1 respectivamente.

3.2.11. Ejemplo 11:

Hallar la transmisividad del siguiente modelo de 10 barreras sin pendiente, para partículas incidentes de masa $m = 1$ con un rango de energía de $[0.0, 2]$, con amplitud del campo 0.005 y frecuencia de 0.1. El experimento se realizará con $n = 2$ canales.

Ancho de la barrera	Potencial	Distancia
1.0	2.0	1.0
1.0	1.0	1.0
1.0	2.0	1.0
1.0	1.0	1.0
1.0	2.0	1.0
1.0	1.0	1.0
1.0	2.0	1.0
1.0	1.0	1.0
1.0	2.0	1.0
1.0	1.0	1.0



La gráfica de la transmisividad sin campo es la figura 3.14 y la del experimento con campo es la figura 3.15.

Los picos más altos están en 0.62, 0.71, 1.11, 1.21, 1.33 y 1.43 a. u. con $T = 0.98, 0.67, 0.65, 0.92, 0.90$ y 0.97 respectivamente en el caso del experimento sin campo (ver figura 3.14); en el experimento con campo la gráfica de la Transmisividad Total los pico más altos están en 0.63, 1.11, 1.19 y 1.33 a. u. con $T = 0.85, 0.64, 0.69$ y 0.59 respectivamente (los picos coinciden con el experimento sin campo). Vemos que T para el canal 0 es casi la misma que TT y las transmisividades en los demás canales es muy baja (ver figura 3.15).

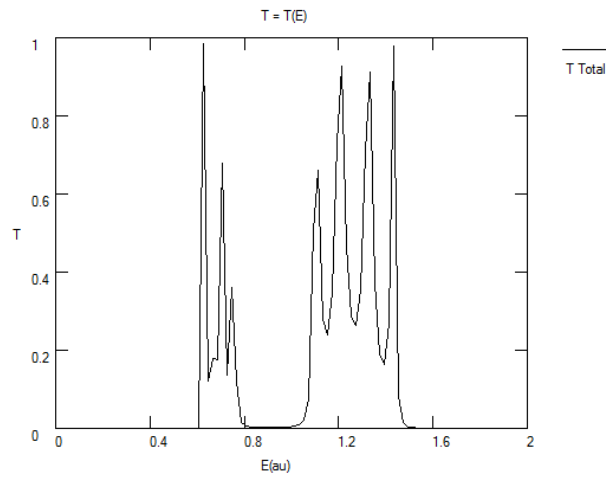


Figura 3.14: Gráfica de T sin campo del ejemplo 11

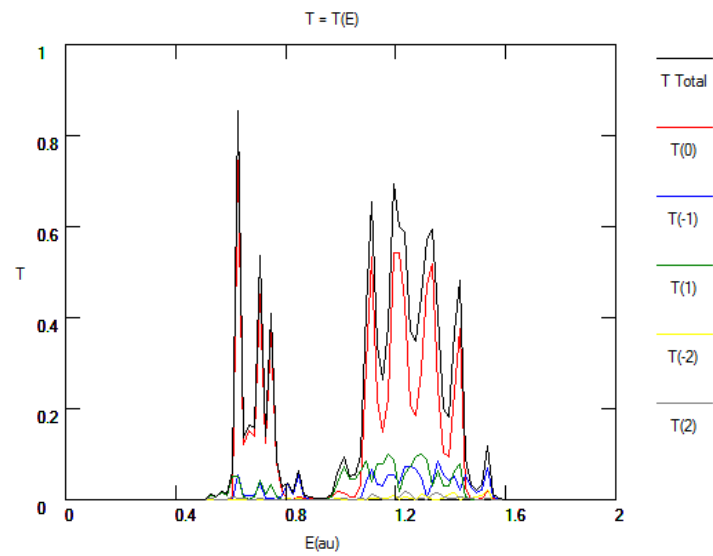
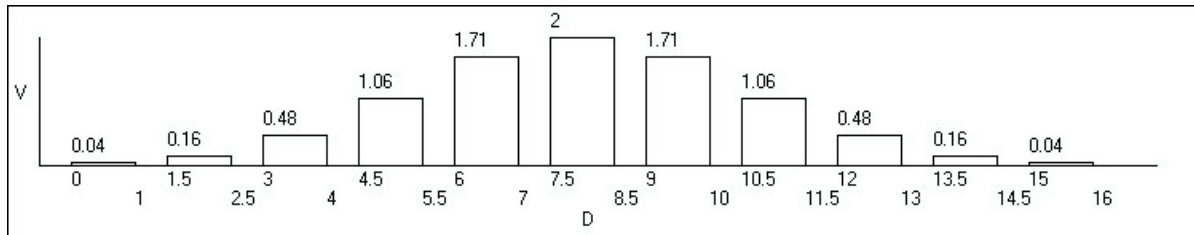


Figura 3.15: Gráfica de T con campo del ejemplo 11

3.2.12. Ejemplo 12:

Hallar la transmisividad del siguiente modelo de 11 barreras gaussiano, para partículas incidentes de masa $m = 1$ con un rango de energía de $[0.0, 2]$, con amplitud del campo 0.005 y frecuencia de 0.1. El experimento se realizará con $n = 2$ canales.

Ancho de la barrera	Potencial	Distancia
1.0	0.0383143436742583	0.5
1.0	0.159119017436455	0.5
1.0	0.481580948544497	0.5
1.0	1.06219198207069	0.5
1.0	1.7073527226903	0.5
1.0	2	0.5
1.0	1.7073527226903	0.5
1.0	1.06219198207069	0.5
1.0	0.481580948544497	0.5
1.0	0.159119017436455	0.5
1.0	0.0383143436742583	0



La gráfica de la transmisividad sin campo es la figura 3.16 y la del experimento con campo es la figura 3.17.

El pico más alto está en 1.84 a. u. con $T = 1$ en el caso del experimento sin campo (ver figura 3.16); en la gráfica de la Transmisividad Total el pico más alto está en 1.80 a. u. con $T = 0.98$, vemos que T para el canal 0 es casi la misma que TT y las transmisividades en los demás canales es muy baja (ver figura 3.17).

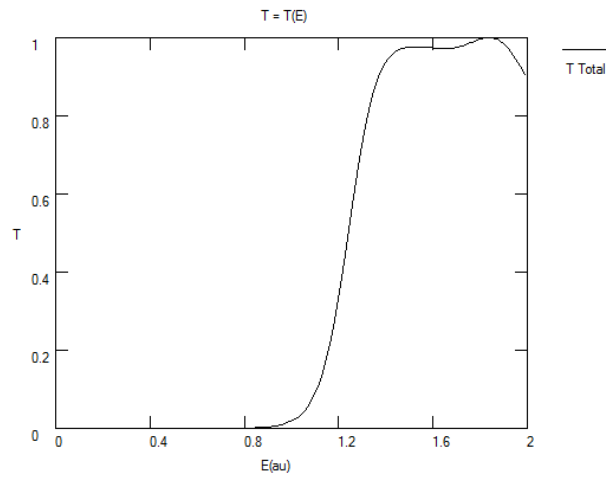


Figura 3.16: Gráfica de T sin campo del ejemplo 12

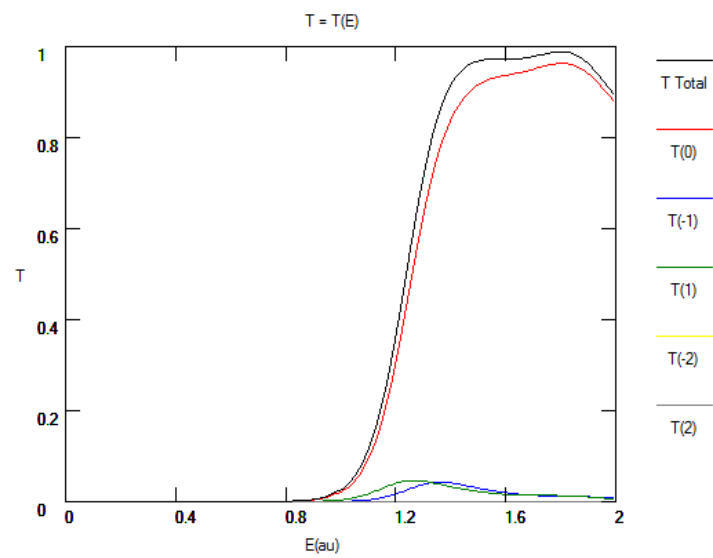


Figura 3.17: Gráfica de T con campo del ejemplo 12

Conclusiones

- Se obtuvieron las soluciones de la ecuación de Schrödinger para un potencial de una barrera de manera analítica de forma rectangular y trapezoidal.
- Se obtuvieron las soluciones de la ecuación de Schrödinger para un sistema multi-barreras mediante el método de la Matriz de Transferencia de forma rectangular y trapezoidal sin campo externo y de forma rectangular con un campo externo
- Se definieron algoritmos del método de la Matriz de Transferencia para hallar la transmisividad T de modelos cuánticos de colisión (sistema multibarreras) para barreras rectangulares y trapezoidales sin campo externo y para barreras rectangulares con campo externo.
- Se concluyó que el método de la Matriz de Transferencia es un método numérico ya que es posible su implementación en una computadora, además de ser una solución eficiente e innovadora del problema de hallar la transmisividad de un sistema multibarreras, es una alternativa a las soluciones analíticas más complejas y que mayormente son para casos particulares.
- Se utilizaron algoritmos numéricos de solución de sistemas de ecuaciones lineales y de interpolación para números complejos que nos sirvieron de base para hallar inversas de matrices complejas y dar las soluciones aproximadas de las funciones de Airy.
- Se creó un software que permite modelar casi cualquier sistema multibarreras, hallando la transmisividad y reflectividad del mismo, dando la libertad al usuario de definir el modelo de barreras, número de partículas a colisionar, la masa de éstas y su rango de energía. Dicho software tiene como base el método de la Matriz de Transferencia.
- Los lenguajes de programación que se utilizaron fueron Fortran y Object Pascal (Kylix 3.0 / Delphi 7.0) principalmente Fortran fue utilizado para la programación del método de la Matriz de Transferencia y Object Pascal para la interfaz gráfica.
- El software es compatible en los sistemas operativos Linux y Windows.
- El software es amigable al usuario, permitiendo el ingreso de los datos mediante el uso de una tabla preestablecida y mediante opciones de fácil uso, permite simular el comportamiento del experimento de potenciales de barrera dados por el usuario. El programa puede ser utilizado por investigadores y estudiantes de posgrado en

áreas afines, permitiendo guardar e imprimir las gráficas y tablas de los datos estudiados.

- Para finalizar, en conjunto, el trabajo de ésta tesis fue realizar un estudio computacional y numérico del método de la Matriz de Transferencia para potenciales de barrera rectangulares sin campo y con campo externo y también para sistemas de barreras trapezoidales sin campo externo, para así poder crear un software que permita modelar múltiples barreras para hallar su transmisividad y reflectividad.

Apéndice A

Unidades Atómicas

- u. a. masa: $m_e = 9.10938188 \times 10^{-31}$ kg.
- u. a. longitud: $a_0 = 0.5291772083 \times 10^{-10}$ m.
- u. a. carga: $e = 1.602176462 \times 10^{-19}$ C.
- u. a. momento: $\frac{\hbar}{a_0} = 1.99285151 \times 10^{-24}$ kg m s⁻¹.
- u. a. energía: $\frac{e^2}{a_0} = 27.2113834$ eV.
- u. a. tiempo: $\frac{a_0 \hbar}{e^2} = 2.418884326500 \times 10^{-17}$ s.

Apéndice B

Manual del Usuario del Sistema Multi-Barreras

Requerimientos del Sistema

El Sistema Multi-Barreras para que obtenga un óptimo rendimiento, necesita que la computadora en la cual trabaje, tenga las siguientes características:

- Sistema Operativo Linux Distribución Fedora o Sistema Operativo Windows XP, Vista, 7, 8 y 8.1.
- Microprocesador a 1 Ghz (32 o 64 bits).
- Memoria RAM 2 Gb.
- Espacio en Disco Duro 5 Mb.

Se requieren estas características debido a que el sistema realiza cálculos que pueden originar que la computadora trabaje más lenta.

Área de Trabajo

Para empezar a utilizar el Sistema Multi-Barreras, debemos conocer el área de trabajo, esta cuenta con una tabla donde se pueden insertar los datos de las barreras (ver figura B.1). Los datos a insertar en la tabla son: el ancho de la barrera, potencial de ésta, inclinación (grados) y la distancia a la siguiente barrera, notar que el usuario tiene la libertad de definir el número de barreras conforme va completando las filas de la tabla.

Ya que se completaron los datos de las barreras, se procede a definir la energía inicial y final de las partículas a incidir, su masa y el número de partículas a colisionar (ver figura B.2).

No. Barrera	Ancho Barrera	Potencial	Inclinación (Grados)	Distancia
1				
2				
3				
4				
5				
6				
7				
8				
9				
10				
11				

Figura B.1: Tabla de inserción de barreras

Energía Inicial

Energía Final

Masa de la partícula

Número de puntos

Figura B.2: Datos a insertar

Como paso opcional se puede mandar a dibujar el modelo de barreras, donde ésta figura se puede guardar en un archivo (jpeg) o mandarla a imprimir (ver figura B.3).

NOTA: Ya que se realizaron los pasos anteriores, se puede ejecutar el método de la Matriz de Transferencia para hallar T y R , ésta opción está en el menú Barrera.

Menú Archivo

En este menú se organizan los archivos de forma que se adapten a las preferencias del usuario. Las opciones son:

- Nuevo SMB: Crea una hoja de datos donde sólo se pueden insertar datos numéricos, es decir, aquí podemos insertar los datos del sistema.

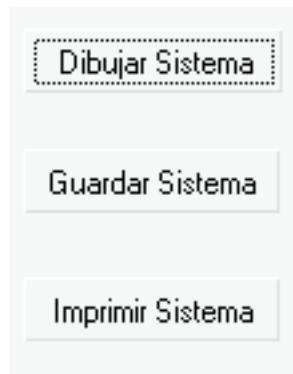


Figura B.3: Opciones referente al dibujo del modelo de barreras

- Abrir: Accesa a los archivos de trabajo del Sistema Multi-Barreras (con extensión *.smb).
- Guardar: Esta opción es utilizada para actualizar los datos guardados en disco del archivo de trabajo actual (con un nombre definido previamente).
- Guardar como: Define el nombre del archivo de trabajo y el lugar donde se guardará en disco; este último nos servirá también para hacer una copia del archivo de trabajo poniéndole otro nombre.
- Imprimir: Manda a imprimir los datos que están en la hoja de trabajo, utilizando la impresora predeterminada por el sistema operativo.
- Cerrar: Cierra un archivo de trabajo existente y deja el programa en su modo inicial.
- Salir: Cierra el archivo de trabajo actual y termina la ejecución del programa.

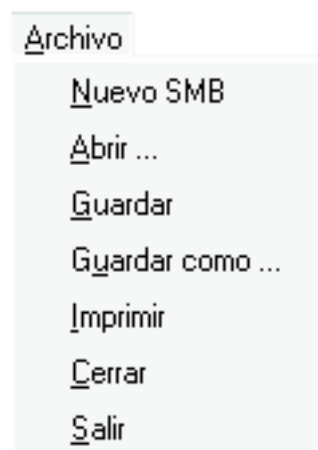


Figura B.4: Menú Archivo

Menú Edición

El Sistema Multi-Barreras permite manipular los datos que contenga la hoja de trabajo, como copiarlos, cortarlos o pegarlos; pero para esto, necesitamos seleccionar los datos que queremos manejar. Se pueden seleccionar de dos maneras, utilizando el teclado o con el ratón.

Ya que se ha seleccionado uno o más datos, se pueden utilizar los comandos:

- Copiar: Hace una copia de uno o más datos seleccionados y lo guarda en memoria para su uso posterior.
- Cortar: Mueve los datos seleccionados a la memoria para que después el usuario pegue su información en otra parte. Note que aquí los datos desaparecen del área de trabajo (están en memoria).
- Pegar: Coloca la información que está en memoria (ya sea de copiar o cortar) a un lugar destino (donde está colocado el cursor). Note que esta opción sólo se puede activar siempre y cuando se haya ejecutado el comando de copiar o cortar previamente.

Los siguientes comandos se pueden utilizar sin necesidad de seleccionar:

- Insertar filas: Aquí nos aparece un cuadro de diálogo que pide el número de filas a insertar, al dar aceptar, añade el número de filas vacías deseadas en la hoja de trabajo a partir de donde está colocado el cursor hacia abajo.
- Eliminar filas: Aparece un cuadro de diálogo que pide el número de filas a eliminar, al dar aceptar, elimina el número de filas con o sin información a partir de donde está colocado el cursor.



Figura B.5: Menú Edición

Menú Barrera

Este menú se puede ejecutar el método de la Matriz de Transferencia para hallar la transmisividad y reflexividad de un Sistema Multibarreras Cuántico y además se pueden insertar barreras con un formato previamente establecido.

Las opciones de este menú son:

- Ejecutar MMT: Ejecuta el método de la Matriz de Transferencia y realiza las gráficas de la transmisividad y reflexividad del sistema dado previamente, además activa los botones para guardar e imprimir las gráficas así como el botón de guardar los datos de la simulación en un archivo de texto.
- Gaussiana: Permite insertar en la hoja de trabajo un sistema multibarreras en forma de campana de Gauss de acuerdo a la distancia total del sistema o por ancho de barrera.
- Cuadrática: Permite insertar en la hoja de trabajo un sistema multibarreras en forma de parábola de acuerdo a la distancia total del sistema o por ancho de barrera.
- Insertar Barreras: Aparece un cuadro de diálogo donde se pueden insertar los siguientes datos: el ancho de la barrera, potencial, distancia a la siguiente barrera y el número de copias de éstos últimos, que se insertarán en la hoja de trabajo a partir de la fila donde se encuentre el cursor.

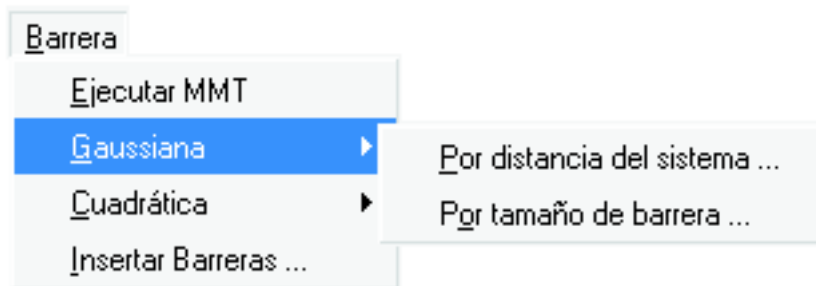


Figura B.6: Menú Barrera

Menú Ayuda

Este menú contiene las opciones que describen el uso e información general del Sistema Multi-Barreras. Sus opciones son:

- Ayuda del sistema: Esta opción contiene la información general para facilitar el manejo del sistema, esta misma se mostrará en una ventana tipo navegador, en la cual el usuario podrá elegir el tema a consultar.

- Acerca de...: Muestra información sobre el nombre del sistema, versión, autor y asesor del tema.



Figura B.7: Menú Ayuda

Barra de Herramientas

El Sistema Multi-Barreras cuenta con una barra de herramientas, que son botones para hacer un llamado directo a alguna opción de un menú, es decir, la barra tiene las opciones que se usan con mayor frecuencia.

Las opciones de la barra son:

- Nuevo: Crea un nuevo archivo.
- Abrir: Abre un archivo existente.
- Guardar: Guarda en un archivo los datos del área de trabajo.
- Copiar: Copia los datos seleccionados.
- Cortar: Corta los datos seleccionados.
- Pegar: Pega los datos existentes en la memoria.
- Ejecuta el método de la Matriz de Transferencia.



Figura B.8: Barra de Herramientas



Figura B.9: Barra de Estado

Trabajando con los Resultados

Después de haber ejecutado el método de la Matriz de Transferencia, se realizan las gráficas de T y R del sistema dado. En el área de trabajo del gráfico, podemos arrastrar el ratón y nos muestra las coordenadas de E y T (o R) en la barra de estado (ver figura B.9). Esto nos sirve para dar un estudio rápido del coeficiente de T (o R).

NOTA: En Windows para que se muestren las coordenadas, se necesita pulsar el botón izquierdo del ratón y arrastrar sobre el gráfico.

Otra ventaja que tenemos después de ejecutar el método, es que podemos guardar los gráficos de T y R , además de tener las opciones para mandar a imprimirlos. También se pueden guardar los datos de la transmisividad y reflexividad con su respectiva energía en un archivo de texto.



Figura B.10: Opciones referente a la gráfica de T



Para finalizar, el Sistema Multi-Barreras cuenta con una opción de acercamiento (zoom) para las gráficas de T y R , donde se tiene que indicar el rango de energía para su acercamiento.

A screenshot of a software interface. At the top, there is a checkbox labeled "Activar Zoom" which is checked. Below this, there are two input fields: "Energía Inicial" and "Energía Final". At the bottom of the interface is a button labeled "Ejecutar".

Figura B.12: Opción referente al zoom de las gráficas

Apéndice C

Código fuente del programa para hallar T en una barrera

Este programa obtiene la transmisividad de un potencial de barrera mediante las ecuaciones 1.23 y 1.24 del capítulo 1, dicho programa está codificado en Object Pascal.

```
program cell1bpas;

{$APPTYPE CONSOLE}

uses
  SysUtils, Math;

var
  npuntos, np : integer;
  a, v, ei, ef, m, T : double;
  delta, e, c1, c2, c3, c4 : double;
  f : text;

begin
  writeln('Programa que obtiene la Transmisividad de un potencial de barrera');
  writeln('Nota: Los datos de entrada son en u. a. ');
  writeln('Dame el ancho de barrera: ');
  readln(a);
  writeln('Dame el potencial de la barrera: ');
  readln(v);
  writeln('Dame la masa: ');
  readln(m);
  writeln('Dame la energia inicial: ');
  readln(ei);
  writeln('Dame la energia final: ');
  readln(ef);
  writeln('Dame el numero de particulas a incidir: ');
```

```

readln(npuntos);

{ Los datos de Transmisividad se guardan en el archivo salida.txt}
AssignFile(f, 'salida.txt');
rewrite(f);
e := 0.0;
c1 := 2 * m * v * a * a;
delta := (ef - ei) / (npuntos - 1);
for np := 1 to npuntos do begin
    e := e + delta;
    c2 := e / v;
    if e < v then begin
        c3 := 1 - c2;
        c4 := sinh(sqrt(c1 * c3));
        T := 1 / (1 + (c4 * c4)/(4 * c2 * c3));
        writeln(f, e, ' ', T);
    end
    else
        if e > v then begin
            c3 := c2 - 1;
            c4 := sin(sqrt(c1 * c3));
            T := 1 / (1 + (c4 * c4)/(4 * c2 * c3));
            writeln(f, e, ' ', T);
        end;
    end;
end;
close(f);
end.

```

Apéndice D

Código fuente del programa para hallar T por el MMT para un valor de energía

Este programa obtiene la transmisividad de un sistema multibarreras mediante el método de la Matriz de Transferencia (MMT) para un valor de energía.

```
program cellmbpas1;

{$APPTYPE CONSOLE}

uses
  SysUtils, VarCmplx;

type
  matrizc = array[1..2,1..2] of variant;
  matrizv = array[1..100] of matrizc;

var
  fent, gsal: TextFile;
  { Declaraciones principales }
  n : integer;
  a, v, c: array [1..199] of double;
  e, m: double;

  { Otras declaraciones }
  x : array[1..100] of double;
  MatrizDeSoluciones : matrizv;
  MT : matrizc;
  F, B, T, R, P : variant;
  i, ndisc, barrera, disc, k : integer;
```

```

procedure Inversa(ment: matrizc; var msal: matrizc);
var
  detM : variant;
begin
  detM := VarComplexCreate(0.0, 0.0);
  detM := ment[1,1]*ment[2,2] - ment[2,1]*ment[1,2];

  msal[1,1] := ment[2,2]/detM;
  msal[1,2] := -ment[1,2]/detM;
  msal[2,1] := -ment[2,1]/detM;
  msal[2,2] := ment[1,1]/detM;
end;

```

```

procedure Producto(m1, m2: matrizc; var mp: matrizc);
var
  i, j, k : integer;
begin
  for i := 1 to 2 do
    for j := 1 to 2 do begin
      mp[i,j] := VarComplexCreate(0.0,0.0);
      for k := 1 to 2 do
        mp[i,j] := mp[i,j] + m1[i,k] * m2[k,j]
      end;
    end;
  end;
end;

```

```

procedure ObtieneMatrizMi(x1, x2, v, e, m: double; var mr: matrizc);
var
  k1, k2, kd1, kd2, icte : variant;
  ma, mb, mc, md, mai, mci : matrizc;
begin
  k1 := VarComplexCreate(0.0, 0.0);
  k2 := VarComplexCreate(0.0, 0.0);
  kd1 := VarComplexCreate(0.0, 0.0);
  kd2 := VarComplexCreate(0.0, 0.0);
  icte := VarComplexCreate(0.0, 1);

  k1 := VarComplexSqrt(2*m*e);
  k2 := VarComplexSqrt(2*m*(e-v));
  ma[1,1] := VarComplexExp(k1*x1*icte);
  ma[2,1] := VarComplexExp(k1*x1*icte);
  ma[1,2] := VarComplexExp(-k1*x1*icte);
  ma[2,2] := -VarComplexExp(-k1*x1*icte);

```

```

kd1 := k2/k1;
kd2 := k1/k2;
mb[1,1] := VarComplexExp(k2*x1*icte);
mb[1,2] := VarComplexExp(-k2*x1*icte);
mb[2,1] := kd1 * VarComplexExp(k2*x1*icte);
mb[2,2] := -kd1 * VarComplexExp(-k2*x1*icte);

mc[1,1] := VarComplexExp(k2*x2*icte);
mc[2,1] := VarComplexExp(k2*x2*icte);
mc[1,2] := VarComplexExp(-k2*x2*icte);
mc[2,2] := -VarComplexExp(-k2*x2*icte);

md[1,1] := VarComplexExp(k1*x2*icte);
md[1,2] := VarComplexExp(-k1*x2*icte);
md[2,1] := kd2 * VarComplexExp(k1*x2*icte);
md[2,2] := -kd2 * VarComplexExp(-k1*x2*icte);

Inversa(ma, mai);
Inversa(mc, mci);

Producto(mai, mb, mr);
Producto(mr, mci, mr);
Producto(mr, md, mr);
end;

procedure ResuelveSistema(MT: matrizc; var FR, BR: variant);
begin
  FR := VarComplexCreate(0.0, 0.0);
  BR := VarComplexCreate(0.0, 0.0);
  FR := VarComplexInverse(MT[1,1]);
  BR := MT[2,1]/MT[1,1];
end;

begin
  { Lectura de datos desde el archivo entrada.in }
  AssignFile(fent, 'entrada.in');
  Reset(fent);
  { n = numero de barreras }
  readln(fent, n);
  for i:= 1 to n do begin
    { a[i] = ancho i-esima barrera }
    readln(fent, a[i]);
    { v[i] = potencial de la i-esima barrera }
    readln(fent, v[i]);
    { c[i] = distancia a la siguiente barrera desde la i-esima barrera }

```

```

    readln(fent,c[i]);
end;
{ e = valor de la energia }
readln(fent, e);
{ m = valor de la masa }
readln(fent, m);
close(fent);

{ Hallamos las discontinuidades del sistema }
ndisc := 2 * n;
x[1] := 0;
k := 1;
i := 2;
while (i < ndisc) do begin
    x[i] := x[i-1] + a[k];
    x[i+1] := x[i] + c[k];
    inc(k);
    inc(i, 2);
end;
x[i] := x[i-1] + a[k];

disc := 1;
barrera := 1;
for k:=2 to n+1 do
    if (e <> 0) and ((e - v[barrera]) <> 0) then begin
        ObtieneMatrizMi(x[disc],x[disc+1],v[barrera],e,m,MatrizDeSoluciones[k]);
        inc(disc,2);
        inc(barrera);
    end;

if n > 1 then
    Producto(MatrizDeSoluciones[2],MatrizDeSoluciones[3], MT)
else
    MT := MatrizDeSoluciones[2];
if (n > 2) then
    for k := 4 to n+1 do
        Producto(MT, MatrizDeSoluciones[k], MT);

ResuelveSistema(MT, F, B);
T := VarComplexCreate(0.0, 0.0);
R := VarComplexCreate(0.0, 0.0);
P := VarComplexCreate(0.0, 0.0);
T := F * VarComplexConjugate(F);
R := B * VarComplexConjugate(B);
P := T + R;

```

```
{ Escribe datos al archivo salida.out }  
AssignFile(gsal,'salida.out');  
rewrite(gsal);  
writeln(gsal,'Transmisividad: ',T);  
writeln(gsal,'Reflexividad: ',R);  
writeln(gsal,'T + R = ',P);  
close(gsal);  
end.
```

Apéndice E

Código fuente del programa para hallar T por el MMT para múltiples valores de energía

Este programa obtiene la transmisividad de un sistema multibarreras mediante el método de la Matriz de Transferencia (MMT) para múltiples valores de energía.

```
program cellmbpas2;

{$APPTYPE CONSOLE}

uses
  SysUtils, VarCmplx;

type
  matrizc = array[1..2,1..2] of variant;
  matrizv = array[1..100] of matrizc;
  arreglo = array[1..100] of double;

var
  fent, gsal : TextFile;
  { Declaraciones principales }
  n, npuntos : integer;
  a, v, c : arreglo;
  ei, ef, m : double;

  { Otras declaraciones }
  x : arreglo;
  MatrizDeSoluciones : matrizv;
  MT : matrizc;
  F, B, T, R, P : variant;
  i, ndisc, barrera, disc, k, np : integer;
```

```

de, e : double;

procedure Inversa(ment: matrizc; var msal: matrizc);
var
  detM : variant;
begin
  detM := VarComplexCreate(0.0, 0.0);
  detM := ment[1,1]*ment[2,2] - ment[2,1]*ment[1,2];

  msal[1,1] := ment[2,2]/detM;
  msal[1,2] := -ment[1,2]/detM;
  msal[2,1] := -ment[2,1]/detM;
  msal[2,2] := ment[1,1]/detM;
end;

procedure Producto(m1, m2: matrizc; var mp: matrizc);
var
  i, j, k : integer;
begin
  for i := 1 to 2 do
    for j := 1 to 2 do begin
      mp[i,j] := VarComplexCreate(0.0,0.0);
      for k := 1 to 2 do
        mp[i,j] := mp[i,j] + m1[i,k] * m2[k,j]
      end;
    end;
  end;
end;

procedure ObtieneMatrizMi(x1, x2, v, e, m: double; var mr: matrizc);
var
  k1, k2, kd1, kd2, icte : variant;
  ma, mb, mc, md, mai, mci : matrizc;
begin
  k1 := VarComplexCreate(0.0, 0.0);
  k2 := VarComplexCreate(0.0, 0.0);
  kd1 := VarComplexCreate(0.0, 0.0);
  kd2 := VarComplexCreate(0.0, 0.0);
  icte := VarComplexCreate(0.0, 1);

  k1 := VarComplexSqrt(2*m*e);
  k2 := VarComplexSqrt(2*m*(e-v));
  ma[1,1] := VarComplexExp(k1*x1*icte);
  ma[2,1] := VarComplexExp(k1*x1*icte);
  ma[1,2] := VarComplexExp(-k1*x1*icte);

```

```

ma[2,2] := -VarComplexExp(-k1*x1*icte);

kd1 := k2/k1;
kd2 := k1/k2;
mb[1,1] := VarComplexExp(k2*x1*icte);
mb[1,2] := VarComplexExp(-k2*x1*icte);
mb[2,1] := kd1 * VarComplexExp(k2*x1*icte);
mb[2,2] := -kd1 * VarComplexExp(-k2*x1*icte);

mc[1,1] := VarComplexExp(k2*x2*icte);
mc[2,1] := VarComplexExp(k2*x2*icte);
mc[1,2] := VarComplexExp(-k2*x2*icte);
mc[2,2] := -VarComplexExp(-k2*x2*icte);

md[1,1] := VarComplexExp(k1*x2*icte);
md[1,2] := VarComplexExp(-k1*x2*icte);
md[2,1] := kd2 * VarComplexExp(k1*x2*icte);
md[2,2] := -kd2 * VarComplexExp(-k1*x2*icte);

Inversa(ma, mai);
Inversa(mc, mci);

Producto(mai, mb, mr);
Producto(mr, mci, mr);
Producto(mr, md, mr);
end;

procedure ResuelveSistema(MT: matrizc; var FR, BR: variant);
begin
  FR := VarComplexCreate(0.0, 0.0);
  BR := VarComplexCreate(0.0, 0.0);
  FR := VarComplexInverse(MT[1,1]);
  BR := MT[2,1]/MT[1,1];
end;

procedure MTransferencia(e, m: double; var T, R, P: variant);
var
  k :integer;
begin
  disc := 1;
  barrera := 1;
  for k := 2 to n+1 do
    if (e <> 0) and ((e - v[barrera]) <> 0) then begin
      ObtieneMatrizMi(x[disc], x[disc+1], v[barrera], e, m, MatrizDeSoluciones[k]);
      inc(disc, 2);
    end;
  end;
end;

```

```

        inc(barrera);
    end;

    if n > 1 then
        Producto(MatrizDeSoluciones[2],MatrizDeSoluciones[3], MT)
    else
        MT := MatrizDeSoluciones[2];
        if (n > 2) then
            for k := 4 to n+1 do
                Producto(MT, MatrizDeSoluciones[k], MT);

            ResuelveSistema(MT, F, B);
            T := F * VarComplexConjugate(F);
            R := B * VarComplexConjugate(B);
            P := T + R;
        end;

begin
    { Lectura de datos desde el archivo entrada.in }
    AssignFile(fent,'entrada.in');
    Reset(fent);
    { n = numero de barreras }
    readln(fent, n);
    for i := 1 to n do begin
        { a[i] = ancho i-esima barrera }
        readln(fent,a[i]);
        { v[i] = potencial de la i-esima barrera }
        readln(fent,v[i]);
        { c[i] = distancia a la siguiente barrera desde la i-esima barrera }
        readln(fent,c[i]);
    end;
    { m = valor de la masa }
    readln(fent, m);
    { ei = energia inicial }
    readln(fent, ei);
    { ef = energia final }
    readln(fent, ef);
    { npuntos = numero de puntos a incidir }
    readln(fent, npuntos);
    close(fent);

    { Hallamos las discontinuidades del sistema }
    ndisc := 2 * n;
    x[1] := 0;
    k := 1;

```

```

i := 2;
while (i < ndisc) do begin
    x[i] := x[i-1] + a[k];
    x[i+1] := x[i] + c[k];
    inc(k);
    inc(i, 2);
end;
x[i] := x[i-1] + a[k];

{ Escribe datos al archivo salida.out }
AssignFile(gsal,'salida.out');
rewrite(gsal);

e := ei;
de := (ef - ei) / (npuntos - 1);
for np:=1 to npuntos do begin
    T := VarComplexCreate(0.0, 0.0);
    R := VarComplexCreate(0.0, 0.0);
    P := VarComplexCreate(0.0, 0.0);
    e := e + de;
    MTransferencia(e, m, T, R, P);
    write(gsal,e ,' ');
    writeln(gsal, VarComplexSimplify(T));
end;
close(gsal);
end.

```

Bibliografía

- [Beiser] Beiser Arthur: *Conceptos de Física Moderna*, Mc. Graw-Hill, México, 1998.
- [Eisberg] Eisberg Robert M.: *Fundamentos de Física Moderna*, Limusa, México, 1992.
- [Hale] Hale Jack K.: *Oscillations in Nonlinear Systems*, Mc. Graw Hill, USA, 1963.
- [Brennan] Brennan Kevin F.: *The Physics of Semiconductors with applications to optoelectronic devices*, Cambridge University Press, USA, 1999.
- [Levine] Levine Ira N.: *Química Cuántica*, Prentice Hall, 5a. Edición, Madrid, 2001.
- [Abramowitz] Abramowitz, Stegun: *Handbook of Mathematical Functions*, National Bureau of Standards, USA, 1972.
- [Martin1] Martín M., Sandoval L., Lefebvre R., Atabek O.: *Nonadiabatic tunneling: an exactly soluble model*, J. Physics B, Atomic Molecular Optic Physics, Vol 33, pag. 3665-3675, 2000.
- [Martin2] Martín M., Lefebvre R., Atabek O.: *Nonadiabatic tunneling in the presence of an oscillating field*, Physical Review A, Vol. 65, Art. Num. 062714, 2002.
- [Martin3] A.Palma, L. Sandoval, M. Martín, R. Lefebvre, *Second Quantization and Floquet Quasienergies of the parabolic barrier*, International Journal of Quantum Chemistry, Vol. 99, Pags. 484-487, 2004.
- [Stefano] De Leo Stefano, Rotelli Pietro: *Tunneling through two barriers*, quant-ph/0408042, Vol. 1, 2004.
- [Esposito] Esposito S.: *Multibarrier tunneling*, quant-ph/0209018, Vol. 1, 2002.
- [Fukuma] Wayne W., Lui and Massao Fukuma: *Exact Solution of the Schrödinger equation across one dimensional piecewise-linear potential barrier*, J. Appl. Physics, September 1986.
- [Ahiua] Ahiua Zhang, et al., *Tunelling coefficient across an arbitrary potencial barrier*, J. Physics A, Gen 33, pag 5549-5456, 2000.
- [Fedirko1] V. A. Fedirko, S. V. Poyakov, D. A. Zenyuk, *Transformation-Matrix Method for Tunnel-Effect Simulation*, Physics of Particles and Nuclear Letters, Vol. 8, No. 5, pag 463-466, 2011.

- [Fedirko2] V. A. Fedirko, S. V. Poyakov, D. A. Zenyuk, *Matrix Method for Simulating the Tunneling-Effect*, Mathematical Models and Computer Simulations, Vol. 2, No. 6, pag 704-713, 2010.
- [Sameer] Sameer Grover, Sankalpa Ghosh, Manish Sharma, *A transfer matrix approach to electron transport in graphene through arbitrary electric and magnetic potential barriers*, Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, Vol. 20, 2012.
- [Kyu-Tae Lee] Kyu-Tae Lee, Eun Joo Jung, Chul Han Kim, Chang-Min Kim, *Derivation of tunneling probabilities for arbitrarily graded potential barriers using modified Airy functions*, Opt Quant Electron, 42, pag 129-141, 2010.
- [Björn] Björn Jonsson, Sverre T., *Solving the Schrödinger Equation in Arbitrary Quantum-Well Potential Profiles Using the Transfer Matrix Method*, IEEE Journal of Quantum Electronics, Vol. 26, No. 11, pag 2025-2035, 1990.
- [Jirauschek] Jirauschek Christian, *Accuracy of Transfer Matrix Approaches for Solving the Effective Mass Schrödinger Equation*, IEEE Journal of Quantum Electronics, Vol. 45, No. 9, pag 1059-1067, 2009.
- [Wei Li] Wei Li, *Generalized Free Wave Transfer Matrix Method for Solving the Schrödinger Equation With an Arbitrary Potential Profile*, IEEE Journal of Quantum Electronics, Vol. 46, No. 6, pag 970-975, 2010.
- [Vatannia] Vatannia S, Gildenblat, *Airy's Functions Implementation of the Transfer-Matrix Method for Resonant Tunneling in Variably Spaced Finite Superlattices*, IEEE Journal of Quantum Electronics, Vol. 32, No. 6, pag 1093-1105, 1996.
- [Deyasi] Deyasi Arpan, Bhattacharyya Swapan, *Numerical Computation of Eigenenergy and Transmission Coefficient of Symmetric Quantum Double Barrier Structure with Variable Effective Mass in Presence of Electric Field*, International Journal of Electronics and Communication Engineering and Technology, Vol. 2, No. 1, pag 24-34, 2011.
- [Ghatak] Ghatak A. K., Gallawa R. L., Goyal I. C. *Accurate Solutions to Schrödinger's Equation Using Modified Airy Functions*, IEEE Journal of Quantum Electronics, Vol. 28, No. 2, pag 400-403, 1992.
- [Shukhdev] Sukhdev Roy, Ghatak A. K., Gallawa R. L., Goyal I. C. *Accurate Solutions to Schrödinger's Equation Using Modified Airy Functions*, IEEE Journal of Quantum Electronics, Vol. 28, No. 2, pag 400-403, 1992.
- [McIntosh] McIntosh Harold V. *Complex Analysis*, Departamento de Microcomputadoras, ICUAP, 2001.