



BENEMÉRITA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE PUEBLA

INSTITUTO DE FÍSICA "LUIS RIVERA TERRAZAS"

**"DISPERSIÓN DE ONDAS EN UNA Y CUASI UNA
DIMENSIÓN. MÉTODOS DE LA MATRIZ DE
REACCIÓN, DE TRANSFERENCIA Y DEL
HAMILTONIANO EFECTIVO"**

TESIS

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE

**DOCTOR EN CIENCIAS
(FÍSICA)**

PRESENTA:

ANTONIO ALEJANDRO FERNÁNDEZ MARÍN

ASESOR(ES):

**DR. GERMÁN A. LUNA ACOSTA
DR. FELIX IZRAILEV**

JUNIO 2014

Resumen

En este trabajo se estudia la dispersión de ondas, tanto clásicas como cuánticas, en sistemas unidimensionales y cuasi-unidimensionales. En la parte cuántica estudiaremos una partícula sin espín dispersada por un potencial arbitrario localizado en una región del espacio, la región de reacción, suponiendo invarianza temporal. Usaremos el formalismo de la Teoría de la Matriz de Reacción (TMR) y obtendremos la matriz de dispersión $S(E)$ en términos de la matriz de Reacción. Para los sistemas de uno y dos canales en una dimensión, describiremos el proceso inverso para obtener las energías de reacción y las anchuras reducidas y obtendremos expresiones para las siguientes Cantidades de Dispersión (CD): coeficiente de transmisión ($t(E)$), tiempo de demora ($\tau(E)$) y probabilidad de atrapamiento ($P(E)$) en términos de la Matriz R y demostraremos que los polos de éstas son los mismos que los polos de la matriz de dispersión. Consideraremos algunos potenciales para examinar las CD como funciones de la energía y mostraremos que los cálculos por TMR son un orden de magnitud más rápidos que usando el método de la Matriz de Transferencia.

Obtendremos expresiones de las CD en la aproximación de un nivel, cuya importancia radica en poder relacionar el espectro del sistema interno con las resonancias en las CD y también con los polos de $S(E)$. Por otra parte, obtendremos la matriz de dispersión en términos de un hamiltoniano efectivo no hermítico ($\mathcal{H}(E)$), cuyos eigenvalores son los polos de $S(E)$. Describiremos y utilizaremos tres métodos para calcular los polos de la matriz de dispersión en uno y dos canales: el método de búsqueda de las raíces, el método del escaneo y el método del punto fijo, en donde discutiremos las limitaciones y ventajas de cada uno de los métodos. Encontraremos una expresión analítica del error que surge al truncar las series que definen la matriz R . Debido a la lenta convergencia de $R(E)$ introducimos un nuevo método para acelerar la convergencia de los $R_{\nu\nu'}(E)$ que nos permitirá calcular un número mayor de polos de $S(E)$.

Obtendremos la Matriz de Reacción para una región de interacción cuasi unidimensional conectado a dos

terminales. La región de reacción puede ser una cavidad con perfiles arbitrarios y/o un potencial dispersivo localizado en la guía de ondas. Calcularemos la conductancia para tres modos abiertos para dos tipos de potenciales azarosos que varían únicamente en la dirección longitudinal.

Referente a las ondas clásicas, estudiamos la transmisión electromagnética T en una heteroestructura fotónica unidimensional cuyos anchos de sus capas siguen una distribución tipo Lévy. Demostraremos (numéricamente) que para un sistema de longitud fija L : (i) el promedio $\langle -\ln T \rangle \propto L^\alpha$ para $0 < \alpha < 1$, mientras que $\langle -\ln T \rangle \propto L$ para $1 \leq \alpha < 2$, siendo α el exponente del decaimiento de la ley de potencia de la distribución de probabilidad, y (ii) la distribución de probabilidad $P(T)$ es invariante al ángulo de incidencia y de la frecuencia de la onda electromagnética. Por último, mostraremos que $\langle T \rangle \propto L^\alpha$ con $0 < \alpha < 1$.

Abstract

In this work we study the scattering of waves, both classical and quantum, in one and quasi-one dimensional systems. In the quantum part we will study a spinless quantum particle scattered by an arbitrary localized potential, assuming time-reversal invariance. We will use the Reaction Matrix Theory formalism (RMT) to get the scattering matrix $S(E)$ in terms of the reaction matrix. For one dimensional system of one or two channels, we will describe the inverse process to obtain the reaction energies and the reduced widths. We also obtain expressions for the following scattering quantities in terms of the Reaction matrix: transmission and reflection coefficients ($S_{ij}(E)$), the time delay ($\tau(E)$), and trapping probability ($P(E)$) and we show that their poles are the same as the poles of the scattering matrix. Taking into account some representative scattering potentials, we will analyze the scattering quantities as a functions of energy and we will show that the RMT computing times are at least one order of magnitude faster than using the transfer matrix method.

We also obtain expressions of the scattering quantities in the single-level approximation, whose importance lies in relating the internal spectrum of system with the resonances in the scattering quantities and also with the poles of $S(E)$. Moreover, we will get the scattering matrix in terms of a non-Hermitian effective Hamiltonian whose eigenvalues are the poles of $S(E)$. We will describe and use three methods to calculate the poles of the scattering matrix for one and two channels: the root-finding method, the scanning method, and the fixed point iterative method. We discuss their limitations and advantages. We found an analytical expression for the error that arises when truncating the series that define the R-matrix. Due to the slow convergence of $R(E)$, we introduce a new method to accelerate the convergence of the $R_{\nu\nu'}(E)$ that will allow us calculate a large number of poles of $S(E)$.

In addition, we will obtain the reaction matrix for a quasi one-dimensional interaction region connected

to two terminals. The reaction region may be a cavity with arbitrary walls and/or a scattering potential located in the waveguide. We will calculate the conductance for three open modes for two types of random potential that change only in the longitudinal direction.

Concerning to the classical waves, we study the electromagnetic transmission T through one-dimensional (1D) photonic heterostructures whose layer thicknesses follow a Lévy-type distribution. We show (numerically) that for a system of length L that (i) the average $\langle -\ln T \rangle \propto L^\alpha$ for $0 < \alpha < 1$, while $\langle -\ln T \rangle \propto L$ for $1 \leq \alpha < 2$, α being the exponent of the power-law decay; and (ii) the transmission distribution $P(T)$ is independent of the angle of incidence and frequency of the electromagnetic wave. We also found that $\langle T \rangle \propto L^{-\alpha}$.

Índice general

Resumen	II
Abstract	IV
1. Introducción	X
2. Método de la Matriz de Reacción	XIV
2.1. Definición de Canales	XIV
2.2. Obtención de la Matriz de Reacción	XV
2.2.1. Una dimensión, un canal	XV
2.2.2. Una dimensión, dos canales	XX
2.2.3. Sistema cuasi-unidimensional	XXIV
2.3. La Matriz de Dispersión en términos de la Matriz de Reacción	XXX
2.3.1. $S(E)$ en una dimensión para un canal	XXXI
2.3.2. $S(E)$ en una dimensión, dos canales	XXXV
2.3.3. $S(E)$ para M canales	XXXVII
2.4. Continuidad de la función de onda dispersada	XXXIX
2.5. Ventajas teóricas de la TMR sobre otros métodos	XL
3. Cantidades de Dispersión	XLII
3.1. Cantidades de dispersión en sistemas unidimensionales de un canal	XLII
3.1.1. Tiempo de demora $\tau(E)$	XLII
3.1.2. Probabilidad de atrapamiento	XLIV

3.2. Cantidades de dispersión en sistemas unidimensionales de dos canales	XLV
3.2.1. Coeficientes de reflexión y transmisión	XLV
3.2.2. Tiempo de demora, dos canales	XLVI
3.2.3. Probabilidad de Atrapamiento	XLVIII
3.3. Los polos de $t(E)$, $\tau(E)$ y $P(E)$ son los mismos que los polos de $S(E)$	XLIX
3.4. Modelos de potenciales dispersivos	LII
3.5. Resonancias de transporte vs. resonancias de $S(E)$; un canal	LIV
3.5.1. $\tau(E)$ y $P(E)$ para $V(x) = V_0$; un canal	LIV
3.5.2. $\tau(E)$ y $P(E)$ para un potencial de PT y PC; un canal	LIX
3.5.3. $\tau(E)$ y $P(E)$ para cadenas de potenciales; un canal	LXI
3.5.4. Resonancias de transporte vs. resonancias de $S(E)$. Dos canales	LXIII
3.5.5. $T(E)$, $\tau(E)$ y $P(E)$ para $V(x) = \pm V_0$; dos canales	LXIV
3.5.6. $T(E)$, $\tau(E)$ y $P(E)$ para potenciales de PT y PC; dos canales	LXVI
3.5.7. CD para cadenas de potenciales, TMR vs. MMT	LXIX
3.5.8. Ventajas numéricas del método de la matriz de Reacción	LXXII
4. Aproximación a un nivel de las CD	LXXV
4.1. $A_\lambda(E)$ para un canal	LXXV
4.2. $A_\lambda(E)$ para dos canales	LXXXI
4.3. Cantidades de dispersión en la aproximación a un nivel	LXXXV
4.3.1. $\tau(E)$ en la aproximación a un nivel; un canal	LXXXV
4.3.2. $P(E)$ en la aproximación a un nivel; un canal	LXXXVII
4.3.3. $t(E)$ en la aproximación a un nivel, dos canales	LXXXIX
4.3.4. $\tau(E)$ en la aproximación a un nivel, dos canales	XCI
4.3.5. $P(E)$ en la aproximación a un nivel; dos canales	XCII
5. Formalismo del hamiltoniano efectivo	XCIV
5.1. Matriz de dispersión en términos del hamiltoniano efectivo	XCIV
5.1.1. $\mathcal{H}(E)$ para $V(x) = V_0$. Uno y dos canales	XCVIII
5.1.2. A_λ vs. VV^\dagger	C

5.2. Cantidades de dispersión en términos de $\mathcal{H}(E)$	CI
5.2.1. El coeficiente de transmisión	CI
5.2.2. Tiempo de demora	CIV
5.2.3. Probabilidad de atrapamiento	CV
5.3. Aplicación del hamiltoniano efectivo para el cálculo de las CD	CVI
5.4. El Punto Fijo	CVIII
5.5. Modelo de pocos niveles	CX
6. Métodos para calcular los polos de S	CXV
6.1. Introducción	CXV
6.2. Polos de la matriz S y polos de la Matriz de Reacción	CXVI
6.3. Método de búsqueda de raíces (MBR)	CXVIII
6.4. Método del Punto Fijo (MPF)	CXIX
6.5. Método de escaneo de la función $\tau(z)$	CXXI
6.6. Ventajas y limitaciones de los métodos	CXXIII
6.7. Sistemas representativos	CXXVI
6.8. Error generado	CXXXIII
6.9. Aceleración de la convergencia	CXXXVI
7. Guía de onda cuasi-unidimensional	CXLIII
7.1. Introducción	CXLIII
7.2. Transformación canónica	CXLIV
7.3. Cálculo de la conductancia para $M=3$ modos abiertos	CXLVIII
8. Caso fotónico	CLIII
8.1. Introducción	CLIII
8.2. Modelo	CLV
8.3. Cálculo de la transmisión T	CLVI
8.4. Propiedades estadísticas de T	CLVII
8.4.1. Promedio de la transmisión $\langle T \rangle$	CLVII
8.4.2. Promedio del logaritmo de la transmisión $\langle -\ln T \rangle$	CLIX

8.4.3. Distribución de la transmisión $P(T)$	CLX
9. Conclusiones	CLXII
A. Matriz R y S con Condiciones de Frontera Homogéneas	CLXVI
A.1. Condiciones de Frontera	CLXVI
A.2. Relación de Ortogonalidad	CLXVII
A.3. Matriz de Reacción, un canal	CLXIX
A.4. Matriz de reacción, dos canales	CLXX
A.5. La Matriz S en términos de la Matriz R	CLXXIII
B. Potencial constante, uno y dos canales	CLXXV
B.1. Barrera/pozo de potencial constante, dos canales	CLXXV
B.2. Potencial plano semi-infinito, un canal	CLXXVIII
C. Eigenestados de Reacción	CLXXX
D. $A_\lambda(E)$ en forma matricial	CLXXXIII
E. Método de la Matriz de Transferencia	CLXXXVI
F. Punto fijo y análisis de estabilidad	CXC
F.1. Modelo de un nivel	CXC
F.2. Modelo de dos niveles	CXCI
F.3. Análisis de estabilidad para $N = 2$	CXCIII
G. Propiedades de la matriz de dispersión	CXCV

Capítulo 1

Introducción

La dispersión de las ondas en cavidades es un problema de interés en muchas áreas de la física. Esto se debe al hecho de que en las cavidades podemos encontrar la mayoría de los fenómenos de dispersión producidos en sistemas complejos [1, 2]. El estudio tanto teórico como experimental de la dispersión por cavidades ha permitido entender la interacción onda-materia a diferentes escalas [3, 4]. Por otro lado, resultados teóricos, numérico y experimentales sobre la dispersión por cavidades unidimensionales se han tratado ampliamente en [5–7]. Además, el profesor Estöckmann y sus colaboradores han estudiado teórica y experimentalmente la dispersión en cavidades bidimensionales [8–10].

Varios trabajos han tratado la dispersión de la luz a través de medios dieléctricos [11–16] y en heteroestructuras fotónicas [17]. Estudios teóricos y experimentales sobre la propagación de ondas acústicas se han desarrollado principalmente en el grupo del Profesor José Sanchez [18–21]. Algunos resultados experimentales sobre la dispersión de ondas torsionales se encuentran reportados en [6, 7].

Esta tesis trata sobre la descripción de la dispersión cuántica no relativista independiente del tiempo en una y cuasi-una dimensiones con potenciales arbitrarios localizados en una cierta región del espacio. Siendo la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, el formalismo que aquí vamos a desarrollar es válido para todos los sistemas antes mencionados. Los potenciales pueden deberse a potenciales de interacción electrostática de partículas cuánticas, potenciales atómicos, o arreglos de pozos cuánticos, por ejemplo. Sin embargo, la teoría de dispersión que utilizaremos, que tiene sus orígenes en la física nuclear, se puede aplicar también para fenómenos de dispersión de luz a través de potenciales dieléctricos en una y cuasi una

dimensión.

La herramienta principal en las teorías de dispersión cuántica es la matriz de dispersión $S(E)$ (introducida por Wheeler en 1937 [22]), ya que contiene toda la información posible que se puede extraer del sistema dispersivo [5, 23–26]. Ésta se puede escribir en términos de diferentes cantidades, dependiendo del formalismo teórico. Por ejemplo, usando propagadores (métodos perturbativos) tenemos el método de Lippmann Schwinger [24], el método de la función de Green [5, 24], el método de la Matriz de Transferencia [5, 27] y en términos de métodos puramente numéricos tal como el método del elemento finito [28]. Por otro lado, tenemos aquellos que separan el espacio completo de Hilbert: el método de los operadores de proyección de Feshbach [29–31], el método de la matriz T [24, 32] y el método de la Teoría de la Matriz de Reacción (TMR) [33–38]. Este último, será usado en esta tesis ya que nos va a permitir relacionar las propiedades de las CD con el espectro del sistema interno o de reacción.

La TMR fue introducida en la década de los 40's por E. P. Wigner y L. Eisenbud [33–35] para el estudio de las reacciones nucleares basándose en la idea original de Kapur y Peierls [39]. En la actualidad, la TMR se utiliza para describir la dispersión de una partícula (o sistemas de partículas) con un dispersor (potencial) [5, 37, 40], en puntos cuánticos [41] y en guías de ondas [5, 37, 42–44].

El principio de la TMR se basa en la división del espacio de configuración a través de la definición de una frontera virtual (*llamada frontera de reacción*) en dos regiones: región interna (*también llamada región de reacción*) y región externa (*llamada región asintótica*). En la región asintótica se considera que la solución a la ecuación de Schrödinger es conocida. En muchas aplicaciones en la región externa la partícula es totalmente libre (superposición de ondas planas). En la región interna, el sistema se considera como si estuviera *aislado del exterior* y por lo tanto, la solución a la ecuación de Schrödinger (con condiciones de frontera específicas) es tal que sus eigenestados (discretos) forman una base completa que se usa para expandir la función de onda dispersada en dicha región. Entonces la matriz R , la cual es definida como la inversa de la derivada logarítmica de la función de onda dispersada evaluada en la frontera de reacción, puede ser calculada. Aplicando la continuidad de la función de onda y su derivada se obtiene la matriz de dispersión S .

Para conseguir nuestros resultados nos planteamos los siguiente objetivos particulares:

- diseñar e implementar algoritmos de computación que nos permitan resolver la ecuación de Schrödinger para potenciales arbitrarios y también obtener la matriz de dispersión en una y cuasi una dimen-

siones,

- implementar y crear algoritmos de computación que nos permitan hacer el cálculo de los polos de la matriz de dispersión en sistemas de una dimensión,
- estudiar las cantidades de dispersión en sistemas de uno y dos canales en una dimensión y para sistemas de multicanales en un sistema cuasi-unidimensional,
- relacionar el espectro de Reacción con las características de las cantidades de dispersión.
- estudiar numérica y experimentalmente la transmisión de ondas electromagnéticas a través de una heteroestructura fotónica.

Organización del Trabajo

El trabajo está organizado de la siguiente forma. En el capítulo 2 estudiamos las CD en un sistema unidimensional. Para ello describimos en detalle el método de la TMR para M canales. Discutimos las propiedades de la función de onda dispersada así como las condiciones de frontera impuestas en la frontera virtual necesarias para mantener la hermiticidad del problema. Nuestro resultado principal en este primer capítulo es la obtención de las energías de reacción a través del *cálculo inverso*. En el capítulo 3 obtenemos expresiones analíticas de las CD en términos de los elementos de la matriz R y mostramos que éstas tienen los mismos polos que los polos de la matriz S . Posteriormente deducimos sus expresiones en la aproximación de un solo nivel. Finalmente tomamos algunos potenciales representativos para discutir los pros y contras del cálculo numérico de la matriz R respecto a otros métodos. En el capítulo 4 demostramos analítica y numéricamente i) para el caso de un canal, para una onda incidente a una energía $E \sim E_{\lambda'}$, ésta estará formada únicamente por el eigenestado $|\Psi_{\lambda}\rangle$ y ii) para el caso de dos canales (1D), una onda incidente a una energía $E \sim E_{\lambda}$ estará compuesta primordialmente por el eigenestado de Neumann $|\Psi_{\lambda}\rangle$ y de aquellos estados con diferente paridad a $|\Psi_{\lambda}\rangle$ contribuyendo con intensidades que decaen como $1/(E_{\lambda} - E_{\lambda'})^2$.

En el capítulo 5 usamos el formalismo del hamiltoniano efectivo para describir las CD y mostramos que los polos de S coinciden con los eigenvalores del hamiltoniano efectivo. Además, este formalismo nos permite hacer la descripción de las CD considerando modelos de pocos niveles. En el capítulo 6 describimos los métodos para calcular los polos de S : Método del punto fijo (MPF), método de búsqueda de raíces (MBR)

y el método de escaneo (ME). Discutimos el régimen de validez y de coincidencia así como las limitaciones y ventajas de cada uno de estos métodos. En seguida (Sec. 6.8), encontramos analíticamente la expresión para el error (B_N) que resulta de truncar las series que definen la matriz R : $B_N \propto \log(1 + C(E)/N)$, el cual se refleja en las limitaciones de los métodos previamente mencionados. Concluimos este capítulo introduciendo un *nuevo* método para acelerar la convergencia. Éste consiste en separar los elementos de la matriz R en una suma finita y una suma infinita, ésta última se puede escribir como una serie convergente.

En el capítulo 7 consideramos un sistema cuasi-unidimensional, en donde introducimos y desarrollamos el método de la transformación canónica, la cual consiste en pasar de una cavidad con paredes arbitrarias a una con paredes planas (Sec. 7.2). En la sección 7.3 calculamos la conductancia G para $M = 3$ modos permitidos en una cavidad con paredes planas con un potencial que varía únicamente en la dirección longitudinal considerando dos tipos de ruido: el ruido posicional y ruido composicional. Concluimos que la conductancia distingue del tipo de ruido, siendo más sensible al ruido posicional.

En el capítulo 8 estudiamos la transmisión electromagnética ($\langle -\ln T \rangle$) a través de una heteroestructura fotónica cuyos anchos siguen una secuencia aleatoria de cola larga. Mostramos que $\langle -\ln T \rangle \propto L^\alpha$ para $0 < \alpha < 1$ y $\langle -\ln T \rangle \propto L$ para $1 \leq \alpha < 2$, donde α es el exponente de decaimiento de la ley de potencia de la distribución de L evy y L el tama o de la muestra. Adem as, mostramos num ericamente que $P(T)$ (distribuci on de probabilidad) es independiente del  angulo de incidencia y la frecuencia de la onda electromagn etica. Finalmente en el cap ıtulo 9 concluimos haciendo un resumen de todos los resultados obtenidos en este trabajo.

Capítulo 2

Método de la Matriz de Reacción

En este capítulo describimos el formalismo de la Teoría de la Matriz de Reacción para una partícula cuántica sin espín dispersada por un potencial arbitrario. Supondremos que el sistema es invariante bajo inversión temporal. En primer lugar definimos el concepto de canal de dispersión. En segundo lugar encontramos la forma explícita de la Matriz de Reacción para el sistema de un canal, dos canales y M canales (cavidad + guías de ondas), respectivamente. Para el caso último, nos especializamos en una guía electrónica con M modos abiertos. Posteriormente encontramos la matriz de dispersión $S(E)$ en términos de la matriz $R(E)$ para los tres casos anteriores y finalmente, discutimos las características de la función de onda dispersada en la región interna así como las ventajas conceptuales de usar este formalismo respecto a otros métodos.

2.1. Definición de Canales

En la descripción de los fenómenos dispersivos se requiere de la definición de los llamados canales de dispersión (*Scattering channels*). Cada canal se identifica por un posible estado en la región asintótica, antes o después de la interacción con el potencial. Para sistemas nucleares, un canal puede corresponder a un grupo de partículas en un cierto estado definido por sus momentos angular, spinorial, etc.. Por otro lado, para una guía de ondas cuasi-unidimensional con dos terminales, el número de canales está dado por los modos de propagación en cada terminal.

El caso más simple es el de un solo canal. Esto ocurre en un sistema unidimensional donde el potencial dispersivo sólo permite reflexión. También nos referiremos a este caso como un sistema semi-infinito. Sí el sistema unidimensional permite la transmisión, entonces el sistema es de dos canales, el canal de reflexión y el de transmisión y le llamaremos sistema unidimensional infinito.

Un caso importante es el de sistemas dispersivos con simetría esférica, común en sistemas nucleares y atómicos. Esta simetría implica que la solución a la ecuación de Schrödinger es separable, donde para cada momento angular se satisface su ecuación radial sujeta a la Condición de Frontera de Dirichlet (CFD) en el origen. Es decir, para cada momento angular l , el sistema es efectivamente unidimensional con un solo canal, el canal de reflexión y la matriz de dispersión $S(E)$ es entonces diagonal de tamaño $l \times l$.

En este capítulo obtenemos la matriz de reacción para tres tipos de sistemas: **i)** unidimensional semi-infinito, **ii)** sistema unidimensional infinito y **iii)** guía de ondas cuasi-unidimensional, con $m = 1, 2$, y M canales, respectivamente.

2.2. Obtención de la Matriz de Reacción

2.2.1. Una dimensión, un canal

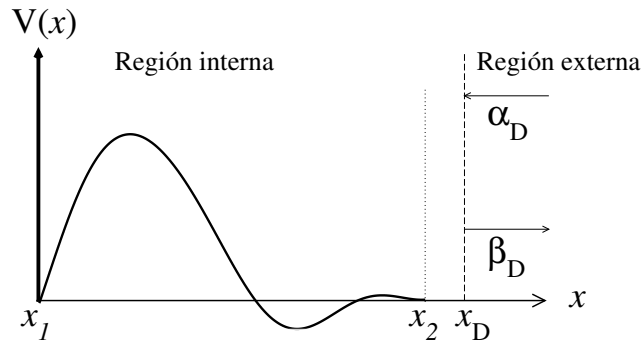


Figura 2.1: Sistema dispersivo unidimensional. Hemos introducido una *frontera de reacción* en $x = x_D$, la cual separa la región interna de la externa y $x = x_2$ (nos referiremos como *frontera de continuidad*) denota el punto a partir del cual el potencial es despreciable.

Consideremos una partícula sin espín en una dimensión interactuando con un potencial dispersivo arbitrario. Sin pérdida de generalidad escogemos incidencia por la derecha. Consideremos que en $x = x_1 = 0$ se

encuentra una pared impenetrable y por lo tanto el potencial dispersivo está localizado en la región $0 \leq x \leq x_2$:

$$V = \begin{cases} \infty; & x \leq 0, \\ V(x); & 0 < x \leq x_2, \\ 0; & x > x_2, \end{cases} \quad (2.1)$$

donde x_2 (rango del potencial) denota el punto a partir del cual el potencial se anula y además define la frontera que divide la zona de reacción o de interacción con el potencial dispersivo; a la derecha de x_2 la partícula es libre. La función de onda y su derivada deben ser continuas en la frontera de reacción y obedecer condiciones de frontera, tales como Dirichlet o Neumann o más generales. La teoría de la matriz de reacción nos permite imponer la continuidad y condiciones de frontera en la frontera de reacción (x_D) o a cualquier otra distancia que incluya x_2 . En ocasiones haremos uso de esta opción y por lo tanto definiremos a x_D como la Frontera de Continuidad, para distinguirla de la frontera de Reacción. Para propósitos de interpretación física, como veremos más adelante, conviene escoger $x_D = x_2$. Por otro lado, cabe mencionar que la elección de x_2 es inmediata cuando $V(x_2) = 0$. Para potenciales que decaen de manera lenta a cero conforme $x \rightarrow \infty$, es necesario variar la posición de x_2 y para cada posición calcular las cantidades de dispersión. La posición adecuada de la frontera de reacción será tal que el cálculo de las cantidades de dispersión ya no cambien.

La función de onda satisface la ecuación de Schrödinger

$$H\psi(E; x) = \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \psi(E; x) = E\psi(E; x), \quad 0 \leq x < \infty, \quad (2.2)$$

con la condición de frontera: $\psi(E; x = 0) = 0$ (caso semi-infinito). En la región asintótica (*región externa*) la partícula es libre y por lo tanto su función de onda es una combinación lineal de ondas planas

$$\psi(E; x > x_2) = e^{-ikx} + S(E)e^{ikx}, \quad (2.3)$$

donde $\alpha_D \equiv 1$ (amplitud de la onda incidente) y $\beta_D \equiv S(E)$ (amplitud de la onda reflejada) y $k = \hbar^{-1}\sqrt{2\mu E}$ es el vector de onda.

Una característica básica del método de la Teoría de la Matriz de Reacción, TMR, es la separación del

espacio completo de Hilbert en una región interna y otra externa. $x = x_D$ es la frontera de reacción, que separa las dos regiones, como se muestra en la Fig. 2.1. En la región interna se resuelve la ecuación de Schrödinger:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \Psi_\lambda(x) = E_\lambda \Psi_\lambda(x), \quad 0 \leq x \leq x_2. \quad (2.4)$$

con ciertas condiciones de frontera especificadas abajo. Debido a la pared impenetrable, la condición de frontera en $x_1 = 0$ es $\psi(E; x_1) = 0$, i.e., condiciones de frontera de Dirichlet. La pregunta es ¿qué tipo de Condición de Frontera (CF) debemos de escoger en $x = x_2$ para $\Psi_\lambda(x)$? Recordemos que las CF son necesarias para conservar la hermiticidad del hamiltoniano dado en (2.4). Existen muchas opciones a priori viables de CF para $\Psi_\lambda(x)$ en $x = x_2$ (ver la Sección A.1 del Apéndice A y Cuadro 2.1).

Wigner y Eisenbud [33–35] usaron Condiciones de Frontera de Neumann (CFN):

$$\left. \frac{d\Psi_\lambda(x)}{dx} \right|_{x=x_2} = 0, \quad (2.5)$$

con lo cual definieron a la función de reacción como

$$\frac{1}{R(E)} = \left(\frac{1}{\psi(x)} \frac{d\psi(x)}{dx} \right)_{x=x_2}, \quad (2.6)$$

es decir, la inversa de la función de reacción $R(E)$ es igual a la derivada logarítmica de la función de onda dispersada en $x = x_2$. La ec. (2.6) dice que $R(E)$ tiene dimensiones de longitud.

Lane y Thomas [36] generalizaron las CF dadas en la ecuación (2.5) y consideraron CF Homogéneas (CFH) definidas en términos de la derivada logarítmica de los eigenestados de reacción:

$$\left(\frac{1}{\Psi_\lambda(x)} \frac{d\Psi_\lambda(x)}{dx} \right)_{x=x_2} = B, \quad (2.7)$$

donde B (con unidades de inversa de la longitud) es un parámetro de frontera real e independiente de λ y nos permite ir, de forma continua, de las CFN ($B = 0$) a las CFD ($B = \infty$). Ellos demostraron que la matriz de reacción es dependiente de B , sin embargo, la matriz de dispersión no lo es (ver comentarios al final de la Sec. A.5 del Apéndice A).

En 1957, justo antes de que se publicara el trabajo de Lane y Thomas [36], Bloch [45] introdujo un

CF <i>Mixtas 1</i>	CFN	CFD	CF <i>Mixtas 2</i>
$\Psi_\lambda(x_I) = 0$	$\frac{d\Psi_\lambda(x_I)}{dx} = 0$	$\Psi_\lambda(x_I) = 0$	$\frac{d\Psi_\lambda(x_I)}{dx} = 0$
$\frac{d\Psi_\lambda(x_D)}{dx} = 0$	$\frac{d\Psi_\lambda(x_D)}{dx} = 0$	$\Psi_\lambda(x_D) = 0$	$\Psi_\lambda(x_D) = 0$

Cuadro 2.1: CF más comunes aplicadas a $\Psi_\lambda(x)$ en las *fronteras de reacción*. Aquí $x_I = 0$ y $x_D = x_2$. Las terminaciones de N y D se refieren a Neumann y Dirichlet, respectivamente.

operador singular (conocida actualmente como operador de Bloch) definido sobre la frontera de reacción, el cual asegura hermeticidad del hamiltoniano interno y permite el acoplamiento entre las funciones de onda que entran y salen en la frontera de reacción.

Aquí, seguiremos [36] para deducir la matriz de reacción y la matriz de dispersión $S(E)$, es decir, usaremos las CFH. Usando la ecuación (2.7), se muestra que los $\Psi_\lambda(x)$ forman una base completa ortonormal que depende de B (ver la sección A.2 del Apéndice A):

$$(\Psi_{\lambda'}^*(x; B), \Psi_\lambda(x; B)) = \int_0^{x_2} \Psi_{\lambda'}^*(x; B) \Psi_\lambda(x; B) dx = \delta_{\lambda'\lambda}. \quad (2.8)$$

Por otra parte, a cada estado $\Psi_\lambda(x; B)$ (que llamaremos estados de reacción) le corresponde una energía $E_\lambda(B)$ (que llamaremos energías de reacción),

$$E_\lambda(B) = \frac{\hbar^2 K_\lambda^2(B)}{2\mu}, \quad (2.9)$$

donde $K_\lambda(B)$ depende de la forma explícita del potencial. En la región interna, la función de onda dispersada $\psi_{in}(E; x)$ se expande en el conjunto completo $\{\Psi_\lambda(x; B)\}$ como:

$$\psi_{in}(E; x) \equiv \psi(E; x) = \sum_{\lambda=1}^{\infty} A_\lambda(E; B) \Psi_\lambda(x; B); \quad 0 \leq x \leq x_2. \quad (2.10)$$

donde los $A_\lambda(E; B)$ y $A_\lambda(E; 0)$ están dados, respectivamente, como (ver los detalles en la Sec. A.3):

$$A_\lambda(E; B) = \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial_x \psi(E; x_2) - B\psi(E; x_2)}{E_\lambda(B) - E} \Psi_\lambda^*(x_2; B), \quad (2.11a)$$

$$A_\lambda(E; 0) = \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial_x \psi(E; x_2)}{E_\lambda(0) - E} \Psi_\lambda^*(x_2; 0). \quad (2.11b)$$

La ecuación (2.11b) la usaremos después para definir la probabilidad de atrapamiento (ver la Sec. 3.1.2)

así como para demostrar que la función de onda dispersada en la región interna no diverge cuando $E \rightarrow E_\lambda(0)$ (ver la Sec. 4.1).

En general, substituyendo la ecuación (2.11a) en (2.10), obtenemos la función de onda dispersada como

$$\psi(E; x) = (\partial_x \psi(E; x_2) - B\psi(E; x_2)) \frac{\hbar^2}{2\mu} \sum_{\lambda=1}^{\infty} \frac{\Psi_\lambda^*(x_2; B)\Psi_\lambda(x; B)}{E_\lambda(B) - E}, \quad 0 \leq x \leq x_2. \quad (2.12)$$

Evaluando (2.12) en $x = x_2$, obtenemos

$$\psi(E; x_2) = (\partial_x \psi(E; x_2) - B\psi(E; x_2))R(E; B). \quad (2.13)$$

Aquí,

$$R(E; B) \equiv \frac{\hbar^2}{2\mu} \sum_{\lambda=1}^{\infty} \frac{\Psi_\lambda^*(x_2; B)\Psi_\lambda(x_2; B)}{E_\lambda(B) - E} = \sum_{\lambda} \frac{|\gamma_\lambda(B)|^2}{E_\lambda(B) - E}, \quad (2.14)$$

donde $|\gamma_\lambda(B)| = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2\mu}} |\Psi_\lambda(x_2; B)|$ se le conoce como la amplitud reducida. Su cuadrado, $\gamma_\lambda^2(B)$, con dimensiones de *energía-longitud* se le conoce como el ancho reducido [36]. La expresión (2.14) muestra que la función de reacción depende de B y que $R(E; B)$ es una *función meromórfica* [5, 36, 38], real sobre el eje real, cuyos polos ocurren únicamente sobre el eje real y sus residuos son reales y negativos. Ahora, reacomodando términos en (2.13), obtenemos

$$\frac{\partial_x \psi(E; x_2)}{\psi(E; x_2)} = \frac{1 + BR(E; B)}{R(E; B)} = \frac{1}{R(E; B)} + B. \quad (2.15)$$

Para el caso particular de $B = 0$ (CFN), la función de reacción coincide con la definición de Wigner y Eisenbud [33–35]:

$$R(E) = R(E; B = 0) = \left(\frac{\psi(E; x)}{\partial_x \psi(E; x)} \right)_{x=x_2} = \sum_{\lambda}^{N \rightarrow \infty} \frac{|\gamma_\lambda|^2}{E_\lambda - E}, \quad (2.16)$$

donde $|\gamma_\lambda(B = 0)| \equiv |\gamma_\lambda|$ y $E_\lambda(B = 0) \equiv E_\lambda$. Con la ayuda de (2.16), podemos escribir (2.15) como

$$R(E; B) = (R^{-1}(E) - B)^{-1}. \quad (2.17)$$

La ecuación (2.17) muestra la relación entre $R(E; B)$ y la función de reacción con CFN [36, 38]. Por otro

lado, reescribiendo (2.17) como $R^{-1}(E) = R^{-1}(E; B) + B$ podemos ver que la derivada logarítmica de la función de onda interna en la frontera de reacción es independiente de B [38]. Alternativamente, la dependencia de la función de reacción sobre B se puede expresar como una ecuación diferencial [36]

$$\frac{\partial R(E; B)}{\partial B} = R^2(E; B). \quad (2.18)$$

Hasta aquí hemos deducido la función de reacción para una dimensión y un canal en su forma más general. No obstante, aunque la matriz de reacción depende de B , la matriz de dispersión $S(E)$ es independiente del parámetro de frontera como lo veremos más adelante [36] (ver por ejemplo la ecuación (2.63), Sec. 2.3.1). La razón por la cual no vamos a considerar valores de $B \neq (0, \infty)$, es que se torna complicado obtener una base completa. En este sentido, existen dos valores de B para los cuales, la matriz de dispersión obtiene su forma más simple. Estos valores son $B = 0$ [ver ecuación (2.72)] y $B = \infty$, correspondientes a las Condiciones de Frontera de Neumann y Dirichlet, respectivamente. Sin embargo, en lo sucesivo únicamente consideraremos el caso de CFN debido a que éstas permiten el acoplamiento entre la función de onda dispersada y asintótica. $B = \infty$ es un caso muy especial y será tratado en un trabajo posterior, debido a que las series que definen los elementos de la Matriz de Reacción (con CFD) divergen, en consecuencia, no permiten calcular las CD de forma adecuada, a menos que se haga un proceso de regularización.

Para referencia futura, nos especializamos ahora al caso de una barrera(+)/pozo(-) de potencial constante. Para ello obtendremos los anchos reducidos haciendo uso de la ecuación (C.7), que después de ser evaluada en $x = x_2$ encontramos: $\gamma_\lambda^2 = \frac{\hbar^2}{2\mu} |\Psi_\lambda(x_2)|^2 = \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{2}{x_2}$. Los eigenvalores los obtenemos de (C.12), dados como $E_\lambda = \frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{\lambda\pi}{2x_2} \right)^2 \pm V_0$ con $\lambda = 1, 3, 5, \dots$. Sustituyendo todo esto en (2.16), obtenemos $R(E)$ para $V(x) = \pm V_0$ [33, 36, 37]

$$R(E) = \frac{\tan(qx_2)}{q} = \sum_{\lambda=impar}^{\lambda=N \rightarrow \infty} \frac{2/x_2}{\left(\frac{\lambda\pi}{2x_2} \right)^2 - q^2}, \quad (2.19)$$

con $\hbar q = \sqrt{2\mu(E \pm V_0)}$.

2.2.2. Una dimensión, dos canales

Eliminemos la barrera impenetrable de la sección anterior permitiendo así, que la partícula *continúe* su viaje después de interactuar con el potencial $V(x)$. Es decir, ahora la partícula puede ser transmitida y

reflejada. Este es un ejemplo de un sistema con dos canales. Supondremos que el potencial dispersivo $V(x)$ está localizado dentro de una región del espacio ($x_1 \leq x \leq x_2$) como se muestra en la Fig. 2.2. La función de onda estacionaria de la partícula satisface la ecuación de Schrödinger

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \psi(E; x) = E\psi(E; x), \quad -\infty < x < \infty. \quad (2.20)$$

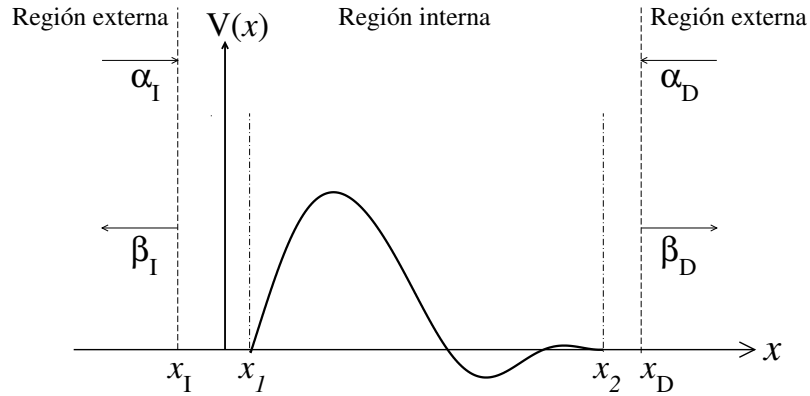


Figura 2.2: Sistema unidimensional de dos canales. El potencial está localizado en la región $x_1 \leq x \leq x_2$. La *región interna* está acotada por las fronteras de reacción situadas en $x = x_{I,D}$. Aquí, $\alpha_{I,D}$ ($\beta_{I,D}$) denotan las amplitudes de las ondas entrantes (salientes).

En la región asintótica (región externa) la partícula es libre y por lo tanto la solución de la función de onda se describe como una combinación lineal de ondas planas entrantes y salientes:

$$\psi_D(E; x > x_D) = \alpha_D e^{-ikx} + \beta_D e^{ikx}, \quad (2.21a)$$

$$\psi_I(E, x < x_I) = \alpha_I e^{ikx} + \beta_I e^{-ikx}, \quad (2.21b)$$

donde $\alpha_{I,D}$ y $\beta_{I,D}$ son constantes complejas adimensionales y $k = \hbar^{-1} \sqrt{2\mu E}$.

A continuación describimos el procedimiento para obtener la matriz de reacción para este sistema. De manera similar al caso de un canal, definimos dos puntos, $x = x_I$ y $x = x_D$ que separan la región interna de la externa como se muestra en la Fig. 2.2. Nuevamente, por simplicidad tomaremos $x = x_I = x_1$ y $x = x_D = x_2$ debido a que nuestro propósito es relacionar las energías de reacción con las propiedades de las CD. $x_{1[2]}$ denota el punto a partir del cual el potencial se anula y además define la frontera que divide la zona de reacción o de interacción con el potencial dispersivo; a la izquierda [derecha] de $x_{1[2]}$ la partícula

es libre. La Teoría de la Matriz de Reacción permite imponer la continuidad y condiciones de frontera en la frontera de reacción ($x_{I,D}$) o a cualquier otra distancia que incluya $x_{1,2}$. Más adelante haremos uso de esta opción y por lo tanto definimos $x_{1,2}$ como las Fronteras de Continuidad, para distinguirlas de las frontera de Reacción.

En la región interna las soluciones $\{\Psi_\lambda(x)\}$ de la ecuación de Schrödinger

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \Psi_\lambda(x) = E_\lambda \Psi_\lambda(x), \quad (2.22)$$

obedecen las Condiciones de Frontera de Neuman:

$$\left(\frac{1}{\Psi_\lambda(x)} \frac{d\Psi_\lambda(x)}{dx} \right)_{x=x_\nu} = 0, \quad (2.23)$$

donde x_ν denota la posición de la frontera de reacción.

La deducción general para $B_\nu \neq 0$, tanto de la función de onda dispersada como de la Matriz de Reacción $R(E; B)$, son tratados en el Apéndice A. Aquí, tomaremos el caso particular de $B_\nu = 0$ (CFN) debido a que la matriz de dispersión es independiente de B como se demuestra en el Apéndice A, Sec. A.5. Por otro lado, no vamos a considerar valores de $B_\nu \neq (0, \infty)$, por la misma razón que en el caso de un canal, i.e., se torna complicado obtener una base completa.

Entonces, para las CFN definimos $A_\lambda(E; B = 0) \equiv A_\lambda(E)$ y $\Psi_\lambda(x_\nu; B = 0) \equiv \Psi_\lambda(x_\nu)$, donde los eigenestados de reacción ($\Psi_\lambda(x)$) forman una base completa de estados ortonormales (ver Apéndice A), en términos de los cuales expandimos la función de onda $\psi(E; x)$ de (2.20), como

$$\psi(E; x) = \sum_{\lambda}^{\infty} A_\lambda(E) \Psi_\lambda(x), \quad x_I \leq x \leq x_D, \quad (2.24)$$

donde $A_\lambda(E)$ (con unidades de $\sqrt{\text{longitud}}$) está dado como (ver la sección A.4)

$$A_\lambda(E) = \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\Psi_\lambda^*(x_D) \psi'(E; x_D) - \Psi_\lambda^*(x_I) \psi'(E; x_I)}{E_\lambda - E}. \quad (2.25)$$

Sustituyendo (2.25) en (2.24), obtenemos explícitamente la función de onda en la región interna como

$$\psi_{in}(E; x) \equiv \psi(E; x) = \frac{\hbar^2}{2\mu} \sum_{\lambda}^{\infty} \frac{\Psi_{\lambda}^*(x_D) \partial_x \psi(E; x_D) - \Psi_{\lambda}^*(x_I) \partial_x \psi(E; x_I)}{E_{\lambda} - E} \Psi_{\lambda}(x). \quad (2.26)$$

Al evaluar (2.26) en $x = x_D$ y $x = x_I$, obtenemos

$$\psi(E; x_{\nu}) = R_{\nu\nu'}(E) \frac{\partial}{\partial n} \psi(E; x_{\nu'}), \quad (2.27)$$

la cual se puede escribir en forma matricial como

$$\Psi = R(E) \nabla \Psi, \quad (2.28)$$

con $\Psi = \begin{pmatrix} \psi(E; x_D) \\ \psi(E; x_I) \end{pmatrix}$, ∇ denota el operador de la derivada en la dirección normal y $R(E; B = 0) \equiv R(E)$ es la Matriz de Reacción de 2×2 cuyos elementos (con dimensiones de *longitud*) están dados como

$$R_{\nu\nu'}(E) = \frac{\hbar^2}{2\mu} \sum_{\lambda}^{N \rightarrow \infty} \frac{\Psi_{\lambda}^*(x_{\nu}) \Psi_{\lambda}(x_{\nu'})}{E_{\lambda} - E} = \sum_{\lambda}^{N \rightarrow \infty} \frac{\gamma_{\lambda}^{\nu\nu'}}{E_{\lambda} - E}, \quad (2.29)$$

con

$$\gamma_{\lambda}^{\nu\nu'} \equiv \frac{\hbar^2}{2\mu} \Psi_{\lambda}^*(x_{\nu}) \Psi_{\lambda}(x_{\nu'}). \quad (2.30)$$

Notemos que la matriz $R(E)$ de (2.28) es la generalización para dos canales de la derivada logarítmica para el caso de un canal. A continuación y para referencia futura, vamos a demostrar que las sumas de las series $R_{\nu\nu'}(E)$, dadas en la ecuación (2.29), se pueden hacer de forma exacta para una barrera(+)/pozo(-) de potencial constante $V(x) = \pm V_0$. En este caso, los eigenestados (ver ecuación (C.6) del Apéndice C) y eigenvalores de reacción están dados, respectivamente, como

$$\Psi_{\lambda}(x) = \begin{cases} 1/\sqrt{d}, & \lambda = 0, \\ \sqrt{\frac{2}{d}} \cos(k_{\lambda}(x - x_D)) & \lambda = 1, 2, \dots, \end{cases} \quad (2.31)$$

y

$$E_{\lambda} = \frac{\hbar^2}{2\mu} k_{\lambda}^2 \pm V_0; \quad k_{\lambda} = \frac{\lambda\pi}{d}, \quad \lambda = 0, 1, 2, \dots, \quad (2.32)$$

con $d = x_D - x_I$. Usando (2.31) obtenemos (2.30) como (con $\frac{\hbar^2}{2\mu} = 1$): $\gamma_0^{II} = \gamma_0^{DD} = \gamma_0^{ID} = \gamma_0^{DI} = \frac{1}{d}$, $\gamma_\lambda^{II} = \gamma_\lambda^{DD} = \frac{2}{d}$, $\gamma_\lambda^{ID} = \gamma_\lambda^{DI} = \frac{2(-1)^\lambda}{d}$. Por lo tanto, los elementos de (2.29) toman la forma siguiente

$$R_{DD}(E) = R_{II}(E) = \frac{(1/d)}{\pm V_0 - E} + \frac{2}{d} \sum_{\lambda=1}^{\infty} \frac{1}{\frac{(\lambda\pi)^2}{d^2} \pm V_0 - E}, \quad (2.33a)$$

$$R_{ID}(E) = R_{DI}(E) = \frac{(1/d)}{\pm V_0 - E} + \frac{2}{d} \sum_{\lambda=1}^{\infty} \frac{(-1)^\lambda}{\frac{(\lambda\pi)^2}{d^2} \pm V_0 - E}. \quad (2.33b)$$

Factorizando $(\pi/d)^2$ en (2.33) y definiendo $\hat{q}^2 = \frac{d^2}{\pi^2}(E \mp V_0)$, obtenemos:

$$R_{DD}(E) = R_{II}(E) = -\frac{d}{\pi\hat{q}} \left(\frac{1}{\pi\hat{q}} + \frac{2\hat{q}}{\pi} \sum_{\lambda=1}^{\infty} \frac{1}{\hat{q}^2 - \lambda^2} \right), \quad (2.34a)$$

$$R_{ID}(E) = R_{DI}(E) = -\frac{d}{\pi\hat{q}} \left(\frac{1}{\pi\hat{q}} + \frac{2\hat{q}}{\pi} \sum_{\lambda=1}^{\infty} \frac{(-1)^\lambda}{\hat{q}^2 - \lambda^2} \right), \quad (2.34b)$$

los términos que se encuentran dentro de los paréntesis, son las series correspondientes a las funciones trigonométricas $\cot(\pi\hat{q})$ y $\csc(\pi\hat{q})$, respectivamente [46]. Por consiguiente,

$$R_{DD}(E) = R_{II}(E) = -d \frac{\cot(\pi\hat{q})}{\pi\hat{q}}, \quad (2.35a)$$

$$R_{ID}(E) = R_{DI}(E) = -d \frac{\csc(\pi\hat{q})}{\pi\hat{q}}. \quad (2.35b)$$

Éste es un resultado muy útil y lo explotaremos más adelante (ver la Sec. 6.9).

2.2.3. Sistema cuasi-unidimensional

En esta Sección haremos el desarrollo para obtener la Matriz de Reacción para una partícula sin espín dispersada en una guía de ondas cuasi-unidimensional [5], ver Fig. 2.3. La función de onda obedece la ecuación de Schrödinger

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} (\partial_x^2 + \partial_y^2) + V(x, y) \right] \psi(E; x, y) = E\psi(E; x, y). \quad (2.36)$$

La función de onda $\psi(E; x, y)$ está sujeta a las CF de Dirichlet en las paredes de la cavidad $\psi(E; |x, y \in C_p\}) = 0$, donde C_p denota las fronteras impenetrables de la cavidad.

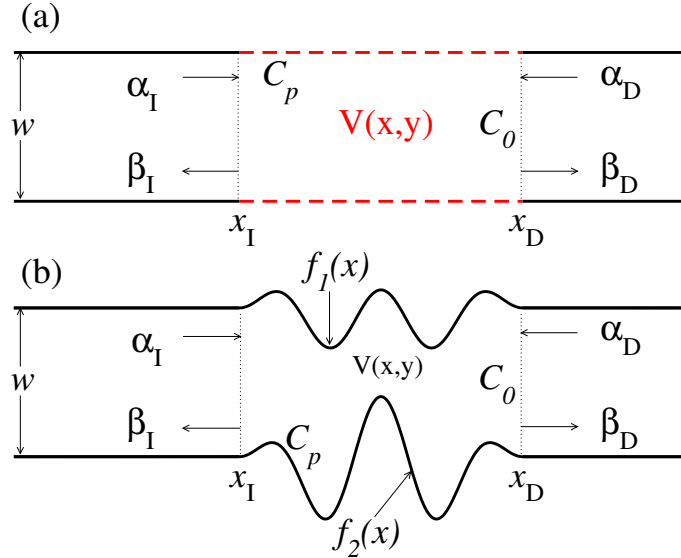


Figura 2.3: (a) Guía de ondas plana que contiene un potencial real $V(x,y)$ de ancho $L = x_D - x_I$. (b) Guía de ondas con una cavidad con paredes superior e inferior no planas descritas por $f_1(x)$ y $f_2(x)$. Por simplicidad, supondremos que ambas terminales tienen el mismo ancho W . C_p denota la frontera con *paredes duras* mientras que C_0 a las fronteras de reacción con *paredes suaves* (interfases). Ahora, α y β denotan los vectores de las ondas entrantes y salientes, respectivamente.

El sistema cuasi-unidimensional consiste de una cavidad conectada a dos terminales, por el lado izquierdo y el derecho, donde la frontera $C = C_p \cup C_0$ puede ser plana como en la Fig. 2.3(a) o definida por perfiles como en la Fig. 2.3(b). En este caso último y para $V(x,y) = 0$, que trataremos en la Sec. 7.2, se hace una transformación de coordenadas que nos permite tratar a la cavidad como una con paredes planas y cuyos efectos de frontera conllevan a la aparición de un potencial efectivo. En ambos tipos de guías de ondas, las soluciones a la ecuación de Schrödinger de la función de onda en la terminal izquierda y derecha son, respectivamente

$$\psi_I^m(E; x, y) = \frac{1}{\sqrt{k_m^I}} (\alpha_I^m e^{ik_m^I x} - \beta_I^m e^{-ik_m^I x}) \sqrt{\frac{2}{W_I}} \sin\left(\frac{m\pi}{W_I} y\right) = \phi_I^m(E, x) \chi_m(y) \quad (2.37a)$$

$$\psi_D^m(E; x, y) = \frac{1}{\sqrt{k_m^D}} (\alpha_D^m e^{-ik_m^D x} - \beta_D^m e^{ik_m^D x}) \sqrt{\frac{2}{W_D}} \sin\left(\frac{m\pi}{W_D} y\right) = \phi_D^m(E, x) \chi_m(y) \quad (2.37b)$$

donde $\phi_{I,D}^m(E, x)$ es la componente longitudinal de la función de onda, y

$$\chi_m(y) = \sqrt{\frac{2}{W}} \sin\left(\frac{m\pi y}{W}\right), \quad (2.38)$$

es la componente transversal.

Aquí por simplicidad utilizaremos W como el ancho de ambas terminales y por lo tanto $k_m \equiv k_m^I = k_m^D$.

La función de onda en la región asintótica (las terminales) se expande como

$$\psi_{I,D}(E; x, y) = \sum_{m=1}^M \psi_{I,D}^m(E; x, y) = \sum_{m=1}^M \phi_{I,D}^m(E, x) \chi_m(y), \quad (2.39)$$

con

$$E = \frac{\hbar^2}{2\mu} \left(k_m^2 + \frac{m^2 \pi^2}{W^2} \right) \Rightarrow k_m = \sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar^2} - \frac{m^2 \pi^2}{W^2}}, \quad (2.40)$$

siendo k_m y $m\pi/W$ las componentes de momento longitudinal y transversal, respectivamente. El número M de modos abiertos está determinado por el valor más grande de m tal que k_m es real. Este número M es el que determinará el tamaño de las sub-matrices de la matriz de dispersión.

Como ya se explicó en las secciones anteriores, la idea principal de la TMR es considerar a la cavidad primero y resolver la ecuación de Schrödinger imponiendo CF específicas en las paredes de la cavidad y en las interfaces dando lugar a un conjunto de soluciones con espectro discreto. La frontera total de la cavidad es la unión de dos fronteras, C_p y C_0 , donde C_p denota la frontera de la cavidad con pared dura (CFD) y C_0 la frontera de la cavidad con *paredes suaves* (CFN) (ver Fig. 2.3). Entonces, definimos el problema interno a través de la ecuación de Schrödinger

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} (\partial_x^2 + \partial_y^2) + V(x, y) \right] \Psi_\lambda(x, y) = E_\lambda \Psi_\lambda(x, y), \quad x_I \leq x \leq x_D, \quad (2.41)$$

donde los $\Psi_\lambda(x, y)$, por simplicidad, supondremos que cumplen con las condiciones de fronteras mixtas

$$\Psi_\lambda(x, y) = 0, \quad (x, y \in C_p) \quad (2.42a)$$

$$\frac{\partial \Psi_\lambda(x, y)}{\partial n} = 0, \quad (x, y \in C_0), \quad (2.42b)$$

y forman una base completa de estados ortonormales $(\Psi_\lambda(x, y), \Psi_{\lambda'}^*(x, y)) = \delta_{\lambda, \lambda'}$. Expandiendo la función de onda dispersada (en la región interna) en términos de los $\Psi_\lambda(x, y)$, obtenemos

$$\psi_{in}(E; x, y) \equiv \psi(E; x, y) = \sum_{\lambda} A_{\lambda}(E) \Psi_{\lambda}(x, y) \implies A_{\lambda}(E) = \int_{in} \psi(E; x, y) \Psi_{\lambda}^*(x, y) dx dy. \quad (2.43)$$

Para poder definir la matriz R , debemos primero determinar los coeficientes $A_{\lambda}(E)$. Para ello consideremos las siguientes dos ecuaciones

$$\Psi_{\lambda}^*(x, y) \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} (\partial_x^2 + \partial_y^2) + V(x, y) \right] \psi(E; x, y) = E \Psi_{\lambda}^*(x, y) \psi(E; x, y), \quad (2.44a)$$

$$\psi(E; x, y) \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} (\partial_x^2 + \partial_y^2) + V(x, y) \right] \Psi_{\lambda}^*(x, y) = E_{\lambda} \Psi_{\lambda}^*(x, y) \psi(E; x, y). \quad (2.44b)$$

Restando las ecuaciones (2.44a) y (2.44b), obtenemos

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\Psi_{\lambda}^*(x, y) \nabla^2 \psi(E; x, y) - \psi(E; x, y) \nabla^2 \Psi_{\lambda}^*(x, y) \right] = (E - E_{\lambda}) \Psi_{\lambda}^*(x, y) \psi(E; x, y) \quad (2.45)$$

donde hemos reescrito $\nabla^2 = \partial_x^2 + \partial_y^2$. Ahora integramos sobre el área A de la cavidad

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \int_A \left[\Psi_{\lambda}^*(x, y) \nabla^2 \psi(E; x, y) - \psi(E; x, y) \nabla^2 \Psi_{\lambda}^*(x, y) \right] dx dy = (E - E_{\lambda}) A_{\lambda}(E). \quad (2.46)$$

Considerando la segunda identidad de Green en forma diferencial [47]-(Cap. 7)

$$\begin{aligned} \Psi_{\lambda}^*(x, y) \nabla^2 \psi(E; x, y) - \psi(E; x, y) \nabla^2 \Psi_{\lambda}^*(x, y) = \\ \sum_{i=1}^2 \partial_i (\Psi_{\lambda}^*(x, y) \partial_i \psi(E; x, y) - \psi(E; x, y) \partial_i \Psi_{\lambda}^*(x, y)) \end{aligned} \quad (2.47)$$

con $\partial_{1,2} = \partial_{x,y}$ en la ec. (2.46), obtenemos

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \sum_{i=1}^2 \int_A \partial_i (\Psi_{\lambda}^*(x, y) \partial_i \psi(E; x, y) - \psi(E; x, y) \partial_i \Psi_{\lambda}^*(x, y)) dx dy = (E - E_{\lambda}) A_{\lambda}(E). \quad (2.48)$$

Veamos a que se reduce el lado izquierdo de (2.48). Para ello desarrollemos la suma como [con $\psi \equiv \psi(E; x, y)$] [5]:

$$\begin{aligned} & \int_{C_p} \int_{C_0} [\partial_x(\Psi_\lambda^* \partial_x \psi - \psi \partial_x \Psi_\lambda^*) + \partial_y(\Psi_\lambda^* \partial_x \psi - \psi \partial_x \Psi_\lambda^*)] dx dy \\ = & \int_{C_p} [\Psi_\lambda^* \partial_x \psi - \psi \partial_x \Psi_\lambda^*]_{C_0} dy + \int_{C_0} [\Psi_\lambda^* \partial_x \psi - \psi \partial_x \Psi_\lambda^*]_{C_p} dx \end{aligned} \quad (2.49a)$$

$$= \int_{C_p} [\Psi_\lambda^* \partial_x \psi]_{C_0} dy = \int_0^W [\Psi_\lambda^* \partial_x \psi]_{x_I}^{x_D} dy. \quad (2.49b)$$

Para llegar al resultado dado en (2.49b) hemos aplicado las condiciones de frontera dadas en (2.42). Ahora, sustituyendo (2.49b) en (2.48) obtenemos

$$A_\lambda(E) = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{E - E_\lambda} \int_0^W (\Psi_\lambda^*(x_D, y) \partial_x \psi(E; x_D, y) - \Psi_\lambda^*(x_I, y) \partial_x \psi(E; x_I, y)) dy \quad (2.50a)$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{E - E_\lambda} \sum_{s=1}^2 (-1)^s \int_0^W \Psi_\lambda^*(x_s, y) \left(\frac{\partial \psi(E; x, y)}{\partial x} \right)_{x_s} dy, \quad (2.50b)$$

donde $x_{s=1[2]} = x_{I[D]}$. Sustituyendo (2.50b) en la ecuación (2.43) obtenemos la función de onda interna para toda energía como

$$\psi(E; x, y) = \frac{\hbar^2}{2\mu} \sum_\lambda \frac{\Psi_\lambda(x, y)}{E_\lambda - E} \sum_{s=1}^2 (-1)^s \int_0^W \Psi_\lambda^*(x_s, y) \left(\frac{\partial \psi(E; x, y)}{\partial x} \right)_{x_s} dy. \quad (2.51)$$

Usando la ecuación (2.39) podemos reescribir la integral que aparece en (2.51) como

$$\begin{aligned} \sqrt{\frac{\hbar^2}{2\mu}} \int_0^W \Psi_\lambda^*(x_s, y) \frac{\partial \psi(E; x_s, y)}{\partial x} dy &= \sqrt{\frac{\hbar^2}{2\mu}} \sum_m \int_0^W \Psi_\lambda^*(x_s, y) \partial_x \phi_s^m(E; x_s) \chi_m(y) dy \\ &= \sum_m \gamma_{\lambda m}^{*(s)} \partial_x \phi_s^m(E; x_s), \end{aligned} \quad (2.52)$$

donde

$$\gamma_{\lambda m}^{*(s)} \equiv \sqrt{\frac{\hbar^2}{2\mu}} \int_0^W \Psi_\lambda^*(x_s, y) \chi_m(y) dy, \quad (2.53)$$

es la amplitud reducida para el nivel λ en el canal m . Substituyendo (2.52) en (2.51), obtenemos

$$\psi(E; x, y) = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2\mu}} \sum_{\lambda} \frac{1}{E_{\lambda} - E} \sum_{s=1}^2 (-1)^s \sum_m \gamma_{\lambda m}^{*(s)} \partial_x \phi_s^m(E; x_s) \Psi_{\lambda}(x, y). \quad (2.54)$$

Substituimos la expansión (2.39) en (2.54) evaluada en $x = x_l$ para obtener

$$\sum_n \phi_l^n(E; x_l) \chi_n(y) = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2\mu}} \sum_{\lambda} \frac{1}{E_{\lambda} - E} \sum_{s=1}^2 (-1)^s \sum_m \gamma_{\lambda m}^{*(s)} \partial_x \phi_s^m(E; x_s) \Psi_{\lambda}(x_l, y). \quad (2.55)$$

Multiplicando por ambos lados a la ecuación (2.55) por $\chi_p(y)$ e integrando en y obtenemos

$$\begin{aligned} \sum_n \phi_l^n(E; x_l) \int_0^W \chi_n(y) \chi_p(y) dy &= \sum_{\lambda, m} \sum_{s=1}^2 \frac{(-1)^s \gamma_{\lambda m}^{*(s)} \partial_x \phi_s^m(E; x_s)}{E_{\lambda} - E} \sqrt{\frac{\hbar^2}{2\mu}} \int_0^W \Psi_{\lambda}(x_l, y) \chi_p(y) dy, \\ \phi_l^p(E; x_l) &= \sum_{s=1}^2 (-1)^s \sum_m \sum_{\lambda} \frac{\gamma_{\lambda m}^{*(s)} \gamma_{\lambda p}^{(l)}}{E_{\lambda} - E} \partial_x \phi_s^m(E; x_s). \end{aligned} \quad (2.56)$$

Para llegar a (2.56) hemos usado la relación de ortogonalidad para $\chi_n(y)$ y la ecuación (2.53) en el lado izquierdo y derecho de la igualdad, respectivamente. Por consiguiente, la ecuación (2.56) la podemos escribir como

$$\phi_l^p(E; x_l) = \sum_m \sum_{s=1}^{s=2} (-1)^s R_{pm}^{(l,s)} \partial_x \phi_s^m(E; x_s), \quad (2.57)$$

donde hemos definido

$$R_{pm}^{(l,s)}(E) = \sum_{\lambda} \frac{\gamma_{\lambda p}^{(l)} \gamma_{\lambda m}^{*(s)}}{E_{\lambda} - E}, \quad m, p \geq 1, \quad (2.58)$$

como los elementos de la matriz de reacción (s, l denotan las fronteras izquierda y derecha y p, m a los canales en las terminales). Cabe mencionar que todas las ecuaciones que aquí hemos deducido (para M canales) ya fueron obtenidas de manera diferente en [26] y [5]. Nosotros aquí hemos optado en exigir explícitamente la continuidad de las funciones de onda en las fronteras de reacción mientras que, por ejemplo, en [26] introducen *operadores singulares* para acoplar a las funciones de onda en las fronteras de reacción y en [5] se deduce la matriz R para un sistema con simetría radial al igual que en [36].

2.3. La Matriz de Dispersión en términos de la Matriz de Reacción

La matriz de dispersión $S(E)$ [5, 23] es una herramienta fundamental en fenómenos de dispersión, esto debido a que, además de proporcionarnos *toda* la información posible en fenómenos de dispersión, es una cantidad que se puede medir experimentalmente. Matemáticamente, la matriz $S(E)$ se escribe como un operador que relaciona ondas que entran con ondas que salen en la región de interacción. La matriz de dispersión conecta el estado asintótico de incidencia con el asintótico dispersado:

$$\beta = S(E)\alpha, \quad (2.59)$$

donde α y β son vectores cuyos elementos son los coeficientes de la onda entrante y saliente, respectivamente (ver Fig. 2.3). Explícitamente, la matriz $S(E)$ junto con las ondas entrantes y salientes se pueden escribir de la siguiente forma

$$S(E) = \begin{pmatrix} r & t' \\ t & r' \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} \beta_D \\ \beta_I \end{pmatrix}, \quad \alpha = \begin{pmatrix} \alpha_D \\ \alpha_I \end{pmatrix}. \quad (2.60)$$

Los elementos de $S(E)$ son los coeficientes de transmisión (t y t') y reflexión (r y r'), que son matrices de tamaño $M \times M$, donde M denota el modo permitido más alto. Estos coeficientes están definidos como

$$r_{mn}(E) = \frac{(\beta_D)_n}{(\alpha_D)_m}, \quad r'_{mn}(E) = \frac{(\beta_I)_n}{(\alpha_I)_m}, \quad (2.61a)$$

$$t_{mn}(E) = \frac{(\beta_I)_n}{(\alpha_D)_m}, \quad t'_{mn}(E) = \frac{(\beta_D)_n}{(\alpha_I)_m}. \quad (2.61b)$$

Para una guía de ondas con dos terminales, $(\alpha_I)_m$ [$(\beta_D)_m$] denota la amplitud de la onda plana que viaja de izquierda a derecha en la terminal izquierda [derecha] que corresponde al m -ésimo modo transversal. Del mismo modo, $(\beta_I)_m$ [$(\alpha_D)_m$] es la amplitud de la onda plana que viaja de derecha a izquierda en la terminal izquierda [derecha]. Por lo tanto, $t(t')$ es la amplitud de probabilidad de transmisión de derecha a izquierda (izquierda a derecha). Similarmente, $r(r')$ es la amplitud de probabilidad de reflexión en el lado derecho (izquierdo) de la cavidad. C.f. Fig. 2.3

Cuando el sistema dispersivo conserva corriente, entonces la matriz de dispersión es unitaria ($S(E)S^\dagger(E) = S^\dagger(E)S(E) = 1$). Si además, el potencial dispersivo es hermítico, entonces, el sistema tiene la pro-

riedad de ser invariante bajo simetría inverso-temporal y consecuentemente, la matriz $S(E)$ es simétrica ($S(E) = S(E)^T$), C.f Apéndice G.

La condición de la unitariedad de $S(E)$ implica que sus eigenvalores son distribuidos sobre un círculo de radio uno, por lo tanto, éstas pueden ser representadas como $e^{2i\xi_j}$, con ξ_j real, $j = 1, 2$ [48–50]. Para el caso particular de un sistema uni-dimensional (dos canales), la fase de la matriz $S(E)$ se define convencionalmente como $\det S(E) = e^{2i\theta}$, con θ real y cumple con: $\theta + \frac{\pi}{2} = \xi_+ + \xi_-$ (ver Apéndice G).

En las siguientes secciones, encontraremos $S(E)$ en términos de la matriz $R(E)$ para $M = 1, 2, \dots$

2.3.1. $S(E)$ en una dimensión para un canal

La función de dispersión $S(E)$ la obtenemos de (2.15). En este caso sustituimos la expresión correspondiente a la derivada de la función de onda asintótica (2.3) evaluada en $x = x_2$:

$$\frac{\partial_x \psi(E; x_2)}{\psi(E; x_2)} = \frac{ik(-e^{-ikx_2} + Se^{ikx_2})}{e^{-ikx_2} + Se^{ikx_2}} = \frac{1 + BR(E; B)}{R(E; B)}. \quad (2.62)$$

Despejando $S(E)$ obtenemos

$$S(E) = -e^{-2ikx_2} \frac{R^{-1}(E; B) + B + ik}{R^{-1}(E; B) + B - ik} = -e^{-2ikx_2} \frac{1 + ikR(E)}{1 - ikR(E)}. \quad (2.63)$$

Para llegar a la segunda igualdad en (2.63) hemos usado (2.17). La ecuación (2.63) muestra claramente que los polos de la función $S(E)$ están determinados por las soluciones de la ecuación $R^{-1}(E; B) + B - ik = 1 - ikR(E) = 0$.

Dado que la función $R(E; B)$ es una función real es fácil confirmar que $S(E)$ es unitaria ($S(E)S^*(E) = 1$) y por lo tanto, la podemos escribir en términos de su fase, como $S = e^{2i\theta}$ [5, 36, 40]. Para el caso particular de $B = 0$, encontramos que la fase θ está relacionada con la función $R(E)$ como

$$\theta = -kx_2 - \frac{\pi}{2} + \arctan(kR(E)). \quad (2.64)$$

Despejando $kR(E)$ de (2.64), tenemos

$$\tan\left(\theta + kx_2 + \frac{\pi}{2}\right) = kR(E). \quad (2.65)$$

De esta última ecuación podemos ver que los polos de la función $R(E)$ ocurren a aquellas fases discretas $f_n \equiv \theta_n + k_n x_2 + \frac{\pi}{2} = (n - 1/2)\pi$, con $n = 1, 2, \dots$. Por otro lado, sabemos que los polos de $R(E)$ ocurren cuando la energía coincide con los eigenvalores de reacción E_λ (ver la ecuación (2.16)).

La ecuación (2.65) es muy relevante ya que nos permite conocer propiedades del sistema interno (las energías del hamiltoniano interno), a partir de una cantidad que se puede determinar externamente, la fase θ , ya sea numéricamente [ver (2.67)] o experimentalmente [51, 52]. Experimentalmente se barre la fase f_n en un rango de energía para encontrar las singulares de la tangente de f_n . Los valores donde diverge corresponden a las energías internas E_λ .

El conocimiento de los niveles energéticos de reacción sirve para caracterizar parcialmente el potencial que produce la dispersión. Similarmente, las anchuras reducidas γ_λ^2 se pueden determinar a partir del conocimiento de la función de onda, numérica o experimentalmente [10], i.e., una vez conocida la función de onda experimentalmente (ψ_{exp}), se puede usar el resultado siguiente [ver ecuación (4.12) de la Sec. 4.1]:

$$\psi(E \sim E_\lambda; x_2) \sim A_\lambda(E \sim E_\lambda)\Psi_\lambda(x_2) \Rightarrow \Psi_\lambda(x_2) \sim \psi(E \sim E_\lambda; x_2)/A_\lambda(E \sim E_\lambda), \quad (2.66)$$

con lo cual, los eigenestados de reacción, obtenidos de datos experimentales o numéricos, estarán dados como $\Psi_\lambda^{exp}(x_2) \sim \psi_{exp}(E \sim E_\lambda; x_2)/A_\lambda(E \sim E_\lambda)$ y por consiguiente los anchos reducidos serán: $(\gamma_\lambda^{exp})^2 = \frac{\hbar^2}{2\mu} |\Psi_\lambda^{exp}(x_2)|^2$. Así, una vez conocida E_λ^{exp} y γ_λ^{exp} podremos obtener fenomenológicamente una función de reacción [36, 38] y en consecuencia formar una función de dispersión con datos experimentales. Éste sería un procedimiento para conseguir la función de reacción fenomenológica.

Nosotros no hacemos la parte experimental pero sí podemos calcular la fase θ sin conocer a priori la función $R(E)$. Es decir, si usáramos, por ejemplo, el método de la matriz de transferencia, podemos determinar las funciones de onda en las fronteras. El cálculo inverso es obtener estos datos a partir de los datos numéricos de la función de onda en las fronteras de reacción. Luego, para el caso de un canal, la función $S_{exp}(E)$ la obtenemos a partir de^A

$$S_{exp}(E) = e^{2i\theta_{exp}} = e^{-ikx_2} \left(\Psi_{out}(x_2) - \frac{i\partial_x \Psi_{out}(x_2)}{k} \right), \quad (2.67)$$

^AExigiendo continuidad de la función de onda en la frontera de reacción ($x = x_2$):

$$\psi_{out}(E; x) = e^{-ikx_2} + S(E)e^{ikx_2}$$

$$\partial_x \psi_{out}(E; x_2) = -ik(e^{-ikx_2} - S(E)e^{ikx_2}),$$

y resolviendo para $S(E) \equiv S_{exp}(E)$, obtenemos la ec. (2.67).

donde $\Psi_{out}(x)$ denota la función de onda asintótica.

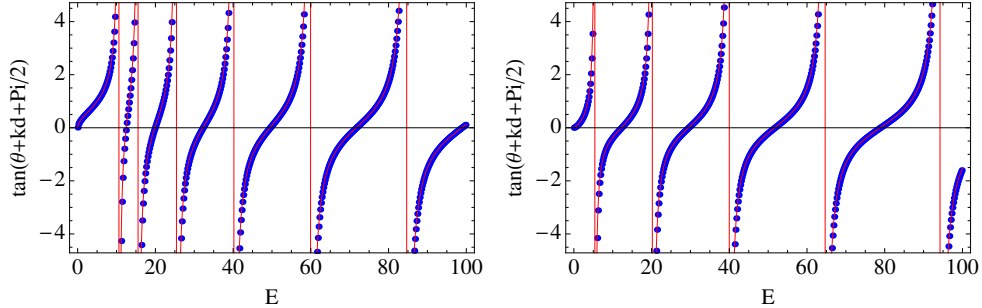


Figura 2.4: Gráfica de la ecuación (2.65) para (Izq.) [Der.] una barrera [pozo] con $(V_0, x_2) = (10, 2) [-10, 2]$. Aquí, los símbolos (\bullet) son los que obtenemos numéricamente a partir de (2.67) y la línea roja denota la gráfica del término $kR(E)$ de (2.65) con $N = 600$.

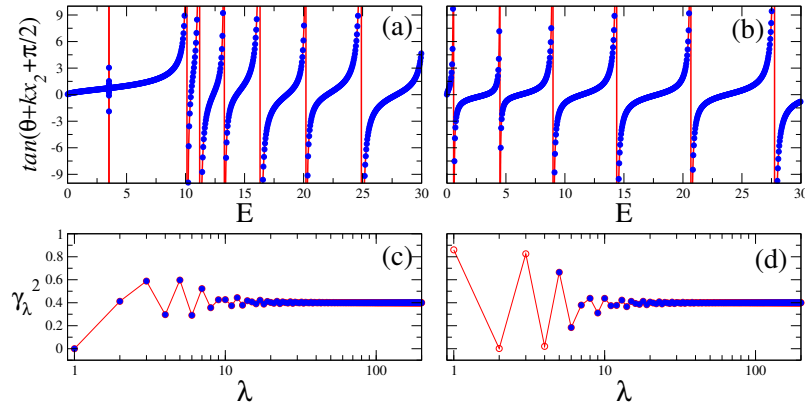


Figura 2.5: Gráfica de la ecuación (2.65) y de las anchuras reducidas. En (a)-(c)[(b)-(d)] los resultados corresponden a una doble barrera[pozo] de potencial separadas una distancia $l = 1$, anchos $d = 2$ y $V_0 = 10[-10]$. Aquí $R(E)$ y γ_λ^2 los obtenemos usando la TMR ($N = 600$ y línea roja) mientras $\tan(\theta + kx_2 + \pi/2)$ y $\gamma_\lambda^2 (exp.)$ se obtienen calculando θ de la ec. (2.67) y (2.66), respectivamente, usando el MMT (símbolos (\bullet)).

En la Fig. 2.4 mostramos los resultados para una barrera/pozo de potencial constante con $V_0 = \pm 10$ y $d = 2$ [(+) Fig. 2.4-Izq. y (-) Fig. 2.4-Der.]. Los símbolos (\bullet) son los que obtenemos numéricamente a partir de (2.67) y la línea roja denota la gráfica del término $kR(E)$ (ver ecuación (2.65) con $N = 600$). Ya que la dispersión ocurre sólo para valores de energía mayores que cero, este cálculo indirecto no nos permite conocer las energías de reacción E_λ de estados acotados. El cálculo de las anchuras reducidas para estos

mismos parámetros no los presentamos ya que todas son constantes iguales a $2/x_2$ y concuerdan con los obtenidos (de forma indirecta) usando (2.67). De igual manera, en la Fig. 2.5 se muestran los resultados para una doble barrera/pozo de potencial separadas una distancia $l = 1$ y anchos $d = 2$ para $V_0 = \pm 10$.

En el caso de dos canales (ver la siguiente sección), obtenemos una ecuación similar a (2.65), dada como

$$\tan\left(\theta^{(t)} + kd + \frac{\pi}{2}\right) = \frac{kTr(R)}{1 - k^2 \det R} \equiv \frac{f(E)}{g(E)}, \quad (2.68)$$

donde $\theta^{(t)}$ es la fase del coeficiente de transmisión, d el ancho del potencial, Tr denota la operación traza, $\det R$ es el determinante de la matriz de reacción, $f(E) \equiv kTr(R)$ y $g(E) \equiv 1 - k^2 \det R$. De (2.68) vemos que los polos de $f(E)/g(E)$ ocurren cuando $\theta_n^{(t)} + k_n d + \frac{\pi}{2} = (n - 1/2)\pi$, con $n = 1, 2, \dots$. A diferencia al caso de un canal, los polos de $f(E)/g(E)$ en general no coinciden con los polos de $R(E)$. Los polos de $f(E)$ y $R(E)$ coinciden únicamente cuando $g(E) \neq (0, \infty)$ para toda energía. Esto es porque si bien las singularidades de $f(E)$ corresponden a los polos de R , también pueden existir ceros de $g(E)$, que generalmente no coinciden con los polos de R . Hemos notado que $g(E)$ tiene ceros cuando hay tunelamiento. Cuando no existen ceros de $g(E)$ en un rango de energías, la determinación de los E_λ procede tal como en el caso de un canal. Queda para un trabajo futuro determinar rigurosamente las condiciones bajo las cuales $g(E)$ es cero, o bien, encontrar algún *filtro* que elimine singularidades de (2.68) que no correspondan a las singularidades de R .

Para mostrar el procedimiento inverso usaremos el pozo de potencial modulado dado por $V(x) = V_0 + \epsilon \cos(13\pi/d)$ con $V_0 = -10$ y $d = 6$, los cuales están dados en la Fig. 2.6 para $\epsilon = 0.25$ y $\epsilon = 1.5$. La fase $\theta^{(t)}$ como función de la energía la obtenemos usando el método de la matriz de transferencia (cuyos valores juegan el papel de nuestros datos experimentales) para posteriormente sustituirlas en (2.68). Por otro lado, para calcular los anchos reducidos hemos usado la misma ecuación dada en (2.66) pero con $A_\lambda(E_\lambda)$ dado en (4.19). Nuevamente, este cálculo inverso no nos permite conocer las energías de reacción E_λ de estados acotados es por ello que tampoco hemos podido calcular todos los valores de los $\gamma_\lambda^{DD} = \gamma_\lambda^{II}$ y de los $\gamma_\lambda^{DI} = \gamma_\lambda^{ID} = (-)^\lambda \gamma_\lambda^{DD}$.

Hasta aquí hemos mostrado como obtener las anchuras, las energías de reacción y la función R fenomenológica a través del conocimiento de la fase θ de la matriz de dispersión obtenida, ya sea de datos experimentales o numéricos (indirectos). La importancia de esto es que con los datos experimentales podemos deducir de forma parcial las propiedades del potencial que produce la dispersión. Es importante destacar que

este método de cálculo indirecto nos permite obtener las energías, anchos reducidos y la matriz de Reacción sólo para procesos de dispersión, es decir, para $E > 0$.

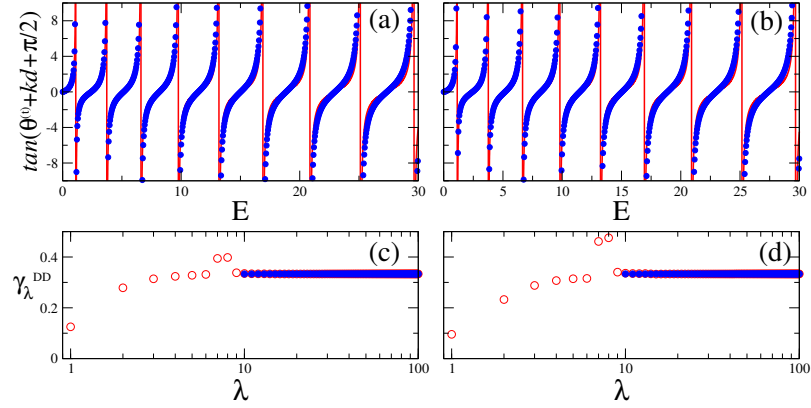


Figura 2.6: Gráfica de la ecuación (2.68) y anchuras reducidas para el pozo modulado. En (a)-(c) [(b)-(d)] se muestran los resultados para $\epsilon = 0.25$ [1.5]. Para este sistema, obtenemos (directo e indirecto) $f(E)$ y $\gamma_\lambda^{ID} = (-)^\lambda \gamma_\lambda^{DD}$ usando la TMR (línea y símbolos en rojo, $N = 600$) mientras que la fase $\theta^{(t)}$ en $\tan(\theta^{(t)} + kd + \pi/2)$ y γ_λ^2 (*exp.*) se obtiene usando el MMT (símbolos (•)).

2.3.2. $S(E)$ en una dimensión, dos canales

En esta sección vamos a obtener la forma de la matriz de dispersión $S(E)$ en términos de la matriz $R(B)$ para dos canales; el canal de la reflexión y el canal de la transmisión. Para ello, primero debemos de escribir Ψ y $\nabla_n \Psi$ en términos de las funciones de onda asintóticas para posteriormente sustituirlas en la ecuación (A.29). Entonces, exigiendo continuidad de la función de onda y de su derivada en la frontera de reacción [$\psi(E; x_i) = \psi_i(E; x_i)$ y $\partial_x \psi(E; x_i) = \partial_x \psi_i(E; x_i)$], obtenemos (ver los detalles en el Apéndice A.5)

$$\Psi = \begin{pmatrix} \psi(E; x_D) \\ \psi(E; x_I) \end{pmatrix} = S_0 \alpha + S_0^* \beta, \quad (2.69a)$$

$$\nabla_n \Psi = \begin{pmatrix} \partial_x \psi(E; x_D) \\ \partial_x \psi(E; x_I) \end{pmatrix} = -ik(S_0 \alpha - S_0^* \beta), \quad (2.69b)$$

$$S_0 = \begin{pmatrix} e^{-ikx_D} & 0 \\ 0 & e^{ikx_I} \end{pmatrix}. \quad (2.69c)$$

Sustituyendo (2.69) en (A.29) y después de acomodar términos, obtenemos

$$(\mathbf{1} + R(B)\sigma_3 B)(S_0\alpha + S_0^*\beta) = -ikR(B)(S_0\alpha - S_0^*\beta), \quad (2.70)$$

donde $\mathbf{1}$ es una matriz unitaria diagonal, $R(B)$ es la matriz de reacción, $\sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ es la matriz de Pauli, $B \equiv \begin{pmatrix} B_D & 0 \\ 0 & B_I \end{pmatrix}$, y $B_{D(I)}$ es el parámetro de frontera definida en la frontera de reacción derecha (izquierda). Resolviendo para β en la expresión (2.70), obtenemos

$$\beta = -S_0 \frac{1 + R(B)\sigma_3 B + ikR(B)}{1 + R(B)\sigma_3 B - ikR(B)} S_0\alpha. \quad (2.71)$$

Comparando (2.71) con la ecuación (2.59) obtenemos $S(E)$ como

$$S(E) = -S_0 \frac{1 + R(B)\sigma_3 B + ikR(B)}{1 + R(B)\sigma_3 B - ikR(B)} S_0 = -S_0 \frac{1 + ikR(0)}{1 - ikR(0)} S_0, \quad (2.72)$$

donde hemos usado (A.30) para llegar a la última igualdad de (2.72). $R(0)$ denota la matriz de reacción con CFN.

La unitariedad de $S(E)$, en la ecuación (2.72), es clara, ya que la matriz de reacción $R(B)$ es real y simétrica (hermítica). Por otro lado, la expresión (2.72) nos indica que no importa el valor de B que se escoja para el cálculo de $S(E)$, pues ésta siempre obtendrá el mismo valor que si elegimos CFN, es decir, la matriz de dispersión $S(E)$ es independiente del parámetro de frontera B .

Cabe recalcar que la deducción de la ecuación (2.72) se hizo siguiendo la formulación de la TMR en su forma más general y representa una generalización al caso de un canal. Una expresión similar a (2.72) se obtuvo en [38] para potenciales con simetría esférica y usando el operador de Bloch para acoplar las funciones de onda, dispersada y asintótica, en las fronteras de reacción. En el trabajo [38] se parte de un hamiltoniano interno no hermítico y se introduce el operador de Bloch para hacer el hamiltoniano hermítico y asegurar la continuidad de la derivada de la función de onda en la frontera de reacción. Además, al considerar potenciales con simetría esférica, en contraste, en nuestro desarrollo, el hamiltoniano interno es de inicio hermítico y no requiere del operador de Bloch.

2.3.3. $S(E)$ para M canales

Ahora usaremos la ecuación (2.57) para obtener la matriz de dispersión usando CFN en la matriz de reacción. Para ello, exigimos continuidad de las funciones de onda en las fronteras de reacción:

$$\phi_I^p(E; x_I) = \frac{1}{\sqrt{k_p}}(\alpha_I^p e^{ik_p x_I} - \beta_I^p e^{-ik_p x_I}), \quad (2.73a)$$

$$\phi_D^p(E; x_D) = \frac{1}{\sqrt{k_p}}(\alpha_D^p e^{-ik_p x_D} - \beta_D^p e^{ik_p x_D}), \quad (2.73b)$$

$$\partial_x \phi_I^m(E; x_I) = i\sqrt{k_m}(\alpha_I^m e^{ik_m x_I} + \beta_I^m e^{-ik_m x_I}), \quad (2.73c)$$

$$\partial_x \phi_D^m(E; x_D) = -i\sqrt{k_m}(\alpha_D^m e^{-ik_m x_D} + \beta_D^m e^{ik_m x_D}), \quad (2.73d)$$

con $1 \leq p, m \leq N$. Substituyendo las ecuaciones (2.73) en la ec. (2.57) se obtiene

$$\begin{aligned} \alpha_D^p e^{-ik_p x_D} - \beta_D^p e^{ik_p x_D} &= -i \sum_{m=1}^{M_D} \sqrt{k_p} R_{pm}^{DD} \sqrt{k_m} (\alpha_D^m e^{-ik_m x_D} + \beta_D^m e^{ik_m x_D}) \\ &\quad -i \sum_{m=1}^{M_I} \sqrt{k_p} R_{pm}^{DI} \sqrt{k_m} (\alpha_I^m e^{ik_m x_I} + \beta_I^m e^{-ik_m x_I}), \end{aligned} \quad (2.74a)$$

$$\begin{aligned} \alpha_I^p e^{ik_p x_I} - \beta_I^p e^{-ik_p x_I} &= -i \sum_{m=1}^{M_D} \sqrt{k_p} R_{pm}^{ID} \sqrt{k_m} (\alpha_D^m e^{-ik_m x_D} + \beta_D^m e^{ik_m x_D}) \\ &\quad -i \sum_{m=1}^{M_I} \sqrt{k_p} R_{pm}^{II} \sqrt{k_m} (\alpha_I^m e^{ik_m x_I} + \beta_I^m e^{-ik_m x_I}). \end{aligned} \quad (2.74b)$$

En notación matricial las ecuaciones (2.74) se reducen a

$$\tilde{\alpha} - \tilde{\beta} = i\sqrt{k}R\sqrt{k}(\tilde{\alpha} + \tilde{\beta}). \quad (2.75)$$

con

$$\begin{aligned} \tilde{\alpha} &= (\alpha_D^1 e^{-ik_1 x_D}, \dots, \alpha_D^{M_D} e^{-ik_{M_D} x_D}, \alpha_I^1 e^{ik_1 x_I}, \dots, \alpha_I^{M_I} e^{ik_{M_I} x_I})^\top, \\ \tilde{\beta} &= (\beta_D^1 e^{ik_1 x_D}, \dots, \beta_D^{M_D} e^{ik_{M_D} x_D}, \beta_I^1 e^{-ik_1 x_I}, \dots, \beta_I^{M_I} e^{-ik_{M_I} x_I})^\top, \\ k_{n'n} &= k_n \delta_{n'n}, \quad 1 \leq n', n < N, \end{aligned} \quad (2.76)$$

donde $M_{I(D)}$ denota el número de modos abiertos en la terminal izquierda (derecha).

Note que $\tilde{\beta} = S_0^\dagger \beta$ y $\tilde{\alpha} = S_0 \alpha$, donde S_0 ahora es una matriz diagonal, cuyos componentes se pueden escribir como

$$(S_0)_{nn'} = \begin{cases} e^{ik_n x_D}, & 1 \leq n \leq M_D, \\ e^{-ik_n x_I}, & M_D + 1 \leq n, \end{cases} \quad (2.77)$$

$\alpha = (\alpha_D^1, \dots, \alpha_D^{M_D}, \alpha_I^1, \dots, \alpha_I^{M_I})^\top$ y $\beta = (\beta_D^1, \dots, \beta_D^{M_D}, \beta_I^1, \dots, \beta_I^{M_I})^\top$. Ahora, de la ecuación (2.75) obtenemos

$$\beta = S_0 \frac{1 + i\sqrt{k}R\sqrt{k}}{1 - i\sqrt{k}R\sqrt{k}} S_0 \alpha. \quad (2.78)$$

Comparando las ecuaciones (2.59) y (2.78) obtenemos la matriz de dispersión

$$S(E) = S_0 \frac{1 - i\sqrt{k}R\sqrt{k}}{1 + i\sqrt{k}R\sqrt{k}} S_0, \quad (2.79)$$

con $S(E)$ una matriz de $M \times M$ y M el número total de modos abiertos^B.

La expresión (2.79) para la matriz de dispersión coincide con la de varios otros autores (ver, por ejemplo [5, 37, 53]). Sin embargo, nuestro procedimiento difiere en que aquí hemos optado por exigir continuidad de la función de onda y de su derivada explícitamente en la frontera de reacción x_s con las funciones de ondas asintóticas, mientras que, por ejemplo, en [5] expanden las funciones $\psi(E; x_{x_s}, y)$ y $\partial_x \psi(E; x_s, y)$ en términos de una base completa con CFD (que varían en la dirección transversal). Por otro lado, en [37] usan los operadores de proyección de Feshbach y los operadores singulares para *acoplar* las funciones de onda, dispersada y asintótica, en las fronteras de reacción y así llegar a la ec. (2.79). Por último, en [53] siguen el mismo procedimiento que en [37], pero ellos obtienen una expresión de $S(E)$ más general, pues incluyen los efectos de los modos cerrados y demuestran que la posición de los polos en el plano complejo de la energía se ve afectada por la inclusión de dichos modos cerrados.

^BRecordemos que en el caso del sistema cuasi-unidimensional hemos elegido las CFN en las interfaces (fronteras de reacción) de la guía de ondas y por lo tanto la matriz R que aparece en la ec. (2.79) ya no tiene dependencia con los parámetros de fronteras B_μ .

2.4. Continuidad de la función de onda dispersada

Si tuviéramos que derivar la ecuación (2.12) en la frontera de reacción ($x = x_2$) término por término, obtendríamos:

$$\left. \frac{\partial \psi(E; x)}{\partial x} \right|_{x_2} = \frac{\hbar^2}{2\mu} \sum_{\lambda=1}^{\infty} \frac{\Psi_{\lambda}^*(x_2) \partial_x \Psi_{\lambda}(x_2)}{E_{\lambda} - E} \partial_x \psi_{in}(E; x_2). \quad (2.80)$$

Debido a las CFN en $x = x_2$ ($B = 0$ en (2.7)), cada término en la serie infinita es cero y por tanto $\partial_x \psi(E; x_2) = 0$ para toda energía E . Sin embargo, $\partial_x \psi(E; x_2)$ en general no es cero en $x = x_2$. La razón de esta aparente contradicción es que la serie resultante, aunque es convergente en $0 \leq x < x_2$, no es uniformemente convergente en $x = x_2$ y por tanto no puede ser diferenciada término por término [5, 36].

Sin pérdida de generalidad, vamos a tomar la función de onda dispersada en el sistema de un canal. Reproduciendo los argumentos dados en [36], mostraremos entonces que^C $\partial_x \psi(E; x) \rightarrow \partial_x \psi(E; x_2)$ cuando $x \rightarrow x_2$. Para ello, comencemos integrando la ecuación (2.4) desde un punto arbitrario “ x ” a $x = x_2$, tal que

$$\frac{d\Psi_{\lambda}(x)}{dx} = \frac{2\mu}{\hbar^2} \int_x^{x_2} (E_{\lambda} - V(x)) \Psi_{\lambda}(x) dx. \quad (2.81)$$

Esta expresión nos permite tomar la derivada de $\Psi_{\lambda}(x)$ en un vecindario de $x < x_2$ y luego tomar el límite $x \rightarrow x_2$. Ahora, derivando por ambos lados (2.12) y dividiéndola por $\partial_x \psi(E; x_2)$, obtenemos

$$\frac{\partial_x \psi(E; x)}{\partial_x \psi(E; x_2)} = \frac{\hbar^2}{2\mu} \sum_{\lambda} \frac{\Psi_{\lambda}(x_2)}{E_{\lambda} - E} \frac{d\Psi_{\lambda}(x)}{dx}. \quad (2.82)$$

Sustituyendo la ecuación (2.81) en (2.82), obtenemos

$$\frac{\partial_x \psi_{in}(E; x)}{\partial_x \psi_{in}(E; x_2)} = \sum_{\lambda} \int_x^{x_2} \frac{(E_{\lambda} - V(x) - E + E) \Psi_{\lambda}(x_2) \Psi_{\lambda}(x)}{E_{\lambda} - E} dx, \quad (2.83)$$

después de acomodar términos llegamos a

$$\frac{\partial_x \psi_{in}(E; x)}{\partial_x \psi_{in}(E; x_2)} = \sum_{\lambda} \Psi_{\lambda}(x_2) \int_x^{x_2} \Psi_{\lambda}(x) dx + \sum_{\lambda} \frac{\Psi_{\lambda}(x_2)}{E_{\lambda} - E} \int_x^{x_2} (E - V(x)) \Psi_{\lambda}(x) dx. \quad (2.84)$$

La razón por la cual el segundo término de (2.84) no contribuye es porque $|E - V(x)| \leq K < \infty$, ya que

^CEn [36] indican que la demostración fue hecha por J. L. Jackson en 1950 en su tesis doctoral, New York University.

$V(x)$ se supone acotado. Por lo tanto, el integral tiende a cero cuando $x \rightarrow x_2$. Por otro lado, la primera suma en (2.84) es justamente la expansión de una función que es unitaria en el intervalo de x a x_2 y cero en otra región. Para ver esto último, consideremos la siguiente identidad [54, 55]

$$\sum_{\lambda}^{\infty} \Psi_{\lambda}(a)\Psi_{\lambda}(\xi) = \delta(a - \xi). \quad (2.85)$$

Sustituyendo (2.85) en la primera suma de la ec. (2.84) e identificando $a = x_2$ y $\xi = x$, obtenemos

$$\sum_{\lambda} \Psi_{\lambda}(x_2) \int_x^{x_2} \Psi_{\lambda}(x) dx = \int_x^{x_2} \delta(x_2 - x) dx = 1. \quad (2.86)$$

Usando esto último en (2.84) llegamos al resultado deseado:

$$\frac{\partial_x \psi(E; x \rightarrow x_2)}{\partial_x \psi(E; x_2)} \rightarrow 1 \quad (2.87)$$

Con esto se demuestra que la suma de derivadas converge aunque no de manera uniforme y por consiguiente, debemos de tener cuidado y no diferenciar la ec. (2.12) término por término en la frontera de reacción y de paso, hemos mostramos que el formalismo de la matriz R es consistente.

2.5. Ventajas teóricas de la TMR sobre otros métodos

La teoría de la matriz de reacción presenta ciertas ventajas teóricas respecto a otros métodos. Por ejemplo, la diferencia entre el formalismo de la matriz de reacción y el método del hamiltoniano efectivo [56–59], es que en el primero se trabaja en el plano real de la energía mientras que, en el segundo, en el plano complejo. Por otro lado, siempre es posible obtener el hamiltoniano efectivo en términos de los eigenvalores y eigenestados de reacción (ver el Capítulo 5). Otra de las ventajas teóricas sobre métodos puramente numéricos, como son los métodos del elemento finito [28] o matriz de transferencia [5, 27], es la de poder caracterizar el potencial dispersivo (de manera parcial) a través de la obtención de los niveles energéticos del hamiltoniano interno, así como también los anchos reducidos. Por otro lado, la matriz R se *construye* resolviendo la ecuación de Schrödinger en la región interna una sola vez. Es decir, el conocimiento de un número N de estados y energías de reacción (que se obtienen al diagonalizar el hamiltoniano hermítico interno) son suficientes para calcular las cantidades de dispersión en un amplio rango de energía (dependiendo de N y

de la precisión deseada), a diferencia de los puramente numéricos que requieren de resolver la ecuación de Schrödinger para cada energía.

Además, los parámetros en la matriz R , tales como las anchuras reducidas y los E_λ , para resonancias angostas (régimen de resonancias aisladas), tienen una interpretación física, es decir, los polos de la matriz R están cercanos a las energías reales de resonancias de dispersión (máximos locales de las cantidades de dispersión) y sus residuos (anchos reducidos) con las anchuras. A diferencia; por ejemplo, en el formalismo del hamiltoniano efectivo o de los operadores de proyección de Feshbach, en donde estos parámetros están representados en términos de los polos de las matriz de dispersión. Por otro lado, podemos aproximar las cantidades de dispersión, en el régimen de energías bajas, usando únicamente pocos términos de R .

Para terminar, como se discutió en la Sec. 2.3.1, del conocimiento de la fase de θ a través de datos, ya sean experimentales o numéricos, podremos obtener características del potencial que produce la dispersión, como son las energías de reacción y las anchuras. Este método indirecto, aunque sólo funciona para $E > 0$, no lo proporcionan los métodos puramente numéricos ni los métodos del hamiltoniano efectivo o el de los operadores de proyección de Feshbach. Por consiguiente, el MMR cobra relevancia para usarla en el estudio de sistemas dispersivos y abre una opción para tratar el problema de la dispersión inversa.

RESUMEN: En este capítulo hemos definido el concepto de canal. Hemos usado el formalismo de la teoría de la matriz de reacción para encontrar la matriz de dispersión en sistemas de uno y dos canales (unidimensional) y una guía de ondas rectangular cuasi-unidimensional para M canales. En el caso específico del sistema unidimensional de uno y dos canales, obtuvimos la matriz de reacción en términos de las condiciones de frontera homogéneas y mostramos que el valor de la matriz de Reacción depende del parámetro de frontera B , en cambio, el valor de la matriz de dispersión no depende de B . Por otro lado, mostramos que es posible conocer, por métodos indirectos, tanto las energías de reacción ($E > 0$) como las anchuras reducidas a partir del conocimiento de la fase θ en forma, ya sea, experimental o numérica.

Además, generalizamos el resultado conocido para el caso de un canal y para una barrera/pozo de potencial constante ($V(x) = \pm V_0$), mostrando que la suma infinita que define a los elementos de la matriz de reacción (para dos canales y $\pm V_0$) converge a las funciones trigonométricas $\cot(\pi\hat{q})$ y $\csc(\pi\hat{q})$ (ver (2.35)). Posteriormente, demostramos que la función de onda dispersada $\psi(E; x_2)$ converge de manera no uniforme en la frontera de reacción y por lo tanto, no es derivable término por término en tal punto.

También discutimos las ventajas teóricas de usar el formalismo de la TMR respecto a otros métodos, tanto puramente numéricos como teóricos.

Capítulo 3

Cantidades de Dispersión

En este Capítulo primeramente obtenemos las expresiones de ciertas Cantidades de Dispersión (CD) comunes en términos de la Matriz R para los sistemas unidimensionales de uno y dos canales. Estas cantidades de dispersión son los coeficientes $S_{ij}(E)$, el tiempo de demora $\tau(E)$ y la probabilidad de atrapamiento $P(E)$. Posteriormente demostramos que los polos de estas cantidades son los mismos que los polos de la matriz de dispersión. Consideramos algunos potenciales representativos para examinar las CD como funciones de la energía y discutimos las ventajas numéricas de usar la matriz R respecto de otros métodos.

3.1. Cantidades de dispersión en sistemas unidimensionales de un canal

Claramente, las matrices $R(E)$ y $S(E)$, en el caso de sistemas de un canal, se reducen a una función escalar. El único canal es el de la reflexión que siempre es total, independiente de la energía. Por lo tanto, las cantidades a calcular aquí son el tiempo de demora y la probabilidad de atrapamiento.

3.1.1. Tiempo de demora $\tau(E)$

El concepto del tiempo de demora $\tau(E)$ fue introducido por Eisenbud y Wigner [60] (conocido también como tiempo de demora de Wigner) en el sistema de un canal. Este se interpreta como el tiempo *típico*

gastado por una partícula dispersada en la región de interacción (o de reacción). En otras palabras, el tiempo de demora lo podemos entender de la siguiente manera: sea t_i el tiempo que *demora* una partícula (con masa μ) en cruzar la región de interacción cuando existe un potencial y sea t_0 el tiempo que *demora* en cruzar la misma región de interacción pero ahora sin ningún potencial. Entonces; la diferencia $\tau \equiv t_i - t_0$ es el tiempo de demora o de retraso. Este tiempo puede tener valores positivos o negativos. Un tiempo de retraso positivo nos indica que la partícula interactuante es *detenida* en la región de interacción. Un tiempo de demora negativo indica que la partícula interactuante es acelerada durante la interacción. Además, físicamente se espera que $t_i - t_0 \rightarrow 0$ cuando $E \rightarrow \infty$, esto debido a que la partícula/onda gradualmente dejará de sentir la presencia del potencial conforme aumente la energía, y por lo tanto no sufrirá ya ninguna demora en cruzar la región de interacción.

El tiempo de demora en términos de la función de dispersión y de su fase $\theta(E)$ está dado como [60, 61]

$$\tau(E) = -iS^* \frac{\partial S}{\partial E} = \hbar \frac{d\theta(E)}{dE}, \quad (3.1)$$

donde $\theta(E)$ está dada en la ec. (2.64). La expresión (3.1) indica que el tiempo de demora es proporcional a la rapidez con que cambia la fase de $S(E)$ con la energía. Por otro lado, para demostrar que los polos de $\tau(E)$ son los mismos que los de $S(E)$, conviene escribir $\tau(E)$ en términos de $R(E)$, usando la ecuación (2.64):

$$\tau(E) = -2 \left[\frac{\mu x_2}{\hbar k} - \frac{1}{1 + k^2 R^2} \left(\frac{\mu R(E)}{\hbar k} + \hbar k \frac{\partial R}{\partial E} \right) \right]. \quad (3.2)$$

El factor “2” que aparece en la ecuación (3.2) se debe a que la partícula cruza dos veces la misma región de reacción debido a la pared impenetrable.

Si nos fijamos en el denominador del segundo término de la ecuación (3.2), vemos que éste lo podemos reescribir como $1 + k^2 R^2 = (1 + ikR)(1 - ikR)$, es decir, esto muestra que los polos de $\tau(E)$ están determinados por las raíces de la ecuación $1 - ikR = 0$ ($z = \omega - i\Gamma$), que es la misma para determinar los polos de $S(E)$ (ver ecuación (2.63)). Las soluciones del término $1 + ikR = 0$ ($z^* = \omega + i\Gamma$) no son físicamente aceptables, esto es debido a que a estas energías, la función de onda dispersada viola el principio de causalidad [62], es decir, conllevan a que la función de onda no sea normalizable (ver Sec. 3.3).

3.1.2. Probabilidad de atrapamiento

Definimos la probabilidad de atrapamiento $P(E)$ en la región de reacción como

$$P(E) \equiv \int_{int} |\psi_{in}(x; E)|^2 dx. \quad (3.3)$$

Notemos que $P(E)$ es independiente de cualquier base; sin embargo, para demostrar que los polos de $P(E)$ son los mismo que los polos de $S(E)$, es conveniente escribirla en términos de los coeficientes de la expansión $A_\lambda(E)$ del estado $\psi_{in}(E; x)$:

$$\begin{aligned} P(E) &= \int_{int} \sum_{\lambda\lambda'} A_\lambda^*(E) \Psi_\lambda^*(x) A_{\lambda'}(E) \Psi_{\lambda'}(x) dx \\ &= \sum_{\lambda\lambda'} A_\lambda^*(E) A_{\lambda'}(E) \int_{int} \Psi_\lambda^*(x) \Psi_{\lambda'}(x) dx = \sum_{\lambda, \lambda'} |A_\lambda(E)|^2 \delta_{\lambda\lambda'} \\ &= \sum_{\lambda} |A_\lambda(E)|^2, \end{aligned} \quad (3.4)$$

donde las amplitudes $A_\lambda(E)$ están dadas por la ecuación (2.11b).

Ahora obtenemos la siguiente expresión

$$\partial_x \psi(E; x_2) = -ik(e^{-ikx_2} - S(E)e^{ikx_2}) = -e^{-ikx_2} \frac{2ik}{1 - ikR}, \quad (3.5)$$

que resulta de la continuidad de la función de onda en la frontera de reacción y de la expresión de $S(E)$ en términos de $R(E)$ [c.f. ecuación (2.63)]^A. La substitución de (3.5) en (2.11b) nos da:

$$A_\lambda(E) = \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{2ik\Psi_\lambda^*(x_2)e^{-ikx_2}}{(1 - ikR)(E - E_\lambda)}. \quad (3.6)$$

Notemos que $A_\lambda(E)$ es una función compleja cuyos polos ocurren cuando $1 - ikR = 0$, es decir, son los mismos polos que los de la función $S(E)$ (ver la ecuación (2.63)). Por otro lado, más adelante demostraremos (en la Sec. 4.1) que (3.6) no diverge cuando $E \rightarrow E_\lambda$, i.e., no tiene polos sobre el eje real.

^ALa ecuación (3.5) muestra que $\psi'(E; x_2)$ tiene los mismos polos que S .

Insertando (3.6) en la ecuación (3.4), obtenemos

$$P(E) = \left(\frac{\hbar^2}{2\mu}\right)^2 \sum_{\lambda=1}^N \frac{4|k\Psi_{\lambda}(x_2)|^2}{(1+(kR)^2)(E_{\lambda}-E)^2}. \quad (3.7)$$

La ecuación (3.7) muestra que $P(E)$ tiene los mismos polos que los de $S(E)$, ya que el término de su denominador se puede escribir como $1+k^2R^2 = (1+ikR)(1-ikR)$. Por lo tanto, las raíces de $1-ikR = 0$ nos dan sus polos. Por otro lado, las soluciones de $(1+ikR) = 0$ son los complejos conjugados de los polos ($z^* = \omega + i\Gamma$), que son físicamente inaceptables. Esto debido a que a esta energía (z^*) la función de onda no es normalizable y por lo tanto, viola el principio de causalidad [62] (ver Sec. 3.3).

3.2. Cantidades de dispersión en sistemas unidimensionales de dos canales

En esta sección, además del tiempo de demora y de la probabilidad de atrapamiento, obtendremos los coeficientes de la reflexión y de la transmisión en términos de los elementos de la Matriz de Reacción. El modulo al cuadrado del coeficiente de transmisión (Amplitud de transmisión) nos da la probabilidad de que una partícula/onda, para una energía dada, sea transmitida del canal de la reflexión al canal de la transmisión.

3.2.1. Coeficientes de reflexión y transmisión

En la Sección 2.3.2 obtuvimos la expresión para $S(E)$ en términos de $R(E)$:

$$S(E) = -w \frac{1+ikR(E)}{1-ikR(E)} w. \quad (3.8)$$

Luego entonces, para obtener explícitamente los elementos de (3.8) debemos primero obtener la inversa de la matriz $1-ikR(E)$ para después multiplicarla por las matrices $1+ikR(E)$ y w , para llegar a:

$$S(E) = \frac{1}{\Omega^-(E)} \begin{pmatrix} e^{-2ikx_D} (\Omega^+(E) - 2(1+ikR_{DD})) & -e^{-ikd} 2ikR_{DI} \\ -e^{-ikd} 2ikR_{ID} & e^{2ikx_I} (\Omega^+(E) - 2(1+ikR_{II})) \end{pmatrix}, \quad (3.9)$$

donde $\Omega^{\pm}(E) \equiv \det(1 \pm ikR(E))$ y $d = x_D - x_I$.

Comparando la ecuación (3.9) con (2.60) obtenemos los coeficientes de la reflexión y de la transmisión, respectivamente, como

$$r(E) = e^{-2ikx_D} \left[\frac{\Omega^+(E)}{\Omega^-(E)} - \frac{2(1 + ikR_{DD})}{\Omega^-(E)} \right], \quad (3.10a)$$

$$r'(E) = e^{2ikx_I} \left[\frac{\Omega^+(E)}{\Omega^-(E)} - \frac{2(1 + ikR_{II})}{\Omega^-(E)} \right], \quad (3.10b)$$

$$t(E) = -e^{-ikd} \frac{2ikR_{ID}}{\Omega^-(E)}, \quad (3.10c)$$

$$t'(E) = -e^{-ikd} \frac{2ikR_{DI}}{\Omega^-(E)}. \quad (3.10d)$$

De la expresión (3.9) notamos que los polos de la matriz $S(E)$ (por consiguiente, los coeficientes de la reflexión y transmisión) están determinados por las raíces complejas de la ecuación característica (más adelante describiremos los métodos que nos permitirán calcular los polos de $S(E)$):

$$\Omega^-(E) = \det(1 - ikR(E)) = 0. \quad (3.11)$$

Por otro lado, de (3.10) podemos observar la correspondencia entre los elementos de la matriz $R(E)$ y los de $S(E)$. Por ejemplo, recordemos que R_{DD} es el elemento de $R(E)$ definido en la frontera de reacción derecha, el cual, aparece explícitamente en la expresión del coeficiente $r(E)$, definido en el canal de la reflexión a la derecha. Similarmente, $r'(E)$ depende de R_{II} y $t(E)$ [$t'(E)$] depende de R_{ID} [R_{DI}]. Para obtener las amplitudes de transmisión y reflexión tomamos el absoluto al cuadrado de sus respectivos coeficientes: la amplitud de la transmisión se define como $T(E) \equiv |t(E)|^2$ y la amplitud de la reflexión es $\mathcal{R}(E) \equiv |r(E)|^2$. Hasta aquí hemos encontrado los coeficientes de la matriz de dispersión en términos de la matriz $R(E)$, en el siguiente apartado vamos a deducir el tiempo de demora en términos de la fase del coeficiente de transmisión.

3.2.2. Tiempo de demora, dos canales

La expresión unidimensional del tiempo de demora de Wigner en un canal fue generalizada por Felix T. Smith a un sistema de M canales, quien introdujo la matriz del *tiempo de demora* Q [61]:

$$Q = -i\hbar S^\dagger(E) \frac{\partial S(E)}{\partial E}, \quad (3.12)$$

donde $S(E)$ es una matriz de $M \times M$. Aquí $M = 2$. Los eigenvalores de Q ; τ_1 y τ_2 , son llamados *tiempos propios de demora*. El tiempo de demora $\tau(E)$ se define como el promedio de los eigenvalores de Q [63]:

$$\tau(E) = -\frac{i\hbar}{M} \text{tr} S^\dagger(E) \frac{d}{dE} S(E) = -\frac{i\hbar}{2} \frac{d}{dE} \log \det S(E). \quad (3.13)$$

Ahora bien, recordemos que en el sistema de un canal obtuvimos el tiempo de demora en términos de la fase de $S(E)$ (coeficiente de reflexión), debido a que era la única cantidad que se podía calcular. Ahora, tenemos dos canales; el de la transmisión y el de la reflexión. No obstante, es posible encontrar una relación entre la fase de la matriz de dispersión, definida convencionalmente como $\det S = \exp(2i\theta)$, y la fase del coeficiente de transmisión ($\theta^{(t)}$), la cual es [48, 49] (ver el Apéndice G)

$$\theta^{(t)} = \theta + \frac{\pi}{2}. \quad (3.14)$$

Usando la ecuación (3.14) podemos reescribir la fase de $S(E)$ como: $\det S = \exp(2i\theta) = \exp[i(2\theta^{(t)} - \pi)] \Rightarrow \log \det S = i(2\theta^{(t)} - \pi)$. Sustituyendo esto último en la ecuación (3.13) obtenemos:

$$\tau(E) = \hbar \frac{d\theta^{(t)}}{dE}. \quad (3.15)$$

Entonces, usaremos la fase del coeficiente de la transmisión para deducir $\tau(E)$. Para ello, primero escribiremos $t(E)$ en términos de su modulo y de su fase, como $t(E) = |t(E)|e^{i\theta^{(t)}}$ donde, $\theta^{(t)} = -kd + \delta$ y δ son cantidades reales que dependen de E . La fase δ la obtenemos después de separar la parte real e imaginaria de $t(E)$ dada en la ecuación (3.10c), como

$$\tan(\delta) = -\frac{\text{Re}[(\Omega^-(E))^*]}{\text{Im}[(\Omega^-(E))^*]} = \frac{\text{Re}[\Omega^+(E)]}{\text{Im}[\Omega^+(E)]} = \tan(\delta'), \quad (3.16)$$

donde δ' es debido al coeficiente^B $t'(E)$ de la ecuación (3.10d), y

$$\text{Re}[(\Omega^-(E))^*] = \text{Re}[\Omega^+(E)] = 1 - k^2 \det(R), \quad (3.17a)$$

$$\text{Im}[(\Omega^-(E))^*] = \text{Im}[\Omega^+(E)] = k \text{tr}(R). \quad (3.17b)$$

^BNuestro sistema es invariante bajo simetría inverso-temporal y por consecuencia $t(E) = t'(E)$.

Con estas deducciones podemos escribir $\theta^{(t)}$ como

$$\theta^{(t)} = -kd - \frac{\pi}{2} + \arctan\left(\frac{kTr(R)}{1 - k^2 \det R}\right). \quad (3.18)$$

Tomando la derivada a la ecuación (3.18) con respecto a la energía y después de sustituirla en (3.15), obtenemos el tiempo de demora como

$$\tau(E) = -\frac{\mu}{\hbar} \frac{d}{k} - \frac{\frac{\mu}{\hbar} k D_R T_R + \hbar k^3 [d_E(D_R) T_R - D_R d_E(T_R)] + \frac{\mu T_R}{\hbar k} + \hbar k d_E(T_R)}{(k T_R)^2 + (1 - k^2 D_R)^2}, \quad (3.19)$$

con $D_R \equiv \det(R)$, $T_R \equiv tr(R)$ y $d_E \equiv \frac{d}{dE}$ en (3.19).

Ahora, el denominador del segundo término que aparece a la derecha de (3.19) se puede reescribir como

$$\begin{aligned} (k T_R)^2 + (1 - k^2 D_R)^2 &= (1 - k^2 D_R + ik T_R)(1 - k^2 D_R - ik T_R) \\ &= \Omega^+(E) \Omega^-(E), \end{aligned} \quad (3.20)$$

es decir, los polos de τ los obtenemos resolviendo $\Omega^-(E) = 0$, los cuales coinciden con los polos de $S(E)$ (ver ecuación (3.9)). Como ya se discutió anteriormente, las soluciones del término $\Omega^+(E) = 0$ son físicamente no aceptables, debido a que conllevan a una función de onda no normalizable y en consecuencia, violarían el principio de causalidad.

3.2.3. Probabilidad de Atrapamiento

Sustituyendo la ecuación (2.25) en la definición (3.4) de $P(E)$ obtenemos

$$P(E) = \sum_{\lambda=1}^N |A_\lambda(E)| = \left(\frac{\hbar^2}{2\mu}\right)^2 \sum_{\lambda} \left| \frac{\Psi_\lambda^*(x_D) \psi'(E; x_D) - \Psi_\lambda^*(x_I) \psi'(E; x_I)}{E_\lambda - E} \right|^2. \quad (3.21)$$

Primero mostraremos que $P(E)$ también tiene los mismos polos que la matriz de dispersión. Para lograr esto, es suficiente con mostrar que los polos de $A_\lambda(E)$ son los mismos que los polos de $S(E)$. Es decir, necesitamos escribir $A_\lambda(E)$ en términos, ya sea, de $\Omega^-(E)$ o de la función de dispersión. Optamos por la segunda opción. Entonces, después de un poco de trabajo algebraico (hecho en el apéndice D), obtenemos

$A_\lambda(E)$ (en notación matricial) como

$$A_\lambda(E) = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{ik}{E_\lambda - E} \Psi_{DI} [w - w^* S] \alpha, \quad (3.22a)$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{2ik}{E_\lambda - E} \Psi_{DI} \frac{1}{1 - ikR} w \alpha. \quad (3.22b)$$

donde $\Psi_{DI} = (\Psi_\lambda^*(x_D) \quad \Psi_\lambda^*(x_I))$. La ecuación (3.22) muestra estrictamente que los únicos polos de $A_\lambda(E)$ son debidos al término $1/(1 - ikR)$, i.e., son los mismos que los de la matriz de dispersión $S(E)$ [ver ecuación (3.9)]. Esto debido a que para $E \rightarrow E_\lambda$, $A_\lambda(E_\lambda)$ no es singular, es decir, no tiene polos sobre el eje real (ver la Sec. 4.2). En consecuencia, de este resultado podemos afirmar que $P(E)$ tiene los mismos polos que los de la matriz de $S(E)$.

Ahora, suponiendo que $\alpha_D = 1$ y $\alpha_I = 0$ (incidencia por la derecha), la ecuación (3.22a) toma la forma siguiente (ver ecuación (D.9))

$$A_\lambda(E) = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{2ike^{-ikx_D}}{E_\lambda - E} \frac{\Psi_\lambda(x_D) - ik(\Psi_\lambda^*(x_D)R_{II} - \Psi_\lambda^*(x_I)R_{ID})}{\Omega^-(E)}. \quad (3.23)$$

Tomando el absoluto al cuadrado de (3.23), encontramos $P(E)$ como

$$P(E) = \sum_\lambda^N \left[\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{2k}{(E_\lambda - E)} \right]^2 \frac{(1 + k^2 R_{II}^2) |\Psi_\lambda(x_D)|^2 + k^2 (R_{ID}^2) |\Psi_\lambda(x_I)|^2 - 2R_{ID} R_{II} \Psi_\lambda(x_D) \Psi_\lambda(x_I)}{|\Omega^-(E)|^2}. \quad (3.24)$$

Hasta aquí hemos encontrado las expresiones de las CD en términos de la matriz $R(E)$ para uno y dos canales para potenciales arbitrarios. En la siguiente sección vamos a demostrar que los polos de $t(E)$, $\tau(E)$ y $P(E)$ son los mismos que los polos de $S(E)$.

3.3. Los polos de $t(E)$, $\tau(E)$ y $P(E)$ son los mismos que los polos de $S(E)$

La matriz de dispersión contiene no sólo toda la información sobre la dinámica de dispersión, sino también toda la información sobre el sistema. Para estudiar los polos de $S(E)$ se hace la continuación analítica al plano complejo de energías $z_n = \omega_n - i\Gamma_n$. Si están en el plano complejo de k , entonces

$$k_n = \sqrt{2\mu z_n/\hbar^2} = K_n - i\kappa_n.$$

Cuando los polos de la matriz $S(E)$, $z_n = \omega_n - i\Gamma_n$, están cerca del eje real de la energía, su presencia es evidente en las cantidades de dispersión. Éstos se revelan como resonancias en las cantidades de dispersión como función de la energía E (la parte real e imaginaria de los polos son las energías en donde las CD alcanzan un máximo local y la mitad de su anchura, respectivamente). Nosotros adoptamos la definición de resonancia, como en varios textos (ver por ejemplo [5, 23, 24, 26]), como un polo de la matriz $S(E)$ [94]. Cuando los polos son puramente reales ($z_n = -\omega_n$, $\omega_n > 0$) (o puramente imaginarios en el plano de k : $k_n = i\kappa$, $\kappa_n > 0$), representan a los estados ligados (puntos en color azul en la Fig. 3.1). Cuando los polos de S son de la forma $z_n = \omega_n - i\Gamma_n$, $(\omega_n, \Gamma_n) > 0$ [$k_n = K_n - i\kappa_n$ (K_n, κ_n) > 0], son llamados estados resonantes (puntos en color rojo de la Fig. 3.1). Por otro lado, sí $z_n = \omega_n - i\Gamma_n$, $(\omega_n > 0, \Gamma_n < 0)$ [$k_n = K_n - i\kappa_n$ ($K_n < 0, \kappa_n > 0$)], entonces, éstos son llamados estados anti-resonantes (puntos en color negro de la Fig. 3.1). El resto de las definiciones se dan en la Tabla 3.1. En la Fig. 3.1 mostramos estos diferentes tipos de polos, tomando como ejemplo un pozo plano $V_0 = -10$ y ancho $d = 1$.

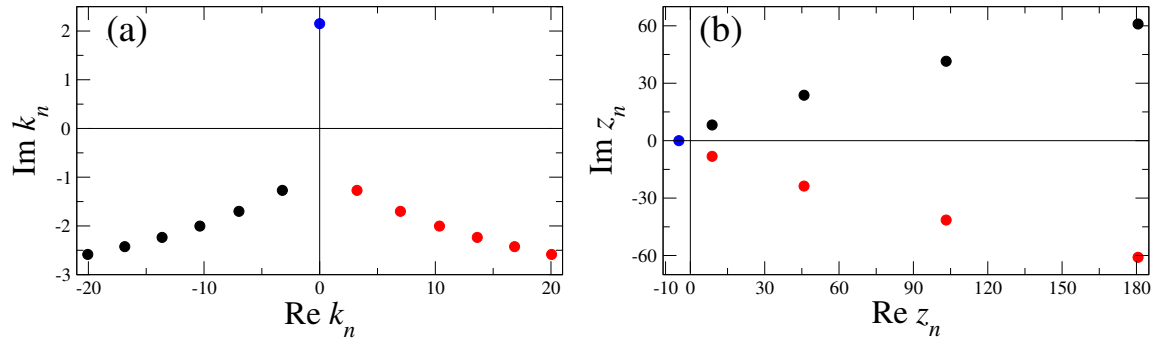


Figura 3.1: Polos en el plano complejo (a) de k ($k_n = \sqrt{z_n}$) y (b) z_n para un pozo de potencial plano con $V_0 = -10$ y $d = 1$. El punto (●) que se encuentra sobre el eje positivo imaginario de k y sobre el eje real negativo de z es un estado ligado. Los puntos (●) situados en el cuarto cuadrante del plano k y los que están en la segunda rama del plano complejo de z son estados resonantes y los puntos que se encuentran en el tercer cuadrante del plano k y sobre el plano superior de z son estados anti-resonantes (●).

Ahora bien, en la Sec. 3.1 [Sec. 3.2] encontramos las expresiones de las CD en términos de la matriz $R(E)$ para un canal [dos canales] y mostramos que los polos de éstas son las soluciones de la ecuación $(1 + ikR(E))(1 - ikR(E)) = 0$ [$\Omega^+(E)\Omega^-(E) = 0$]. Por otro lado mostramos que las soluciones de los términos $(1 - ikR(E)) = 0$ (para un canal) y $\Omega^-(E) = 0$ (dos canales) nos dan los polos de la matriz

Def. de polos	Re k_n	Im k_n	Re z_n	Im z_n	Rama
Resonancia	positivo	negativo	Cualquier	negativo	segunda
Anti-resonancia	negativo	negativo	Cualquier	positivo	segunda
Estados acotados	cero	positivo	negativo	cero	primera
Estados anti-acotados	cero	negativo	negativo	cero	segunda

Cuadro 3.1: Definición de los polos de $S(E)$ como *estados* de resonancia, anti-resonancia, estados acotados y anti-acotados. Los $z_n = \omega_n + i\Gamma_n$ están relacionados con el vector de onda k_n como $k_n = \kappa_n + iK_n = \sqrt{2\mu z_n/\hbar^2}$. La ecuación $\Omega(E) = (1 + ikR)(1 - ikR)$ y $\Omega(E) = \Omega^-(E)\Omega^+(E)$ para uno y dos canales, respectivamente.

de dispersión. Entonces, surge la cuestión sobre ¿qué es lo que representan las soluciones de los términos conjugados, $1 + ikR(E) = 0$ y $\Omega^+(E) = 0$? Para responder esta pregunta, analicemos $1 + ikR = 0$ (por simplicidad tomaremos el caso de un canal para un potencial arbitrario), la cual toma la forma siguiente:

$$1 + ikR = 1 + ik \left(\frac{\gamma_1^2}{E_1 - z} + \frac{\gamma_2^2}{E_2 - z} + \frac{\gamma_3^2}{E_3 - z} + \dots \right) = 0, \quad (3.25)$$

donde hemos continuado al plano complejo $E \rightarrow z \Rightarrow k = \sqrt{z}$ [en unidades de $\frac{\hbar^2}{2\mu} = 1$] y usado la definición de $R(E)$, ecuación (2.16). Tomemos la aproximación a un nivel en (3.25), tal que

$$1 + ikR \simeq 1 + ik \frac{\gamma_1^2}{E_1 - z} = 0. \quad (3.26)$$

Las soluciones de (3.26) son $z_1^\pm = \frac{1}{2}(2E_1 - \gamma_1^4) \pm i \frac{\gamma_1^2}{2} \sqrt{4E_1 - \gamma_1^4}$. Si $4E_1 - \gamma_1^4 > 0$, entonces $z_1^\pm \equiv \omega_1 \pm i\Gamma_1$, donde el subíndice 1 implica aproximación a un nivel. Además, como el término en el radical es mayor que cero, entonces $\Gamma_1 > 0$, de lo contrario tendremos un estado acotado (polo puramente real). Según las definiciones dadas anteriormente, podemos ver que $z_1^{+(-)}$ representa un polo anti-resonante (resonante). Ahora, para ver que es lo que representa físicamente z_1^\pm , consideremos la *solución completa* de la ecuación de Schrödinger y sustituyamos en ella la energía compleja z_1^\pm , tal que:

$$\Phi(x, t) = \psi(x) e^{-iz_1^\pm t} = \psi(x) e^{-i(\omega_1 \pm i\Gamma_1)t}, \quad (3.27)$$

en consecuencia, esta última ecuación la podemos escribir como

$$\Phi(x, t) = \psi(x) e^{-i\omega_1 t} e^{\pm\Gamma_1 t}. \quad (3.28)$$

Note que, como $\Gamma_1 > 0$ entonces, la función de onda (3.28) con el término $e^{+\Gamma_1 t}$ no es normalizable, porque diverge conforme crece el tiempo. Si una función de onda no es normalizable, entonces viola el principio de causalidad, el cual establece que una onda debe ser normalizable y que la probabilidad de encontrar una partícula/onda fuera de la región de dispersión debe ser menor o igual que la unidad, para todo tiempo [62, 64, 65].

Con esto concluimos que los polos de la forma $z = \omega_n + i\Gamma_n$, con $\Gamma_n > 0$, son físicamente inaceptables y por consiguiente, los polos de las CD son los mismos polos que los de la matriz $S(E)$.

3.4. Modelos de potenciales dispersivos

El objetivo principal de esta Sección es mostrar la funcionalidad de la matriz de reacción en el cálculo de las cantidades de dispersión. Por consiguiente, usaremos diferentes potenciales descritos abajo.

1.- Barrera (+) y pozo (-) de potencial plano

$$V(x) = \pm V_0; \quad x_I \leq x \leq x_D. \quad (3.29)$$

2.- Potencial de Pöschl-Teller (PT). El perfil de este potencial está dado como

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\alpha^2 V_0}{\cosh^2(\alpha x)}, \quad (3.30)$$

en donde, tendremos una barrera o pozo dependiendo del signo de V_0 (parámetro adimensional) que junto con α^C (con unidades de $longitud^{-1}$) determinan la altura o la profundidad del potencial [66].

La ecuación de Schrödinger para el potencial Pöschl-Teller es soluble analíticamente [25].

3.- Potencial Cosenoidal (PC). Este potencial está dado de la siguiente forma

$$V(x) = \frac{V_0}{2} (1 - \cos(m\pi x/d)), \quad m = 1, 2, 3, \dots \quad (3.31)$$

donde $(\pm)V_0$, m y d son parámetros que determinan la altura (+) o la profundidad (-), el número de oscilaciones y el ancho del potencial.

^CDe aquí en adelante vamos a usar α como un parámetro y por favor no confundir con el vector α de la ec. (2.59).

4.- **Cadenas o arreglos de m períodos de potenciales** (ver Fig. 3.2). Los arreglos de potenciales que trataremos estarán compuestos de barreras planas (perfil en azul de la Fig. 3.2), de potenciales de Pöschl-Teller (perfil en negro de la Fig. 3.2) y de potenciales Cosenoidales (perfil en rojo de la Fig. 3.2). El primero es conocido como el modelo de Kronig Penney cuando el arreglo periódico es infinito [67]. En el arreglo finito, la forma del perfil se puede describir como

$$V(x) = \sum_{j=1}^m V_j [\Theta(x - x_{2j-1}) - \Theta(x - x_{2j})], \quad (3.32)$$

en donde $\Theta(x)$ es la función escalón definida como $\Theta(x) = 1$ si $x > 0$ y cero si $x < 0$, V_j denota la altura/profundidad de cada potencial, anchura $d_j = x_{2j} - x_{2j-1}$ y separación entre cada barrera/pozo $l_j = x_{2j+1} - x_{2j}$. Note que para un sistema periódico con m barreras/pozos, tendremos $V_0 \equiv V_1 = V_2 = \dots = V_m$; $d \equiv d_1 = d_2 = \dots = d_m$ y $l \equiv l_1 = l_2 = \dots = l_{m-1}$.

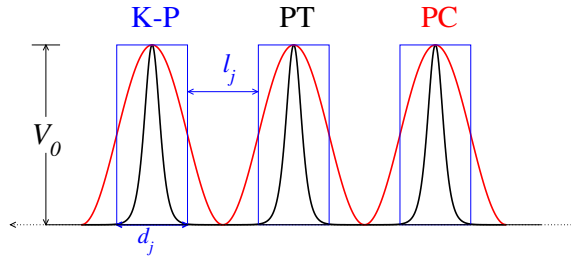


Figura 3.2: Representación gráfica de cadenas de potenciales arriba descritas para tres períodos. El color de las etiquetas corresponde al color de las líneas de cada potencial. K-P denota el perfil del Modelo de Kronig-Penney finito, PT denota el perfil para una secuencia de potenciales del tipo Pöschl-Teller y PC denota el perfil del potencial cosenoidal.

Por otro lado, la secuencia o cadena de potenciales de Pöschl-Teller está dada como

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{2\mu} \sum_{p=1}^m \frac{\alpha_p^2 V_p}{\cosh^2[\alpha_p(x - x_p)]}, \quad (3.33)$$

aquí, m y x_p determinan el número total de períodos y la posición en donde son centradas las barreras/pozos, respectivamente. Cabe mencionar que en [66] encuentran expresiones analíticas para la amplitud de la transmisión para $p = 1, 2$ usando el MMT, que nos servirá para comparar con nuestros resultados. Finalmente, una cadena de potenciales Oscilatorios la obtendremos variando $m = 1, 2, 3, \dots$

CD	un canal	dos canales
$S(E)$	$e^{-2ikd} \frac{q+ik \tan(qd)}{q-ik \tan(qd)}$	$\frac{e^{ikd}}{\cos(qd)-i\eta_+ \sin(qd)} \begin{pmatrix} i\eta_- \sin(qd) & 1 \\ 1 & i\eta_- \sin(qd) \end{pmatrix}$
$\tau(E)$	$-\frac{2\mu}{\hbar} \left(\frac{d}{k} - \frac{\eta_- \tan(qd) + dk \sec^2(qd)}{q^2 + k^2 \tan^2(qd)} \right)$	$-\frac{\mu}{\hbar} \left(\frac{d}{k} - \frac{d\eta_+ - \eta_-^2 k^{-1} \sin(2qd)}{q[\cos^2(qd) + \eta_+^2 \sin^2(qd)]} \right)$
$P(E)$	$\frac{2k^2 \sec(qd)^2 [d - (qd)^{-1} \sin(2qd)]}{q^2 + k^2 \tan^2(qd)}$	$\frac{(d/2)(1+(k/q)^2) + (4q)^{-1}(1-(k/q)^2) \sin(2qd)}{\cos^2(qd) + \eta_+^2 \sin^2(qd)}$
$T(E)$	0	$\frac{1}{\cos^2(qd) + \eta_+^2 \sin^2(qd)}$

Cuadro 3.2: Cantidades de dispersión (CD) para una barrera/pozo de potencial plana, $V(x) = V_0$, en los sistemas de uno y dos canales. $\hbar k = \sqrt{2\mu E}$, $\hbar q = \sqrt{2\mu(E - V_0)}$, $\eta_{\pm} = \frac{1}{2}(\frac{k}{q} \pm \frac{q}{k})$ y d denota el ancho de V_0 . Todas estas cantidades fueron obtenidas para $E > V_0$ (ver las deducciones en el Apéndice B).

en la ecuación (3.31). En la Fig. 3.2 mostramos los perfiles de las secuencias arriba descritas; K-P finito, PT y PC, para barreras y para tres períodos.

3.5. Resonancias de transporte vs. resonancias de $S(E)$; un canal

Para verificar que nuestros cálculos son correctos y como referencia comparativa con los diversos sistemas que aquí estudiaremos, primero consideramos el caso de un sistema para el cual existen resultados analíticos exactos: barrera o pozo de potencial constante. Las expresiones para sus cantidades de transporte, $S(E)$, $\tau(E)$, $P(E)$ y $t(E)$, están derivadas en el Apéndice B y resumidas en la Tabla 3.2. Posteriormente, calcularemos las CD debidos a barreras/pozos y de secuencias o cadenas de potenciales arriba descritos.

3.5.1. $\tau(E)$ y $P(E)$ para $V(x) = V_0$; un canal

Para una barrera/pozo de potencial (llamado también potencial escalón en el sistema de un canal) plana conviene definir el parámetro adimensional $\beta^2 \equiv 2\mu d^2 |V_0| / \hbar^2$, tal que, para valores de β pequeños (grandes) corresponde, ya sea, a potenciales muy estrechos (anchos) o potenciales cuya altura V_0 es pequeña (grande). Por otro lado, es conveniente (para una mejor referencia) escribir abajo las expresiones correspon-

dientes de $\tau(E)$ y $P(E)$ en términos de la función de reacción:

$$\tau(E) = -2 \left[\frac{\mu x_2}{\hbar k} - \frac{1}{1 + k^2 R^2} \left(\frac{\mu R(E)}{\hbar k} + \hbar k \frac{\partial R}{\partial E} \right) \right], \quad (3.34a)$$

$$P(E) = \left(\frac{\hbar^2}{2\mu} \right)^2 \sum_{\lambda=1}^N \frac{4|k\Psi_\lambda(x_2)|^2}{(1 + (kR)^2)(E_\lambda - E)^2}. \quad (3.34b)$$

Como primer ejemplo consideremos una barrera de potencial escalón [ver ecuación (2.1)] con $\beta = 4.47$ [(x_2, V_0) = (1, 10)], cuyas cantidades de dispersión se muestran en la Fig. 3.3. En esta figura comparamos las cantidades de dispersión usando el método de la Matriz de Reacción ($\tau(E)$ [$P(E)$] dado en (3.34a) [(3.34b)]) para diferentes valores de N , donde N denota el número de términos a la cual la función de Reacción es truncada [ver ecuación (2.19)], con los obtenidos de forma *exacto*^D ($\tau(E)$ [$P(E)$] dado en (B.9) [(B.11)]). El valor de β que aquí hemos escogido se debe a que es el parámetro más bajo que nos permite tener una resonancia pronunciada (aguda) a bajas energías y en el resto resonancias anchas. Como veremos en el siguiente capítulo si las resonancias son agudas entonces se describen muy bien con pocos términos mientras que cuando son anchas es necesario un número grande de N . La Fig. 3.3 muestra que para $N = 20$ términos las diferencias entre ambos cálculos son notables, excepto para energías alrededor del primer pico en las cantidades de dispersión. Para $N = 50$ las diferencias son casi imperceptibles para el rango de energía mostrado. Por otro lado, para $N = 300$ la concordancia se extiende a mayores energías.

Antes de mostrar resultados para otros potenciales, es necesario dar respuesta a la siguiente pregunta: ¿Cuántos términos (eigenestados y eigenvalores) en la serie que define $R_{\nu\nu'}(E)$ son necesarios para que el cálculo de las CD se puedan considerar confiables? Cuando tenemos expresiones analíticas con las cuales comparar, como en el ejemplo anterior, lo que hacemos es medir el Error Relativo (E_R) entre la CD obtenida de forma exacta con la obtenida por la Matriz de Reacción considerando un número dado N de términos en la serie, esto a una energía $E = E_0$, donde E_0 es la energía máxima a la cual estamos interesados en conocer el comportamiento de la CD. Por ejemplo, sea $\tau(E_0)$ el tiempo de demora para una barrera/pozo de potencial plana (exacto, ver Cuadro 3.2) y $\tau_{MR}(E_0)$ el tiempo de demora calculado por Matriz de Reacción usando N términos en las series $R_{\nu\nu'}(E_0)$ [ver ecuación (3.34a)], entonces

$$E_R \equiv 1 - \frac{\tau_{MR}(E_0)}{\tau(E_0)}. \quad (3.35)$$

^DNos referiremos al resultado exacto a aquel que obtenemos de una expresión *cerrada*. Por ejemplo, la ecuación (B.9) para el tiempo de demora.

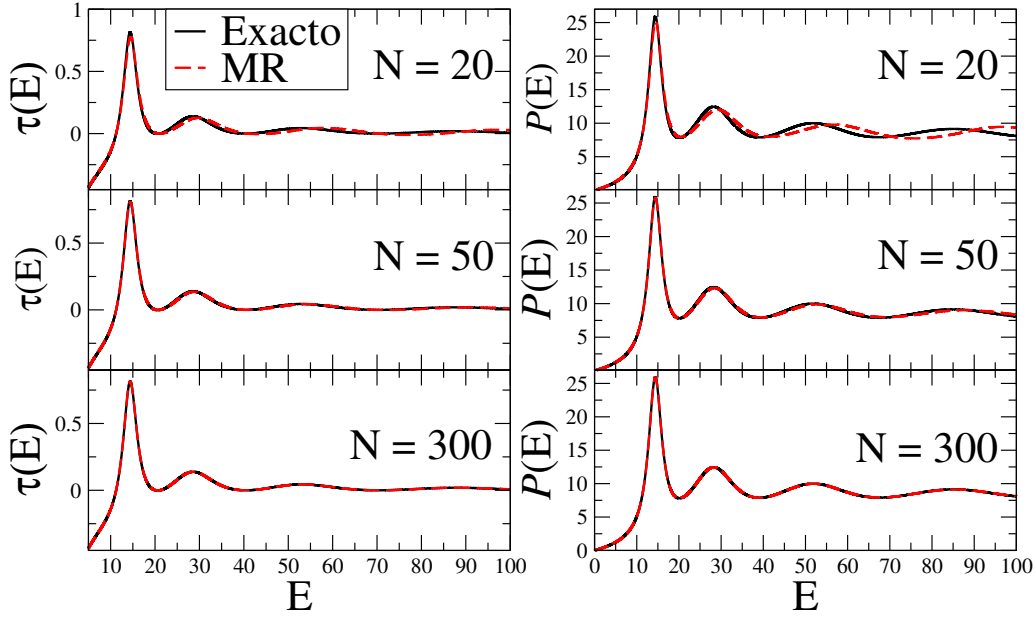


Figura 3.3: Cantidades de dispersión; $\tau(E)$ y $P(E)$, para una barrera de potencial escalón con $\beta = x_2 \sqrt{2\mu|V_0|}/\hbar = 4.47[(x_2, V_0) = (1, 10)]$. En esta figura comparamos los resultados obtenidos por Matriz de Reacción (MR) para $N = 20, 50$ y 300 términos para la función de Reacción dado en (2.19) con los *exactos*. El resultado *exacto* para $\tau(E)$ [$P(E)$] se obtuvo de (B.9) [(B.11)].

En general, hemos usado $|E_R| \leq 10^{-3}$ excepto para el cálculo de muchos polos donde requerimos mayor precisión. En el caso de no contar con expresión alguna para la comparación, lo que hacemos es lo siguiente: calculamos $\tau_{MR}^{N_1}(E_0)$ usando N_1 términos en los $R_{\nu\nu'}(E_0)$, posteriormente volvemos a calcular $\tau_{MR}^{N_2}(E_0)$ pero ahora usando $N_2 > N_1$ términos y evaluamos (3.35) como

$$E_R = 1 - \frac{\tau_{MR}^{N_2}(E_0)}{\tau_{MR}^{N_1}(E_0)}. \quad (3.36)$$

Sí $|E_R| \leq 0.001$ en (3.36), entonces, decimos que N_2 es el número de términos suficientes para calcular las CD hasta $E = E_0$. En caso de obtener $|E_R| > 0.001$ en (3.36), lo que hacemos es tomar $N_3 > N_2$ términos para calcular $\tau_{MR}^{N_3}(E_0)$ y así sucesivamente hasta obtener el resultado deseado para $|E_R|$. De nuestros resultados, hemos encontrado que para $N \simeq 1000$ términos es suficiente para calcular las CD, en uno y dos canales, y satisfacer que $|E_R| \leq 0.001$ para una $E_0 \sim 500$ para *casi cualquier* perfil del potencial.

Por ejemplo, calculando el Error Relativo para el sistema considerado en la Fig. 3.3 con $E_0 = 100$

y para $N = 20(50)[300]$ términos en la serie de $R(E)$ dada en la ec. (2.19), obtenemos para $\tau(E_0)$ un $|E_R| = 3.5(0.14)[0.01]$ y para $P(E_0)$, $|E_R| = 0.14(0.05)[0.004]$. Los resultados de la Fig. 3.3 junto con los resultados para $|E_R|$ también revelan que para un valor de N dado, las diferencias son menores para el cálculo de $P(E_0)$, que para $\tau(E_0)$. La lenta convergencia en $\tau(E_0)$ respecto a $P(E_0)$ se justifica por el hecho de que en $\tau(E)$ hacemos uso de la función $R(E)$ en más ocasiones así como de su derivada [ver ec. (3.34a)], en cambio, en $P(E)$ la usamos una sola vez [ver ec. (3.34b)]. Es decir, la aproximación de la función de Reacción para una N dada con lleva un error por truncamiento (en la Sec. 6.8 discutimos esto) y por ende, mientras más aparezca en una CD, el error será mayor, como lo es, en este caso. Con este *simple* ejemplo mostramos la buena correspondencia entre las expresiones exactas y las aproximadas.

Para futuros resultados, únicamente indicaremos el número N de términos que hemos utilizado en la función $R(E)$ (o matriz) teniendo en mente que $|E_R| \leq 0.001$ a menos que se diga lo contrario.

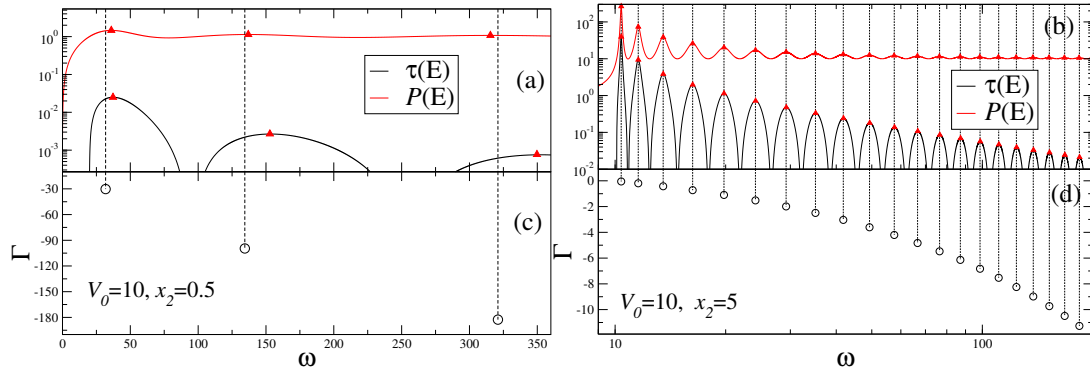


Figura 3.4: Tiempo de demora, probabilidad de atrapamiento y polos de $S(E)$ para una barrera plana con $V_0 = 10$ en el sistema semi-infinito. En (a) y (b) graficamos $\tau(E)$ y $P(E)$ para $\beta = 1.58(V_0 = 10, x_2 = 1/2)$ (con $N = 500$ en la función de Reacción) y $\beta = 15.81(V_0 = 10, x_2 = 5)$ (con $N = 800$ en la función de Reacción), respectivamente. Los triángulos sólidos rojos denotan los máximos locales de $P(E)$ y $\tau(E)$. En (c)-(d) mostramos los polos de $S(E)$, $z_n = \omega_n - i\Gamma_n$. Las líneas verticales son la proyecciones de la parte real de los polos en el plano real de E y se ponen para que nos sirvan de guía o comparación.

En la Fig. 3.4(a) [3.4(b)] calculamos $\tau(E)$ y $P(E)$ para el caso de una **barrera de potencial** plana semi-infinito ($V(x = 0) = \infty$, $V(x) = V_0$, $0 < x \leq x_2$ y $V(x) = 0$, $x > x_2$) con $\beta = 1.58$ ($N = 500$) [$\beta = 15.81$ ($N = 800$)]. En la misma figura [Fig. 3.4(c)-(d)] mostramos los polos de S (más adelante describiremos la forma de calcular estos polos). Estos parámetros nos permiten observar resonancias de transporte anchas (para $\beta = 1.58$) y resonancias de transporte delgadas ($\beta = 15.81$). Estas figuras nos

muestran la bien conocida correspondencia entre la anchura de las resonancias de transporte y la parte imaginaria de los polos de $S(E)$, (Γ): entre más aislada sea la resonancia^E, más cerca estará el polo del eje real de energía y por ende, se manifestará como un pico de resonancia en las cantidades de dispersión. Aquellos polos de $S(E)$ suficientemente alejados del eje real, no muestran ningún efecto en las cantidades de dispersión (traslape grande). Resultados similares se obtienen para **pozos de potencial** planos, como se puede observar en la Fig. 3.5, en donde consideramos $\beta = 1.58$ ($V_0 = -10, x_2 = 1/2$) [ver Fig. 3.5-(Izq.)] y $\beta = 31.62$ ($V_0 = -10, x_2 = 10$) [ver Fig. 3.5-(Der.)].

Las figuras 3.4 y 3.5 nos muestran que los máximos locales de $\tau(E)$ y de $P(E)$ sólo coinciden para el caso de resonancias suficientemente aisladas. Entre menos aisladas sean las resonancias, mayor es la diferencia en los valores donde alcanzan sus máximos locales. Por otro lado, este resultado no contradice el hecho que los polos de $\tau(E)$ y $P(E)$ sean los mismos (y también de $S(E)$) puesto que son funciones diferentes de la energía z y por lo tanto sus curvas de nivel generalmente no coinciden. Entonces, las diferentes cantidades de dispersión como función de la energía en el eje real, alcanzan sus máximos locales a diferentes valores de energía, excepto cuando las resonancias son aisladas.

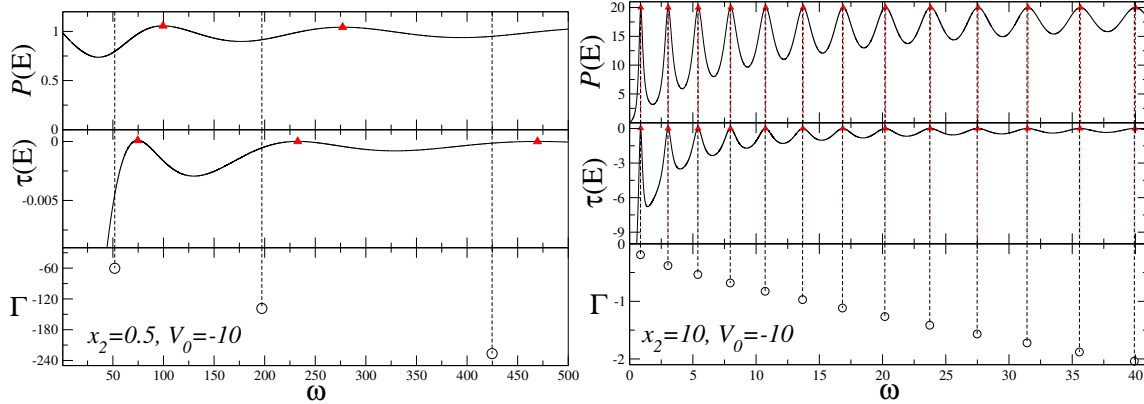


Figura 3.5: Tiempo de demora, probabilidad de atrapamiento y polos de $S(E)$ para una pozo plano con $V_0 = -10$, en el sistema semi-infinito. $\tau(E)$ y $P(E)$ para (Izq.) $\beta = 2.23$ con $N = 500$ y (Der) $\beta = 31.62$ con $N = 600$. Los triángulos sólidos rojos denotan los máximos locales de $P(E)$ y $\tau(E)$. En los paneles de abajo mostramos los polos de $S(E)$ ($z = \omega - i\Gamma$). Las líneas verticales discontinuas en negro son las proyecciones de la parte real de z_n al plano de $E = 0$ y las líneas discontinuas en rojo son las proyecciones de los máximos locales de las CD y se ponen para que nos sirvan de guía o comparación.

^EUna resonancia aislada cumple cumple con $\Gamma/\Delta E \ll 1$, donde Γ y ΔE son la anchura y el espaciamiento de sus niveles, respectivamente.

3.5.2. $\tau(E)$ y $P(E)$ para un potencial de PT y PC; un canal

En este apartado calcularemos el tiempo de demora y la probabilidad de atrapamiento para una barrera/pozo de potencial de Pöschl-Teller y Cosenoidal, dadas en las ecuaciones (3.30) y (3.31). En efecto, en los paneles (a) y (c) [(b) y (d)] de la Fig. 3.6 mostramos $\tau(E)$ y $P(E)$ para una barrera [pozo] de potencial de Pöschl-Teller con $V_0\alpha^2 = 10[-10]$, $\alpha = 3$ y centrada en $x = 2$. Note que para la barrera de Pöschl-Teller, vemos el bien conocido fenómeno de tunelamiento de la onda/partícula, produciendo así, una resonancia muy aguda tanto en $\tau(E)$ como en $P(E)$. La manifestación de este fenómeno se debe a la presencia de un *pozo*, situado entre la barrera de Pöschl-Teller y el potencial infinito. Como sabemos, los pozos tienen estados ligados y por lo tanto, para que se produzca el efecto de *tunelamiento resonante* se requiere que la energía de la partícula/onda incidente sea igual a la energía de alguno de los niveles permitidos dentro del pozo. En efecto, para nuestro ejemplo específico, uno de los estados cuasi-ligados tiene energía igual a la energía donde se produce la resonancia ($E \sim 2.68$). Por otro lado, el centro y la anchura de esta primera resonancia coincide para ambas CD y está bien determinada por el correspondiente polo de $S(E)$: $z_1 = 2.683 - i0.003$, donde la parte real (imaginaria) corresponde al centro (anchura) de la resonancia. Los siguientes dos polos son $z_2 = 9.396 - i0.696$ y $z_3 = 19.381 - i3.517$, los cuales, nos determinan aproximadamente la segunda y tercera resonancias para este potencial, respectivamente (ver paneles interiores de la Fig. 3.6).

Para el caso del pozo de potencial de Pöschl-Teller (ver columna izquierda de la Fig. 3.6), sólo podemos asociar la primera y segunda resonancias de $\tau(E)$ y $P(E)$ con los dos primeros polos de $S(E)$, que son: $z_1 = 2.317 - i0.916$ y $z_2 = 9.365 - i4.247$, ya que el resto de las resonancias son muy anchas.

El comportamiento de las CD para la barrera/pozo de Pöschl-Teller que arriba hemos descrito se manifiestan de forma similar para el potencial Cosenoidal, como se puede apreciar en la Fig. 3.7, en donde, $\tau(E)$ y $P(E)$ se muestran en los paneles (a) y (c) [(b) y (d)] para la barrera [pozo] de potencial Cosenoidal con $V_0 = 10[-10]$, $m = 1$ y centrada en $x = 2$. Para la barrera cosenoidal, la primera resonancia (tunelamiento resonante) está dada por el primer polo de $S(E)$: $z_1 = 6.521 - i0.006$ mientras que para la segunda resonancia no, ya que $z_2 = 10.607 - i0.367$ y en $E \sim 12.04$ se encuentra el pico de $\tau(E)$ y $P(E)$. Para el caso del pozo de potencial cosenoidal, el primer polo de $S(E)$ no se asocia con la primera resonancia ya que es $z_1 = 2.317 - i0.916$ y el primer pico (resonancia) de $\tau(E)$ y $P(E)$ se localiza en $E \sim 4.967$. Sin embargo, la parte real del segundo y tercer polo de $S(E)$ ($z_2 = 9.365 - i4.247$ y $z_3 = 15.093 - i7.785$) si aproximan

la posición de la segunda y tercera resonancia ($E \sim 9.92$ y $E \sim 15.834$) para $P(E)$, ya que en este caso, el tiempo de demora no tiene más resonancias después de la primera.

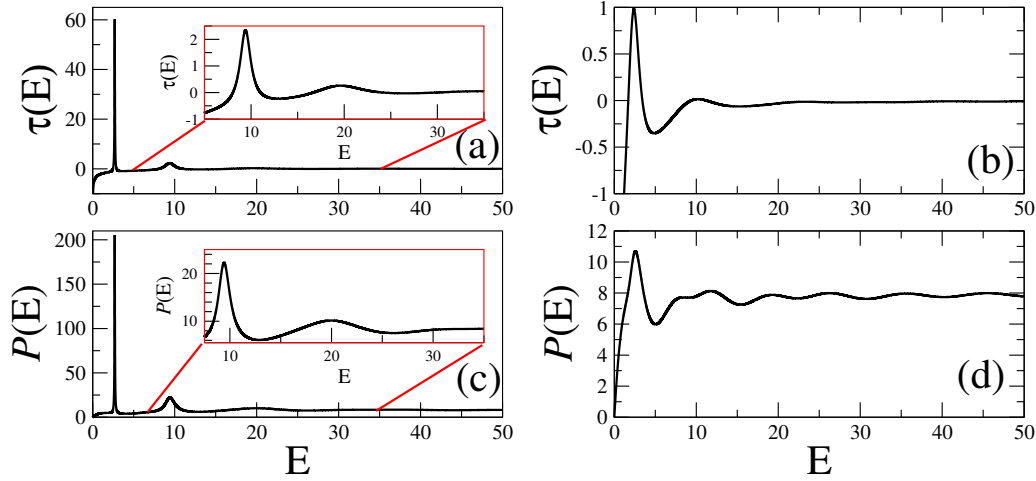


Figura 3.6: Cantidades de dispersión para una barrera/pozo de potencial de Pöschl-Teller [ec. (3.30)]. En (a) y (c) [(b) y (d)] se muestran $\tau(E)$ y $P(E)$ para la barrera [pozo] de PT con $V_0\alpha^2 = 10[-10]$, $\alpha = 3$ y centrada en $x = 2$. En el interior de (a) [(c)] se muestran $\tau(E)$ [$P(E)$] en un intervalo específico con el objetivo de apreciar mejor el comportamiento de las CD en dicha región. $N=500$ en la función R .

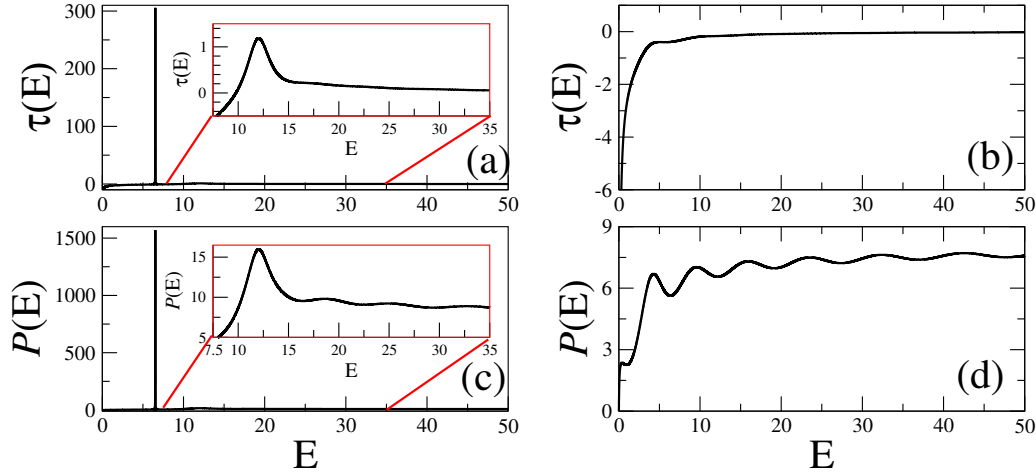


Figura 3.7: Cantidades de dispersión para una barrera/pozo de potencial Cosenoidal [ec. (3.31)]. En (a) y (c) [(b) y (d)] mostramos $\tau(E)$ y $P(E)$ para una barrera [pozo] Cosenoidal con $V_0 = 10[-10]$, $m = 1$ y centrada en $x = 2$. En el interior de los paneles (a) y (c) se muestran $\tau(E)$ y $P(E)$ en un intervalo específico para poder apreciar mejor las resonancias en dicho intervalo. $N = 500$ en la función R .

3.5.3. $\tau(E)$ y $P(E)$ para cadenas de potenciales; un canal

Las secuencias o cadenas de potenciales pueden encontrar su utilidad en física del estado sólido para describir estados de energía de un electrón perteneciente a un cristal, suponiendo que la estructura cristalina configura un potencial periódico de cambios abruptos (barrera/pozos cuadrados) o suaves (PT y PC, en nuestro caso). Es por ello que en esta parte vamos a considerar arreglos periódicos de celdas unitarias definidas por potenciales planos, PT y cosenos, c.f. Fig. 3.2.

Las cantidades de dispersión ($\tau(E)$ y $P(E)$) para las secuencias de barreras/pozos planos (modelo de K-P finito), de potenciales de PT y de potenciales con perfil cosenoidal, están dadas en forma respectiva en las Figs. 3.8, 3.9 y 3.10. En todos estos sistemas hemos tomado $N = 600$ términos en la función de Reacción [ver ec. (2.16)] para el cálculo de las CD. Ahora bien, los parámetros para el modelo de K-P finito de barreras [pozos] cuadradas son $m = 10$ periodos con $V_0 = 10$ [-10], anchura y separación entre cada barrera [pozo] dada por $d = 0.5$ y $l = 0.5$, en donde los paneles (a) y (c) [(b) y (d)] de la Fig. 3.8 corresponde a la secuencia de barreras [pozos].

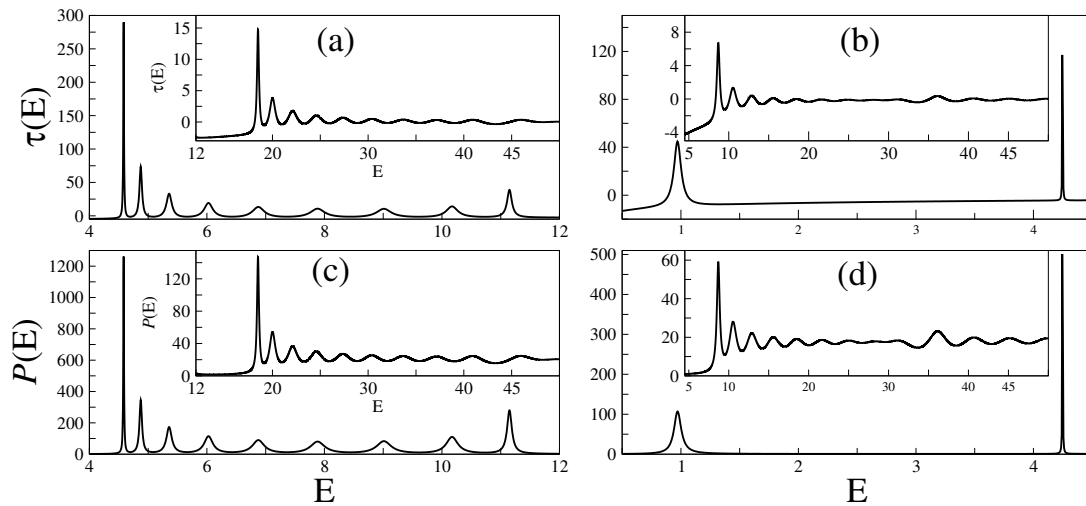


Figura 3.8: Cantidades de dispersión para el modelo de K-P finito con $m = 10$ periodos de barreras/pozos cuadradas cuya separación (anchura) entre cada barrera/pozo es $l = 0.5$ ($d = 0.5$) y ancho total del sistema $x_2 = 11$. En (a) y (c) [(b) y (d)] mostramos $\tau(E)$ y $P(E)$ para la secuencia de barreras [pozos] con $V_0 = 10$ [$V_0 = -10$]. En todos los paneles interiores mostramos la segunda banda de conducción. $N = 600$ términos en la ec. (2.16).

Los parámetros para la secuencia o cadena de barreras(+) (pozos [-]) formada de perfiles de Pöschl-Teller son

centrados en $x_p = p$ ($p = 1, 2, \dots, 10$.) y hemos tomado $\alpha = 10$, $V_0 = \pm 0.1$ y ancho total del potencial $x_2 = 11$. Con estos parámetros nuestro sistema es entonces periódico (finito con $m = 10$ períodos). Similarmente, los paneles (a) y (c) [(b) y (d)] de la Fig. 3.9 muestran el comportamiento de $\tau(E)$ y $P(E)$ para la secuencia de barreras [pozos].

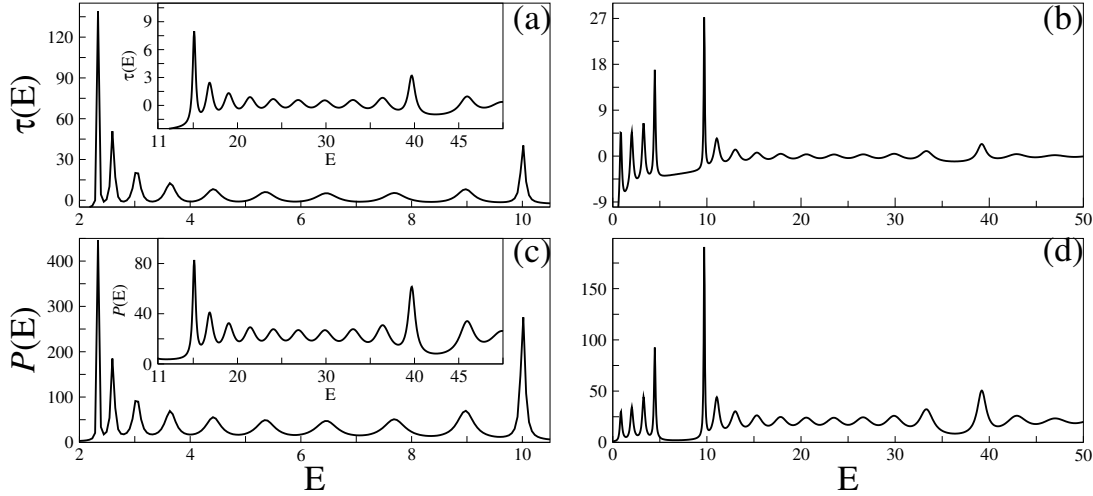


Figura 3.9: Cantidades de dispersión; $\tau(E)$ y $P(E)$, para una cadena periódica de $m = 10$ barreras [pozos] de Potenciales de Pöchl-Teller para $\alpha = 10$, $x_2 = 11$. (a) y (c) [(b) y (d)] corresponde a barreras [pozos] para $V_0 = 0.1$ [$V_0 = -0.1$]. En el interior de los paneles (a) y (c) mostramos la segunda banda de conducción. Hemos usado $N = 600$ términos en la ec. (2.16) para el cálculo de las CD.

Ahora consideremos el Potencial Cosenoidal [ver ecuación (3.31)] con los siguientes parámetros: $m = 10$ períodos, $x_2 = 11$ y $V_0 = \pm 10$, los cuales, nos permiten tener una cadena similar a la cadena formada por potenciales de PT y de barreras/pozos cuadradas y así comparar sus CD, que se muestran en la Fig. 3.10.

Cabe señalar que para estos potenciales y en el caso de un canal, no encontramos en la literatura cálculo alguno sobre estas cantidades con que comparar. No obstante, podemos hacer notar lo siguiente. Para los casos de secuencias de barreras considerados en los ejemplos anteriores hemos encontrado que puede haber un número de resonancias igual al número (m) de celdas que forman la secuencia periódica o un número igual a $m - 1$ resonancias. Esta discrepancia en el número de resonancias la podemos explicar de la siguiente manera. Siendo un sistema periódico de barreras (planas, de PT y PC); entonces, se formarían pozos de potencial entre cada separación de dichas barreras, donde el número total de pozos coincide con el número de barreras por la cual está formada nuestra secuencia. Estos pozos son los responsables de las resonancias

en las CD. Hemos notado que no hay una regla para el número de picos de resonancias para la primera banda de conducción, pues este número puede ser igual a m (como el ejemplo de la Fig. 3.9), $m - 1$ picos de resonancias (como en el ejemplo de las Figs. 3.8 y 3.10) o cualquiera como el caso de secuencias de pozos (resultados dados en las columnas de la derechas de las Figs. 3.8 y 3.10). Para esto no hemos podido encontrar explicación. Sin embargo, en la segunda banda de conducción (ver paneles interiores de las columnas izquierdas de las Figs. 3.8, 3.9 y 3.10) hemos encontrado $m (= 10)$ picos de resonancia. Este último resultado se encuentra siempre para cualquier sistema periódico.

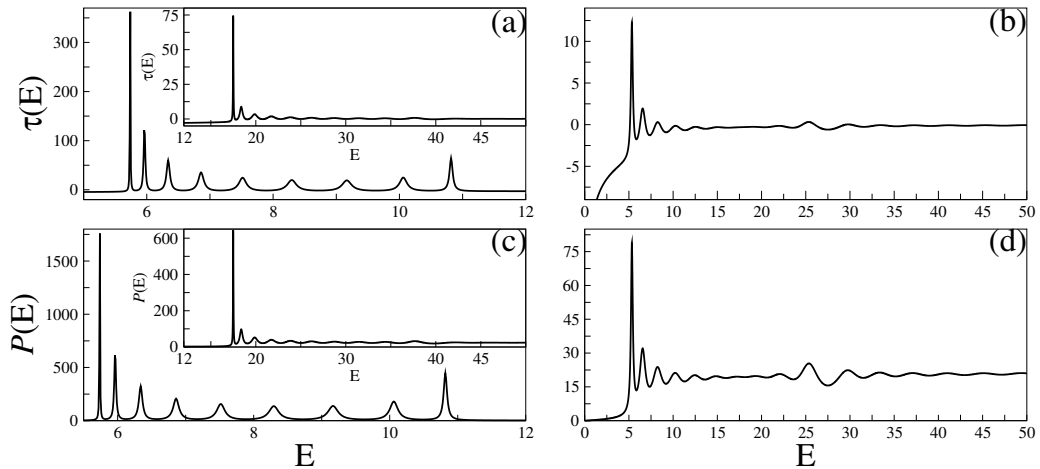


Figura 3.10: Cantidades de dispersión para el potencial Cosenoidal [ver ec. (3.31)] con $m = 10$ periodos y $x_2 = 11$. (a) y (c) [(b) y (d)] corresponden a barreras [pozos] con $V_0 = 10$ [-10]. En el interior de los paneles (a) y (c) se muestra la segunda banda de conducción. Aquí hemos usado $N = 600$ en (2.16).

3.5.4. Resonancias de transporte vs. resonancias de $S(E)$. Dos canales

Con dos canales, ahora podemos calcular la transmisión, aparte del tiempo de demora y la probabilidad de atrapamiento. Comenzaremos con el potencial $V(x) = V_0$, cuyas expresiones de las cantidades de dispersión se pueden encontrar analíticamente y son resumidas en el Cuadro 3.2. Posteriormente, consideraremos barreras/pozos de potenciales de PT y PC y finalmente, cadenas de potenciales en los cuales usaremos el método de la matriz de transferencia (MMT) para comparar el cálculo de la transmisión.

3.5.5. $T(E)$, $\tau(E)$ y $P(E)$ para $V(x) = \pm V_0$; dos canales

Para el caso de una barrera(+)/pozo(-) de potencial plana, las resonancias en la transmisión ($T = 1$) ocurren exactamente cuando $qd = n\pi$ (ver. Tabla 3.2). Es decir, cuando múltiplos de mitades de onda coinciden con la anchura de la barrera/pozo, $d = n\frac{\lambda}{2}$. Los valores de energía correspondientes son los mismos que las eigen-energías de un pozo infinito de anchura d , $E_n = \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{n^2\pi^2}{d^2} \pm V_0$. Es interesante notar que en este sistema, las energías de resonancia (en la transmisión) E_n coinciden también con las energías de reacción. Esto sucede independiente de que tan ancha sea la resonancia. Surge entonces la pregunta: ¿qué relación hay entre las energías de las resonancias de transmisión y los polos de la matriz $S(E)$?

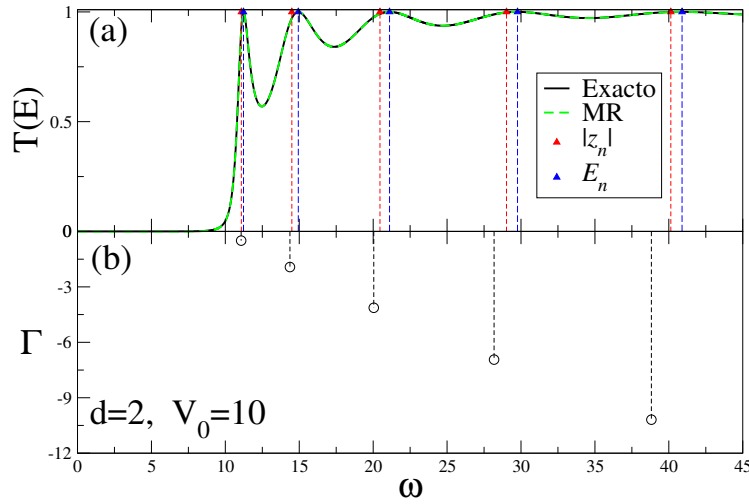


Figura 3.11: (a) Coeficiente de transmisión para una barrera rectangular con $V_0 = 10$ y $d = 2$. (b) localización de los primeros polos de $S(E)$. Aquí, E_n denota las energías tal que $T(E_n) = 1$ y $|z_n|$ denota el absoluto de los polos de $S(E)$. En las sumas de los $R_{ij}(E)$ tomamos $N = 500$ términos. Las líneas verticales son las proyecciones de $|z_n|$, ω_n y E_n al eje $E = 0$, para una mejor comparación de sus posiciones.

En la Fig. 3.11-(a) se presenta el coeficiente de transmisión como función de la energía para una barrera plana ($V_0 = 10$ y $d = 2$) y se señalan los valores donde ocurren las energías de resonancia (en la transmisión), los valores absolutos de los polos $|z_n|$ y la posición de los polos resonantes en el plano complejo de la energía. La parte real del polo resonante z_n es ω_n . En ésta comparamos el resultado obtenido por MR (para $N = 500$) con el exacto (el analítico del cuadro 3.2 para la transmisión). Como podemos observar, los resultados están en perfecto acuerdo. En la Fig. 3.11-(b) mostramos los polos de $S(E)$. Así como en el caso de un canal, aquí observamos un desplazamiento de las E_n respecto a la parte real de los polos de $S(E)$ (círculos abiertos

en negro). También mostramos las posiciones de los valores absolutos de los polos de $S(E)$, $|z_n|$, puesto que según Klaiman y Moiseyev [68], los picos de la resonancia en la transmisión ocurren en $|z_n|$. Como vemos en esta figura, ciertamente estos se acercan más a los valores donde ocurren los picos que las partes reales ω_n de los polos. Sin embargo, éstos se alejan de los valores exactos E_n al aumentar la anchura de la resonancias.

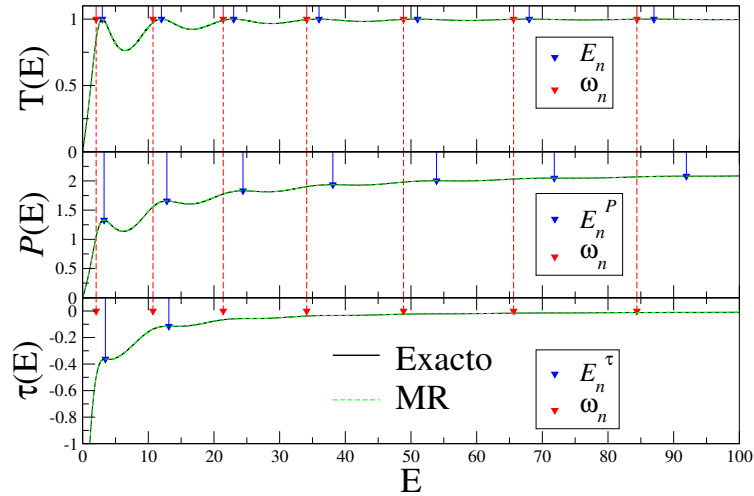


Figura 3.12: $\tau(E)$, $P(E)$ y $T(E)$ para un pozo de potencial con $d = \pi/\sqrt{2}$ y $V_0 = -13$. Aquí, E_n , E_n^τ y E_n^P denotan las energías para las cuales $T(E_n) = 1$, $\tau(E_n^\tau) = \tau_{max}$ y $P(E_n^P) = P_{max}$, respectivamente y ω_n es la parte real de los polos de S . Aquí usamos $N = 500$ para las sumas de los $R_{ij}(E)$. Las líneas verticales son las proyecciones de E_n , E_n^τ , E_n^P y ω_n , esto para una mejor comparación de sus posiciones.

En la Fig. 3.12 graficamos $T(E)$, $\tau(E)$ y $P(E)$ para un pozo de potencial con $V_0 = -13$ y $d = \pi/\sqrt{2}$ ^F. Vemos que los resultados están en perfecto acuerdo entre la MR (con $N = 500$) y los exactos. En la misma figura mostramos la posición de ω_n , en la cual, podemos observar dos cosas; la primera es que los máximos locales entre $T(E)$, $\tau(E)$ y $P(E)$ no coinciden y la segunda es que, las posiciones de los máximos locales de estas cantidades difieren de los ω_n , además conforme crece la energía éstas se desplazan más. Por otro lado, para el caso particular del tiempo de demora, podemos notar que ésta sólo tiene dos máximos locales, lo cual muestra que no todos los polos se manifiestan cuando se proyectan en el plano real de las energías. Por otro lado, aunque los E_n coincide con los máximos de $T(E)$, estas no coinciden con los máximos locales de $\tau(E)$ y $P(E)$ a menos que sus resonancias estén aisladas aunque tengan los mismos polos en el

^FEstos parámetros son usados en [68] para ejemplificar que los $|z_n|$ coinciden con los máximos de la transmisión en vez de la parte real de los polos.

plano complejo, debido a que τ , P y S son diferentes funciones de z . Por lo tanto, entre más esté alejado el polo del eje real, las curvas de estas cantidades en el eje real. La Fig. 3.13 ilustra este comportamiento.

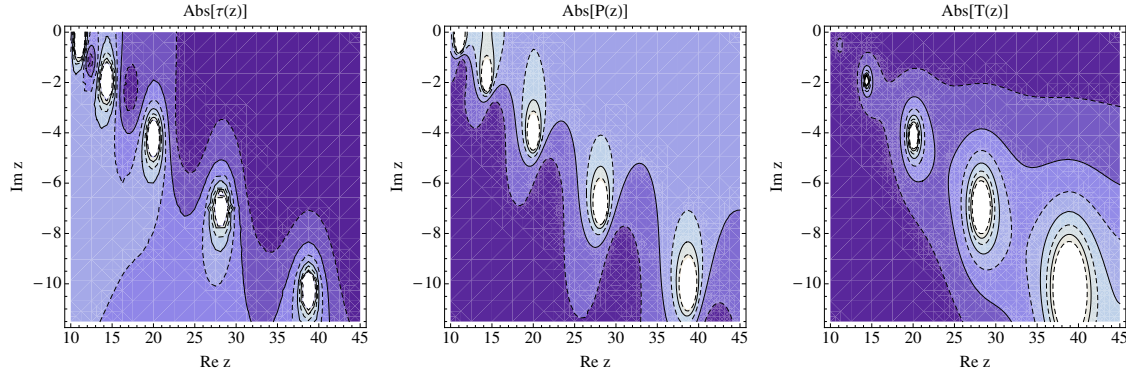


Figura 3.13: Cantidades de dispersión en el plano complejo de la energía para una barrera de potencial plana con $V_0 = 10$ y $d = 2$. El panel izquierdo (medio) [dercho] corresponde a $|\tau(z)|$ ($|P(z)|$) [$T(z)$]. La posición de los polos son los centros de los contornos de fondo blanco. Las curvas de nivel (líneas continuas y discontinuas en negro) son los que determinan el comportamiento de las CD en su proyección al plano real de la energía.

3.5.6. $T(E)$, $\tau(E)$ y $P(E)$ para potenciales de PT y PC; dos canales

Empecemos esta sección estudiando el potencial Pöschl-Teller:

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\alpha^2 V_0}{\cosh^2(\alpha x)}. \quad (3.37)$$

Como mencionamos en la Sec. 3.4, la ecuación de Schrödinger para (3.37) tiene solución analítica cerrada [25]. Además, en [66] encuentran una expresión analítica cerrada para la matriz de transferencia. Específicamente, la expresión para el coeficiente de la transmisión que obtienen para este potencial es

$$t(E) = \frac{e^{-ikd}}{\sqrt{1+w^2}}, \quad (3.38)$$

donde

$$w = \frac{\sin(b\pi)}{\sinh(\pi k/\alpha)}; \quad b = \frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} - V_0}. \quad (3.39)$$

La ecuación (3.38) muestra que para valores enteros de b , la amplitud de la transmisión será $|t(E)|^2 = 1$ para toda E y es independiente de α . La condición para V_0 en términos de b entero es: $V_0 = -b(b-1) = -2, -6, -12, \dots$. Es decir, tendremos transmisión *resonante* únicamente en pozos de potencial.

Por otro lado, podemos notar que el radical del denominador de (3.38) se puede escribir como $1 + w^2 = (1 - iw)(1 + iw)$ cuyos ceros nos dan los polos para el coeficiente de la transmisión y por consiguiente, los de la matriz de dispersión. Entonces, los ceros los obtenemos cumpliendo la siguiente igualdad:

$$\sinh(\pi k/\alpha) = \pm i \sin(\pi b). \quad (3.40)$$

Note que para k real, la igualdad en (3.40) no se puede cumplir, debido a que el seno hiperbólico es una función monótona creciente. Por consiguiente, nos conviene ir al plano complejo de $k : k \rightarrow k' + ik''$. Hacer esta extensión analítica en (3.40) nos lleva a un sistema de ecuaciones acopladas:

$$\sinh(\pi k'/\alpha) \cos(\pi k''/\alpha) = 0, \quad (3.41a)$$

$$\sin(\pi k''/\alpha) \cosh(\pi k'/\alpha) = \pm \sin(\pi b). \quad (3.41b)$$

De (3.41a) notamos que para $k' \neq 0$, implica que $\pi k''/\alpha = \frac{m}{2}\pi$, con $m = 1, 3, 5, \dots$. Substituyendo esta condición para k'' en (3.41b) encontramos que $\cosh(\pi k'/\alpha) = \sin(\pi b)$. Esta última igualdad se cumple únicamente si $k' = 0$ y $b = 1, 2, \dots$, lo cual es una contradicción porque partimos de la condición $k' \neq 0$. Ahora bien, sí partimos de que $k' = 0$, entonces de (3.41b) obtenemos la igualdad $\sin(\pi k''/\alpha) = \pm \sin(\pi b)$, la cual se cumple si $\pi k''/\alpha + m\pi = \pi b \Rightarrow \frac{k''}{\alpha} = b - m$; $m = 1, 2, 3, \dots, [b]$, donde $[\cdot]$ indica parte entera. Este análisis nos muestra que sí $b > 0$, entonces el pozo de potencial de Pöschl-Teller únicamente tendrá estados acotados [66]. Mientras que sí $b < 0$ (barrera de Pöschl-Teller), entonces la matriz de dispersión no tendrá polos.

En la Fig. 3.14 mostramos las cantidades de dispersión; $T(E)$, $\tau(E)$ y $P(E)$, correspondientes a una barrera [pozo] de Pöschl-Teller para $V_0\alpha^2 = 10[-10]$ y $d = 4$, esto en el sistema de dos canales. Además, consideramos $V_0 = -6$, $\alpha = 3$ y $d = 4$, valor de V_0 para el cual se obtiene transmisión total para toda E (ver figuras interiores de la columna derecha de la Fig. 3.14). De la Fig. 3.14 podemos ver que la amplitud de la transmisión calculada por MR está en perfecto acuerdo con la obtenida usando la expresión analítica, dada en (3.38). Por otro lado, debido a la no existencia de polos de $S(E)$, $T(E)$ no presenta resonancias

así como tampoco $\tau(E)$ los presenta. Los máximos en $P(E)$ para la barrera y pozo de PT se deben a la variación de su numerador mas no al término en su denominador (ver ecuación (3.24)), ya que se debe de cumplir que $\Omega^-(E) \neq 0$ ($=0$ implica presencia de polos) para $E > 0$, como se demostró anteriormente. Los resultados presentados en la columna derecha de la Fig. 3.14 corresponden a un pozo.

El caso especial $V_0 = -6$, i.e., $T(E) = 1$ para toda energía, tiene mucha importancia, ya que nos ayuda a reafirmar que nuestro método de la Matriz de Reacción para el cálculo de las cantidades de dispersión, es confiable. Los resultados para este último caso se muestran en los paneles interiores de la columna derecha de la Fig. 3.14.

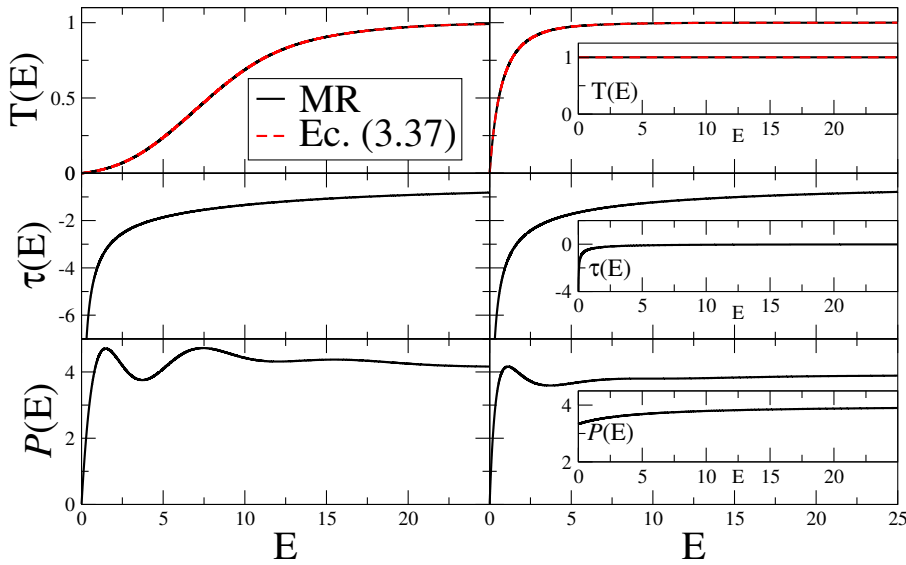


Figura 3.14: Cantidades de dispersión; $T(E)$, $\tau(E)$ y $P(E)$, en el sistema de dos canales para una barrera/pozo de potencial de Pöschl-Teller, ec. (3.37), con $\alpha = 3$ y $d = 4$. La columna izquierda (derecha) corresponde una barrera (pozo) con $V_0\alpha^2 = 10$ (-10). Las figuras en los interiores de la columna derecha corresponden a $V_0 = -6$, i.e., $T(E) = 1$. Hemos usado $N = 600$ términos en $R_{\nu\nu'}(E)$. Comparamos $T(E)$, obtenida por MR, con la ec. (3.38), encontrando un excelente acuerdo.

Ahora consideramos una barrera/pozo de potencial cosenoidal, ecuación (3.31), cuyas cantidades de dispersión para este potencial se muestran en la Fig. 3.15. Para el caso de la barrera cosenoidal (columna izquierda de la Fig. 3.15), los máximos en $\tau(E)$ y $P(E)$ se deben al punto en el cual la transmisión tiene un punto de inflexión. Para el pozo cosenoidal (columna derecha de la Fig. 3.15) presenta resonancias en la transmisión casi imperceptibles (señaladas por líneas verticales rojas), los cuales no los pudimos relacionar con los polos

de $S(E)$ debido a que son muy anchas. Por otro lado, vemos que los máximos en la transmisión suceden a energías *lejos* a las energías de reacción (líneas verticales en azul).

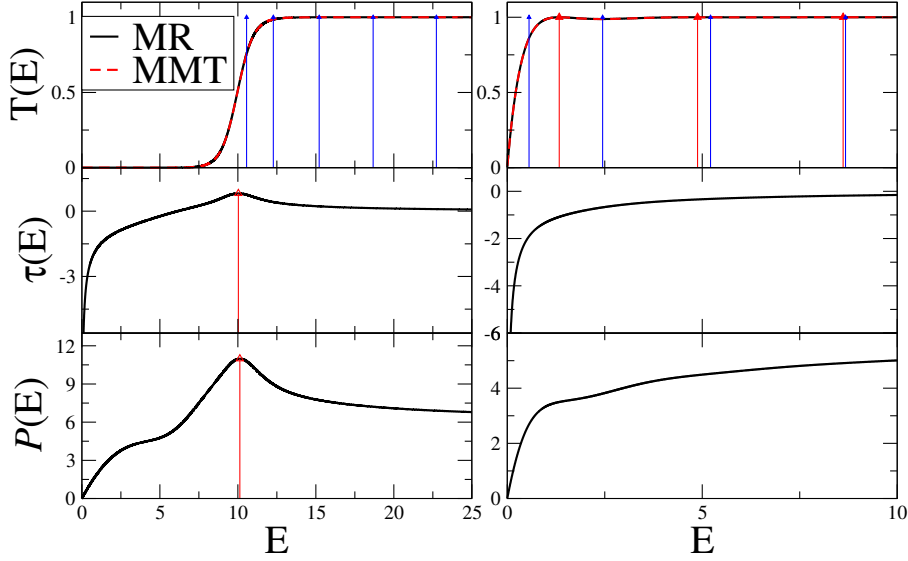


Figura 3.15: Cantidades de dispersión; $T(E)$, $\tau(E)$ y $P(E)$, en el sistema de dos canales para una barrera/pozo de potencial cosenoidal, ec. (3.31), con $m = 1$ y $d = 6$. La columna izquierda (derecha) corresponde a una barrera (pozo) con $V_0 = 10$ (-10). Aquí hemos usado $N = 600$ términos en los $R_{\nu\nu'}(E)$ para el cálculo de las CD. Comparamos $T(E)$, obtenida por MR, con la obtenida por el MMT, encontrando un excelente acuerdo. Las líneas verticales rojas [azules] denotan la posición de los máximos de las CD [E_λ].

3.5.7. CD para cadenas de potenciales, TMR vs. MMT

En el caso de dos canales hemos recurrido al Método de la Matriz de Transferencia (MMT) M para comparar los resultados del coeficiente de transmisión obtenidos por la matriz de reacción. Cabe mencionar que de la matriz M podemos obtener $S(E)$. Los elementos de M y $S(E)$ están directamente relacionados como (ver el Apéndice E):

$$\begin{aligned} S_{11} &= -M_{22}^{-1}M_{21}; & S_{12} &= M_{22}^{-1}, \\ S_{21} &= (M_{11}^*)^{-1}; & S_{22} &= M_{12}M_{22}^{-1}. \end{aligned} \quad (3.42)$$

Existe una ventaja desde el punto de vista teórico el usar la matriz de transferencia respecto de la matriz de dispersión y es que la matriz de transferencia permite la multiplicación serial; esto es, si consideramos

dos potenciales $V_1(x)$ y $V_2(x)$ separados una distancia d' , cuyas matrices de transferencia son M_1 y M_2 respectivamente, y sí los coeficientes de las ondas relacionados a la matriz M_1 son a^1, b^1 y a^2, b^2 (Izq. y Der.), y los coeficientes de las ondas relacionados a la matriz M_2 son a^2, b^2 y a^3, b^3 (Izq. y Der.); entonces el producto:

$$M = M_2 M_1. \quad (3.43)$$

Entonces, procedemos ahora a mostrar las CD para cadenas de potenciales periódicas compuestas por perfiles de barreras cuadradas (modelo de K-P), de PT y potencial oscilatorio. Dichos resultados se muestran en (a), (b) y (c) de la Fig. 3.16, respectivamente para $m = 19$ períodos.

Para el caso del modelo de Kronig Penney finito es posible, a través del formalismo de la MT, encontrar una expresión analítica cerrada para el coeficiente de transmisión para m barreras/pozos (T_m), la cual está dada como [27, 69]:

$$T_m = \frac{1}{1 + \left| \frac{r^2}{t^2} \right| \frac{\sin^2 mql}{\sin^2 ql}}, \quad (3.44)$$

donde ql es el número de onda de Bloch definida por la relación de dispersión $2 \cos ql = TrM \leq 2$, M es la matriz de transferencia para un periodo y l es la anchura de cada potencial. Notemos de la ecuación (3.44), que sí $TrM > 2$, entonces ql es imaginaria, así que el factor $\frac{\sin^2 mql}{\sin^2 ql}$ incrementará exponencialmente como $e^{(m-1)|ql|}$ y por lo tanto tendremos una región de no conducción (*gap*). Por otro lado, la región de mayor probabilidad de la transmisión se encuentra cuando $TrM < 2$ (banda de conducción), en tal caso, ql es real y varía de 0 a π . Por consiguiente, habrá exactamente $m - 1$ valores de ql para los cuales la transmisión es $T_m = 1^G$. Como es de esperarse entonces, para el caso de $m = 19$ barreras en el modelo de K-P, tendremos $m - 1 = 18$ picos de resonancia en las zonas de conducción, así como se puede ver en la Fig. 3.16 (a), para $V_0 = 10$ y $l = 0.5$. Las bandas de conducción, los *gaps* así como el número de picos de resonancias, también se ven reflejadas en $\tau(E)$ y $P(E)$. Resultados similares se encuentran para las cadenas de potenciales de Pösch-Teller ($V_0 \alpha^2 = 10$, $x_p = p \frac{d}{19}$ y $d = 20$, ver incisos (b) de la Fig. 3.16) y potenciales oscilatorios ($V_0 = 10$, $m = 19$ y $d = 20$, ver incisos (c) de la Fig. 3.16). Por comparación, los parámetros que hemos escogido para estas dos últimas cadenas son tales que las barreras tienen la misma altura, espaciamiento similares y centrados en la misma posición que para el modelo de K-P.

^GNote que valores de $ql = 0$ y π no dan $T_m = 1$, ya que la razón $\frac{\sin^2 mql}{\sin^2 ql} \neq 0$.

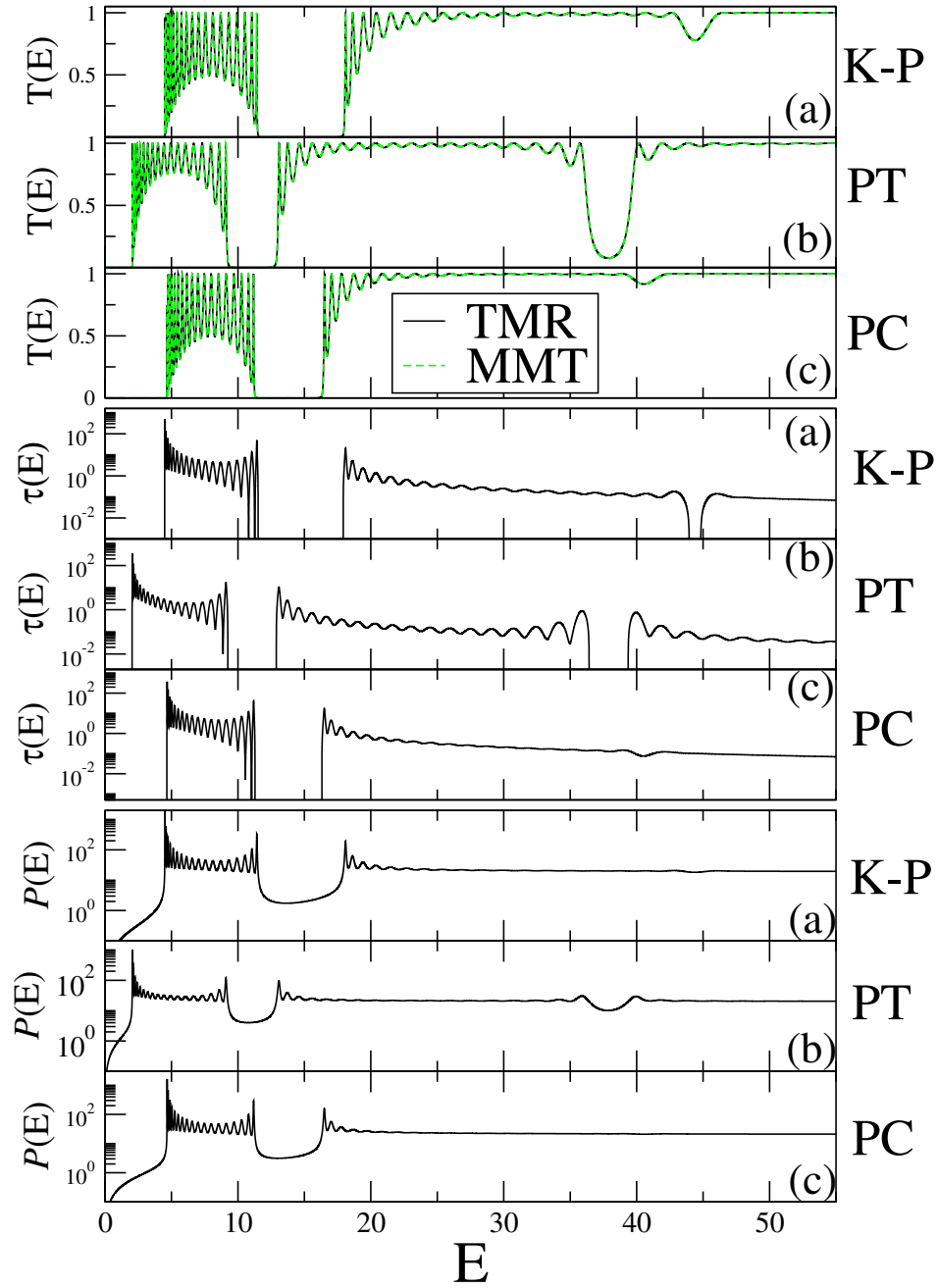


Figura 3.16: $T(E)$, $\tau(E)$ y $P(E)$ para los potenciales periódicos de (a) K-P para 19 barreras planas con $V_0 = 10$ y $d_i = l_i = 0.5$ (ver (3.32)). En (b) una cadena de PT para $P = 19$ barreras con $V_0\alpha^2 = 10$, $x_p = p\frac{d}{19}$ y $d = 20$ (ver ec. (3.33)) y en (c) el potencial cosenoidal con $V_0 = 10$, $m = 19$ y $d = 20$ (ver ec. (3.31)). Hemos usado $N = 1000$ en los $R_{\nu\nu'}(E)$.

3.5.8. Ventajas numéricas del método de la matriz de Reacción

Una de las ventajas de formular la matriz $S(E)$ en términos de la TMR la obtenemos en la parte numérica respecto a la matriz de transferencia. Esto se puede ver haciendo un análisis del número total de procesos que involucran tanto en la MT como en la Matriz de Reacción para formar la matriz de dispersión $S(E)$ en un solo punto de la energía, digamos E_i . Para esto, definamos el tiempo t_m (t_s) que una computadora tarda en hacer un proceso u operación de multiplicación (suma). Después de contar el número total de operaciones al multiplicar dos matrices de transferencia de 2×2 ($M_1 \times M_2$, por ejemplo), cuyos elementos son complejos, obtenemos:

$$16(t_m + t_s).$$

Como en el caso de la Matriz de Transferencia dividimos el potencial en P rectángulos (como se explica en el Apéndice E), la computadora se tardará un tiempo igual a $16P(t_m + t_s)$ para calcular, por ejemplo $T(E_i)$.

Haciendo el mismo conteo pero ahora en el coeficiente de transmisión en términos de la matriz R [ver la ecuación 3.10c)], encontramos que ésta involucra $10t_m + (6N + 1)t_s$, donde N es el número de términos considerados en la suma que define a la matriz $R(E_i)$. Si suponemos que $t_s \sim t_m \equiv t_c$, entonces, el tiempo total usando la Matriz de Transferencia (T_{MT}) se obtiene que es $T_{MT} \sim 32t_c$. Para el caso de la Matriz de Reacción obtenemos que el tiempo total (T_{MR}) es $T_{MR} \sim 6Nt_c$, para este último tiempo hemos supuesto que $11 \ll 6N$. De la discusión hecha anteriormente (ver sub-sección 3.5.1), sabemos que $N \sim 10^3$ para que $|E_R| \sim 10^{-3}$ hasta $E = E_0$. Por otro lado, la forma de aproximar nuestro potencial en el MMT es por una suma de Riemman, entonces el número de rectángulos debe ser tal que $P \gg 1$, esto para tener una buena aproximación del potencial. Sin embargo, hemos encontrado que con $P \sim 10^3$ ya tenemos una buena aproximación para casi cualquier potencial. Con esto: $T_{MT} \sim 10^4 t_c$ y $T_{MR} \sim 10^3 t_c$, es decir, el cálculos de las CD son más rápidos usando MR por un orden de magnitud respecto al método de la MT para una sola energía E_i .

Los resultados obtenidos en este análisis se corroboraron numéricamente tomando como ejemplo el potencial oscilatorio dado en la ecuación (3.31) con $m = 20$, $V_0 = 10$ y $d = 20$ cuya gráfica de $T(E)$ se muestra en la Fig. 3.16-(c). Hemos escogido este potencial debido a que hemos calculado los elementos del hamiltoniano interno [ver la ecuación (C.10)] en forma analítica. Los resultados de los Tiempos de Consumo totales (TC) para MT y MR se muestran en la Fig. 3.17, en donde, en la Fig. 3.17-(Izq.) calculamos TC fijando $N = 1000$ y $N = 2000$ para el cálculo de $T(E)$ por MR y un número de divisiones fijo $Div = 1500$

por el MMT. Con estos parámetros fijos, lo que hacemos es un barrido para diferentes particiones en la energía (E_P) hasta $E_0 = 100$, es decir, $\Delta E = E_0/E_P$. Mientras más grande sea E_p , más detalles de las CD podremos observar. Los símbolos abiertos son nuestros resultados numéricos mientras que las líneas discontinuas son la regresiones de dichos resultados, los cuales, después de hacer los ajustes, arrojan que:

$$TC_{MR} \sim 1.625 \times 10^{-5} E_p \text{ [seg]},$$

$$TC_{MT} \sim 6.77 \times 10^{-4} E_p \text{ [seg]}$$

donde TC_{MR} (TC_{MT}) es el tiempo total de computo para la MR (MT) para $N = 2000$. Aquí las pendientes de las curvas representan las tasas de crecimiento de los tiempos totales de computo y concuerdan con lo encontrado teóricamente, es decir, hay una diferencia de un orden de magnitud entre TC_{MR} respecto a TC_{MT} . Encontramos además, que TC_{MR} para $N = 1000$ (símbolos y línea discontinua en verde en la Fig. 3.17-(Izq.)) es la mitad respecto al caso cuando tomamos $N = 2000$, lo que indica que TC_{MR} crece linealmente con N . Por otro lado, en la Fig. 3.17-(Der.) calculamos TC para MT a diferentes números de divisiones ($P \equiv NDiv$) en el potencial y diferentes ΔE , cuyos resultados muestran que a menor ΔE y mayor número de divisiones del potencial, entonces mayor será el tiempo de consumo numérico.

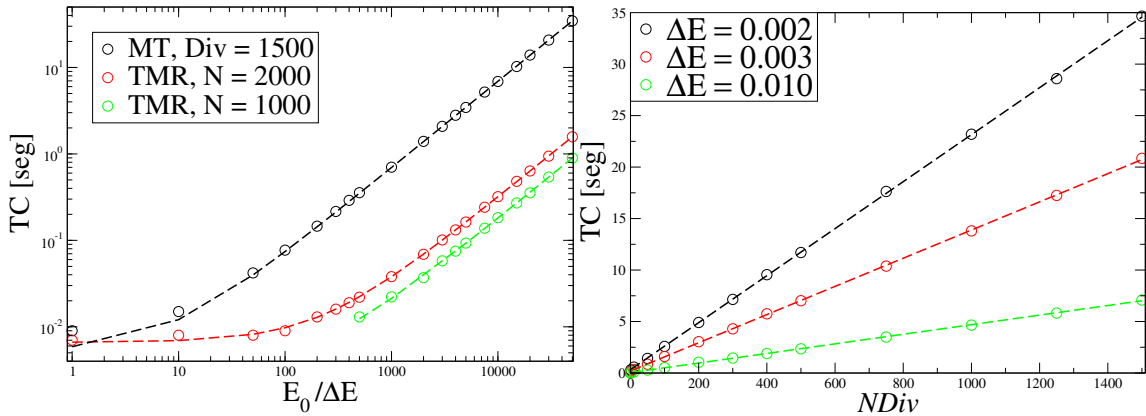


Figura 3.17: Tiempos de consumo para el cálculo del coeficiente de la transmisión para el potencial oscilatorio dado en la ec. (3.31) con $m = 20$, $V_0 = 10$ y $d = 20$. En el panel izquierdo compramos los tiempos de consumo entre la MR y la MT para diferentes E_p . En el panel derecho mostramos los resultados de TC que se consumen para el cálculo de $T(E)$ usando MT para diferentes números de divisiones en el potencial ($P \equiv NDiv$) y diferentes ΔE . Aquí $E_0 = 100$.

RESUMEN: *En este Capítulo hemos obtenido las cantidades de dispersión tales como los $S_{ij}(E)$, $\tau(E)$ y $P(E)$ en términos de la matriz R . Mostramos que estas cantidades tienen los mismos polos que los de la matriz $S(E)$. Tomando algunos potenciales representativos, mostramos que los resultados obtenidos usando la matriz R están en perfecto acuerdo con aquellos obtenidos por las expresiones exactas (para $V(x) = V_0$ y Pöschl-Teller para una barrera/pozo) y por aquellos obtenidos usando el MMT. Demostramos que el cálculo de las cantidades de dispersión usando el formalismo de la Matriz de Reacción es un orden de magnitud más rápido que calcularlas usando el formalismo de la matriz de transferencia.*

Capítulo 4

Aproximación a un nivel de las CD

En este capítulo obtenemos las cantidades de dispersión en la aproximación de un nivel. Primero se considera el caso de un canal, donde demostraremos que $A_\lambda(E_\lambda) \propto \Psi_\lambda^{-1}(x_2)$, lo cual indica que para una energía de incidencia $E \sim E_\lambda$, la función de onda en la región interna se acoplará con el λ -ésimo eigenestado de reacción y será proporcional a ésta. En seguida, para el sistema de dos canales, demostramos (para $V(x) = V(-x)$) que hay acoplamiento sólo entre eigenestados de diferente paridad. En consecuencia, esto último indica que para una energía de incidencia $E \sim E_\lambda$, la función de onda en la región interna estará formada principalmente por los primeros vecinos al λ -ésimo eigenestado de reacción. Además, demostramos que cuando las resonancias son aisladas, las CD se describen bien a través de una función Lorentziana.

4.1. $A_\lambda(E)$ para un canal

Dada la definición (2.11b)

$$A_\lambda(E) = \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\Psi_\lambda^*(x_2)}{E_\lambda - E} \partial_x \psi(E; x_2), \quad (4.1)$$

deseamos saber como se comportan los $A_\lambda(E)$ cuando $E \simeq E_\lambda$. ¿Es singular? Para investigar esto, procedamos de la siguiente manera. A partir de la ecuación (2.3), obtenemos

$$\partial_x \psi(E; x_2) = -ik(e^{-ikx_2} - S(E)e^{ikx_2}), \quad (4.2)$$

y expresando $S(E)$ en términos de la función de Reacción [ver ecuación (2.63)], tenemos

$$\partial_x \psi(E; x_2) = -\frac{2ike^{-ikx_2}}{1 - ikR(E)}. \quad (4.3)$$

La expresión (4.3) nos revela que $\partial_x \psi(E; x_2)$ tiene los mismos polos que la función $S(E)$ y que es cero cuando $E \rightarrow E_\lambda$ (ya que $R(E_\lambda) \rightarrow \infty$).

Sustituyendo la ecuación (4.3) en (4.1) llegamos a

$$A_\lambda(E) = -\frac{\hbar^2 \Psi_\lambda^*(x_2)}{2\mu} \frac{2ike^{-ikx_2}}{E_\lambda - E} \frac{1}{1 - ikR(E)}. \quad (4.4)$$

Ya que el numerador de (4.4) no es cero para ninguna $E > 0$, y el denominador es cero para $E = E_\lambda$ y en los polos de $S(E)$, no es obvio que $A_\lambda(E)$ no sea singular para $E = E_\lambda$ y $z = z_\lambda$ (polos de $S(E)$).

Hasta aquí no hemos hecho ninguna aproximación. Entonces, para determinar $A_\lambda(E)$ cuando E coincide con la energía de algún eigenvalor de reacción, por ejemplo, $E = E_{\lambda'}$, notemos que el término dominante en la serie que define a la función $R(E)$ [ver ecuación (2.16)] es

$$R(E \sim E_{\lambda'}) \rightarrow \frac{\gamma_{\lambda'}^2}{E_{\lambda'} - E}; \quad E \rightarrow E_{\lambda'}. \quad (4.5)$$

Sustituyendo la aproximación (4.5) en la ecuación (4.4), obtenemos

$$A_\lambda(E \sim E_{\lambda'}) \sim -\frac{\hbar^2 \Psi_\lambda^*(x_2) 2ike^{-ikx_2}}{2\mu} \frac{(E_{\lambda'} - E)}{(E_\lambda - E)} \frac{1}{E_{\lambda'} - E - ik\gamma_{\lambda'}^2}. \quad (4.6)$$

Cuando $E_\lambda \neq E_{\lambda'}$ y $E \rightarrow E_{\lambda'}$, vemos que (4.6) tiende a cero:

$$A_\lambda(E \sim E_{\lambda'}) \rightarrow 0. \quad (4.7)$$

Para $E_\lambda = E_{\lambda'}$, la ecuación (4.6) se reduce a

$$A_\lambda(E \sim E_\lambda) \sim \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{2ik\Psi_\lambda^*(x_2)}{E - E_\lambda + ik\gamma_\lambda^2} e^{-ikx_2} = \frac{2e^{-ikx_2}}{\Psi_\lambda(x_2)} \frac{ik\gamma_\lambda^2}{E - E_\lambda + ik\gamma_\lambda^2}, \quad (4.8)$$

donde hemos usado la definición del ancho reducido en el numerador: $\gamma_\lambda^2 = \frac{\hbar^2}{2\mu} |\Psi_\lambda(x_2)|^2$. Adicionalmente,

para $E - E_\lambda \sim 0$, la ec. (4.8) se reduce a

$$A_\lambda(E \sim E_\lambda) \sim \frac{2e^{-ikx_2}}{\Psi_\lambda(x_2)} \quad \Rightarrow \quad |A_\lambda(E \sim E_\lambda)|^2 \sim \frac{4}{|\Psi_\lambda(x_2)|^2}. \quad (4.9)$$

Como $A_\lambda(E) \rightarrow 0$ cuando $E \rightarrow E_{\lambda'} \neq E_\lambda$, concluimos que

$$A_\lambda(E \sim E_{\lambda'}) \sim \frac{2e^{-ikx_2}}{\Psi_\lambda(x_2)} \delta_{\lambda\lambda'}. \quad (4.10)$$

Para el caso particular de una barrera/pozo de potencial plana $\Psi_\lambda(x_2) = (-)^{\lambda+1} \sqrt{2/x_2}$. En consecuencia, (4.10) se reduce a

$$A_\lambda(E \sim E_{\lambda'}) \sim (-1)^{\lambda+1} \frac{2e^{-ikx_2}}{\sqrt{2/x_2}} \delta_{\lambda\lambda'}. \quad (4.11)$$

La expresión (4.10) demuestra que $A_\lambda(E)$ no es singular para ninguna energía y que para energías cercanas a una E_λ , el coeficiente predominante es $A_\lambda(E_\lambda)$. En otras palabras, en la región de reacción ($0 < x \leq x_2$) para $E \sim E_\lambda$, la función de onda dispersada estará dada aproximadamente por

$$\psi(E \sim E_\lambda, x) \sim A_\lambda(E \sim E_\lambda) \Psi_\lambda(x) = \frac{2e^{-ikx_2}}{\Psi_\lambda(x_2)} \Psi_\lambda(x). \quad (4.12)$$

La ecuación (4.12) indica además que $|\psi(E \sim E_\lambda, x_2)|^2 \sim 4$ para cualquier potencial. En contraste, para una energía de incidencia diferente a una de reacción, entonces, son necesarios *todos* los eigenestados de reacción para formar la función de onda dispersada en la región interna.

A continuación mostramos resultados numéricos para diferentes potenciales. Como primer caso consideraremos una barrera [pozo] de potencial plana para $V_0 = 10$ [-10] y $x_2 = 0.5$ [2]. Para estos parámetros, en la Fig. 4.1(a) [(b)] mostramos los coeficientes para la barrera^A [pozo], donde hemos tomando tres energías distintas, de las cuales, dos de ellas corresponden a las energías de reacción y cuyo comportamiento está en perfecto acuerdo con los resultados obtenidos en (4.10). Por otro lado, para una energía $E = E_{pro} = \frac{1}{2}(E_{\lambda'+1} + E_{\lambda'})$, indica que debemos de tomar en cuenta *todos* los eigenestados de reacción para formar la función de onda en la región interna. Adicionalmente, la Fig. 4.2 muestra el modulo al cuadrado de la función de onda dispersada para una energía de incidencia $E \sim E_{\lambda'}$ para (a) [(b)] una barrera [pozo] plana con $(V_0, x_2) = (10, 0.5)[-10, 2]$ y se compara con el resultado dado en (4.12) encontrando un

^ALos resultados para el pozo plano con $(V_0, x_2) = (-10, 0.5)$ son similares al de la barrera plana con $(V_0, x_2) = (10, 0.5)$ y ya no los mostramos, entonces, optamos por $(V_0, x_2) = (-10, 2)$, esto para contrastar resultados.

excelente acuerdo.

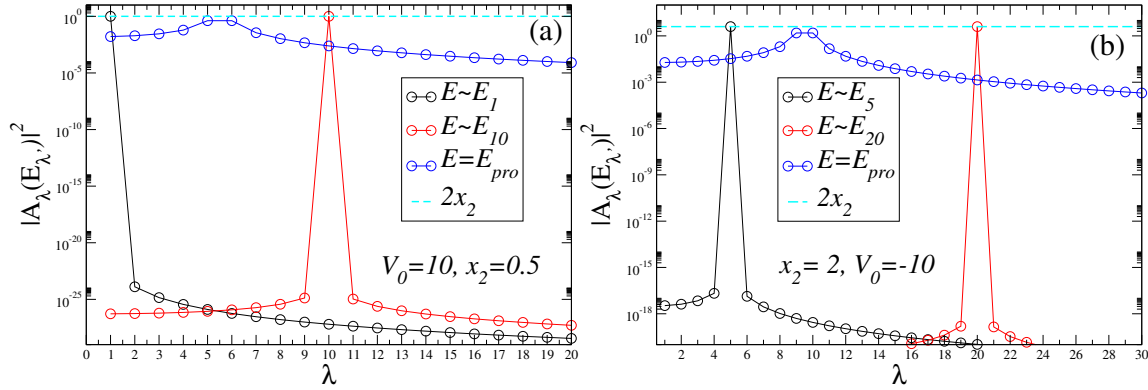


Figura 4.1: $|A_\lambda(E_{\lambda'})|^2$ para un canal. En (a) una barrera plana con $(V_0, x_2) = (10, 1/2)$, $E_{1(10)} = 19.869(3572.93)$ y $E_{pro} = 0.5(E_5 + E_6) = 1006.83$. En (b) un pozo plano con $(V_0, x_2) = (-10, 2)$, $E_{5(20)} = 39.964(928.229)$ y $E_{pro} = 0.5(E_9 + E_{10}) = 190.476$. Los resultados para $E \sim E_{\lambda'}$ están en perfecto acuerdo con los resultados obtenidos en (4.7) y (4.11). Para $E = E_{pro}$ observamos que *todos los coeficientes* son activados. La línea discontinua en color cian marca el valor $2x_2 = 1$ [4]. Los círculos en negro, azul y rojo fueron calculados usando $N = 500$ términos en $R(E)$.

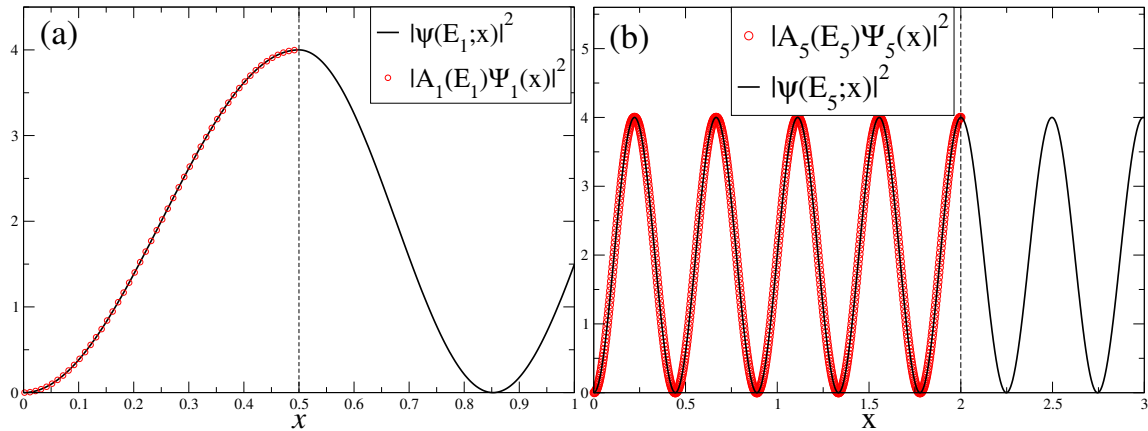


Figura 4.2: En esta figura comparamos $|\psi(E_\lambda; x)|^2$ con el resultado dado en (4.12) en el sistema de un canal para (a) una barrera plana con $(V_0, x_2) = (10, 0.5)$ y (b) un pozo plano para $(V_0, x_2) = (-10, 2)$. Aquí $E_1 = 19.869$ y $E_5 = 39.964$. Los resultados están en perfecto acuerdo con la ec. (4.12). La línea perpendicular discontinua denota la posición de la frontera de reacción que coincide con el ancho de los potenciales.

En los ejemplos anteriores hemos puesto a prueba nuestros resultados analíticos tomando como ejemplo

una barrera/pozo de potencial constante. Ahora, el objetivo es mostrar que nuestras deducciones son validas en general, por lo que en la Fig. 4.3 gráficamos $|A_\lambda(E_{\lambda'})|^2$ para el potencial tipo Pöschl-Teller dado en (3.30) con $(V_0, \alpha, x_2) = (2, 3, 4)$ centrado en $x_0 = 2$. Al igual que en los ejemplos anteriores, gráficamos los coeficientes tomando tres energías distintas, dos valores cercanas a las de reacción y $E_{pro} = \frac{1}{2}(E_{\lambda'=4} + E_{\lambda'=5})$. Para $E \sim E_\lambda$ se encuentra nuevamente una perfecta correspondencia con los encontrados en (4.10). Del mismo modo y para los mismos parámetros, la Fig. 4.4 muestra el modulo al cuadrado de la función de onda dispersada para una energía de incidencia $E \sim E_6$ y lo comparamos con el resultado dado en (4.12) encontrando de igual forma un excelente acuerdo.

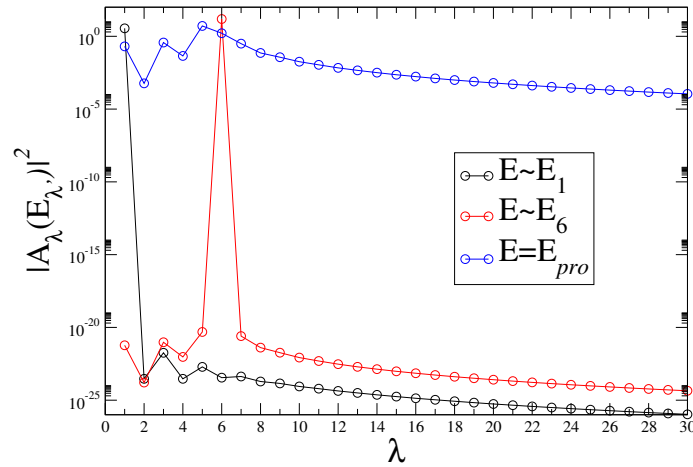


Figura 4.3: $|A_\lambda(E \sim E_{\lambda'})|^2$ para el potencial de Pöschl-Teller, ec. (3.30), con $(V_0, \alpha, x_2) = (2, 3, 4)$. En este caso, $E_{1[6]} = 0.8171 [22.211]$ y $E_{pro} = \frac{1}{2}(E_{\lambda'=5} + E_{\lambda'=6}) = 19.202$. Los resultados están en perfecto acuerdo con la ec. (4.9), i.e., $|A_{1[6]}(E \sim E_{1[6]})|^2 \sim 3.535 [15.384]$. Los círculos en negro, azul y rojo fueron calculados usando $N = 500$ términos para $R(E)$.

Notemos que existe una diferencia entre el comportamiento de los $|A_\lambda(E_{\lambda'})|^2$ para un potencial constante ($V(x) = \pm V_0$) con un potencial del tipo PT (en este caso). Para el potencial contante $|A_\lambda(E_\lambda)|^2 = 2x_2$, i.e., son independiente de λ y $\pm V_0$ (ver Fig. 4.1), ya que $\Psi_\lambda(x) = \sqrt{\frac{2}{x_2}} \sin[(\lambda - 0.5)\pi x/x_2] \Rightarrow \Psi_\lambda(x_2) = (-1)^{\lambda+1} \sqrt{\frac{2}{x_2}}$. Para el caso de un potencial más general, como lo es en este caso el PT, el comportamiento de $|A_\lambda(E_{\lambda'})|^2$ es *más complicado*, ya que $\Psi_\lambda(x) = \sqrt{\frac{2}{x_2}} \sum_m C_m^\lambda \sin[(m - 0.5)\pi x/x_2] \Rightarrow \Psi_\lambda(x_2) = \sqrt{\frac{2}{x_2}} \sum_m (-1)^{m+1} C_m^\lambda$, donde C_m^λ es el λ -ésimo eigenvector del hamiltoniano interno (ver Apéndice C). Es decir, los coeficientes tendrán diferentes amplitudes dependiendo de $\Psi_\lambda(x_2)$. Específicamente, en la Fig. 4.5, gráficamos los eigenvectores de reacción $|\Psi_\lambda(x_2)|^2$ como función de λ para el potencial PT de (3.30) [con

$(V_0, \alpha, x_2) = (2, 3, 4)$]. También en la Fig. 4.5 podemos observar que los primeros eigenvectores ($\lambda \lesssim 20$) tienen un comportamiento *oscilante* para después, estabilizarse. Este comportamiento indica que para una energía del orden de $E \gtrsim E_{\lambda=20}$, la partícula ve al potencial como si éste fuese un potencial constante (en este caso una barrera) de ancho $x_2 = 4$.

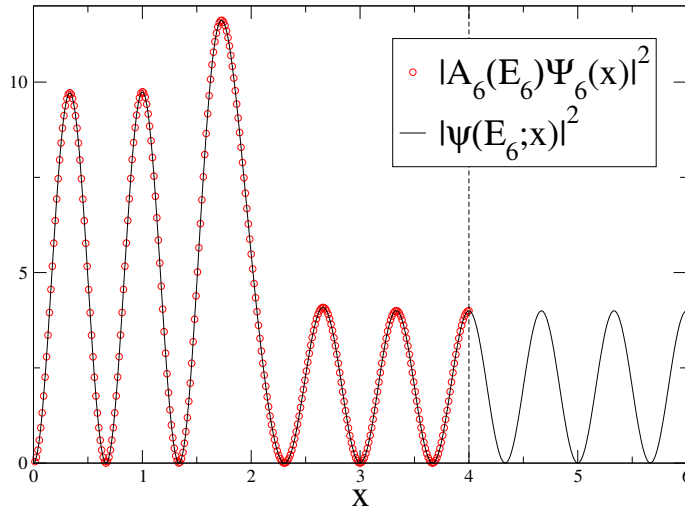


Figura 4.4: Absoluto al cuadrado de la función de onda dispersada para el potencial de PT dado en (3.30) para $(V_0, \alpha, x_2) = (2, 3, 4)$. La energía de incidencia es $E_6 = 22.211$.

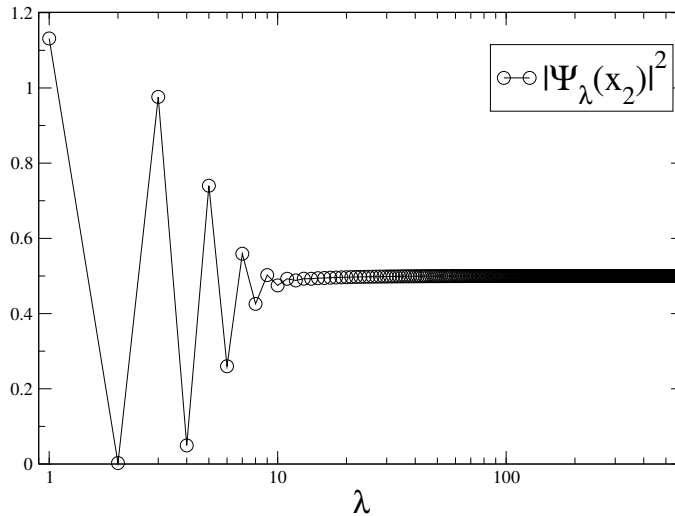


Figura 4.5: $\gamma_\lambda^2 = \frac{\hbar^2}{2\mu} |\Psi_\lambda(x_2)|^2$ ($\frac{\hbar^2}{2\mu} = 1$) para el potencial de PT dado en (3.30) con $(V_0, \alpha, x_2) = (2, 3, 4)$.

Hasta aquí hemos estudiado el comportamiento de $A_\lambda(E_{\lambda'})$ para el sistema de un canal, en la siguiente sección analizaremos lo mismo pero para el sistema de dos canales.

4.2. $A_\lambda(E)$ para dos canales

La expresión para los coeficientes con $B = 0$ en términos de los elementos de la matriz de reacción es (ver Apéndice D):

$$A_\lambda(E) = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{2ik e^{-ikx_D} \Psi_\lambda(x_D) - ik[\Psi_\lambda^*(x_D)R_{II} - \Psi_\lambda^*(x_I)R_{ID}]}{E_\lambda - E} \frac{1}{\Omega^-(E)}. \quad (4.13)$$

Para averiguar si $A_\lambda(E)$ diverge o no para $E \sim E_{\lambda'}$, supondremos por simplicidad que $x_D = -x_I$ y además se supondrá que el potencial es simétrico. Estas suposiciones van a asegurar que los Ψ_λ tengan paridad definida, es decir,

$$\Psi_\lambda(x_D) = (-1)^\lambda \Psi_\lambda(x_I). \quad (4.14)$$

Entonces, para $E \sim E_{\lambda'}$, la serie dada en la ecuación (2.29) la podemos aproximar manteniendo únicamente el término λ' -ésimo, es decir,

$$R_{\nu\nu'}(E \sim E_{\lambda'}) \simeq \frac{\gamma_{\lambda'}^{\nu\nu'}}{E_{\lambda'} - E}, \quad (4.15)$$

con $\gamma_{\lambda'}^{\nu\nu'} = \frac{\hbar^2}{2\mu} \Psi_\lambda^*(x_\nu) \Psi_\lambda(x_{\nu'})$. Después de usar (4.14) en (4.15) se obtiene que $R_{II}(E \sim E_{\lambda'}) = R_{DD}(E \sim E_{\lambda'}) \simeq \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{|\Psi_{\lambda'}(x_D)|^2}{E_{\lambda'} - E}$ y $R_{ID}(E \sim E_{\lambda'}) = R_{DI}(E \sim E_{\lambda'}) \simeq (-1)^{\lambda'} R_{DD}(E \sim E_{\lambda'})$ y por consiguiente $\Omega^-(E \sim E_{\lambda'}) \simeq 1 - 2ikR_{DD} = \frac{E_{\lambda'} - E - 2ik\frac{\hbar^2}{2\mu} |\Psi_{\lambda'}(x_D)|^2}{E_{\lambda'} - E}$.

Sustituyendo estas aproximaciones para $R_{\nu\nu'}(E \sim E_{\lambda'})$ en la ecuación (4.13), obtenemos

$$\begin{aligned} A_\lambda(E \sim E_{\lambda'}) &\simeq -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{2ik e^{-ikx_D}}{E_\lambda - E} \left[\frac{\Psi_\lambda^*(x_D) - \frac{ik\hbar^2}{2\mu} (\Psi_\lambda^*(x_D) \frac{|\Psi_{\lambda'}(x_I)|^2}{E_{\lambda'} - E} - \Psi_\lambda^*(x_I) \frac{\Psi_{\lambda'}^*(x_I) \Psi_{\lambda'}(x_D)}{E_{\lambda'} - E})}{\frac{E_{\lambda'} - E - \frac{\hbar^2}{2\mu} 2ik |\Psi_{\lambda'}(x_D)|^2}{E_{\lambda'} - E}} \right], \\ &\simeq -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{2ik \Psi_\lambda^*(x_D) e^{-ikx_D}}{E_\lambda - E} \left[\frac{(E_{\lambda'} - E) - \frac{ik\hbar^2}{2\mu} |\Psi_{\lambda'}(x_D)|^2 (1 - (-1)^{\lambda+\lambda'})}{E_{\lambda'} - E - \frac{\hbar^2}{2\mu} 2ik |\Psi_{\lambda'}(x_D)|^2} \right]. \quad (4.16) \end{aligned}$$

La ecuación (4.16) muestra que en general $A_\lambda(E \sim E_{\lambda'}) \neq 0$ y por consiguiente, para una energía de incidencia $E \sim E_{\lambda'}$ la función de onda dispersada en la región interna, no será proporcional al λ -ésimo eigenestado de reacción como en el caso de un canal. A continuación analizaremos (4.16) por separado considerando los casos $\lambda = \lambda'$ y $\lambda \neq \lambda'$, respectivamente.

Para $\lambda = \lambda'$, la ecuación (4.16) se reduce a (tomando en cuenta que $E - E_\lambda \sim 0$)

$$A_\lambda(E \sim E_\lambda) \simeq e^{-ikx_D} (\Psi_\lambda(x_D))^{-1}, \quad \Rightarrow |A_\lambda(E \sim E_\lambda)|^2 \simeq |\Psi_\lambda(x_D)|^{-2}. \quad (4.17)$$

El resultado (4.17) difiere por el factor 4 respecto al resultado de un canal (ver ecuación (4.9)).

Para $\lambda \neq \lambda'$, nuevamente debemos de tomar en cuenta que el término $E - E_{\lambda'} \sim 0$ y en consecuencia, la ecuación (4.16) se reduce a

$$A_\lambda(E \sim E_{\lambda'}) \simeq \frac{i \frac{\hbar^2}{2\mu} k \Psi_\lambda^*(x_D) e^{-ikx_D}}{E_\lambda - E_{\lambda'}} [1 - (-1)^{\lambda+\lambda'}] \Rightarrow |A_\lambda(E \sim E_{\lambda'})|^2 \simeq \frac{|\frac{\hbar^2}{2\mu} k \Psi_\lambda(x_D)|^2}{(E_\lambda - E_{\lambda'})^2} [1 - (-1)^{\lambda+\lambda'}]^2. \quad (4.18)$$

La ecuación (4.18) indica que hay acoplamiento sólo entre es eigenestados de diferente paridad ($\lambda + \lambda' = \text{impar}$).

Los resultados obtenidos en (4.17) y (4.18) se pueden resumir en una sola ecuación como

$$|A_\lambda(E \sim E_{\lambda'})|^2 \sim \begin{cases} |\Psi_\lambda(x_D)|^{-2}, & \lambda = \lambda', \\ 0, & \lambda + \lambda' = \text{par} \\ 4 \frac{\Gamma_\lambda^2}{(E_\lambda - E_{\lambda'})^2}, & \lambda + \lambda' = \text{impar} \end{cases} \quad (4.19)$$

donde hemos usados $\Gamma_\lambda = |\frac{\hbar^2}{2\mu} k \Psi_\lambda(x_D)|^2$. La ecuación (4.19) muestra que para una energía residente igual al de un eigenvalor de reacción, digamos $E_{\lambda'}$, los estados de reacción con la misma paridad que $\Psi_{\lambda'}$ no participan en la formación de la función de onda en la región interna (región de reacción). Aquellos estados con diferente paridad a Ψ_λ contribuyen con intensidades que decaen como $1/(E_\lambda - E_{\lambda'})^2$.

En lo que sigue, vamos a considerar algunos ejemplos para poner a prueba nuestros resultados analíticos. Comencemos con el potencial $V(x) = V_0 = -10$ y $d = 2, 4$ y 10 , para los cuales las primeras resonancias en la transmisión van de anchas a angostas. En la Fig. 4.6 mostramos los resultados numéricos para $|A_\lambda(E \sim E_{\lambda'})|^2$ con $V_0 = -10$ y diferentes valores de d . Para $d = 2$ escogemos tres energías, dos de ellas corresponden a las energías de reacción ($E_5 = 29.478$ y $E_{10} = 189.859$) y una *intermedia* ($E_{pro} = \frac{1}{2}(E_9 + E_{10}) = 168.887$), para esta última, vemos que son activados *todos* los coeficientes. Para $d = 4(10)$ se evalúa $|A_\lambda(E_{\lambda'})|^2$ en $E_{10(20)}$ y se obtiene nuevamente una perfecta correspondencia con lo obtenido en (4.19). Para $E_{pro} = \frac{1}{2}(E_{9[19]} + E_{10[20]}) = 34.715[23.795]$ y al igual que en el ejemplo anterior,

para esta energía todos los coeficientes son activados.

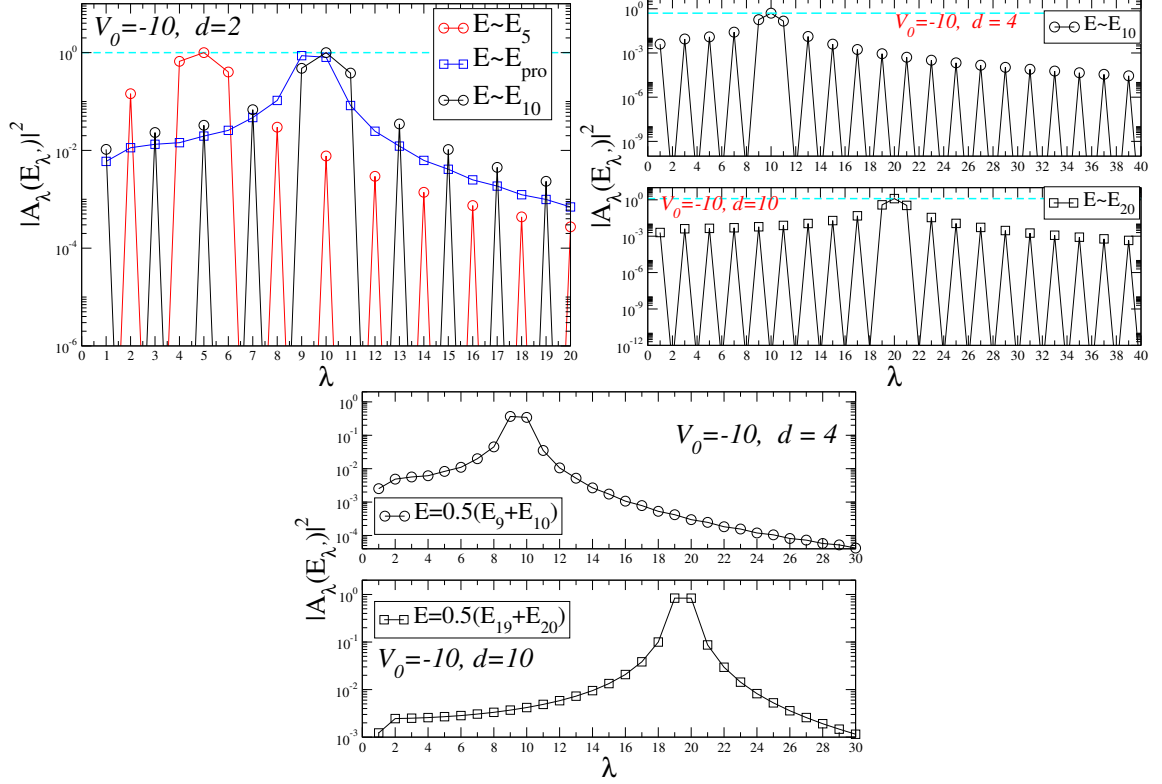


Figura 4.6: $|A_\lambda(E \sim E_{\lambda'})|^2$ para un pozo plano, $V_0 = -10$, dos canales. Para $d = 2$, $E_{5(10)[pro]} = 29.478(189.859)[168.887]$. Para $d = 4[10]$, tomamos $E_{10[20]} = 39.964[25.629]$ y $E_{pro} = \frac{1}{2}(E_{9[19]} + E_{10[20]}) = 34.715[23.795]$. La línea discontinua en color cian señala el resultado dado en (4.17). Los símbolos en negro, azul y rojo fueron calculados usando $N = 500$ términos para los $R_{\nu\nu'}(E)$.

Hasta aquí hemos discutido el caso de potenciales invariantes ante paridad. Ahora consideremos un potencial modulado de la siguiente forma

$$V(x) = V_0 + \epsilon \cos\left(\frac{(\ell + 0.5)\pi x}{d}\right) + \epsilon' \sin\left(\frac{\ell' \pi x}{d}\right), \quad (4.20)$$

donde $d = x_D - x_I$, $\ell(\ell')$ denota el número de períodos y $\epsilon(\epsilon')$ denota la amplitud de la perturbación. Físicamente este potencial puede describir una partícula (electrón) que se mueve dentro de un arreglo periódico ($\epsilon \neq 0, \epsilon' = 0$), impar ($\epsilon = 0, \epsilon' \neq 0$) y antisimétrico ($\epsilon, \epsilon' \neq 0$).

Entonces, en la Fig. 4.7 mostramos los resultados numéricos de los $|A_\lambda(E \sim E_{\lambda'})|^2$ debidos al potencial

dado en (4.20) para $(V_0, d) = (10, 6)$ y $\ell(\ell') = 6(6)$ y diferentes valores del par (ϵ, ϵ') . En todos los casos hemos incluido $N = 600$ términos en las series $R_{\nu\nu'}(E)$. También, consideramos únicamente una energía de reacción ($E \sim E_4$), ya que para otros valores de las energías de reacción el comportamiento es similar. También ya no mostramos el comportamiento de los coeficientes evaluadas en energías E_{pro} ya que encontramos resultados similares que en los ejemplos anteriores, i.e., para $E = E_{pro}$ son activados todos los coeficientes. Todos los resultados están en perfecto acuerdo con el resultado analítico encontrado en la ecuación (4.19).

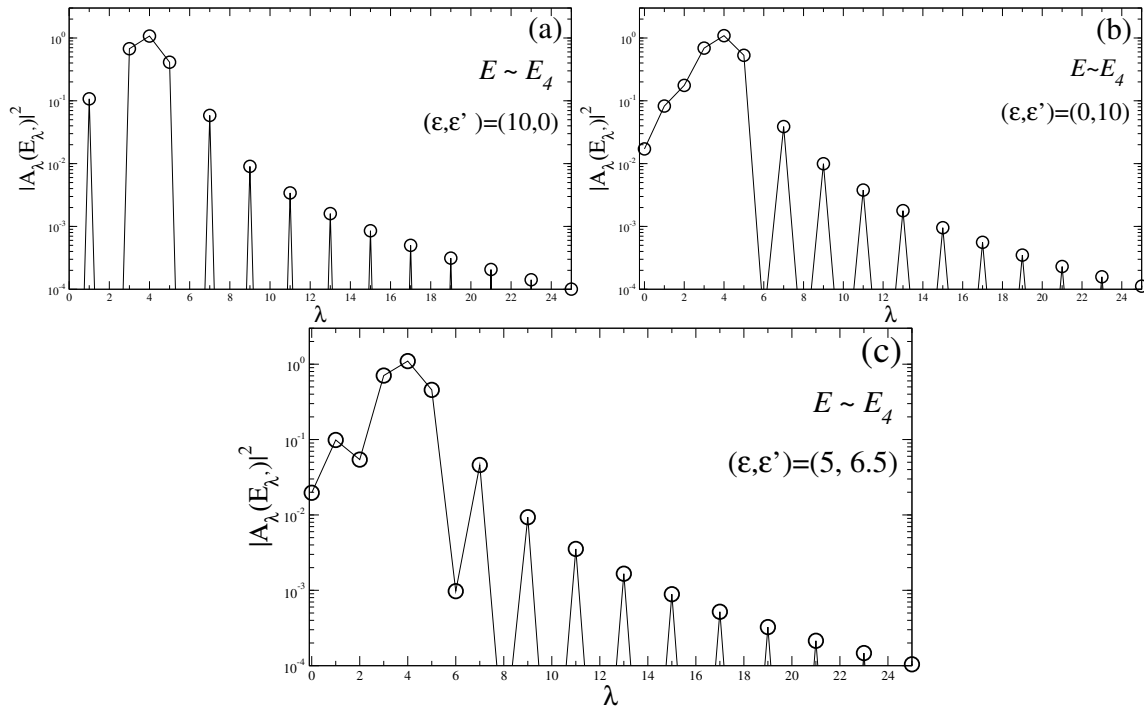


Figura 4.7: Comportamiento de $|A_\lambda(E \sim E_\lambda)|^2$ debido al potencial oscilante dado en (4.20) con $(V_0, d) = (10, 6)$ y $(\ell, \ell') = (6, 6)$. Los símbolos fueron obtenidos usando $N = 600$ términos en la matriz de Reacción. (a) corresponde a los coeficiente de un potencial par, (b) a un potencial impar y (c) a un potencial asimétrico, cuyos valores del par (ϵ, ϵ') se muestran en cada panel.

Dado que la ecuación (4.19) se obtuvo suponiendo simetría par del potencial, en los ejemplos (b) y (c) de la Fig. 4.7, notamos que ésta funciona en general, excepto para los primeros vecinos al λ -ésimo coeficiente.

En la Fig. 4.8 comparamos $|\psi(E_\lambda; x)|^2$ usando $N = 600$ términos en las series que definen los elementos de la Matriz de reacción con aquellos obtenidos usando pocos términos. Esto lo hacemos porque la ecuación

(4.19) sugiere fuertemente que la función de onda dispersada en la región interna puede aproximarse con sólo pocos estados de reacción.

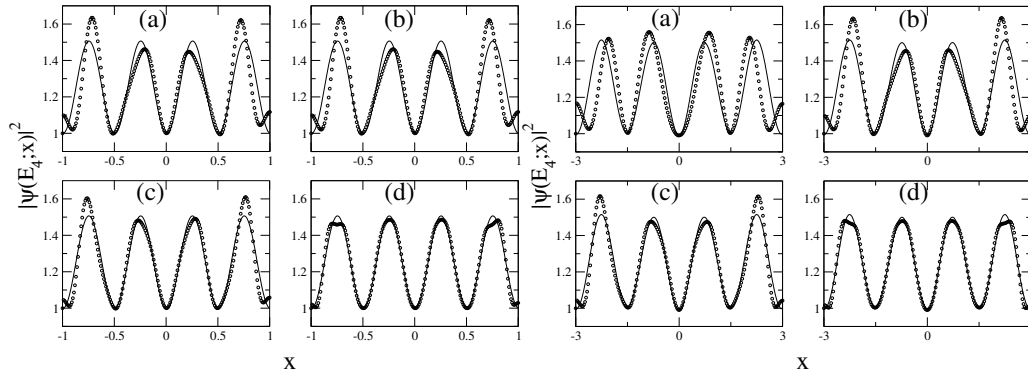


Figura 4.8: Absoluto al cuadrado de la función de onda dispersada en la región interna para el sistema de dos canales. (Izq.) corresponde a una barrera plana con $V_0 = 10$ y $d = 2$. (Der.) es para un potencial par con $V_0 = 10$, $d = 6$ y $\epsilon = 3$. En este caso comparamos los resultados obtenidos usando $N = 600$ términos en la Matriz de Reacción (línea continua) con aquellos obtenidos considerando (a) 8, (b) 10, (c) 14 (d) 20 términos (símbolos).

4.3. Cantidades de dispersión en la aproximación a un nivel

El acuerdo encontrado entre las predicciones de nuestras expresiones analíticas para A_λ con E cercana a algún nivel de reacción $E_{\lambda'}$ con los cálculos numéricos de $\psi(E; x)$ en la región de reacción y el hecho de que nuestra aproximación equivale a considerar sólo un término en la serie que define $R(E)$, nos motiva a examinar en esta subsección las cantidades de dispersión en la aproximación de un solo nivel. Comenzaremos estudiando las CD en el sistema de un canal y posteriormente abordaremos el caso de dos canales.

4.3.1. $\tau(E)$ en la aproximación a un nivel; un canal

Para obtener la expresión del tiempo de demora en un canal, $\tau(E)$, al rededor de una energía de reacción, debemos de considerar la aproximación de la función de reacción de un solo nivel, dada en la ecuación (4.5)

y sustituirla en la ecuación (3.2), con lo cual, obtenemos

$$\tau(E \sim E_\lambda) \simeq 2 \frac{1}{1 + k^2 \frac{\gamma_\lambda^4}{(E_\lambda - E)^2}} \left[\frac{\mu \gamma_\lambda^2}{\hbar k (E_\lambda - E)} + \frac{\hbar k \gamma_\lambda^2}{(E_\lambda - E)^2} \right] \quad (4.21a)$$

$$\simeq 2 \frac{1}{(E_\lambda - E)^2 + k^2 \gamma_\lambda^4} \left[\frac{\mu \gamma_\lambda^2 (E_\lambda - E)}{\hbar k} + \hbar k \gamma_\lambda^2 \right] \quad (4.21b)$$

$$\simeq 2 \frac{\hbar k \gamma_\lambda^2}{(E_\lambda - E)^2 + k^2 \gamma_\lambda^4} = 2\hbar \frac{\Gamma_\lambda/2}{(E_\lambda - E)^2 + (\Gamma_\lambda/2)^2}. \quad (4.21c)$$

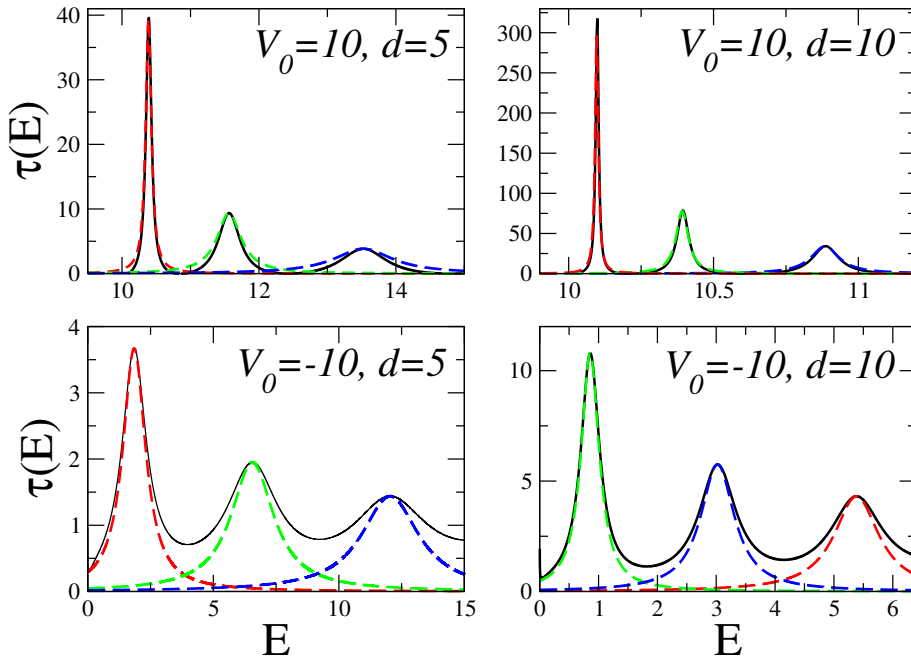


Figura 4.9: Comparación de $\tau(E)$, en un canal, entre la ec. (3.2) para $N = 300$ [líneas continuas] y la ec. (4.21c) [líneas discontinuas] para una barrera/pozo de potencial plana para diferentes valores del par (V_0, x_2) (dados en cada panel). Los anchos (centros) de las resonancias se aproximan bien con $\Gamma_\lambda \simeq \text{Im}[z_\lambda]$ ($E_\lambda \sim \text{Re}[z_\lambda]$), ver Cuadro 4.1.

Para pasar de (4.21b) a (4.21c) hemos despreciado el término $\frac{\mu \gamma_\lambda^2 (E_\lambda - E)}{\hbar k}$ ya que tiende a cero conforme $E \rightarrow E_\lambda$ y por lo tanto no contribuye a la descripción de $\tau(E_\lambda)$. Por otro lado, en (4.21c) hemos tomado la definición de la anchura de la resonancia como [5]:

$$\frac{1}{2} \Gamma_\lambda \equiv \sqrt{2\mu E_\lambda / \hbar^2 \gamma_\lambda^2}. \quad (4.22)$$

La ecuación (4.21c) nos indica que para resonancias suficientemente aisladas, obtenemos el resultado bien conocido de que el tiempo de demora está descrita por una función Lorentziana con anchura Γ_λ .

En la Fig. 4.9 comparamos los resultados obtenidos para el tiempo de demora en el sistema de un canal usando la ecuación (3.2) para $N = 300$ [línea continua] con los de la ecuación (4.21c) [líneas discontinuas] para una barrera/pozo plana de potencial con diferentes valores del par (V_0, x_2) . Los valores de los anchos de las resonancias y de sus centros (cuando son suficientemente aisladas) están bien aproximados por $\Gamma_\lambda \simeq \text{Im}[z_\lambda]$ y $E_\lambda \sim \omega_\lambda = \text{Re}[z_\lambda]$, respectivamente (ver el Cuadro 4.1). Por otro lado, podemos observar que la descripción de $\tau(E)$ a través de (4.21c) es cada vez mejor mientras más grande sea $\beta^2 = x_2^2|V_0|$ y para las primeras resonancias, esto debido a que, mientras la energía crece, las anchuras se hacen cada vez más amplias.

4.3.2. $P(E)$ en la aproximación a un nivel; un canal

La probabilidad de atrapamiento en el sistema de un canal y para la aproximación de un nivel de reacción, la obtenemos inmediatamente después de introducir la expresión para $A_\lambda(E_\lambda)$ encontrada en (4.8) en la ecuación (3.4), como

$$P(E \sim E_\lambda) \simeq \frac{1}{|\Psi_\lambda(d)|^2} \frac{(\Gamma_\lambda/2)^2}{(E_\lambda - E)^2 + (\Gamma_\lambda/2)^2}, \quad (4.23)$$

con $\Gamma_\lambda/2$ dada en (4.22). Suponiendo que $\Gamma_\lambda/2 \ll 1$, entonces podemos escribir esta última ecuación como:

$$P(E \sim E_\lambda) \simeq \pi |\Psi_\lambda(x_D)|^{-2} \delta(E_\lambda - E), \quad (4.24)$$

donde hemos usado la identidad: $\delta(x) = (1/\pi) \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \epsilon^2/(x^2 + \epsilon^2)$. Esto muestra que $P(E)$ es proporcional a la densidad de estados (DOS) [70, 71] cuando las resonancias son muy delgadas, es decir, cuando la partícula es fuertemente atrapada en la región de interacción (ver la gráfica en el interior del panel superior derecho de la Fig. 4.10).

En la Fig. 4.10 comparamos los resultados obtenidos usando la ecuación (3.7) para $N = 300$ [líneas continuas] con los de la ecuación (4.23) [líneas discontinuas] para una barrera/pozo plana de potencial con diferentes valores del par (V_0, x_2) . Similarmente a la descripción de $\tau(E_\lambda)$, la probabilidad de atrapamiento descrita por (4.23) alcanza su mejor acuerdo con (3.7) para $\beta^2 = x_2^2|V_0|$ grande y para las primeras resonancias. Por otro lado, los anchos (centros) de las resonancias, cuando son suficientemente aisladas, están

	$(\omega_1, \Gamma_1/2)$	$(\omega_2, \Gamma_2/2)$	$(\omega_3, \Gamma_3/2)$
$V_0 = 10, x_2 = 5$	(10.390, 0.049)	(11.561, 0.193)	(13.517, 0.423)
$V_0 = 10, x_2 = 10$	(10.098, 0.006)	(10.393, 0.024)	(10.885, 0.055)
$V_0 = -10, x_2 = 5$	(1.850, 0.583)	(6.563, 1.212)	(12.067, 1.791)
$V_0 = -10, x_2 = 10$	(0.859, 0.191)	(3.027, 0.380)	(5.393, 0.534)

Cuadro 4.1: Energías en donde las CD alcanzan aproximadamente sus máximos locales ($E_\lambda \simeq \omega_\lambda$) y sus anchuras ($\Gamma/2 \simeq Im[z_n]$) para diferentes valores de V_0 y x_2 . El subíndice 1(2)[3] en $(\omega_k, \Gamma_k/2)$ denota la posición del primer(segundo)[tercer] pico de resonancia de las Figs. 4.9 y 4.10.

dados por $\Gamma_\lambda \simeq Im[z_\lambda]$ ($E_\lambda \sim Re[z_\lambda]$), cuyos valores están dados en el Cuadro 4.1. Además, en el interior del panel superior derecho de la Fig. 4.10 mostramos $P(E)$ para cuando ésta se aproxima con la ec. (4.24) para $(V_0, x_2) = (10, 30)$. Para este último caso, la primera (segunda) [tercera] resonancia se obtiene en $(\omega_{1(2)[3]}, \Gamma_{1(2)[3]}) = 10.011, 0.0002$ (10.043, 0.0009) [10.098, 0.0020].

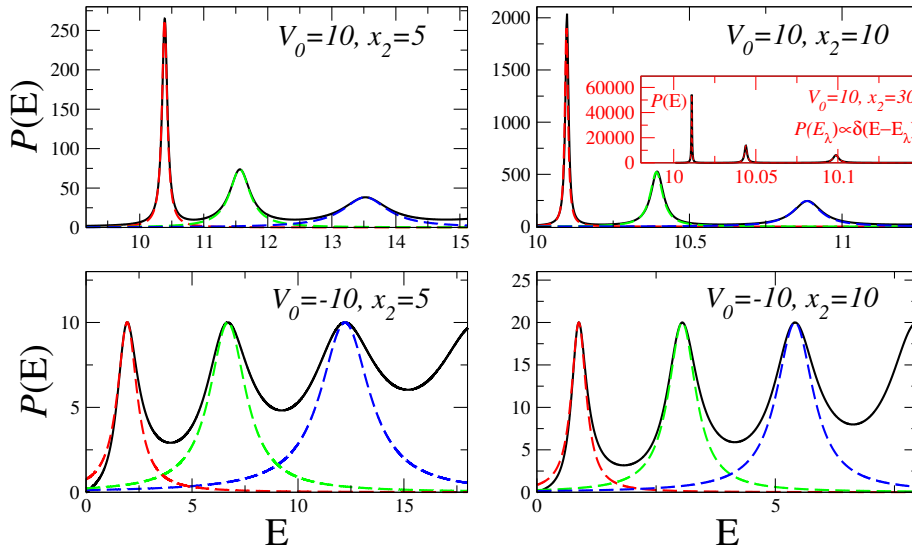


Figura 4.10: Comparación de $P(E)$ entre la ec. (3.7) para $N = 300$ [líneas continuas] y la ec. (4.23) [líneas discontinuas] en el sistema de un canal, para una barrera/pozo de potencial plana con (V_0, x_2) dados en cada panel. Los anchos (centros) de las resonancias, $\Gamma_\lambda \simeq Im[z_\lambda]$ ($E_\lambda \sim Re[z_\lambda]$), están dados en el Cuadro 4.1. En el interior del panel superior derecho comparamos $P(E)$ con la ec. (4.24) para $(V_0, x_2) = (10, 30)$, en donde la primera (segunda) [tercera] resonancia se obtiene en $(\omega_{1(2)[3]}, \Gamma_{1(2)[3]}) = 10.011, 0.0002$ (10.043, 0.0009) [10.098, 0.0020].

En la Fig. 3.7 calculamos $\tau(E)$ y $P(E)$ para un potencial cosenoidal y vimos que la primera resonancia, producto del tunelamiento, está muy aislada. Por lo tanto, en la Fig. 4.11 comparamos las expresiones para

$\tau(E)$ [$P(E)$] para $N \gg 1$ con la ecuación (4.21c) [(4.23)] para la primera resonancia. En dicha figura vemos el buen acuerdo entre ambos resultados ($N \gg 1$ y un nivel).

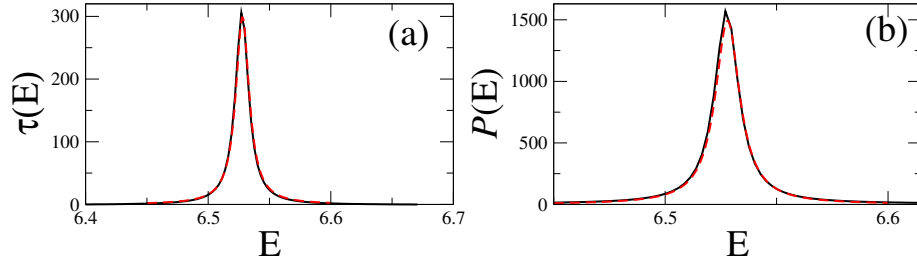


Figura 4.11: Comparación de $\tau(E)$ [$P(E)$] para un barrera de potencial coseoidal en un canal para $N = 500$ (línea continua) y la ec. (4.21c) [(4.23)] (líneas continuas). Los parámetros del potencial, dado por la ec. (3.31), son: $V_0 = 10$, $m = 1$ y centrada en $x = 2$.

4.3.3. $t(E)$ en la aproximación a un nivel, dos canales

Una vez encontrado la expresión para $A_\lambda(E)$ en la aproximación a un nivel, ahora corresponde estudiar las CD en dicha aproximación. Para ello, mantendremos las mismas suposiciones hechas anteriormente, i.e., $x_D = -x_I$ y potencial par. Empecemos analizando $t(E)$ en esta aproximación. Usando la ecuación (4.15), el denominador de $S(E)$ se reduce a $\Omega^-(E \sim E_{\lambda'}) \simeq 1 - 2ikR_{DD} = \frac{E_{\lambda'} - E - 2ik\frac{\hbar^2}{2\mu}|\Psi_{\lambda'}(x_D)|^2}{E_{\lambda'} - E}$. Luego entonces la ecuación (3.10c) se puede escribir como

$$te^{2ikx_D} \approx -(-1)^{\lambda'} \frac{2ik\frac{\hbar^2}{2\mu}|\Psi_{\lambda'}(x_D)|^2/(E - E_{\lambda'})}{\frac{E_{\lambda'} - E - 2ik\frac{\hbar^2}{2\mu}|\Psi_{\lambda'}(x_D)|^2}{E_{\lambda'} - E}} = (-1)^{\lambda'} \frac{2ik\frac{\hbar^2}{2\mu}|\Psi_{\lambda'}(x_D)|^2}{E - E_{\lambda'} + 2ik\frac{\hbar^2}{2\mu}|\Psi_{\lambda'}(x_D)|^2}. \quad (4.25)$$

Definiendo ahora $\Gamma_{\lambda'}/2 \equiv 2k\frac{\hbar^2}{2\mu}|\Psi_{\lambda'}(x_D)|^2$ [5], obtenemos

$$te^{ikd} \approx (-1)^{\lambda'} \frac{i\Gamma_{\lambda'}/2}{E - E_{\lambda'} + i\Gamma_{\lambda'}/2}, \quad (4.26)$$

está ecuación nos dice que el coeficiente de la transmisión tiene sus polos en valores de *energía compleja* $E = E_{\lambda'} - i\Gamma_{\lambda'}/2$. Con esto, la amplitud de la transmisión toma la forma siguiente

$$|t(E)|^2 \approx \frac{(\Gamma_{\lambda'}/2)^2}{(E - E_{\lambda'})^2 + (\Gamma_{\lambda'}/2)^2}, \quad (4.27)$$

que es una función Lorentziana centrada en $E_{\lambda'}$ y de anchura $\Gamma_{\lambda'}$ y es válida cuando $\Gamma_{\lambda'}/\Delta E \ll 1$.

La aproximación de un solo nivel es también conocida como aproximación de Breit-Wigner o de resonancias aisladas [5, 25, 26, 72, 73]. En esta aproximación, se supone que los estados de reacción o internos son débilmente acoplados con el exterior, cumpliéndose que $\frac{1}{2}\Gamma/\Delta E \ll 1$, donde $\frac{1}{2}\Gamma$ y $\Delta E \equiv E_{n+1} - E_n$ son la mitad de la anchura y el espaciamiento de los niveles de resonancias, respectivamente [5, 72].

En la Fig. 4.12 comparamos los resultados obtenidos usando la ecuación (3.10c) para $N = 300$ [línea continua] con los de la ecuación (4.27) [líneas discontinuas] para una barrera/pozo plana con diferentes valores del par (V_0, d) . En la Fig. 4.12 (a)-(b) consideramos dos pozos de potencial planos, mientras que en la Fig. 4.12 (c)-(d) dos barreras planas. Notemos que $T(E)$ en la región de la resonancia coincide muy bien con la ecuación (4.27). Los anchos de las resonancias y sus centros, cuando son aisladas, están determinados por $\Gamma_\lambda \simeq \text{Im}[z_\lambda]$ y $E_\lambda \simeq \omega_\lambda = \text{Re}[z_\lambda]$, respectivamente. Notemos también que la aproximación es mejor mientras más grande sea $\beta^2 = d^2|V_0|$ y siempre para las primeras resonancias, esto debido a que mientras la energía crece, las anchuras cada vez más se traslapan.

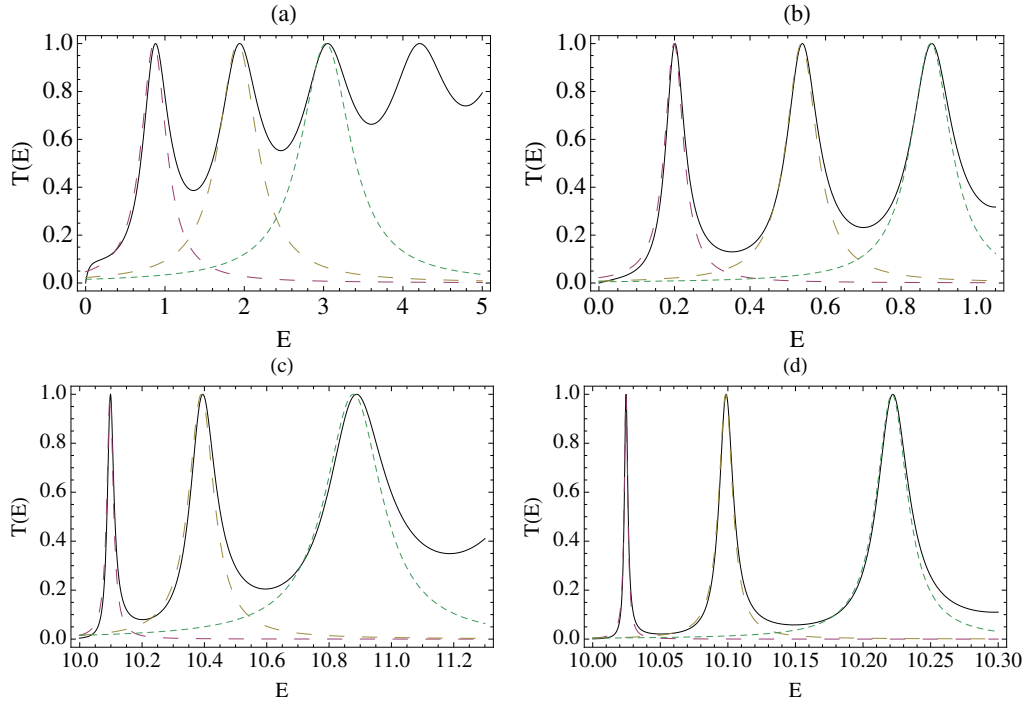


Figura 4.12: $T(E)$ dado por (3.10c) (línea continua y $N = 300$) vs. (4.27) (líneas discontinuas). En (a) [(b)] $V_0 = -10$ y $d = 20$ [60]; en (c) [(d)] $V_0 = 10$ y $d = 10$ [20]. Los picos están (aproximadamente) centrados en $E_\lambda \simeq \omega_\lambda$ y anchuras dadas por $\Gamma_\lambda \simeq \text{Im}[z_n]$ cuyos valores se dan en el Cuadro 4.2.

	$(\omega_1, \Gamma_1/2)$	$(\omega_2, \Gamma_2/2)$	$(\omega_3, \Gamma_3/2)$
(a)	(0.859, 0.191)	(1.919, 0.294)	(3.027, 0.380)
(b)	(0.199, 0.030)	(0.536, 0.049)	(0.878, 0.064)
(c)	(10.097, 0.012)	(10.390, 0.049)	(10.878, 0.109)
(d)	(10.024, 0.001)	(10.098, 0.006)	(10.221, 0.013)

Cuadro 4.2: Energías aproximadas donde las CD alcanzan sus máximos locales ($E_\lambda \simeq \omega_\lambda$) y anchuras ($\Gamma/2 \simeq \text{Im}[z_n]$). En (a) [(b)] $V_0 = -10$ y $d = 20$ [60]; en (c) [(d)] $V_0 = 10$ y $d = 10$ [20]. El subíndice 1(2)[3], denota la posición del primer(segundo)[tercer] pico de resonancia de las Figs. 4.12, 4.13 y 4.14.

4.3.4. $\tau(E)$ en la aproximación a un nivel, dos canales

Para obtener el tiempo de demora en la aproximación de un nivel, en el sistema de dos canales, partimos de la expresión para $\tau(E)$, ecuación (3.19), y después de considerar las aproximaciones de un nivel anteriormente dadas para los elementos $R_{\nu\nu'}(E_\lambda)$ [ver ecuación (4.15)], obtenemos

$$\tau(E) \simeq \frac{2\mu R_{DD} + 2\hbar k R'_{DD}}{1 + (2k R_{DD})^2}, \quad (4.28)$$

con $R'_{DD} = \partial_E R_{DD} \sim \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{|\Psi_\lambda(x_D)|^2}{(E_\lambda - E)^2}$. Después de arreglar términos, obtenemos

$$\tau(E) \simeq \hbar \frac{\frac{\hbar^2}{\mu} k |\Psi_\lambda(x_D)|^2}{(E - E_\lambda)^2 + (\frac{\hbar^2}{\mu} k |\Psi_\lambda(x_D)|^2)^2} = \hbar \frac{\Gamma_\lambda/2}{(E - E_\lambda)^2 + (\Gamma_\lambda/2)^2}, \quad (4.29)$$

con $\Gamma_\lambda/2$ dado en (4.22). La expresión de $\tau(E)$ para un canal, en la aproximación de una resonancia aislada, ecuación (4.21c), difiere por un factor de 2 respecto a la obtenida para el caso de dos canales, ec. (4.29). Este factor de 2 se debe a que en el sistema de un canal, la partícula cruza dos veces la misma región, cosa que no sucede en el caso de dos canales. En ambos sistemas; uno y dos canales, cuando las resonancias están muy aisladas, el tiempo de demora tiende a ser muy grande y la energía de resonancia es muy similar a una *energía acotada*, por lo tanto, a $2\hbar/\Gamma$ se le conoce como *el tiempo de vida* de la resonancia [73]. En la Fig. 4.13 graficamos $\tau(E)$ para el sistema de dos canales, en la cual, comparamos los resultados obtenidos usando la expresión (3.19) (usando $N = 300$ términos en $R_{\nu\nu'}(E)$) con la aproximada a un nivel dada en la ecuación (4.29). Para ello, hemos tomado los mismos parámetros (en forma respectiva) de los de la Fig. 4.12. Del mismo modo, la posición de los picos de resonancia así como sus anchuras corresponden a los dados en el Cuadro 4.2.

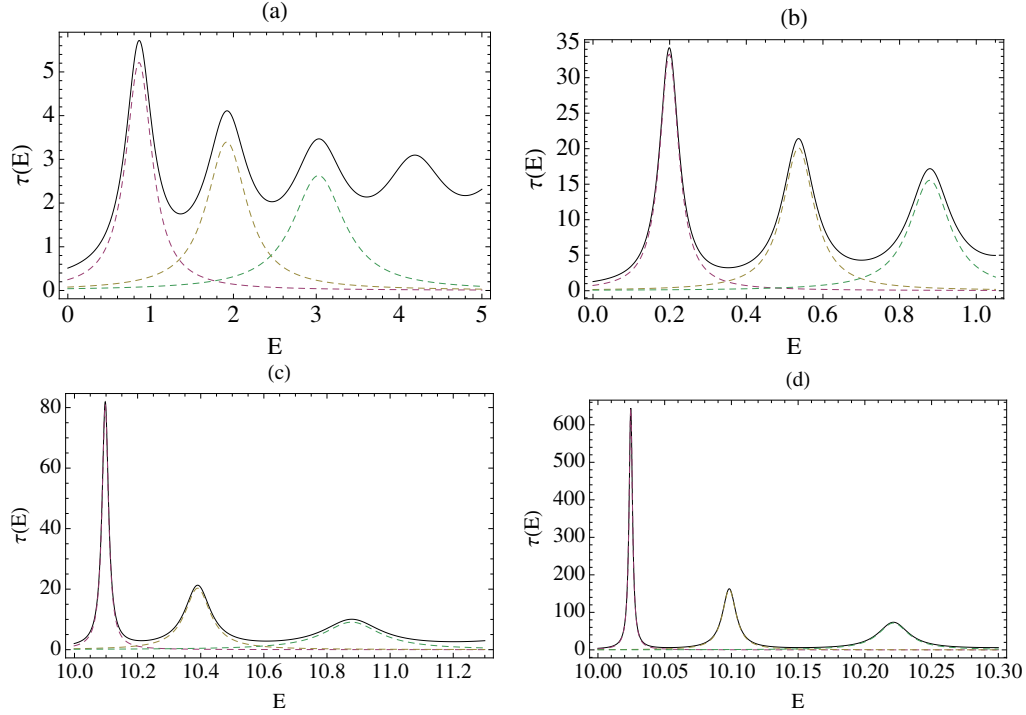


Figura 4.13: $\tau(E)$ en el sistema de dos canales dado en (3.19) (línea continua y $N = 300$) vs. (4.29) (líneas discontinuas). En (a) [(b)] $V_0 = -10$ y $d = 20$ [60]; en (c) [(d)] $V_0 = 10$ y $d = 10$ [20]. Las energías aproximadas para los cuales alcanzan los máximos (ω_λ) locales así como las anchuras ($\Gamma_\lambda/2$) están dados en el Cuadro 4.2.

4.3.5. $P(E)$ en la aproximación a un nivel; dos canales

La probabilidad de atrapamiento en la aproximación a un nivel se obtiene inmediatamente, usando el resultado dado en la ecuación (4.16) para $\lambda = \lambda'$ en la ecuación (3.4):

$$P(E \sim E_\lambda) \simeq \frac{1}{|\Psi_\lambda(x_D)|^2} \frac{(\Gamma_\lambda/2)^2}{(E_\lambda - E)^2 + (\Gamma_\lambda/2)^2}, \quad (4.30)$$

con $\Gamma_\lambda/2$ dada en (4.22). Este resultado es similar al encontrado para un canal, ecuación (4.24) y por lo tanto tiene la misma interpretación, es decir, para resonancias aisladas ($\Gamma_\lambda/\Delta E \ll 1$), $P(E)$ es entonces proporcional a la densidad de estados (DOS) [70, 71]. Esto indica que la partícula es fuertemente atrapada en la región de interacción. Por lo tanto, la expresión (4.30) se puede interpretar además, como la densidad

de resonancias de transporte.

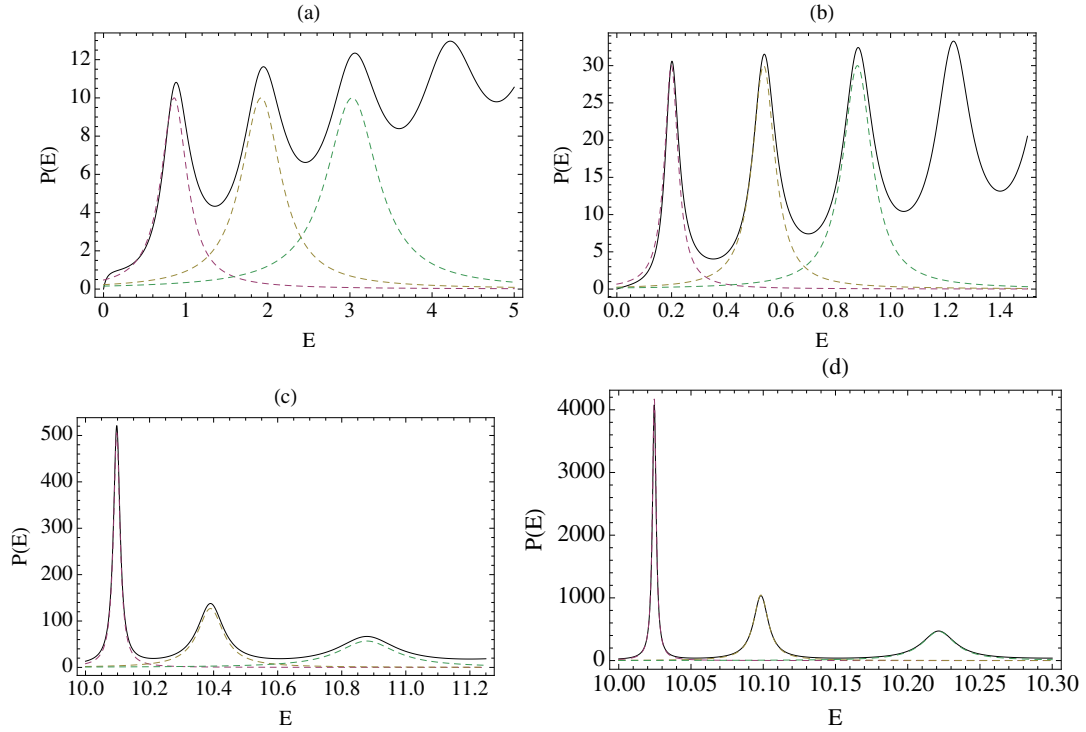


Figura 4.14: $P(E)$ para dos canales y dado en (3.24) (línea continua y $N = 300$) vs. (4.30) (líneas discontinuas). En (a) [(b)] $V_0 = -10$ y $d = 20$ [60]; en (c) [(d)] $V_0 = 10$ y $d = 10$ [20]. Las energías aproximadas de los picos (ω_λ) así como de sus anchuras ($\Gamma_\lambda/2$) están dados en el Cuadro 4.2.

En la Fig. 4.14 graficamos $P(E)$ en el sistema de dos canales, en donde comparamos los resultados usando la ecuación (3.24) (para $N = 300$) con su correspondiente para un nivel, ecuación (4.30). Hemos considerado los mismos parámetros que los de la Fig. 4.12. La posición de los picos de resonancia y de sus anchuras están dados en el Cuadro 4.2. De nuestros resultados, vemos que la aproximación a un nivel es buena cuando la anchura de la resonancia es muy delgada y falla cuando tenemos resonancias muy anchas, como por ejemplo, para la segunda y tercera resonancia del (a) de las tres CD, mostradas en las Figs. 4.12, 4.13 y 4.14.

RESUMEN: Hemos estudiado el comportamiento de los coeficientes $A_\lambda(E)$ para energías de incidencia E cercanas a los niveles de reacción E_λ para uno y dos canales. Para el caso de un canal demostramos que para $E \sim E_\lambda$ la función de onda dispersada es proporcional al λ -ésimo eigenestado de reacción: $\psi(E_\lambda, x) \propto \Psi_\lambda(x)$, lo cual indica que ha de llegar con pendiente cero en $x = x_2$. Por otro lado, para una energía que esté lejos a una de reacción, todos los coeficientes son activados y por consiguiente, la función

de onda en la región de reacción requerirá de todos los eigenestados de reacción

En referencia al caso de dos canales demostramos, para $V(x) = V(-x)$, que hay una especie de regla de *selección*, que establece que ondas incidentes con energías cercanas a una de los niveles de reacción, e.g., $E_{\lambda'}$, se acoplará en la región de reacción sólo con eigenestados de reacción Ψ_{λ} de opuesta paridad. Es decir, para $E \approx E_{\lambda'}$, la función de onda en el interior será una combinación lineal de $\Psi_{\lambda \pm n}$, $n = 0, 1, 3, 5$. El componente predominante es Ψ_{λ} ; los demás contribuyen con intensidades que decaen inversamente con el cuadrado de la diferencia $|E_{\lambda} - E_{\lambda'}|^2$.

En la practica, hemos escogido una base compuesta de ondas planas para corroborar nuestros resultados analíticos sin que se pierda generalidad con esto. Encontrando pues, que todos nuestros resultados numéricos están en perfecto acuerdo con nuestros resultados analíticos.

También obtuvimos, para uno y dos canales, las expresiones de las CD en la aproximación de un nivel de resonancia. Reproducimos el resultado bien conocido que la amplitud de la transmisión y el tiempo de demora son descritos a través de una función Lorentziana (resonancias de Breit-Wigner), valida para resonancias aisladas. Para la probabilidad de atrapamiento, encontramos que la función Lorentziana es acompañada por un factor $|\Psi_{\lambda}(x_d)|^{-2}$ y demostramos que sí $\Gamma_{\lambda}/\Delta E \ll 1$, entonces, $P(E_{\lambda}) \propto \delta(E - E_{\lambda})$, es decir, proporcional a la densidad de estados (DOS).

Capítulo 5

Formalismo del hamiltoniano efectivo

En este capítulo primeramente deducimos la matriz de dispersión, para potenciales arbitrarios, en términos de un hamiltoniano efectivo no hermítico dependiente de la energía $\mathcal{H}(E)$. Enseguida, obtenemos $\mathcal{H}(E)$ para una barrera/pozo de potencial constante. Posteriormente demostramos que la matriz de acoplamiento es proporcional a $|A_\lambda(E_\lambda)|^{-2}$ en la aproximación de un nivel. Después obtenemos las cantidades de dispersión en términos de $\mathcal{H}(E)$ y demostramos que los eigenvalores de $\mathcal{H}(E)$ son soluciones de una ecuación de punto fijo. Finalmente, usando modelos de pocos niveles para $\mathcal{H}(E)$ calculamos las CD y las comparamos con el modelo de $N \gg 1$ y mostramos numéricamente que el modelo de pocos niveles trabaja bien en el régimen de traslape medio y pequeño.

5.1. Matriz de dispersión en términos del hamiltoniano efectivo

Las resonancias en la dispersión se revelan como picos o valles en las cantidades de dispersión como función de la energía y corresponden al atrapamiento transitorio de partículas u ondas por el potencial dispersivo. En el caso de resonancias agudas, su anchura es inversamente proporcional al tiempo de atrapamiento o escape. Es importante hacer la distinción entre resonancias en la dispersión y los polos de resonancia. Estos últimos son los polos de la matriz $S(E)$ en el plano complejo, $z_n = w_n - i\Gamma_n$, donde w_n es la parte real y $\Gamma_n (> 0)$ la parte imaginaria. Sólo en el caso de resonancias aisladas, las resonancias de dispersión ocurren a energías cercanas a la parte real de los polos de resonancia. En contraste, cuando las anchuras Γ_n son del

orden o mayores que el “espaciamiento” $w_{n+1} - w_n$ las resonancias de dispersión tienden a desaparecer. Es decir, los polos de resonancia no siempre se revelan en las cantidades de dispersión.

En el Capítulo anterior expresamos $S(E)$ en términos de la matriz $R(E)$, y vimos que sus polos son las raíces de $\Omega^-(E) = 0$. Aquí, expresaremos la matriz de dispersión en términos de un hamiltoniano no hermítico $\mathcal{H}(E)$ (llamado hamiltoniano efectivo) [8, 37, 56–58, 74, 75], cuyos eigenvalores complejos son los polos de $S(E)$. La idea de hacer esto radica en que con el formalismo de $\mathcal{H}(E)$ podremos escribir las CD directamente en términos de los polos de $S(E)$, así mismo estudiarlas usando modelos de pocos niveles de forma más simple.

Una manera de obtener este hamiltoniano efectivo es usando los operadores de Feshbach \hat{P} y \hat{Q} , que proyectan a la función de onda en la región interna y externa, respectivamente [30, 31]. Tal procedimiento conduce formalmente al mismo hamiltoniano efectivo que obtendremos a continuación, utilizando el formalismo de la matriz de Reacción (truncada hasta los primeros N términos) reescrita en una forma apropiada para este propósito^A. Entonces, sean

$$V \equiv \begin{pmatrix} v_I & v_D \end{pmatrix}; \quad v_\nu \equiv \sqrt{\frac{\hbar^2}{2\mu}} \begin{pmatrix} \Psi_1(x_\nu) \\ \Psi_2(x_\nu) \\ \vdots \\ \Psi_N(x_\nu) \end{pmatrix}, \quad (H_{in})_{\lambda\lambda'} = E_\lambda \delta_{\lambda\lambda'}, \quad (5.1)$$

matrices de $N \times 2$, $N \times 1$ y $N \times N$, respectivamente y $\nu = I, D$. H_{in} es una matriz diagonal formada por los eigenvalores de reacción. Está notación nos permite escribir los elementos de la matriz de reacción, dados en la ecuación (2.29), de la forma siguiente

$$R_{ij}(E) = \sum_{\lambda=1}^N \frac{\sqrt{\hbar^2/2\mu} \Psi_\lambda^*(x_i) \sqrt{\hbar^2/2\mu} \Psi_\lambda(x_j)}{E_\lambda - E} \quad (5.2a)$$

$$\begin{aligned} &= \sqrt{\frac{\hbar^2}{2\mu}} (\Psi_1^*(x_i) \cdots \Psi_N^*(x_i)) \begin{pmatrix} \frac{1}{E_1 - E} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \frac{1}{E_2 - E} & \cdots & 0 \\ \vdots & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & \frac{1}{E_N - E} \end{pmatrix} \sqrt{\frac{\hbar^2}{2\mu}} \begin{pmatrix} \Psi_1(x_j) \\ \Psi_2(x_j) \\ \vdots \\ \Psi_N(x_j) \end{pmatrix} \\ &= v_i^\dagger (H_{in} - E)^{-1} v_j = -v_i^\dagger (E - H_{in})^{-1} v_j. \end{aligned} \quad (5.2b)$$

^ALa nueva definición de $R(E)$ la hacemos siguiendo [37] (Cap. 7); sin embargo, diferimos en la forma de obtener $\mathcal{H}(E)$.

Con esto, la matriz de reacción se puede reescribir como

$$R(E) = -V^\dagger(E\mathbf{1} - H_{in})^{-1}V = -V^\dagger GV; \quad G \equiv (E\mathbf{1} - H_{in})^{-1}, \quad (5.3)$$

donde $\mathbf{1}$ es una matriz diagonal unitaria de $N \times N$. Sustituyendo (5.3) en (2.72), obtenemos $S(E)$ como

$$S(E) = -S_0 \frac{\mathbf{1} - ikV^\dagger GV}{\mathbf{1} + ikV^\dagger GV} S_0 \quad (5.4a)$$

$$= -S_0 \left(\mathbf{1} - 2 \frac{ikV^\dagger GV}{\mathbf{1} + ikV^\dagger GV} \right) S_0. \quad (5.4b)$$

Investiguemos cómo se transforma el siguiente término

$$\frac{ikV^\dagger GV}{\mathbf{1} + ikV^\dagger GV}. \quad (5.5)$$

Para ello usemos la siguiente identidad matricial [76]:

$$\mathcal{A}(\mathcal{B} + \mathcal{C}\mathcal{D}\mathcal{E})^{-1} = [\mathcal{B}(\mathbf{1} + \mathcal{E}\mathcal{B}^{-1}\mathcal{C}\mathcal{D})]^{-1}\mathcal{A}, \quad (5.6)$$

donde \mathcal{B} es una matriz no singular, además \mathcal{A} , \mathcal{C} , \mathcal{D} y \mathcal{E} pueden, en general, ser rectangulares. Después de aplicar (5.6) en (5.5) y al identificar $\mathcal{A} \equiv V$, $\mathcal{B} \equiv \mathbf{1}$, $\mathcal{C} \equiv V^\dagger$, $\mathcal{D} \equiv G$ y $\mathcal{E} \equiv V$, obtenemos

$$(5.5) = ikV^\dagger GV(\mathbf{1} + ikV^\dagger GV)^{-1}, \quad (5.7a)$$

$$= ikV^\dagger G[V(\mathbf{1} + ikV^\dagger GV)^{-1}], \quad (5.7b)$$

$$= ikV^\dagger G[(\mathbf{1} + ikVV^\dagger G)^{-1}V], \quad (5.7c)$$

$$= ikV^\dagger G[(\mathbf{1} + ikGVV^\dagger)^{-1}V], \quad (5.7d)$$

$$= ikV^\dagger GG^{-1}(G^{-1} + ikVV^\dagger)^{-1}V, \quad (5.7e)$$

donde hemos usado $[VV^\dagger, G] = 0$ para pasar de la ecuación (5.7c) a la (5.7d). La expresión (5.7e) usualmente se obtiene usando la expansión de la serie geométrica $[(1 - x)^{-1} = \sum_{n=0}^{\infty} (x)^n]$ [9, 37, 58]. Es importante recordar que tal serie es valida siempre y cuando cumpla con una de las siguientes condiciones: a) que la norma ($\|\cdot\|$) de la matriz $\|x\| < 1$ o, b) que el máximo valor de sus eigenvalores sea menor a uno [77].

Sin embargo, el resultado final es el mismo pues la expansión se usa como paso intermedio dos veces sólo para conmutar matrices. Ahora, al sustituir la ecuación (5.7e) en (5.4b) y poniendo $G = (E\mathbf{1} - H_{in})^{-1}$, obtenemos

$$S(E) = -S_0 \left[\mathbf{1} - 2ikV^\dagger \frac{1}{E\mathbf{1} - \mathcal{H}(E)} V \right] S_0, \quad (5.8)$$

donde

$$\mathcal{H}(E) = H_{in} - ikVV^\dagger = H_{in} - \frac{ik\hbar^2}{2m} \left(v_D v_D^\dagger + v_I v_I^\dagger \right), \quad (5.9)$$

es el hamiltoniano efectivo no hermítico. La expresión (5.9) expresa claramente que el hamiltoniano efectivo depende de la energía, vía el momento $k = \sqrt{2\mu E}/\hbar$. Los eigenvalores ($z_n = \omega_n - i\Gamma_n$) de $\mathcal{H}(E)$ son los polos de la matriz de dispersión. Encontrar los polos entonces implica resolver el problema de eigenvalores para el hamiltoniano efectivo (5.9). La diagonalización del hamiltoniano efectivo sería la usual si éste no dependiera de la energía. Como sí depende de la energía, entonces ¿Qué procedimiento debemos seguir para determinar sus eigenvalores? Escoger un valor arbitrario de la energía para obtener el conjunto de polos obviamente no es correcto pues para cada energía correspondería un conjunto de polos diferente. Los polos, al igual que las eigen-energías de un sistema cerrado, caracterizan al sistema independientemente de la energía del sistema. En la Sección 5.4, veremos que la solución del problema de eigenvalores para el hamiltoniano efectivo (5.9) equivale a resolver la ecuación del punto fijo para $\mathcal{H}(E)$.

En algunos casos es justificable ignorar la dependencia del hamiltoniano efectivo respecto a la energía. Un caso importante y de actualidad es el de sistemas desordenados, donde la diagonalización se hace fijando la energía en el centro de la banda [8, 57, 59, 74]. En nuestro caso y para nuestros propósitos, obtendremos los eigenvalores de $\mathcal{H}(E)$ considerando plenamente su dependencia energética.

5.1.1. $\mathcal{H}(E)$ para $V(x) = V_0$. Uno y dos canales

En esta subsección obtendremos $\mathcal{H}(E)$ (para uno y dos canales) para una barrera/pozo de potencial plana debido a que conocemos E_λ y Ψ_λ de manera exacta para este potencial. Esto nos permitirá conocer la estructura de la matriz de acoplamiento kVV^\dagger para estos potenciales.

Para el caso **de un canal** y escogiendo incidencia por la derecha ($v_I = 0$), la ecuación (5.9) se reduce a

$\mathcal{H}(E) = H_{in} - ikv_D v_D^\dagger$. Los eigenestados de reacción para un canal están dados como (ver Apéndice C)

$$\Psi_\lambda(x) = \sqrt{\frac{2}{x_2}} \sin\left(\frac{(\lambda - \frac{1}{2})\pi x}{x_2}\right); \Rightarrow \Psi_\lambda(x_2) = (-1)^{\lambda+1} \sqrt{\frac{2}{x_2}}, \quad (5.10)$$

con $\lambda = 1, 2, \dots, N$. Con el resultado dado en (5.10), obtenemos

$$v_D v_D^\dagger = \frac{\hbar^2}{x_2 \mu} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \\ \vdots \end{pmatrix} (1, -1, 1, \dots) = \frac{\hbar^2}{x_2 \mu} \begin{pmatrix} 1 & -1 & 1 & -1 & \dots \\ -1 & 1 & -1 & 1 & \dots \\ \vdots & & & \ddots & \vdots \\ \dots & \dots & 1 & 1 & \dots \end{pmatrix}. \quad (5.11)$$

Adicionalmente, al usar la ecuación (5.11) junto con la ecuación (C.12), obtenemos $\mathcal{H}(E)$ como

$$\mathcal{H}(E) = \begin{pmatrix} \frac{(\hbar\pi)^2}{8\mu x_2^2} + V_0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \frac{(3\hbar\pi)^2}{8x_2^2\mu} + V_0 & 0 & \dots \\ \vdots & & \ddots & \vdots \end{pmatrix} - \frac{ik\hbar^2}{\mu x_2} \begin{pmatrix} 1 & -1 & 1 & -1 & \dots \\ -1 & 1 & -1 & 1 & \dots \\ \vdots & & & \ddots & \vdots \\ \dots & \dots & 1 & 1 & \dots \end{pmatrix}. \quad (5.12)$$

En notación corta, la ecuación (5.12) se puede escribir como

$$\mathcal{H}_{\lambda\lambda'}(E) = E_\lambda \delta_{\lambda\lambda'} - \frac{ik\hbar^2}{\mu x_2} (-1)^{\lambda+\lambda'}, \quad (5.13)$$

donde E_λ está dada en (C.12).

Para obtener VV^\dagger en el **sistema de dos canales** hacemos uso de la ecuación (C.6) y repetimos el procedimiento realizado en la ecuación (5.11), para finalmente obtener

$$VV^\dagger = \frac{\hbar^2}{2\mu d} (v_D v_D^\dagger + v_I v_I^\dagger) = \frac{\hbar^2}{2\mu d} \begin{pmatrix} 1 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{2} & \dots \\ 0 & 2 & 0 & 2 & 0 & \dots \\ \sqrt{2} & 0 & 2 & 0 & 2 & \dots \\ \vdots & & & \ddots & & \dots \end{pmatrix}. \quad (5.14)$$

Por otro lado, los eigenvalores de reacción E_λ para el sistema de dos canales están dados en la ecuación

(2.32). Por lo tanto, sustituyendo (5.14) y (2.32) en (5.9), obtenemos la expresión del hamiltoniano efectivo para dos canales:

$$\mathcal{H}(E) = \begin{pmatrix} E_1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & E_2 & 0 & \cdots \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & E_N \end{pmatrix} - \frac{ik\hbar^2}{2\mu d} \begin{pmatrix} 1 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{2} & \cdots \\ 0 & 2 & 0 & 2 & 0 & \cdots \\ \sqrt{2} & 0 & 2 & 0 & 2 & \cdots \\ \vdots & & & \ddots & & \vdots \end{pmatrix}. \quad (5.15)$$

Desafortunadamente, la ecuación (5.15) no fue posible escribirla en notación abreviada.

Las ecuaciones (5.12) y (5.15) nos muestran la estructura de la matriz de acoplamiento kVV^\dagger para pozos/barreras de potencial planas. Para el caso de un canal, la matriz de acoplamiento kVV^\dagger es completamente llena y todos los elementos tienen la misma intensidad. En contraste, para dos canales y con elementos $\lambda + \lambda' = \text{nones}$, son nulos. En otras palabras, estados internos de diferente paridad no se acoplan entre sí al interactuar con ondas entrantes. Este resultado se demostró en la Sec. 4.2, en cuyo caso se supuso la aproximación a un nivel de resonancia [ver ecuación (4.19)]. Por otro lado, conocer la forma explícita de $\mathcal{H}(E)$ representa una gran ventaja para el cálculo numérico, ya que nos permite calcular los polos de $S(E)$ de forma más simple y rápida.

5.1.2. A_λ vs. VV^\dagger

En esta sección demostraremos que los elementos de VV^\dagger son inversamente proporcionales al cuadrado de los coeficientes $A_\lambda(E_\lambda)$, obtenidos en la aproximación a un nivel de resonancia para los sistemas de uno y dos canales para potenciales arbitrarios. En esta aproximación, suponemos que el hamiltoniano efectivo es diagonal, es decir, eliminamos cualquier interacción con los estados vecinos y por consiguiente VV^\dagger lo podemos escribir, para dos canales, en forma diagonal como

$$(VV^\dagger)_{\lambda\lambda} = \frac{\hbar^2}{2\mu} (|\Psi_\lambda(x_D)|^2 + |\Psi_\lambda(x_I)|^2). \quad (5.16)$$

Suponiendo que el potencial es par, entonces podemos usar la ecuación (4.14) para obtener

$$(VV^\dagger)_{\lambda\lambda} = \frac{\hbar^2}{2\mu} 2|\Psi_\lambda(x_D)|^2. \quad (5.17)$$

El resultado (4.17) nos permite reescribir la ecuación (5.17) como

$$(VV^\dagger)_{\lambda\lambda} = \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{2}{|A_\lambda(E_\lambda)|^2}. \quad (5.18)$$

La ecuación (5.18) para el caso de un canal difiere únicamente por un factor de 1/2. Por otro lado, la ecuación (5.18) indica que los elementos diagonales de VV^\dagger son inversamente proporcionales a $|A_\lambda(E_\lambda)|^2$. Además indica que mientras más dominante sea $|A_\lambda(E_\lambda)|^2$ respecto a los demás coeficientes, entonces la función de onda dispersada llegará con pendiente *casi* cero en la frontera de reacción e implicaría tener una resonancia aguda. En otras palabras, los coeficientes $A_\lambda(E_\lambda)$ los podemos considerar como nuestros parámetros de acoplamiento dependientes de la energía.

5.2. Cantidades de dispersión en términos de $\mathcal{H}(E)$

En esta sección obtendremos, partiendo de la ecuación (5.8), las expresiones de $t(E)$, $\tau(E)$ y $P(E)$ en términos de $\mathcal{H}(E)$. Aquí, nos dedicaremos al caso exclusivo de dos canales en una dimensión, debido a que las expresiones para un canal son deducibles a partir del resultado para dos canales.

5.2.1. El coeficiente de transmisión

El coeficiente de transmisión $t(E) \equiv S_{12}$ se obtiene de la ecuación (5.8) como

$$t(E) = -2ike^{-ikd} \left[V^\dagger \frac{1}{E\mathbf{1} - \mathcal{H}(E)} V \right]_{12}. \quad (5.19)$$

Podemos reescribir esta última ecuación usando la siguiente igualdad: $(E\mathbf{1} - \mathcal{H})^{-1} = (E\mathbf{1} - \mathcal{H}(E))^{Adj} / \det(E\mathbf{1} - \mathcal{H}(E))$, tal que:

$$t(E) = -2ike^{-ikd} \left[V^\dagger \frac{(E\mathbf{1} - \mathcal{H}(E))^{Adj}}{\det(E\mathbf{1} - \mathcal{H}(E))} V \right]_{12}, \quad (5.20)$$

donde *Adj* corresponde a la matriz de cofactores traspuesta de $(E\mathbf{1} - \mathcal{H}(E))$. Por otro lado, ya que el determinante es invariante ante transformaciones de similitud, podemos escribir

$$\det(E\mathbf{1} - \mathcal{H}(E)) = \prod_{\lambda=1}^N [E - z_\lambda(E)] = \prod_{\lambda=1}^N [E - \omega_\lambda + i\Gamma_\lambda], \quad (5.21)$$

donde $z_\lambda(E)$ son las funciones que nos determinan los eigenvalores del hamiltoniano efectivo. Al ser estos los ceros del denominador de los elementos de la matriz $S(E)$, vemos que los eigenvalores de $\mathcal{H}(E)$ son los polos de la matriz $S(E)$. Ahora, usando (5.21) en la ecuación (5.20), obtenemos

$$t(E) = -2ike^{-ikd} \frac{[V^\dagger(E\mathbf{1}-\mathcal{H}(E))^{Adj}V]_{12}}{\prod_{\lambda=1}^N [E - \omega_\lambda + i\Gamma_\lambda]}. \quad (5.22)$$

La relación (5.22) muestra que los polos del coeficiente de transmisión son los mismos que los de la matriz $S(E)$, resultado que ya se demostró anteriormente de una forma diferente. Es decir, encontramos que es suficiente resolver la ecuación $\Omega^-(E) = 0$ para obtener los polos de $t(E)$ (ver (3.10c) y la Sec. 3.3).

Una de las ventajas de escribir $t(E)$ como en (5.22), es que nos permite obtener la aproximación de pocos niveles en términos de los polos de $S(E)$ ^B. Pero antes obtengamos una identidad para el término $[V^\dagger(E\mathbf{1}-\mathcal{H}(E))^{Adj}V]_{12}$, el cual nos permitirá *acelerar* el uso de (5.22). Para ello, vamos a reescribir la ecuación (3.10c) con la ayuda de la siguiente identidad

$$\det[\mathbf{1} \pm kiV^\dagger GV] = \det(E\mathbf{1} - H_{in})^{-1} \det[E\mathbf{1} - H_{in} \pm ikVV^\dagger], \quad (5.23)$$

como:

$$t(E) = \frac{-e^{-ikd} 2ik R_{ID}(E)}{\det(E\mathbf{1} - H_{in})^{-1} \det(E\mathbf{1} - \mathcal{H}(E))} = \frac{-e^{-ikd} 2ik R_{ID}(E)}{\prod_{n=1}^N (E - E_n)^{-1} \prod_{\lambda=1}^N (E - \omega_\lambda + i\Gamma_\lambda)}, \quad (5.24)$$

aquí hemos usado la ecuación (5.21) en la última igualdad. Comparando (5.24) con (5.22) obtenemos

$$[V^\dagger(E\mathbf{1}-\mathcal{H})^{Adj}V]_{12} = -\frac{R_{ID}(E)}{\prod_{n=1}^N (E - E_n)^{-1}} = \prod_{n=1}^N \sum_{\lambda=1}^N \frac{E_n - E}{E_\lambda - E} \gamma_\lambda^{ID}, \quad (5.25)$$

que es la *identidad* que andábamos buscando. Ahora sustituimos la ecuación (5.25) en (5.22) y obtenemos

$$t(E) = 2ike^{-ikd} \frac{\prod_{n=1}^N \sum_{\lambda=1}^N \frac{E_n - E}{E_\lambda - E} \gamma_\lambda^{ID}}{\prod_{\lambda=1}^N [E - \omega_\lambda + i\Gamma_\lambda]}. \quad (5.26)$$

La ecuación (5.26) es más fácil de manejar que la ecuación (5.22), ya que podemos obtener explícitamente $t(E)$ para diferentes aproximaciones de una manera más simple. Específicamente, en el caso de un nivel

^BEn la Sec. 4.3 obtuvimos las CD en la aproximación de un nivel en términos de los eigenestados y eigenvalores de reacción

(para $N = 1$, (5.25) es γ_λ^{ID}) y potenciales con simetría par [ver ec. (4.14)], la ecuación (5.26) se reduce a

$$t(E)e^{ikd} = \frac{2ik\gamma_\lambda^{ID}}{E - \omega_\lambda + i\Gamma_\lambda} = (-1)^\lambda \frac{i\Gamma'_\lambda}{E - \omega_\lambda + i\Gamma_\lambda}, \quad (5.27)$$

donde $\Gamma'_\lambda \equiv 2k\gamma_\lambda^{ID}$ ($\Gamma'_\lambda \rightarrow \Gamma_\lambda$ para resonancias muy delgadas). Por otro lado, para dos y tres niveles ($N = 2, 3$) obtenemos, respectivamente:

$$t(E)e^{-ikd} = 2ik \frac{(E - E_\lambda)\gamma_{\lambda-1}^{ID} + (E - E_{\lambda-1})\gamma_\lambda^{ID}}{(E - \omega_{\lambda-1} + i\Gamma_{\lambda-1})(E - \omega_\lambda + i\Gamma_\lambda)}. \quad (5.28)$$

$$t(E) = 2ik \frac{(E - E_\lambda)(E - E_{\lambda+1})\gamma_{\lambda-1}^{ID} + (E - E_{\lambda-1})(E - E_{\lambda+1})\gamma_\lambda^{ID} + (E - E_{\lambda-1})(E - E_\lambda)\gamma_{\lambda+1}^{ID}}{(E - \omega_{\lambda-1} + i\Gamma_{\lambda-1})(E - \omega_\lambda + i\Gamma_\lambda)(E - \omega_{\lambda+1} + i\Gamma_{\lambda+1})}. \quad (5.29)$$

En el apartado 4.3.3 vimos que la amplitud de la transmisión, en la aproximación de un nivel, está descrita por la función de Breit-Wigner. Sin embargo, no nos fijamos que condiciones deben de cumplir sus resonancias vecinas para que se considere netamente aislada. A continuación, usando (5.29) deduciremos estas condiciones para que una resonancia este aislada. Para ello consideremos lo siguiente. Sea $E \rightarrow E_\lambda$, por lo tanto, el término de en medio del numerador de (5.29) será el único que se mantendrá y entonces:

$$t(E)e^{2ikd}|_{E \rightarrow E_\lambda} = 2ik \frac{(E - E_{\lambda-1})(E_{\lambda+1} - E)\gamma_{ID}^\lambda}{(E - \omega_{\lambda-1} + i\Gamma_{\lambda-1})(E - \omega_\lambda + i\Gamma_\lambda)(E - \omega_{\lambda+1} + i\Gamma_{\lambda+1})}. \quad (5.30)$$

Las diferencias $E - E_{\lambda-1}$ y $E_{\lambda+1} - E$ son *prácticamente* los espaciamientos entre niveles $\Delta E_{\lambda-1}$ y $\Delta E_{\lambda+1}$, respectivamente. Con esto, la ecuación (5.30) se puede reescribir como

$$t(E)e^{2ikd}|_{E \rightarrow E_\lambda} = \frac{-2ik\Delta E_{\lambda-1}\Delta E_\lambda\gamma_{ID}^\lambda}{(E - \omega_{\lambda-1} + i\Gamma_{\lambda-1})(E - \omega_\lambda + i\Gamma_\lambda)(E - \omega_{\lambda+1} + i\Gamma_{\lambda+1})}, \quad (5.31a)$$

$$= \frac{-i(-1)^\lambda\Gamma'_\lambda}{\left(\frac{E - \omega_{\lambda-1}}{\Delta E_{\lambda-1}} + i\frac{\Gamma_{\lambda-1}}{\Delta E_{\lambda-1}}\right)(E - \omega_\lambda + i\Gamma_\lambda)\left(\frac{E - \omega_{\lambda+1}}{\Delta E_{\lambda+1}} + i\frac{\Gamma_{\lambda+1}}{\Delta E_{\lambda+1}}\right)}. \quad (5.31b)$$

Sí $\Delta E_{\lambda-1} \sim E_\lambda - \omega_{\lambda-1}$, $\Delta E_{\lambda+1} \sim -(E_{\lambda+1} - \omega_\lambda)$, entonces la ecuación (5.31b) se reduce a

$$t(E)e^{2ikd}|_{E \rightarrow E_\lambda} \simeq (-1)^\lambda \frac{i\Gamma'_\lambda}{\left(1 + i\frac{\Gamma_{\lambda-1}}{\Delta E_{\lambda-1}}\right)(E - \omega_\lambda + i\Gamma_\lambda)\left(1 - i\frac{\Gamma_{\lambda+1}}{\Delta E_{\lambda+1}}\right)}. \quad (5.32)$$

Ahora, sí suponemos que se cumple $\frac{\Gamma_{\lambda-1}}{\Delta E_{\lambda-1}} \ll 1$ y $\frac{\Gamma_{\lambda+1}}{\Delta E_{\lambda+1}} \ll 1$, entonces podremos usar la aproximación

de la suma geométrica $((1-x)^{-1} \simeq 1+x+\dots)$ en el denominador de (5.32), tal que

$$t(E)e^{2ikd} \simeq (-1)^\lambda \frac{i\Gamma'_\lambda}{E - \omega_\lambda + i\Gamma_\lambda} \left[1 + i \left(\frac{\Gamma_{\lambda-1}}{\Delta E_{\lambda-1}} - \frac{\Gamma_{\lambda+1}}{\Delta E_\lambda} \right) \right], \quad (5.33)$$

la diferencia $\frac{\Gamma_{\lambda-1}}{\Delta E_{\lambda-1}} - \frac{\Gamma_{\lambda+1}}{\Delta E_\lambda} \sim 0$ y consecuentemente, obtenemos

$$t(E)e^{2ikd} \simeq (-1)^\lambda \frac{i\Gamma'_\lambda}{E - \omega_\lambda + i\Gamma_\lambda}; \Rightarrow |t(E)e^{2ikd}|^2 \simeq \frac{\Gamma_\lambda^2}{(E - \omega_\lambda)^2 + \Gamma_\lambda^2}. \quad (5.34)$$

que es la expresión para resonancias aisladas ($\Gamma'_\lambda \simeq \Gamma_\lambda$). Concluimos entonces, para que una resonancias no se traslape con sus resonancias vecinas, es necesario que se cumpla la condición $\frac{\Gamma_{\lambda+1}}{\Delta E_{\lambda+1}} \ll 1$ y que $E_\lambda \sim \omega_\lambda$.

5.2.2. Tiempo de demora

Pasemos ahora a obtener el tiempo de demora $\tau(E)$ en términos de $\mathcal{H}(E)$. El tiempo de demora está relacionado con la derivada respecto a la energía de la fase de la matriz de dispersión como [37, 61] (ver Sec. 3.2.2)

$$\tau(E) = -i\hbar \frac{dS(E)}{dE} S^\dagger(E) = -\frac{i\hbar}{2} \frac{d}{dE} \ln(\det S(E)). \quad (5.35)$$

Entonces al sustituir (5.4a) en (5.35) y recordando que $\det(AB^{-1}) = \det(A) \det(B^{-1})$, obtenemos

$$\tau(E) = -\frac{i\hbar}{2} \frac{d}{dE} \ln \left[\frac{\det(1 + ikV^\dagger GV)}{\det(1 - ikV^\dagger GV)} \right]. \quad (5.36)$$

Ahora, después de usar la identidad (5.23)^C en (5.36), llegamos a

$$\tau(E) = -\frac{i\hbar}{2} \frac{d}{dE} \ln \left(\frac{\det(E\mathbf{1} - H_{in})^{-1} \det(E\mathbf{1} - H_{in} - ikVV^\dagger)}{\det(E\mathbf{1} - H_{in})^{-1} \det(E\mathbf{1} - H_{in} + ikVV^\dagger)} \right), \quad (5.37a)$$

$$= -\frac{i\hbar}{2} \frac{d}{dE} \ln \left(\frac{\det(E\mathbf{1} - H_{in} - ikVV^\dagger)}{\det(E\mathbf{1} - H_{in} + ikVV^\dagger)} \right). \quad (5.37b)$$

^CEn [37] utilizan la identidad $\det[\mathbf{1} \pm ikV^\dagger GV] = \det[E\mathbf{1} - H_{in} \pm ikVV^\dagger]$, la cual es *incompleta*, la expresión correcta es de la ecuación (5.23). Sin embargo, el resultado para el tiempo de demora no se ve afectada, ya que, el término $\det(E\mathbf{1} - H_{in})^{-1}$ aparece tanto en el numerador como en el denominador de (5.37a).

También haciendo uso de (5.21) en (5.37b), obtenemos $\tau(E)$ en términos de los eigenvalores de $\mathcal{H}(E)$:

$$\tau(E) = -\frac{i\hbar}{2} \frac{d}{dE} \ln \left[\prod_{\lambda}^M \left(\frac{E - \omega_{\lambda} - i\Gamma_{\lambda}}{E - \omega_{\lambda} + i\Gamma_{\lambda}} \right) \right]. \quad (5.38)$$

Con esto, el tiempo de demora lo obtenemos como [37]

$$\tau(E) = \hbar \sum_{\lambda=1}^N \frac{\Gamma_{\lambda}}{(E - \omega_{\lambda})^2 + \Gamma_{\lambda}^2}. \quad (5.39)$$

La expresión (5.39) es útil para inferir cuantos niveles efectivamente contribuyen en el fenómeno dispersivo. Es decir, comparando las curvas obtenidas experimentalmente con la expresión (5.39) para uno, dos o varios términos. En el caso de resonancias suficientemente aisladas se considera un solo término en la serie (5.39), lo cual nos da el resultado bien conocido de que el tiempo de demora es una Lorentziana con anchura Γ_{λ} (por ejemplo, en la Fig. 4.13 comparamos las primeras tres resonancias de $\tau(E)$ con funciones Lorentzianas de diferentes anchuras).

5.2.3. Probabilidad de atrapamiento

Recordemos que la probabilidad de atrapamiento se define como la integral del absoluto al cuadrado de la función de onda en la región interna (ver ecuación (3.3)) y ésta es independiente del método que se use para su obtención. En principio, para obtener $P(E)$ uno puede usar el MMT o el método de la TMR. Sin embargo, la expresión (3.4) ya está escrita en términos de los coeficientes de la expansión $A_{\lambda}(E)$, las cuales son las probabilidades de que el estado interno se encuentre en un estado dado de Neumann (de Reacción). Para obtener la probabilidad de atrapamiento en términos del hamiltoniano efectivo, partimos de la expresión matricial para $A_{\lambda}(E)$ [ver (3.22b)] y usando $(1 - ikV^{\dagger}GV)^{-1} = (1 - ikV^{\dagger}GV)^{adj} / \det(1 - ikV^{\dagger}GV)$ y la ecuación (5.23) en (3.22b), obtenemos

$$A_{\lambda}(E) = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{2ik}{E_{\lambda} - E} \Psi_{DI} \frac{(1 - ikV^{\dagger}GV)^{adj}}{\det(\mathbf{E}\mathbf{1} - H_{in})^{-1} \det(\mathbf{E}\mathbf{1} - H_{in} + ikVV^{\dagger})} w\alpha, \quad (5.40a)$$

$$= \frac{\hbar^2 2ik}{2\mu} \frac{\prod_{n \neq \lambda} (E_n - E)}{\det(\mathbf{E}\mathbf{1} - H_{in} + ikVV^{\dagger})} \Psi_{DI} (1 - ikV^{\dagger}GV)^{adj} w\alpha. \quad (5.40b)$$

En términos de los eigenvalores del hamiltoniano efectivo la ecuación (5.40b) toma la forma

$$A_\lambda(E) = \frac{\hbar^2 2ik}{2\mu} \frac{\prod_{n \neq \lambda} (E_n - E)}{\prod_n (E - \omega_n + i\Gamma_n)} \Psi_{DI} (1 - ikV^\dagger GV)^{adj} w\alpha. \quad (5.41)$$

Específicamente, para $\alpha_D = 1$ y $\alpha_I = 0$ [incidencia por la derecha, ver la ecuación (4.13)], obtenemos

$$P(E) = \sum_\lambda^N \left[\frac{2k\hbar^2}{2\mu} \right]^2 \frac{(1 + k^2 R_{II}^2) |\Psi_\lambda(x_D)|^2 + k^2 (R_{ID}^2) |\Psi_\lambda(x_I)|^2 - 2R_{ID} R_{II} \Psi_\lambda(x_D) \Psi_\lambda(x_I)}{\prod_{n \neq \lambda} (E_n - E)^{-2} \prod_n [(E - \omega_n)^2 + \Gamma_n^2]}. \quad (5.42)$$

Esta expresión para $P(E)$ está en términos de los polos de $S(E)$ y no es sencilla de manejar desde el punto de vista analítico. Sin embargo, nos sirve para demostrar, de una forma diferente, que ésta tiene los mismos polos de $S(E)$ [ver la ecuación (3.22b)].

5.3. Aplicación del hamiltoniano efectivo para el cálculo de las CD

En esta sección vamos a comparar los resultados obtenidos usando el método de la Matriz de Reacción con los del formalismo del hamiltoniano efectivo. Para ellos, usaremos como ejemplos una barrera/pozo de potencial plana, una doble barrera/pozo de Pöschl-Teller y un potencial oscilatorio asimétrico, en donde, calcularemos la amplitud de la transmisión (ver Fig. 5.1) y la probabilidad de atrapamiento (Fig. 5.2). La importancia de esta comparación radica en que uno puede obtener la matriz de dispersión $S(E)$ en términos de un hamiltoniano efectivo sin hacer uso del método de la matriz de Reacción [56, 57, 75]. En este sentido, lo que importa es estimar cual de los dos formalismos es más eficiente desde el punto de vista numérico, ya que involucran diferentes operaciones. En el formalismo de la Matriz de Reacción es necesario encontrar los eigenvalores y eigenestados de reacción para poder calcular las CD y una vez obtenidas estas, todo se reduce a calcular las series que definen los $R_{\nu\nu'}(E)$ para cada E . Así mismo, en el formalismo del hamiltoniano efectivo podemos proceder de dos formas para calcular las cantidades de dispersión; la primera es hacer el cálculo de los eigenvalores z_n de \mathcal{H} y usar las expresiones (5.26), (5.39) y (5.42) para calcular $t(E)$, $\tau(E)$ y $P(E)$, respectivamente. La segunda es usar directamente las expresiones en donde aparece de forma explícita el hamiltoniano no hermético, evitando así, calcular los polos. Esta segunda opción es la que usaremos. Para ello, notemos que es necesario calcular, ya sea, la inversa de la matriz $E - \mathcal{H}$ [para $t(E)$, ver ecuación (3.10c)] o el $\det(E - \mathcal{H})$ para el cálculo de la probabilidad de atrapamiento [ver ecuación (5.40b)].

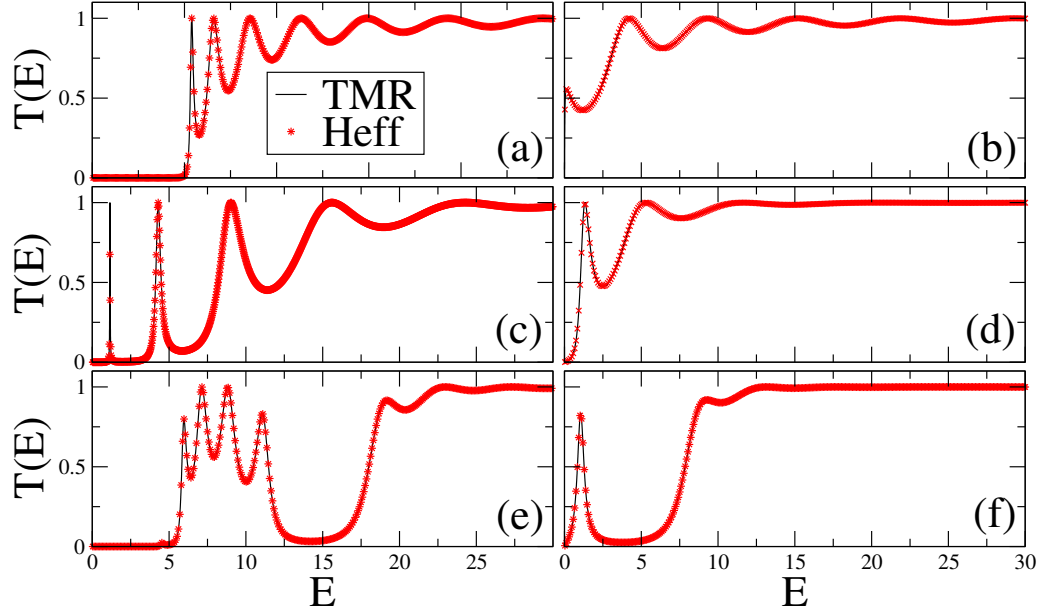


Figura 5.1: Amplitud de la transmisión $T(E)$ para una barrera/pozo de potencial plana, una doble barrera/pozo de Pöschl-Teller y un potencial oscilatorio asimétrico; Matriz de Reacción [ver ec. (3.10c)] ($N = 500$ términos en $R_{\nu\nu'}$) vs. formalismo del hamiltoniano efectivo (tamaño de matriz 500×500) [ver ec. (5.19)]. (a) [b] corresponde a una barrera[pozo] de potencial constante con $V_0 = 10[-10]$ y $d = 5$. (c) [(d)] corresponde a una doble barrera [pozo] de potenciales de PT centradas en $x = \pm 2$ y $\alpha^2 V_0 = 10[-10]$ [ver ec. (3.30)]. Y (e) [f] corresponde a un potencial oscilatorio asimétrico [ver ec. (4.20)] con $(V_0, d) = (0, 6)$, $(\ell, \ell') = (6, 1)$ y $(\epsilon, \epsilon') = (10[-10], 1)$.

Los potenciales que usaremos para averiguar los tiempos de cálculo corresponden a una barrera/pozo de potencial plana, una doble barrera/pozo de Pöschl-Teller y un potencial oscilatorio asimétrico en donde hemos tomado $N = 500$ términos para las series de $R_{\nu\nu'}(E)$ y tamaños de \mathcal{H} de 500×500 . En la Fig. 5.1 [Fig. 5.2] mostramos los resultados para el coeficiente de transmisión [probabilidad de atrapamiento] para los potenciales antes mencionados. Estos resultados muestran el perfecto acuerdo entre ambos formalismos. Sin embargo, hemos encontrado que calcular las CD con el método de la Matriz de Reacción, es aproximadamente cuatro veces más rápido que con el formalismo del hamiltoniano efectivo. Por otro lado, como veremos en la siguiente sección, el formalismo del hamiltoniano efectivo es importante ya que nos provee de una alternativa para calcular los polos de $S(E)$.

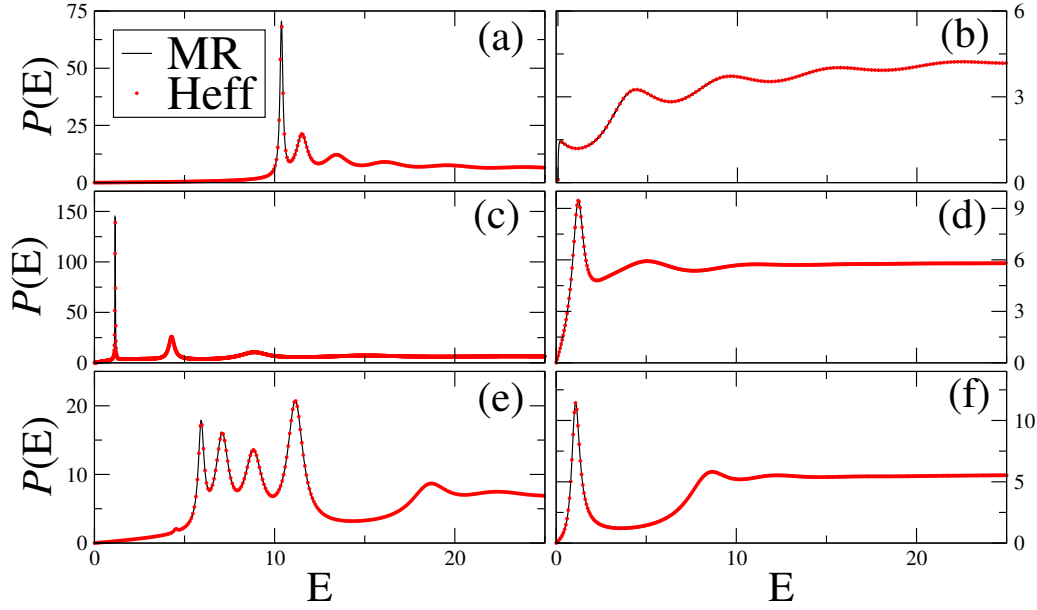


Figura 5.2: Probabilidad de atrapamiento $P(E)$ para una barrera/pozo de potencial plana, una doble barrera/pozo de Pöschl-Teller y un potencial oscilatorio asimétrico; Matriz de Reacción [ver ec. (3.24)] ($N = 500$ términos en $R_{\nu\nu'}$) vs. formalismo del hamiltoniano efectivo (tamaño de matriz 500×500) [ver ec. (5.42)]. (a) [(b)] corresponde a una barrera[pozo] de potencial constante con $V_0 = 10[-10]$ y $d = 5$. (c) [(d)] corresponde a una doble barrera [pozo] de potenciales de PT centradas en $x = \pm 2$ y $\alpha^2 V_0 = 10[-10]$ [ver ec. (3.30)]. Y (e) [(f)] corresponde a un potencial oscilatorio asimétrico [ver ec. (4.20)] con $(V_0, d) = (0, 6)$, $(\ell, \ell') = (6, 1)$ y $(\epsilon, \epsilon') = (10[-10], 1)$.

5.4. El Punto Fijo

La relación (5.8) muestra claramente que los polos de la matriz $S(E)$ son los mismos que los eigenvalores del hamiltoniano efectivo $\mathcal{H}(E)$. k es puramente imaginario en el caso $E < 0$ y como VV^\dagger y H_{in} son hermíticos, entonces los eigenvalores de $\mathcal{H}(E)$ son reales. Estos corresponden a los niveles acotados del potencial dispersivo. Sin embargo $\mathcal{H}(E)$ no es hermítico cuando $E > 0$, y sus eigenvalores yacen en el plano complejo ($E \rightarrow z$). Es decir, ocurren para “energías” $z = z_\alpha$, $\alpha = 1, 2, \dots, N$, donde N es el tamaño de la matriz hamiltoniana efectiva. Formalmente $N \rightarrow \infty$, pero en la práctica la matriz se trunca a un valor N , que dependerá del número de polos que se quieren calcular y de la precisión que se requiera. Entonces, el

procedimiento a seguir para encontrar los polos parece muy claro: resolver el problema de eigenvalores

$$\mathcal{H}(z)F_\alpha = z_\alpha F_\alpha, \quad (5.43)$$

donde z_α son los polos y F_α sus eigenvectores. Usualmente este procedimiento se puede hacer de dos formas:

- a) Diagonalizando $\mathcal{H}(z)$ a través de operaciones que llevan a $\mathcal{H}(z)$, primero, ya sea a una matriz triangular (algoritmo de Jacobi) o, a una matriz de banda (algoritmo de Givens) [78–80].
- b) Calculando los ceros de la ecuación característica $\xi(z) = \det(\mathcal{H}(z) - z)$.

Como caso particular, si la matriz a diagonalizar es una matriz fija (como en la gran mayoría de las aplicaciones), ambos procedimientos conllevan al mismo resultado. Cuando la matriz no es constante la equivalencia no es directa. Para apreciar esto, consideremos primero el segundo procedimiento en donde los polos z_α son los ceros de $\xi(z)$. Este conjunto de ceros es único y caracteriza al sistema dispersivo pues son los polos de la matriz $S(z)$, de la misma manera que el espectro de un sistema cerrado está caracterizado por sus eigenvalores. Por el contrario, en el primer procedimiento, la diagonalización requiere de fijar un valor de z en $\mathcal{H}(z)$ y para cada valor de z obtenemos un conjunto de polos $z_\alpha = z_\alpha(z)$. Los espectros generalmente serán diferente para diferentes valores de z , en contraste con el procedimiento b). Es claro entonces que el procedimiento a) no tiene sentido físico porque el conjunto de polos del sistema debe ser único, ya que caracterizan al sistema dispersivo.

Sin embargo, formalmente la diagonalización del hamiltoniano y la búsqueda de ceros de la ecuación característica son equivalentes. Por el procedimiento b) obtenemos que los polos ocurren en $z = z_\alpha$ y por el procedimiento a) observamos que $z_\alpha = z_\alpha(z)$. Entonces, para que ambos procedimientos sean equivalentes debe ser tal que

$$z_\alpha = z_\alpha(z) = z. \quad (5.44)$$

Esta relación nos confirma lo obvio, que la solución a la ecuación (5.43) ocurre para $z = z_\alpha = z_\alpha(z)$. Sin embargo, *a priori* no conocemos los eigenvalores z_α . Estos los podríamos conocer por el procedimiento b) pero entonces no tiene caso utilizar el procedimiento a), excepto para encontrar sus eigenvectores. Mientras que para encontrar los ceros es una labor muy tediosa y lenta. Por otro lado, la ecuación (5.44) es la ecuación

del punto fijo para los polos del hamiltoniano efectivo. Esto sugiere que, si el punto fijo fuera del tipo estable, en el sentido de sistemas dinámicos, entonces podríamos determinar los polos a través de iteraciones a partir de una condición inicial z_α^0 , como se describirá en la Sec. 6.4.

5.5. Modelo de pocos niveles

En esta Sección vamos a considerar modelos de pocos niveles^D para la matriz $\mathcal{H}(E)$ de $M \times M$ (con $M \sim 5$), para describir las cantidades de dispersión considerando su forma explícita en la energía. El modelo de pocos niveles ha sido utilizado, por ejemplo, para estudiar los *cruces evitados* de los polos de la matriz $S(E)$ [74, 81, 82] y la transición de estados *super-radiantes* [58, 83]. Esto lo hacen cambiando la dependencia explícita de la energía por un parámetro de acoplamiento entre la región externa y la interna ($k \rightarrow \Delta$) en $\mathcal{H}(E)$.

La forma de obtener los polos $\mathcal{H}(z)$ para pocos niveles (~ 10) aquí, es usando el MPF iterativo (que se explica en la Sec. 6.4). En particular, para los modelos de 1×1 y 2×2 se pueden obtener los eigenvalores de $\mathcal{H}(z)$ de forma explícita y exacta, cuyas expresiones están dadas en el Apéndice F. Adicionalmente en dicho apéndice se demuestra que para el modelo de 2×2 y simetría par del potencial, el MPF iterativo siempre converge. Esto se logra considerando a \mathcal{H} como un hamiltoniano de un sistema dinámico. No obstante, para modelos de $M > 2$ no es simple mostrar la convergencia en forma analítica. Por otro lado, hemos encontrado numéricamente que para matrices del orden $\sim 10 \times 10$ el MPF iterativo siempre converge.

En lo que sigue mostraremos resultados para el potencial $V(x) = V_0$, en el cual ya conocemos como obtener resonancias agudas: haciendo cada vez más grande $\beta^2 = d^2|V_0|$, como vimos en el Capítulo anterior. Entonces, en la Fig. 5.3 mostramos la transmisión para $V_0 = -10$ y diferentes valores de d . En dicha figura, comparamos la amplitud de la transmisión considerando diferentes modelos; $N \times N$ (línea negra), 2×2 [ver ecuación (5.28) y línea azul] y con la suma de dos funciones de *Briet-Wigner* (BW) [línea roja]. La suma de dos WB (como es de esperarse) no conserva flujo en general y sólo es una buena aproximación cuando las resonancias de dispersión son muy delgadas. Note que la correspondencia mejora para d grandes, es decir, para resonancias agudas.

En la Fig. 5.3 podemos observar que ninguna de las dos aproximaciones (2×2 y BW) describen bien

^DUsaremos la letra M para denotar el tamaño de $\mathcal{H}(z)$ para pocos niveles, esto para no confundir con la letra N que denota el número total de términos usados en la series para los $R_{\nu\nu'}(E)$.

lo que sucede en $E \sim 0$, esto debido a que en ninguna de las aproximaciones estamos incluyendo el efecto de los estados acotados ($w_n < 0$ y $\Gamma_n = 0$). Para ello, en la Fig. 5.4 mostramos los resultados obtenidos cuando incluimos los últimos dos estados acotados ($n_b^u = 2$) en el cálculo de la amplitud de la transmisión, es decir, ahora tomamos matrices del hamiltoniano efectivo de tamaños $(n_b^u + j) \times (n_b^u + j)$, donde j denota el número de polos resonantes.

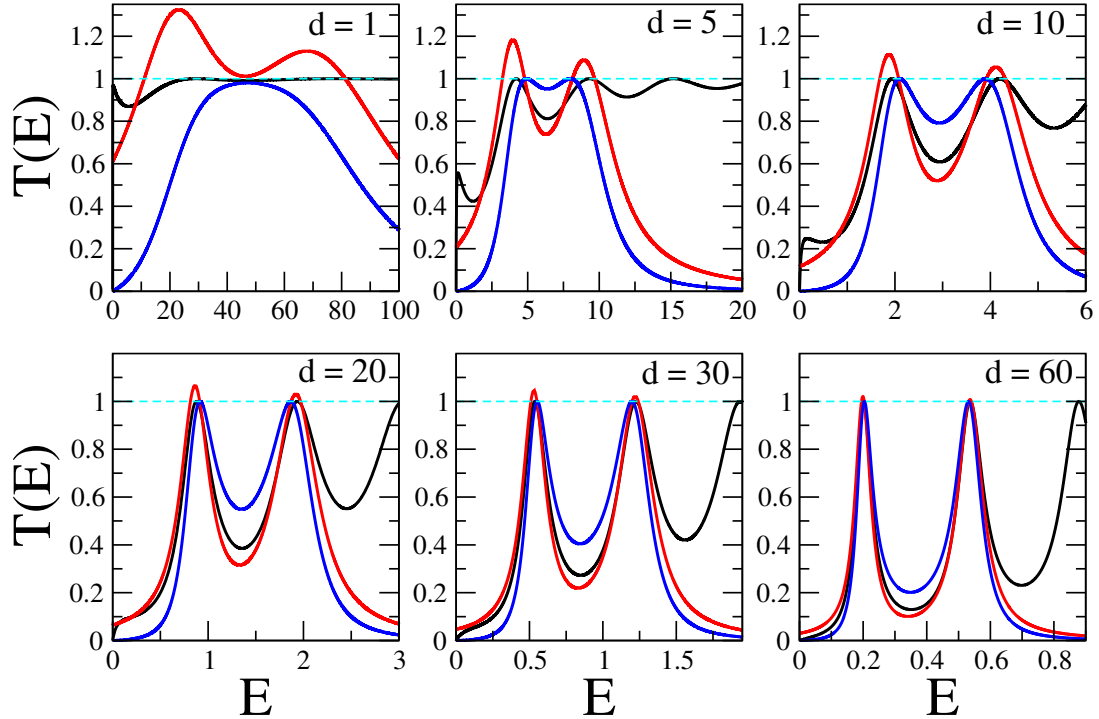


Figura 5.3: $T(E)$ para un pozo de potencial constante $V_0 = -10$ y $d = 1, 5, 10, 20, 30, 60$ en el sistema de dos canales. En este caso comparamos entre los resultados obtenidos para; $N = 300$ (línea negra), 2×2 [ec. (5.28) y línea azul] y la suma de dos BW (línea roja). Observamos que la correspondencia mejora para resonancias cada vez más agudas. La línea discontinua en color cian denota la línea $cte = 1$. Los valores de los polos están dados en el Cuadro 5.1.

El efecto de incluir estados acotados se nota más cuando éstas son más próximas a $E \sim 0$ y éstas determinan el primer máximo local, como se puede apreciar en la Fig. 5.4. Por ejemplo, para $d = 1$, la primera resonancia es para $E = E_3 = 29.478$ ($T(E_3) = 1$) mientras que $w_3 = 11.254$, es decir E_3 está desplazada un $\sim 61\%$ respecto a ω_3^E (ambas lejos de $E \sim 0$) y por lo tanto $z_2 = -0.001$ es la

^EMás adelante veremos que para valores de β pequeños existe un mayor desplazamiento relativo entre E_λ y ω_λ (ver Fig. 6.1) para los primeros λ 's.

responsable del primer máximo local en $T(E \sim 0)$. El efecto de los estados acotados se pierde conforme la parte imaginaria del primer polo resonante se acerca más al eje real, lo cual sucede cuando d es cada vez más grande (ver Cuadro 5.1).

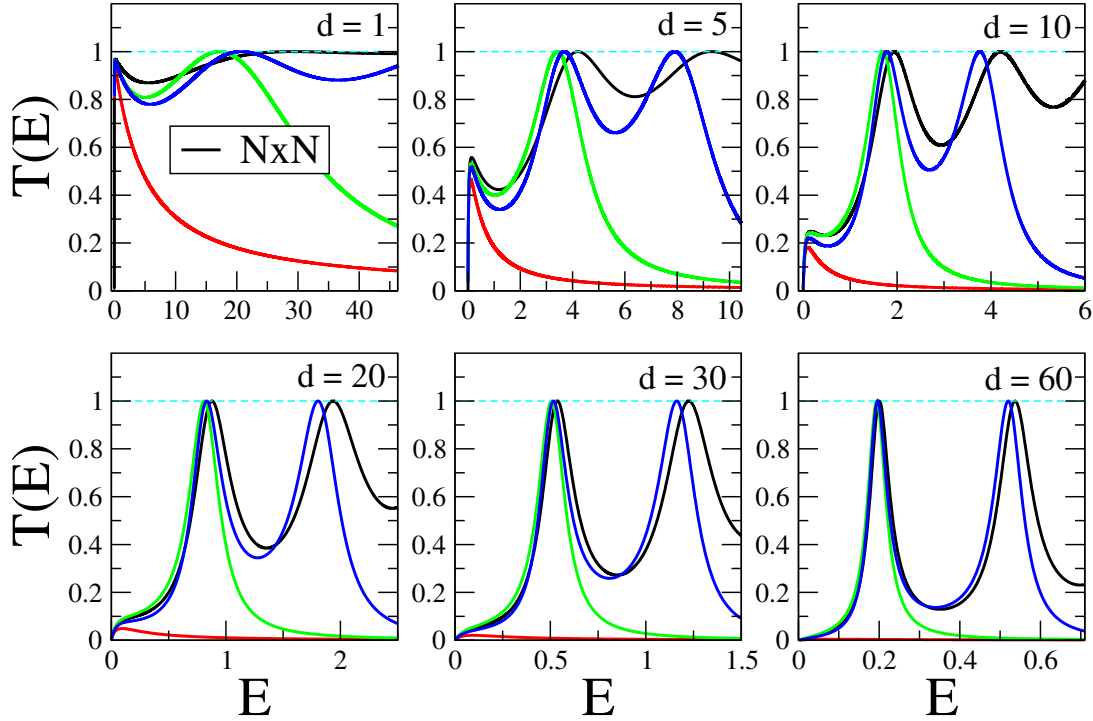


Figura 5.4: Descripción de $T(E)$ tomando en cuenta los últimos dos estados acotado para un pozo plano: $V_0 = -10$ y $d = 1, 5, 10, 20, 30, 60$ en el sistema de dos canales; el color rojo (verde) [azul] representa el valor de $j = 0$ (1) [2] para cada matriz de tamaño $(2 + j) \times (2 + j)$. Aquí $N = 300$ para la curva en color negro. Para $j = 0$, significa que únicamente consideramos el efecto de los estados acotados. Para matrices de tamaño de 3×3 hemos usado la expresión (5.29) para $T(E)$.

Por último, en la Fig. 5.5 mostramos el tiempo de demora, en donde comparamos los resultados usando únicamente el modelo $N \times N$ y el modelos de 2×2 (ecuación 5.39), además tampoco incluimos el efecto de los estados acotados como en el ejemplo de la Fig. 5.4. Los resultados muestran que la ecuación (5.39) describe bien al tiempo de demora para d grande.

$d = 1$	$d = 5$	$d = 10$	$d = 20$
$z_1 = -6.4902$	$z_5 = -2.569$	$z_{10} = -1.542$	$z_{20} = -0.908$
$z_2 = -0.001$	$z_6 = -0.019$	$z_{11} = -0.045$	$z_{21} = -0.075$
$z_3 = 11.254 - i26.539$	$z_7 = 3.796 - i1.786$	$z_{12} = 1.850 - i0.583$	$z_{22} = 0.859 - i0.191$
$z_4 = 51.862 - i60.282$	$z_8 = 8.834 - i2.966$	$z_{13} = 4.107 - i0.913$	$z_{23} = 1.919 - i0.294$
	$d = 30$	$d = 60$	
	$z_{30} = -0.671$	$z_{60} = -0.414$	
	$z_{31} = -0.090$	$z_{61} = -0.108$	
	$z_{32} = 0.529 - i0.099$	$z_{62} = 0.199 - i0.030$	
	$z_{33} = 1.219 - i0.153$	$z_{63} = 0.536 - i0.049$	

Cuadro 5.1: Últimos y primeros dos polos acotados y resonantes, respectivamente, para $V_0 = -10$ y diferentes valores de d . El total de estados acotados es $n_b = 2, 6, 11, 21, 31$ y 61 para $d = 1, 5, 10, 20, 30$ y 60 , respectivamente.

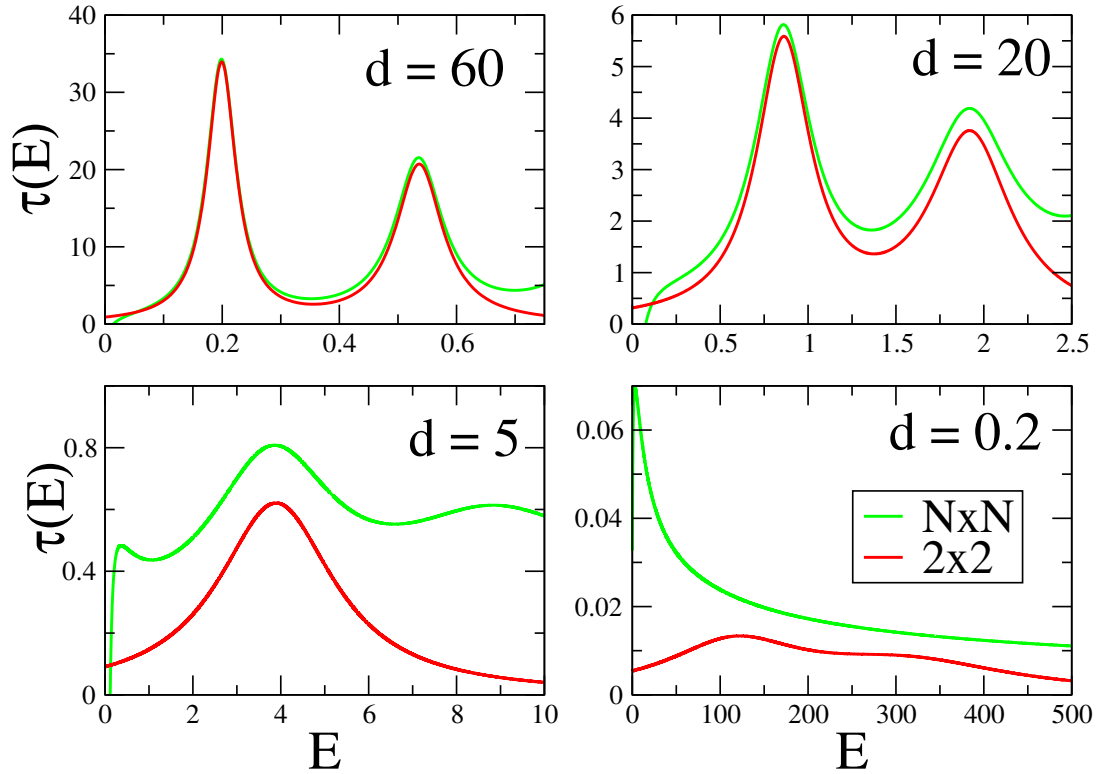


Figura 5.5: Tiempo de demora para $V_0 = -10$ y diferente valores de d (se muestran en cada panel) en el sistema de dos canales. En esta figura compramos resultados de un modelo de $N \times N$ ($N = 300$ en todos los casos) con el modelo de 2×2 [ver ec. (5.39)]. Aquí no incluimos el efecto de los estados acotados.

RESUMEN: En el presente capítulo hemos mostramos una forma alternativa de obtener el hamiltoniano

efectivo, en donde hemos usado una identidad matricial en vez de lo usual, emplear la aproximación de la serie geométrica para matrices. La diferencia está en que, cuando usamos la identidad matricial [ecuación (5.6)] se hace más evidente la conmutación entre las matrices G y VV^\dagger .

Posteriormente, obtuvimos las expresiones de las cantidades de dispersión en términos del hamiltoniano efectivo no hermítico. Comparamos el cálculo de las CD usando el formalismo de la MR con los del formalismo del hamiltoniano efectivo, encontrando un perfecto acuerdo. No obstante, vimos que el método de la Matriz de Reacción es más eficiente que el de \mathcal{H} . En seguida y para el caso específico del coeficiente de la transmisión, obtuvimos expresiones para $N = 1, 2$ y 3 . Particularmente, la expresión para $N = 3$ la usamos para determinar la condición que debe cumplirse para que una resonancia esté aislada ($\frac{\Gamma_{\lambda+1}}{\Delta E_{\lambda+1}} \ll 1$ y $E_\lambda \sim \omega_\lambda$). Por otro lado, el escribir las CD en términos de $\mathcal{H}(E)$ nos permitió relacionarlas de una forma directa y explícita con los polos de S .

Adicionalmente demostramos, que los eigenvalores de $\mathcal{H}(z)$ se obtienen resolviendo una ecuación de punto fijo [ver ecuación (5.44)]. Esto nos sugiere que si el punto fijo fuera del tipo estable, en el sentido de sistemas dinámicos, entonces podemos determinar los polos a través de iteraciones a partir de una condición inicial z_α^0 .

También, usando un potencial plano, comparamos las CD obtenidas para $N \gg 1$ con los modelos de pocos niveles y mostramos que la inclusión de estados acotados en el cálculo de las CD nos describen lo que sucede en la región de $E \sim 0$. Además, mostramos numéricamente que el modelo de pocos niveles trabaja bien en el régimen de traslape medio y pequeño (para $\beta^2 = d^2|V_0|$ grande).

Capítulo 6

Métodos para calcular los polos de S

En este capítulo primero discutimos la relación entre los polos de $S(E)$ con los polos de $R(E)$. Posteriormente describimos los siguientes métodos para calcular los polos de la matriz de dispersión en uno y dos canales: el método de búsqueda de las raíces (Sec. 6.3), el método del punto fijo (Sec. 6.4) y el método del escaneo (Sec. 6.5). En la Sec. 6.6 definimos el *parámetro de traslape*, el cual lo usaremos para discutir las limitaciones, régimen de validez y comparar los métodos antes mencionados. Posteriormente, encontramos la expresión para el error que resulta de truncar la serie que define la matriz R e introducimos un método para acelerar la convergencia de los $R_{\nu\nu'}(E)$ que nos permitirá calcular un número mayor de polos de la matriz de dispersión.

6.1. Introducción

La matriz de dispersión $S(E)$ se puede expresar en una variedad de formas; por ejemplo, en términos de la función de Green [5, 24], de la matriz K (esencialmente la matriz de Reacción) [24, 32], de la función de Jost [84–86], de Hamiltonianos efectivos [57, 58, 74, 75] y de la matriz de transferencia [5, 27]. En esta tesis, hemos expresado $S(E)$ en términos de la Matriz de Reacción [ver la ecuación (2.72)] y del hamiltoniano efectivo [ver ecuación (5.8)]. Estas dos expresiones nos proveen de dos maneras independientes de calcular los polos. En el primer caso, los polos están dados por los ceros del determinante $\Omega^-(z) = \det(1 - ikR(z)) = 0$, en el segundo por los eigenvalores del hamiltoniano efectivo. También

hemos calculado la matriz $S(E)$ en términos de la matriz de transferencia, pero al no proveernos en general con expresiones analíticas, recurriamos a encontrar los polos escaneando $S(E)$ numéricamente como función de la energía en el plano complejo.

Por otro lado, en el Cap. 3 habiendo re-escrito $\tau(E)$, $P(E)$ y $t(E)$ en términos de la matriz R , hemos demostrado que estas tienen los mismos polos que $S(E)$, dados por los ceros del determinante $\Omega^-(z) = 0$. Sin embargo, como estas cantidades también están escritas en formas independientes de la matriz R , nos rinden formas adicionales para el cálculo de los polos. En particular, veremos que $\tau(E)$, como función de la energía en el plano complejo, resulta una cantidad muy conveniente para calcular sus polos por el método de escaneo.

En este Capítulo, describiremos el cálculo de los polos por tres métodos: búsqueda de ceros del determinante Omega, método de escaneo y método del punto fijo utilizando el Hamiltoniano efectivo. Así mismo, discutiremos las ventajas y limitaciones de cada método. Todos estos métodos requieren de una estimación inicial de la localización de los polos. Por lo tanto, antes de abordar cada método, es conveniente discutir la relación que hay entre el espectro de $S(E)$ (espectro de polos de $S(E)$) y el espectro del Hamiltoniano de reacción.

6.2. Polos de la matriz S y polos de la Matriz de Reacción

Aquí cobra esencial importancia el haber definido una región de reacción, con su respectivo espectro de energías discretas, $\{E_n\}$. Los polos de la Matriz de Reacción ocurren precisamente en E_n , por eso nos podemos referir a estos como los eigen-niveles de reacción, eigen-niveles del sistema interno o polos de R . En primer lugar, es bien sabido que si los polos de S , $z_n = \omega_n - i\Gamma_n$, están suficientemente cercanos al eje real, estos se manifiestan como resonancias aisladas en las cantidades de dispersión [23, 26]. Entre más cerca están los polos del eje real, más delgadas (asiladas) son las resonancias. Cuando esto sucede, ω_n es aproximadamente igual a la energía E_n de algún estado acotado del potencial, como lo indica la fórmula de Breit-Wigner [72]:

$$|t(E)e^{2ikd}|^2 \simeq \frac{\Gamma_\lambda^2}{(E - \omega_\lambda)^2 + \Gamma_\lambda^2}. \quad (6.1)$$

que obtuvimos en el Cap. 5. En este caso, el concepto de resonancia en mecánica cuántica coincide con el de la mecánica clásica; un sistema entra en resonancia cuando se le excita con la misma energía de uno de los modos vibracionales del sistema cerrado. Esta correspondencia nos lleva a pensar en los estados de reacción como lo equivalente a los modos vibraciones del sistema cuántico. Debemos notar que para que esta correspondencia ocurra es necesario escoger las fronteras de Continuidad iguales a las fronteras de reacción (c.f. discusión de la Sec. 2.2.1 del Cap. 2).

Es claro entonces que cuando las resonancias en las cantidades de dispersión están aisladas, debemos buscar los polos de z_n suponiendo que su parte real, ω_n , se encontrará en un vecindario pequeño al rededor de E_n , el n -ésimo eigen-nivel de reacción. Este vecindario deberá crecer al aumentar la anchura de las resonancias en las cantidades de transporte. ¿Podría este vecindario ser igual o mayor que la distancia entre niveles vecinos $E_{n+1} - E_n$? Si fuera así, no existiría una correspondencia uno a uno entre niveles de reacción y polos de S . No hemos demostrado analíticamente ni encontrado alguna referencia que demuestre bajo que condiciones (sobre el potencial) tal correspondencia deba existir o no. Sin embargo, para cualquier sistema podemos checar si ésta existe o no. Habrá correspondencia uno a uno si $\omega_n \in (E_n, E_{n+1}) \forall n$, o si $\omega_{n+1} \in (E_{n+1}, E_n) \forall n \geq 1$. En el primer caso, la parte real del n -ésimo polo, ω_n , está arriba de su correspondiente nivel de reacción E_n y en el segundo caso, por abajo.

El primer caso implica que para todo n ,

$$0 < \frac{\omega_n - E_n}{E_{n+1} - E_n} < 1, \quad (6.2)$$

y en el segundo caso,

$$0 < \frac{\omega_{n+1} - E_n}{E_{n+1} - E_n} < 1. \quad (6.3)$$

Ambos casos pueden suceder, dependiendo si la primera resonancia ocurre tal que $\omega_1 < E_1$ o si $\omega_1 > E_1$. La correspondencia uno a uno se cumple si y sólo si cualquiera de las dos se cumplen para todo n .

Como ilustración, en la Fig. 6.1 verificamos que tal correspondencia se cumple para tres sistemas: (a) pozo plano para $V_0 = -10$ y $d = 5$, (b) pozo plano $V_0 = -10$ y $d = 4.95$ y (c) pozo con perfil cosenoidal [ver ec. (6.9a)] para $V_0 = -10$ y $d = 6$. Los sistemas (a) y (b) difieren sólo en la anchura, lo que produce una diferencia en sus eigen-estados acotados. En a) se cumple que $\omega_1 > E_1$ y en (b) que $\omega_1 < E_1$. En el sistema (c) se cumple que $\omega_1 > E_1$

No es difícil encontrar potenciales cuyos niveles de Neumann sean cuasi-degenerados. Por ejemplo, barreras de potencial múltiples. En tal caso, hemos visto que sólo existe un polo de S para cada multiplete de eigenestados degenerados de reacción.

De cualquier manera, como en muchos casos no se puede prever si habrá degeneración de niveles de reacción, se utilizará el mismo criterio para determinar el intervalo inicial de búsqueda de polos. Veremos en las próximas subsecciones como cada uno de los métodos que presentamos aquí encaran las degeneraciones de niveles de reacción.

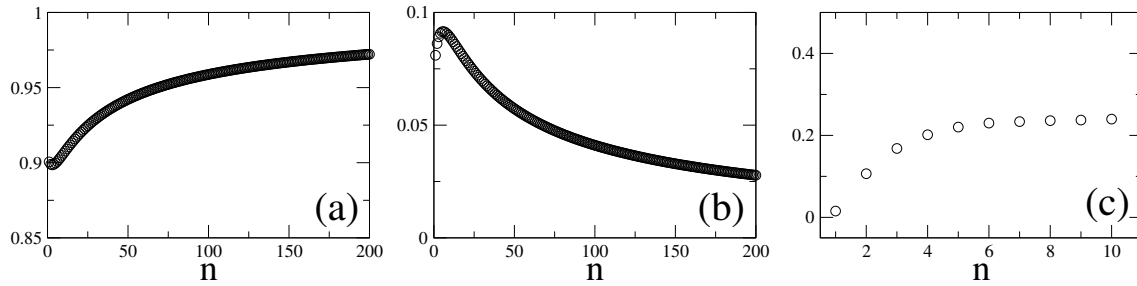


Figura 6.1: En esta figura verificamos la correspondencia uno a uno usando pozos de potenciales. En (a) un pozo plano con $V_0 = -10$ y $d = 5$ [$\omega_1 > E_1$, graficamos la desigualdad (6.2) (eje vertical)], (b) pozo plano $V_0 = -10$ y $d = 4.95$ [$\omega_1 < E_1$, graficamos la desigualdad (6.3) (eje vertical)] y (c) pozo cosenoidal [ver ec. (6.9a)] $V_0 = -10$ y $d = 6$ [$\omega_1 > E_1$, en el eje vertical la desigualdad (6.2)].

6.3. Método de búsqueda de raíces (MBR)

Este método consiste entonces en determinar los ceros de $\Omega^-(z) = \det(1 - ikR(z)) = 0$, para lo cual se puede usar alguna paquetería de búsqueda de raíces. Nosotros utilizamos el programa findroot de Mathematica. Es conveniente señalar aquí, que la matriz R está definida por una serie infinita [Cf. (2.29)]. Por lo tanto, etiquetaremos $\Omega_N^-(z)$ con un subíndice N , que se refiere al número de términos considerados en la serie de la matriz R :

$$\Omega_N^-(z) = \det(1 - ikR_N(z)) \quad (6.4)$$

Después fijamos un cuota ϵ tal que exista un N , y un intervalo real de energía δ_E , tal que

$$\left| (\Omega_{N+1}^-(z) - \Omega_N^-(z)) / \Omega_N^-(z) \right| < \epsilon, \quad \epsilon > 0. \quad (6.5)$$

En la práctica, y en general, N es del orden de 2000 para un $\epsilon = 0.001$. Esto indica que la convergencia de R es muy lenta y por lo tanto, cuando deseemos calcular un gran número de polos es necesario idear un método de aceleración de convergencia, el cual trataremos en la sección 6.9

Como se menciona en la sección anterior, buscaremos los polos de S tal que ω_1 esté, ya sea, en (E_1, E_2) o en $(0, E_1)$. A priori no se sabe cual de estos casos es el que en realidad ocurre, así que se empieza por suponer uno de los dos, cualquiera. Para una mejor aplicación del método, es conveniente i) examinar el espectro E_n y ii) calcular alguna de las cantidades de dispersión como función de energía. Lo primero nos sirve para saber si hay cuasi degeneraciones o no y la segunda para saber si las resonancias, son delgadas o anchas y en que región de energía.

1. Caso espectro de reacción no degenerado: Entonces se espera la correspondencia uno a uno de polos de S y polos de R :
 - a) resonancias (de dispersión) delgadas: Se supone, por ejemplo, que $\omega_i \in (E_i, E_{i+1}) \forall E_i, i > 1$ siempre es mayor o igual que cero porque la energía de incidencia es mayor que cero. Se inicia la búsqueda de unos 4-5 ceros y se examinan los datos y si los valores de ω_n no aparecen ordenados o están muy alejados de sus respectivos E_n , entonces se repite la búsqueda pero ahora tendrá que cumplirse que $\omega_{i+1} \in (E_{i+1}, E_i)$. Los valores de ω_n que arroje el programa deberán estar cercanos a E_n , puesto que las resonancias de dispersión son delgadas.
 - b) resonancias (de dispersión) anchas o no perceptible. Se repite el caso anterior y se deberá obtener un conjunto ordenado creciente de valores ω_n tales que cumplan, ya sea, $\omega_i \in (E_i, E_{i+1})$ o $\omega_{i+1} \in (E_{i+1}, E_i)$ pero con valores de ω_n intermedio entre E_{n+1} y E_n o E_n y E_{n-1} .
2. Caso espectro de reacción cuasi-degenerado. Habiendo detectado los estados cuasi-degenerados, se repite el proceso indicado en a). Se verá que la búsqueda de ceros para estos estados sólo uno de cada multiplete converge a un cero de la función Ω_N^- .

6.4. Método del Punto Fijo (MPF)

El MPF es un método iterativo que resulta de plantear el problema de eigenvalores para el hamiltoniano efectivo $\mathcal{H}(z) = H_{in} - ikVV^\dagger$. Aquí resumimos la discusión de la Sec. 5.4. Podemos seguir dos procedimientos formalmente equivalentes para obtener los eigenvalores de $\mathcal{H}(z)$. El primero es obtener las raíces

de la ecuación característica $\xi(z) = \det(\mathcal{H}(z) - z) = 0$. El segundo es diagonalizar $\mathcal{H}(z)$ usando, ya sea, el algoritmo de Jacobi o el algoritmo de Givens [78–80]. Del primer procedimiento obtenemos que los polos ocurren en $z = z_n$ y del segundo notamos que $z_n = z_n(z)$. Siendo ambos procedimientos equivalentes, entonces debe de cumplirse que

$$z_n = z_n(z) = z. \quad (6.6)$$

Es decir, la ec. (6.6) es la ecuación del punto fijo para los eigenvalores de $\mathcal{H}(z)$. Estos eigenvalores los obtenemos a través de iteraciones dada una condición inicial z_0 tal como se describe a continuación:

- El proceso se inicia substituyendo una adivinanza z_0 para obtener el primer polo de \mathcal{H} . Tomamos $z = z_0 \equiv E_1 + i0$. Se diagonaliza numéricamente este hamiltoniano $\mathcal{H}(z_0)$ de rango N , lo cual nos arroja N polos $z_n^{(1)}(z_0)$, $n = 1, 2, \dots, N$. En la siguiente etapa substituímos $z_1^{(1)}$ en \mathcal{H} . Su diagonalización arroja el segundo conjunto $\{z_n^{(2)}\}$.
- Antes de hacer el cálculo del siguiente conjunto de eigenvalores, medimos la variación de la parte real del eigenvalor $z_1^{(2)}(z_1)$ respecto a la parte real del eigenvalor calculado en la primera iteración (el resultado no cambia si usamos la parte imaginaria en vez de la parte real), i.e., $\varepsilon_1 = \left| \frac{\omega_1^{(1)} - \omega_1^{(2)}}{\omega_1^{(2)}} \right|$.
- Sí se satisface que $\varepsilon_1 \leq 10^{-5}$ (este es el valor de ε que fijamos en todos nuestros cálculos), entonces decimos que el primer polo de $S(z)$ ha sido calculado correctamente y proseguimos a calcular el siguiente polo, siguiendo la misma secuencia.
- Sí ε no satisface la condición anterior ($\varepsilon > 10^{-5}$), entonces nuevamente tomamos el primer eigenvalor del conjunto $\{z_n^{(2)}(z_1)\}$ y evaluamos el hamiltoniano efectivo en dicho eigenvalor: $\mathcal{H}(z_1^{(3)})$, para posteriormente diagonalizarla, hacer el cálculo de $\varepsilon_2 = \left| \frac{\omega_1^{(2)} - \omega_1^{(3)}}{\omega_1^{(3)}} \right|$ y así sucesivamente hasta satisfacer el valor de ε .
- Una vez satisfecha la condición para ε proseguimos con el cálculo del siguiente polo. Para ello, suponemos que el primer polo convergió en la j -ésima iteración ($\{z_n^{(j)}(z_{j-1})\}$). Entonces nuestra primera adivinanza la tomaremos como $z_2^0 \equiv z_2^j(z_{j-1})$ y en este eigenvalor evaluamos el hamiltoniano efectivo $\mathcal{H}(z_2^0)$ para diagonalizarla, luego obtenemos el conjunto $\{z_n^{(j+1)}(z_j)\}$ y repetimos todos los pasos hechos en el cálculo del primer polo hasta nuevamente satisfacer el valor de ε . Los siguientes polos se calculan siguiendo la misma receta.

Hemos identificado dos situaciones donde el MPF no converge. La primera es cuando existen estados de reacción cuasi-degenerados. En este caso, sólo uno convergerá numéricamente. Esto se puede anticipar pues se sabría que existen estados cuasi-degenerados. La segunda situación ocurre cuando la parte imaginaria del enésimo polo, Γ_n , es del orden del espaciamiento de niveles de reacción, $E_{n+1} - E_n$. Claro, a priori no se sabe cual es el valor correcto de Γ_n , pero esto se puede checar con el método de escaneo presentado arriba. Usualmente esta falta de convergencia indica que el rango del hamiltoniano efectivo, el número de términos considerados en la serie de R , o ambos, no son suficientes. Cuando esto sucede en los primeros polos, es posible aumentar el rango y el número y hasta que haya convergencia. Si embargo, para energías grandes, el incremento de estos tamaños requiere de tiempos de cómputo no viables. Aun cuando hayamos acelerado la convergencia de la serie R , en ocasiones es necesario aumentar de manera significativa el rango de \mathcal{H} para lograr convergencias del punto fijo.

6.5. Método de escaneo de la función $\tau(z)$

Este método lo introducimos para auxiliar los otros métodos. Habiendo experimentado con las diferentes cantidades de dispersión, transmisión, tiempo de demora y probabilidad de atramiento, hemos observado que la función $\tau(z)$ es más conveniente que las otras puesto que en general sus gráficos de contorno alrededor de los polos definen con más precisión la posición de los polos. El método es simple, pues consiste en graficar $\tau(z)$ dada en la ecuación (3.2) y (3.19) para uno y dos canales, respectivamente, haciendo un barrido en el plano complejo. Para ello, requerimos producir una *malla* en dicho plano suficientemente fina como para localizar los polos. Esta malla se hace variando la parte real de z mientras mantenemos fija su parte imaginaria (o viceversa) y así sucesivamente hasta cubrir una región limitada por E_n y E_{n+1} en el eje real, que es la misma región para el eje imaginario. Esto se repite hasta obtener los resultados deseados.

Para mostrar la funcionalidad de los métodos antes descritos, en la Fig. 6.2 localizamos los polos para un sistema de un canal correspondiente a una barrera de potencial plana con $(x_2, V_0) = (1/2, 10)$, cuyas cantidades de dispersión corresponden a la de la Fig. 3.4(a). La Fig. de la Izquierda [derecha] corresponde a $|\tau(z)|$ [$|P(z)|$]. En primera instancia, la comparación de estas dos figuras ilustra que aunque $\tau(z)$ y $P(z)$ comparten los mismo polos, sus contornos equipotenciales son muy diferentes. Como se mencionó anteriormente, la función $\tau(z)$ nos permite resolver mejor la posición de los polos. Por otro lado, los parámetros para este ejemplo son tales que producen resonancias muy anchas desde energías bajas, lo cual representa un reto

para nuestros métodos. En dicha figura podemos observar los tres métodos, en donde, los puntos en color **naranja** representarán los valores de z_n para cada iteración en el MPFI, los puntos en color **verde** al valor de z_n a la cual converge el MPFI (o en su defecto, si no converge, entonces al último valor de la iteración) y los puntos en color **rojo** serán los valores de z_n encontrados por búsqueda de raíces^A. La inspección de estas figuras muestra que los tres métodos concuerdan para los primeros cuatro polos. Después del cuarto polo, en el MPF ya no es posible alcanzar convergencia.

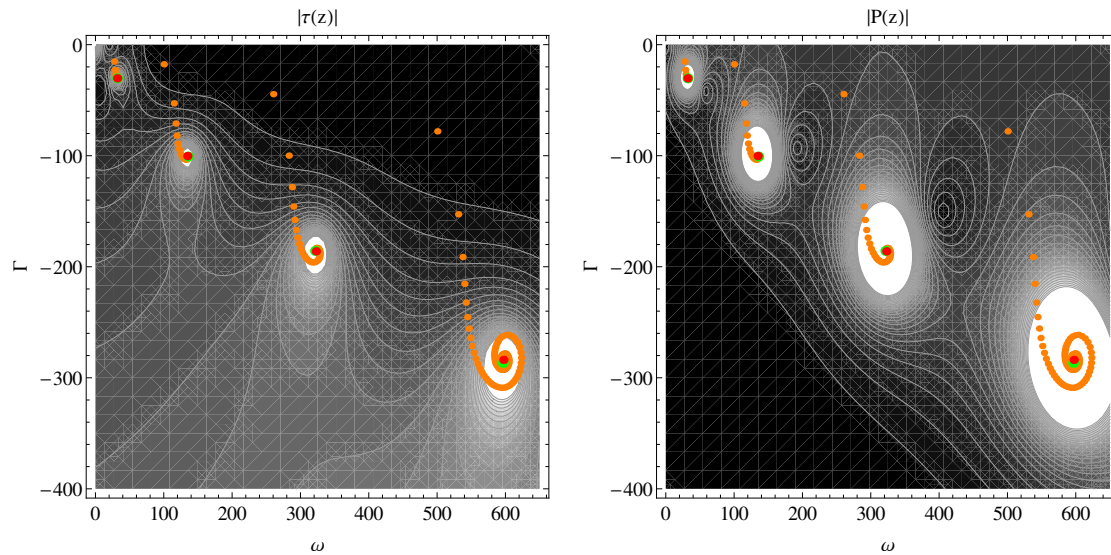


Figura 6.2: Localización de los polos de $\tau(z)$ (Izq.) y $P(z)$ (Der.) para $(x_2, V_0) = (1/2, 10)$. Aquí comparamos los resultados obtenidos por MPFI (puntos naranja y verde), MEs (contornos) y MBR (puntos en rojo). Los puntos anaranjados muestran la evolución de los polos para cada iteración en el MPFI. Los centros de los contornos denotan la posición de los polos de las CD. Para la obtención de los primeros (últimos) dos polos hemos usado $N = 800$ ($N = 1500$) estados de reacción e igual número en el tamaño de la matriz del hamiltoniano efectivo, i.e., 800×800 (1500×1500) para los primeros (últimos) dos polos.

De la Fig. 6.2, podemos sacar algunas conclusiones preliminares pero que se cumplirán en general para el MPF. La más relevante es que el número de iteraciones tiende a aumentar considerablemente conforme se incrementa el número de polos a calcular. Por ejemplo, para obtener el primer polo en el ejemplo anterior, fueron necesarias 5 iteraciones, mientras que para el cuarto polo se necesitaron 83 iteraciones. Otra es que se requieren más estados de reacción y/o tamaños de matrices más grandes para poder calcular más polos.

^AEn todas las gráficas posteriores, estos son los colores que utilizaremos.

6.6. Ventajas y limitaciones de los métodos

Las limitaciones de los tres métodos se determina por el número de eigenestados y eigenvalores de reacción suficientes para definir: a) las cantidades de dispersión (para el MEs), b) la ecuación característica (para el MBR) y c) el hamiltoniano efectivo (para el MPFI). Es decir, a mayor cantidad de eigenestados y eigenvalores de reacción, mayor será el número de polos posibles de calcular. Para ver esto, definimos un *parámetro de traslape* (Δ_n), el cual, toma la razón entre la mitad de la parte imaginaria del polo (anchura de las resonancias cuando hay acoplamiento débil) y el espaciamiento entre los niveles de reacción:

$$\Delta_n \equiv \frac{\frac{1}{2}\Gamma_n}{E_{n+1} - E_n}. \quad (6.7)$$

Para ilustrar la utilidad de la expresión (6.7) consideramos como referencia el caso del pozo de potencial plano ($V_0 = -10$, $d = 5$). En el caso del potencial plano, contamos con la expresión analítica exacta:

$$f(z) = \cos(qd) - i\eta_+ \sin(qd) = 0, \quad (6.8)$$

cuyos ceros son los polos de $S(E)$ ^B. Por otro lado, la expresión $\Omega^-(z) = 1 - k^2 \det(R) - ikTr(R)$ es exacta sólo en el límite $N \rightarrow \infty$. La Fig. 6.3 muestra el cálculo de Δ_n para el pozo antes mencionado. De dicha figura podemos observar la importancia de tener una cantidad considerable de eigenestados y eigenvalores de reacción para el cálculo de los polos. Por ejemplo y para este caso particular, si estamos interesados en obtener los primeros $n \sim 15$ polos; entonces, requerimos de $N \sim 2000$ términos en los $R_{\nu\nu'}(E)$ lo cual es equivalente a diagonalizar un hamiltoniano efectivo de 2000×2000 (usando el MPF iterativo) para obtener estos mismos polos. Por otro lado, si estamos interesados en calcular polos de orden más grande ($n \sim 100$), entonces requerimos de $N \sim 100,000$ términos en los elementos de la matriz de reacción, que es equivalente a diagonalizar una matriz de $100,000 \times 100,000$ y ésta es prácticamente imposible.

Los resultados de la Fig. 6.3 nos muestran que los polos convergen lentamente a su valor exacto. Aquí y siendo un potencial de la forma $V(x) = V_0$ es que hemos podido llegar hasta $N = 100,000$ (porque conocemos analíticamente los estados de reacción, ver ecuaciones (2.31) y (2.32)). Sin embargo, para potenciales arbitrarios es necesario diagonalizar la matriz H_{nm} [ver ec. (C.10)] para obtener dichos estados de reacción. Siendo H_{mn} una matriz hermítica, entonces requiere de un tiempo de consumo de cálculo numérico pro-

^BNos referiremos al valor exacto de los polos a aquellos que se obtienen de la expresión exacta (6.8).

porcional al cuadrado tamaño de la matriz ($\propto N^2$). Por ejemplo, una computadora con un procesador **1 Intel Xeon Six-Core E5645 a 2.4 Ghz, 24 Gb memoria RAM, disco duro 1 HD 250 Gb SATA**, sistema Operativo y versión **Linux CentOS 5.6 (64 bits)** (como las que se tienen en la sala de computo del IFUAP) consume alrededor de 10 segundos para diagonalizar una matriz de 1000×1000 y unas cuatro horas para una de $10,000 \times 10,000$.

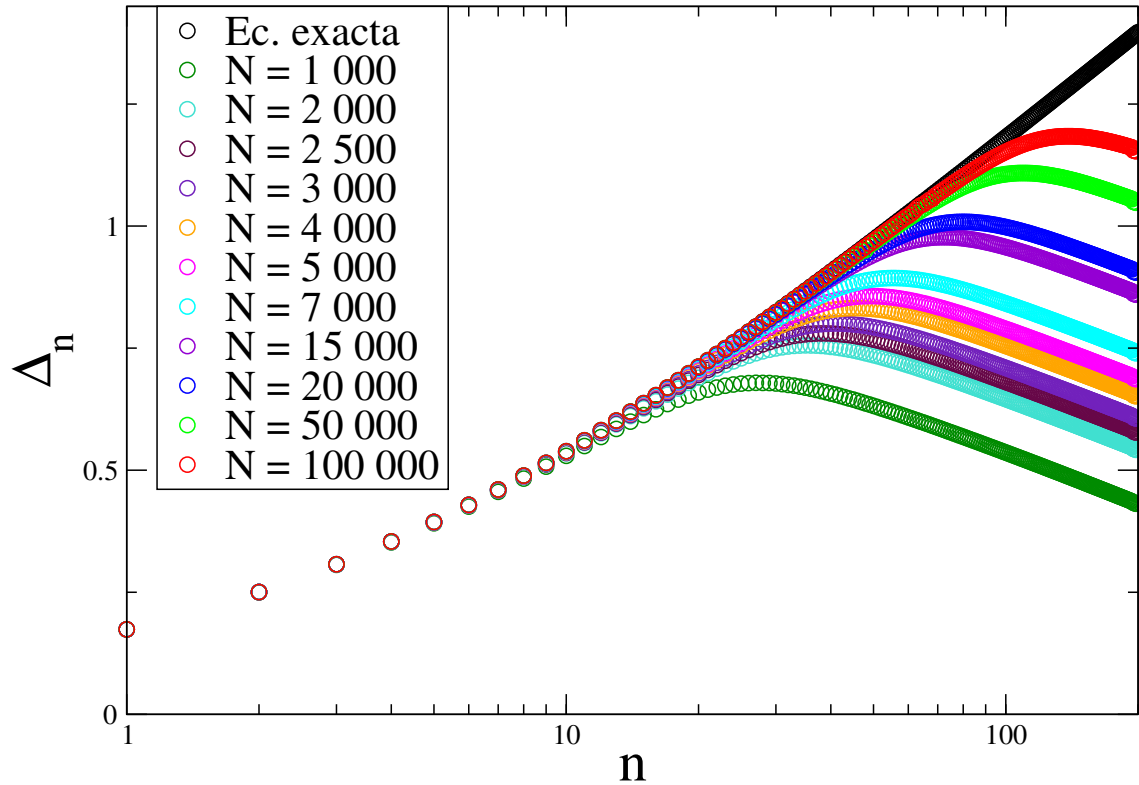


Figura 6.3: Parámetro de traslape para un pozo de potencial constante: $V_0 = -10$ y $d = 5$. Aquí comparamos los resultados obtenidos por el MBR resolviendo la ec. (6.8) (etiquetados por Ec. exacta) con su correspondiente expresión aproximada para diferentes N términos en las series que definen R , ec. (6.4).

El ejemplo anterior muestra también que estamos limitados en poder calcular sólo pocos polos ($n \sim 20$) para cualquier sistema. En este contexto, si queremos calcular el polo $n = 30$, el cual, de acuerdo a la Fig. 6.3 se requieren $N \sim 10,000$ términos, entonces se consumirán cuatro horas en diagonalizar H_{mn} . Supongamos ahora que se requieren de 100 iteraciones para alcanzar la convergencia del polo z_{30} . Por otro lado, el tiempo de consumo numérico para diagonalizar una matriz no hermítica $\mathcal{H}(z)$, es del orden de $\mathcal{O} \sim N^3 \sim 5$ horas. Esto quiere decir que se requieren de aproximadamente 500 hrs (~ 20 días), el cual

prácticamente es inviable y también representa una desventaja para los tres métodos.

En el caso del MBR no son necesarias tales cantidades de horas como en el MPF para calcular en polo $n = 30$, pero conforme aumentamos N , éste se vuelve muy sensible en los intervalos iniciales convirtiéndose en una especie de cálculo de prueba y error (esto no sucede cuando el potencial es $V(x) = V_0$, debido a que conocemos analíticamente los eigenvalores y los eigenestados de reacción y es por ello que hemos podido hacer la Fig. 6.3), lo que conlleva estar cambiando c hasta obtener el polo deseado.

Concluimos entonces que la limitación de los tres métodos se determina por la cantidad de eigenvalores y eigenestados de reacción que podemos conocer.

Por otro lado, hemos encontrado numéricamente que el MPF trabaja bien para $\Delta_n \lesssim 1$ y además, para este valor de Δ_n los tres métodos **coinciden** bastante bien para cualquier potencial. Aunque el MPFI deja de funcionar, los otros dos métodos siguen siendo eficientes aún para $\Delta_n > 1$.

Nuestros análisis muestran que el MPF no es que deje de funcionar para $\Delta_n > 1$, sino que es más un efecto de truncar el tamaño de la matriz del hamiltoniano efectivo y esto se debe a que, sólo llegamos a diagonalizar matrices de 5000×5000 sin obtener mejoras en nuestros resultados. Sin embargo, si tuviéramos la capacidad de diagonalizar matrices mucho más grandes y con menos tiempo que los mencionados anteriormente, entonces sabríamos si éste está limitado (o no) a valores de $\Delta_n \gtrsim 1$ para su funcionalidad.

El MPFI presenta más ventajas para el cálculo de los polos de la matriz de dispersión respecto a los otros dos métodos y se debe a que es más estable numéricamente. En otras palabras, únicamente debemos de fijar una condición inicial y dejar correr el programa para que tiempo después (como unas dos horas para matrices $\sim 2000 \times 2000$) obtengamos los polos convergentes (~ 10 polos). Contrario a los otros métodos para los cuales es necesario fijar diferentes condiciones iniciales para obtener el mismo número de polos con un tiempo similar o mayor. Otra de las ventajas del MPFI es que consume muy poca *memoria-ram* (porque no usamos paquetería alguna y el programa está desarrollada en Fortran 90) y en consecuencia podemos hacer el cálculo de los polos en una computadora de escritorio *estándar* para $\Delta_n \lesssim 0.8$. Por el contrario, los otros dos métodos consumen mucha *memoria-ram*, lo cual imposibilita hacer los cálculos en nuestras computadoras y siempre es necesario hacer uso de los *súper* procesadores del centro de cómputo del IFUAP.

De aquí en adelante usaremos N_R para denotar el número de términos en las series que definen la matriz de reacción y N_H para denotar el tamaño de la matriz del hamiltoniano efectivo ($N_H \times N_H$).

6.7. Sistemas representativos

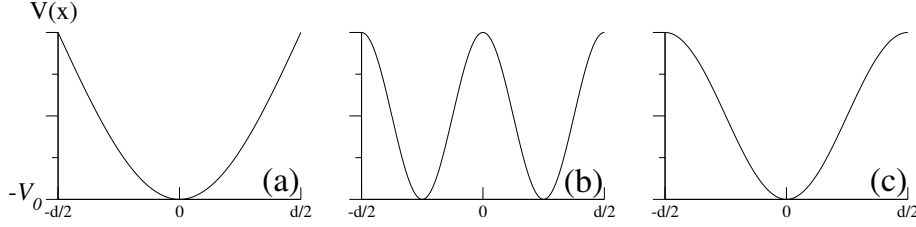


Figura 6.4: Perfiles para los potenciales dados en la ec. (6.9): (a) ecuación (6.9a), (b) ecuación (6.9b) y (c) ec. (6.9c).

Se han analizados detalladamente las limitaciones de los tres métodos, así como también sus regímenes de validez y hemos encontrado sus ventajas para sistemas de uno y dos canales. Aquí sólo nos concentraremos al sistema de dos canales, debido a que Δ_n tiene un comportamiento similar para un canal. En primer lugar, consideremos los siguiente potenciales

$$V(x) = -V_0 \cos(\pi x/d), \quad |x| \leq \frac{d}{2} \quad (6.9a)$$

$$V(x) = -\frac{V_0}{2}(1 - \cos(4\pi x/d)), \quad |x| \leq \frac{d}{2} \quad (6.9b)$$

$$V(x) = -\frac{V_0}{2}(1 - \cos(2\pi x/d)), \quad |x| \leq \frac{d}{2} \quad (6.9c)$$

cuyos perfiles se muestran en la Fig. 6.4. Escogimos estos potenciales para ilustrar los efectos que tiene la discontinuidad de la derivada de la función en la frontera de reacción en el cálculo de los polos. En la Fig. 6.5 mostramos el comportamiento de Δ_n para los potenciales descritos en (6.9). Aquí $N_H = 2000$ para calcular los polos por el MPF y para el MEs y el MBR, hemos considerado $N_R = 2500$. Los valores de Δ_n se muestran en el Cuadro 6.1 y en la Fig. 6.6 mostramos la posición de los polos obtenidos por los tres métodos. Notemos que para $\Delta_n \lesssim 1$ el MPFI funciona bien y además, los resultados de los tres métodos están en muy buen acuerdo.

Notemos que hay una diferencia entre el número de polos que podemos calcular debido al potencial (6.9a) respecto al dado en (6.9c). En ambos casos son pozos de potencial y la diferencia radica en que el primero tiene derivada distinto de cero en la frontera $x = \pm d/2$ mientras que el segundo tiene derivada igual a cero en dichas fronteras. Por ejemplo, para $d = 6$ [$d = 12$] en el primer pozo es posible calcular 8 [10] polos mientras en el segundo, únicamente 2 [4].

n	d=6			d=12		
	Pot. (6.9a) Δ_n	Pot. (6.9b) Δ_n	Pot. (6.9c) Δ_n	Pot. (6.9a) Δ_n	Pot. (6.9b) Δ_n	Pot. (6.9c) Δ_n
1	0.236	0.325	0.986	0.328	0.353	0.407
2	0.436	0.442	1.065	0.458	0.423	0.664
3	0.565	0.637	—	0.550	0.601	0.827
4	0.667	0.757	—	0.624	0.693	0.990
5	0.758	0.891	—	0.688	0.808	1.223
6	0.843	1.031	—	0.746	0.911	—
7	0.934	1.279	—	0.801	1.024	—
8	0.947	1.212	—	0.853	—	—
9	1.121	1.150	—	0.905	—	—
10	1.174	1.112	—	0.954	—	—

Cuadro 6.1: Δ_n para los potenciales descritos en la ec. (6.9), el MPFI funciona bien para $\Delta_n \lesssim 1$ y los valores para $\Delta_n > 1$ fueron calculados usando el MBR, y fueron verificados usando $N = 4000$ por el MEs.

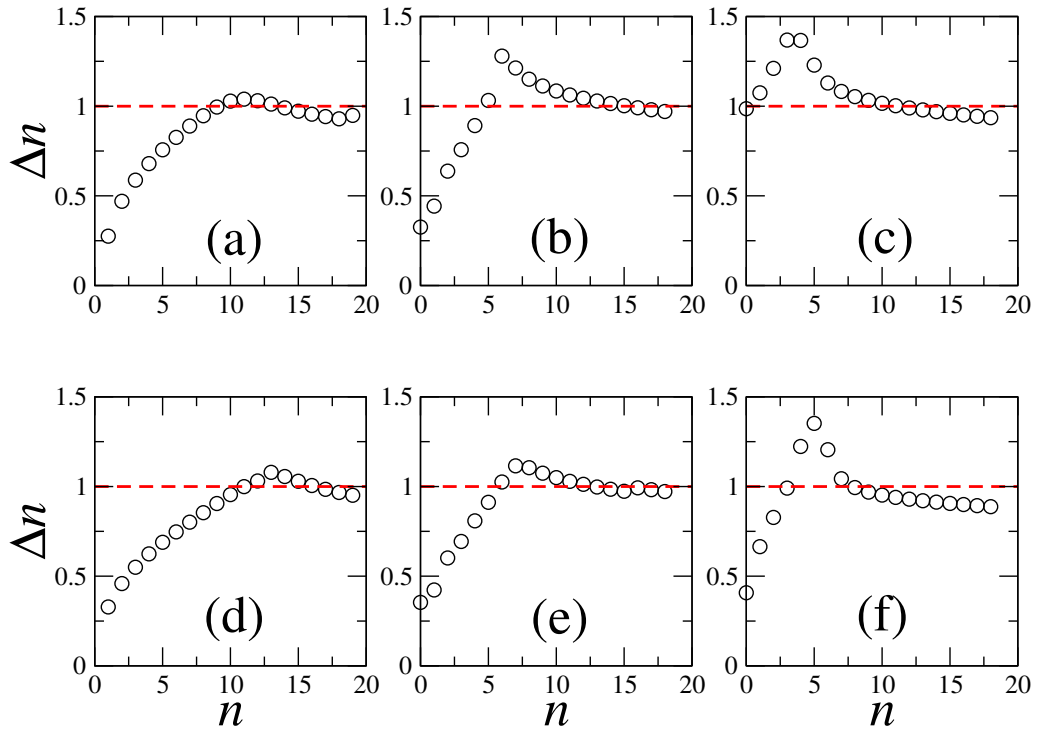


Figura 6.5: Δ_n [ver ec. (6.7)] para los potenciales cosenoidales, ecs (6.9c). $V_0 = -10$ y $N_R [N_H] = 2500$ [2000] términos de reacción para los tres métodos. En (a) [d], (b) [e] y (c) [f] $d = 6$ [$d = 12$] para los potenciales dados en la ec. (6.9a), (6.9b) y (6.9c), respectivamente. Los valores de Δ_n fueron calculados por búsqueda de raíces.

Por otro lado, encontramos que al cambiar el área de ambos pozos de potenciales, entonces aumentamos el número de polos posibles de calcular. Después de hacer muchos análisis, donde hemos variado el valor de la derivada de los potenciales en las fronteras de reacción y así como también sus áreas; hemos concluido que el aumento en el número de polos posibles para calcular, es más sensible al cambio de la derivada en las fronteras de reacción que al cambio en su área.

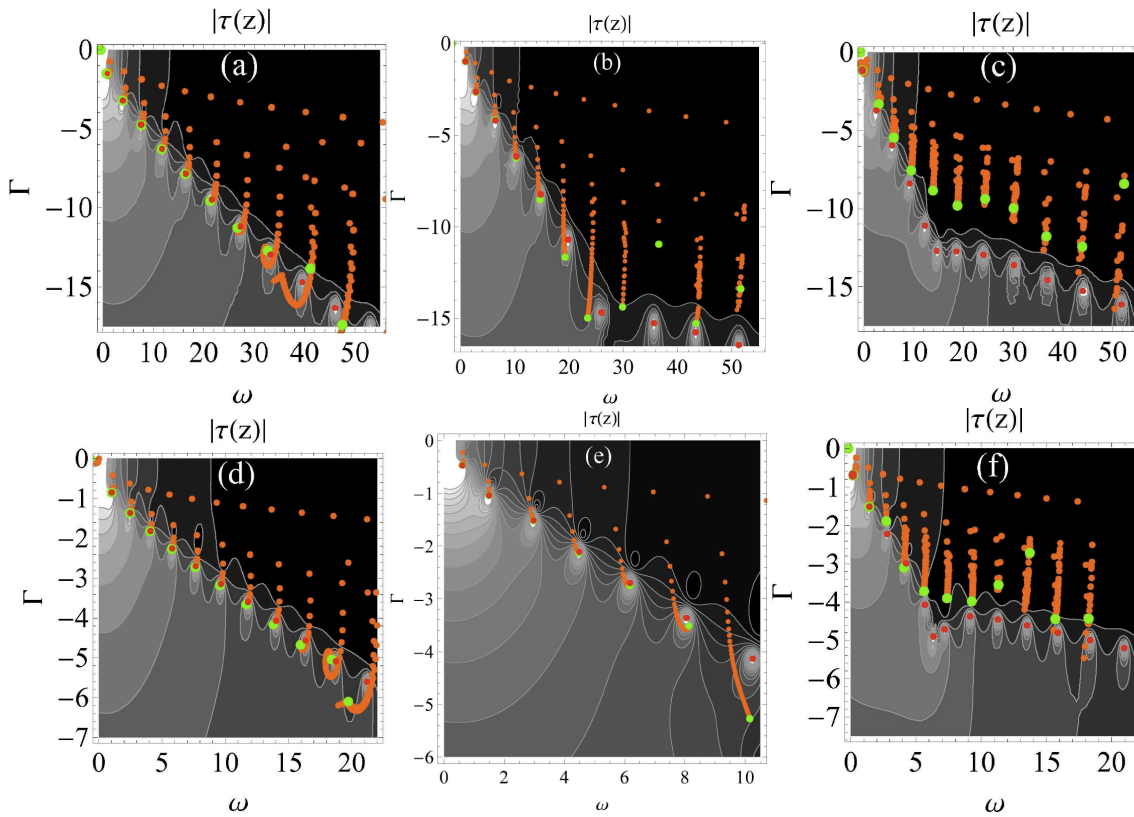


Figura 6.6: Polos en el plano complejo para los potenciales dados en la ec. (6.9). Se muestran en (a) [d], (b) [e] y (c) [f] $d = 6$ [$d = 12$] para los potenciales dados en la ec. (6.9a), (6.9b) y (6.9c), respectivamente. Se usó $V_0 = -10$ y $N_R [N_H] = 2500$ [2000] para todos los casos.

Motivados por los resultados obtenidos en los ejemplos anteriores (para pozos), en lo que sigue vamos a considerar un potencial *especial*, el cual llamaremos potencial parametrizado (con un parámetro α podremos variar el valor de la derivada en la frontera de reacción conservando el ancho y profundidad del potencial). Esto con la finalidad de ver el efecto de la derivada (o el cambio del área) en las fronteras de reacción con la

funcionalidad del MPF, en este caso el potencial está definido como

$$V(\alpha; x) = -\frac{V_0}{V_0 + g(\alpha, d/2)}(g(\alpha; x) + g(\alpha; d/2)), \quad (6.10)$$

donde $g(\alpha; x)$ es la función que define el perfil del potencial y para $\alpha = 1$ ($\rightarrow 0$), tenemos que $\partial_x V(\alpha; \pm d/2) = 0$ ($\rightarrow \infty$) (ver Fig. 6.7).

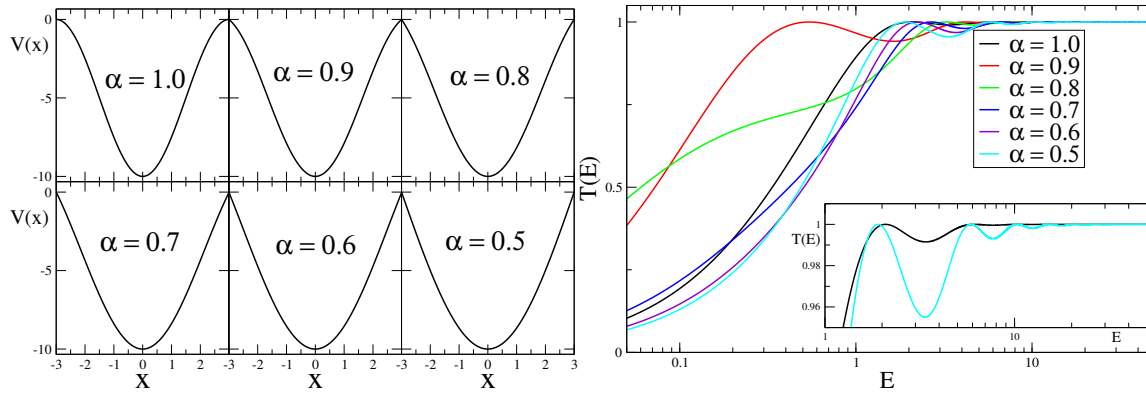


Figura 6.7: Gráfica (Izq.) del potencial (6.10) para $g(\alpha; x)$ dado en la ec. (6.11) y (Der.) de la amplitud de la transmisión para diferentes valores de α . Aquí, $V_0 = 10$ y $d/2 = 3$. En el interior de la figura derecha, mostramos $T(E)$ para los casos $\alpha = 1$ y $\alpha = 0.5$.

Aquí consideraremos dos funciones para $g(\alpha; x)$, una compuesta de una función coseno y otra en términos de una función del tipo de PT. La idea de usar estos potenciales se debe a que producen anchuras muy grandes a bajas energías en sus CD y por consiguiente, el cálculo de sus polos se torna complicado. Pero una vez parametrizadas a través de la ecuación (6.10), podemos obtener una mayor cantidad de sus polos sin necesidad de aumentar N_H y N_R .

Primero consideremos la función tipo coseno, el cual, está dada como:

$$g(\alpha; x) = -\frac{V_0}{2} \left(1 + \cos \left(\frac{2\alpha\pi x}{d} \right) \right), \quad (6.11)$$

cuyo perfil del potencial (6.10) con (6.11) para diferentes valores de α así como de la amplitud de la transmisión se muestran en la Fig. 6.7 para $V_0 = 10$ y $d = 6$.

De la Fig. 6.8 podemos ver que para $\alpha = 1$ [$\partial_x V(\alpha = 1; x = \pm d/2) = 0$], tres polos de $S(E)$ cumplen con $\Delta_n < 1$, por consiguiente el MPFI tendría que funcionar. Sin embargo, como se puede observar de la

Fig. 6.9(a), únicamente el primer polo converge mientras que los siguientes dos (que cumplen con $\Delta_n < 1$) no. Se ha observado que en general para potenciales que cumplen con la condición $\partial_x V(\alpha = 1; x = \pm d/2) = 0$, el MPF no funciona, esto se debe a que este tipo de potenciales tienen grandes traslapes en sus resonancias, esto desde las primeras energías (ver por ejemplo, el comportamiento de $T(E)$ para $\alpha = 1$ en la figura interior de la Fig. 6.7-(Der.) en la cual se puede observar que $T(E \gtrsim 5) \sim 1$ para toda E).

En seguida consideremos el potencial con perfil *tipo PT*:

$$g(\alpha; x) = -\frac{V_0}{2} \frac{1}{\cosh^2(\alpha x)}, \quad (6.12)$$

el cual, también cumple la relación entre Δ_n y con la funcionalidad del MPFI, como se puede observar en la Fig. 6.10, en la cual hemos considerado $V_0 = 10$, $d = 7$ y diferentes valores de α 's.

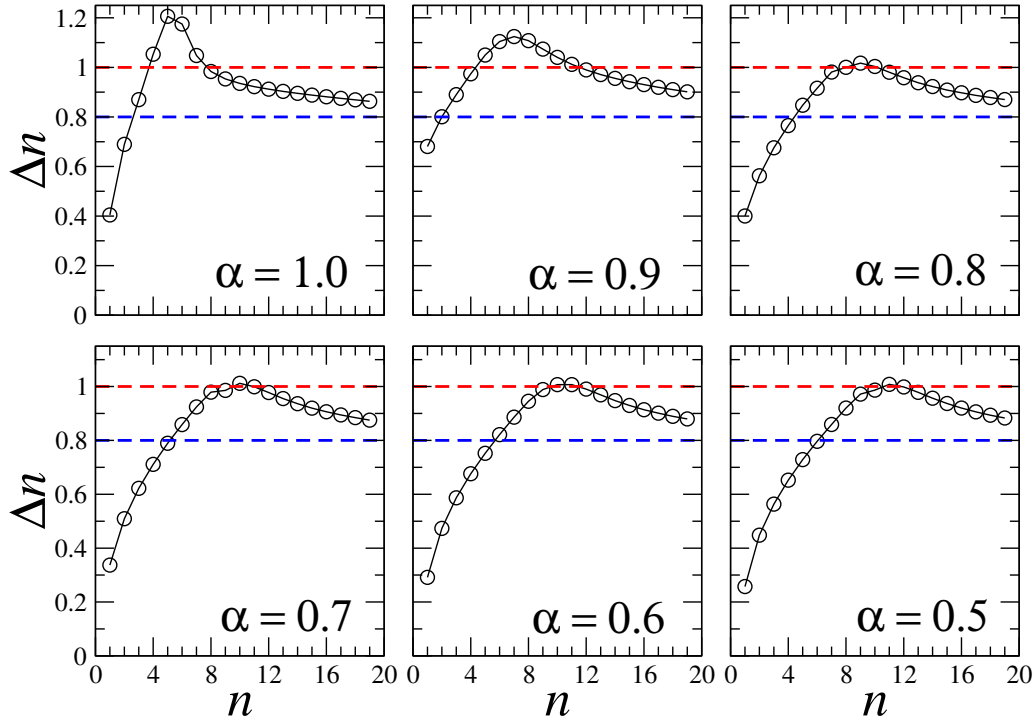


Figura 6.8: Δ_n [ver ec. (6.7)] para el potencial parametrizado tipo coseno para $V_0 = 10$, $d = 6$ y diferentes valores de α . Las líneas discontinuas en color azul denotan aquellos polos que se obtienen al usar $N_R [N_H] = 1000 [800]$ en los tres métodos. Para $0.8 < \Delta_n \lesssim 1$, el número de términos de reacción tiende a aumentar gradualmente hasta llegar a $N_R [N_H] = 2500 [2000]$ para $\Delta_n \sim 1$.

Por favor, no confundir el potencial de PT, ec. (3.37), de la Sec. 3.5.6 con la composición de la ec. (6.10) con (6.12), ya que en este caso, el potencial de PT está parametrizado con α y por lo tanto, los resultados de la Sec. 3.5.6 no son validos aquí.

Podemos observar en todas las figuras que el parámetro de traslape alcanza un máximo, que es reflejo de los tamaños finitos de N_H y N_R (lo mismo se observa en la Fig. 6.3 correspondiente a un pozo plano). Encontramos que el MPF no funciona para valores de $\Delta_n > 1$. Por lo tanto, hemos usado el MBR para obtener los polos cuando $\Delta_n > 1$ utilizando $N_R \sim 5000$.

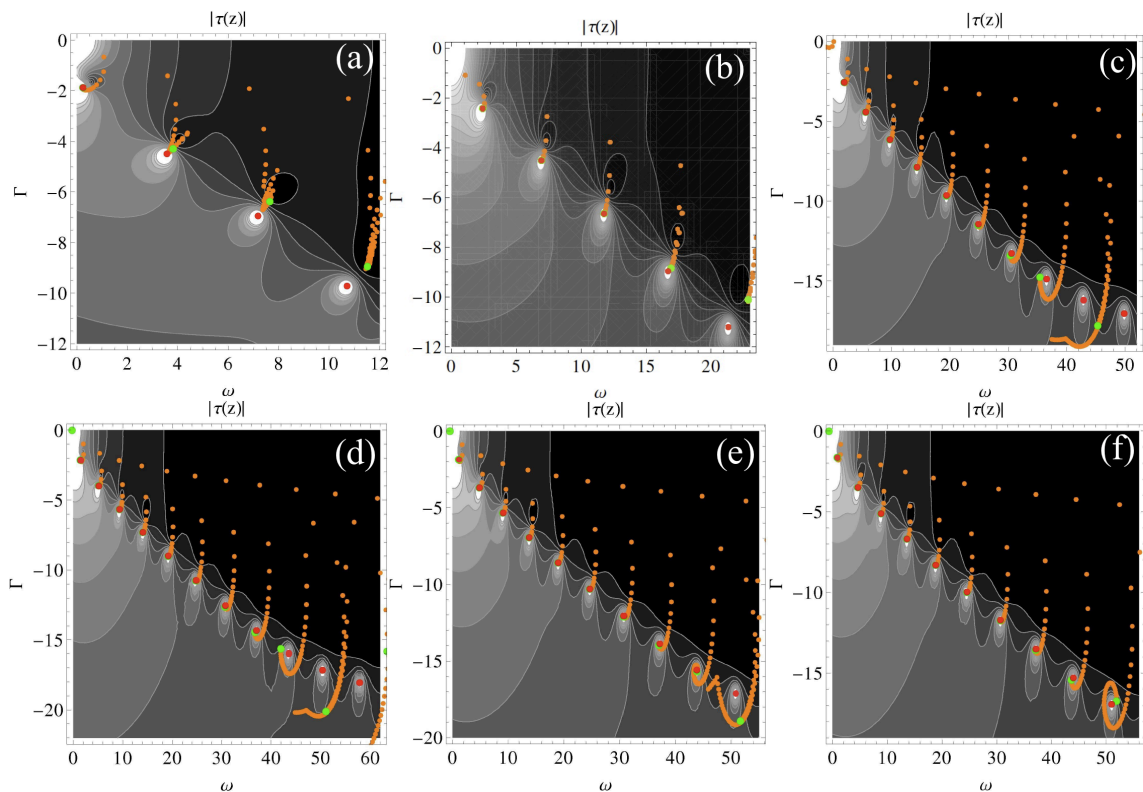


Figura 6.9: Localización de los polos en el plano complejo para el potencial de la ec. (6.10) y con $g(\alpha; x)$ dado en (6.11), esto para $V_0 = 10$ y $d = 6$. En (a) $\alpha = 1.0$, (b) $\alpha = 0.9$, (c) $\alpha = 0.8$, (d) $\alpha = 0.7$, (e) $\alpha = 0.6$ y en (f) $\alpha = 0.5$. Note que en (a) no existe la correspondencia entre Δ_n y la funcionalidad del MPFI, esto se debe a que para (casi) todos los potenciales con $\partial_x V(x = \pm d/2) = 0$, el MPF falla.

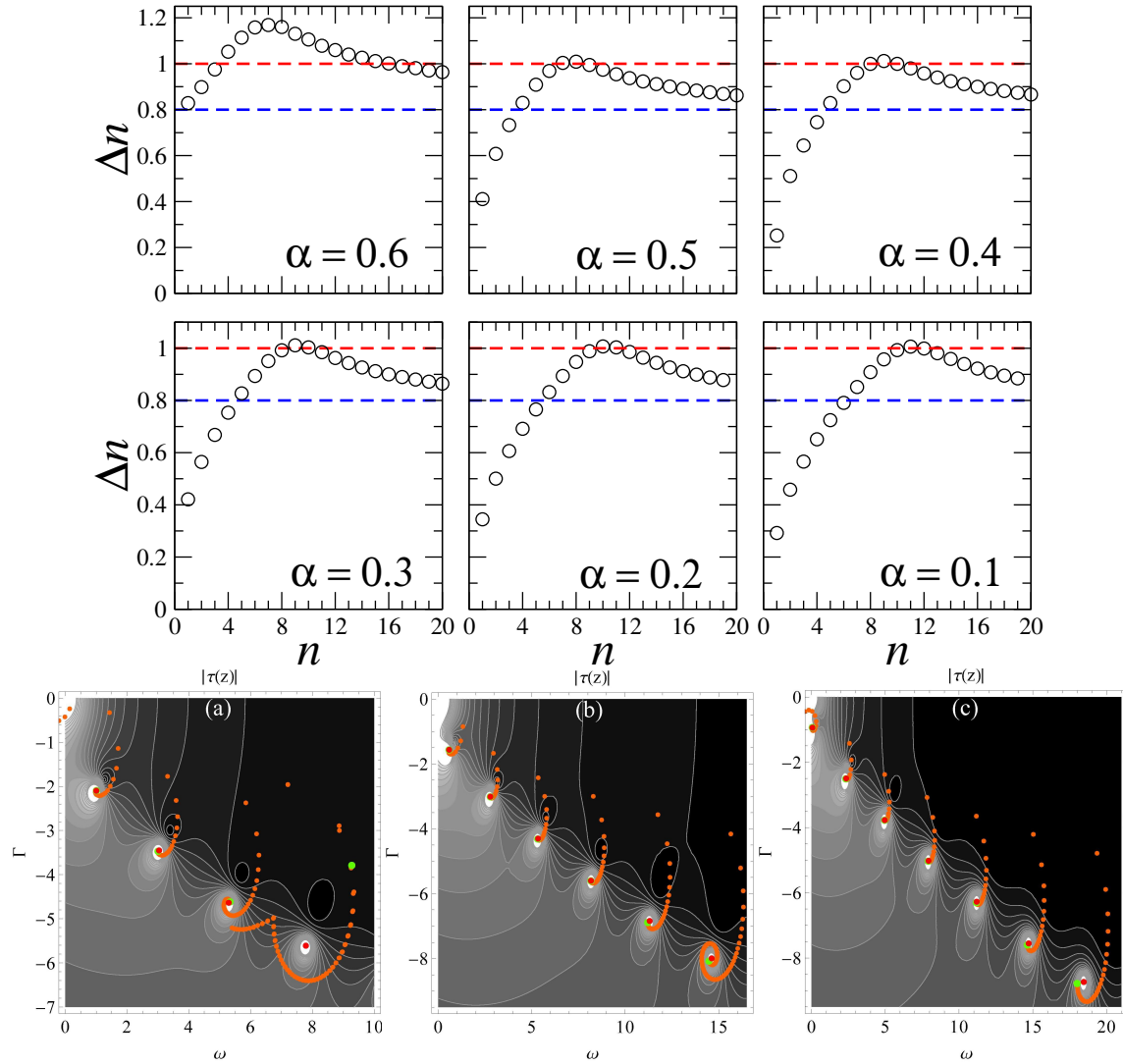


Figura 6.10: Δ_n para el potencial parametrizado tipo de PT con $V_0 = 10$ y $d/2 = 3.5$ (Superior). Las líneas discontinuas en color azul denotan aquellos polos que se obtienen al usar $N_R [N_H] = 1000 [800]$ en los tres métodos. Para $0.8 < \Delta_n \lesssim 1$, el número de términos de reacción tiende a aumentar gradualmente hasta llegar a $N_R [N_H] = 2500 [2000]$ para $\Delta_n \sim 1$, mientras que para $\Delta_n > 1$ los resultados no mejoran. En los tres paneles de la parte inferior de esta figura localización de los polos en el plano complejo, en donde, en (a) $\alpha = 0.6$, (b) $\alpha = 0.5$ y en (c) $\alpha = 0.4$.

Por otro lado, de todos los cálculos numéricos que hemos realizado nos llevan a la conclusión de que el MPF se puede dividir en tres regímenes: a) régimen de funcionalidad ($\Delta_n \lesssim 1$ con $N_H \sim 2000$), b) régimen

de no convergencia. En este régimen no podemos calcular al rededor de 20-30 polos después de aquellos que cumplen con $\Delta_n < 1$. Además, en este régimen, simplemente nunca pudimos encontrar convergencia, inclusive al grado de considerar $N_H = 5000$. c) régimen de convergencia. Aquí encontramos nuevamente convergencia. Sin embargo, los polos calculados no son correctos ya que tienen un error porcentual $\sim 10\%$ para la parte real respecto *al valor exacto del polo*, pero con un error porcentual del $\sim 90\%$ para la parte imaginaria. Por lo tanto, no podemos obtener un valor confiable para Δ_n que nos permita establecer dicho régimen. Para medir el error porcentual antes mencionado, recurrimos al cálculo de los polos para un pozo de potencial plano usando la ecuación (6.8).

6.8. Error generado

Hemos visto en las secciones anteriores que, excepto para $V(x) = V_0$, debemos de truncar la serie $R_{\nu\nu'}(E)$ hasta un cierto número de eigenestados de reacción.

A continuación, estimaremos el error para los elementos de la matriz de reacción cuando la suma es truncada a los primeros N términos. Consideremos primero al caso de $V(x) = V_0$, para el cual, los numeradores en las sumas de los elementos diagonales son todos constantes e iguales a $2/d$, esto es, son independientes de λ , mientras que para los elementos fuera de la diagonal, los numeradores tienen la misma constante en magnitud pero alternan el signo con λ (ver ecuación (2.33)).

Consideremos primero los elementos diagonales que están dados como

$$R_{II}(E) = R_{DD}(E) \equiv R_1(E) = \frac{\hbar^2}{2\mu} \sum_{\lambda=1}^{\infty} \frac{2/d}{E_{\lambda} - E}, \quad (6.13)$$

donde $E_{\lambda} = c\lambda^2 + V_0$ y con $c = \hbar^2\pi^2/\mu d^2$. Así, $E_{\lambda} - E = c\lambda^2 - (E - V_0) = c\lambda^2 - \bar{E}$, donde ahora $\bar{E} \equiv E - V_0$. Por lo tanto,

$$R_1(\bar{E}) = \frac{\hbar^2}{2\mu} \sum_{\lambda=1}^{\infty} \frac{2/d}{c\lambda^2 - \bar{E}}, \quad (6.14)$$

la suma exacta de esta última ecuación está dada en (2.35a). Ahora, comparemos la suma exacta con la suma parcial hasta los primeros $N - 1$ términos

$$R_1^{N-1}(\bar{E}) = \frac{\hbar^2}{2\mu} \sum_{\lambda=1}^{N-1} \frac{2/d}{c\lambda^2 - \bar{E}}. \quad (6.15)$$

donde

$$R_1(\bar{E}) = R_1^{N-1}(\bar{E}) + \frac{\hbar^2}{2\mu} \sum_{\lambda=N}^{\infty} \frac{2/d}{c\lambda^2 - \bar{E}}. \quad (6.16)$$

Aquí N debe ser mayor que $\sqrt{\bar{E}/c}$, de lo contrario, la segunda serie tendrá una o más singularidades y en consecuencia ésta no podrá ser despreciada en general. El truncamiento a los primeros N términos, entonces, conduce a un error Q_N igual al número de términos despreciados

$$Q_N = \frac{\hbar^2}{2\mu} \sum_{\lambda=N}^{\infty} \frac{2/d}{c\lambda^2 - \bar{E}}. \quad (6.17)$$

En seguida demostraremos que Q_N tiene una cota máxima dependiente N . Para ello consideremos lo siguiente (por simplicidad $\frac{\hbar^2}{2\mu} = 1$):

$$Q_N = \sum_{\lambda=N}^{\infty} \frac{2/d}{c\lambda^2 - \bar{E}} \leq B_N \equiv \int_N^{\infty} f(x)dx, \quad f(x) \equiv \frac{2/d}{cx^2 - \bar{E}}, \quad (6.18)$$

donde la integral involucrada

$$B_N = \frac{2}{dc} \int_N^{\infty} \frac{dx}{x^2 - \bar{E}/c}, \quad (6.19)$$

se resuelve haciendo una sustitución trigonométrica del tipo $x = \sqrt{\bar{E}/c} \cos(\theta)$ y el cual, después de un poco de trabajo algebraico nos conduce a lo siguiente

$$B_N = \frac{2}{dc} \sqrt{\frac{c}{\bar{E}}} \log \left(\frac{\sqrt{\bar{E}/c} - x}{\sqrt{x + \sqrt{\bar{E}/c}}} \right)_{x=N}^{x \rightarrow \infty} \quad (6.20a)$$

$$= \frac{1}{d\sqrt{\bar{E}c}} \log \left(\frac{N - \sqrt{\bar{E}/c}}{N + \sqrt{\bar{E}/c}} \right) = \frac{1}{d\sqrt{\bar{E}c}} \log \left(1 - \frac{2\sqrt{\bar{E}/c}}{N + \sqrt{\bar{E}/c}} \right). \quad (6.20b)$$

En la Fig. 6.11 mostramos dos series de valores para \bar{E} , d y V_0 ; específicamente, $\bar{E} = 400$, $d = 2$, $V_0 = 10$ y $\bar{E} = 100$, $d = 2$, $V_0 = 10$. De acuerdo a la figura podemos estimar el número N de términos en la serie Q_N requeridos para producir un límite específico en el error. Por ejemplo, si el error no es mayor que 0.1, entonces, $B_N = 0.1$ y la suma $R_1^{N-1}(\bar{E})$ debe de consistir de al menos $N \approx 170$ ($N \approx 320$) términos para la primera (segunda) serie de parámetros. Note además, que el error disminuye muy rápido al principio, pero después muy lento.

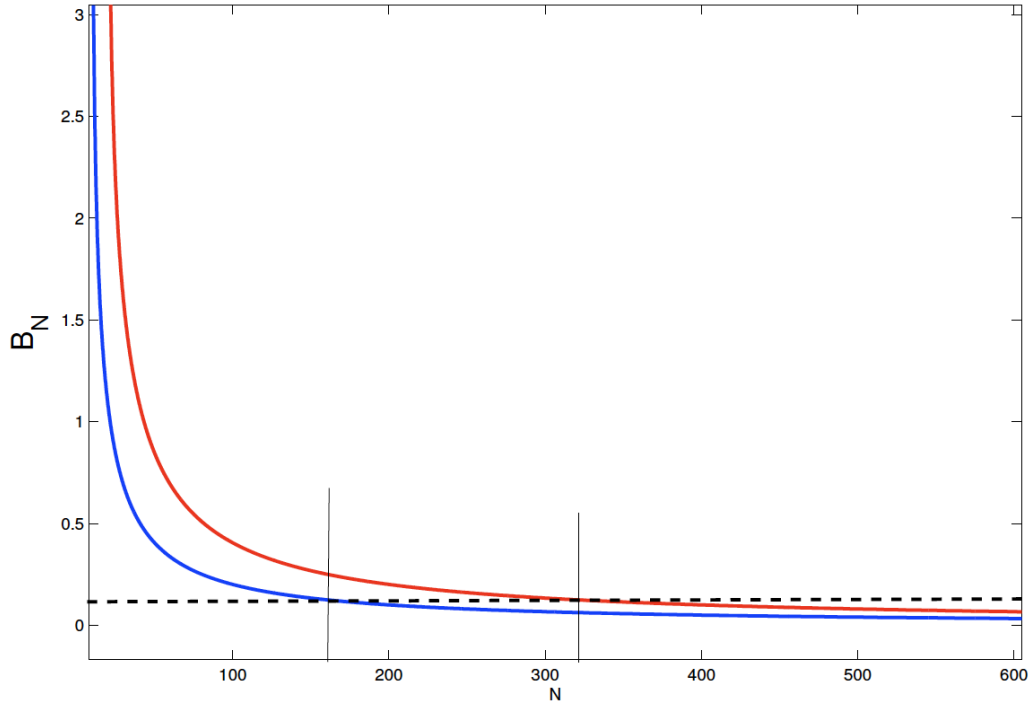


Figura 6.11: B_N [ver ec. (6.20b)] como función de N para \bar{E} , d , V_0 fijos. Las líneas verticales denotan el valor mínimo de N que asegura un error en $R_1(\bar{E})$ menor al especificado para B_N ($B_N = 0.1$ en nuestro ejemplo, línea horizontal discontinua). La curva pintada en color rojo (azul) corresponde a los valores de $\bar{E} = 400$, $d = 2$ y $V_0 = 10$ ($\bar{E} = 100$, $d = 2$ y $V_0 = 10$).

¿Qué implica esta lenta convergencia? Esto implica que para los cálculos basados en la matriz $R(E)$ el error será pequeño para energías bajas y para N no tan grandes, mientras que para energías grandes, entonces se requiere de una suma mucho mayor. Del mismo modo, en el cálculo de los polos, el número de términos requeridos en la suma de $R_1(E)$ aumenta dramáticamente a medida que aumentamos el número de polos a calcular con un error determinado. Aunque esta lenta convergencia fue ejemplificada para el caso de una barrera/pozo de potencial plana, la misma lenta convergencia se encuentra para cualquier otro potencial.

Los elementos fuera de la diagonal de la matriz $R(E)$, $R_{ID}(E) = R_{DI}(E) \equiv R_2(E)$ son series alternates de la forma $\sum_{\lambda=1}^{\infty} (-1)^\lambda b_\lambda$. Ahora, escribiendo esta serie para el caso de una barrera/pozo y con $(\hbar^2/2\mu) = 1$, obtenemos

$$R_2(\bar{E}) = \sum_{\lambda=1}^{\infty} \frac{(-1)^\lambda 2/d}{c\lambda^2 - \bar{E}} = R_2^{N-1}(E) + Q_2^N, \quad (6.21)$$

cuya suma exacta está dada en la ec. (2.35b). Aquí, $R_2^{N-1}(\bar{E}) = \sum_{\lambda=1}^{N-1} \frac{2(-)^\lambda/d}{c\lambda^2 - \bar{E}}$, $Q_2^N = \sum_{\lambda=N}^{\infty} \frac{2(-)^\lambda/d}{c\lambda^2 - \bar{E}}$. Usando la desigualdad del triángulo en Q_2^N , obtenemos que $|Q_2^N| < \frac{2/d}{\alpha(N+1)^2 - \bar{E}}$, ya que la serie es alternante y las sumas parciales $Q_2^j \equiv \sum_{\lambda=N+1}^{N+1+j} (-1)^\lambda \frac{2/d}{c\lambda^2 - \bar{E}}$ son tales que $|Q_2^j| > |Q_2^{j+1}|$ para toda j , debido a que decaen con N^2 . Por lo tanto, el error máximo es $\frac{2/d}{c(N+1)^2 - \bar{E}}$. Los resultados numéricos para \bar{E} , d , V_0 fijos (mismos que los de la Fig. 6.11) se muestran en la Fig. 6.12, los cuales confirman que $R_2(\bar{E}) - R_2^{N-1}(E) < \frac{2/d}{c(N+1)^2 - \bar{E}}$ para toda N .

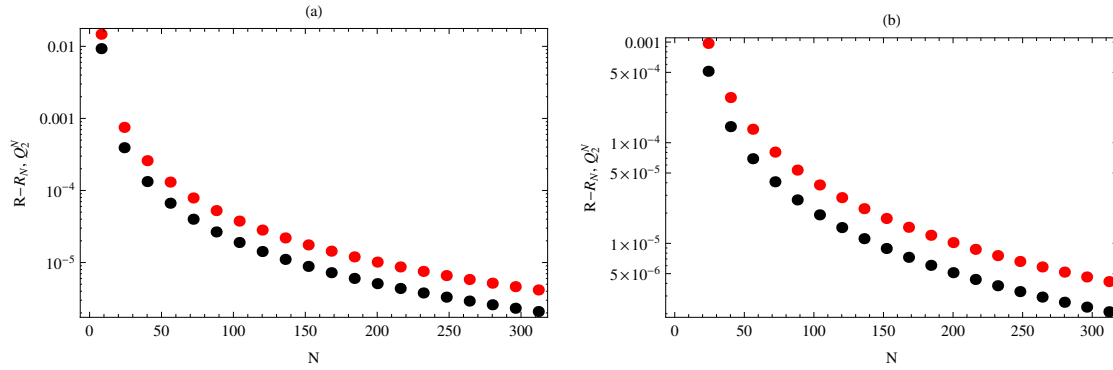


Figura 6.12: (a) $d = 2$, $V_0 = 10$ y $\bar{E} = 100$. (b) $d = 2$, $V_0 = 10$ y $\bar{E} = 400$. Los puntos en color negro denotan la diferencia $R_1(\bar{E}) - R_1^{N-1}(\bar{E})$ y los puntos en rojo a $\frac{2/d}{c(N+1)^2 - \bar{E}}$.

6.9. Aceleración de la convergencia

Hasta ahora hemos mostrado que nuestros métodos para calcular los polos de $S(E)$ están limitados a calcular sólo pocos polos, esto principalmente por el truncamiento y por las limitaciones de los procesadores actuales. Debido a estas limitaciones, en esta sección vamos a desarrollar *el método de la aceleración de la convergencia*. Supondremos que tenemos un potencial par, por consiguiente, $R_{II}(E) = R_{DD}(E) \equiv R_1(E)$ ($\gamma_\lambda^{II} = \gamma_\lambda^{DD} \equiv \gamma_\lambda^1$) y $R_{ID}(E) = R_{DI}(E) \equiv R_2(E)$ ($\gamma_\lambda^{ID} = \gamma_\lambda^{DI} \equiv \gamma_\lambda^2$). La idea central aquí es separar las series de R_ν ($\nu = 1, 2$) en dos términos: el primer término es una suma truncada hasta $\lambda = N$ y el segundo en una suma cuyo índice corre desde $\lambda = N + 1$ hasta infinito, como

$$R_1(E) = \sum_{\lambda=1}^N \frac{\gamma_\lambda^1}{E_\lambda - E} + \sum_{\lambda=N+1}^{\infty} \frac{C_0}{E_\lambda - E}, \quad (6.22a)$$

$$R_2(E) = \sum_{\lambda=1}^N \frac{\gamma_\lambda^2}{E_\lambda - E} + \sum_{\lambda=N+1}^{\infty} \frac{(-)^\lambda C_0}{E_\lambda - E}, \quad (6.22b)$$

donde C_0 es el valor (en magnitud) a la cual convergen los γ_λ^ν ($\nu = 1, 2$) para todos los potenciales. Las sumas que aparecen en el segundo término de (6.22) se pueden hacer de forma exacta, bajo la suposición de que a partir de $\lambda = N + 1$ los eigenvalores de reacción se ajustan a una ecuación cuadrática: $E_\lambda \sim a\lambda^2 + b$ (a y b son parámetros a determinar haciendo el ajuste). Entonces, agregando y restando los términos que faltan para completar la serie en (6.22a), obtenemos

$$\sum_{\lambda=N+1}^{\infty} \frac{C_0}{a\lambda^2 + b - E} = \sum_{\lambda=1}^{\infty} \frac{C_0}{a\lambda^2 + b - E} - \sum_{\lambda=1}^N \frac{C_0}{a\lambda^2 + b - E}. \quad (6.23)$$

Donde el primer término de la derecha de la igualdad (6.23) se puede escribir como

$$\sum_{\lambda=1}^{\infty} \frac{C_0}{a\lambda^2 + b - E} = \frac{C_0\pi}{2\alpha\hat{x}} \left(\cot(\pi\hat{x}) - \frac{1}{\pi\hat{x}} \right), \quad (6.24)$$

en donde hemos usado las ecuaciones (2.34a) y (2.35a) con $\hat{x}^2 = \frac{E-b}{a}$ para llegar a la igualdad en (6.24). De la misma manera se puede hacer la suma del segundo término de (6.22b), pero usando las ecuaciones (2.34b) y (2.35b). Con todo esto llegamos a

$$R_1(E) = S_N^1 + \frac{C_0\pi}{2\alpha\hat{x}} \left(\cot(\pi\hat{x}) - \frac{1}{\pi\hat{x}} \right), \quad (6.25a)$$

$$R_2(E) = S_N^2 + \frac{C_0\pi}{2\alpha\hat{x}} \left(\sec(\pi\hat{x}) - \frac{1}{\pi\hat{x}} \right). \quad (6.25b)$$

con

$$S_N^1 = \sum_{\lambda=1}^{\lambda=N} \left(\frac{\gamma_\lambda^1}{E_\lambda - E} - \frac{C_0}{a\lambda^2 + b - E} \right), \quad (6.26a)$$

$$S_N^2 = \sum_{\lambda=1}^{\lambda=N} \left(\frac{\gamma_\lambda^2}{E_\lambda - E} - \frac{(-)^{\lambda} C_0}{a\lambda^2 + b - E} \right). \quad (6.26b)$$

Las ecuaciones (6.25) son las que le dan título a la presente sección y esto se debe a que las funciones trigonométricas, que aparecen en dicha ecuación y son las que *simulan* las sumas infinitas en los $R_\nu(E)$.

Los anchos reducidos (γ_λ^ν) convergen rápidamente (en magnitud) a $C_0 \sim 2/d$. Esto es en realidad lo que se espera que ocurra físicamente, es decir mientras la energía crece, la onda/partícula gradualmente dejará de distinguir la forma del potencial, con lo cual, $|\Psi_\lambda(x_\nu)| \sim |\Phi_\lambda(x_\nu)| \sim \sqrt{2/d}$ [ver ec. (C.14)], donde $\Phi_\lambda(x_\nu)$

es la función de onda de una partícula sujeta a una barrera/pozo de potencial plana. Para ejemplificar esto, consideremos el potencial perturbado de la ec. (4.20) para $\epsilon' = 0$, $\ell = 6$, $V_0 = -10$ y $d = 6$:

$$V(x) = -10 + \epsilon \cos\left(\frac{13\pi x}{12}\right). \quad (6.27)$$

En la Fig. 6.13 graficamos los γ_λ' para el potencial dado en (6.27) para (a) [(b)] $\epsilon = 0.1$ [1.0]. De la figura podemos notar que a partir de $\lambda \sim 20$ los $|\gamma_\lambda'|$ prácticamente son iguales a $2/d$ para ambos valores de ϵ . Este es el comportamiento típico de los $|\gamma_\lambda'|$ para todos los potenciales dispersivos que hemos considerado aquí, tanto para uno (vea por ejemplo la Fig. 4.5) y dos canales, es decir que a partir de un cierto $\lambda = K$, $|\gamma_\lambda'| \sim 2/d$. Sin embargo, aunque los γ_λ' convergen rápido, nuestros cálculos numéricos nos indican que necesitamos un número mayor de éstos para que la ecuación (6.25) funcione bien.

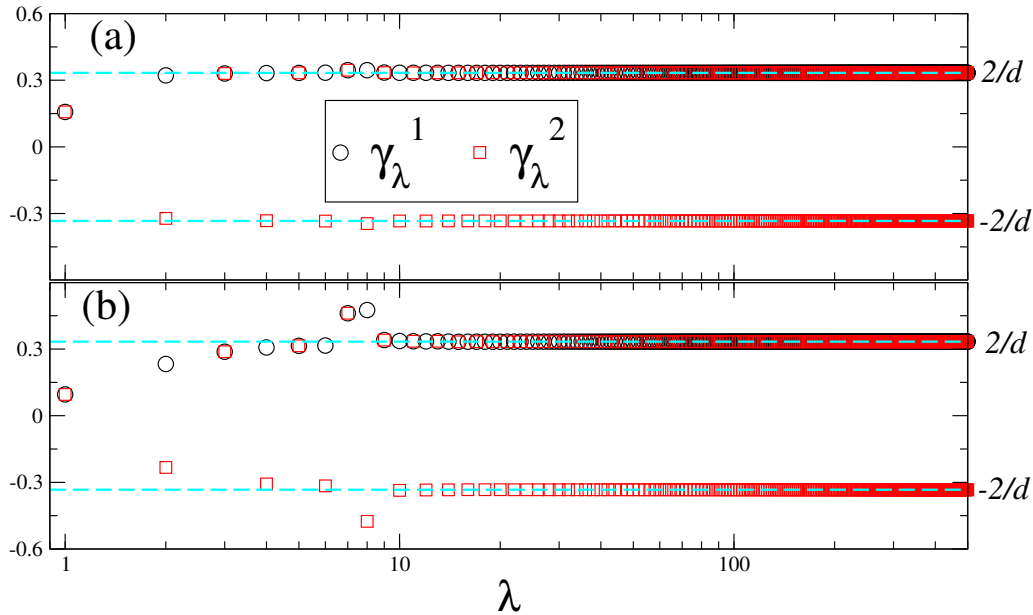


Figura 6.13: γ_λ' para el pozo de potencial perturbado descrito por la ec. (6.27). En (a) [(b)] $\epsilon = 0.1$ [1.0]. Notemos que $C_0 \sim 2/d$ a partir de $\lambda \sim 20$ para ambos casos.

En la Fig. 6.14 comparamos E_λ y la amplitud de la transmisión para el potencial perturbado con el sistema sin perturbar. En la misma figura podemos observar que tanto las energías de reacción como la $T(E)$ no cambian de manera considerable, cuando el potencial es perturbado respecto al no perturbado.

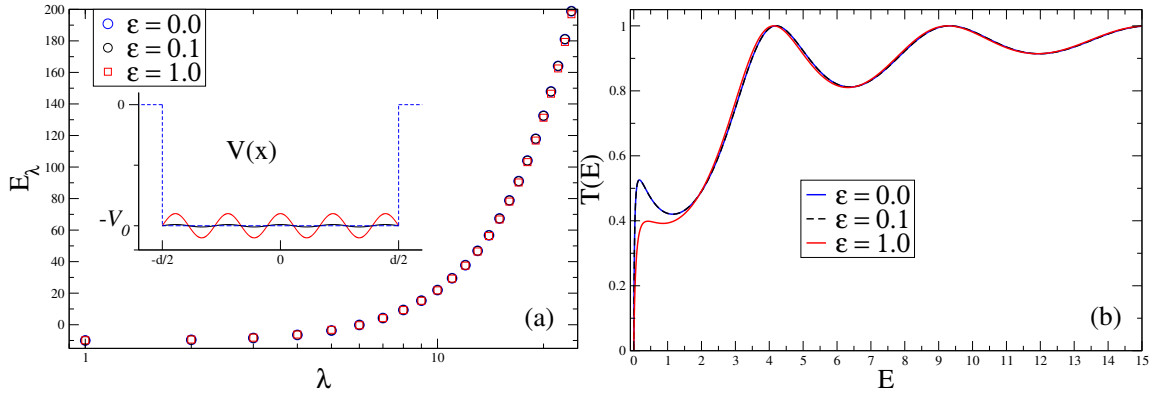


Figura 6.14: En (a) [(b)] compramos E_λ [$T(E)$] para diferentes valores de ϵ de la ec. (6.27) que son indicados en cada panel.

En las siguientes dos figuras mostramos los polos de $S(z)$ obtenidos a partir de las ecs. (6.25) en $\Omega^-(z)$ para el cual potencial perturbado de la ec. (6.27) tiene los mismos valores de ϵ considerados en los ejemplos de las Figs. 6.13-6.14. Debemos de señalar que para calcular dichos polos haremos uso del MBR. La razón de escoger un potencial perturbado se debe a que sabemos que es lo que pasa físicamente a energías grandes, es decir que a energías grandes la partícula no detectará ya las perturbaciones hechas al potencial y por lo tanto esperamos que sus polos estén localizados cerca de los polos del potencial sin perturbar ($V(x) \simeq V_0$).

En la Fig. 6.15 mostramos los primeros 100 polos de la matriz de dispersión para el potencial dado en la ec. (6.27) y con $\epsilon = 0.1$. En esta figura, la etiqueta Aprox. 1 [Aprox. 2] indica que hemos calculado los coeficientes del ajuste $E_\lambda \sim a\lambda^2 + b$ sobre el intervalo $N = 1001 - 2000$ [2001 - 3000] términos, es decir, el índice en las series de (6.26) corre desde $\lambda = 1$ hasta $\lambda = N = 1000$ [$\lambda = 1$ hasta $\lambda = N = 2000$], para lo cual, obtuvimos $(a, b) = (-584.320, 0.394)$ [$-982.836, 0.394$]. Para referencia y comparación, también mostramos los polos *exactos* y aproximados usando 100,000 términos de reacción para $V(x) = -10$. Observemos también que los resultados para Aprox. 1 son mejores que los que se obtienen para $N = 100,000$. Así mismo, en el interior de esta figura mostramos los polos 180-200, esto con el fin de ver que la primera aproximación falla para estos últimos polos. Sin embargo, sigue siendo mejor aproximación respecto a los resultados usando $N = 100,000$ términos de reacción.

Los resultados para $\epsilon = 1$ se muestran en el Fig. 6.16 y al igual que en la figura anterior, aquí mostramos los primeros 100 polos. Además mostramos los polos obtenidos usando la ecuación característica $\Omega^-(z)$, sin acelerar la convergencia para $N = 2000$ y $N = 5000$ términos de reacción. Esto con el objetivo de mostrar

la tendencia que siguen los polos conforme vamos aumentando el número de términos en los $R_{\nu\nu'}(E)$.

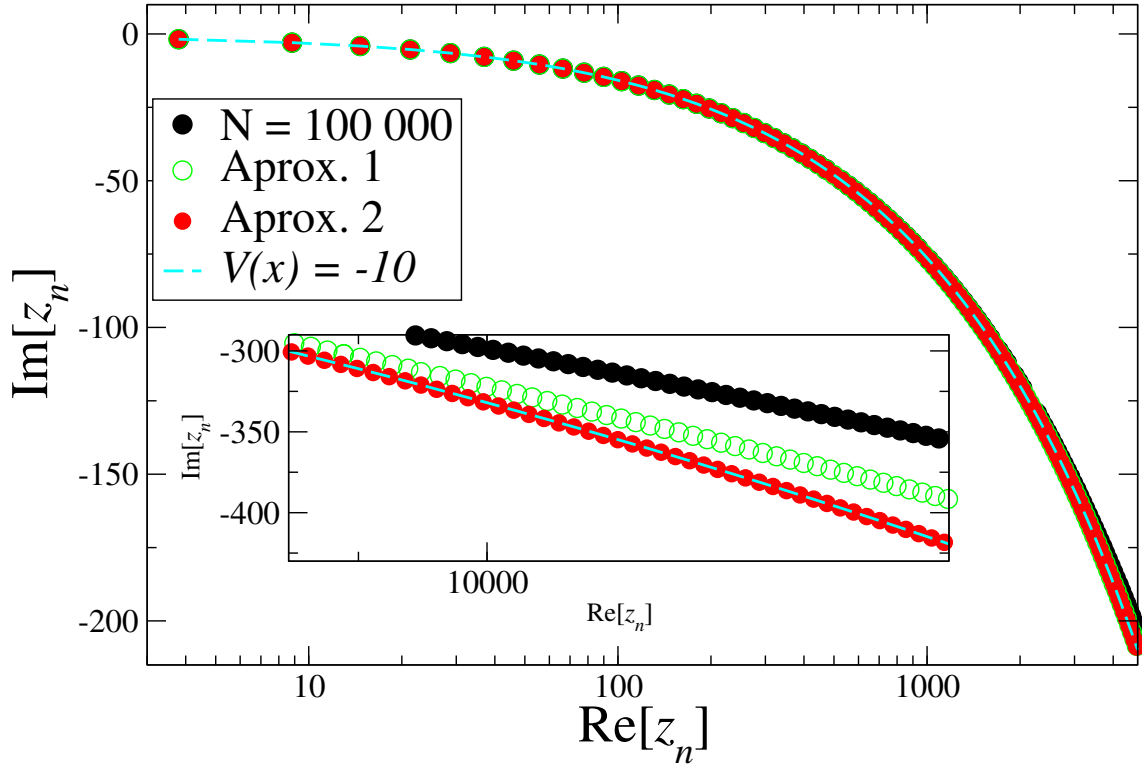


Figura 6.15: Primeros 100 polos para el potencial (6.27) con $\epsilon = 0.1$, donde Aprox. 1 [Aprox. 2] $(a, b) = (-584.320, 0.394) [-982.836, 0.394]$ obtenidos sobre el intervalo de $N = 1001-2000$ [2001-3000] términos. Para referencia y comparación, mostramos los polos *exactos* y aproximados usando 100,000 términos para $V(x) = -10$.

RESUMEN: En este capítulo hemos estudiado los métodos para calcular los polos de la matriz de dispersión los cuales son útiles para los sistemas de uno y dos canales (el método de búsqueda de raíces, de escaneo y el del punto fijo iterativo). Hemos discutido sus limitaciones, sus regímenes de validez y sus ventajas. En el primer caso, vimos que los tres métodos están limitados por el número de estados de reacción, los cuales se obtienen diagonalizando un hamiltoniano hermítico. También vimos que al introducir el parámetro de traslape y para $\Delta_n \lesssim 1$, los tres métodos coinciden bastante bien y esto marca la región de validez para el MPFI. Además, el MPFI es posible separarlo en tres regiones respectivas: a) región de validez para $\Delta_n \lesssim 1$, b) región de *inestabilidad* que comienza a partir de $\Delta_n > 1$ y c) región de nueva estabilidad. En este último, aunque se alcanza convergencia, los errores son del orden del 80-90 % respecto al valor exacto, este valor exacto es para una barrera de potencial constante.

Los pozos de potencial con derivada cero en las fronteras de reacción son los que mayor problemas de convergencia presentan en el MPFI, por ello hemos introducido los potenciales parametrizados y de los cuales nos permitieron modificar su derivada en las fronteras de reacción (así como su área), sin alterar de forma drástica sus propiedades. Encontramos que a mayor valor de la derivada en las fronteras de reacción, mayor será el número de polos que se pueden calcular encontrando excelentes resultados entre los tres métodos. Por otro lado, concluimos que el número de polos a calcular es más sensible al cambio en la derivada que al cambio en su área del potencial.

Adicionalmente demostramos analíticamente y numéricamente que emerge un error proporcional al $\log(1 - C(\bar{E})/N)$ cuando truncamos las series en los $R_{\nu\nu'}(E)$ hasta un $\lambda = N$, el cual muestra que el error puede ser pequeño considerando sumas no tan grandes. Pero cuando $N^2 - \bar{E} > 0$, se cumple para una N grande y se requiere de una suma mucho mayor. Del mismo modo, en el cálculo de los polos, el número de términos requeridos en la suma de $R_1(E)$ aumenta dramáticamente a medida que se aumenta el número de polos a calcular con un error determinado.

Finalmente hemos introducido el método de la aceleración de la convergencia, el cual está basado en la idea de que los elementos de la matriz de reacción *convergen* a funciones trigonométricas que nos permiten *simular* sumas infinitas. Nuestro método muestra una gran ventaja respecto a los tres métodos mencionados anteriormente, ya que en éste únicamente se requieren de pocos términos de reacción en los $R_{\nu\nu'}(E)$, esto debido a que el resto de las sumatorias son intercambiadas por funciones trigonométricas. Nuestro nuevo método reduce en gran medida los tiempos de cálculo, así como también aumenta de forma drástica el número de polos que podemos calcular y esto lo hace un método muy potente respecto a los métodos mencionados anteriormente.

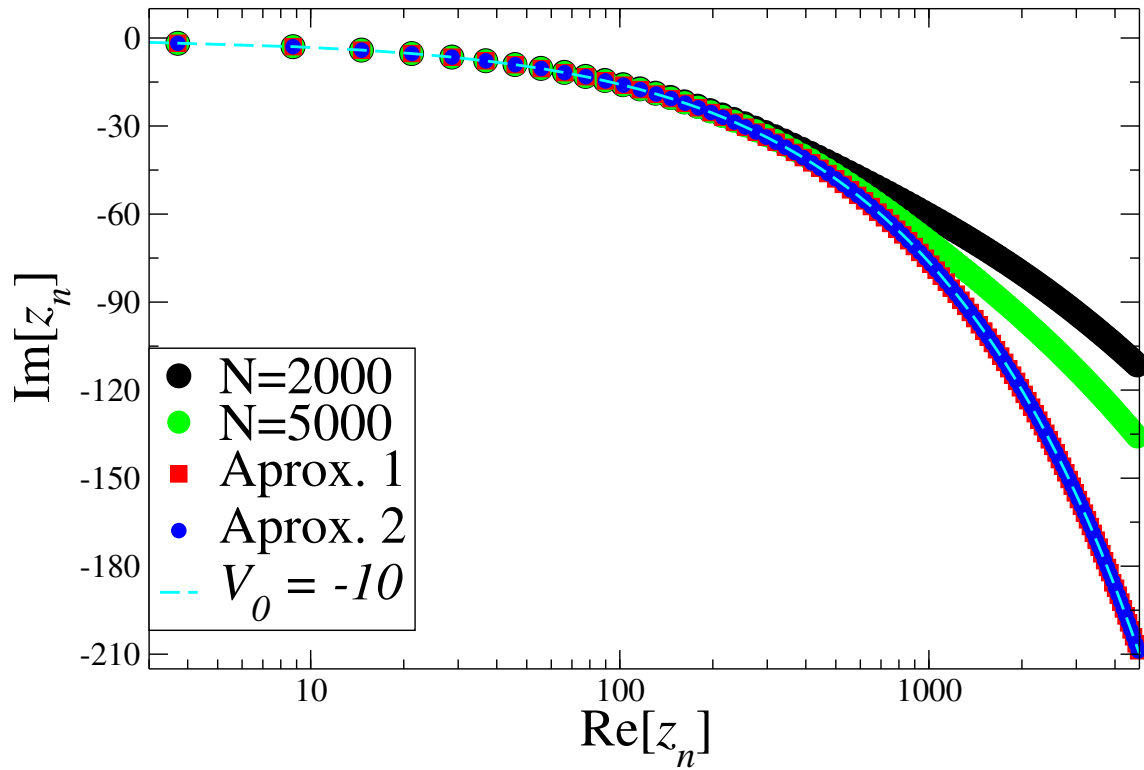


Figura 6.16: Primeros 100 polos para el potencial (6.27) con $\epsilon = 1.0$, en donde Aprox. 1 [Aprox. 2] $(a, b) = (-580.158, 0.374)$ $[-986.943, 0.239]$ obtenidos sobre el intervalo de $N = 1001 - 2000$ $[2001 - 3000]$ términos. Para referencia y comparación, mostramos los polos *exactos* de $V(x) = -10$. $N = 2000$ y $N = 5000$ denotan los polos obtenidos sin acelerar la convergencia, esto para mostrar la tendencia que los polos siguen conforme vamos aumentando el número de términos en los $R_{\nu\nu'}(E)$.

Capítulo 7

Guía de onda cuasi-unidimensional

En este capítulo describiremos el método que nos permitirá resolver problemas de dispersión de una partícula libre en un billar abierto (bi-)cuasi-unidimensional con dos terminales conectadas y una región de dispersión cuyas paredes; superior e inferior, están definidas por las funciones $f_1(x)$ y $f_2(x)$, respectivamente. Posteriormente, presentaremos resultados de la conductancia para tres modos abiertos para una guía de ondas plana que contiene un potencial que varía únicamente en la dirección longitudinal, en donde, consideramos dos tipos de ruidos: posicional y composicional.

7.1. Introducción

En la Sec. 2.2.3 mostramos el método general de la Teoría de la Matriz de Reacción para un sistema cuasi-unidimensional. Sin embargo, al obtener la matriz de reacción (y la matriz $S(E)$) no especificamos el tipo de cavidad. Por consiguiente, en esta sección presentamos el método que nos permitirá resolver problemas de dispersión de una partícula libre en un billar abierto (bi-)cuasi-unidimensional con dos terminales conectadas y una región de dispersión como se muestra en la Fig. 2.3(b). Dentro de esta región de dispersión, supondremos que la partícula está libre excepto por sus colisiones con las fronteras, definidas por las funciones $f_1(x)$ y $f_2(x)$. Supondremos que las paredes son impenetrables y las colisiones de la partícula con las paredes son elásticas. Por lo tanto, utilizaremos condiciones de Dirichlet en las fronteras. Como las paredes no son planas, haremos una transformación de coordenadas $(x, y) \rightarrow (u, v)$ tales que las condiciones

de Dirichlet aparezcan como si las paredes fueran planas. Esto implica que el nuevo hamiltoniano adquiere potenciales efectivos de bulto. Entonces, la idea básica es lograr transformar la región de dispersión en un rectángulo.

Guías de ondas con paredes arbitrarias ya se han estudiado anteriormente usando el formalismo de la matriz de dispersión sin hacer la transformación de coordenadas. Por ejemplo, usando el Método del Elemento Finito para obtener los autovalores y autofunciones de billares lo hacen en [37, 53, 95] y usando el formalismo de las funciones de Green lo hacen en [5, 8]. En [43] hacen la transformación de coordenadas y recurren al método de la transformada inversa de Fourier para obtener los elementos de la matriz hamiltoniana. Por otro lado, la transformación de coordenadas ya ha sido usada para estudiar al billar modulado definido por $f(x) = 0$ y $g(x) = A \cos(x)$, para el que se obtuvieron la estructura de bandas de energía y distribuciones de Husimi [101]. También se estudió la distribución de espaciamiento entre niveles consecutivos $P(s)$ [107]. Además este método ha servido para el estudio de la estructura de las autofunciones así como de la *densidad local de estados* [108–110].

7.2. Transformación canónica

A continuación especificamos la transformación de coordenadas que nos permite *transformar* a la cavidad modulada en coordenadas cartesianas (x, y) en un billar *plano* en coordenadas curvilíneas (u, v) . Las nuevas coordenadas (u, v) se definen como

$$u = x; \quad v = \frac{f_2(x) - y}{f_2(x) - f_1(x)}, \quad (7.1)$$

de modo que cuando $y = f_2(x)$ [= $f_1(x)$] entonces $v = 0$ [= 1]. El hamiltoniano de nuestro sistema es de una partícula libre

$$H = \frac{1}{2\mu} (P_x^2 + P_y^2). \quad (7.2)$$

La ecuación (7.2) en las nuevas coordenadas se obtiene de la expresión covariante del Laplaciano para una partícula moviéndose en un espacio curvo de Riemann [116, 117]:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{cov} \Psi(u, v) = \frac{\hbar^2}{2\mu} g^{-1/2} \partial_\nu g^{\nu\nu'} g^{1/2} \partial_{\nu'} \Psi(u, v), \quad (7.3)$$

donde $\nu, \nu' = u, v$, Δ_{cov} es el operador de Laplace-Beltrami, g es la métrica y $g^{\nu\nu'}$ es el tensor de la métrica. El momento canónico representado en las nuevas coordenadas adquiere la forma

$$P_\nu = -i\hbar[\partial_\nu + \frac{1}{4}\partial_\nu \ln(g)] = -i\hbar g^{-1/4}\partial_\nu g^{1/4}. \quad (7.4)$$

Al sustituir (7.4) en la (7.3) se obtiene el hamiltoniano en forma covariante

$$H = \frac{1}{2\mu} g^{-1/4} P_\nu g^{\nu\nu'} g^{1/2} P_{\nu'} g^{-1/4}, \quad (7.5)$$

y la expresión para el tensor de la métrica $g^{\nu\nu'}$ está dada como

$$g^{\nu\nu'} = \begin{pmatrix} 1 & -\frac{f_1'v + f_2'(1-v)}{f_1 - f_2} \\ -\frac{f_1'v + f_2'(1-v)}{f_1 - f_2} & \frac{1 + [f_1'v + f_2'(1-v)]^2}{(f_1 - f_2)^2} \end{pmatrix}, \quad (7.6)$$

donde $f'_{1,2} \equiv \partial f_{1,2}(u, v)/\partial u$, y la métrica g está dada como

$$g = \det(g_{\nu\nu'}) = (f_1 - f_2)^2. \quad (7.7)$$

Sustituyendo (7.6) y (7.7) en el hamiltoniano (7.5), obtenemos

$$H = \frac{g^{-1/4}}{2\mu} \left\{ P_u J P_u - [P_u (f_2' + v J_u) P_v + P_v (f_2' + v J_u) P_u] + P_v \frac{1 + (f_2' + v J_u)^2}{J} P_u \right\} g^{-1/4}, \quad (7.8)$$

con $J \equiv f_1 - f_2$ y $J_\nu \equiv \partial_\nu J$.

La función de onda en el plano $u - v$ se puede expandir en términos de una base que cumpla con CFD en las paredes de la cavidad y CFN en las interfaces (x_I, x_D):

$$\phi_{mn}(u, v) = \frac{2}{\sqrt{JL}} \cos\left(\frac{m\pi u}{L}\right) \sin(n\pi v), \quad (7.9)$$

el factor $2/\sqrt{Jd}$ ($L = x_D - x_I$) en la ecuación (7.9) es debido a la relación de ortogonalidad en las coordenadas curvilíneas (u, v) de la función de onda:

$$\int \int \sqrt{g} du dv \Psi_\lambda^*(u, v) \Psi_\lambda(u, v) = 1, \quad (7.10)$$

y relación de completos:

$$\int \int \sqrt{g} dudv |u, v\rangle \langle u, v| = 1. \quad (7.11)$$

Al desarrollar $\phi_{mn}(u, v)$ en una serie de Fourier [54], obtenemos

$$\Psi_\lambda(u, v) = \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} B_{mn}^\lambda \phi_{mn}(u, v). \quad (7.12)$$

Diagonalizando el hamiltoniano (7.8) en la base (7.9), obtenemos

$$\sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} H_{mn, m'n'} B_{m'n'}^\lambda = E_\lambda B_{mn}^\lambda, \quad (7.13)$$

cuyos elementos de matriz están dados como

$$\begin{aligned} H_{mnm'n'} &= \frac{\hbar^2}{2\mu} \int \int dudv \phi_{mn}^k(u, v) \partial_\nu g^{\nu\nu'} J \partial_{\nu'} \phi_{m'n'}^k(u, v) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2\mu} \int \int dudv (\partial_\nu \phi_{mn}^k(u, v)) g^{\nu\nu'} J \partial_{\nu'} \phi_{m'n'}^k(u, v) \\ &= -\frac{2\hbar^2}{d\mu} \int \int dudv (\partial_\nu C_m S_n J^{1/2}) g^{\nu\nu'} J (\partial_{\nu'} C_{m'} S_{n'} J^{1/2}) \end{aligned} \quad (7.14)$$

donde $C_m \equiv \cos(m\pi u/L)$, $S_{n'} \equiv \sin(n'\pi v)$. Después de algo de trabajo algebraico llegamos a la forma final de la matriz hamiltoniana:

$$\begin{aligned} H_{mnm'n'} &= \frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{m^2 \pi^2}{L^2} \delta_{mm'} + 2(I^{(1)}(m, m') - I^{(2)}(m, m') - I^{(3)}(m, m')) \right] \delta_{nn'} \\ &+ \frac{2\hbar^2}{L\mu} \left\{ I^{(4)}(m, m') (1 - \delta_{nn'}) \frac{nn' (1 - (-1)^{n+n'})}{n^2 - n'^2} \right. \\ &+ I^{(5)}(m, m') \left[-\frac{1}{4} \delta_{nn'} + (1 - \delta_{nn'}) \frac{nn' (-1)^{n+n'}}{n'^2 - n^2} \right] \\ &+ I^{(6)}(m, m') (1 - \delta_{nn'}) \frac{nn' (1 - (-1)^{n+n'})}{n'^2 - n^2} + I^{(8)}(m, m') \frac{n^2 \pi^2}{2} \delta_{nn'} \\ &+ I^{(7)}(m, m') \left[-\frac{\delta_{nn'}}{4} + (1 - \delta_{nn'}) \frac{nn' (-1)^{n+n'}}{n^2 - n'^2} \right] \\ &+ I^{(9)}(m, m') \left[\frac{n^2 \pi^2}{2} \left(\frac{1}{3} + \frac{1}{2n^2 \pi^2} \right) \delta_{nn'} + (1 - \delta_{nn'}) \frac{2nn' (-1)^{n+n'} (n^2 + n'^2)}{(n^2 - n'^2)^2} \right] \\ &+ I^{(10)}(m, m') \left[\frac{n^2 \pi^2}{4} \delta_{nn'} + (1 - \delta_{nn'}) \frac{nn' (n^2 + n'^2) ((-1)^{n+n'} - 1)}{(n^2 - n'^2)^2} \right] \left. \right\} \end{aligned} \quad (7.15)$$

con

$$\begin{aligned}
I^{(1)}(m, m') &= \int_{x_I}^{x_D} du C_m C_{m'} \left[\partial_u (\ln(J)/2) \right]^2, \\
I^{(2)}(m, m') &= \int_{x_I}^{x_D} du C_{m'} (\partial_u C_m) \partial_u (\ln(J)/2), \\
I^{(3)}(m, m') &= \int_{x_I}^{x_D} du C_m (\partial_u C_{m'}) \partial_u (\ln(J)/2), \\
I^{(4)}(m, m') &= \int_{x_I}^{x_D} du \partial_u \left(\frac{C_m}{\sqrt{J}} \right) (-f'_2) \frac{C_{m'}}{\sqrt{J}}, \\
I^{(5)}(m, m') &= \int_{x_I}^{x_D} du \partial_u \left(\frac{C_m}{\sqrt{J}} \right) (-J_u) \frac{C_{m'}}{\sqrt{J}}, \\
I^{(6)}(m, m') &= \int_{x_I}^{x_D} du \frac{C_m}{\sqrt{J}} (-f'_2) \partial_u \left(\frac{C_{m'}}{\sqrt{J}} \right), \\
I^{(7)}(m, m') &= \int_{x_I}^{x_D} du \frac{C_m}{\sqrt{J}} (-J_u) \partial_u \left(\frac{C_{m'}}{\sqrt{J}} \right), \\
I^{(8)}(m, m') &= \int_{x_I}^{x_D} du C_m C_{m'} \frac{1 + (f'_2)^2}{J^2}, \\
I^{(9)}(m, m') &= \int_{x_I}^{x_D} du C_m C_{m'} \frac{J_u^2}{J^2}, \\
I^{(10)}(m, m') &= \int_{x_I}^{x_D} du C_m C_{m'} \frac{2f'_2 J_u}{J^2}.
\end{aligned} \tag{7.16}$$

De las ecuaciones (7.15) y (7.16) podemos ver que el hamiltoniano (7.2) depende explícitamente de las funciones f_1 y f_2 , así como de sus derivadas.

Note que, para $J = cte$, es decir, $f_1(x) - f_2(x) = cte$, las integrales $I^{(1)}(m, m') = I^{(2)}(m, m') = I^{(3)}(m, m') = I^{(5)}(m, m') = I^{(7)}(m, m') = I^{(9)}(m, m') = I^{(10)}(m, m') = 0$, y (7.15) se reduce a

$$\begin{aligned}
H_{mm'n'n'} &= \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{m^2 \pi^2}{L^2} \delta_{mm'} \delta_{nn'} \\
&+ \frac{2\hbar^2}{\mu L} \left\{ I^{(4)}(m, m') (1 - \delta_{nn'}) \frac{nn' (1 - (-1)^{n+n'})}{n^2 - n'^2} \right. \\
&+ \left. I^{(6)}(m, m') (1 - \delta_{nn'}) \frac{nn' (1 - (-1)^{n+n'})}{n'^2 - n^2} + I^{(8)}(m, m') \frac{n^2 \pi^2}{2} \delta_{nn'} \right\}
\end{aligned} \tag{7.17}$$

Para $f_1 = cte$ y $f_2 = 0$ (partícula libre dentro de una cavidad rectangular) la matriz (7.15) se reduce a

$$H_{mm'n'n'} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2\mu} \left(\frac{m^2}{L^2} + \frac{n^2}{J^2} \right) \delta_{mm'} \delta_{nn'}. \tag{7.18}$$

El problema ahora se ha reducido a diagonalizar el hamiltoniano dado en la ecuación (7.15). En este trabajo únicamente presentamos el método general para obtener los eigenestados de reacción, los cuales son necesarios para obtener los elementos de la matriz de reacción cuya expresión está dada en la ecuación (2.58) y por consiguiente la matriz de dispersión dada en la ecuación (2.79). El interés por introducir este método se debe a que nos permitirá estudiar propiedades de dispersión en cualquier^A tipo de billares, como por ejemplo, billares unidireccionales [113].

Por otro lado, debido a la forma paramétrica de las funciones $f_1(x)$ y $f_2(x)$, las integrales (7.16) en general no tienen solución exacta y por consiguiente las resolvemos numéricamente para así obtener la matriz hamiltoniana para cada billar y diagonalizarla. Es conveniente usar nuevos índices en el hamiltoniano (7.14) que nos permitan un manejo más simple de la misma: $l = (m, n)$ y $l' = (m', n')$, donde n corresponde al número de modos transversales y m a los longitudinales. El tamaño de la matriz hamiltoniana estará determinado por el máximo número de modos transversales y longitudinales (m y n) que elijamos, con lo cual, las series en (7.12) serán evaluadas hasta $1 \leq n \leq l_{max}$ y $1 \leq m \leq l'_{max}$; de modo que el tamaño máximo de la matriz hamiltoniana será: $N = l_{max}l'_{max}$. En principio podemos evaluar la matriz hamiltoniana para cualquier valor de l_{max} y l'_{max} , sin embargo, el número de eigenestados efectivos serán aquellos que cumplan con la ley de Weyl, que está determinado por las dimensiones longitudinales y transversales del billar [111–113].

En la siguiente sección calcularemos la conductancia para una guía de ondas plana con un potencial que varía únicamente en la dirección longitudinal.

7.3. Cálculo de la conductancia para M=3 modos abiertos

La conductancia $G(E)$ es una cantidad muy importante en el estudio de transporte electrónico pues exhibe efectos de interferencia cuántica y éstos pueden ser medidos experimentalmente. La $G(E)$ se define a través de la fórmula de Landauer-Buttiker [114, 115] como

$$G = \text{Tr}(tt^\dagger) = \frac{2e}{\hbar^2} \sum_{mn} T_{mn}, \quad (7.19)$$

^APara todos aquellos billares cuyas funciones f_1 y f_2 sean tales que se unan de forma suave con las terminales, esto debido a la dependencia de las derivadas en (7.15).

donde t_{mn} está dada en la ecuación (2.61b), Tr es la operación traza, $T_{mn} = |t_{mn}|^2$ y m, n denotan el número de modos abiertos en la terminal derecha e izquierda. En nuestro caso particular $m = n \equiv M$.

En esta sección vamos a calcular $G(E)$ correspondiente a una guía de ondas con paredes planas que contiene un potencial dispersivo que varía únicamente en la dirección longitudinal ($V(x, y) = V(x)$). Por lo tanto no habrá mezcla de modos, es decir, habrá el mismo número de modos en ambas terminales. Aquí hemos fijado la razón $\pi^2/W^2 = 15$ (W ancho de la guía), por consiguiente, los modos se abrirán a energías $E_m = 7.5m^2$. En los resultados que a continuación presentaremos, hemos usado el 75 % del total de eigenestados de reacción obtenidos después de diagonalizar matrices de tamaños $N = 4500$.

Consideraremos dos tipos de cadenas de potenciales; el tipo K-P [ver ecuación (3.32)] y el tipo PT [ver ecuación (3.33)]. En ambas cadenas pondremos dos tipos de ruido aleatorio ε_i (tomado de una distribución normal con $\varepsilon_i \in [-a, a]$): a) el **ruido posicional** que consiste en variar aleatoriamente las separaciones de los potenciales manteniendo constantes sus alturas y b) el **ruido composicional**, en este caso son las alturas de los potenciales las que cambian aleatoriamente y sus separaciones se mantienen constantes.

En la cadena de K-P, los anchos de los potenciales estarán dados como $\frac{l_i}{l_a} = 2$, mientras que en el modelo de PT serán dados por $\alpha_p = \alpha = 22$. En ambas cadenas, para el ruido posicional las separaciones entre las barreras estarán dadas como $\frac{l_i}{2l_a} = 1 + \varepsilon_i$ y para el ruido composicional las alturas serán $V_i/V_0 = 1 + \varepsilon_i$. En el caso de la cadena de potenciales del tipo de PT, las separaciones se medirán respecto a los centros de las barreras. Aquí, cuando $a = 0.05$ (0.1) [0.15] nos referiremos como “desorden débil (medio) [fuerte]” (por ejemplo, para $a = 0.1 \Rightarrow \varepsilon_i \in [-0.1, 0.1]$). En todas las figuras (de la 7.1 a la 7.4), las curvas en negro, corresponden a los casos *sin ruido*, y los ponemos únicamente para referencia y las líneas verticales azules discontinuas señalaran las energías en donde se abre un nuevo modo. En las Figs. 7.1 y 7.2 mostramos la conductancia para $M = 3$ modos abiertos para una cadena de potenciales de K-P con $l_a = 1$ y $V_0 = 10$ considerando el ruido posicional y composicional, respectivamente.

De la misma manera, en las Figs. 7.3 y 7.4 graficamos la conductancia para una cadena de PT para los dos tipos de ruidos, posicional y composicional, respectivamente.

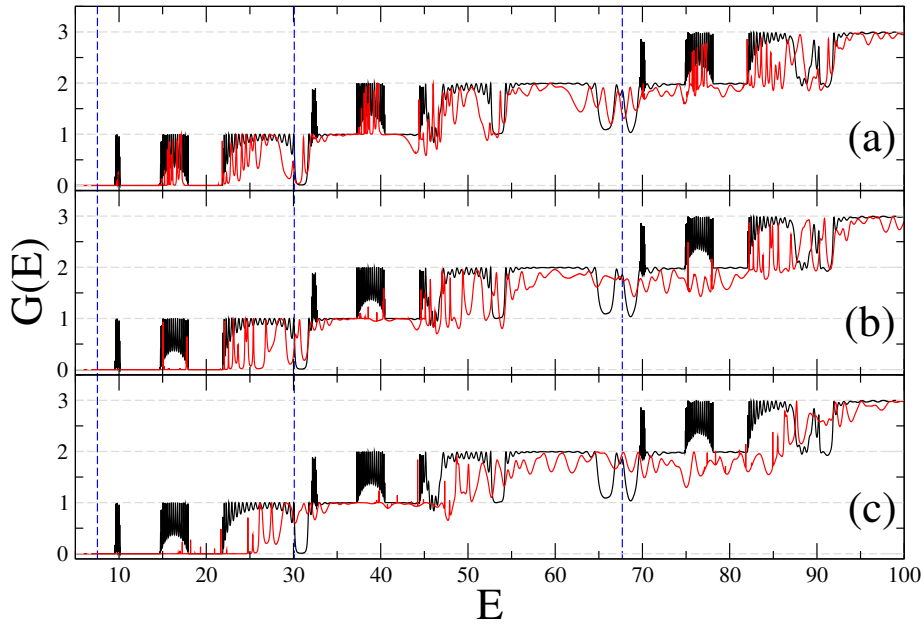


Figura 7.1: $G(E)$ para una cadenas de K-P con 20 barreras y $(l_a, V_0) = (1, 10)$ para $M = 3$ modos permitidos. En (a), (b) y (c) el ruido posicional débil, medio y fuerte, respectivamente (curvas rojas).

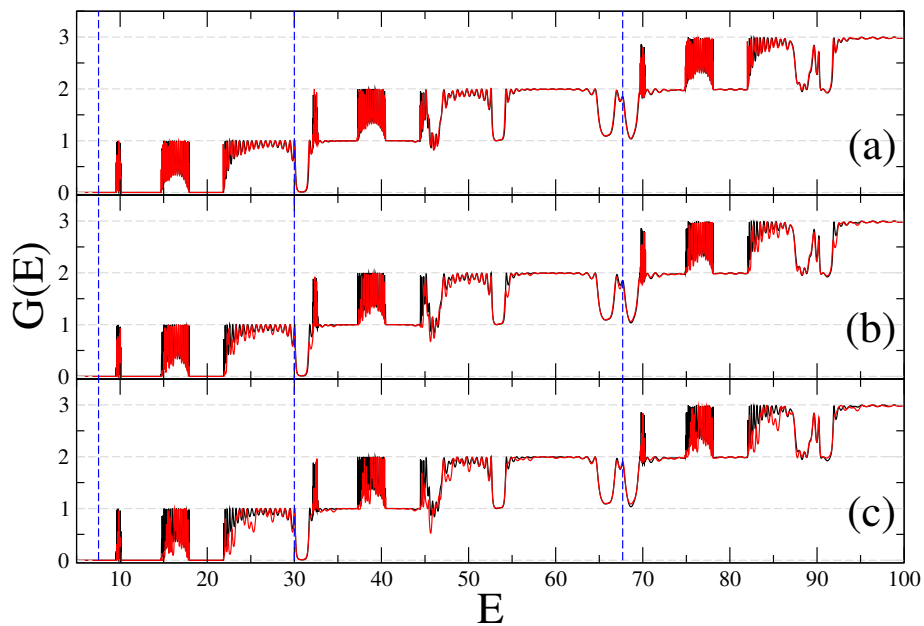


Figura 7.2: Conductancia para una cadena de K-P con 20 barreras y $(l_a, V_0) = (1, 10)$ para $M = 3$ modos permitidos. En (a), (b) y (c) el ruido con posicional débil, medio y fuerte, respectivamente (curvas rojas).

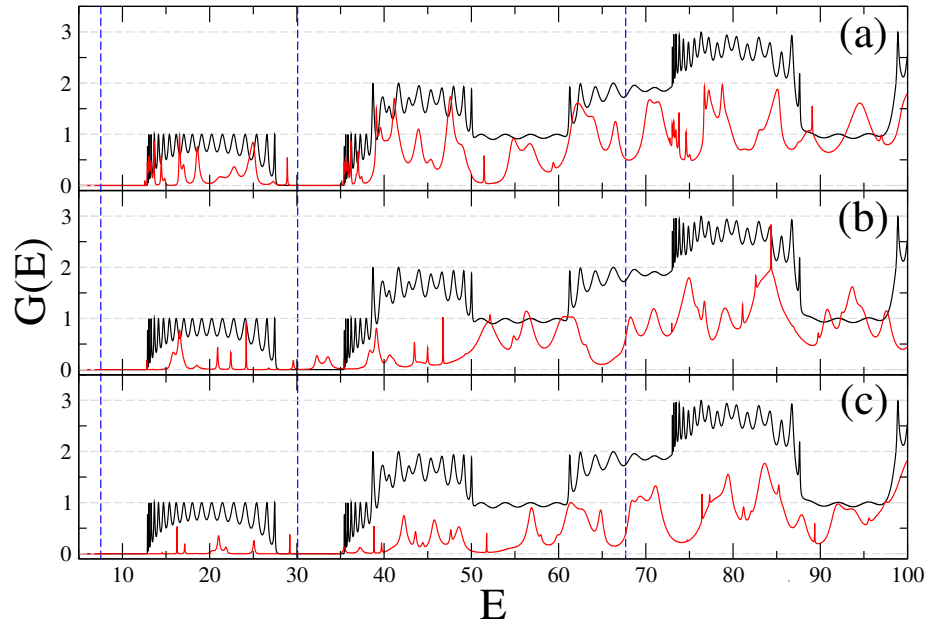


Figura 7.3: $G(E)$ para una cadena de 19 barreras de PT centradas en $x = 0, \pm 1, \dots, \pm 9$ con $\alpha = 22$ y $V_0 = 10/\alpha^2$. En (a), (b) y (c) ruido posicional débil, medio y fuerte, respectivamente (curvas rojas).

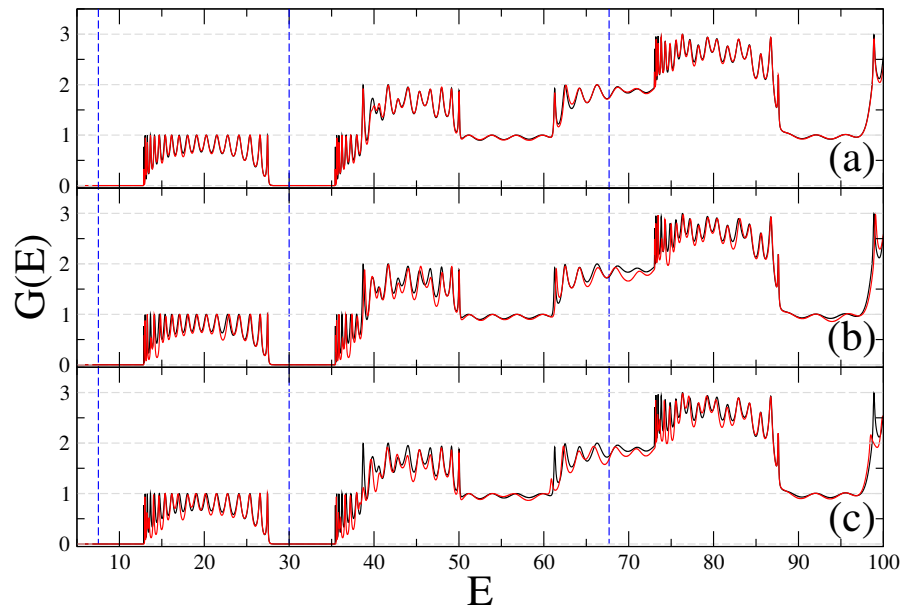


Figura 7.4: $G(E)$ para una cadena de 19 barreras de PT centradas en $x = 0, \pm 1, \dots, \pm 9$ con $\alpha = 22$ y $V_0 = 10/\alpha^2$. En (a), (b) y (c) ruido composicional débil, medio y fuerte, respectivamente (curvas rojas).

Hasta aquí podemos concluir que 1) la conductancia es más sensible para la cadena de barreras de potenciales de Pösch-Teller que cuando ponemos una serie de barreras potenciales planas (modelo KP) para el caso de desorden posicional y 2) en el desorden composicional, casi no cambian los resultados de la conductancia para las cadenas y para los porcentajes de ruido que aquí hemos considerado, es decir, la conductancia sigue siendo prácticamente la misma en comparación con el caso sin desorden.

Por otro lado, de nuestros resultados numéricos, encontramos que la conductancia es más sensible al ruido posicional que al ruido composicional; además, $G(E)$ distingue entre ambos ruidos; el desorden composicional preserva el comportamiento “de escalón” de la conductancia para los parámetros que hemos considerado.

RESUMEN: En este Capítulo hemos introducido el método para obtener los eigenestados de reacción para una billar con paredes arbitrarias definidas por las funciones $f_1(x)$ y $f_2(x)$. Para ello hemos construimos el hamiltoniano del sistema y lo diagonalizamos y vimos que los elementos de dicho hamiltoniano dependen explícitamente tanto de las funciones que definen a las paredes del billar como de sus derivadas.

Por otro lado, hemos calculado la conductancia para una guía de onda plana considerando cadenas de potenciales que varían únicamente en la dirección longitudinal, en los cuales hemos colocado dos tipos de ruidos; posicional y composicional. Las cadenas furor de barreras cuadradas (modelo de K-P) y de barreras de PT y vimos que la conductancia distingue de ambos ruidos siendo más sensible al ruido posicional que al composicional. Además, el ruido composicional preserva el comportamiento tipo escalón de la conductancia para los parámetros que hemos considerado.

Capítulo 8

Caso fotónico

En este capítulo estudiamos la transmisión electromagnética T a través de una heteroestructura fotónica unidimensional cuyos anchos de sus capas, siguen una distribución de *cola larga* de tipo Lévy. Mostraremos numéricamente que para un sistema de longitud L : (i) el promedio $\langle -\ln T \rangle \propto L^\alpha$ para $0 < \alpha < 1$, mientras que $\langle -\ln T \rangle \propto L$ para $1 \leq \alpha < 2$, siendo α el exponente del decaimiento de la ley de potencia de la distribución de probabilidad que siguen los anchos de las capas, y (ii) la distribución de probabilidad $P(T)$ es independiente del ángulo de incidencia y de la frecuencia de la onda electromagnética, además es completamente determinada por los valores de α y $\langle -\ln T \rangle$. Finalmente, encontramos y verificamos numéricamente que $\langle T \rangle \propto L^\alpha$ con $0 < \alpha < 1$.

8.1. Introducción

Los procesos aleatorios caracterizados por densidades de probabilidades de *cola larga* (procesos Tipo-Lévy) se han estudiado en diferentes fenómenos y campos tales como la biología, la economía y la física. Una de las características esenciales de las distribuciones de densidad ($p(l)$) de tipo Lévy, es el lento decaimiento de sus colas. Es decir, para l grandes

$$p(l) \sim \frac{1}{l^{1+\alpha}}, \quad (8.1)$$

con $0 < \alpha < 2$. Notemos que el segundo momento diverge para toda α y si $0 < \alpha < 1$, entonces también el primer momento diverge. Esta clase de distribuciones son conocidas también como *distribuciones α -estables* [118]. Una ventana sobre nuevos materiales ópticos que permiten estudiar experimentalmente los *vuelos* de Lévy en una forma completamente controlable, fue recientemente abierta con la construcción de los así llamados *vidrios de Lévy* [119]: partículas de dióxido de titanio son suspendidas en una matriz hecha de microesferas de vidrio. La distribución de los diámetros de las microesferas es elegida debidamente a fin de que la luz pueda viajar ejecutando vuelos de Lévy dentro de las microesferas. La distribución de los diámetros se caracteriza por el exponente α de la ley de potencia de decaimiento de sus colas; donde se encuentra que para $0 < \alpha < 1$ el transporte es superdifusivo, mientras que para $\alpha = 2$ el transporte difusivo normal se recupera [119]. Este estudio experimental ha motivado varios trabajos teóricos sobre los efectos de la presencia de los procesos de tipo Lévy, sobre diferentes cantidades de transporte en una dimensión, así como en sistemas de muchas dimensiones [120–124].

Por otro lado, el transporte coherente de electrones a través de un alambre cuántico unidimensional con desorden de tipo Lévy fue estudiado en [123]. En el que encontraron que la conductancia adimensional (o transmisión), T cumple:

- (i) el promedio del logaritmo de la transmisión, sobre diferentes realizaciones del desorden se comporta como

$$\langle -\ln T \rangle \propto \begin{cases} L^\alpha & \text{for } 0 < \alpha < 1 \\ L & \text{for } 1 \leq \alpha < 2 \end{cases}, \quad (8.2)$$

- (ii) la distribución de la transmisión $P(T)$ se determina completamente por el exponente α y el promedio del ensamble $\langle -\ln T \rangle$.

Si bien para $1 \leq \alpha < 2$, el promedio $\langle -\ln T \rangle$ depende linealmente sobre L , como en el problema de localización estándar de Anderson, es interesante hacer notar que las propiedades estadísticas de T no son las previstas por el enfoque de escalamiento estándar de la localización, en particular por la ecuación de Dorokhov-Mello-Pereyra-Kumar (DMPK) [5]. Esto es que para $0 \leq \alpha < 2$ las fluctuaciones de la transmisión son mayores que aquellas consideradas en la ecuación de DMPK. No obstante, las propiedades estadísticas de T se recuperan para $\alpha \leq 2$.

Teniendo como referencias varias analogías entre transporte de electrones, de luz y de ondas de materia

[11–15] uno puede esperar que lo establecido en (i) y (ii) también sea válido en sistemas ópticos unidimensionales, a pesar de que en este último caso parámetros adicionales entran en juego tales como el ángulo de incidencia y la frecuencia.

Una investigación sistemática de las propiedades estadísticas de la transmisión coherente para un análogo 1D de vidrios de Lévy, aún no está disponible en la literatura y las expectativas mencionadas anteriormente no han sido verificadas hasta ahora. Por lo tanto, en este trabajo realizaremos esta tarea mediante el estudio de la transmisión T , esto a través de una heteroestructura fotónica unidimensional con separaciones que siguen un ruido aleatorio de tipo Levy. Por otra parte, la ingeniería en sistemas desordenados en heteroestructuras fotónicas, podría ser menos compleja que en un sistema electrónico y en consecuencia esperamos que este trabajo motive futuros experimentos en fotónica.

8.2. Modelo

La heteroestructura que estudiaremos consiste de una secuencia alternante de capas dieléctricas A y B , con índices de refracción n_A y n_B respectivamente (ver Fig. 8.1). Sus anchos correspondientes l_A y l_B , se obtienen de una distribución de tipo Lévy caracterizada por el exponente α de la ley de potencia de sus colas. En este trabajo únicamente consideramos distribuciones de tipo Lévy soportados a lo largo del semieje positivo, y nos centramos en el caso de $0 < \alpha < 1$, donde están presentes las más interesantes y mayores fluctuaciones de la transmisión. La longitud total L de la heteroestructura es entonces dada como $L = \sum l_j$, donde l_j se obtiene de la distribución [125]:

$$l = \begin{cases} \frac{\sin(\alpha\Theta)}{[\cos(\Theta)]^{1/\alpha}} \left[\frac{\cos((\alpha-1)\Theta)}{W} \right]^{(1-\alpha)/\alpha} & \alpha \neq 1; \\ \tan(\Theta) & \alpha = 1, \end{cases} \quad (8.3)$$

donde Θ y W son variables aleatorias independientes: Θ está distribuida uniformemente sobre $(-\pi/2, \pi/2)$, W se obtiene de una distribución exponencial con media 1 y $0 \leq \alpha \leq 2$. Para una L fija el número de capas que componen la heteroestructura pueden ir desde unos pocos para $0 < \alpha < 1$, hasta un gran número para $\alpha \leq 1$.

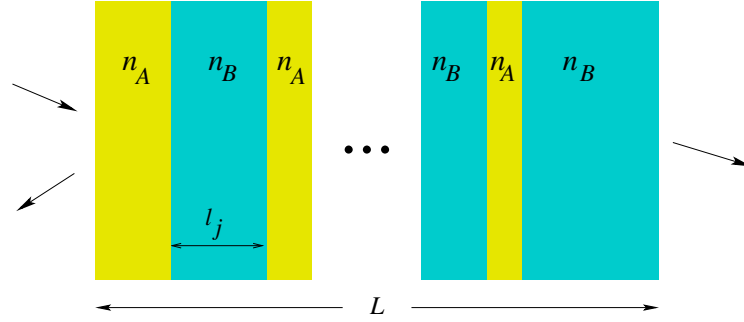


Figura 8.1: Heteroestructura de longitud L con capas aleatorias de anchos l_j e índices de refracción $n_{A(B)}$. La distribución de las capas sigue una distribución de tipo Lévy.

Heteroestructuras unidimensionales con desorden de Lévy en las capas (como las definimos anteriormente) se pueden producir con diferentes materiales, por ejemplo de teflón o de silicio poroso. Para este último, las capas de silicio con diferentes porosidades (es decir, diferentes índices de refracción) y diferentes grosores, se pueden obtener por ataque electroquímico de ácido fluorhídrico, modulando el valor de la densidad de corriente durante el proceso de anodización [126]. Aquí fijamos $n_A = 1.4$ y $n_B = 2.4$ en todos nuestros cálculos, ya que éstos corresponden a valores experimentalmente accesibles de silicio poroso [126, 127].

8.3. Cálculo de la transmisión T

En este trabajo calcularemos la transmisión $T(\omega, \theta) \equiv T$ a través de nuestra estructura usando el formalismo de la Matriz de Transferencia descrito en [27]. Consideramos una onda electromagnética con frecuencia ω que choca con la primera capa (sumergida en aire $n_{air} = 1$), haciendo un ángulo θ con respecto al eje z y a continuación se propaga dentro de la estructura compuesta de N capas, finalmente, escapa a través de la última capa por el lado opuesto. Sin pérdida de generalidad, en lo que sigue nos especializamos sobre los modos TE^A . En general, la matriz de transferencia del proceso dispersivo se puede escribir como [27]

$$\mathbf{M} = \mathbf{M}_{0,N} \mathbf{M}_{het} \mathbf{M}_{1,0}, \quad (8.4)$$

^ASiendo z la dirección de propagación de la onda electromagnética, entonces, los modos Transversales Eléctricos (TE) y Magnéticos (TM) cumplen con:

- en los modos TE la intensidad del campo eléctrico \mathbf{E} es paralelo a la interface y las componentes de los campos $\{E_y, H_x, H_z\} \neq 0$,
- en los modos TM la intensidad del campo magnético \mathbf{H} es paralelo a la interface y las componentes de los campos $\{H_y, E_x, E_z\} \neq 0$.

donde $\mathbf{M}_{\text{het}} = \mathbf{D}_N \mathbf{M}_{N,N-1} \mathbf{D}_{N-1} \cdots \mathbf{M}_{2,1} \mathbf{D}_1$,

$$\mathbf{D}_j = \begin{pmatrix} \exp(ik_{jz}l_j) & 0 \\ 0 & \exp(-ik_{jz}l_j) \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{M}_{j,j-1} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + k_{(j-1)z}/k_{jz} & 1 - k_{(j-1)z}/k_{jz} \\ 1 - k_{(j-1)z}/k_{jz} & 1 + k_{(j-1)z}/k_{jz} \end{pmatrix},$$

y k_{jz} es la componente del vector de onda a lo largo de la dirección z y en la j -ésima capa, dada por $k_{jz} = k_j \cos(\theta_j)$ con $k_j = (\omega/c)n_j$ (n_j es igual a n_A o n_B). Aquí θ_j se relaciona con θ_{j-1} a través de la ley de Snell: $\sin(\theta_j)/\sin(\theta_{j-1}) = n_{j-1}/n_j$.

En la ecuación (8.4): $\mathbf{M}_{1,0}$ [$\mathbf{M}_{0,N}$] es la matriz de transferencia entre la primera capa [N -ésima] y el aire, mientras que \mathbf{M}_{het} es la matriz de transferencia de la heteroestructura. Finalmente

$$T = |\mathbf{M}_{22}|^{-2}. \quad (8.5)$$

8.4. Propiedades estadísticas de T

A continuación estudiaremos las propiedades estadísticas de la transmisión T , en particular su total distribución. En cuanto a las simulaciones numéricas, a lo largo de este trabajo la estadística se colecta sobre un ensamble de diferentes realizaciones del desorden. Además, debido a que los espesores l_i son extraídos de una distribución de tipo Lévy [ver ecuación (8.1)], para una longitud fija de L el número de capas que componen la heteroestructura puede variar mucho de muestra a muestra. Por otro lado, a lo largo del presente trabajo, ω estará dada en unidades de una frecuencia de referencia $\omega_0 = 2\pi c/\lambda_0$, donde λ_0 puede ser escogida para proporcionar condiciones experimentales adecuadas.

8.4.1. Promedio de la transmisión $\langle T \rangle$

Como hemos mencionado, los resultados teóricos de este trabajo se basan sobre el análisis presentado en [123]. Aquí, únicamente reproduciremos el resultado principal de dicho trabajo: la distribución para la transmisión $P_\xi(T)$ con $\xi \equiv \langle T \rangle$. Las cantidades promediadas que estudiaremos tales como $\langle T \rangle$ y $\langle -\ln T \rangle$

[ver ecuación (8.2)], se obtienen de la siguiente expresión para la distribución

$$P_\xi(T) = \int_0^\infty p_{s(\alpha, \xi, z)}(T) q_{\alpha, 1}(z) dz, \quad (8.6)$$

y para $0 < \alpha < 1$, donde $q_{\alpha, c}$ es la función de la densidad de probabilidad de una distribución de tipo Lévy, admitido en el semieje positivo, $s(\alpha, \xi, z) = \xi / (2z^\alpha I_\alpha)$, $I_\alpha = 1/2 \int_0^\infty z^{-\alpha} q_{\alpha, 1} dz$, y

$$p_s(T) = \frac{s^{-\frac{3}{2}} e^{-\frac{s}{4}}}{\sqrt{2\pi} T^2} \int_{y_0}^\infty dy \frac{y e^{-\frac{y^2}{4s}}}{\sqrt{\cosh y + 1 - 2/T}}, \quad (8.7)$$

donde $y_0 = \text{arcosh}(2/T - 1)$.

De la ecuación (8.6) se encuentra que el promedio de la transmisión $\langle T \rangle$ está dado como

$$\langle T \rangle \propto L^\alpha, \quad (8.8)$$

para $0 < \alpha < 1$.

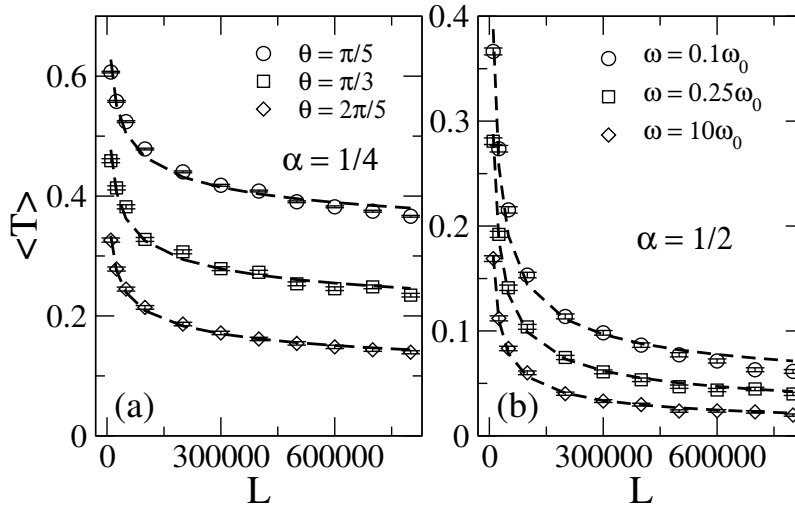


Figura 8.2: Promedio de la transmisión $\langle T \rangle$ como función de L (símbolos) para la heteroestructura unidimensional, con espaciamento desordenado tipo-Lévy y caracterizado por el parámetro α . En (a) [(b)] tres valores de θ fueron considerados para $\omega = 0.25$ [$\theta = 0$]. Las curvas discontinuas son las regresiones de los datos de acuerdo con la ec. (8.6). Cada símbolo fue calculado usando un ensamble de 10^4 realizaciones.

Nosotros hemos verificado numéricamente este resultado. En la Fig. 8.2 presentamos el promedio de la

transmisión para diferentes valores de θ y ω , con $\alpha = 1/4$ y $\alpha = 1/2$. Como podemos ver, el acuerdo es muy bueno en todos los casos. Este resultado [ecuación (8.8)] podría ser contrastado con el decaimiento exponencial de $\langle T \rangle$ con L , para sistemas unidimensionales con desorden estándar y con $\langle T \rangle \propto 1/L$, para sistemas cuasi-unidimensionales en el régimen de transporte difusivo normal.

8.4.2. Promedio del logaritmo de la transmisión $\langle -\ln T \rangle$

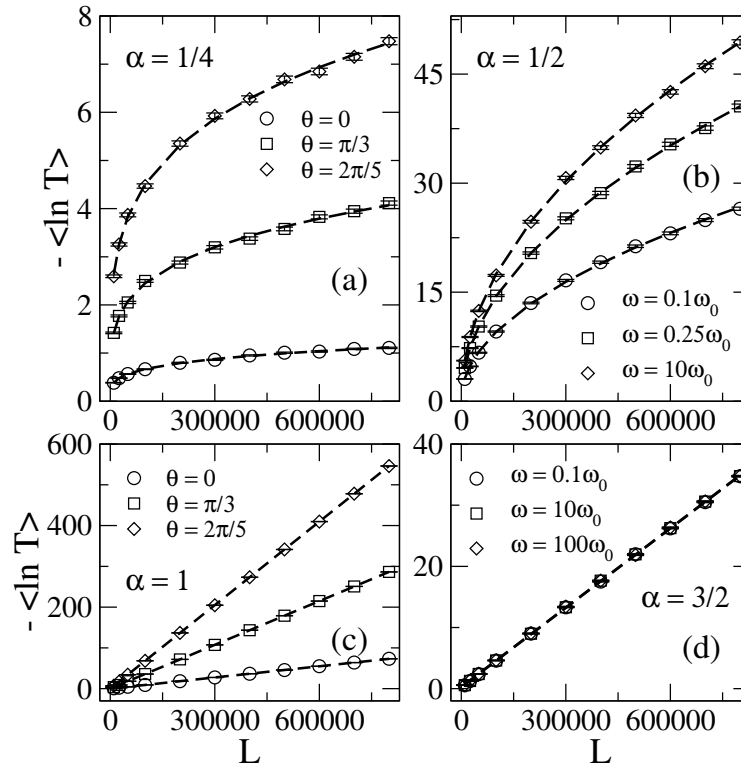


Figura 8.3: Promedio $\langle -\ln T \rangle$ como función de L (símbolos), para la heteroestructura unidimensional con espaciamiento desordenado tipo-Lévy y caracterizado por el parámetro α . En (a) y (c) [(b) y (d)] tres valores de θ [ω] fueron considerados para $\omega = 0.25$ [$\theta = 0$]. Las curvas discontinuas son las regresiones de los datos de acuerdo con la ec. (8.2). Cada símbolo fue calculado usando un ensamble de 10^4 realizaciones.

Ahora estudiaremos el promedio $\langle -\ln T \rangle$. En el transporte electrónico esta cantidad es de mucha importancia, ya que nos provee información sobre la longitud de localización del sistema desordenado. En la Fig. 8.3 presentamos diferentes gráficas del promedio $\langle -\ln T \rangle$ como función del tamaño L , para $\alpha < 1$ [Figs. 8.3(a) y 8.3(b)] y para $\alpha \geq 1$ [Figs. 8.3(c) y 8.3(d)]. Para $\alpha < 1$ podemos observar un claro comportamiento de

Panel	Rojo	Azul	Berde	Negro
(a)	(0,0.1)	($\pi/5,0.5$)	($\pi/4,10$)	($3\pi/7,1$)
(b)	(0,10)	($\pi/5,1$)	($\pi/6,0.1$)	($\pi/3,0.5$)
(c)	(0,10)	($\pi/5,5$)	($2\pi/5,1$)	($\pi/6,0.1$)
(d)	(0,2)	($\pi/4,10$)	($\pi/5,1$)	($\pi/3,5$)

Cuadro 8.1: Valores para $(\theta, \omega/\omega_0)$ usadas para los histogramas (etiquetadas por su color) en la Fig. 8.4.

la forma $\langle -\ln T \rangle \propto L^\alpha$; mientras que para $\alpha \geq 1$, observamos que $\langle -\ln T \rangle$ es simplemente proporcional al tamaño del sistema L , tal como en un sistema con desorden estándar. Por lo tanto, todas las curvas de la Fig. 8.3 están bien descritas por la ecuación (8.2). Además, observe que mientras las curvas de $\langle -\ln T \rangle$ vs. L son fuertemente dependientes sobre el ángulo de incidencia θ para toda α [ver Figs. 8.3(a) y 8.3(c)], la dependencia en ω se pierde para $\alpha \geq 1$ [ver Figs. 8.3(b) y 8.3(d)].

8.4.3. Distribución de la transmisión $P(T)$

Por último, vamos a analizar la distribución completa de la transmisión. Es claro de la Fig. 8.3 que eligiendo la combinación apropiada de θ , ω y L , uno puede fijar el valor del promedio $\langle -\ln T \rangle$ para un α dada. Entonces, en la Fig. 8.4(a) y 8.4(b) mostramos la probabilidad de la función de distribución $P(T)$ para $\alpha = 1/2$ y $\alpha = 3/4$ para $\langle -\ln T \rangle \simeq 2$. Ya que para valores pequeños de $\langle -\ln T \rangle$, $P(T)$ se acumula cerca de $T = 0$. Por otro lado, en la Fig. 8.4(c) y 8.4(d) presentamos $P(\ln T)$ para $\langle -\ln T \rangle \simeq 8$. Note además que cada panel en esta figura contiene cuatro histogramas con diferentes combinaciones de θ y ω . No obstante, todos los histogramas caen una encima de la otra, lo que indica que $P(T)$ y $P(\ln T)$ están completamente determinados por α y $\langle -\ln T \rangle$. Por otra parte, las líneas negras corresponden a predicciones teóricas para $P(T)$ y $P(\ln T)$, esto es para las combinaciones específicas de α y $\langle -\ln T \rangle$ que hemos usado. Evidentemente, la correspondencia entre la teoría y los resultados numéricos es excelente, afirmando la equivalencia entre sistemas desordenados unidimensionales cuánticos y electromagnéticos.

Queremos hacer hincapié que aunque hemos usado unidades arbitrarias para la longitud L de la heteroestructura, nuestros resultados pueden ser confirmados experimentalmente con una adecuada elección de la frecuencia $\omega = 2\pi c/\lambda$. Por ejemplo, ya que $\omega/\omega_0 = \lambda_0/\lambda$ y si $\lambda_0 = 2L$, entonces un experimento típico en el rango del visible con $\lambda \sim 500$ nm y $L = 10$ micrómetros [126, 127], la razón ω/ω_0 se puede fijar a 40. Por lo tanto, θ puede ser puesto a un valor específico en el que deseemos medir $\langle T \rangle$ ó el $\langle -\ln T \rangle$.

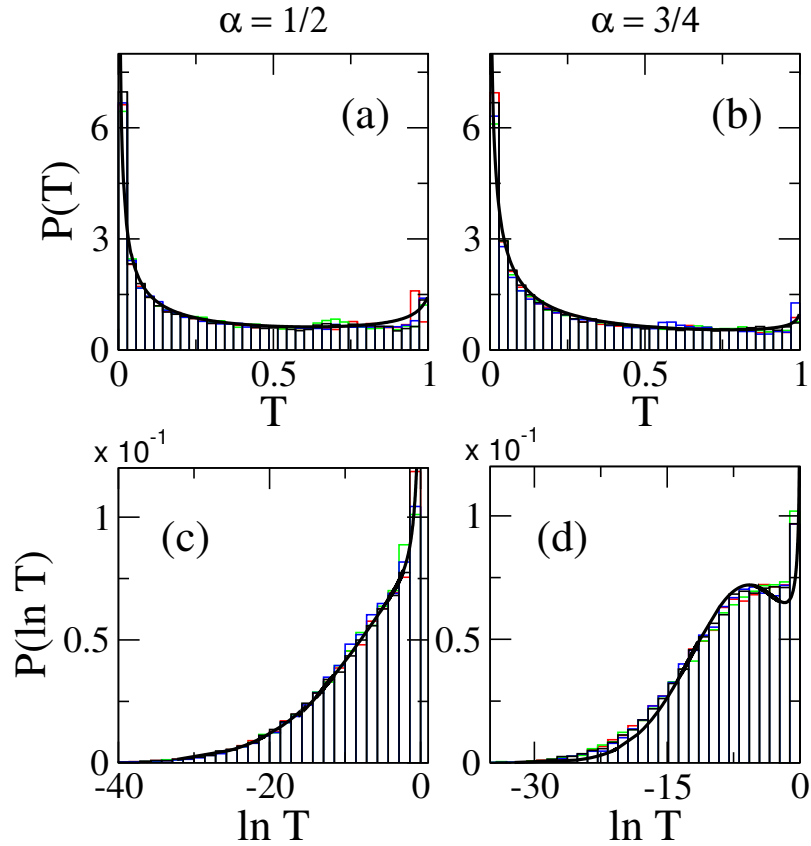


Figura 8.4: Función de distribución de probabilidad $P(T)$ [(a) y (b)] y $P(\ln T)$ [(c) y (d)] para $\alpha = 1/2$ y $3/4$ (histogramas). Cada panel contiene cuatro histogramas con valores de θ y ω , dados en el Cuadro 8.1. Los histogramas en los paneles (a) y (b) [(c) y (d)] se caracterizan por $\langle -\ln T \rangle \approx 2$ [$\langle -\ln T \rangle \approx 8$]. Las curvas continuas son las correspondientes predicciones teóricas obtenidas de la ec. (8.6). Cada histograma fue calculado usando ensambles de 3×10^4 realizaciones.

RESUMEN: En este capítulo hemos estudiado una heteroestructura unidimensional cuyos anchos de sus capas siguen una distribución de tipo Lévy, caracterizado por una ley de potencia de decaimiento, donde hemos mostrado que $\langle -\ln T \rangle \propto L^\alpha$ para $0 < \alpha < 1$; y una vez fijos α y $\langle -\ln T \rangle$, entonces la distribución de la probabilidad es invariante con respecto a los parámetros del sistema (θ, ω) . También, hemos encontrado que $\langle T \rangle \propto L^{-\alpha}$, en contraste a la ley de decaimiento exponencial en un sistema desordenado unidimensional. Finalmente, hemos verificado que nuestros resultados no cambian al considerar modos TM y diferentes contrastes en los índices de refracción n_A/n_B .

Capítulo 9

Conclusiones

El objetivo de esta tesis ha sido contribuir al entendimiento de la propagación de ondas, tanto clásicas como cuánticas. En la parte cuántica hemos usado la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo en sistemas de una y cuasi una dimensión. Esta misma ecuación, además puede ser usada para estudiar sistemas elásticos con frontera libre [6]. En la parte clásica hemos usado la ecuación de onda para estudiar la propagación de ondas electromagnéticas.

Hemos formulado la teoría de la matriz de reacción en una dimensión; para uno y dos canales, usando una base completa que obedece condiciones de frontera homogéneas (ver capítulo 2). Esto nos permitió demostrar que la matriz de dispersión es invariante ante cualquier base y por consiguiente, nos especializamos a las condiciones de frontera de Neumann. Adicionalmente, demostramos que es posible obtener los polos de $R(E)$ (energías de reacción) y sus anchuras reducidas a través del proceso inverso con la ayuda de las ecuaciones (2.65) y (2.68). En seguida, en el Capítulo 3, obtuvimos expresiones analíticas para algunas cantidades de interés físico, tales como el coeficiente de la transmisión, el tiempo de demora y la probabilidad de atrapamiento y demostramos que sus polos son los mismos que polos de la matriz de dispersión $S(E)$. Asimismo, calculamos y comparamos las cantidades de dispersión como función de la energía usando el formalismo de la Matriz de Reacción con el Método de la Matriz de Transferencia y algunas expresiones analíticas para el caso de la barrera/pozo plana y potencial de Pöschl-Teller. La comparación muestra el excelente acuerdo y revela la ventaja del cálculo numérico (computacional) de usar la Matriz de Reacción respecto a la Matriz de Transferencia.

En el Capítulo 4 hemos demostrado, para el caso de un canal, que una onda incidente a una energía $E \sim E_{\lambda'}$ estará formada únicamente por el eigenestado $|\Psi_{\lambda'}\rangle$. Esto aun cuando no se observe alguna resonancia en las cantidades de dispersión. En contraste, para el caso de dos canales (1D), una onda incidente a una energía $E \sim E_{\lambda}$ estará compuesta primordialmente por el eigenestado de Neumann $|\Psi_{\lambda}\rangle$ y de aquellos estados con diferente paridad a $|\Psi_{\lambda}\rangle$ contribuyendo con intensidades que decaen como $1/(E_{\lambda} - E_{\lambda'})^2$. Queremos hacer hincapié de que los resultados para $A_{\lambda}(E)$, ec. (4.10) y ec. (4.19), para uno y dos canales, son independientes de la anchura de la resonancia. Por otra parte, debido al hecho de que pocos son los niveles que contribuyen en la formación de la función de onda en la región interna nos motivó a considerar la aproximación extrema de un solo nivel. En este sentido, obtuvimos expresiones para las CD en esta aproximación (a un solo nivel) y las comparamos con sus correspondientes a $N \gg 1$ niveles. La fórmula de Breit-Wigner emerge de manera natural y nos dice que para resonancias aisladas, la parte real del polo de $S(E)$ está cerca al polo de la Matriz de Reacción.

La matriz de dispersión $S(E)$ en términos del hamiltoniano efectivo no hermítico $\mathcal{H}(E)$ la obtuvimos en el Capítulo 5, el cual nos permitió obtener las cantidades de dispersión en términos tanto del mismo $\mathcal{H}(E)$ como de los polos z_n de $S(E)$ cuyos resultados concuerdan con los de la matriz de reacción y de la matriz de transferencia. Además, el hamiltoniano efectivo es útil para la búsqueda de los polos y también para obtener expresiones las cantidades de dispersión para $N = 1, 2$ y 3 niveles.

En el Capítulo 6 presentamos tres diferentes e independientes formas de calcular los polos de la matriz de dispersión $S(E)$. En este sentido, encontramos que existe una relación uno a uno entre los eigenestados de reacción con lo polos de la matriz de dispersión para sistemas sin degeneración, esto nos permitió definir intervalos para la búsqueda de los polos, dependiendo de si $\omega_i \in (E_i, E_{i+1}) \forall i$, o si $\omega_{i+1} \in (E_{i+1}, E_i) \forall i \geq 1, E_n < \omega_n$ o $E_n > \omega_n$. Aunque la relación uno a uno se pierde para sistemas cuasi-degenerados hemos utilizado el mismo criterio para determinar el intervalo inicial de búsqueda de polos. Por otra lado, obtuvimos analíticamente la expresión del error que resulta de truncar las series que definen a la matriz R . Además, como consecuencia de la lenta convergencia de las series $R_{\nu\nu'}(E)$ y de las limitaciones de los métodos de búsqueda de polos, hemos introducido el método de la aceleración de la convergencia (ver Sec. 6.9) encontrando con ello excelentes resultados que hacen todavía más atractiva el uso de la MR para el cálculo de las cantidades de dispersión y de sus polos.

Adicionalmente, en el Capítulo 7, describimos el método de resolver la ecuación de Schrödinger para

obtener los eigenestados de reacción para un billar con paredes arbitrarias definidas por las funciones $f_1(x)$ y $f_2(x)$ (C.f. Fig. 2.3). Para ello se realizó un cambio de coordenadas cartesianas a curvilíneas, dando lugar a un nuevo hamiltoniano que incorpora los efectos de la frontera en un potencial de interacción efectiva. Después calculamos la conductancia para una guía de ondas con paredes planas especializándonos a cadenas de potenciales que varían únicamente en la dirección longitudinal, en donde hemos estudiado dos tipos de ruidos; posicional y composicional. Las cadenas que hemos considerado son de barreras cuadradas (modelo de K-P finito) y de barreras de PT encontrando que la conductancia distingue ambos tipos de ruidos; siendo más sensible al ruido posicional que al composicional. Además, el ruido composicional, preserva el comportamiento tipo escalón de la conductancia para los parámetros que hemos considerado.

Referente a la dispersión de ondas electromagnéticas, en el Capítulo 8 estudiamos una heteroestructura unidimensional cuyos anchos de sus capas siguen una distribución de tipo Lévy, donde hemos mostrado numéricamente que $\langle -\ln T \rangle \propto L^\alpha$ para $0 < \alpha < 1$. Por otro lado, una vez fijos α y $\langle \ln T \rangle$, entonces la distribución de la probabilidad es invariante con respecto a los parámetros del sistema (θ, ω) . También, hemos encontrado que $\langle T \rangle \propto L^{-\alpha}$, en contraste a la ley de decaimiento exponencial en un sistema desordenado unidimensional. Estos resultados fueron publicados en [17].

Trabajo a Futuro

De acuerdo a los resultados obtenidos en este trabajo, se tienen líneas de investigación que pretendemos seguir:

- Extenderemos los métodos para el cálculo de los polos considerados en el Cap. 6 para sistemas cuasi-unidimensionales.
- Con el formalismo desarrollado en el Capítulo 7, en conjunto con el del Capítulo 6, se analizarán las propiedades estadísticas de los anchos de las resonancias y de los espaciamientos entre ellas, en billares caóticos en función de su acoplamiento con el continuo.
- Referente a los resultados del Capítulo 8, se planea extender el análisis; tanto teórico como numérico, de las propiedades estadísticas de heteroestructuras contenidas en una guía de ondas ($M > 1$ canales), cuyos anchos de sus capas sigan una distribución de tipo Lévy, puesto que actualmente no existen resultados reportados en la literatura para estas propiedades.

- Se realizarán experimentos con cavidades de microondas en el laboratorio del Dr. José Sánchez-Dehesa (Universidad Politécnica Valencia, Valencia, España) para verificar experimentalmente algunas de nuestras predicciones teóricas en el transporte electromagnético a través de heteroestructuras desordenadas que se estudiaron en el Capítulo 8.

Apéndice A

Matriz R y S con Condiciones de Frontera Homogéneas

En este Apéndice usamos condiciones de fronteras homogéneas para definir la relación de ortogonalidad de los estados de reacción y a la matriz R . Mostraremos que, aunque la matriz de reacción si depende de las condiciones de frontera, la matriz de dispersión es independiente de éstas.

A.1. Condiciones de Frontera

Es necesario definir las CF, aplicadas en las fronteras de reacción, para el conjunto $\{\Psi_\lambda\}$. Estas condiciones de frontera son esenciales para mantener hermiticidad del hamiltoniano en la región interna. Las CF más comunes son las llamadas CF Mixtas de Dirichlet y de Neumann (ampliamente discutidas en [47]):

$$c_I \Psi_\lambda(x_I) + d_I \frac{d\Psi_\lambda(x_I)}{dx} = b_I, \quad (\text{A.1a})$$

$$c_D \Psi_\lambda(x_D) + d_D \frac{d\Psi_\lambda(x_D)}{dx} = b_D, \quad (\text{A.1b})$$

donde $x_{I,D}$ denota la posición de la frontera de reacción, $c_{I,D}$, $d_{I,D}$ y $b_{I,D}$ son constantes reales e independientes de λ . Para $b_I = b_D = 0$ las CF son llamadas CF homogéneas (CFH). En este caso, la ec. (A.1) se

puede escribir como

$$c_I \Psi_\lambda(x_I) + d_I \frac{d\Psi_\lambda(x_I)}{dx} = 0, \quad \Rightarrow \quad \frac{1}{\Psi_\lambda(x_I)} \frac{d\Psi_\lambda(x_I)}{dx} = -\frac{c_I}{d_I} \equiv B_I, \quad (\text{A.2a})$$

$$c_D \Psi_\lambda(x_D) + d_D \frac{d\Psi_\lambda(x_D)}{dx} = 0, \quad \Rightarrow \quad \frac{1}{\Psi_\lambda(x_D)} \frac{d\Psi_\lambda(x_D)}{dx} = -\frac{c_D}{d_D} \equiv B_D. \quad (\text{A.2b})$$

Casos especiales de estas CF son:

- CF de Neumann (CFN): $B_I = B_D = 0$ ($c_I = c_D = 0$) $\Rightarrow \frac{d\Psi_\lambda(x_{I,D})}{dx} = 0$,
- CF de Dirichlet (CFD): $B_I = B_D = \infty$ ($d_I = d_D = 0$) $\Rightarrow \Psi_\lambda(x_{I,D}) = 0$.

Aquí, usaremos las CFH para obtener la matriz de reacción y la matriz de dispersión y posponemos la investigación para el caso de CF no homogéneas.

A.2. Relación de Ortogonalidad

Para mostrar que la completés de los estados de reacción es independiente del tipo de CF, consideremos la ec. (A.2) reescrita como

$$\left(\frac{1}{\Psi_\lambda(x)} \frac{d\Psi_\lambda(x)}{dx} \right)_{x=x_i} = B_i, \quad (\text{A.3})$$

donde x_i denota la posición de la frontera de reacción y B_i es el parámetro de frontera. Ahora consideremos las siguientes dos ecuaciones

$$\Psi_{\lambda'}^*(x) \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \Psi_\lambda(x) = E_\lambda \Psi_{\lambda'}^*(x) \Psi_\lambda(x), \quad (\text{A.4a})$$

$$\Psi_\lambda(x) \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \Psi_{\lambda'}^*(x) = E_{\lambda'} \Psi_\lambda(x) \Psi_{\lambda'}^*(x), \quad (\text{A.4b})$$

los restamos y después integramos (en la región interna),

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \int_{int} \frac{d}{dx} \left[\Psi_{\lambda'}^*(x) \frac{d\Psi_\lambda(x)}{dx} - \Psi_\lambda(x) \frac{d\Psi_{\lambda'}^*(x)}{dx} \right] dx = (E_\lambda - E_{\lambda'}) \int_{int} \Psi_\lambda(x) \Psi_{\lambda'}^*(x) dx, \quad (\text{A.5a})$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\Psi_{\lambda'}^*(x) \frac{d\Psi_\lambda(x)}{dx} - \Psi_\lambda(x) \frac{d\Psi_{\lambda'}^*(x)}{dx} \right]_{frontera} = (E_\lambda - E_{\lambda'}) (\Psi_{\lambda'}^*, \Psi_\lambda), \quad (\text{A.5b})$$

con $(\Psi_{\lambda'}^*, \Psi_{\lambda}) = \int_{int} \Psi_{\lambda'}^*(x) \Psi_{\lambda}(x) dx$. Ahora analicemos la ec. (A.5b) considerando el sistema de dos canales, en el cual, en ambas fronteras (x_I y x_D) la condición de frontera es homogénea, y en consecuencia, la ec. (A.5b) toma la siguiente forma

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\Psi_{\lambda'}^*(x_D) \partial_x \Psi_{\lambda}(x_D) - \Psi_{\lambda}(x_D) \partial_x \Psi_{\lambda'}^*(x_D) - \Psi_{\lambda'}^*(x_I) \partial_x \Psi_{\lambda}(x_I) + \Psi_{\lambda}(x_I) \partial_x \Psi_{\lambda'}^*(x_I) \right) = (E_{\lambda} - E_{\lambda'}) (\Psi_{\lambda'}^*, \Psi_{\lambda}). \quad (\text{A.6})$$

Aplicando (A.3) en la ec. (A.6), obtenemos

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[B_D (\Psi_{\lambda'}^*(x_D) \Psi_{\lambda}(x_D) - \Psi_{\lambda}(x_D) \Psi_{\lambda'}^*(x_D)) - B_I (\Psi_{\lambda'}^*(x_I) \Psi_{\lambda}(x_I) - \Psi_{\lambda}(x_I) \Psi_{\lambda'}^*(x_I)) \right] = (E_{\lambda} - E_{\lambda'}) (\Psi_{\lambda'}^*, \Psi_{\lambda}), \quad (\text{A.7})$$

vemos que el término del lado izquierdo de esta última ecuación es igual a cero. Entonces, para $E_{\lambda'} \neq E_{\lambda}$ con $\lambda' \neq \lambda$ (esto siempre se cumple en un sistema unidimensional), obtenemos la relación de ortogonalidad

$$(\Psi_{\lambda'}^*, \Psi_{\lambda}) = 0, \quad \lambda' \neq \lambda. \quad (\text{A.8})$$

Para $\lambda' = \lambda$ podemos normalizar a uno:

$$(\Psi_{\lambda'}^*, \Psi_{\lambda}) = 1, \quad \lambda' = \lambda. \quad (\text{A.9})$$

Con esto se muestra que la relación de ortogonalidad es independiente de B. Sin embargo, debemos de tener cuidado de que el valor de B sea tal que nos conduzca a CF acorde al problema físico para evitar problemas de convergencia y de acoplamiento con la función de onda asintótica.

A.3. Matriz de Reacción, un canal

Primero deduzcamos la forma de los $A_\lambda(E)$ usando la CF homogénea. Para ello, consideremos las siguientes ecuaciones

$$\Psi_\lambda^*(x) \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \psi(E; x) = E \Psi_\lambda^*(x) \psi(E; x), \quad (\text{A.10a})$$

$$\psi(E; x) \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \Psi_\lambda^*(x) = E_\lambda \psi(E; x) \Psi_\lambda^*(x). \quad (\text{A.10b})$$

Restamos estas ecuaciones y posteriormente integramos (en la región interna (*int*)) para obtener

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \int_{int} \frac{\partial}{\partial x} \left[\Psi_\lambda^*(x) \frac{\partial \psi(E; x)}{\partial x} - \psi(E; x) \frac{\partial \Psi_\lambda^*(x)}{\partial x} \right] dx = (E - E_\lambda) \int_{int} \psi(E; x) \Psi_\lambda^*(x) dx, \quad (\text{A.11a})$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\Psi_\lambda^*(x) \frac{\partial \psi(E; x)}{\partial x} - \psi(E; x) \frac{\partial \Psi_\lambda^*(x)}{\partial x} \right]_{frontera} = (E - E_\lambda) A_\lambda(E), \quad (\text{A.11b})$$

donde

$$A_\lambda(E) = \int_{int} \Psi_\lambda^*(x) \psi(E; x) dx.$$

En este caso, de un canal, las CF son de Dirichlet en el origen y homogénea en $x = x_2$. Con esto, la ec.

(A.11b) toma la forma

$$A_\lambda(E) = \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{[\Psi_\lambda^*(x) \partial_x \psi(E; x) - \psi(E; x) \partial_x \Psi_\lambda^*(x)]_0^{x_2}}{E_\lambda - E} \quad (\text{A.12a})$$

$$= \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\Psi_\lambda^*(x_2) \partial_x \psi(E; x_2) - \psi(E; x_2) \partial_x \Psi_\lambda^*(x_2)}{E_\lambda - E} \quad (\text{A.12b})$$

$$= \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial_x \psi(E; x_2) - \psi(E; x_2) \left(\frac{\partial_x \Psi_\lambda^*(x_2)}{\Psi_\lambda^*(x_2)} \right)}{E_\lambda - E} \Psi_\lambda^*(x_2). \quad (\text{A.12c})$$

Sustituyendo la ec. (A.3) en (A.12c), obtenemos la forma de $A_\lambda(E)$ como

$$A_\lambda(E) = \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial_x \psi(E; x_2) - B_2 \psi(E; x_2)}{E_\lambda - E} \Psi_\lambda^*(x_2). \quad (\text{A.13})$$

Sustituyendo (A.13) en la expresión para la función de onda dispersada (ver ec. (2.10)), obtenemos

$$\psi(E; x) = (\partial_x \psi(E; x_2) - B_2 \psi(E; x_2)) \frac{\hbar^2}{2\mu} \sum_{\lambda=1}^{\infty} \frac{\Psi_\lambda^*(x_2) \Psi_\lambda(x)}{E_\lambda - E}, \quad 0 \leq x \leq x_2. \quad (\text{A.14})$$

Evaluando (A.14) en $x = x_2$, obtenemos

$$\psi(E; x_2) = (\partial_x \psi(E; x_2) - B_2 \psi(E; x_2)) R(E; B_2), \quad (\text{A.15})$$

donde $R(E; B_2)$ es una función de *reacción* y que explícitamente hemos indicado que depende de B_2 .

Reacomodando términos en (A.15), obtenemos

$$\frac{\partial_x \psi(E; x_2)}{\psi(E; x_2)} = \frac{1 + B_2 R(E; B_2)}{R(E; B_2)} = \frac{1}{R(E; B_2)} + B_2, \quad (\text{A.16})$$

La fracción que aparece del lado izquierdo de esta última ecuación es la derivada logarítmica de la función de onda dispersada que debe ser independiente de B_2 , puesto que es independiente de la base utilizada para expandir $\psi(E; x)$. Para $B_2 = 0$ (eigenestados de reacción con condiciones de frontera de Neumann), la ec. (A.16) se reduce a

$$\frac{\partial_x \psi(E; x_2)}{\psi(E; x_2)} = \frac{1}{R(E; 0)}, \quad (\text{A.17})$$

la cual es la función de reacción definida por Wigner-Eisenbud en [35]. Sustituimos (A.17) en la ec. (A.16) obtenemos la relación que muestra la dependencia de la función de reacción sobre B_2 [36, 38], como

$$R(E; B_2) = (R^{-1}(E; 0) - B_2)^{-1}, \quad (\text{A.18})$$

la cual se puede expresar en forma de una ecuación diferencial [36] de la siguiente manera

$$\frac{\partial R(E; B_2)}{\partial B_2} = R^2(E; B_2) = (R^{-1}(E; 0) - B_2)^{-2}. \quad (\text{A.19})$$

Esta última expresión nos indica explícitamente la dependencia de la función de reacción con respecto a B_2 .

A.4. Matriz de reacción, dos canales

Al igual que en la sección anterior, aquí primero vamos a deducir la forma de $A_\lambda(E)$ usando las CF dadas en la ec. (A.3) para posteriormente obtener la forma de la matriz de reacción. Para obtener $A_\lambda(E)$

partimos de la ec. (A.11b), que después de evaluarla en x_D y x_I , obtenemos

$$A_\lambda(E) = \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\Psi_\lambda^*(x_D)\partial_x\psi(E; x_D) - \psi(E; x_D)\partial_x\Psi_\lambda^*(x_D) - \Psi_\lambda^*(x_I)\partial_x\psi(E; x_I) + \psi(E; x_I)\partial_x\Psi_\lambda^*(x_I)}{E_\lambda - E}. \quad (\text{A.20})$$

Factorizando $\Psi_\lambda^*(x_D)$ y $\Psi_\lambda^*(x_I)$ en (A.20), obtenemos

$$A_\lambda(E) = \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{[\partial_x\psi(E; x_D) - \frac{\partial_x\Psi_\lambda^*(x_D)}{\Psi_\lambda^*(x_D)}\psi(E; x_D)]\Psi_\lambda^*(x_D) - [\partial_x\psi(E; x_I) - \frac{\partial_x\Psi_\lambda^*(x_I)}{\Psi_\lambda^*(x_I)}\psi(E; x_I)]\Psi_\lambda^*(x_I)}{E_\lambda - E}. \quad (\text{A.21})$$

Usando la ec. (A.3) en (A.21), llegamos a lo siguiente

$$A_\lambda(E; B) = \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{[\partial_x\psi(E; x_D) - B_D\psi(E; x_D)]\Psi_\lambda^*(x_D) - [\partial_x\psi(E; x_I) - B_I\psi(E; x_I)]\Psi_\lambda^*(x_I)}{E_\lambda - E}. \quad (\text{A.22})$$

Con esto la función de onda dispersada, ec. (2.24), toma la forma siguiente

$$\begin{aligned} \psi(E; x) = & (\partial_x\psi(E; x_D) - B_D\psi(E; x_D)) \frac{\hbar^2}{2\mu} \sum_\lambda \frac{\Psi_\lambda^*(x_D)\Psi_\lambda(x)}{E_\lambda - E} \\ & - (\partial_x\psi(E; x_I) - B_I\psi(E; x_I)) \frac{\hbar^2}{2\mu} \sum_\lambda \frac{\Psi_\lambda^*(x_I)\Psi_\lambda(x)}{E_\lambda - E}. \end{aligned} \quad (\text{A.23})$$

Evaluamos la ec. (A.23) en $x = x_D$ y $x = x_I$, respectivamente, obtenemos

$$\psi(E; x_D) = \left(\frac{\partial\psi(E; x_D)}{\partial x} - B_D\psi(E; x_D) \right) R_{DD}(B_D) - \left(\frac{\partial\psi(E; x_I)}{\partial x} - B_I\psi(E; x_I) \right) R_{DI}(B_I), \quad (\text{A.24a})$$

$$\psi(E; x_I) = \left(\frac{\partial\psi(E; x_D)}{\partial x} - B_D\psi(E; x_D) \right) R_{ID}(B_D) - \left(\frac{\partial\psi(E; x_I)}{\partial x} - B_I\psi(E; x_I) \right) R_{II}(B_I), \quad (\text{A.24b})$$

donde $R_{ij}(E; B) \equiv R_{ij}(B)$ denota los elementos de la matriz de reacción dados como

$$R_{ij}(B) = \frac{\hbar^2}{2\mu} \sum_\lambda \frac{\Psi_\lambda(x_i; B)\Psi_\lambda^*(x_j; B)}{E_\lambda(B) - E}. \quad (\text{A.25})$$

Reacomodando términos en el sistema de ecuaciones (A.24), obtenemos

$$\begin{pmatrix} \psi(E; x_D) \\ \psi(E; x_I) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R_{DD}(B_D) & -R_{DI}(B_I) \\ R_{ID}(B_D) & -R_{II}(B_I) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \partial_x \psi(E; x_D) - B_D \psi(E; x_D) \\ \partial_x \psi(E; x_I) - B_I \psi(E; x_I) \end{pmatrix}, \quad (\text{A.26a})$$

$$= R(B) \sigma_3 \begin{pmatrix} \partial_x \psi(E; x_D) \\ \partial_x \psi(E; x_I) \end{pmatrix} - R(B) \sigma_3 \begin{pmatrix} B_D & 0 \\ 0 & B_I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi(E; x_D) \\ \psi(E; x_I) \end{pmatrix}, \quad (\text{A.26b})$$

con $R(B) = \begin{pmatrix} R_{DD}(B_D) & R_{DI}(B_I) \\ R_{ID}(B_D) & R_{II}(B_I) \end{pmatrix}$ y $\sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ es la matriz de Pauli. Puesto que no consideramos espín en nuestro sistema, σ_3 define el signo en la frontera de reacción.

El sistema de ecuaciones (A.26) lo podemos escribir como

$$\psi(E; x_i) = (R(B) \sigma_3)_{ij} \left[\frac{\partial \psi(E; x_j)}{\partial x} - B_j \psi(E; x_j) \right]. \quad (\text{A.27})$$

En notación matricial la ecuación (A.27) es

$$\Psi = R(B) \sigma_3 \nabla \Psi - R(B) \sigma_3 B \Psi, \quad (\text{A.28})$$

donde $\Psi \equiv \begin{pmatrix} \psi(E; x_D) \\ \psi(E; x_I) \end{pmatrix}$ y $B \equiv \begin{pmatrix} B_D & 0 \\ 0 & B_I \end{pmatrix}$. Factorizando Ψ en (A.28), obtenemos

$$\Psi = \frac{R(B)}{1 + R(B) \sigma_3 B} \nabla_n \Psi, \quad (\text{A.29})$$

donde $\nabla_n = \sigma_3 \nabla$ denota la derivada en la dirección normal. Para el caso de eigenestados de reacción con condiciones de frontera de Neumann ($B = 0$), obtenemos $\Psi = R(0) \nabla_n \Psi$, que después de sustituirla en (A.29) obtenemos

$$R(0) = \frac{R(B)}{1 + R(B) \sigma_3 B}. \quad (\text{A.30})$$

Finalmente, de (A.30) obtenemos la relación que muestra de forma explícita la dependencia de la matriz de reacción con respecto a B :

$$R^{-1}(B) = R^{-1}(0) - \sigma_3 B, \quad (\text{A.31})$$

que es una generalización del resultado para un canal (ver ec. (A.18)).

A.5. La Matriz S en términos de la Matriz R

En previas secciones mostramos que la matriz de Reacción depende explícitamente de B . En esta sección vamos a obtener la matriz de dispersión en términos de la matriz de reacción y mostraremos que ésta es independiente de B .

Primeramente veamos como se pueden escribir Ψ y $\nabla_n \Psi$. Entonces, exigiendo continuidad de la función de onda $\psi(E; x_i) = \psi_i(E; x_i)$ (ver ec. (6.20b)) obtenemos

$$\Psi = \begin{pmatrix} \psi(E; x_D) \\ \psi(E; x_I) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_D e^{-ikx_D} + \beta_D e^{ikx_D} \\ \alpha_I e^{ikx_I} + \beta_I e^{-ikx_I} \end{pmatrix} \quad (\text{A.32a})$$

$$= \begin{pmatrix} e^{-ikx_D} & 0 \\ 0 & e^{ikx_I} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_D \\ \alpha_I \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} e^{ikx_D} & 0 \\ 0 & e^{-ikx_I} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta_D \\ \beta_I \end{pmatrix} \quad (\text{A.32b})$$

$$= w\alpha + w^*\beta, \quad (\text{A.32c})$$

Ahora, exigiendo continuidad de la derivada de la función de onda $\partial_x \psi(E; x_i) = \partial_x \psi_i(E; x_i)$, obtenemos $\nabla_n \Psi$ como:

$$\nabla_n \Psi = \begin{pmatrix} \partial_x \psi(E; x_D) \\ -\partial_x \psi(E; x_I) \end{pmatrix} = ik \begin{pmatrix} -\alpha_D e^{-ikx_D} + \beta_D e^{ikx_D} \\ -\alpha_I e^{ikx_I} + \beta_I e^{-ikx_I} \end{pmatrix} \quad (\text{A.33a})$$

$$= -ik \begin{pmatrix} e^{-ikx_D} & 0 \\ 0 & e^{ikx_I} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_D \\ \alpha_I \end{pmatrix} + ik \begin{pmatrix} e^{ikx_D} & 0 \\ 0 & e^{-ikx_I} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta_D \\ \beta_I \end{pmatrix} \quad (\text{A.33b})$$

$$= -ik(w\alpha - w^*\beta). \quad (\text{A.33c})$$

donde $w = \begin{pmatrix} e^{-ikx_D} & 0 \\ 0 & e^{ikx_I} \end{pmatrix}$. Sustituimos (A.32c) y (A.33c) en la ecuación (A.28) y después de acomodar términos llegamos a la siguiente ecuación

$$(1 + R(B)\sigma_3 B)(w\alpha + w^*\beta) = -ikR(B)ik(w\alpha - w^*\beta). \quad (\text{A.34})$$

Resolviendo para β , obtenemos

$$\beta = -w \frac{1 + R(B)\sigma_3 B + ikR(B)}{1 + R(B)\sigma_3 B - ikR(B)} w \alpha. \quad (\text{A.35})$$

Comparando (A.35) con la ecuación (2.59) obtenemos $S(E)$ como

$$S(E) = -w \frac{1 + R(B)\sigma_3 B + ikR(B)}{1 + R(B)\sigma_3 B - ikR(B)} w = -w \frac{1 + ikR(0)}{1 - ikR(0)} w, \quad (\text{A.36})$$

donde en esta última igualdad hemos usado la ecuación (A.30).

El resultado (A.36) nos dice que la forma de $S(E)$, como función de $R(B)$, es la misma para toda B diferente de cero y obtiene su forma más simple cuando $B = 0$. Dado que el valor del parámetro de frontera B se ha supuesto arbitrario, la relación (A.36) también muestra que no importa que valor de B se escoja, pues el valor de $S(E)$ corresponde al caso $B = 0$ (condición de frontera de Neumann). Es decir, el valor de $S(E)$ es independiente de B . Recordemos que este es el caso de las condiciones de frontera homogéneas. ¿Pasaría lo mismo para el caso de las no homogéneas? Por cuestiones de tiempo, pospondremos esta investigación.

Apéndice B

Potencial constante, uno y dos canales

En este apéndice obtenemos las expresiones de la amplitud de la transmisión, el tiempo de demora y la probabilidad de atrapamiento para los casos de uno y dos canales para una barrera/pozo de potencial constante.

B.1. Barrera/pozo de potencial constante, dos canales

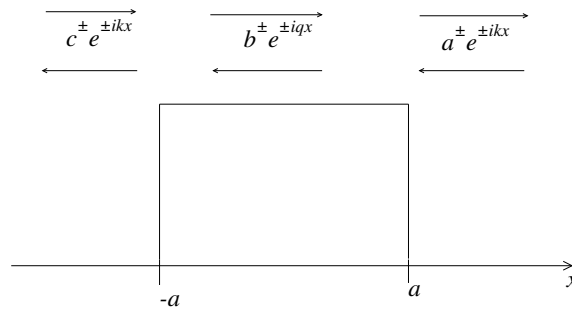


Figura B.1: Barrera de potencial plana cuyo ancho es $d = 2a$. Aquí mostramos las ondas incidentes, reflejadas y transmitidas para $E > V_0$. k es el vector de onda en la región asintótica y $\hbar^2 q = \sqrt{2\mu(E - V_0)}$.

La función de onda satisface la ecuación de Schrödinger

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_0 \right] \Phi(E; x) = E\Phi(E; x), \quad (\text{B.1})$$

cuya soluciones, para cada una de las tres regiones mostradas en la figura B.1, se pueden expresar como una combinación lineal de ondas planas (para $E > V_0$) como

$$\Phi(x) = \begin{cases} c^+ e^{ikx} + c^- e^{-ikx}, & x < -a \\ b^+ e^{iqx} + b^- e^{-iqx}, & -a \leq x \leq a \\ a^+ e^{ikx} + a^- e^{-ikx}, & x > a \end{cases} \quad (\text{B.2})$$

donde $\hbar k = \sqrt{2\mu E}$ y $\hbar q = \sqrt{2\mu(E - V_0)}$. Para obtener los coeficientes de reflexión y transmisión usaremos el formalismo de la matriz de transferencia, es decir, obtendremos $c^\pm = M a^\pm$, donde M es una matriz de 2×2 dado como

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

Después de demandar continuidad de la función de onda y de su derivada en $x = \pm a$, obtenemos los elementos de la matriz M :

$$\begin{pmatrix} c^+ \\ c^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (\cos(qd) + i\eta_+ \sin(qd))e^{ikd} & i\eta_- \sin(qd) \\ -i\eta_- \sin(qd) & (\cos(qd) - i\eta_+ \sin(qd))e^{-ikd} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a^+ \\ a^- \end{pmatrix}. \quad (\text{B.3})$$

Note que se cumple $M_{11}^* = M_{22}$ y $M_{21}^* = M_{12}$. El coeficiente de la transmisión se obtiene como $t(E) = 1/M_{22}$:

$$t(E) = \frac{e^{-ikd}}{\cos(qd) - i\eta_+ \sin(qd)}; \quad \eta_\pm = \frac{1}{2} \left(\frac{k}{q} \pm \frac{q}{k} \right). \quad (\text{B.4})$$

Relacionando los elementos de la matriz de transferencia con los de la matriz S , obtenemos [ver la ecuación (E.13)]

$$S(E) = \frac{e^{-ikd}}{\cos(qd) - i\eta_+ \sin(qd)} \begin{pmatrix} i\eta_- \sin(qd) & 1 \\ 1 & i\eta_- \sin(qd) \end{pmatrix}. \quad (\text{B.5})$$

La expresión (B.5) se muestra en el Cuadro 3.2. La amplitud de la transmisión, $T(E) = |t(E)|^2$, expresa la probabilidad de que la partícula incidente sobre el potencial pase a través de ésta. Cuando $E > V_0$, entonces es posible encontrar energías para las cuales la amplitud de la transmisión $T(E_n) = 1$. Estas energías se obtienen cuando $qd = n\pi$ en (B.4) para $n = 1, 2, 3, \dots$, es decir, para energías discretas: $E_n = \frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{n\pi}{d} \right)^2 \pm V_0$

((+) para una barrera de potencial y (-) para un pozo de potencial). Esto quiere decir que el potencial es completamente transparente para éstas energías (la transparencia del potencial se debe a la dualidad del electrón, la cual es una partícula cuántica).

Ahora vamos a obtener el **tiempo de demora** y para ello consideremos lo siguiente. Sea $\theta_t(E)$ la fase del coeficiente de la transmisión, la cual nos da la diferencia de la onda transmitida comparada con la onda incidente. $\theta_t(E)$ se obtiene de (B.4) como (recordemos que podemos escribir $t(E) = |t(E)|e^{i\theta_t(E)}$)

$$\theta_t(E) = \arctan\left(\frac{\text{Im}[t(E)]}{\text{Re}[t(E)]}\right), \quad (\text{B.6})$$

con lo cual se obtiene

$$\theta_t(E) = kd - \arctan(\eta_+ \tan(qd)). \quad (\text{B.7})$$

El tiempo de demora $\tau(E)$ lo obtenemos derivando la ecuación (B.7) con respecto a la energía, como

$$\tau(E) = \hbar \frac{d\theta_t(E)}{dE}. \quad (\text{B.8})$$

Así, después de un poco de manipulación algebraica, llegamos a

$$\tau(E) = -\frac{\mu}{\hbar} \left(\frac{d}{k} - \frac{d\eta_+ - \eta_+^2 k^{-1} \sin(2qd)}{q[\cos^2(qd) + \eta_+^2 \sin^2(qd)]} \right). \quad (\text{B.9})$$

Por otro lado, la **probabilidad de atrapamiento** la obtenemos después de integrar la función de onda en la región interna como:

$$\begin{aligned} P(E) &= \int_{-a}^a |\Phi_{in}(x; E)|^2 \\ &= d(|b^+|^2 + |b^-|^2) + 2\Re\left[\frac{b^+ b^{-*}}{q}\right] \sin(qd), \end{aligned} \quad (\text{B.10})$$

donde

$$b^\pm = \frac{1}{2} \frac{(1 \mp k/q)e^{\pm id(q \mp k)}}{\cos(qd) - i\eta_+ \sin(qd)}.$$

Después de acomodar términos y hacer algunas simplificaciones obtenemos $P(E)$ como

$$P(E) = \frac{\frac{d}{2}(1 + (k/q)^2) + (4q)^{-1}(1 - (k/q)^2) \sin(2qd)}{\cos^2(qd) + \eta_+^2 \sin^2(qd)} \quad (\text{B.11})$$

B.2. Potencial plano semi-infinito, un canal

Aquí consideraremos la dispersión de una partícula debido a un potencial (de ancho d) en un sistema semi-infinito. Supondremos que la partícula incide desde el ∞ (incidencia por la derecha) con energía E y vector de onda k . Así mismo, es reflejada nuevamente a la derecha por una barrera infinita localizada en el origen. Refiriéndonos a la función de onda dada en la ecuación (B.2) cuyos coeficientes ahora se redefinen como: $c^\pm = 0$ para $x < 0$; $b^+ = -b^- \equiv B$ para $0 \leq x \leq d$, y finalmente para $x > d$ definimos $a^+ = 1$ y $a^- \equiv S(E)$, donde $S(E)$ es la función de dispersión. Ahora bien, después de exigir continuidad de la función de onda y de su derivada en la interface $x = d$, obtenemos

$$B(E) = \frac{e^{-ikd} + S e^{ikd}}{\sin(qd)}, \quad (\text{B.12})$$

y

$$S(E) = e^{-2ikd} \frac{q + ik \tan(qd)}{q - ik \tan(qd)}. \quad (\text{B.13})$$

Note que $S(E)S^*(E) = 1$, lo cual implica que la podemos escribir en términos de su fase como $S = e^{i2\theta(E)}$ donde $\theta(E) = -2kd + 2\delta$. Después de separar la parte real e imaginaria de (B.13) obtenemos $\delta = \arctan\left(\frac{k}{q} \tan(qd)\right)$. Finalmente, usando (B.8) obtenemos el tiempo de demora como [40]

$$\tau(E) = -\frac{2\mu}{\hbar} \left(\frac{d}{k} - \frac{\eta_- \tan(qd) + dk \sec^2(qd)}{q^2 + k^2 \tan^2(qd)} \right). \quad (\text{B.14})$$

Finalmente, para el caso de un canal, la **densidad de atrapamiento** de igual forma, la obtenemos inte-

grando la función de onda en la región de interacción como

$$\begin{aligned}
 P(E) &= \int_0^d |\Phi_{in}(E; x)|^2 dx = |B(E)|^2 \int_0^d \sin^2(qx) dx \\
 &= \frac{2(k/q)^2}{1 - (1 - (k/q)^2) \sin^2(qd)} \left[d - \frac{\sin(2qd)}{2q} \right] \\
 &= \frac{2k^2 \sec^2(qd) [d - (2q)^{-1} \sin(2qd)]}{q^2 + k^2 \tan^2(qd)}.
 \end{aligned} \tag{B.15}$$

Para el caso de $E < V_0$, $q \rightarrow i\sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2}(V_0 - E)} = iQ$, y

$$P(E) = \frac{-2(k/Q)^2}{1 + (1 + (k/Q)^2) \sinh^2(Qd)} \left[d - \frac{\sinh(2Qd)}{2Q} \right]. \tag{B.16}$$

Apéndice C

Eigenestados de Reacción

Para implementar el método de la teoría de la matriz de reacción necesitamos primeramente obtener una base para obtener los estados de reacción $\Psi_\lambda(x)$. Para el caso de dos canales usaremos, por simplicidad, las condiciones de frontera de Neumann ($\partial_x \Phi(x_{I,D}) = 0$) para obtener dicha base. Esto lo lograremos expandiendo los $\Psi_\lambda(x)$ en la base de eigenfunciones formadas por una superposición de ondas planas (esta no es la única opción, por ejemplo en [38] se discuten otras posibilidades):

$$\Phi(k; x) = Ae^{ik(x-x_D)} + Be^{-ik(x-x_D)}, \quad (\text{C.1})$$

Tomando la derivada, obtenemos

$$\partial_x \Phi(k; x_I) = ik(Ae^{ik(x_I-x_D)} - Be^{-ik(x_I-x_D)}) = 0 \quad (\text{C.2a})$$

$$\partial_x \Phi(k; x_D) = ik(A - B) = 0 \quad (\text{C.2b})$$

Resolviendo el sistema de ecuaciones, obtenemos que $\sin(kd) = 0 \Rightarrow k_m d = (m-1)\pi$, donde $d = x_D - x_I$ y $m = 1, 2, 3, \dots$. La función de onda (C.1) ahora se puede escribir como

$$\Phi_m(x) = 2B \cos(k_m(x - x_D)). \quad (\text{C.3})$$

Sin pérdida de generalidad definimos $C \equiv 2B$, tal que

$$\Phi_m(x) = C \cos(k_m(x - x_D)). \quad (\text{C.4})$$

Normalizando esta función de onda, primero para $m = 1$, obtenemos

$$|C|^2 \int_{x_I}^{x_D} dx = 1 \quad \Rightarrow \quad C = \frac{1}{\sqrt{d}}.$$

Para $m > 1$ se obtiene

$$|C|^2 \int_{x_I}^{x_D} \cos^2(k_m(x - x_D)) dx = 1 \Rightarrow C = \sqrt{\frac{2}{d}}. \quad (\text{C.5})$$

Entonces, la base que cumple con CFN en $x = x_{I,D}$ se puede escribir como

$$\Phi_m(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{d}}, & m = 1, \\ \sqrt{\frac{2}{d}} \cos(k_m(x - x_D)), & m > 1 \end{cases} \quad (\text{C.6})$$

Ahora, para el caso de un **sistema semi-infinito** unidimensional, las condiciones de frontera son una mezcla de Dirichlet ($\Phi_m(0) = 0$) y Neumann ($\partial_x \Phi_m(x_2) = 0$) en $x_1 = 0$ y $x = x_2$, respectivamente. Considerando estas CF, obtenemos la función de onda de la base ya normalizada como

$$\Phi_m(x) = \sqrt{\frac{2}{x_2}} \sin\left(\frac{(m - 1/2)\pi x}{x_2}\right); \quad m = 1, 2, \dots \quad (\text{C.7})$$

Diagonalización de la matriz hamiltoniana con CFN

Para obtener $H_{m'm}$ debemos primero desarrollar $\Psi_\lambda(x)$ en una serie de Fourier como

$$\Psi_\lambda(x) = \sum_m C_m^\lambda \Phi_m(x),$$

donde C_m^λ es el λ -ésimo eigenvector de reacción con su respectivo eigenvalor E_λ .

Ahora procedemos a resolver el problema de eigenvalores diagonalizando la ecuación de Schrödinger

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \Psi_\lambda(x) = E_\lambda \Psi_\lambda(x), \quad 0 \leq x \leq x_2, \quad (\text{C.8})$$

en la base de los $\Phi_m(x)$. Para ello, multiplicamos (C.8) por ambos lados por $\Phi_{m'}^*(x)$ y después integramos en la región interna, tal que

$$\sum_m H_{m'm} C_m^\lambda = E_\lambda C_{m'}^\lambda, \quad (\text{C.9})$$

donde

$$H_{m'm} = \int_{int} \Phi_{m'}^*(x) H \Phi_m(x) dx = \frac{\hbar^2 k_m^2}{2\mu} \delta_{m'm} + \int_{int} \Phi_{m'}^*(x) V(x) \Phi_m(x) dx. \quad (\text{C.10})$$

El problema, es entonces, encontrar los eigenvalores y eigenvectores de reacción de la matriz $H_{mm'}$ para un potencial cualesquiera. Para una barrera/pozo de potencial plana, la ecuación (C.10) se reduce a

$$H_{m'm} = \frac{\hbar^2 k_m^2}{2\mu} \delta_{m'm} + V_0 \int_{int} \Phi_{m'}^*(x) \Phi_m(x) dx = \left(\frac{\hbar^2 k_m^2}{2\mu} + V_0 \right) \delta_{m'm}. \quad (\text{C.11})$$

Para el caso de un canal $k_m = \frac{(m-1/2)\pi}{x_2}$ y por consiguiente

$$H_{m'm} = \left[\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{(m-1/2)\pi}{x_2} \right)^2 + V_0 \right] \delta_{m'm} = E_m \delta_{m'm}. \quad (\text{C.12})$$

Para el sistema de dos canales $k_m = \frac{(m-1)\pi}{x_D - x_I}$, con lo que

$$H_{m'm} = \left[\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{(m-1)\pi}{d} \right)^2 + V_0 \right] \delta_{m'm}. \quad (\text{C.13})$$

Además $\Psi_\lambda(x)$ se reduce a la forma de la base

$$\Psi_\lambda(x) = \sum_m C_m^\lambda \Phi_m(x) = \sum_m \delta_{m\lambda} \Phi_m(x) = \Phi_\lambda(x). \quad (\text{C.14})$$

Apéndice D

$A_\lambda(E)$ en forma matricial

En este apéndice primero obtenemos $A_\lambda(E)$ en términos de la matriz de dispersión $S(E)$.

Posteriormente deducimos su forma explícita en términos de los elementos de la matriz $R(E)$.

Recordemos que $A_\lambda(E)$ esta dada como

$$A_\lambda(E) = \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\Psi_\lambda^*(x_D)\psi'(x_D; E) - \Psi_\lambda^*(x_I)\psi'(x_I; E)}{E_\lambda - E}, \quad (\text{D.1})$$

Por continuidad ($\partial_x\psi(E, x_D) = \partial_x\psi_D(E, x_D)$ y $\partial_x\psi(E, x_I) = \partial_x\psi_I(E, x_I)$), obtenemos^a.

$$\partial_x\psi(E, x_D) = -ik(\alpha_D e^{-ikx_D} - \beta_D e^{ikx_D}), \quad (\text{D.2a})$$

$$\partial_x\psi(E, x_I) = ik(\alpha_I e^{ikx_I} - \beta_I e^{-ikx_I}). \quad (\text{D.2b})$$

Sustituimos la ec. (D.2) en la ec. (D.1), obtenemos

$$\begin{aligned} A_\lambda(E) &= -\frac{ik\hbar^2}{2\mu} \frac{\Psi_\lambda^*(x_D)(\alpha_D e^{-ikx_D} - \beta_D e^{ikx_D}) + \Psi_\lambda^*(x_I)(\alpha_I e^{ikx_I} - \beta_I e^{-ikx_I})}{E_\lambda - E} \\ &= -\frac{ik\hbar^2}{2\mu} \frac{(-\beta_D e^{ikx_D} \Psi_\lambda^*(x_D) - \beta_I e^{-ikx_I} \Psi_\lambda^*(x_I)) + (\alpha_D e^{-ikx_D} \Psi_\lambda^*(x_D) + \alpha_I e^{ikx_I} \Psi_\lambda^*(x_I))}{E_\lambda - E} \\ &= -\frac{ik\hbar^2}{2\mu(E_\lambda - E)} \left[(\Psi_\lambda^*(x_D) \quad \Psi_\lambda^*(x_I)) \begin{pmatrix} e^{-ikx_D} \alpha_D \\ e^{ikx_I} \alpha_I \end{pmatrix} - (\Psi_\lambda^*(x_D) \quad \Psi_\lambda^*(x_I)) \begin{pmatrix} e^{ikx_D} \beta_D \\ e^{-ikx_I} \beta_I \end{pmatrix} \right] \end{aligned} \quad (\text{D.3})$$

^aPara incidencia por la izquierda [derecha] tenemos, $(\alpha_I, \beta_I, \beta_D) \neq 0$ y, $\alpha_D = 0$ [$(\alpha_D, \beta_D, \beta_I) \neq 0$, y $\alpha_I = 0$].

Reescribiendo esta última ecuación en notación corta y usando la relación $\beta = S(E)\alpha$, obtenemos

$$\begin{aligned} A_\lambda(E) &= -\frac{ik\hbar^2}{2\mu(E_\lambda - E)}(\Psi_{DI}w\alpha - \Psi_{ID}w^*\beta) \\ &= -\frac{ik\hbar^2}{2\mu(E_\lambda - E)}\Psi_{DI}(w - w^*S(E))\alpha \end{aligned} \quad (D.4)$$

donde $\Psi_{DI} = (\Psi_\lambda^*(x_D) \quad \Psi_\lambda^*(x_I))$ y $w = \begin{pmatrix} e^{-ikx_D} & 0 \\ 0 & e^{ikx_I} \end{pmatrix}$. La ec. (D.4) muestra que los polos de $A_\lambda(E)$ son los mismos que los polos de la matriz de dispersión.

Ahora vamos a deducir $A_\lambda(E)$ en términos de los elementos de la matriz R . Para ello, usaremos la ecuación

$$S = -w \frac{1 - ikR}{1 + ikR} w,$$

con lo cual, la ec. (D.4) la podemos escribir como

$$A_\lambda(E) = -\frac{ik\hbar^2}{2\mu(E_\lambda - E)}\Psi_{DI} \left[1 + \frac{1 + ikR}{1 - ikR} \right] w\alpha, \quad (D.5a)$$

$$= -\frac{ik\hbar^2}{2\mu(E_\lambda - E)}\Psi_{DI} \frac{2}{1 - ikR} w\alpha. \quad (D.5b)$$

Cos esto, la función de onda dispersada, en términos de la matriz S y R , toma la forma siguiente

$$\begin{aligned} \psi(E; x) &= -\sum_\lambda \frac{ik\hbar^2}{2\mu(E_\lambda - E)} [\Psi_{DI}(w - w^*S)\alpha] \Psi_\lambda(x), \\ &= -\sum_\lambda \frac{ik\hbar^2}{2\mu(E_\lambda - E)} [\Psi_{DI} \frac{2}{1 - ikR} w\alpha] \Psi_\lambda(x). \end{aligned} \quad (D.6)$$

Note que la función de onda dispersada también tiene los mismos polos que los de la matriz S .

Por otra parte, usando $(1 - ikR)^{-1} = [\Omega^-(E)]^{-1}(1 - ikR)^{Adj}$ en la ec. (D.5b), obtenemos

$$A_\lambda(E) = -\frac{2ik\hbar^2}{2\mu(E_\lambda - E)} \frac{1}{\Omega^-(E)} \Psi_{DI} \begin{pmatrix} 1 - ikR_{II} & ikR_{DI} \\ ikR_{ID} & 1 - ikR_{DD} \end{pmatrix} w\alpha. \quad (D.7)$$

Desarrollando, obtenemos

$$A_\lambda(E) = C(E)\Psi_{DI} \begin{pmatrix} e^{-ikx_D}(1 - ikR_{II})\alpha_D + e^{ikx_I}ikR_{DI}\alpha_I \\ e^{-ikx_D}ikR_{ID}\alpha_D + e^{ikx_I}(1 - ikR_{DD})\alpha_I \end{pmatrix}, \quad (\text{D.8})$$

donde hemos definido $C(E) = -\frac{2ik\hbar^2}{2\mu(E_\lambda - E)}[\Omega^-(E)]^{-1}$. Por ejemplo, para una onda que incide por la derecha ($\alpha_D \equiv 1$ y $\alpha_I \equiv 0$), tenemos

$$A_\lambda(E) = -\frac{2ik\hbar^2 e^{-ikx_D}}{2\mu(E_\lambda - E)} \frac{\Psi_\lambda^*(x_D)(1 - ikR_{II}) + \Psi_\lambda^*(x_I)ikR_{ID}}{\Omega^-(E)}. \quad (\text{D.9})$$

Apéndice E

Método de la Matriz de Transferencia

En este Apéndice encontramos el coeficiente de transmisión usando el método de la matriz de transferencia (MMT) para un sistema dispersivo. Posteriormente discutiremos las propiedades esta matriz bajo la simetría inverso-temporal y conservación de corriente. Finalmente, mostramos la relación que existe entre la matriz de transferencia (M) con la matriz de dispersión $S(E)$.

El MMT ha mostrado su utilidad en sistemas periódicos para obtener resultados analíticos del coeficiente de transmisión [27]. También para describir hetroestructuras o secuencias de barreras/pozos en sistemas unidimensionales, tales como el de modelo de Kroning-Penny de *tamaño finito* para barreras/pozos cuadrados, en heteroestructuras fotónicas [5] y en potenciales del tipo PT (para uno y dos barreras/pozos) [66].

Sí el sistema no es periódico o el potencial tiene un perfil *más general* como el de la Fig. E.1, por ejemplo, entonces se vuelve un problema algebraicamente difícil de manejar y es imposible encontrar expresiones analíticas para las CD. En estos casos, lo que se hace es dividir el potencial en pequeños rectángulos con alturas $V_j \equiv V(x_j)$ (sin pérdida de generalidad, aquí aproximamos el potencial $V(x)$ por la derecha, es decir $V(x) \leq \sum_j V_j$). Por otro lado, sobre el intervalo $(x_j, x_{j+1}]$ la j -ésima función de onda estará dada como

$$\phi_j(E; x) = a_j^+ e^{iq_j x} + a_j^- e^{-iq_j x}, \quad x_j < x \leq x_{j+1}, \quad (\text{E.1})$$

donde $\hbar q_j = \sqrt{2\mu(E - V_j)}$, $\hbar q_0 = \hbar q_n \equiv \sqrt{2\mu E}$.

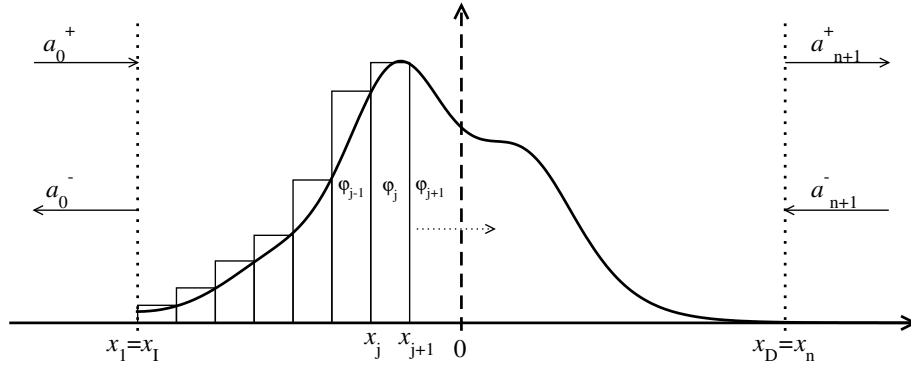


Figura E.1: Aproximación del potencial $V(x)$ por medio de rectángulos (o pozos, según sea el caso) de alturas $V_j \equiv V(x_j)$. Aquí, a_0^+ (a_{n+1}^-) es la amplitud de la onda entrante que viaja de izquierda (derecha) a derecha (izquierda) y a_{n+1}^+ (a_0^-) es la amplitud de la onda saliente que viaja de izquierda (derecha) a derecha (izquierda).

Por definición, la matriz de transferencia conecta las amplitudes a_n^\pm con las amplitudes a_0^\pm como [5, 27]:

$$a_n^\pm = M a_0^\pm, \quad (\text{E.2})$$

donde, a_0^+ (a_{n+1}^-) es la amplitud de la onda entrante que viaja de izquierda (derecha) a derecha (izquierda) y a_{n+1}^+ (a_0^-) es la amplitud de la onda saliente que viaja de izquierda (derecha) a derecha (izquierda).

Para encontrar los elementos de $M^{(j)}$ demandamos continuidad entre la j -ésima función de onda y la $(j+1)$ -ésima función de onda en la interface x_j :

$$[\phi_j(E; x) - \phi_{j+1}(E; x)]_{x=x_j} = 0, \quad (\text{E.3})$$

$$[\partial_x \phi_j(E; x) - \partial_x \phi_{j+1}(E; x)]_{x=x_j} = 0. \quad (\text{E.4})$$

Usando la ec. (E.1) (con el subíndice correspondiente), obtenemos

$$\begin{pmatrix} a_{j+1}^+ \\ a_{j+1}^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{iq_{j+1}x_j} & e^{-iq_{j+1}x_j} \\ e^{iq_{j+1}x_j} & -e^{-iq_{j+1}x_j} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} e^{iq_j x_j} & e^{-iq_j x_j} \\ \frac{q_j}{q_{j+1}} e^{iq_j x_j} & -\frac{q_j}{q_{j+1}} e^{-iq_j x_j} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_j^+ \\ a_j^- \end{pmatrix} = M^{(j)} \begin{pmatrix} a_j^+ \\ a_j^- \end{pmatrix},$$

donde los elementos de la j -ésima matriz están dados como

$$M_{11}^{*(j)} = M_{22}^{(j)} = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{q_j}{q_{j+1}} \right) e^{-i(q_j - q_{j+1})x_j} \quad (\text{E.5})$$

$$M_{12}^{*(j)} = M_{21}^{(j)} = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{q_j}{q_{j+1}} \right) e^{i(q_j + q_{j+1})x_j}. \quad (\text{E.6})$$

Después de conectar todos los rectángulos, la ec. (E.2) toma la forma siguiente

$$\begin{pmatrix} a_{n+1}^+ \\ a_{n+1}^- \end{pmatrix} = \prod_{j=1}^n M^{(n-j+1)} \begin{pmatrix} a_0^+ \\ a_0^- \end{pmatrix}, \quad (\text{E.7})$$

donde $M^{(j)}$ denota a la j -ésima matriz de transferencia y el producto en esta última ecuación representa a la matriz de transferencia total: $M = M^{(n)} M^{(n-1)} M^{(n-2)} \dots M^{(2)} M^{(1)} = \prod_{j=1}^n M^{(n-j+1)}$. El coeficiente de transmisión está dado como $T(E) = |M_{22}|^{-2}$.

Propiedades de M y su relación con S

Bajo conservación de corriente, la matriz M satisface las siguientes propiedades [5, 27]:

$$|M_{11}|^2 - |M_{12}|^2 = 1, \quad |M_{22}|^2 - |M_{21}|^2 = 1, \quad (\text{E.8})$$

$$M_{11}^* M_{12} = M_{21}^* M_{22}. \quad (\text{E.9})$$

Si el sistema tiene la propiedad de ser invariante bajo simetría inverso-temporal, entonces, los elementos de la matriz de transferencia satisfacen:

$$M_{22} = M_{11}^*, \quad (\text{E.10})$$

$$M_{21} = M_{12}^*, \quad (\text{E.11})$$

por consiguiente, la matriz M se puede reescribir como:

$$M = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{12}^* & M_{11}^* \end{pmatrix}, \quad (\text{E.12})$$

y por lo tanto cumple con $\det M = 1$.

La ventaja de trabajar con esta descripción matricial es que podemos relacionar los elementos de las matrices de dispersión S con los de la matriz de transferencia M como:

$$\begin{aligned} S_{11} &= -M_{22}^{-1}M_{21}; & S_{12} &= M_{22}^{-1}, \\ S_{21} &= (M_{11}^*)^{-1}; & S_{22} &= M_{12}M_{22}^{-1}. \end{aligned} \tag{E.13}$$

Apéndice F

Punto fijo y análisis de estabilidad

F.1. Modelo de un nivel

El hamiltoniano efectivo para el modelo de $N = 1$ es

$$\mathcal{H}(E) = E_\lambda - ik\mathcal{V}_{\lambda\lambda} = E_\lambda - ik(|\Psi_\lambda(x_D)|^2 + |\Psi_\lambda(x_I)|^2), \quad (\text{F.1})$$

que es la que usualmente se usa para describir los sistemas dispersivos en la aproximación de un nivel en términos de los polos de S . Haciendo la extensión analítica ($E \rightarrow z$) y resolviendo $\det[\mathcal{H}(z) - z] = 0$, obtenemos

$$0 = \det[\mathcal{H}(z) - z] = E_\lambda - ik\mathcal{V}_{\lambda\lambda} - z \Rightarrow z = E_\lambda - ik\mathcal{V}_{\lambda\lambda}, \quad (\text{F.2})$$

cuya solución explícita esta dada como (recordemos que $k^2 = z$ y por consiguiente (F.2) se puede escribir como $z - E_\lambda = -ik\mathcal{V}_{\lambda\lambda}$ y tomando el cuadrado por ambos lados, obtenemos $z^2 - z(2E_\lambda - \mathcal{V}_{\lambda\lambda}^2) + E_\lambda^2 = 0$)

$$z_\lambda = \omega_\lambda \pm i\Gamma_\lambda = \frac{2E_\lambda - \mathcal{V}_{\lambda\lambda}^2 \pm i\mathcal{V}_{\lambda\lambda}\sqrt{4E_\lambda - \mathcal{V}_{\lambda\lambda}^2}}{2}. \quad (\text{F.3})$$

Siempre hemos de elegir el signo negativo en la parte imaginaria como solución físicamente aceptable, ya que estamos interesados en las resonancias y éstas están definidas en la segunda rama del plano complejo cuya parte real debe ser mayor que cero (ver Sec. 3.3).

De (F.3) obtenemos las siguientes condiciones:

$$\begin{cases} 4E_\lambda - \mathcal{V}_{\lambda\lambda}^2 \geq 0, & z_\lambda \text{ es una resonancia de dispersión,} \\ 4E_\lambda - \mathcal{V}_{\lambda\lambda}^2 < 0, & z_\lambda \text{ es un estado acotado.} \end{cases} \quad (\text{F.4})$$

Estas condiciones las utilizaremos más adelante.

F.2. Modelo de dos niveles

Consideremos ahora el modelo de 2×2 , para lo cual, tenemos

$$\mathcal{H}(z) = H_{in} - ik(z)\mathcal{V} = \begin{pmatrix} E_a & 0 \\ 0 & E_b \end{pmatrix} - ik(z) \begin{pmatrix} \mathcal{V}_{aa} & \mathcal{V}_{ab} \\ \mathcal{V}_{ba} & \mathcal{V}_{bb} \end{pmatrix}, \quad (\text{F.5})$$

donde $\mathcal{V} \equiv VV^\dagger$, $a > b = a + 1$ un número entero, $\mathcal{V}_{cc} = |\Psi_c(x_D)|^2 + |\Psi_c(x_I)|^2$ ($c = a, b$) y $\mathcal{V}_{ab} = \Psi_a(x_D)\Psi_b(x_D) + \Psi_b(x_I)\Psi_a(x_I) = \mathcal{V}_{ba}$. Los eigenvalores de (F.5) los podemos obtener de dos formas matemáticamente diferentes, la primera es diagonalizar la matriz (F.5) usando el método de Gauss, por ejemplo. La otra opción es resolver la ecuación característica que consiste en calcular las raíces del determinante de (F.5). Aquí usaremos esta última opción. Entonces,

$$\det[\mathcal{H}(z) - z] = z^2 - z \operatorname{tr}(\mathcal{H}(z)) + \det(\mathcal{H}(z)) = [z - z^+(z)][z - z^-(z)] = 0, \quad (\text{F.6})$$

con $\operatorname{tr}(\mathcal{H}(z)) = E_+ - ik\mathcal{V}_+$, $\det(\mathcal{H}(z)) = E_a E_b - ik(\mathcal{V}_{aa}E_b + \mathcal{V}_{bb}E_a) - k^2(\mathcal{V}_{aa}\mathcal{V}_{bb} - \mathcal{V}_{ab}\mathcal{V}_{ba})$, $E_\pm = E_b \pm E_a$, $\mathcal{V}_\pm = \mathcal{V}_{bb} \pm \mathcal{V}_{aa}$ y

$$z^\pm(z) = \omega(z) \pm \frac{i\Gamma(z)}{2} = \frac{\operatorname{tr}(\mathcal{H}(z)) \pm \sqrt{\operatorname{tr}(\mathcal{H}(z))^2 - 4\det(\mathcal{H}(z))}}{2} \quad (\text{F.7a})$$

$$= \frac{E_+ - ik\mathcal{V}_+ \pm \sqrt{E_-^2 - 2ik\mathcal{V}_- E_- - k^2(\mathcal{V}_-^2 + 4\mathcal{V}_{ba}\mathcal{V}_{ab})}}{2}. \quad (\text{F.7b})$$

Note que la primera igualdad de (F.6) no es propiamente una ecuación cuadrática, sin embargo, siempre es posible factorizarla como si ésta si lo fuera (con coeficientes no constantes) y escribirla como aparece en la

segunda igualdad de (F.6)^a.

Recordemos que las simetrías son parte importante en los sistemas físicos y éstas nos permiten simplificar mucho nuestras ecuaciones. Por consiguiente, si nosotros consideramos potenciales con simetría par, entonces tendremos que los eigenestados cumplen con $\Psi_a(x_D) = (-)^a \Psi_a(x_I)$ (paridad definida) y por lo tanto, los términos fuera de la diagonal de la matriz (F.5) son iguales a cero. Veamos:

$$\mathcal{V}_{ab} = \Psi_a(x_D)\Psi_b(x_D) + \Psi_b(x_I)\Psi_a(x_I) \quad (\text{F.8a})$$

$$= \Psi_a(x_D)\Psi_b(x_D) + (-)^{b+a}\Psi_b(x_D)\Psi_a(x_D) \quad (\text{F.8b})$$

$$= \Psi_a(x_D)\Psi_b(x_D)(1 + (-)^{2b+1}) \quad (a = b + 1) \quad (\text{F.8c})$$

$$= 0. \quad (\text{F.8d})$$

Por lo tanto, para potenciales simétricos, la matriz dada en (F.5) es obviamente diagonal y por consiguiente la ec. (F.7b) se reduce a

$$z^\pm(z) = \frac{E_+ - ik\mathcal{V}_+ \pm \sqrt{E_-^2 - 2ik\mathcal{V}_- E_- - k^2\mathcal{V}_-^2}}{2} = \frac{E_+ - ik\mathcal{V}_+ \pm (E_- - ik\mathcal{V}_-)}{2}. \quad (\text{F.9})$$

De (F.9) obtenemos ambas soluciones como (ecuaciones desacopladas, recuerde que $b = a + 1$, es un número entero)

$$z^+(z) \equiv z_b(z) = E_b - ik\mathcal{V}_{bb}, \quad (\text{F.10a})$$

$$z^-(z) \equiv z_a(z) = E_a - ik\mathcal{V}_{aa}. \quad (\text{F.10b})$$

Debido a la forma de (F.10), éstas se pueden describir en una sola, como

$$z_c(z) = z = E_c - ik\mathcal{V}_{cc}, \quad (\text{F.11})$$

^aLa demostración de la segunda igualdad de (F.6) es muy simple. Consiste en encontrar sus raíces y esto lo logramos de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} z^2 - z \operatorname{tr}(\mathcal{H}(z)) + \det(\mathcal{H}(z)) &= 0 \\ 4z^2 - 4z \operatorname{tr}(\mathcal{H}(z)) + 4 \det(\mathcal{H}(z)) &= 0 \\ [2z - \operatorname{tr}(\mathcal{H}(z))]^2 - \operatorname{tr}^2(\mathcal{H}(z)) + \det(\mathcal{H}(z)) &= 0 \\ [2z - \operatorname{tr}(\mathcal{H}(z))]^2 &= \operatorname{tr}^2(\mathcal{H}(z)) - 4 \det(\mathcal{H}(z)), \end{aligned}$$

y de esta última relación llegamos al resultado dado en la ec. (F.7b) y por consiguiente a la segunda igualdad de (F.6).

donde para $c = b[a]$ corresponde a la ec. (F.10a)[F.10b] cuya solución es de la forma dada en (F.3):

$$z_c = \omega_c \pm i\Gamma_c = \frac{2E_c - \mathcal{V}_{cc}^2 \pm i\mathcal{V}_{cc}\sqrt{4E_c - \mathcal{V}_{cc}^2}}{2}. \quad (\text{F.12})$$

F.3. Análisis de estabilidad para $N = 2$

Hemos encontrado que un sistema de $N = 1$ tiene solución exacta. Estas soluciones son similares para $N = 2$, debido a su forma diagonal. Sin embargo, esto no nos dice nada respecto a la estabilidad del punto fijo iterativo para este sistema. Es por tanto, conveniente tratar a la ec. (F.2) como un *sistema dinámico*, esto para poder encontrar alguna condición de estabilidad/inestabilidad.

Lo siguiente nos dice las condiciones para tener un punto fijo estable-inestable-centro ^b.

Sí $F(x) = Dx$, D una matriz real de $N \times N$, entonces el mapa es lineal. Sí D es diagonalizable, entonces se pueden definir sub-especies de inestabilidad, estabilidad y centros, respectivamente, dividiendo los eigenvectores de A en tres subespecies:

- $\{u_1, u_2, \dots, u_{N_u}\}$ tal que $|\lambda_i| > 1$,
- $\{v_1, v_2, \dots, v_{N_s}\}$ tal que $|\lambda_i| < 1$,
- $\{w_1, w_2, \dots, w_{N_c}\}$ tal que $|\lambda_i| = 1$,

con $N_u + N_s + N_c = N$.

No haremos el estudio de la estabilidad en el caso de $N = 1$ ya tenemos ecuaciones similares para el modelo de $N = 2$ diagonal, entonces, nos vamos al modelo de $N = 2$ cuyas condiciones de estabilidad serán validas para el caso de $N = 1$. A continuación haremos la linearización de (F.11) y mostremos que el absoluto de los eigenvalores de la matriz Jacobiana son siempre menores que uno (por notación tomaremos z teniendo en mente que la matriz Jacobiana está evaluada en el polo z_n). Note que $\sqrt{z} = \alpha(x, y) - i\beta(x, y)$ con $\alpha(x, y) = \sqrt{\frac{x}{2} + \frac{|z|}{2}}$ y $\beta(x, y) = \sqrt{-\frac{x}{2} + \frac{|z|}{2}}$. Separando la parte real de la imaginaria de (F.11), obtenemos

$$z_c = E_c - i\mathcal{V}_{cc}(\alpha - i\beta) = E_c - i\mathcal{V}_{cc}\beta - i\mathcal{V}_{cc}\alpha, \quad (\text{F.13})$$

^bA Survey of Nonlinear Dynamics, R. L. Ingraham (1991)

igualando (F.13) a z (solución para un punto fijo) obtenemos:

$$z = x - iy = E_c - i\mathcal{V}_{cc}\beta - \mathcal{V}_{cc}\alpha, \quad (\text{F.14})$$

por consiguiente,

$$f(x, y) = E_c - \mathcal{V}_{cc}\beta, \quad \wedge \quad g(x, y) = \mathcal{V}_{cc}\alpha.$$

Linealizando, tenemos

$$x_{j+1} = E_c - \mathcal{V}_{cc}\beta(x_j, y_j), \quad y_{j+1} = \mathcal{V}_{cc}\alpha(x_j, y_j).$$

La matriz:

$$D = \begin{pmatrix} \frac{\partial \beta(x, y)}{\partial x} & \frac{\partial \beta(x, y)}{\partial y} \\ \frac{\partial \alpha(x, y)}{\partial x} & \frac{\partial \alpha(x, y)}{\partial y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\mathcal{V}_{cc}}{4\beta} \left(1 - \frac{x}{|z|}\right) & -\frac{\mathcal{V}_{cc}}{4\beta} \frac{y}{|z|} \\ \frac{\mathcal{V}_{cc}}{4\alpha} \left(1 + \frac{x}{|z|}\right) & \frac{\mathcal{V}_{cc}}{4\alpha} \frac{y}{|z|} \end{pmatrix}.$$

Después de resolver la ecuación característica para diagonalizar D obtenemos sus eigenvalores:

$$\mathcal{D}_+ = \mathcal{D}_-^* = -\frac{i\mathcal{V}_{cc}}{2|z|}(\alpha - i\beta). \quad (\text{F.15})$$

Tomando el absoluto de (F.15), obtenemos

$$|\mathcal{D}_+| = |\mathcal{D}_-^*| \equiv |\mathcal{D}| = \frac{\mathcal{V}_{cc}}{2\sqrt{|z|}}. \quad (\text{F.16})$$

Recordemos que z denota ya el polo de \mathcal{H} dado en (F.12) y entonces $\sqrt{|z|} = \sqrt{E_c}$ por consiguiente (F.16) toma la forma

$$|\mathcal{D}| = \frac{\mathcal{V}_{cc}}{2\sqrt{E_c}} = \frac{1}{2\sqrt{E_c}/\mathcal{V}_{cc}^2} < 1. \quad (\text{F.17})$$

Para llegar a este último resultado hemos usado la condición dada en (F.4) para un polo de resonancia. Entonces, en los sistemas de 2×2 siempre habrá convergencia en el punto fijo (para potenciales pares). Para el caso de una matriz llena (sistema de un canal o en el de dos canales con potencial sin simetría) no hemos podido hacer el análisis de estabilidad debido a que la ec. (F.7b) se torna complicada al momento de hacer la separación en su parte real e imaginaria, esto debido al factor k que se encuentra en su radical.

Apéndice G

Propiedades de la matriz de dispersión

En este Apéndice revisaremos las propiedades de la matriz $S(E)$ (ver, por ejemplo el Cap. 2 de [5] y el Cap. 1 de [27] para una mejor referencia) y obtenemos sus eigenfases. Posteriormente, mostraremos que la fase del coeficiente de la transmisión coincide con la fase de $S(E)$.

La matriz de dispersión cumple las siguientes propiedades:

- (a) Cuando el sistema dispersivo conserva corriente, entonces la matriz de dispersión es unitaria: $S(E)S^\dagger(E) = S^\dagger(E)S(E) = 1$. Con esto, sus elementos cumplen con

$$|S_{11}|^2 + |S_{21}|^2 = 1; \quad |S_{22}|^2 + |S_{12}|^2 = 1; \quad |S_{21}| = |S_{12}|.$$

- (b) Sí el potencial dispersivo es hermítico, entonces, el sistema tiene la propiedad de ser invariante bajo simetría inverso-temporal y consecuentemente, $S(E)$ es simétrica ($S(E) = S(E)^\top$), entonces:

$$S_{21} = S_{12}.$$

- (c) Sí el potencia del sistema dispersivo es par, i.e., $V(x) = V(-x)$, entonces $S_{11} = S_{22}$.

La primera condición implica que las eigenfases de $S(E)$ están distribuidos sobre un círculo unitario. Por lo tanto, éstas se pueden escribir como $e^{2i\xi_j}$, con ξ_j real. Para el caso particular de un sistema uni-dimensional (de dos canales), la fase de $S(E)$ se define convencionalmente como $\det S(E) = e^{2i\theta}$, con θ real.

Para obtener las eigenfases de $S(E)$, escribimos la matriz de dispersión en forma polar [5, 48, 49]:

$$S(E) = e^{i\theta} \begin{pmatrix} e^{i\psi_1} \sin(\psi) & ie^{i\psi_2} \cos(\psi) \\ ie^{-i\psi_2} \cos(\psi) & e^{-i\psi_1} \sin(\psi) \end{pmatrix}, \quad (\text{G.1})$$

cumpliendo con $\det S = e^{i2\theta}$. Aquí $\psi_{1,2}$ y ψ son fases reales. Entonces, resolviendo la ecuación característica $\det(S - \lambda) = 0$, obtenemos las eigenfases, dadas como

$$\lambda_{\pm} = e^{i\theta} \left(i \sin(\psi) \cos(\psi_1) \pm \sqrt{1 - \sin^2(\psi) \cos^2(\psi_1)} \right) \quad (\text{G.2})$$

Notemos que $|\lambda_{\pm}| = 1$ de (G.2). Por lo tanto, podemos escribir las eigenfases como $\lambda_{\pm} \equiv e^{2i\xi_{\pm}}$. Sumando las eigenfases dadas en la ec. (G.2) obtenemos

$$e^{i(2\xi_+ - \theta)} + e^{i(2\xi_- - \theta)} = 2i \sin(\psi) \cos(\psi_1), \quad (\text{G.3})$$

es decir, la parte real de (G.3) debe ser cero: $\cos(2\xi_+ - \theta) + \cos(2\xi_- - \theta) = 0$. Para que esta igualdad se cumpla, entonces $2\xi_+ - \theta = \pi - (2\xi_- - \theta)$, y por consiguiente, llegamos a

$$2\xi_+ + 2\xi_- = 2\theta + \pi, \quad \Rightarrow \quad \xi_+ + \xi_- = \theta + \frac{\pi}{2}. \quad (\text{G.4})$$

La suma de las eigenfases (ξ_{\pm}) de $S(E)$ dada en (G.4) es conocida en la literatura como la *fase de Friedel* [48–50]. Aplicando la propiedad (b) de $S(E)$ en (G.1), vemos que $\psi_2 = 0$ ó π . Por otro lado, escribiendo el coeficiente de la transmisión en términos de su modulo y de su fase como $t(E) = |t(E)|e^{i\theta^{(t)}}$ e igualando con $S_{12} = S_{21}$ de (G.1), obtenemos

$$ie^{i\theta} \cos(\psi) = e^{i(\theta + \pi/2)} \cos(\psi) = |t(E)|e^{i\theta^{(t)}} \quad (\text{G.5})$$

Igualando parte real e imaginaria en la ec. (G.5) y posteriormente tomar la razón de sus resultados, obtenemos

$$\theta^{(t)} = \theta + \frac{\pi}{2} = \xi_+ + \xi_-, \quad (\text{G.6})$$

es decir, basta con conocer la fase del coeficiente de transmisión para obtener las eigenfases de $S(E)$.

Bibliografía

- [1] C. W. J. Beenakker, *Rev. Mod. Phys.* **69**, 731 (1997).
- [2] Y. Alhassid, *Rev. Mod. Phys.* **72**, 895 (2000).
- [3] Kevin J. Savage, Matthew M. Hawkeye, Rubèn Esteban, Andrei G. Borisov, Javier Aizpurua y Jeremy J. Baumberg, *Nature* **491**, 574 (2012).
- [4] Dalcio K. Dacol y Dilip G. Roy, *Journal of Mathematical Physics* **44**, 2133 (2003).
- [5] Pier A. Mello y Narendra Kumar, eds., *Quantum Transport in Mesoscopic Systems: Complexity and Statistical Fluctuation*, OXFORD University Press, OXFORD (2004).
- [6] G. Báez, M. Cobián-Suárez, A. M. Martínez-Argüello, M. Martínez-Mares y R. A. Méndez-Sánchez, *Acta Physica Polonica A* **124**, 1069 (2013).
- [7] A. M. Martínez-Argüello, R. A. Méndez-Sánchez y M. Martínez-Mares, *Acta Physica Polonica A* **124**, 1069 (2013).
- [8] H. J. Stöckmann, *Quantum Chaos: an introduction*, Cambridge, (2000).
- [9] H.-J. Stöckmann, E. Persson, Y.-H. Kim, M. Barth, U. Kuhl e I. Rotter, *Phys. Rev. E* **65** 066211 (2002).
- [10] J. Stein y H.-J. Stöckmann, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 2867 (1992).
- [11] B. A. van Tiggelen y A. Tip, *J. Phys. I (Fr.)* **1**, 1145 (1991).
- [12] P. Sheng, *Introduction to Wave Scattering, Localization, and Mesoscopic Phenomena*, Academic Press, San Diego, (1995).

-
- [13] G. L. J. A. Rikken y B. A. van Tiggelen, *Nature (London)* **381**, 54 (1996).
- [14] R. Sapienza, P. Costantino, D. Wiersma, M. Ghulinyan, C. J. Oton y L. Pavesi, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 263902 (2003).
- [15] F. Scheffold y G. Maret, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 5800 (1998).
- [16] G. Raschke, S. Kowarik, T. Franzl, C. Sönnichsen, T. A. Klar y J. Feldmann, *Nano Lett.*, bf 3, 935 (2003).
- [17] A. A. Fernández-Marín, J. A. Méndez-Bermúdez y Victor A. Gopar, *Phys. Rev. A* **85**, 035803 (2012).
- [18] Daniel Torrent y José Sánchez-Dehesa, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 17430-1 (2012).
- [19] Daniel Torrent y J. Sánchez-Dehesa, *Phys. Rev. B*, **87**, 115143 (2013).
- [20] V. M. García-Chocano, S. Cabrera y J. Sánchez-Dehesa. *Appl. Phys. Lett.*, **101**, 184101 (2012).
- [21] J. Carbonell, A. Díaz-Rubio, D. Torrent, F. Cervera, M. A. Kirleis, A. Piqué y J. Sánchez-Dehesa, *Nature Sci. Rep.*, **2**, 558 (2012).
- [22] John A. Wheeler, *Phys. Rev.* **17**, 1107 (1937).
- [23] R. G. Newton, *Scattering Theory of Waves and Particles*, McGraw-Hill Inc. (1966)
- [24] J. J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*. Edición revisada, Addison Wesley, New York (1994)
- [25] Siegfried Flügge, *Practical Quantum Mechanics, Segunda reimpression*, **Springer**, (1994).
- [26] L. D. Landau y E. M. Lifshitz, eds., *Quantum Mechanics, Non-Relativistic Theory, Tercera edición* PERGAMON PRESS, OXFORD-NEW YORK, (1977).
- [27] P. Markos y C. M. Soukoulis, *Wave Propagation. From Electrostatics to Photonic Crystals and Left-Handed Materials*, (Princeton, New Jersey, 2008).
- [28] William Gilbert Strang y George J. Fix, *An Analysis of the Finite Elements Method* **Prentice Halls**, (1973).
- [29] H. Feshbach, *Ann. Phys.* **5**, 357 (1958).

- [30] H. Feshbach, *Ann. Phys.* **19**, 287 (1962).
- [31] H. Feshbach, *Rev. Mod. Phys.* **36**, 1076 (1964).
- [32] A. Messiah, *Quantum Mechanics*, Vol. 1, John Wiley and Sons, New York (1962)
- [33] E. P. Wigner, *Phys. Rev.* **70**, 15 (1946).
- [34] E. P. Wigner, *Phys. Rev.* **70**, 606 (1946).
- [35] E. P. Wigner y L. Eisenbud, *Phys. Rev.* **72**, 29 (1947).
- [36] A. M. Lane y R. G. Thomas, *Rev. Modern Phys.* **30**, 257 (1958).
- [37] Linda E. Reichl, *The Transition to Chaos, Conservative Classical Systems and Quantum Manifestations, Segunda edición*, Springer, (2004).
- [38] P. Descouvemont y D. Baye, *Rep. Prog. Phys.* **73**, 036301 (2010).
- [39] P. L. Kapur y R. Peierls, *Proc. Roy. Soc. London A* **166**, 227 (1938).
- [40] L. E. Reichl y Gursoy B. Akguc, *Foundations of Physics.* **31**, No. 2 (2001).
- [41] E. Onac, J. Kučera y U. Wulf, *Phys. Rev. B* **63**, 085319 (2001).
- [42] U. Wulf, J. Kučera, P. N. Racec y E. Sigmund, *Phys. Rev. B* **58**, 16209 (1998).
- [43] Gursoy B. Akguc y Thomas H. Seligman, *Phys. Rev. B* **74**, 245317-1 (2006).
- [44] Holger Schanz, *Physica E.* **18**, 429 (2003).
- [45] C. Bloch, *Nucl. Phys.* **4**, 503 (1957).
- [46] I.S. Gradshteyn y I.M. Ryzhik, *Table of Integrals, Series, and Products*, Séptima Edición, ELSEVIER, (2007).
- [47] Philip McCord Morse y Herman Feshbach, *Methods of Theoretical Physics*, Volumen 1 y 2, McGraw-Hill Science, (1953).
- [48] H. W. Lee, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 2358 (1999).

-
- [49] A. Levy Yeyati y M. Büttiker, *Phys. Rev. B* **62**, 7307 (2000).
- [50] Tooru Taniguchi y Markus Büttiker, *Phys. Rev. B* **60**, 13814 (1999)
- [51] Oleh Hul, Oleg Tymoshchuk, Szymon Bauch, Peter M. Koch y Leszek Sirko, *J. Phys. A: Math. Gen.* **38** 10489 (2005).
- [52] Michal Lawniczak, Oleh Hul, Szymon Bauch, Petr Seba y Leszek Sirko, *Phys. Rev. E* **77**, 056210 (2008).
- [53] G. Akguc y L. E. Reichl, *Phys. Rev. E* **64**, 056221 (2001).
- [54] Robert M. Young, *An introduction to nonharmonic Fourier series*, Primera edición revisada, ACADEMIC PRESS, (2001).
- [55] Dunham Jackson, *Transactions of the American Mathematical Society*, Vol. **15**, No. 4, pp. 439-466, (1914).
- [56] J. Verbaarschot, H. A. Weidenmüller y M. R. Zirnbauer, *Phys. Rep.* **129**, 367 (1985).
- [57] J. Okolowicz, M. Płoszajczak e I. Rotter, *Phys. Rep.* **374**, 271 (2003).
- [58] Y. V. Fyodorov y H. J. Sommers, *J. Math. Phys.* **38**, 1918 (1997); *J. Phys. A* **36**, 3303 (2003).
- [59] Suren Sorathia, Tesis doctoral, IF-UAP, (2010) (no publicado).
- [60] L. E. Eisenbud, Ph.D thesis, Princeton University, (1948) no publicado. E. P. Wigner, *Phys. Rev.* **98**, 145 (1955).
- [61] Felix. T. Smith, *Phys. Rev.* **118**, 349 (1960).
- [62] H. M. Nussenzvieg, *Causality and Dispersion Relations*, ACADEMICPRESS, New York and London (1972).
- [63] P. W. Brouwer, K. M. Frahm y C. W. J. Beenakker, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 4737 (1997).
- [64] H. M. Nussenzvieg, *Nucl. Phys.* **11**, 499 (1959).
- [65] M. E. Ebel, *J. Math. Phys.* **3**, 68 (1962).

- [66] J. M. Cerveró y A. Rodríguez, Phys. Rev. A **70**, 052705 (2004); Alberto Rodríguez González, Tesis doctoral, Universidad de Salamanca, (2005).
- [67] R. Kronig y W. G. Penney, Proc. R. Soc. A **130**, 499 (1931).
- [68] Shachar Klaiman y Nimrod Moiseyev, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **43**, 185205 (2010).
- [69] G. A. Luna-Acosta, F. M. Izrailev, N. M. Makarov, U. Kuhl y H.-J. Stöckmann, Phys. Rev. B **80**, 115112 (2009)
- [70] Eleftherios N. Economou, *Green's Functions in Quantum Physics, Tercera Edición*, Springer Berlin Heidelberg, New York, (2006)
- [71] B. Solís, M.L. Ladrón de Guevara, P.A. Orellana, Physics Letters A **372** 4736 (2008).
- [72] G. Breit y E. P. Wigner, Phys. Rev. **49**, 519 (1936); Phys. Rev. **49**, 642 (1936).
- [73] Franz Schwabl, *Quantum Mechanics, Cuarta Edición*, Springer Berlin Heidelberg New York, (2007).
- [74] I. Rotter, Rep. Prog. Phys. **54**, 635 (1991); J. Phys. A **42**, 153001 (2009).
- [75] F. M. Dittes, Phys. Rep. **339**, 216 (2000).
- [76] H. V. Henderson y S. R. Searle, SIAM **23**, 53 (1981).
- [77] R. Horn, Ch. R. Johnson, *Matrix Analysis*, Cambridge University Press. New York, (1985).
- [78] E. Anderson, Z. Bai, C. Bischof, S. Blackford, J. Demmel, J. Dongarra, J. Du Croz, A. Greenbaum, S. Hammarling, A. McKenney, LAPACK Users' Guide: *Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, PA*, (1999), Tercera Edición (<http://www.netlib.org/lapack/lug/>).
- [79] M. Galassi, GNU *Scientific Library Reference Manual, (Network Theory Ltd.)*, Segunda Edición (2003).
- [80] W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky, y W. T. Vetterlin, *Numerical Recipes in C*, Cambridge University Press, (1988).
- [81] I. Rotter, Phys. Rev. E **64**, 036213 (2001).

-
- [82] I. Rotter, Phys. Rev. C **64**, 034301 (2001).
- [83] Alexander Volya y Vladimir Zelevinsky, Phys. Rev. C **67**, 054322 (2003).
- [84] Res Jost y Walter Kohn, Phys. Rev. **87**, 977 (1952).
- [85] Res Jost y Walter Kohn, Phys. Rev. **88**, 382 (1952).
- [86] K. Chadan y P. C. Sabatier, *Inverse Problems in Quantum Scattering Theory* (Segunda Edición), Springer, New York, (1989).
- [87] Konstantin Pichugin, Holger Schanz y Petr Seba, Phys. Rev. E **64**, 056227 (2001).
- [88] D. V. Savin, V. V. Sokolov y H. J. Sommers, Phys. Rev. E **67**, 026215 (2003).
- [89] Y. E. Kim y Alexander L. Zubarev J. Phys. A: Math. Gen. **31**, 6483 (1998).
- [90] Hoshik Lee y L. E. Reichl, J. Phys. A: Math. Theor. **43**, 405303 (2010).
- [91] J. Goldstone y R. L. Jaffe, Phys. Rev. B **45**, 14100 (1992).
- [92] R. F. Barrett, L. C. Biedenharn, M. Danos, P. P. Delsanto, W. Greiner y G. Wahsweiler, Rev. Mod. Phys. **45** 44 (1973).
- [93] M. E. Haglund y D. Robson, Phys. Lett. **14**, 225 (1965).
- [94] Nimrod Moiseyev y Romanas Narevich, International Journal of Theoretical Physics **42**, 2131 (2003).
- [95] G. Akguc y L. E. Reichl, Phys. Rev. E **67**, 046202 (2003).
- [96] D. Felbacq, "Finding resonance poles by means of cauchy integrals", Proc. 13th Int. Conf. Transparent Optical Networks, (2011), paper We.B4.2.
- [97] P. Kravanja y M.V. Barel, *Computing the Zeros of Analytic Functions Series: Lecture Notes in Mathematics*, **1727**, Springer-Verlag, Berlin, 2000.
- [98] E. Centeno y D. Felbacq, Phys. Rev. B **62**, 10101 (2000).
- [99] D. Felbacq, Phys. Rev. E **64**, 047702 (2004).
- [100] Dmitry A. Bykov y Leonid L. Doskolovich, J. Lightwave Technology **31**, 793 (2013).

- [101] G. A. Luna-Acosta, K. Na, L. E. Reichl y A. Krokhin, *Phys. Rev. E* **53**, 3271 (1996).
- [102] G. A. Luna-Acosta, J. J. Reyes-Salgado y J. A. Méndez-Bermúdez, *Microelectron. J.* **39**, 1388 (2008).
- [103] W. D. Sheng y J. B. Xia, *J. Phys.: Condens. Matter* **8**, 3635 (1996).
- [104] E. Vergini y M. Saraceno, *Phys. Rev. E* **52**, 2204 (1995).
- [105] T. Dittrich, B. Mehlig, H. Schanz y U. Smilansky, *Phys. Rev. E* **57**, 359 (1998).
- [106] R. Adler, M. Bazin y M. Schiffer, *Introduction to General Relativity*, McGraw-Hill (1975).
- [107] G. A. Luna-Acosta, M. A. Rodríguez, A. A. Krokhin, K. Na y R. A. Méndez, *Rev. Mex. Fis.* **44 S3**, 7 (1998).
- [108] G. A. Luna-Acosta, J. A. Méndez-Bermúdez y F. M. Izrailev, *Phys. Lett. A* **247**, 192 (2000).
- [109] G. A. Luna-Acosta, J. A. Méndez-Bermúdez y F. M. Izrailev, *Phys. Rev. E* **64**, 036206 (2001).
- [110] G. A. Luna-Acosta, J. A. Méndez-Bermúdez y F. M. Izrailev, *Physica E* **12**, 267 (2002).
- [111] M. Sieber, H. Primack, U. Smilansky, I. Ussishkin y H. Schanz, *J. Phys. A: Math. Gen.* **28**, 5041 (1995).
- [112] C. Vaa, P. M. Koch y R. Blümel, *Phys. Rev. E* **72**, 056211 (2005).
- [113] Amando Alcázar Lopéz, Tesis Doctoral, IF-UAP (2013) (no publicado).
- [114] M. Buttiker, *IBM J. Res. Dev.* **32**, 317 (1988).
- [115] R. Landauer, *IBM J. Res. Dev.* **32**, 336 (1988).
- [116] Bryce S. DeWitt, *Rev. Modern Phys.* **29**, 377 (1957).
- [117] R. Adler, M. Bazin y M. Schier, *Introduction to General Relativity*, McGraw-Hill, (1975).
- [118] V. V. Uchaikin y V. M. Zolotarev, *Chance and Stability. Stable Distributions and their Applications* (VSP, Utrecht, 1999).
- [119] P. Barthelemy, J. Bertolotti y D. S. Wiersma, *Nature* **453**, 495 (2008).

- [120] C. W. J. Beenakker, C. W. Groth y A. R. Akhmerov, *Phys. Rev. B* **79**, 024204 (2009).
- [121] R. Burioni, L. Caniparoli y A. Vezzani, *Phys. Rev. E* **81**, 060101(R) (2010).
- [122] P. Buonsante, R. Burioni y A. Vezzani, *Phys. Rev. E* **84**, 021105 (2011).
- [123] F. Falceto y V. A. Gopar, *Europhys. Lett.* **92**, 57014 (2010).
- [124] R. T. Sibatov, *JETP Lett.* **93**, 503 (2011).
- [125] J. P. Nolan, *Stable distributions - Models for heavy tailed data*, sin publicarse.
- [126] A. Bruyant, G. Lerondel, P. J. Reece, y M. Gal, *Appl. Phys. Lett.* **82**, 3227 (2003).
- [127] J. O. Estevez, J. Arriaga, A. M. Blas y V. Agarwal, *Appl. Phys. Lett.* **93**, 191915 (2008).