



BENEMÉRITA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE PUEBLA

INSTITUTO DE FÍSICA "LUIS RIVERA TERRAZAS"

**"Manifestaciones en diversas funciones de
dispersión de los polos de la matriz S en
sistemas cuánticos unidimensionales de un
solo canal"**

**Tesis
para obtener el grado de:**

**MAESTRÍA EN CIENCIAS
(FÍSICA)**

**PRESENTA
Nelson Barrales González**

**DIRECTOR DE TESIS
Dr. Germán Aurelio Luna Acosta**

No. de CVU: 1224893

Junio de 2025

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

**MANIFESTACIONES EN DIVERSAS
FUNCIONES DE DISPERSIÓN DE LOS
POLOS DE LA MATRIZ S EN
SISTEMAS CUÁNTICOS
UNIDIMENSIONALES DE UN SOLO
CANAL**

Tesis presentada por

Nelson Barrales González

para obtener el grado de

**Maestría en Ciencias
(Física)**

Dirigida por

Dr. Germán Aurelio Luna Acosta

Puebla, México
Junio 2025

©2025 - Nelson Barrales González

Derechos Reservados

Agradecimientos

Agradezco al Instituto de Física "Ing. Luis Rivera Terrazas" por recibirme como integrante del posgrado en Física y por proporcionarme las herramientas para una vida académica plena. Asimismo, agradezco al Consejo Nacional de Humanidades, Ciencias y Tecnologías (Conahcyt) por financiar mis estudios en este programa.

A mi asesor, el Dr. Germán Aurelio Luna Acosta, quien me guió constantemente, ayudándome a desarrollar los conocimientos que presento en este trabajo. Sus comentarios certeros han sido fundamentales para mi crecimiento profesional, y su apoyo me ha permitido crecer también a nivel personal.

A mi mamá y a mi papá, Patricia González y Nelzon Barrales, por su apoyo incondicional, su sabiduría para enfrentar la vida y su fe en mí. A mis hermanas, Diana Carolina y Katia Selene, por escucharme cuando sentía que no entendía mis propias ideas, mostrándome que con paciencia podía desarrollarlas y expresarlas mejor. A mis abuelitos, Catalina y Jesús, que siempre han pedido por mi bienestar y éxito.

A mis amigos, Ana Fernanda y Alejandro, que compartieron este camino conmigo. Juntos nos apoyamos y crecimos tanto profesional como personalmente. Sin ellos, este recorrido habría sido mucho más solitario.

Finalmente, agradezco a todo aquello que me permitió seguir adelante y mejorar, tanto física, mental como espiritualmente, incluyendo al gimnasio, a FuwaMoco y los comentarios constructivos de fuentes externas.

a mi familia ...

Resumen

En esta tesis se analiza la dispersión cuántica en potenciales centrales de radio finito r_0 y momento angular cero, enfocándonos en las manifestaciones de los polos de resonancia en diversas funciones de dispersión. Dicha teoría se aplica posteriormente al modelo de pozo cuadrado central. Para este efecto, se utiliza la matriz de reacción de Wigner. Usando las condiciones de frontera “naturales” de la función de onda en $x = r_0$ y en condiciones de resonancia, se obtiene el parámetro de frontera B , el cual define el conjunto apropiado de eigenfunciones y eigenenergías del espectro de la región de reacción, permitiendo aproximar la matriz de reacción R_B a un solo nivel. Se han obtenido expresiones analíticas y numéricas tanto para las funciones de dispersión como para los polos de la matriz de dispersión $S(k)$, con el objetivo de identificar patrones que relacionen las posiciones de los máximos de las funciones de dispersión con las propiedades fundamentales de las resonancias. Además, se aplica la matriz de reacción y su primera aproximación para predecir tanto la parte real como la imaginaria de los polos de $S(k)$, así como las posiciones de los máximos de las funciones de dispersión a primer nivel. Estas aproximaciones son congruentes con los datos numéricos: las diferencias entre resultados son notables para resonancias cercanas al origen y para aquellas de carácter más aislado, pero se vuelven insignificantes para resonancias mayores. Finalmente, al encontrar diferencias entre los distintos tiempos de dispersión, se sugiere una posible discusión sobre cuál de estos tiempos podría estar más relacionado con el tiempo de vida de los estados resonantes. Aunque este aspecto no se aborda directamente en este trabajo, representa una interesante línea de investigación para futuros estudios.

Contenido

1	Introducción	1
1.1	Motivaciones	3
1.2	Objetivos	3
2	Dispersión Cuántica	5
2.0.1	Ecuación de Lippmann-Schwinger	6
2.0.2	Amplitud de dispersión	6
2.1	Resonancias	7
2.1.1	Definición clásica de resonancia	7
2.1.2	Matriz de Dispersión S	8
2.1.3	Resonancias como Polos de la Matriz S	8
2.1.4	Sección Transversal	9
2.2	Funciones de dispersión	11
2.2.1	Tiempo de demora y tiempo de interacción	11
2.2.2	Estiramiento y recorrido efectivo	13
2.2.3	Probabilidad de atrapamiento	14
2.2.4	Tiempo de permanencia	14
3	Matriz de reacción	15
3.0.1	Región interna	15
3.0.2	Región externa	17
3.0.3	Emparejamiento de las regiones interna y externa	18
3.1	Funciones de dispersión en términos de la matriz de reacción	19
3.1.1	Sección transversal resonante	19
3.1.2	Recorrido efectivo	19
3.1.3	Tiempo de demora	20
3.1.4	Tiempo de interacción	20
3.1.5	Probabilidad de atrapamiento	20
3.2	Aproximación a un nivel	21
3.2.1	Funciones de dispersión en la aproximación a un nivel	22
3.2.2	Posición de los máximos de las funciones de dispersión a un nivel	23

4	Aplicación al modelo de pozo cuadrado central	26
4.1	Funciones de dispersión	29
4.1.1	Forma Exacta	29
4.1.2	Forma a bajas energías	30
4.2	Matriz de reacción del modelo	32
5	Resultados	35
5.1	Polos de la matriz $S(k)$ y máximos de las funciones de dispersión	35
5.1.1	Criterios de selección	35
5.1.2	Selección de casos	36
5.1.3	Gráficas de los casos de estudio	39
5.2	Resultados numéricos	53
5.2.1	Datos numéricos de la posición de los máximos de las funciones de dispersión	53
5.2.2	Resultados de la primera aproximación para los polos y gráficas de $l^{(1)}(k)$	67
5.2.3	Máximos de las funciones de dispersión a primer nivel	76
6	Conclusiones	78
A	Análisis de dispersión a bajas energías	80
A.1	Desarrollo de las funciones de dispersión cerca de $k = 0$	80
B	Posición de los máximos de las funciones de dispersión a un nivel	84
B.1	Posición de los máximos (Tiempo de demora y Recorrido efectivo)	84
B.2	Posición de los máximos (Tiempo de interacción)	86
B.3	Posición de los máximos (Probabilidad de atrapamiento)	86
B.4	Posición de los máximos (Tiempo de permanencia)	87
B.5	Posición de los máximos (Sección transversal resonante)	88
C	Estados acotados	89
C.1	Detalles del método numérico y scripts de cálculo	89
C.1.1	Cálculo de máximos y polos (archivo principal)	89
C.1.2	Generación de gráficas (script de visualización)	91
C.1.3	Control de error y convergencia	91
C.1.4	Implementación numérica	92
	Bibliografía	96

Capítulo 1

Introducción

La dispersión en mecánica cuántica es un fenómeno extremadamente rico y diverso, abarcando una amplia gama de efectos físicos, algunos de los cuales no tienen análogos directos en la dispersión clásica [30]. A diferencia de esta última, donde las partículas siguen trayectorias bien definidas, la dispersión cuántica está impregnada por la dualidad onda-partícula, lo que introduce fenómenos como el tunelamiento cuántico y las resonancias. Estas características permiten que la dispersión cuántica describa un espectro de fenómenos naturales mucho más amplio que su contraparte clásica. Estos efectos son fundamentales en diversas áreas de la física, como la física nuclear, la física de partículas y la óptica cuántica, donde fenómenos como la reflexión total y parcial de ondas, el tunelamiento cuántico y las resonancias son cruciales para entender procesos físicos complejos.

Roger G. Newton [30] proporciona una descripción rigurosa de la dispersión cuántica como un proceso esencialmente dependiente del tiempo. Este proceso se divide conceptualmente en tres etapas: en el pasado remoto, las partículas de un paquete de ondas son libres y se dirigen hacia un objetivo; durante la etapa de interacción, las partículas se dispersan; y en el futuro lejano, estas partículas vuelven a ser libres, moviéndose en todas direcciones y siendo detectadas lejos del centro de dispersión.

En “Modern Quantum Mechanics” [35], Sakurai define la dispersión como la transformación de un estado continuo inicial en un estado continuo final a través de un potencial, tratado como una perturbación dependiente del tiempo. Sin embargo, esta descripción se aplica de mejor manera a la dispersión cuántica debida a un potencial específico que a la dispersión cuántica general. Algunos autores, al presentar la dispersión en mecánica cuántica, comienzan motivando el tema como una perturbación dependiente del tiempo. No obstante, en la

mayoría de los enfoques se parte de la formulación estacionaria (dispersión independiente del tiempo) y, solo después, se introduce la descripción temporal. La conexión entre ambas formulaciones a menudo no se enfatiza, pero puede establecerse mediante una transformada inversa de Laplace [27].

Como concepto fundamental, la matriz de dispersión o “Matriz S ”, relaciona el estado inicial de un sistema cuántico con su estado final después de una interacción [3, 30, 35, 38], proporcionando información sobre las probabilidades de transición entre diferentes estados; es decir, la matriz S conecta los estados asintóticos entrantes y salientes.

En mecánica cuántica, las resonancias se definen como los polos de la matriz de dispersión S ubicados en el cuarto cuadrante del plano complejo de k [3, 22, 30, 31]. Estos polos representan estados cuasi-ligados: configuraciones en las que la partícula dispersada queda temporalmente atrapada en la región de interacción antes de decaer. Este comportamiento se traduce en picos característicos en la sección transversal total $\sigma(k)$ [30, 38], que mide la probabilidad de dispersión como función de k . Sin embargo, la sección transversal no es la única función de dispersión que proporciona información sobre las resonancias. Otras funciones, como el tiempo de demora $\tau(k)$ [6, 11, 42], el tiempo de permanencia [3, 5, 6], el tiempo de interacción, el recorrido efectivo $l(k)$ [24], y la probabilidad de atrapamiento $P(k)$ [16], ofrecen diferentes perspectivas sobre cómo las resonancias afectan la dinámica de las partículas.

El tiempo de demora [6, 42], el tiempo de interacción y el tiempo de permanencia [5, 6] poseen similitudes conceptuales. Sin embargo, es crucial identificar las diferencias entre ellos, ya que cada uno puede ofrecer una perspectiva única sobre el proceso de dispersión. Nuestro objetivo es estudiar cómo estas resonancias se manifiestan en diferentes funciones de dispersión y obtener una descripción detallada de sus efectos en el sistema.

Para comprender mejor la naturaleza de las resonancias cuánticas, es útil recordar el concepto clásico de resonancia. En mecánica clásica, un sistema en resonancia es aquel que es excitado por una fuerza externa cuya frecuencia coincide con una de las frecuencias naturales del sistema [30], lo que amplifica las oscilaciones. De manera similar, en mecánica cuántica, las resonancias ocurren cuando el número de onda de una partícula coincide con un valor específico relacionado con los polos de la matriz S .

Esta analogía sugiere el uso de la matriz de reacción (R -matrix) [23] para analizar las resonancias cuánticas. La matriz de reacción permite dividir el sistema en una región interna, donde se describe la dinámica de la partícula bajo el potencial, y una región externa, donde

la partícula se propaga libremente [23].

En este trabajo, se utiliza tanto la matriz de dispersión S como la matriz de reacción para analizar resonancias en un sistema cuántico sencillo. Nuestro objetivo es estudiar cómo estas resonancias se manifiestan en diferentes funciones de dispersión y obtener una descripción de sus efectos en el sistema.

1.1 Motivaciones

Las resonancias son fenómenos físicos fundamentales en la mecánica cuántica, ya que proporcionan información detallada sobre la dinámica interna de los sistemas y su interacción con potenciales externos [22, 30]. En particular, nos centramos en el modelo de pozo cuadrado central, dado a que es un modelo paradigmático que permite extrapolar conocimientos hacia sistemas más complejos. Esta elección se basa en que este modelo presenta resonancias, útil para desarrollar métodos precisos en la caracterización de estos fenómenos. Este trabajo busca explorar las resonancias mediante el uso de la matriz de reacción, con el objetivo de profundizar en cómo los polos resonantes se manifiestan en las funciones de dispersión.

1.2 Objetivos

Este trabajo tiene como objetivo general analizar las resonancias en modelos cuánticos de potenciales centrales con momento angular cero, mediante la caracterización de funciones de dispersión y la aplicación de la matriz de reacción. Como caso de estudio, se aplica específicamente al modelo de pozo cuadrado central. Los objetivos específicos son los siguientes:

- Caracterizar las resonancias del sistema a través del análisis detallado de las funciones de dispersión, identificando los puntos críticos en los que estas resonancias se manifiestan.
- Aplicar la teoría de la matriz de reacción y su aproximación a un nivel para obtener descripciones congruentes de las partes real e imaginaria de los polos de la matriz de dispersión S , mejorando la precisión en la descripción de la dinámica de dispersión en el sistema.

- Seleccionar y evaluar casos representativos que reflejen de manera precisa el comportamiento resonante del sistema, utilizando los valores de las funciones de dispersión obtenidos.
- Derivar expresiones analíticas para los polos de resonancia, escribir las funciones de dispersión en términos de la matriz de reacción, determinar que función de dispersión identifica mejor el valor de la parte real del polo de resonancia a partir de aproximaciones y determinar como se relacionan las diferentes funciones de dispersión.
- Comparar los máximos de las funciones de dispersión con las cantidades asociadas a los polos de la matriz de dispersión S (parte real κ , número de onda del polo k_ω y magnitud del polo $|K|$), con el fin de identificar patrones que determinen cuál función de dispersión es la más adecuada para describir cada una de estas cantidades.

Capítulo 2

Dispersión Cuántica

La dispersión cuántica es un fenómeno extremadamente rico y diverso, que abarca una amplia gama de efectos físicos que superan en complejidad a la dispersión en mecánica clásica [30]. En la dispersión clásica, las partículas siguen trayectorias bien definidas que obedecen las leyes de Newton. Sin embargo, en mecánica cuántica no existen trayectorias definidas en el espacio fase. En su lugar, la dispersión cuántica incorpora la dualidad onda-partícula, un concepto fundamental que permite describir fenómenos como el tunelamiento cuántico y las resonancias, los cuales no tienen un análogo directo en la física clásica [30]. Roger G. Newton [30] señala que la dispersión cuántica es similar a la dispersión clásica en su estructura básica, pero más rica debido a la complejidad de los fenómenos naturales que describe. La dispersión cuántica no se limita únicamente a la interacción de partículas con potenciales; la dispersión por potencial es un caso particular ampliamente estudiado. En este caso, se analiza cómo la onda asociada a una partícula se modifica al interactuar con un potencial externo o con el campo generado por otras partículas. Un experimento icónico que evidenció la naturaleza ondulatoria de las partículas fue el de Davisson y Germer en 1927, donde se observó la difracción de electrones al incidir sobre un cristal de níquel [7]. En el estudio de la dispersión cuántica, la ecuación de Schrödinger se convierte en la herramienta fundamental para analizar problemas de dispersión, tanto dependientes como independientes del tiempo. Resolver la ecuación de Schrödinger permite obtener información sobre la amplitud y la fase de las ondas dispersas, lo que facilita el análisis de cantidades observables como la sección transversal de dispersión. A continuación, se desarrolla la teoría usual de la dispersión cuántica, siguiendo las descripciones proporcionadas por diversos autores en el campo.

2.0.1 Ecuación de Lippmann-Schwinger

Partiendo de la ecuación de Schrödinger para una partícula sin espín en tres dimensiones [35], en presencia de un potencial general $V(x)$, se obtiene:

$$(E - H_0)\psi(x) = V(x)\psi(x), \quad (2.1)$$

donde E es la energía del sistema y H_0 es el Hamiltoniano del sistema libre. En este contexto, el potencial $V(x)$ es localizado, lo que implica que fuera de la región donde $V(x) \neq 0$, la partícula se comporta como libre. La solución general puede expresarse en términos de la función de Green correspondiente al Hamiltoniano libre $G_0(x, x', E)$ como:

$$\psi(x) = \phi(x) + \int d^3x' G_0(x, x', E) V(x') \psi(x'), \quad (2.2)$$

donde $\phi(x)$ es la solución de la ecuación homogénea $(E - H_0)\phi(x) = 0$, que describe el estado no perturbado, y $G_0(x, x', E)$ es la función de Green dependiente de la energía para el sistema libre [30].

Para estudiar el fenómeno de dispersión, se selecciona $\phi(x)$ como una onda plana incidente del tipo $\phi_{\vec{k}}(x) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}}$, y se toma $G_0(x, x', E)$ como la función de Green para partículas libres denotada por G_0^+ . Así, la ecuación de Lippmann-Schwinger [30] toma la forma:

$$\psi_{\vec{k}}(x) = \phi_{\vec{k}}(x) + \int d^3x' G_0^+(x, x', E) V(x') \psi_{\vec{k}}(x'), \quad (2.3)$$

donde $\psi_{\vec{k}}(x)$ representa la función de onda total, que incorpora tanto la onda incidente como la dispersa. Esta ecuación de Lippmann-Schwinger es fundamental, ya que permite relacionar la onda incidente con la onda dispersa mediante la interacción con el potencial $V(x)$. La relación entre la energía E y el vector de onda $\vec{k}$ viene dada por:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (2.4)$$

2.0.2 Amplitud de dispersión

La amplitud de dispersión [30, 35] se obtiene a partir de la solución de la ecuación de Lippmann-Schwinger (2.3). Esta cantidad describe la amplitud de la onda dispersa en función del ángulo de dispersión, proporcionando información clave sobre cómo se redistribuye la onda debido a la interacción con el potencial. A partir de la ecuación de Lippmann-Schwinger (2.3), la función de onda total $\psi_{\vec{k}}(x)$ en la región asintótica (cuando

$|x| \rightarrow \infty$) puede escribirse como una superposición de la onda incidente y la onda dispersa. La solución asintótica tiene la forma:

$$\psi_{\vec{k}}(x) \approx e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}, \quad (2.5)$$

donde $f(\theta)$ es la amplitud de dispersión y θ es el ángulo de dispersión. En esta ecuación, el primer término representa la onda incidente y el segundo describe la onda dispersa, con una dependencia radial r .

Para encontrar la amplitud $f(\theta)$ [35], se compara la expresión asintótica con la solución integral de la ecuación de Lippmann-Schwinger. En la región lejana, la función de Green (G_0^+) para partículas libres puede aproximarse a:

$$G_0^+(x, x', E) \approx -\frac{e^{ik|x-x'|}}{4\pi|x-x'|}. \quad (2.6)$$

Sustituyendo esta expresión en la ecuación de Lippmann-Schwinger, la función de onda total se reescribe como:

$$\psi_{\vec{k}}(x) \approx e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} - \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3x' \frac{e^{ik|x-x'|}}{4\pi|x-x'|} V(x') \psi_{\vec{k}}(x'). \quad (2.7)$$

En la región lejana, es posible aproximar $|x-x'| \approx r - \hat{x} \cdot x'$, donde $\hat{x}$ es un vector unitario en la dirección de x . Esta aproximación permite simplificar la integral y obtener una expresión para la función de dispersión $f(\theta)$:

$$f(\theta) = -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{4\pi} \int d^3x' e^{-i\vec{k} \cdot x'} V(x') \psi_{\vec{k}}(x'). \quad (2.8)$$

La función $f(\theta)$, conocida como la amplitud de dispersión, caracteriza la intensidad y la dirección de la onda dispersa.

2.1 Resonancias

2.1.1 Definición clásica de resonancia

En física clásica, la resonancia se presenta cuando un sistema oscilatorio es excitado por una fuerza externa cuya frecuencia coincide o es cercana a una de las frecuencias naturales del sistema. Este fenómeno resulta en un incremento en la amplitud de las oscilaciones, ya que la energía externa es transferida al sistema de manera eficiente en la frecuencia de resonancia [22]. Un ejemplo básico de resonancia clásica es el oscilador armónico, como

un péndulo, cuya amplitud aumenta considerablemente cuando es forzado a oscilar a su frecuencia natural. Este concepto clásico tiene una correspondencia en la mecánica cuántica, donde las resonancias se describen mediante los polos de la matriz de dispersión S .

2.1.2 Matriz de Dispersión S

La matriz de dispersión, también conocida como matriz S , proporciona una descripción completa de cómo una onda incidente se transforma en una onda dispersada tras interactuar con un potencial [22, 30, 35, 38], dicho de otra forma, contiene toda la información sobre la modificación de la fase de la onda incidente, siendo esencial para describir fenómenos como la resonancia y la dispersión elástica [31]. En la región alejada del potencial, la función de onda $\psi(r)$ puede aproximarse como una superposición de una onda incidente y una onda dispersada:

$$\psi(r) \sim e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}, \quad (2.9)$$

donde e^{ikz} representa la onda incidente y $f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}$ la onda dispersada. Para un estado con momento angular ℓ , la matriz S se relaciona con la fase de dispersión $\theta_\ell(k)$ mediante la siguiente expresión:

$$S_\ell = e^{2i\theta_\ell(k)}. \quad (2.10)$$

La fase de dispersión $\theta_\ell(k)$ describe el cambio de fase causado por la interacción con el potencial. La posición de los polos de la matriz S en el plano complejo del número de onda k permite obtener información relevante sobre el sistema, como la existencia de estados ligados, resonantes o virtuales [22, 31].

2.1.3 Resonancias como Polos de la Matriz S

En la teoría de la matriz S , los polos de esta matriz se ubican en cuatro regiones del plano complejo de k [3, 22, 30] (ver Fig. 2.1). La posición de un polo determina tanto el comportamiento de la función de onda correspondiente como la interpretación física de la solución.

Los polos ubicados en el eje imaginario positivo de k corresponden a estados ligados, cuyas soluciones son normalizables y tienen energía negativa. En contraste, los polos en el eje imaginario negativo representan soluciones no normalizables, lo que corresponde a estados virtuales o “antibound states”.

En el cuarto cuadrante los polos corresponden a los estados resonantes. Las soluciones en esta región oscilan y decrecen exponencialmente, y la parte imaginaria y negativa de la energía se interpreta como el ancho de la resonancia. Finalmente, los polos en la región restante se consideran como estados virtuales. En resumen, los polos “resonantes” de la matriz S permiten interpretar la energía y el ancho de la resonancia, proporcionando información clave sobre el estado resonante y su comportamiento en la dispersión [3, 22].

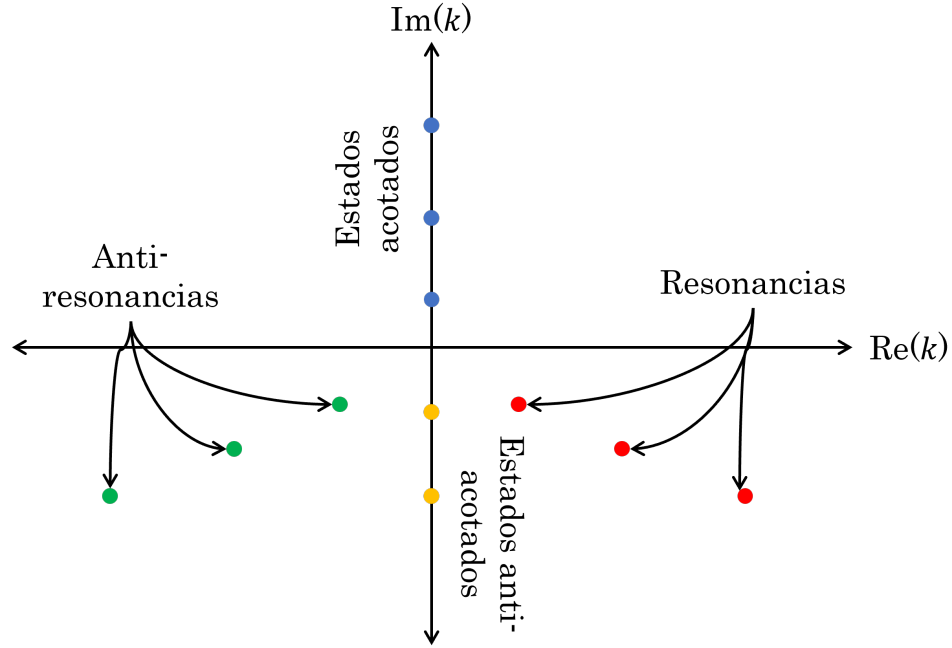


Figura 2.1: Representación gráfica de los diferentes tipos de polos de la matriz S en el plano complejo del número de onda k . Los colores representan: estados resonantes (rojo), estados acotados (azul), estados anti-resonantes (verde), y estados anti-acotados o virtuales (naranja).

2.1.4 Sección Transversal

La sección transversal es una medida cuantitativa de la probabilidad de que ocurra una interacción entre una partícula incidente y un objetivo [30, 38]. La sección transversal diferencial esta definida como:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\text{Número de partículas dispersadas por unidad de ángulo sólido}}{\text{Flujo incidente}}$$

Esta cantidad está relacionada con la amplitud de dispersión $f(\theta)$, que describe cómo la onda incidente se redistribuye angularmente debido a la interacción [30, 35, 38]. La sección

transversal diferencial $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ se expresa como:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2, \quad (2.11)$$

y la sección transversal total σ se obtiene integrando la sección transversal diferencial sobre todos los ángulos sólidos [35]:

$$\sigma = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi |f(\theta)|^2 \sin \theta \, d\theta \, d\phi. \quad (2.12)$$

Para potenciales esféricos, la amplitud de dispersión $f(\theta)$ se puede expandir en una serie de ondas parciales mediante los polinomios de Legendre $P_\ell(\cos \theta)$ y las fases de dispersión θ_ℓ [35]:

$$f(\theta) = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) \frac{e^{i\theta_\ell} \sin \theta_\ell}{k} P_\ell(\cos \theta). \quad (2.13)$$

Sustituyendo esta expansión en la sección transversal diferencial y utilizando la ortogonalidad de los polinomios de Legendre, se obtiene la sección transversal total como una sumatoria sobre los momentos angulares ℓ :

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) \sin^2 \theta_\ell. \quad (2.14)$$

En los casos en que las resonancias están presentes, la sección transversal muestra un pico en función del número de onda k , siempre y cuando la fase de fondo del sistema sea cero, lo que corresponde a una mayor probabilidad de interacción en esas energías específicas [3, 22, 30], esto ocurre cuando la fase de la onda dispersa cambia rápidamente en un intervalo de $\pi/2$, lo que indica una fuerte interacción entre el estado incidente y el estado resonante del sistema. Este fenómeno es aprovechado de forma experimental para poder identificar estas resonancias [33]. Para describir resonancias se utiliza comúnmente la fórmula de Breit-Wigner para representar la forma de las resonancias en función de la energía del sistema [30]:

$$\sigma_\ell = \frac{4\pi}{k^2} \frac{(2\ell+1) (\Gamma/2)^2}{(E - E_0)^2 + (\Gamma/2)^2}, \quad (2.15)$$

donde E_0 es la energía de la resonancia, Γ es el ancho de la resonancia y E es la energía del sistema. El parámetro Γ está relacionado con la vida media del estado resonante: resonancias con un ancho pequeño Γ corresponden a estados cuasi-estacionarios de larga duración, mientras que un valor grande de Γ indica un estado resonante de corta duración. La fórmula de Breit-Wigner es adecuada cuando el ancho de la resonancia Γ es pequeño

en comparación con la separación entre resonancias [23]. Además, es aplicable cuando la dependencia de la fase de la matriz S con respecto a la energía es aproximadamente lineal cerca de E_0 [30]. Para potenciales que solo dependen de la distancia radial r (como es el caso del pozo cuadrado central), el valor de $\ell = 0$, lo que nos da la forma de la sección transversal:

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \theta. \quad (2.16)$$

La fase de dispersión $\theta(k)$ esta compuesta por dos contribuciones: una resonante $\theta_{\text{Res}}(k)$ y una de fondo $\theta_{\text{BG}}(k)$ [3]:

$$\theta(k) = \theta_{\text{Res}}(k) + \theta_{\text{BG}}(k). \quad (2.17)$$

La fórmula de Breit-Wigner (2.15) para describir resonancias supone que la fase de fondo es cero ($\theta_{\text{BG}}(k) = 0$) [3]. Sin embargo, si se considera una fase de fondo no nula, la forma de Breit-Wigner se distorsiona. Por esta razón, se considera la sección transversal resonante $\sigma_{\theta_{\text{Res}}}(k)$ en lugar de la sección transversal completa, facilitando así una descripción más precisa de las resonancias en el sistema [3].

$$\sigma_{\theta_{\text{Res}}}(k) = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 (\theta_{\text{Res}}(k)). \quad (2.18)$$

2.2 Funciones de dispersión

2.2.1 Tiempo de demora y tiempo de interacción

El concepto de tiempo de demora o “delay time” en mecánica cuántica se refiere al tiempo adicional que una partícula pasa en la región de interacción debido a la presencia de un potencial dispersivo [3, 6]. Esto se compara con el tiempo que tomaría si la partícula estuviera en movimiento libre. Este concepto fue formalizado por Wigner en 1955 [42], y ofrece una medida clara del efecto que tiene un potencial sobre la dinámica de una partícula en una región determinada. Para derivar el tiempo de demora, se considera un paquete de onda dispersado descrito por una superposición de ondas con una amplitud $A(k)$:

$$\psi(x, t) = \int A(k) e^{i(kx - \omega t + 2\theta)} dk, \quad (2.19)$$

donde $\omega = \omega(k)$ es la frecuencia angular y $\theta = \theta(k)$ es la fase de dispersión. Se asume que la función $A(k)$ varía lentamente en k . En caso de que $A(k)$ presente variaciones rápidas, podrían emerger fenómenos complejos. Esto complicaría el análisis, haciendo que

la aproximación de fase estacionaria deje de ser válida. Aclarado esto, para que el paquete de onda no sea nulo, se aplica la condición de fase estacionaria:

$$\frac{d}{dk}(kx - \omega t + 2\theta) = 0. \quad (2.20)$$

Esto implica que el paquete de onda se mueve de acuerdo con:

$$x = \omega' t - 2\theta', \quad (2.21)$$

donde $\omega' = \frac{d\omega}{dk}$ es la velocidad de grupo. Resolviendo para t , se obtiene:

$$t = \frac{x}{\omega'} + \frac{2\theta'}{\omega'} = t_{\text{libre}} + \frac{2\theta'}{\omega'}. \quad (2.22)$$

El tiempo de demora τ se define como la diferencia entre el tiempo t y el tiempo de recorrido libre t_{libre} :

$$\tau = t - t_{\text{libre}} = \frac{2\theta'}{\omega'}. \quad (2.23)$$

La velocidad de grupo ω' está dada por:

$$\omega' = \frac{dE}{dk} = \frac{\hbar k}{m}. \quad (2.24)$$

Sustituyendo en la expresión de τ , se obtiene:

$$\tau = \frac{2m}{\hbar k} \frac{d\theta}{dk}. \quad (2.25)$$

Finalmente, utilizando $dE = \frac{\hbar^2 k}{m} dk$, se puede reescribir el tiempo de demora como:

$$\tau(k) = 2\hbar \frac{d\theta}{dE}. \quad (2.26)$$

Utilizando la ecuación (2.10) es posible escribir la función de onda dispersada, en una dimensión, como:

$$\psi(x) = e^{-ikx} + S e^{ikx} = -2i \sin(kx + \theta) \quad (2.27)$$

Donde, al evaluar en la frontera entre la región de interacción y la región libre $x = r_0$, se encuentra que es posible definir la parte resonante θ_{Res} como:

$$\theta_{Res} \equiv \theta + k r_0 \quad (2.28)$$

Donde el segundo termino corresponde a la fase de esfera dura y a la fase de fondo, esto por comparación con la ecuación (2.17). Separando la fase $\theta(k)$ en su parte resonante $\theta_{Res}(k)$

y la parte correspondiente a la dispersión de esfera dura (2.28), se obtiene:

$$\tau(k) = \frac{m}{\hbar k} \left(2 \frac{d\theta_{Res}}{dk} - 2r_0 \right) = \frac{2m}{\hbar k} \frac{d\theta_{Res}}{dk} - \frac{2m}{\hbar k} r_0. \quad (2.29)$$

Por comparación con la definición, el segundo término se refiere al tiempo de recorrido libre, mientras que el primer término se refiere al tiempo en que la partícula realiza el recorrido en presencia del potencial a la misma velocidad de grupo.

Se define entonces el tiempo que la partícula pasa interactuando en la región del potencial como tiempo de interacción:

$$T_I \equiv \frac{2m}{\hbar k} \frac{d\theta_{Res}}{dk} = 2\hbar \frac{d\theta_{Res}}{dE}. \quad (2.30)$$

2.2.2 Estiramiento y recorrido efectivo

El “estiramiento” o “stretch”, tal como lo define Wigner en su artículo *Lower Limit for the Energy Derivative of the Scattering Phase Shift* [42], se refiere al efecto que un potencial tiene sobre la fase de la onda dispersa. Este efecto introduce un retraso en la trayectoria de la partícula que es cuantificado por la siguiente expresión:

$$r(k) = 2 \frac{d\theta}{dk} = 2 \frac{d\theta_{Res}}{dk} - 2r_0. \quad (2.31)$$

Esta ecuación muestra cómo el potencial “estira” la trayectoria de la partícula por $2 \frac{d\theta_{Res}}{dk}$, en el sentido de que el recorrido efectivo se alarga comparado con la distancia que la partícula recorrería en ausencia del potencial. Dicho de manera más simple, esta cantidad mide la diferencia en el recorrido realizado por la partícula debido a la influencia del potencial [24]. Se observa en la ecuación (2.31) que el recorrido adicional asociado a la parte resonante es lo que denominamos el “recorrido efectivo”. Esta cantidad está definida como:

$$l(k) \equiv 2 \frac{d\theta_{Res}}{dk}. \quad (2.32)$$

Esta cantidad resulta particularmente útil para calcular el tiempo de interacción, como se indica en la ecuación (2.30). En este contexto, el tiempo de interacción puede entenderse como el tiempo que la partícula toma para realizar el recorrido efectivo bajo la influencia del potencial.

2.2.3 Probabilidad de atrapamiento

Se define la probabilidad de atrapamiento $P(E)$ [16,24,40] en la región de reacción como:

$$P(E) \equiv \frac{1}{r_0} \int_{\text{int}} |\psi_{\text{in}}(x; E)|^2 dx. \quad (2.33)$$

Esta cantidad es la probabilidad relativa de atrapamiento en la región de interacción, como se menciona en “*Cross section versus time delay and trapping probability*” [24].

2.2.4 Tiempo de permanencia

El concepto de “tiempo de permanencia” está relacionado con la probabilidad de que una partícula se encuentre en una región específica en un instante dado. Se define como el tiempo total que la partícula permanece en dicha región, sin distinguir si es finalmente transmitida o reflejada [3,5,6]. Carvalho [6] muestra que el tiempo de permanencia promedio está directamente vinculado a la densidad de probabilidad en la región de interés. Esta cantidad se puede expresar como:

$$T_D = \frac{\int_0^{r_0} |\psi(k, r)|^2 dr}{|j(k)|} = \frac{r_0 P(k)}{|j(k)|}, \quad (2.34)$$

donde $\psi(k, r)$ es la función de onda de la partícula en la región de interacción, $P(k)$ representa la probabilidad de encontrar la partícula en dicha región, y $j(k)$ es la corriente de probabilidad asociada. En el caso unidimensional y de un solo canal, la dirección de la corriente está determinada únicamente por el flujo incidente, por lo que se identifica $|j(k)|$ con el flujo incidente j_{inc} , ya que solo existe una dirección por la cual la partícula puede ingresar a la región.

Capítulo 3

Matriz de reacción

La matriz R [43], introducida por Eugene Wigner en 1946, es una herramienta esencial en el estudio de procesos de dispersión. Uno de sus propósitos es facilitar la conexión entre la solución de la función de onda en una región donde el potencial de interacción es significativo (región interna o de reacción) y la solución en una región donde el potencial puede considerarse despreciable (región externa). Esta matriz se define en términos de las funciones de onda y sus derivadas evaluadas en el límite que separa ambas regiones [23].

Un aspecto importante de la matriz R es su capacidad para tratar condiciones de frontera más generales, como las condiciones de Robin, que combinan valores de la función de onda y sus derivadas en la frontera [32]. Estas condiciones no son fácilmente manejables mediante otros métodos tradicionales de dispersión.

La utilidad de la matriz R se manifiesta particularmente en el análisis de resonancias, además, simplifica el tratamiento de sistemas con potenciales complejos al reducir el problema de dispersión a una relación entre regiones interna y externa mediante condiciones de continuidad.

3.0.1 Región interna

En la región interna, la función de onda de dispersión se expande en una base ortogonal completa $\{\Phi_{B_\lambda}(r)\}$ [23, 32], donde $\lambda = 1, 2, \dots, \infty$:

$$\psi_{int}(k; r) = \sum_{\lambda=1}^{\infty} A_{\lambda}^B(k) \Phi_{B_{\lambda}}(r), \quad r \in [0, r_0] \quad (3.1)$$

donde $\Phi_{B_\lambda}(r)$ son las soluciones del problema de eigenvalores Hermítico:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \partial_r^2 + V(r) \right] \Phi_{B_\lambda}(r) = E_{B_\lambda} \Phi_{B_\lambda}(r), \quad 0 \leq r \leq r_0 \quad (3.2)$$

sujeto a una condición de frontera B . La función de onda en la región interna $\psi_{\text{int}}(k; r)$ es adimensional, por otro lado, los coeficientes de expansión $A_\lambda(k)$ tienen dimensiones de $\sqrt{\text{distancia}}$, mientras que las funciones de base $\Phi_{B_\lambda}(r)$ tienen dimensiones de $1/\sqrt{\text{distancia}}$. La condición más general que hace que el problema sea Hermítico es la llamada condición de frontera homogénea (o de Robin):

$$r_0 \frac{d\Phi_{B_\lambda}(r)}{dr} = B \Phi_{B_\lambda}(r), \quad \text{en } r = r_0 \quad (3.3)$$

para todo λ , donde B es una constante real adimensional independiente de λ .

Nos referimos a las soluciones $\Phi_{B_\lambda}(x)$ y a los eigenvalores $\frac{2\mu}{\hbar^2} E_{B_\lambda} = k_{B_\lambda}^2$ como los eigenvalores y eigenvalores de reacción, respectivamente. Los coeficientes de expansión $A_\lambda^B(k)$ estan dados por:

$$A_\lambda^B(k) = \frac{r_0 \partial_r \psi_{\text{int}}(k, r_0) - B \psi_{\text{int}}(k, r_0)}{k_{B_\lambda}^2 - k^2} \frac{\Phi_{B_\lambda}^*(r_0)}{r_0} \quad (3.4)$$

Sustituyendo esto en (3.1), obtenemos una expresión importante que conecta la función de onda interna con las amplitudes en la región externa:

$$\psi_{\text{int}}(k; r_0) = (r_0 \partial_r \psi_{\text{int}}(k, r_0) - B \psi_{\text{int}}(k, r_0)) R_B(k), \quad (3.5)$$

donde

$$R_B(k) \equiv \frac{1}{r_0} \sum_{\lambda=1}^{\infty} \frac{|\Phi_{B_\lambda}(r_0)|^2}{k_{B_\lambda}^2 - k^2} \quad (3.6)$$

es la Matriz de Reacción en la base B , escrita en términos del espectro de eigenvalores y eigenfunciones correspondientes al parámetro de valor de frontera B [23]. La cantidad $|\Phi_{B_\lambda}(r_0)/r_0^{1/2}|$ se conoce como la *amplitud de ancho reducido*. Es importante notar que para que la expansión (3.5) sea válida, el límite $r \rightarrow r_0$ debe conmutar con la suma sobre λ . Si tomamos el caso especial $B = 0$ (condiciones de frontera de Neumann), obtenemos:

$$R_0(k) = \frac{\psi_{\text{int}}(k, r_0)}{r_0 \partial_r \psi_{\text{int}}(k, r_0)}, \quad (3.7)$$

que corresponde a la matriz de reacción original propuesta por Wigner [43] en su trabajo inicial.

Ahora, si se divide la ecuación (3.5) por $r_0 \partial_r \psi_{int}(k, r_0)$ y se usa la expresión (3.7), se obtiene la identidad:

$$R_0^{-1}(k) = R_B^{-1}(k) + B. \quad (3.8)$$

Esta identidad relaciona las matrices de reacción para diferentes condiciones de frontera y será útil para el análisis posterior. Si se toma la derivada de la ecuación (3.8) con respecto de k , se obtiene la identidad:

$$\frac{R_B^2}{\frac{dR_B}{dk}} = \frac{R_0^2}{\frac{dR_0}{dk}} \equiv \frac{|\Phi(k)|^2}{2kL}. \quad (3.9)$$

Nota: Aunque en la formulación general la matriz de reacción $R_B(k)$ se define en un espacio de canales—lo que implica que, en un contexto multicanal, se expresa como una matriz de dimensión $n \times n$ (donde n es el número de canales involucrados)—en el presente estudio se aborda un caso unidimensional de un solo canal. Por ello, la expresión (3.6) se reduce a un valor escalar.

3.0.2 Región externa

En la región externa [23], donde se asume que $V(r) = 0$ para todo $r > r_0$, la función de onda se escribe como una combinación de ondas planas entrantes y salientes:

$$\psi(k; r) = e^{-ikr} + S e^{ikr}, \quad r > r_0, \quad (3.10)$$

donde S es la matriz de dispersión. Formando la derivada logarítmica de la función de onda en el límite $r \rightarrow r_0$, podemos resolver para S . Esto nos lleva a la expresión:

$$S = -e^{-2ikL} \frac{1 + ik\psi(k, r_0)/\partial_r \psi(k, r_0)}{1 - ik\psi(k, r_0)/\partial_r \psi(k, r_0)}, \quad (3.11)$$

esta forma muestra que la matriz S es unitaria. La matriz S es posible escribirla en términos de la fase θ , donde se expresa como:

$$S = -e^{2i\theta}, \quad (3.12)$$

donde

$$\theta = -kr_0 + \phi, \quad \text{y} \quad \tan(\phi) = k \frac{\psi_{ext}(k, r_0)}{\partial_r \psi_{ext}(k, r_0)}. \quad (3.13)$$

El desplazamiento de fase, θ , mide el cambio de fase que experimenta la onda debido a la interacción con el potencial. Este puede separarse en dos partes: la componente resonante, dada por ϕ , y la contribución de dispersión de esfera dura, representada por $-kr_0$.

Utilizando la ecuación (3.12), es posible reescribir la función de onda en una forma que resultará útil más adelante:

$$\psi(k, r) = -2ie^{i\theta} \sin(kr + \theta). \quad (3.14)$$

3.0.3 Emparejamiento de las regiones interna y externa

Para emparejar las regiones interna y externa [23, 32], imponemos la continuidad de la función de onda y su derivada logarítmica en $r = r_0$. Las expresiones obtenidas previamente para $R_0(k)$ en la región interna y $S(k)$ en la región externa deben ser compatibles. Requiriendo la continuidad de la derivada logarítmica en $r = r_0$, obtenemos:

$$\frac{r_0 \psi'_{int}}{\psi_{int}} = R_0^{-1}(k) = kr_0 \cot(kr_0 + \theta). \quad (3.15)$$

Esta continuidad asegura que las soluciones en ambas regiones se emparejan correctamente. Finalmente, usando esta condición en la ecuación (3.12), se obtiene una expresión para la matriz de dispersión en términos de la matriz de reacción, tanto de R_0 como de R_B :

$$S = -e^{-2ikr_0} \frac{1 + ikr_0 R_0(k)}{1 - ikr_0 R_0(k)}, \quad (3.16a)$$

$$S = -e^{-2ikr_0} \frac{1 + BR_B + ikr_0 R_B(k)}{1 + BR_B - ikr_0 R_B(k)}. \quad (3.16b)$$

Esta expresión es clave para conectar ambas matrices. Además, utilizando la ecuación (3.14) y su derivada, se puede escribir la función de onda en la región interna, evaluada en la frontera $r = r_0$, como:

$$\psi(k, r_0) = -e^{-ikL} \frac{2ikr_0 R_0}{1 - ikr_0 R_0}, \quad (3.17a)$$

$$\psi(k, r_0) = -e^{-ikL} \frac{2ikr_0 R_B}{1 + BR_B - ikr_0 R_B}. \quad (3.17b)$$

Sustituyendo esta ecuación en (3.4), se obtienen finalmente los coeficientes de expansión A_λ^B :

$$A_\lambda^B = -2ike^{-ikr_0} \frac{1 - BR_0}{1 - ikr_0 R_0} \frac{\Phi_{B_\lambda}(r_0)}{k_{B_\lambda}^2 - k^2}, \quad (3.18a)$$

$$A_\lambda^B = -2ike^{-ikr_0} \frac{1}{1 + BR_B - ikr_0 R_B} \frac{\Phi_{B_\lambda}(r_0)}{k_{B_\lambda}^2 - k^2}. \quad (3.18b)$$

3.1 Funciones de dispersión en términos de la matriz de reacción

Ahora, se busca expresar las funciones de dispersión directamente en términos de la matriz de reacción $R_0(k)$ y de $R_B(k)$. A continuación, se presentan las funciones más relevantes:

3.1.1 Sección transversal resonante

La sección transversal resonante $\sigma_{\theta_{Res}}(k)$ puede escribirse en función de la fase de dispersión resonante $\theta_{Res}(k)$, la cual está relacionada con la matriz de reacción $R_0(k)$ a través de la ecuación (3.15), por lo que la sección transversal se expresa como:

$$\sigma_{\theta_{Res}}(k) = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2(\arctan(kr_0R_0)), \quad (3.19)$$

donde, utilizando la identidad:

$$\sin^2(\arctan(x)) = \frac{x^2}{1+x^2}$$

es posible expresar la sección transversal resonante como:

$$\sigma_{\theta_{res}}(k) = 4\pi \frac{r_0^2 R_0^2}{1 + k^2 r_0^2 R_0^2}. \quad (3.20)$$

Utilizando la identidad (3.8), es posible describir esta función en términos de R_B , obteniendo así:

$$\sigma_{\theta_{res}}(k) = 4\pi \frac{r_0^2 R_B^2}{1 + 2BR_B + (B^2 + k^2 r_0^2) R_B^2}. \quad (3.21)$$

3.1.2 Recorrido efectivo

El recorrido efectivo $l(k)$ [42], que describe la distancia efectiva recorrida por la partícula en presencia del potencial, también puede escribirse en términos de $R_0(k)$. Utilizando la definición de $l(k)$ (ecuación (2.32)):

$$l(k) = 2 \frac{r_0 R_0 + k r_0 R_0'}{1 + k^2 r_0^2 R_0^2}, \quad (3.22)$$

se obtiene el recorrido efectivo en términos de la matriz de reacción, lo cual permite estudiar la interacción en función del número de onda k . De igual forma, utilizando la identidad (3.8), es posible escribir el recorrido efectivo en términos de R_B :

$$l(k) = 2 \frac{r_0 R_B + r_0 B R_B^2 + k r_0 R_B'}{1 + 2BR_B + (B^2 + k^2 r_0^2) R_B^2}. \quad (3.23)$$

3.1.3 Tiempo de demora

El tiempo de demora [6], que mide el tiempo adicional que una partícula pasa interactuando con el potencial, se puede obtener a partir de la derivada de la fase de dispersión $\theta_{Res}(k)$ con respecto a k (ecuación (2.26)):

$$\tau(k) = 2 \frac{m}{\hbar k} \left[\frac{d\theta_{res}(k)}{dk} - r_0 \right]. \quad (3.24)$$

Sustituyendo la expresión de $\theta_{Res}(k)$ (3.15) en términos de $R_0(k)$, obtenemos:

$$\tau(k) = \frac{m}{\hbar k} \left[2 \frac{r_0 R_0 + k r_0 R'_0}{1 + k^2 r_0^2 R_0^2} - 2r_0 \right]. \quad (3.25)$$

Y en términos de $R_B(k)$,

$$\tau(k) = \frac{m}{\hbar k} \left[2 \frac{r_0 R_B + r_0 B R_B^2 + k r_0 R'_B}{1 + 2B R_B + (B^2 + k^2 r_0^2) R_B^2} - 2r_0 \right]. \quad (3.26)$$

3.1.4 Tiempo de interacción

Dado a que se conoce la derivada del “phase shift” resonante, a través de la definición de tiempo de interacción (ecuación (2.30)), queda determinada su forma en términos de R_0 :

$$T_I(k) = 2 \frac{m}{\hbar k} \frac{r_0 R_0 + k r_0 R'_0}{1 + k^2 r_0^2 R_0^2}. \quad (3.27)$$

Y en términos de $R_B(k)$,

$$T_I(k) = 2 \frac{m}{\hbar k} \frac{r_0 R_B + r_0 B R_B^2 + k r_0 R'_B}{1 + 2B R_B + (B^2 + k^2 r_0^2) R_B^2}. \quad (3.28)$$

3.1.5 Probabilidad de atrapamiento

Otra función importante es la probabilidad de atrapamiento $P(k)$ (ecuación (2.33)), que mide la probabilidad de que una partícula quede atrapada temporalmente en la región de interacción [16, 40]. Esta probabilidad se queda dada en términos de $R_0(k)$ como:

$$P(k) = \frac{1}{r_0} \sum_{\lambda}^{\infty} |A_{\lambda}^B|^2 = \frac{2}{r_0} \frac{k}{R_0^{-2} + k^2 r_0^2} \frac{1}{R_B^2} \frac{dR_B}{dk}, \quad (3.29)$$

utilizando la identidad (3.9), se llega a:

$$P(k) = \frac{2}{r_0} \frac{k}{R_0^{-2} + k^2 r_0^2} \frac{1}{R_0^2} \frac{dR_0}{dk}. \quad (3.30)$$

Utilizando la ecuación (3.15), es posible escribir la probabilidad de atrapamiento en términos del recorrido efectivo:

$$P(k) = \frac{1}{r_0} \left(l(k) - \frac{\sin 2\theta_{res}}{k} \right). \quad (3.31)$$

3.2 Aproximación a un nivel

En el vecindario de una resonancia, cerca de la posición de los máximos del recorrido efectivo k^* , es razonable esperar que la función de reacción $R_B(k)$, con un valor en la frontera de B , pueda aproximarse adecuadamente mediante un solo término, es decir, el término λ tal que $k^* = k_{B_\lambda}$. De esta forma, se puede escribir como:

$$R_B(k) \approx R_B^{(1)}(k) = \frac{|\Phi_{B_\lambda}(r_0)|^2/r_0}{k_{B_\lambda}^2 - k^2}. \quad (3.32)$$

Este término se elige de tal manera que el parámetro de valor en la frontera B , definido por la derivada logarítmica de la eigenfunción de reacción, sea igual a la derivada logarítmica de la eigenfunción de reacción.

Por lo tanto, la eigenenergía es igual a la energía de resonancia de la función de dispersión. Esta aproximación es válida cerca de las resonancias [23], donde las contribuciones de los demás términos son insignificantes. Así, $R_B(k)$ se domina por el término resonante. Se sabe que la matriz S esta dada por:

$$S = -e^{-2ikr_0} \frac{1 + BR_B + ikr_0 R_B(k)}{1 + BR_B - ikr_0 R_B(k)} \quad (3.33)$$

donde los polos resonantes están dados por:

$$1 + BR_B - ikr_0 R_B(k) = 0 \quad \text{o} \quad R_B^{-1} + B - ikr_0 = 0. \quad (3.34)$$

Sustituyendo la aproximación a primer nivel (3.32), se tiene:

$$\frac{k_{B_\lambda}^2 - k^2}{|\Phi_{B_\lambda}(r_0)|^2/r_0} + B - ikr_0 = 0, \quad (3.35a)$$

$$k_{B_n}^2 - k^2 + \left(\frac{B}{r_0} - ik \right) |\Phi_{B_n}(r_0)|^2 = 0. \quad (3.35b)$$

Dado a que se buscan los polos resonantes, se espera que la forma de k sea $k_n = \kappa_n - i\eta_n$. Al sustituir la forma de k_n y separar la parte imaginaria y la real, se encuentra que las soluciones

de esta ecuación proporcionan una aproximación para las partes real e imaginaria de los polos de la matriz S :

$$\kappa_n^{(1)} = \sqrt{k_{B_n}^2 + \frac{B}{r_0} |\Phi_{B_n}(r_0)|^2 - \frac{|\Phi_{B_n}(r_0)|^4}{4}}, \quad (3.36a)$$

$$\eta_n^{(1)} = \frac{|\Phi_{B_n}(r_0)|^2}{2}. \quad (3.36b)$$

Estas expresiones son importante, ya que son congruentes con los resultados exactos como se vera en el capítulo 5, y se conocen como “aproximaciones a un nivel para los polos”. A su vez, utilizando la definición de la magnitud del polo, se obtiene:

$$|K_n^{(1)}|^2 \equiv \left(\kappa_n^{(1)}\right)^2 + \left(\eta_n^{(1)}\right)^2 = k_{B_\lambda}^2 + \frac{B}{r_0} |\Phi_{B_\lambda}(r_0)|^2 \quad (3.37)$$

3.2.1 Funciones de dispersión en la aproximación a un nivel

A continuación, es de interés determinar las funciones de dispersión en términos de la aproximación a un nivel, comenzando con la fase resonante $\phi(k)$ y el recorrido efectivo $l(k)$.

Retomando la forma de la matriz de reacción R_0 dada en la ecuación (3.15), se puede despejar la fase resonante como:

$$\theta_{Res}(k) = \arctan(kr_0 R_0(k)). \quad (3.38)$$

Utilizando nuevamente la identidad (3.8) y sustituyendo la ecuación (3.32) en (3.38), se obtiene la fase resonante a un nivel:

$$\theta_{Res}^{(1)}(k) = \arctan\left(\frac{k|\Phi_{B_\lambda}(r_0)|^2}{k_{B_\lambda}^2 - k^2 + \frac{B}{r_0} |\Phi_{B_\lambda}(r_0)|^2}\right). \quad (3.39)$$

A partir de la definición del recorrido efectivo (2.32), se puede obtener su aproximación a un nivel, dada por:

$$l^{(1)}(k) = \frac{2|\Phi_{B_\lambda}(r_0)|^2 \left(k_{B_\lambda}^2 + k^2 + \frac{B}{r_0} |\Phi_{B_\lambda}(r_0)|^2\right)}{\left(k_{B_\lambda}^2 - k^2 + \frac{B}{r_0} |\Phi_{B_\lambda}(r_0)|^2\right)^2 + (k|\Phi_{B_\lambda}(r_0)|^2)^2}. \quad (3.40)$$

Esta ecuación se puede simplificar utilizando $|K_n^{(1)}|^2$ y $\eta_n^{(1)}$, resultando en:

$$l^{(1)}(k) = \frac{4\eta_n^{(1)} \left(|K_n^{(1)}|^2 + k^2\right)}{\left(|K_n^{(1)}|^2 - k^2\right)^2 + \left(2\eta_n^{(1)} k\right)^2}. \quad (3.41)$$

Conociendo el recorrido efectivo, es posible determinar el resto de las funciones de dispersión en la aproximación a un nivel, ya que, como se ha demostrado en la forma general de las funciones de dispersión, estas pueden expresarse únicamente en términos de la fase resonante $\theta_{Res}(k)$ y del recorrido efectivo $l(k)$. Estas funciones de dispersión se pueden ver en la tabla 4.1 o de forma explícita en el apéndice B.

3.2.2 Posición de los máximos de las funciones de dispersión a un nivel

La búsqueda analítica de la posición de los máximos de las funciones de dispersión en su forma general plantea un desafío, ya que estos solo pueden resolverse de forma numérica debido a la complejidad de las expresiones involucradas. Sin embargo, utilizando las expresiones analíticas de un nivel, es posible determinar la ubicación relativa de estos máximos de manera comparativa. Tomando como referencia la posición del máximo del recorrido efectivo ($k^* = k_l$), se puede estimar si los máximos de otras funciones de dispersión se encuentran a la derecha o a la izquierda de este punto. Para un desarrollo explícito del como se obtienen los máximos de las funciones de dispersión a primer nivel, se recomienda revisar el apéndice B.

Una vez encontrados los máximos del recorrido efectivo a primer nivel (ver Apéndice B), siendo la solución que asegura ser tener un máximo:

$$\left(k_{(1)}^*\right)^2 = -|K_n^{(1)}|^2 + 2|K_n^{(1)}|\sqrt{|K_n^{(1)}|^2 - \left(\eta_n^{(1)}\right)^2}. \quad (3.42)$$

Utilizando la aproximación binomial, es posible encontrar cercanía con la parte real del polo $\kappa_n^{(1)}$, siendo que se tiene que los máximos del recorrido efectivo suceden en:

$$\left(k_{(1)}^*\right) \approx \kappa_n^{(1)} \left(1 - \frac{1}{8} \left(\frac{\eta_n^{(1)}}{\kappa_n^{(1)}}\right)\right), \quad (3.43)$$

donde conforme el segundo termino se vuelve pequeño para resonancias mayores, la cercanía entre $\kappa_n^{(1)}$ y $(k_{(1)}^*)$ es menor. Además, se encuentra una relación entre el valor máximo del recorrido efectivo a primer nivel y la parte imaginaria de los polos $\eta_n^{(1)}$, dada por:

$$l\left(k_{(1)}^*\right) \approx \frac{2}{\eta_n^{(1)}}. \quad (3.44)$$

Se utiliza la aproximación a un nivel para las funciones de tiempo de demora, tiempo de interacción, probabilidad de atrapamiento y sección transversal resonante. Para el tiempo de demora, el centro del pico se obtiene a partir de una expansión en serie de Taylor del

recorrido efectivo. Aplicando la ecuación (2.26), la posición de los máximos del tiempo de demora está dada por:

$$\left(k_{\tau}^{(1)}\right)^2 = (k^*)^2 + \frac{(2L - l(k^*))}{2} \left(\eta^{(1)}\right)^3. \quad (3.45)$$

Dado que $l(k^*) > 2r_0$, esto sugiere que los máximos de $\tau(k)$ se encuentran ligeramente a la izquierda de los máximos de $r_0(k)$.

De manera similar, la posición aproximada de los máximos del tiempo de interacción se obtiene mediante un proceso equivalente, resultando en la expresión:

$$\left(k_{T_I}^{(1)}\right)^2 = (k^*)^2 - \frac{l(k^*)}{2} \left(\eta^{(1)}\right)^3. \quad (3.46)$$

Como $l(k^*)$ es positivo, se puede inferir que los máximos del tiempo de interacción están a la izquierda y más alejados de los máximos del recorrido efectivo.

Del mismo modo, para la probabilidad de atrapamiento, los máximos se encuentran en:

$$\left(k_P^{(1)}\right)^2 \approx |K_n^{(1)}|^2, \quad (3.47)$$

lo que indica que los máximos de $P(k)$ suceden muy cerca de la magnitud del polo.

Para obtener la posición de los máximos del tiempo de permanencia, se realiza un desarrollo en serie de Taylor, pero esta vez de la función $P(k)$ y alrededor de $|K_n^{(1)}|$. Donde tras el desarrollo se obtiene que los máximos de $T_D^{(1)}(k)$, suceden en:

$$\left(k_{T_D}^{(1)}\right)^2 \approx \left(\kappa_n^{(1)}\right)^2, \quad (3.48)$$

La posición de los máximos de la sección transversal resonante se determina derivando directamente la expresión correspondiente en la tabla (4.1). El resultado es:

$$\left(k_{\sigma_\phi}^{(1)}\right)^2 \approx \left(k_\omega^{(1)}\right)^2. \quad (3.49)$$

A partir de estas expresiones, es posible encontrar reglas en el patrón de aparición de los máximos de las funciones de dispersión, siendo las reglas:

$$k_{\sigma_\phi}^{(1)} \approx k_\omega^{(1)}, \quad (3.50a)$$

$$k_{T_I}^{(1)} < k_\tau^{(1)} < k_{(1)}^*, \quad (3.50b)$$

$$k_{T_D}^{(1)} \approx \kappa_n^{(1)}, \quad (3.50c)$$

$$k_P^{(1)} \approx |K_n^{(1)}|. \quad (3.50d)$$

Estas reglas de aparición serán comprobadas numéricamente. Cabe destacar que al estar tratando con una aproximación, estas reglas están incompletas en esta forma, ya que no determinan completamente la secuencia de aparición. Sin embargo, considerando los resultados numéricos presentados en el capítulo 5, es posible completar el patrón de aparición aproximado, siendo este:

$$k_{\omega}^{(1)} \approx k_{\sigma_{\phi}}^{(1)} \approx k_{T_I}^{(1)} < k_{\tau}^{(1)} < k_{(1)}^* \approx \kappa_n^{(1)} \approx k_{T_D}^{(1)} < |K_n^{(1)}| \approx k_P^{(1)}. \quad (3.51)$$

Capítulo 4

Aplicación al modelo de pozo cuadrado central

El pozo cuadrado es fundamental en el estudio de la dispersión y las resonancias en mecánica cuántica. Su simplicidad matemática lo convierte en un modelo utilizado tanto pedagógicamente, como en aplicaciones físicas [20, 26, 41]. En particular, el modelo de pozo cuadrado central, o pozo de un solo canal [41], es un caso que ejemplifica cómo las partículas pueden interactuar con una región confinada y escapar a través de un solo canal. Este sistema permite un análisis detallado de los estados cuasi-ligados y resonantes, y cómo el potencial afecta la fase de la onda dispersa, generando picos en la sección transversal de dispersión.

A continuación, se desarrolla el tratamiento del pozo cuadrado central y se aplica la teoría de dispersión a este sistema para obtener las funciones y el coeficiente de dispersión. Este tipo de potencial es una aproximación útil para describir sistemas confinados donde una partícula está restringida en una región finita, pero con acceso a estados de dispersión en el otro extremo.

El modelo que se analiza está descrito por el potencial:

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{si } x < 0, \\ -|V_0| & \text{si } a \leq x \leq b, \\ 0 & \text{si } b < x, \end{cases} \quad (4.1)$$

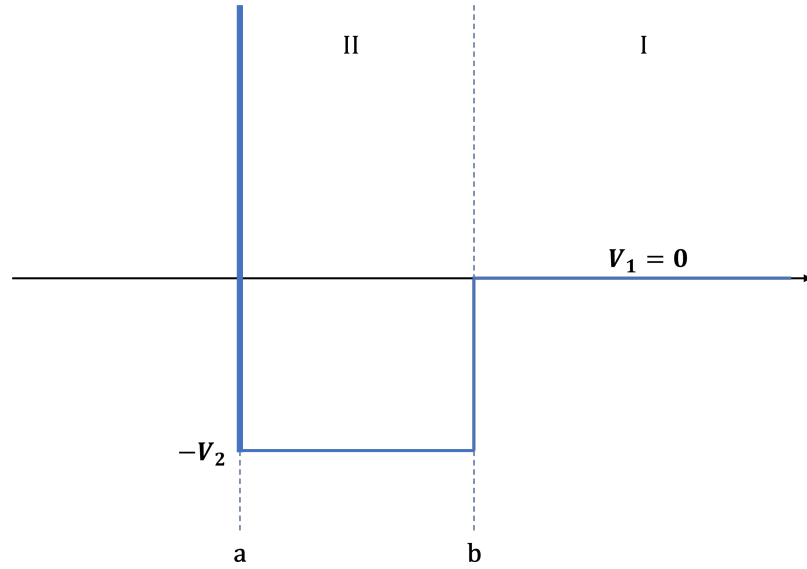


Figura 4.1: Descripción gráfica de la configuración del sistema.

Se restringe el estudio a los valores de energía que cumplen $-|V_0| < V_1 < E$, para así definir los números de onda en las diferentes regiones:

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E, \quad q^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (|V_0| + E), \quad (4.2)$$

donde k es el número de onda fuera del pozo y q es el número de onda dentro del pozo. Para simplificar los cálculos, se considera $m/\hbar^2 = 1$ y $a = 0, b = r_0$.

Resolviendo la ecuación de Schrödinger en ambas regiones, se obtiene la siguiente expresión para la función de onda:

$$\psi(x) = \begin{cases} A \sin(qx) & \text{si } 0 < x \leq r_0, \\ e^{-ikx} + S e^{ikx} & \text{si } r_0 < x, \end{cases} \quad (4.3)$$

donde r_0 es el ancho del pozo y S es el coeficiente de dispersión. En la región externa ($x > r_0$), la onda consiste en una superposición de una onda incidente y una onda reflejada. El número de onda q en el pozo está relacionado con el número de onda fuera del pozo mediante la siguiente expresión:

$$q^2 r_0^2 = k^2 r_0^2 + \alpha^2, \quad \text{donde } \alpha = \sqrt{2|V_0|} r_0. \quad (4.4)$$

La continuidad de la derivada logarítmica de la función de onda en $x = r_0$ nos permite determinar el valor del coeficiente S :

$$\left. \frac{\psi'_{\text{int}}(x)}{\psi_{\text{int}}(x)} \right|_{r_0} = \left. \frac{\psi'_{\text{ext}}(x)}{\psi_{\text{ext}}(x)} \right|_{r_0}. \quad (4.5)$$

Utilizando esta condición, el coeficiente S se expresa como:

$$S = -e^{2i\theta} = -e^{-2ikL} \cdot \frac{q + ik \tan(qr_0)}{q - ik \tan(qr_0)}. \quad (4.6)$$

La continuidad de las derivadas de la función de onda en $x = r_0$ también nos lleva a la siguiente relación entre las ondas en la región interna y externa:

$$qr_0 \cot qr_0 = kr_0 \cot(kr_0 + \theta). \quad (4.7)$$

Se define $\delta(k)$ como:

$$\delta(k) \equiv qr_0. \quad (4.8)$$

Utilizando esta definición y expresando $\tan(\delta)$ en su forma exponencial, obtenemos el valor del “phase shift” del sistema:

$$\theta(k) = \arctan\left(\frac{k}{q} \tan(\delta)\right) - kr_0. \quad (4.9)$$

La parte resonante del “phase shift”, que ahora denominaremos por $\phi(k)$, está dada por:

$$\phi(k) = \arctan\left(\frac{k}{q} \tan(\delta)\right). \quad (4.10)$$

La constante de normalización A en la región interna se obtiene a partir de las condiciones de frontera y está dada por:

$$A = -2ie^{i\theta} \frac{k \cos(\phi)}{q \cos(\delta)}. \quad (4.11)$$

Finalmente, se escoge la condición de frontera más general para $B(k)$ tal que:

$$r_0 \left. \frac{\psi'_{\text{int}}}{\psi_{\text{int}}} \right|_{r_0} = B(k) = r_0 \left. \frac{\psi'_{\text{ext}}(k, r_0)}{\psi_{\text{ext}}(k, r_0)} \right|_{r_0} = kr_0 \cot \phi. \quad (4.12)$$

Esta elección asegura que las condiciones de frontera de la función de onda interna y externa se alineen adecuadamente en el límite $x = r_0$, garantizando la continuidad tanto de la función de onda como de su derivada en todo el sistema.

4.1 Funciones de dispersión

En esta sección, presentamos las funciones de dispersión relevantes junto con su aproximación a bajas energías. Estas funciones permiten describir fenómenos clave como la sección transversal, el tiempo de demora y la probabilidad de atrapamiento en términos del “phase shift” resonante y del recorrido efectivo.

4.1.1 Forma Exacta

La sección transversal resonante se puede escribir sustituyendo el “phase shift resonante” $\phi(k)$ (4.10) en la ecuación correspondiente (2.18):

$$\sigma_\phi(k) = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \left(\arctan \left(\frac{k}{q} \tan(\delta) \right) \right). \quad (4.13)$$

Para determinar el tiempo de demora y el tiempo de interacción, es necesario conocer el recorrido efectivo $l(k)$ (2.32), el cual se define como dos veces la derivada de $\phi(k)$ con respecto a k . Físicamente, el recorrido efectivo $r_0(k)$ representa la distancia que recorre la partícula en presencia del potencial. Durante una resonancia, este recorrido es mayor que dos veces el ancho del potencial, lo cual corresponde a la distancia que recorrería la partícula si no hubiera potencial. Esta propiedad es crucial para entender cómo las partículas interactúan dentro de la región de dispersión.

Al realizar la derivada de $\phi(k)$, se obtiene el siguiente resultado para el recorrido efectivo:

$$l(k) = \frac{2q}{q^2 + k^2 \tan^2(\delta)} \left(\left(1 - \frac{k^2}{q^2} \right) \tan(\delta) + \frac{k^2 r_0}{q} \sec^2(\delta) \right). \quad (4.14)$$

Con esta expresión, podemos utilizar las ecuaciones (2.26) y (2.30) para obtener las formas del tiempo de demora y del tiempo de interacción. Estas se pueden expresar de la siguiente manera:

$$\tau(k) = \frac{2m}{\hbar k} \frac{d\theta}{dk} = \frac{m}{\hbar k} (l(k) - 2r_0), \quad (4.15)$$

$$T_I(k) = \frac{2m}{\hbar k} \frac{d\phi}{dk} = \frac{m}{\hbar k} \cdot l(k). \quad (4.16)$$

La probabilidad de atrapamiento $P(E)$ se calcula integrando la función de onda dentro de la región de interacción. De acuerdo con (2.33) y (2.34), podemos relacionar el tiempo de permanencia $T_D(k)$ con la probabilidad de atrapamiento $P(k)$. Reescribiendo el tiempo de

permanencia en términos de la probabilidad, obtenemos:

$$T_D(k) = \frac{r_0 P(k)}{j_{\text{in}}}, \quad (4.17)$$

donde la corriente de onda incidente j_{in} está dada por $j_{\text{in}} = \frac{\hbar k}{m}$. La probabilidad de atrapamiento, resultado de la integración de la función de onda en la región de interacción, es:

$$P(k) = \frac{k^2 \cos^2(\phi)}{q^3 r_0 \cos^2(\delta)} (2\delta - \sin(2\delta)), \quad (4.18)$$

la cual también puede escribirse en términos del recorrido efectivo $r_0(k)$, como se muestra en la ecuación (3.31).

Al sustituir esta expresión en (2.34) y promediar sobre el ancho del pozo de potencial, obtenemos el tiempo de interacción promedio del sistema $T_I(k)$, como se muestra en (4.16). El promedio del tiempo de permanencia elimina el término oscilatorio, ya que las oscilaciones rápidas no contribuyen de manera significativa al tiempo promedio en este tipo de sistemas. Como se puede observar, todas las funciones de dispersión se pueden escribir en términos del recorrido efectivo $l(k)$ y el “phase shift” resonante $\phi(k)$. Esto no solo simplifica la interpretación del comportamiento del sistema, sino que también permite comparativas entre funciones de dispersión. Conociendo estas dos funciones, se puede obtener toda la información relevante sobre las propiedades de dispersión del sistema.

4.1.2 Forma a bajas energías

Al desarrollar las funciones de dispersión del sistema a bajas energías y cerca de $k = 0$, se obtiene:

$$\delta(k) = \delta(0) + \left(\frac{d\delta(k)}{dk} \right) \Big|_{k=0} k + \left(\frac{d^2\delta(k)}{dk^2} \right) \Big|_{k=0} \frac{k^2}{2} + O(k^3)$$

donde:

$$\delta(0) \equiv \alpha = \sqrt{2|V_0|} r_0, \quad \left(\frac{d\delta(k)}{dk} \right) \Big|_{k=0} \equiv \delta'_0 = 0, \quad \left(\frac{d^2\delta(k)}{dk^2} \right) \Big|_{k=0} \equiv \delta''_0 = \frac{r_0}{\sqrt{2|V_0|}}$$

La sección transversal resonante adquiere la forma:

$$\sigma_{\phi_0} = 4\pi \frac{\tan^2 \alpha}{2|V_0|} \quad \text{si } \alpha \neq \pi/2 \pmod{\pi}, \quad (4.19)$$

$$\sigma_{\phi_0} = 4\pi \lim_{k \rightarrow 0} \left(\frac{1}{q^2 \cot^2 \delta + k^2} \right) \rightarrow \infty \quad \text{si } \alpha = \pi/2 \pmod{\pi}. \quad (4.20)$$

Estas expresiones muestran que, si el parámetro α es un múltiplo impar de $\pi/2$, la sección transversal diverge en el límite cuando $k \rightarrow 0$.

El recorrido efectivo $l(k)$, por su parte, se define como dos veces la derivada de $\phi(k)$ respecto de k . Para bajas energías, esta cantidad está dada por:

$$l(k \rightarrow 0) = 2 \frac{\tan \alpha}{\sqrt{2|V_0|}} \quad \text{si } \alpha \neq \pi/2 \pmod{\pi}, \quad (4.21)$$

$$l(k \rightarrow 0) = r_0 \quad \text{si } \alpha = \pi/2 \pmod{\pi}. \quad (4.22)$$

El tiempo de demora, el cual mide el retraso en la fase de la onda dispersada, se puede obtener a partir del recorrido efectivo. En el límite de bajas energías, el tiempo de demora está dado por:

$$\tau_0 = \lim_{k \rightarrow 0} \left(\frac{m}{\hbar k} \right) [l_0 - 2r_0],$$

con un comportamiento que diverge si $l_0 < 2r_0$ o tiende a infinito si $l_0 \geq 2r_0$.

En cuanto al tiempo de interacción, que mide el tiempo promedio durante el cual la partícula interactúa con la región de potencial, se puede expresar como:

$$T_{I_0} = \lim_{k \rightarrow 0} \left(\frac{1}{k} \right) \cdot l_0,$$

y su comportamiento en $k \rightarrow 0$ depende de l_0 , divergiendo si $l_0 < 0$, tendiendo a infinito si $l_0 > 0$, o siendo cero si $l_0 = 0$.

La probabilidad de atrapamiento $P(k)$, que mide la fracción de la partícula que queda atrapada en la región de interacción, se comporta de la siguiente manera cerca de $k = 0$:

$$P_0 = 0 \quad \text{si } \alpha \neq \pi/2 \pmod{\pi}, \quad (4.23)$$

$$P_0 = 2 \quad \text{si } \alpha = \pi/2 \pmod{\pi}. \quad (4.24)$$

Finalmente, el tiempo de permanencia, relacionado con el tiempo que la partícula pasa en la región de interacción antes de ser dispersada, está dado por:

$$T_{D_0} = \lim_{k \rightarrow 0} \left(\frac{r_0 m}{\hbar k} \right) \cdot P_0, \quad (4.25)$$

y su comportamiento también está condicionado por el valor de α , siendo cero si $\alpha \neq \pi/2 \pmod{\pi}$, o tendiendo a infinito si $\alpha = \pi/2 \pmod{\pi}$.

Como se puede observar, todas las funciones de dispersión a bajas energías se relacionan de manera directa con el recorrido efectivo $r_0(k)$ y el parámetro α . Para un desarrollo completo de estas expresiones y sus aproximaciones a bajas energías, se recomienda consultar el Apéndice A, donde se presentan las derivadas y las aproximaciones necesarias.

4.2 Matriz de reacción del modelo

El problema asociado al modelo de dispersión,

$$(H_0 + V(x))\psi(x) = E\psi(x) \quad (4.26)$$

en la región $0 \leq x \leq \infty$ está dado por:

$$(H_0 + V(x))\Phi_{B,\lambda} = E\Phi_{B,\lambda}, \quad (4.27)$$

en $0 \leq x \leq r_0$, sujeto a las condiciones de frontera $\Phi_{B,\lambda}(0) = 0$, $r_0\Phi'_{B,\lambda}(r_0)/\Phi_{B,\lambda}(r_0) = B$. En la región $x \leq r_0$, las soluciones $\{\Phi_{B,\lambda}(x), \lambda = 1, 2, \dots\}$, que son las eigenfunciones de reacción, se utilizan como base para expandir la función de onda dispersiva $\psi(x)$ y las eigenenergías de reacción $E_{B,\lambda}$, para obtener $R_B(k)$. Comenzando por expresar la ecuación de Schrödinger en la región del pozo:

$$(H_0 + V(x))\Phi_{B,\lambda} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - |V_0|\right) \Phi_{B,\lambda} = E_{B,\lambda} \Phi_{B,\lambda} \quad (4.28a)$$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Phi_{B,\lambda}}{dx^2} = (E_{B,\lambda} + |V_0|) \Phi_{B,\lambda} = \varepsilon_{B,\lambda} \Phi_{B,\lambda}. \quad (4.28b)$$

donde $(E_{B,\lambda} + |V_0|) = \varepsilon_{B,\lambda} \equiv \frac{\hbar^2}{2m} p_{B,\lambda}^2$, o bien $p_{B,\lambda}^2 = k_{B,\lambda}^2 + \frac{2m}{\hbar^2} |V_0|$. Esta última ecuación (4.28b) se asemeja a la ecuación de onda de partícula libre, con la diferencia de que esta función de onda está sujeta a la condición de frontera B . Las soluciones de (4.28b) son ondas estacionarias:

$$\Phi_{B,\lambda} = N_B \sin(p_{B,\lambda} x), \quad (4.29)$$

con el espectro discreto:

$$p_{B,\lambda} = \frac{B}{r_0} \tan(p_{B,\lambda} r_0) \quad (4.30)$$

Esta ecuación es trascendental, y los eigenvalores obtenidos varían al tomar diferentes valores de B . Una vez conocidas las eigenfunciones y eigenvalores, se sustituyen en la matriz de reacción:

$$R_B(k) = \sum_{\lambda=1}^{\infty} \frac{1}{r_0} \frac{|\Phi_{B,\lambda}(r_0)|^2}{k_{B,\lambda}^2 - k^2} = \sum_{\lambda=1}^{\infty} \frac{1}{r_0} \frac{N_B^2 \sin^2(p_{B,\lambda} r_0)}{p_{B,\lambda}^2 - 2|V_0| - k^2} \quad (4.31)$$

donde N_B es una constante de normalización para las eigenfunciones, dada por:

$$N_B^2 = \frac{2/r_0}{1 - \frac{\sin(2p_{B,\lambda}r_0)}{2p_{B,\lambda}r_0}}. \quad (4.32)$$

Como caso particular, si se toma $B = 0$, entonces $q_{B,\lambda}r_0 = \pi(\lambda - \frac{1}{2})$, obteniendo así la expansión en fracciones parciales:

$$R_0(k) = \sum_{\lambda=1}^{\infty} \frac{4}{\pi^2 \left(\lambda - \frac{1}{2}\right)^2 - q^2 r_0^2} = \frac{\tan(qr_0)}{qr_0}. \quad (4.33)$$

Al conocer la forma de la matriz de reacción del modelo, se determinan todas las funciones de dispersión a primer nivel, las cuales se detallan en el capítulo 3. En la tabla 4.1 se presenta un resumen de todas las formas de las funciones de dispersión.

Función	Forma Exacta	Forma a Bajas Energías	Aproximación a un Nivel
Sección Transversal	$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \theta$ $\sigma_\phi = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \phi$	$\sigma_0 = 2\pi r_0^2$ $\sigma_{\phi_0} = 4\pi \frac{\tan^2 \alpha}{2 V_0 }$ $\sigma_{\phi_0} = \infty \text{ (si } \alpha = \pi/2 \text{ mod } \pi)$	$\sigma_\phi^{(1)} = 4\pi \frac{4(\eta_n^{(1)})^2}{(K_n^{(1)} ^2 - k^2 + 4k^2 (\eta_n^{(1)})^2)}$
Recorrido Efectivo	$l(k) = \frac{2q}{q^2 + k^2 \tan^2(\delta)} \left(\left(1 - \frac{k^2}{q^2} \right) \tan(\delta) + \frac{k^2 r_0}{q} \sec^2(\delta) \right)$	$l_0 = 2 \frac{\tan \alpha}{\sqrt{2 V_0 }} \text{ (si } \alpha \neq \pi/2 \text{ mod } \pi)$ $l_0 = r_0 \text{ (si } \alpha = \pi/2 \text{ mod } \pi)$	$l^{(1)}(k) = \frac{4\eta_n^{(1)} (K_n^{(1)} ^2 + k^2)}{(K_n^{(1)} ^2 - k^2)^2 + (2\eta_n^{(1)} k)^2}$
Tiempo de Demora	$\tau(k) = \frac{m}{\hbar k} [l(k) - 2r_0]$	$\tau_0 \rightarrow -\infty \text{ (si } l_0 < 2r_0)$ $\tau_0 \rightarrow \infty \text{ (si } l_0 \geq 2r_0)$	$\tau^{(1)}(k) = \frac{m}{\hbar k} \left[\frac{4\eta_n^{(1)} (K_n^{(1)} ^2 + k^2)}{(K_n^{(1)} ^2 - k^2)^2 + (2\eta_n^{(1)} k)^2} - 2r_0 \right]$
Probabilidad de Atrapamiento	$P(k) = \frac{1}{r_0} \left(l(k) - \frac{\sin 2\phi}{k} \right)$	$P_0 = 0 \text{ (si } \alpha \neq \pi/2 \text{ mod } \pi)$ $P_0 = 2 \text{ (si } \alpha = \pi/2 \text{ mod } \pi)$	$P^{(1)}(k) = \frac{8\eta k^2}{r_0 \left((K_n^{(1)} ^2 - k^2)^2 + 4k^2 (\eta_n^{(1)})^2 \right)}$
Tiempo de Permanencia	$T_D(k) = \frac{r_0 m}{\hbar k} \cdot P(k)$	$T_{D_0} = 0 \text{ (si } \alpha \neq \pi/2 \text{ mod } \pi)$ $T_{D_0} \rightarrow \infty \text{ (si } \alpha = \pi/2 \text{ mod } \pi)$	$T_D^{(1)}(k) = \frac{8m\eta k}{\hbar \left((K_n^{(1)} ^2 - k^2)^2 + 4k^2 (\eta_n^{(1)})^2 \right)}$
Tiempo de Interacción	$T_I(k) = \frac{m}{\hbar k} \cdot l(k)$	$T_{I_0} \rightarrow -\infty \text{ (si } l_0 < 0)$ $T_{I_0} \rightarrow \infty \text{ (si } l_0 > 0)$ $T_{I_0} \rightarrow 0 \text{ (si } l_0 = 0)$	$T_I^{(1)}(k) = \frac{m}{\hbar k} \cdot \frac{4\eta_n^{(1)} (K_n^{(1)} ^2 + k^2)}{(K_n^{(1)} ^2 - k^2)^2 + (2\eta_n^{(1)} k)^2}$

Tabla 4.1: Funciones de Dispersión en su Forma Exacta, a Bajas Energías, y en la Aproximación a un Nivel

Capítulo 5

Resultados

5.1 Polos de la matriz $S(k)$ y máximos de las funciones de dispersión

A continuación se presentan los resultados obtenidos de las funciones de dispersión y del coeficiente S .

5.1.1 Criterios de selección

Al examinar la ecuación (4.10), observamos que cuando k tiende a cero, el comportamiento de ϕ también tiende a ese valor. Sin embargo, se presenta un comportamiento límite cuando el argumento $\sqrt{2|V_0|r_0} = \alpha$ es un múltiplo impar de $\pi/2$. Este comportamiento límite está relacionado con la aparición de nuevos estados acotados [25]. Por lo tanto, los casos representativos deben incluir valores de α cercanos e iguales a múltiplos impares y pares de $\pi/2$. A este parámetro α lo denominaremos “fuerza del pozo de potencial”.

La siguiente región de interés corresponde a aquella en la que surgen los estados acotados del sistema. Estos estados aparecen cuando la energía es menor a la necesaria para que la onda se comporte como una partícula libre ($E < 0$). Al resolver las ecuaciones de Schrödinger para esta región, obtenemos la siguiente expresión:

$$qr_0 \cot(qr_0) = -\kappa r_0 = -\sqrt{\alpha^2 - (qr_0)^2}, \quad (5.1)$$

Esta ecuación permite determinar los estados acotados del sistema. Al elegir $\kappa = 0$, que representa la condición mínima para la aparición de un estado acotado, encontramos que esto ocurre cuando α es un múltiplo impar de $\pi/2$. Este resultado da un sentido físico al primer criterio mencionado anteriormente para la selección de casos. El primer estado acotado aparece cuando $\alpha = \alpha_1 = \pi/2$, el segundo cuando $\alpha = \alpha_2 = 3\pi/2$, y así sucesivamente.

De manera similar, cuando $\alpha = \alpha_n^+ = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} (\alpha_n + \epsilon)$, se tienen exactamente $n = \frac{\alpha_n}{\pi} + \frac{1}{2}$ estados acotados, donde el último, es decir, el n -ésimo estado, corresponde a un estado acotado con energía cero. Para $\alpha_n \leq \alpha \leq \alpha_{n+1}$, existe un número $Q_\alpha \equiv \frac{\alpha}{\pi} + \frac{1}{2}$, tal que $n \leq Q_\alpha \leq n + 1$. La parte entera de Q_α indica el número exacto de estados acotados, mientras que su parte fraccionaria, f , describe la profundidad del estado acotado superior. Por ejemplo, si f es cercano a 0, el n -ésimo nivel es muy superficial; si f está cerca de 1, el pozo está casi lo suficientemente profundo como para confinar el siguiente estado acotado. Nos referiremos a Q_α como el "número de llenado", dado por:

$$Q_\alpha \equiv \frac{\alpha}{\pi} + \frac{1}{2} = n + f, \quad (5.2)$$

donde $n = 0, 1, 2, \dots$, y $0 < f \leq 1$, dependiendo de la fuerza del pozo α . Este parámetro Q_α define el segundo criterio relacionado con el número de estados acotados presentes en el sistema.

El tercer criterio se aplica cuando se incrementa la profundidad del pozo de potencial, lo que implica valores mayores de α . A medida que el número de estados acotados aumenta, las oscilaciones en la función de onda dentro del pozo se vuelven más frecuentes. Estas oscilaciones incrementan el número de nodos en la función de onda, lo cual genera resonancias más aisladas. En el caso de los estados resonantes, la función de onda incidente debe coincidir con mayor precisión, ya que un pequeño desfase en la energía o la fase impediría que se produzca el estado resonante.

5.1.2 Selección de casos

El primer criterio establece que se deben estudiar casos en los que el valor de α sea igual o cercano a múltiplos impares y pares de $\pi/2$, añadiendo además casos intermedios entre estos múltiplos. Esto permite observar el comportamiento del sistema tanto en los límites cercanos como alejados de estos valores característicos.

El segundo criterio determina cuántos estados acotados estarán presentes en el sistema.

Para ello, se seleccionan casos con un número reducido de estados acotados y se comparan con valores de Q_α que permiten tener un número mayor de estados acotados.

El tercer criterio nos lleva a considerar casos con valores más grandes de Q_α , lo que permite observar resonancias más aisladas. Siguiendo estos criterios, se eligieron los 16 casos que se presentan en la siguiente tabla:

Caso	$\alpha[\pi/2]$	Q_α	$\tan \alpha$
1	7.00	4.00	∞
2	6.96	3.98	15.895
3	7.04	4.02	-15.895
4	8.00	4.50	0
5	7.96	4.48	-0.063
6	8.04	4.52	0.063
7	7.50	4.25	-1
8	8.50	4.75	1
9	79.00	40.00	∞
10	78.96	39.98	15.895
11	79.04	40.02	-15.895
12	80.00	40.50	0
13	79.96	40.48	-0.063
14	80.04	40.52	0.063
15	79.50	40.25	-1
16	80.50	40.75	1

Tabla 5.1: Casos seleccionados, el valor del ancho del pozo r_0 es 2.5 para todos los casos, el valor de α en múltiplos de $\pi/2$, el valor de Q_α y el valor de $\tan \alpha$.

Establecidos los casos, se grafica el “phase shift” resonante para cada caso, con el propósito de anticipar el comportamiento que tendrán las funciones de dispersión y notar si existe una región de mayor interés, como lo es la región a bajas energías, que matemática y físicamente ya se observó que presenta un comportamiento distinto si es que se está por un valor crítico en α . Como se esperaba, la región que tiene el comportamiento más irregular, visualmente, es la región a bajas energías y en los casos donde el valor de $\alpha[\pi/2]$ es cercano o igual a un múltiplo impar.

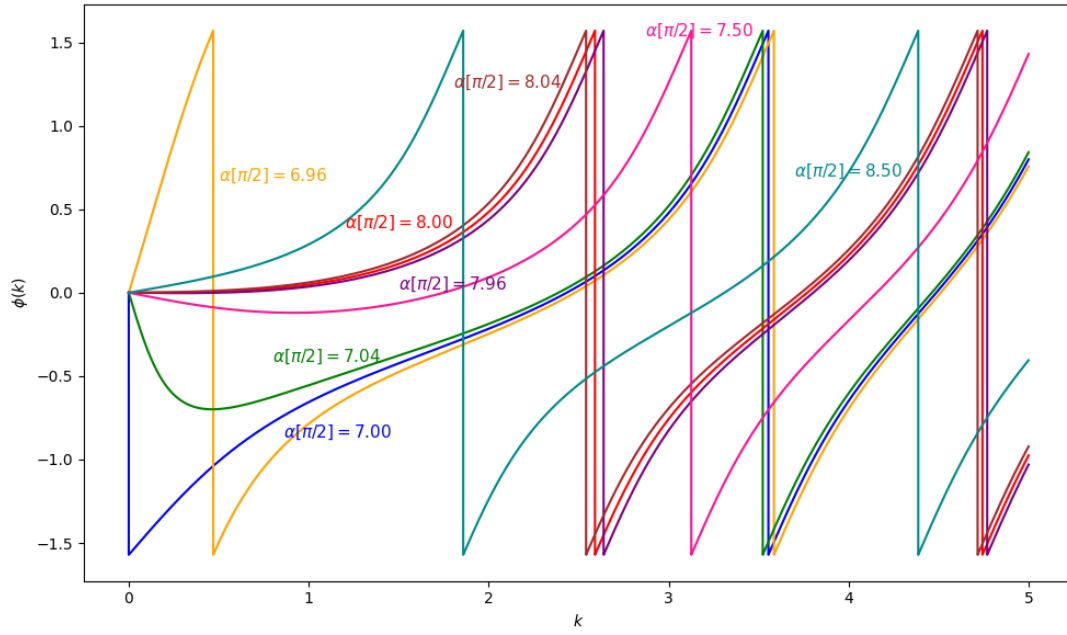


Figura 5.1: Grafica del “phase shift” resonante ϕ , para los primeros ocho casos.

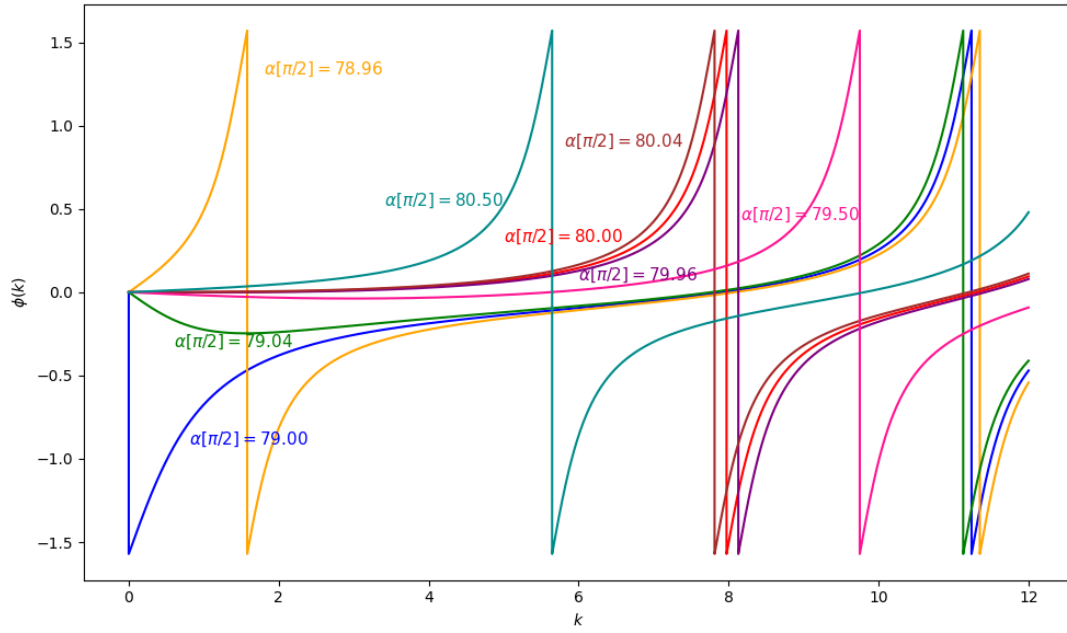


Figura 5.2: Grafica del “phase shift” resonante ϕ , para los últimos ocho casos.

El comportamiento de ϕ es el esperado para todos los casos, obedeciendo la forma del valor crítico para esta función descrita en las ecuaciones (A.10) y (A.11). La inspección a las figuras (5.1) y (5.2), sugiere que los casos 4 a 8 y 12 a 16 son cualitativamente iguales, dado a que su comportamiento conforme $k \rightarrow 0$ es el mismo, teniendo una pendiente positiva constante. La razón de este comportamiento está dado por la ecuación (A.10), ya que la $\tan \alpha$ es un valor pequeño.

5.1.3 Gráficas de los casos de estudio

A continuación, se presentan los resultados gráficos de las simulaciones. Las gráficas muestran las funciones de dispersión (recorrido efectivo, tiempo de demora, probabilidad de atrapamiento, etc.), así como las cantidades κ_n y k_ω correspondientes a los polos de S en el espacio k . Se utiliza una línea horizontal punteada de color gris para señalar la distancia $2L$, la cual está relacionada con el recorrido que realiza la partícula en ausencia del potencial. Además, se emplea una línea vertical verde para indicar la posición de los máximos de $l(k)$, un punto y línea vertical gris para la posición de la parte real del polo κ_n , y un cuadrado con línea vertical marrón para la posición de k_ω . El eje y no representa una cantidad específica, ya que su significado varía dependiendo de la función de dispersión. A partir de la observación de todas las gráficas, se sugiere un comportamiento regular de las funciones de dispersión cuando estas se encuentran cerca de un polo resonante alejado de $k = 0$. En las gráficas, se pueden destacar los siguientes puntos:

1. La parte real de los polos resonantes aparece ligeramente antes de que $\phi(k)$ alcance el valor de $\pi/2$. La magnitud del polo resonante se encuentra más cercana al valor de k para el cual $\phi = \pi/2$.
2. El tiempo de demora $\tau(k)$ es positivo en la vecindad de un polo resonante.
3. Relacionado con el tiempo de demora positivo, el recorrido efectivo $l(k)$ es mayor a $2L$ en la vecindad de un polo resonante.
4. El tiempo de permanencia $T_D(k)$ siempre es positivo.

Para corroborar que las graficas son correctas, se comparan sus comportamientos cerca del origen con los valores límite de las funciones de dispersión:

Caso	$\alpha[\pi/2]$	l_0	τ_0	T_{I_0}	T_{D_0}	P_0	σ_{ϕ_0}
1	7.00	2.5	$-\infty$	∞	∞	2	∞
2	6.96	7.26924	∞	∞	0	0	332.0151
3	7.04	-7.18664	$-\infty$	$-\infty$	0	0	324.51218
4	8.00	0	$-\infty$	0	0	0	0
5	7.96	-0.02516	$-\infty$	$-\infty$	0	0	0.00398
6	8.04	0.02491	$-\infty$	∞	0	0	0.00390
7	7.50	-0.42441	$-\infty$	$-\infty$	0	0	1.13177
8	8.50	0.37448	$-\infty$	∞	0	0	0.88114
9	79.00	2.5	$-\infty$	∞	∞	2	∞
10	78.96	0.64075	$-\infty$	∞	0	0	2.57966
11	79.04	-0.64011	$-\infty$	$-\infty$	0	0	2.57444
12	80.00	0	$-\infty$	0	0	0	0
13	79.96	-0.00251	$-\infty$	$-\infty$	0	0	0.00004
14	80.04	0.0025	$-\infty$	∞	0	0	0.00004
15	79.50	-0.04004	$-\infty$	$-\infty$	0	0	0.01007
16	80.50	0.03954	$-\infty$	∞	0	0	0.00982

Tabla 5.2: Valores de las funciones de dispersión conforme en el límite $k \rightarrow 0$, obtenidos de las ecuaciones en la tabla 4.1 y el comportamiento descrito en el apéndice A. (Los valores de la sección transversal son dos veces lo esperado debido a un factor de escala que multiplica la grafica por dos.)

Con el objetivo de proporcionar una descripción completa, se han añadido gráficas complementarias para aquellas funciones de dispersión cuyo comportamiento excede los límites establecidos en el eje y pero permanece finito. Por otro lado, si no se incluyen gráficas adicionales, se asume que las funciones divergen hacia $\pm\infty$, según lo indicado en la clasificación de la tabla 5.2.

El primer caso de estudio corresponde a un valor crítico según los criterios de selección. El comportamiento de las funciones de dispersión en el límite $k \rightarrow 0$ sigue la descripción proporcionada en la tabla (4.1). Las funciones de dispersión mostradas son: recorrido efectivo (verde), tiempo de demora (azul), tiempo de interacción (violeta), tiempo de permanencia (violeta punteado), probabilidad de atrapamiento (amarillo) y sección transversal resonante (rojo). Cabe destacar la gran cercanía entre los máximos locales de las funciones de dispersión, así como la amplitud de los picos que presentan. La interpretación física de que

los tiempos de interacción (línea violeta) y tiempo de permanencia (línea violeta punteada) tienden a infinito conforme k tiende a cero puede asociarse con la creación de un estado acotado. Este comportamiento también se refleja en que la probabilidad de atrapamiento es diferente de cero.

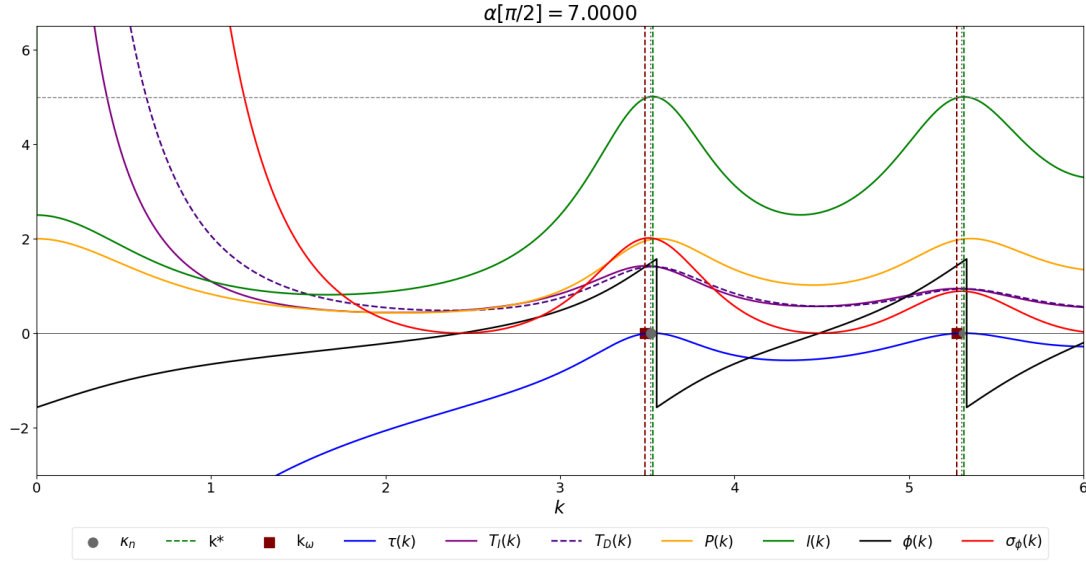


Figura 5.3: Gráficas del caso 1, donde el valor de α es un múltiplo impar de $\pi/2$. El primer polo resonante ocurre lejos del origen. Además, se observa que el comportamiento de las funciones de dispersión sigue lo descrito para los casos críticos en la tabla (4.1). Las funciones de dispersión utilizan una paleta de colores consistente en todas las gráficas, siendo la línea vertical verde la que indica la posición de los máximos de $l(k)$, la cual es muy cercana a la posición de la parte real del polo.

En la siguiente figura se realizó un acercamiento a las funciones de dispersión para la primera resonancia, con el fin de observar mejor el patrón de aparición de los máximos y las partes de los polos. Se puede observar que la cantidad más pequeña para este caso es k_ω , seguida del máximo del tiempo de interacción. En la parte intermedia, se nota que los máximos de la sección transversal resonante, el tiempo de demora, el tiempo de permanencia y el recorrido efectivo son los más cercanos a la parte real del polo. Los máximos de estas tres últimas funciones ocurren casi en la misma posición. En la parte derecha de la gráfica, se observa que la magnitud del polo es cercana al máximo de la probabilidad de atrapamiento y coincide con el punto en el que el “phase shift” alcanza $\pi/2$.

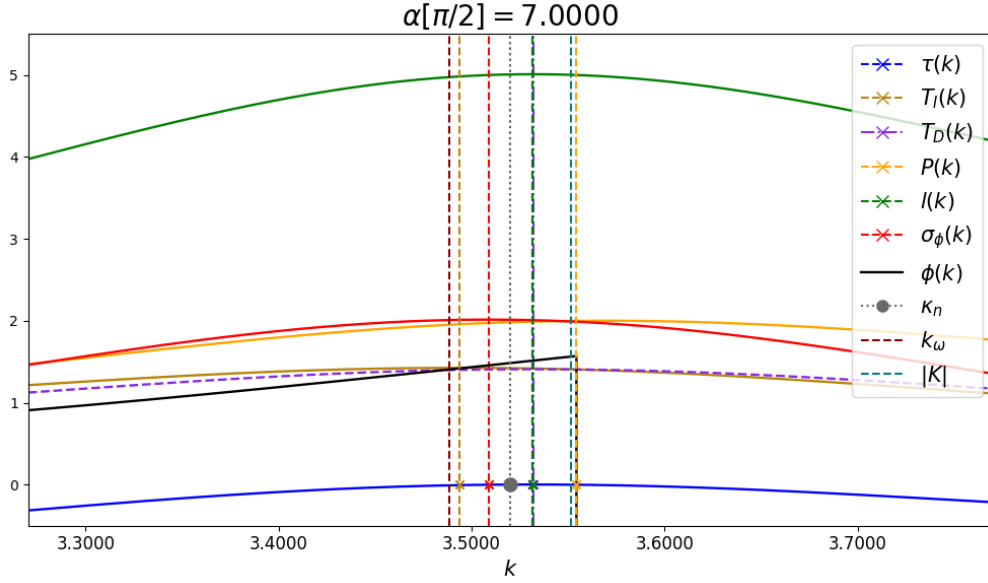


Figura 5.4: Acercamiento escalado a los máximos de las funciones de dispersión alrededor de la primera resonancia para el caso 1. Los máximos de cada función de dispersión se presentan con líneas verticales punteadas, siguiendo el color respectivo al de su gráfica (la paleta de colores para el tiempo de interacción (ahora oro oscuro) y el tiempo de permanencia (ahora azulvioleta) se cambio para mejor visualización de las líneas verticales). Además, se muestran la parte real del polo κ (gris), el valor k_ω (granate) y la magnitud del polo $|K|$ (verde azulado).

Nuestro interés ahora está en observar el comportamiento de los polos y las funciones de dispersión alrededor del valor crítico, comenzando por acercarnos a este valor desde abajo. Como se puede observar en la siguiente figura, el comportamiento de las funciones de dispersión y de los polos es muy diferente al caso anterior, especialmente cuando estamos cerca del origen. Este caso, junto con el caso 10, son los únicos en los que el tiempo de demora tiende a infinito conforme k se aproxima a cero. Físicamente, este comportamiento está relacionado con la formación de un estado acotado, ya que un estado resonante se convierte en un estado acotado al pasar por un valor crítico en α . Recordando que un estado acotado es un estado estable del sistema con un tiempo de vida largo, es razonable que el tiempo de demora sea grande en este caso.

Esta evolución de un estado resonante a acotado también se refleja en que el primer polo resonante ocurre muy cerca del origen. Además, la mayoría de las funciones de dispersión no presentan un máximo local, siendo el recorrido efectivo, la sección transversal resonante y la probabilidad de atrapamiento las únicas funciones que muestran un máximo en la vecindad del polo.

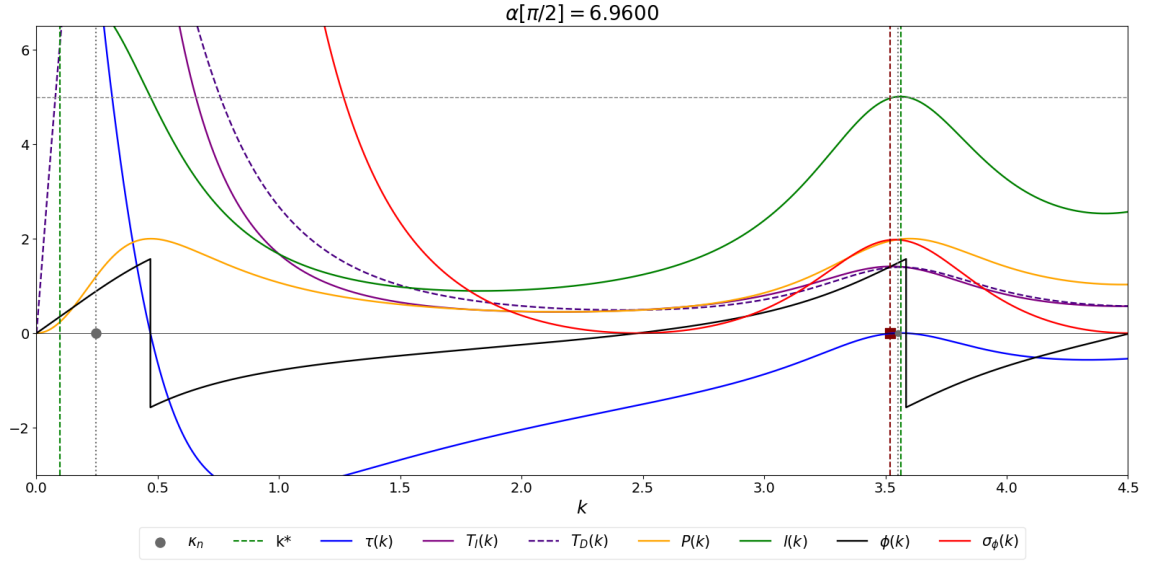


Figura 5.5: Gráficas del caso 2, donde el valor de α es ligeramente menor a un múltiplo impar de $\pi/2$. El primer polo resonante aparece cerca del origen y las funciones de dispersión siguen el comportamiento descrito en la tabla (4.1). Se observa que no hay máximos locales cerca del primer polo resonante en la mayoría de las funciones de dispersión. Para el segundo polo resonante, el comportamiento de las funciones de dispersión regresa al patrón regular.

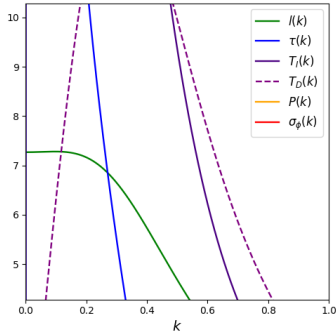


Figura 5.6: Grafica centrada en el valor limite que alcanza el recorrido efectivo $l(0)$ para el caso 2, dado en la tabla 5.2.

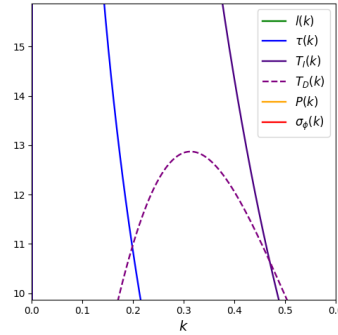


Figura 5.7: Grafica centrada en el valor más grande que alcanza el tiempo de permanencia T_D para el caso 2.

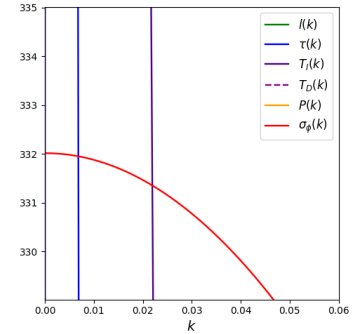


Figura 5.8: Grafica centrada en el valor limite que alcanza la sección transversal resonante $\sigma_\phi(0)$ para el caso 2, dado en la tabla 5.2.

Realizando un acercamiento a la vecindad del polo, se nota inmediatamente la ausencia de máximos locales cercanos. Esto se debe a la configuración del rango de la gráfica, que se centra en la parte real del polo y extiende el rango sumando/restando 0.05 alrededor de este valor. Sin embargo, numéricamente se puede encontrar la existencia de máximos locales en una vecindad más amplia.

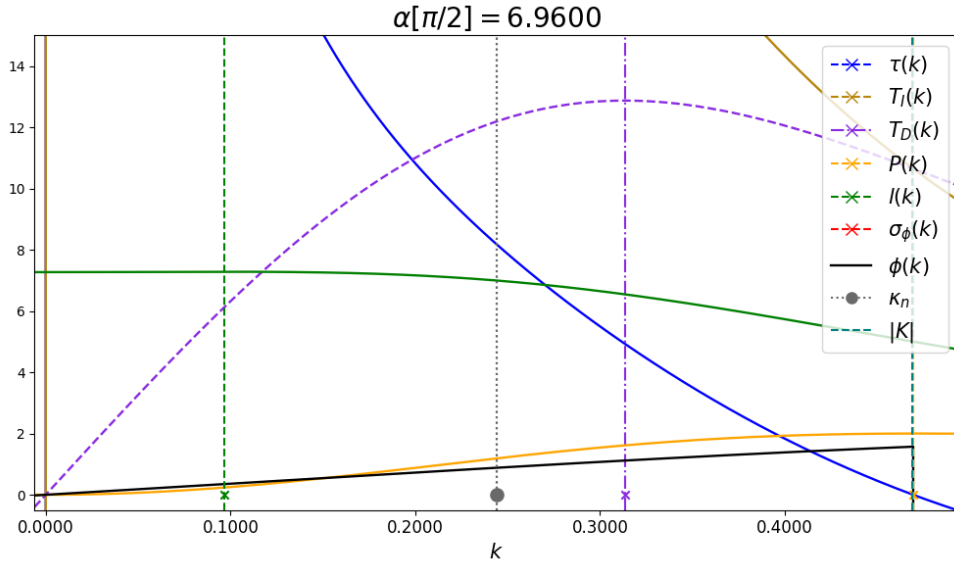


Figura 5.9: Acercamiento escalado a los máximos de las funciones de dispersión alrededor de la primera resonancia para el caso 2 (la paleta de colores para el tiempo de interacción (ahora oro oscuro) y el tiempo de permanencia (ahora azulvioleta) se cambio para mejor visualización de las líneas verticales). Se observa la ausencia de máximos locales cercanos a este valor de κ (gris), al no presentarse líneas verticales. También se destaca que no hay un valor de k_ω asociado a este primer polo resonante. Debido a la escala utilizada en el acercamiento, no es posible observar la magnitud del polo asociada.

El tercer caso se centra en estudiar el comportamiento de las funciones de dispersión ligeramente después de haber pasado un valor crítico en α . Nuevamente, se puede notar que la parte más interesante ocurre cerca del origen. En este caso, se presenta un comportamiento único, donde el “phase shift” muestra un comportamiento decreciente en un intervalo corto, para luego retomar su comportamiento creciente habitual. Sin embargo, esto no es sorprendente, ya que este comportamiento está contemplado en la tabla (4.1). Otro comportamiento inusual en este caso es la aparición de un recorrido efectivo negativo.

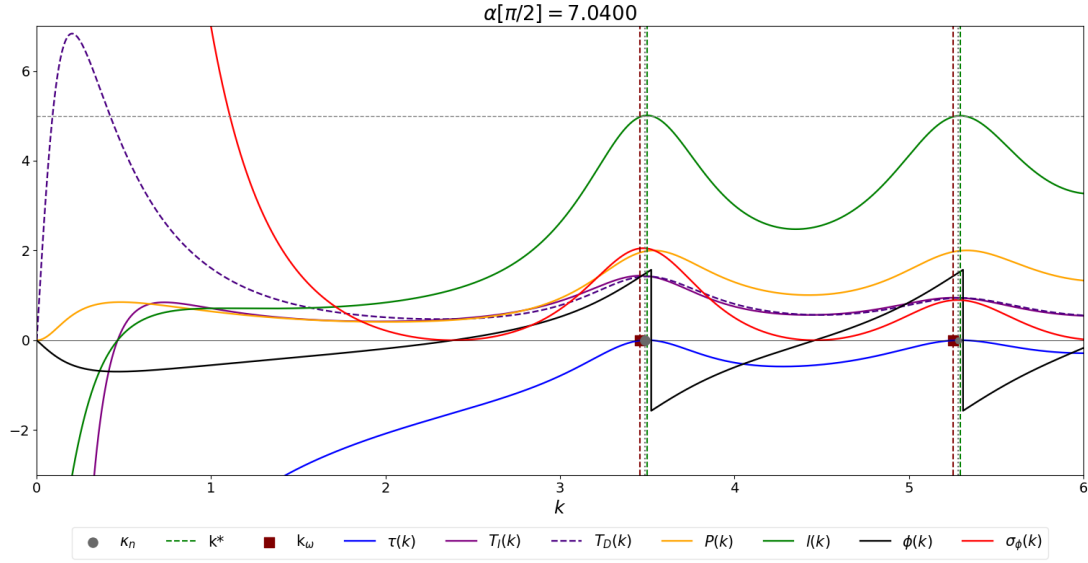


Figura 5.10: Gráficas del caso 3, donde el valor de α es ligeramente mayor a un múltiplo impar de $\pi/2$. El comportamiento de las funciones de dispersión cerca del origen sigue las funciones descritas en la tabla (4.1). Una característica notable es que el “phase shift” (color negro) presenta un comportamiento decreciente en un intervalo corto, para luego crecer lentamente hasta alcanzar el valor de $\pi/2$.

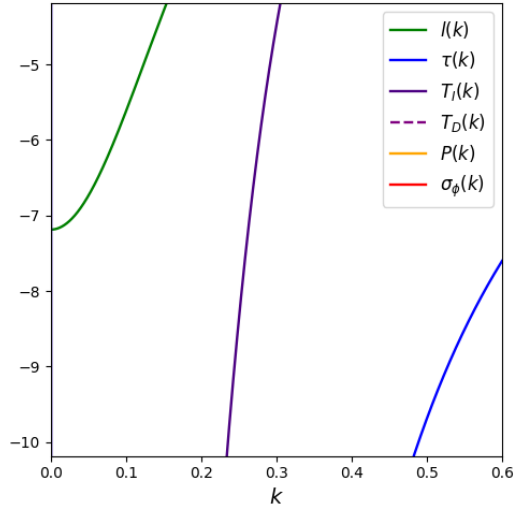


Figura 5.11: Grafica centrada en el valor limite que alcanza el recorrido efectivo $l(0)$ para el caso 3, dado en la tabla 5.2.

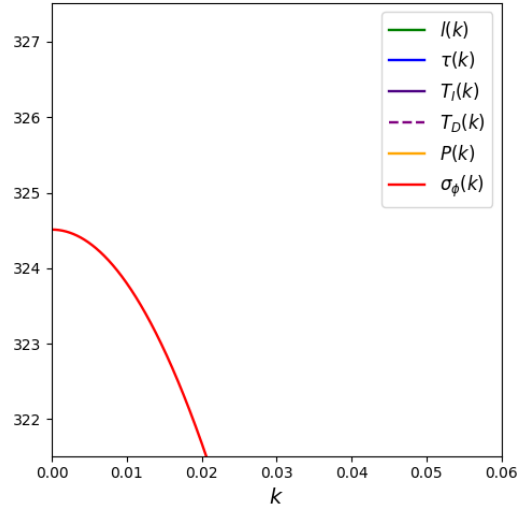


Figura 5.12: Grafica centrada en el valor limite que alcanza la sección transversal resonante $\sigma_\phi(0)$ para el caso 3, dado en la tabla 5.2.

Los siguientes cinco casos se centran en un valor de α no crítico, es decir, que no

es un múltiplo impar de $\pi/2$. Aunque los criterios de selección establecen que las diferencias más notables ocurren cerca de los valores críticos, es necesario comprender el comportamiento regular de las funciones de dispersión. El caso cuatro se enfoca en el comportamiento de las funciones de dispersión y de los polos cuando α es un múltiplo par, mientras que los dos casos siguientes analizan valores cercanos, ligeramente mayores y menores a este múltiplo par. Los casos siete y ocho estudian valores de $\alpha[\pi/2]$ entre un múltiplo impar y par, y entre un múltiplo par e impar, respectivamente.

Las características comunes de los casos cuatro a siete incluyen que el primer polo resonante ocurre lejos del origen, y en todos estos casos las funciones de dispersión presentan máximos locales que siguen el patrón descrito en el primer caso y en las observaciones generales. En el caso ocho, el primer polo resonante aparece más cercano al origen en comparación con los otros tres casos. La parte más interesante se encuentra nuevamente cerca del origen, ya que, aunque el comportamiento de las funciones de dispersión está bien descrito en la tabla (4.1), se pueden notar pequeñas diferencias. Un ejemplo de esto es el tiempo de interacción, que cambia de negativo a positivo cuando se atraviesa un múltiplo par de $\alpha[\pi/2]$. En todos los casos, se observa que el tiempo de demora tiende a menos infinito.

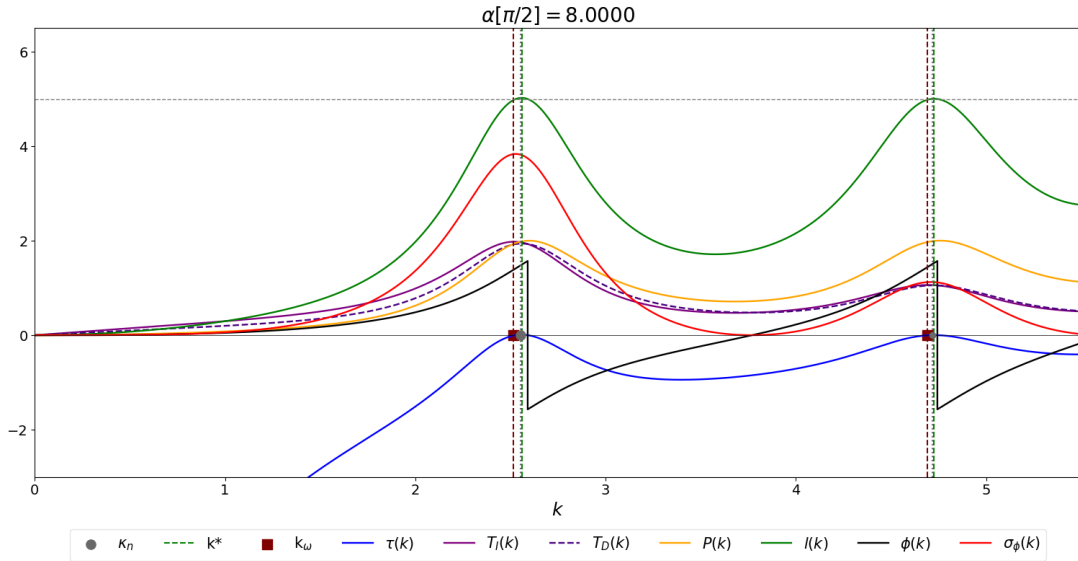


Figura 5.13: Gráficas del caso 4, donde el valor de α es un múltiplo par de $\pi/2$. El comportamiento de las funciones de dispersión cerca del origen sigue lo descrito en la tabla (4.1). Lejos del origen, las funciones de dispersión tienen su comportamiento regular, con máximos locales cerca de los polos y picos anchos.

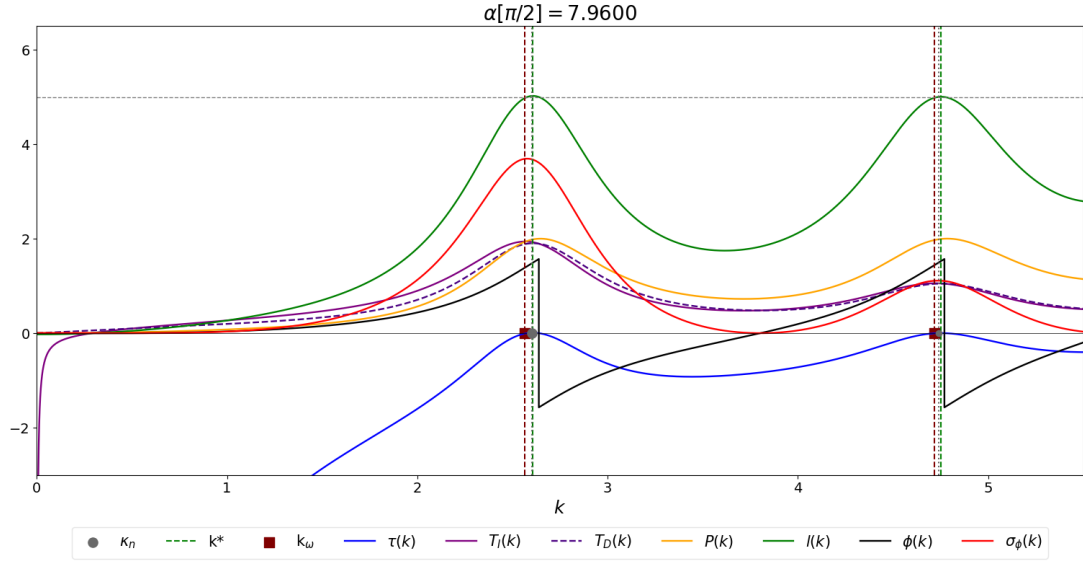


Figura 5.14: Gráficas del caso 5, donde el valor de α es ligeramente menor a un múltiplo par de $\pi/2$. La descripción de la gráfica es la misma que en el caso 4.

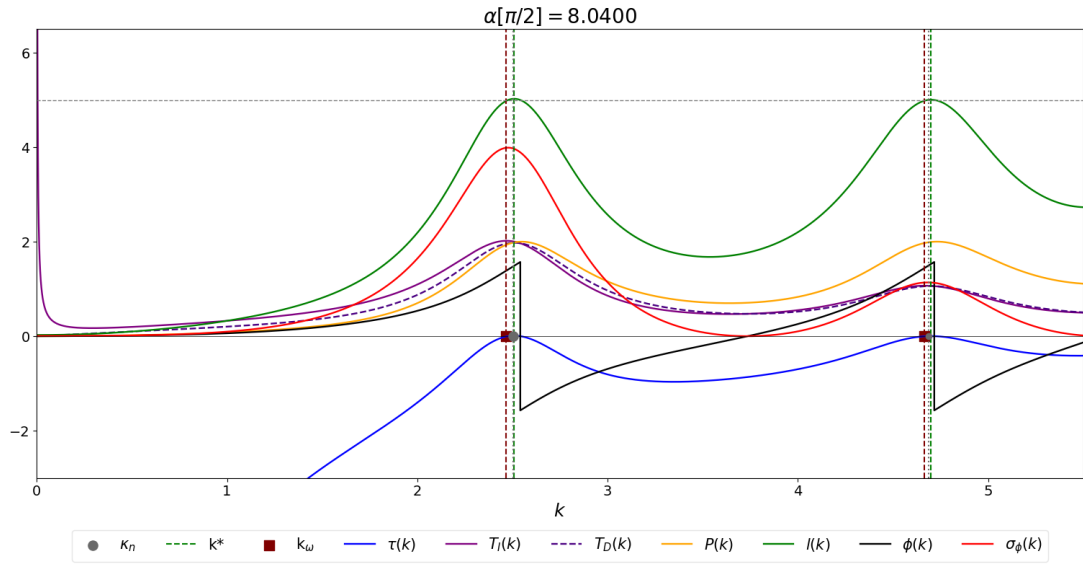


Figura 5.15: Gráficas del caso 6, donde el valor de α es ligeramente mayor a un múltiplo par de $\pi/2$. La descripción de la gráfica es la misma que en el caso 4.

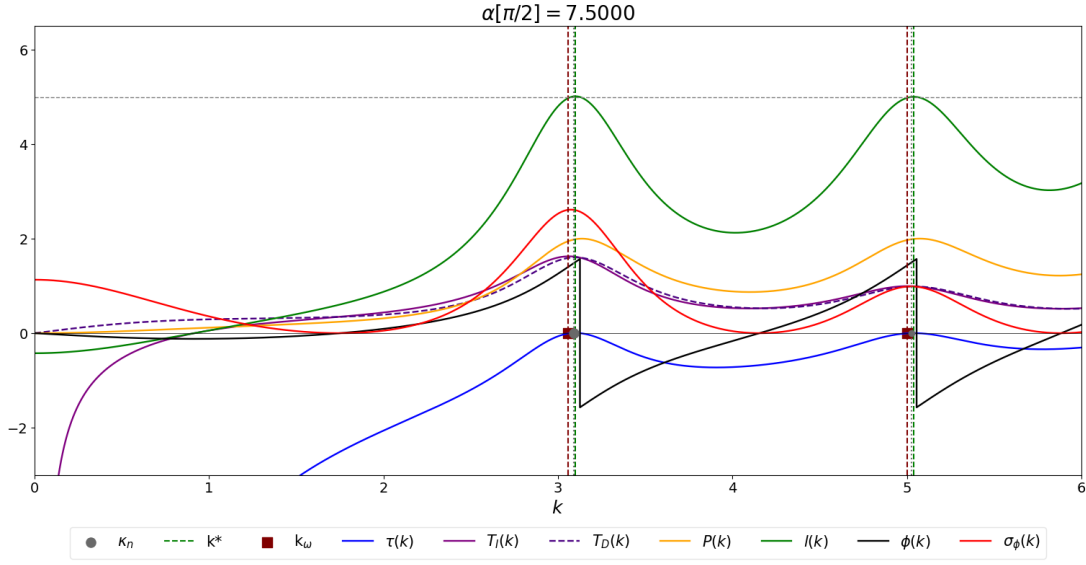


Figura 5.16: Gráficas del caso 7, donde el valor de α es intermedio entre un múltiplo impar y un múltiplo par de $\pi/2$. La descripción de la gráfica es la misma que en el caso 4.

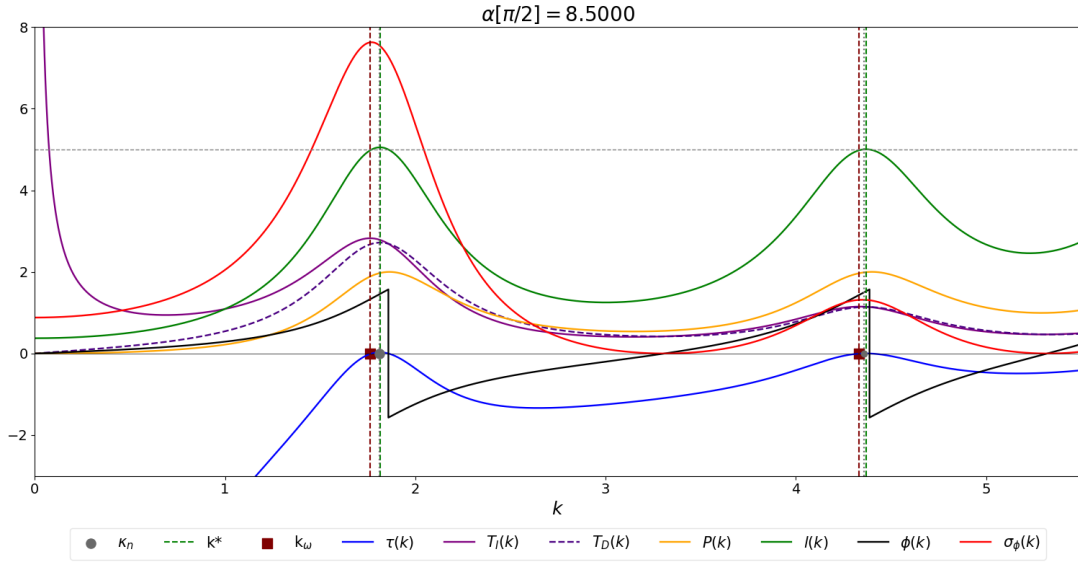


Figura 5.17: Gráficas del caso 8, donde el valor de α es intermedio entre un múltiplo par y un múltiplo impar de $\pi/2$. La descripción de la gráfica es la misma que en el caso 4.

Como se mencionó en los criterios de selección, los siguientes ocho casos consisten en análogos de los primeros ocho, con la diferencia de que los valores de α son diez veces mayores. A medida que incrementamos α , los picos de las funciones de dispersión se vuelven mucho más aislados. Este comportamiento más pronunciado es especialmente visible en la vecindad de los polos, donde las funciones mantienen su estructura, pero con variaciones en la escala. Sin embargo, el comportamiento general de las funciones de dispersión y de los polos sigue el patrón descrito anteriormente, lo que permite una comparación directa entre los casos.

En el caso 9, donde α es un múltiplo impar de $\pi/2$, observamos que el primer polo resonante ocurre mucho más lejos del origen en comparación con los casos previos. Este mismo patrón se observa en los casos 10 y 11, donde los valores de α son ligeramente menores y mayores a un múltiplo impar de $\pi/2$, respectivamente. Un detalle interesante que emerge en el caso 10 es que, aunque el primer polo resonante está cerca del origen, su aparición es más lejana en comparación con su caso análogo con un α menor. Por otro lado, en el caso 11, observamos nuevamente picos aislados, con una separación mayor entre los polos resonantes, lo que destaca el patrón general que caracteriza los valores más altos de α .

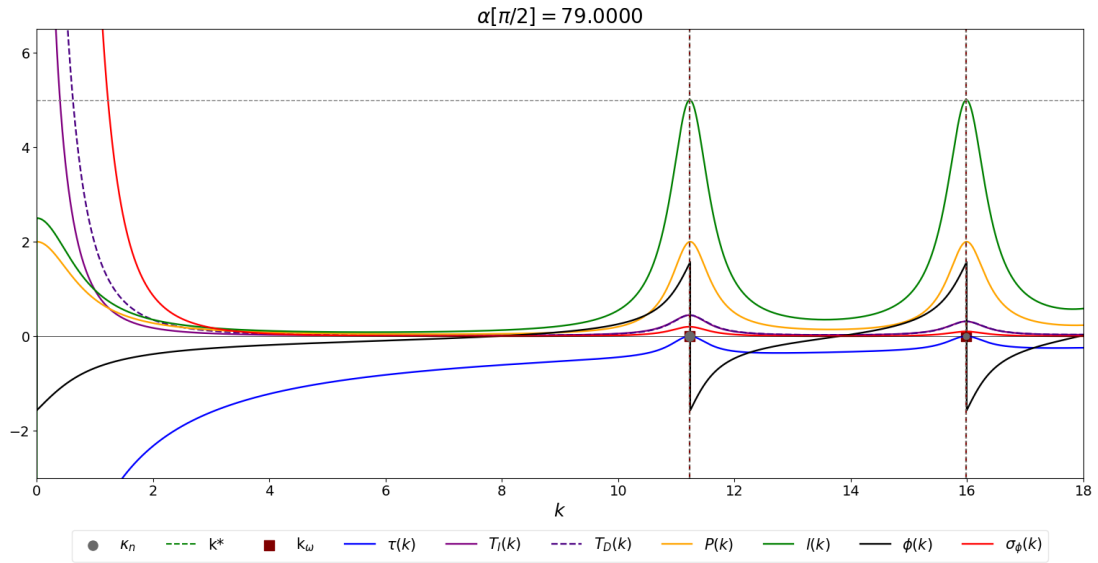


Figura 5.18: Gráficas del caso 9, donde el valor de α es un múltiplo impar de $\pi/2$. El comportamiento de las funciones de dispersión sigue la descripción del caso 1. Las diferencias más notables se observan en el ancho de los picos y en la separación entre los polos resonantes. Además, el primer polo resonante ocurre muy lejos del origen.

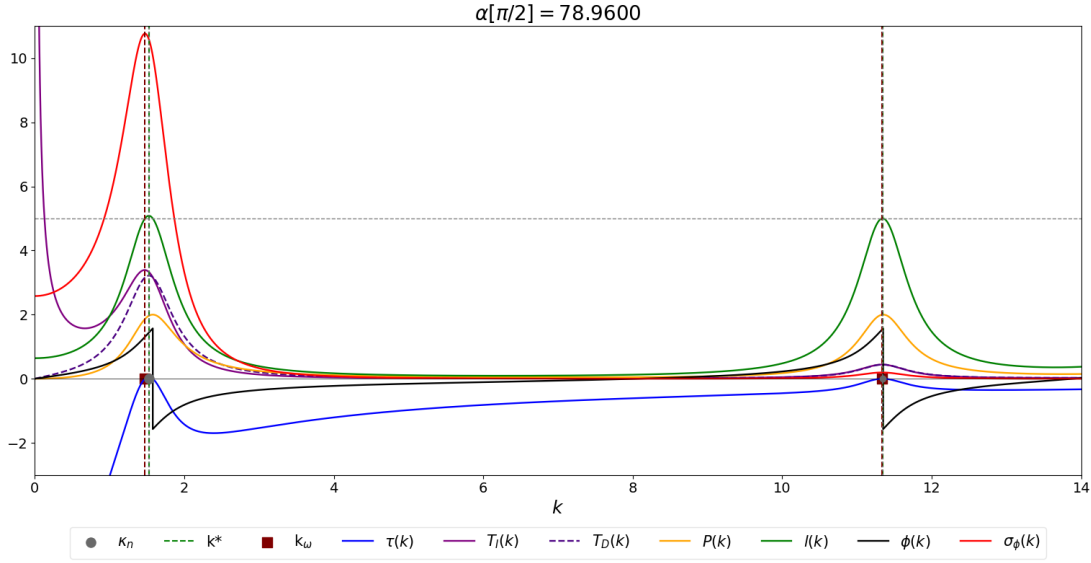


Figura 5.19: Gráficas del caso 10, donde el valor de α es ligeramente menor a un múltiplo impar de $\pi/2$. El comportamiento de las funciones de dispersión sigue la descripción del caso 2. La diferencia más notable es que, aunque el primer polo resonante está cerca del origen, su aparición es más lejana en comparación con su caso análogo. Además, se observa que el tiempo de demora no tiende a infinito positivo, ya que para ello el polo resonante necesitaría estar más cerca del origen.

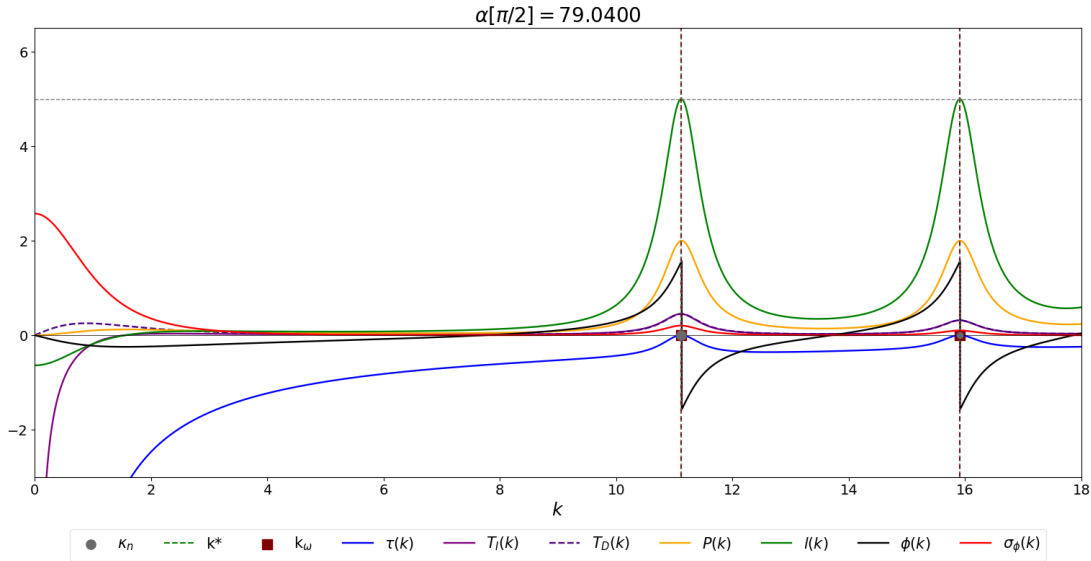


Figura 5.20: Gráficas del caso 11, donde el valor de α es ligeramente mayor a un múltiplo impar de $\pi/2$. El comportamiento de las funciones de dispersión sigue la descripción del caso 3. Las diferencias más notables se observan en el ancho de los picos y en la separación entre los polos resonantes. Además, el primer polo resonante ocurre muy lejos del origen.

A continuación, se presentan los casos 12 a 16.

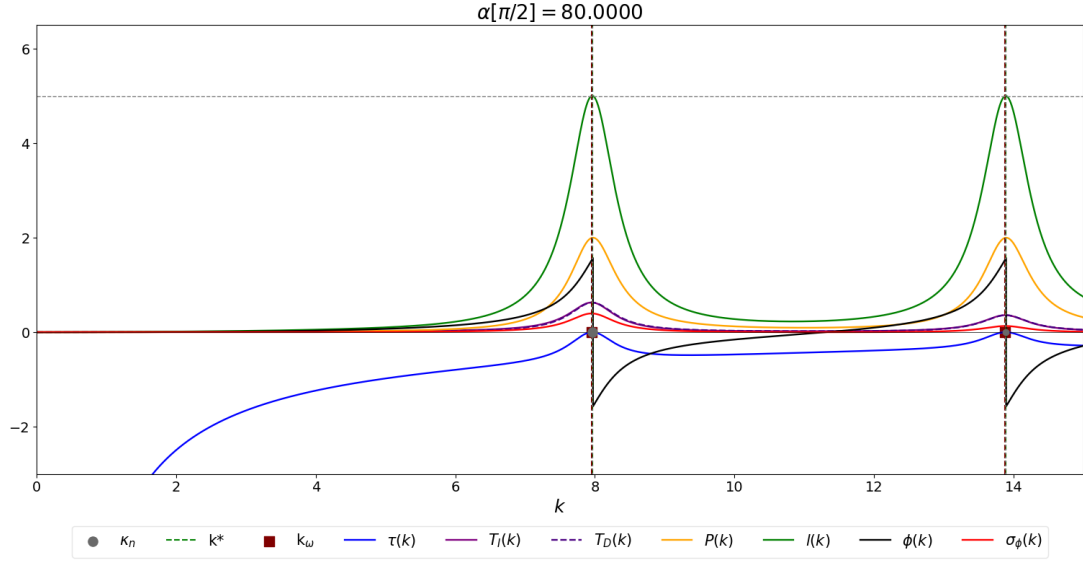


Figura 5.21: Gráficas del caso 12, donde el valor de α es un múltiplo par de $\pi/2$. El comportamiento de las funciones de dispersión sigue la descripción del caso 4. Las diferencias más notables se observan en el ancho de los picos y en la separación entre los polos resonantes. Además, el primer polo resonante ocurre muy lejos del origen.

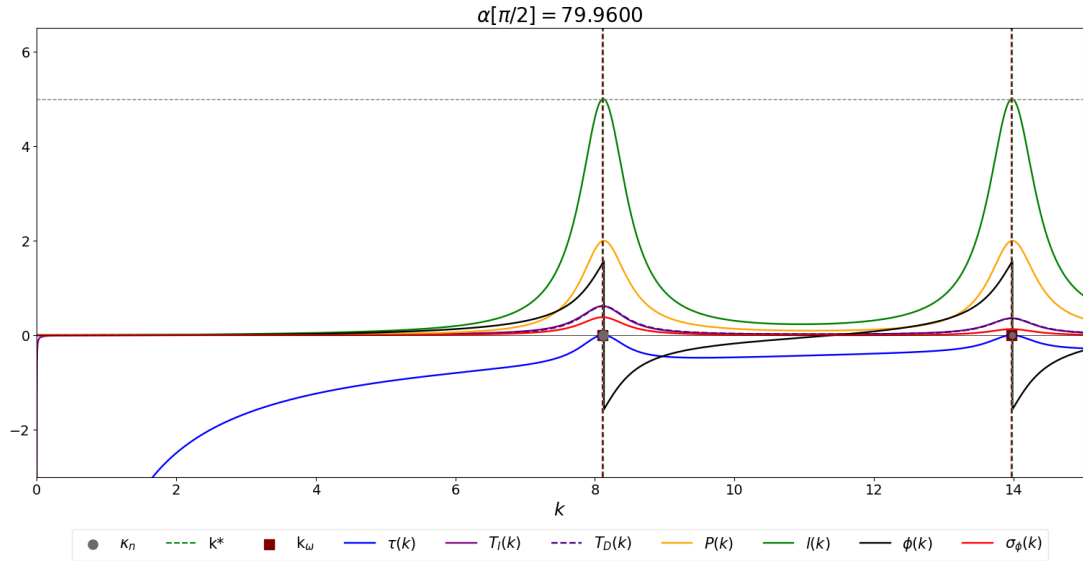


Figura 5.22: Gráficas del caso 13, donde el valor de α es ligeramente menor a un múltiplo par de $\pi/2$. El comportamiento de las funciones de dispersión sigue la descripción del caso 5. Las diferencias más notables se observan en el ancho de los picos y en la separación entre los polos resonantes. Además, el primer polo resonante ocurre muy lejos del origen.

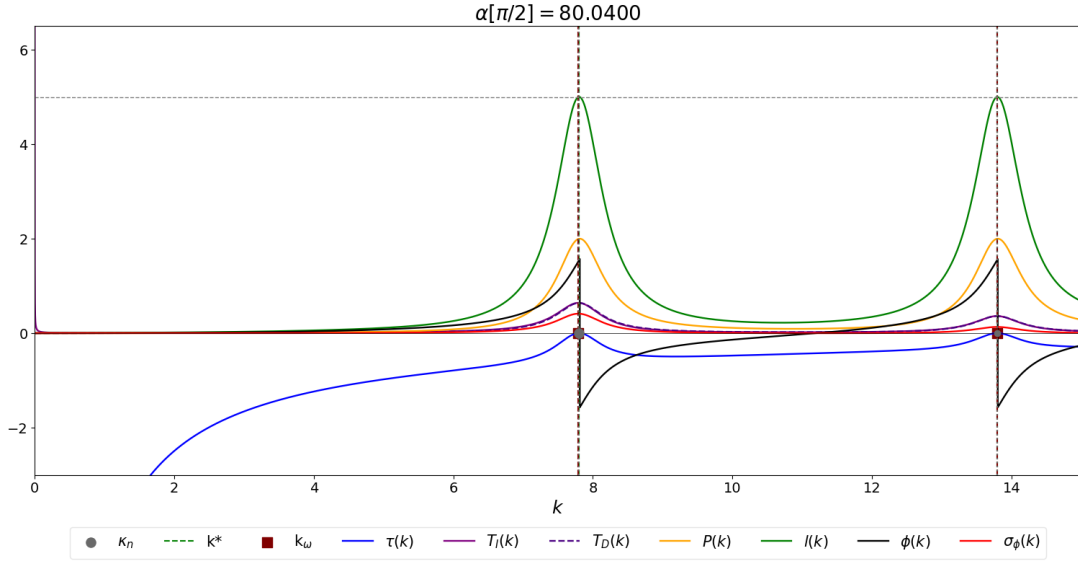


Figura 5.23: Gráficas del caso 14, donde el valor de α es ligeramente mayor a un múltiplo par de $\pi/2$. El comportamiento de las funciones de dispersión sigue la descripción del caso 6. Las diferencias más notables se observan en el ancho de los picos y en la separación entre los polos resonantes. Además, el primer polo resonante ocurre muy lejos del origen.

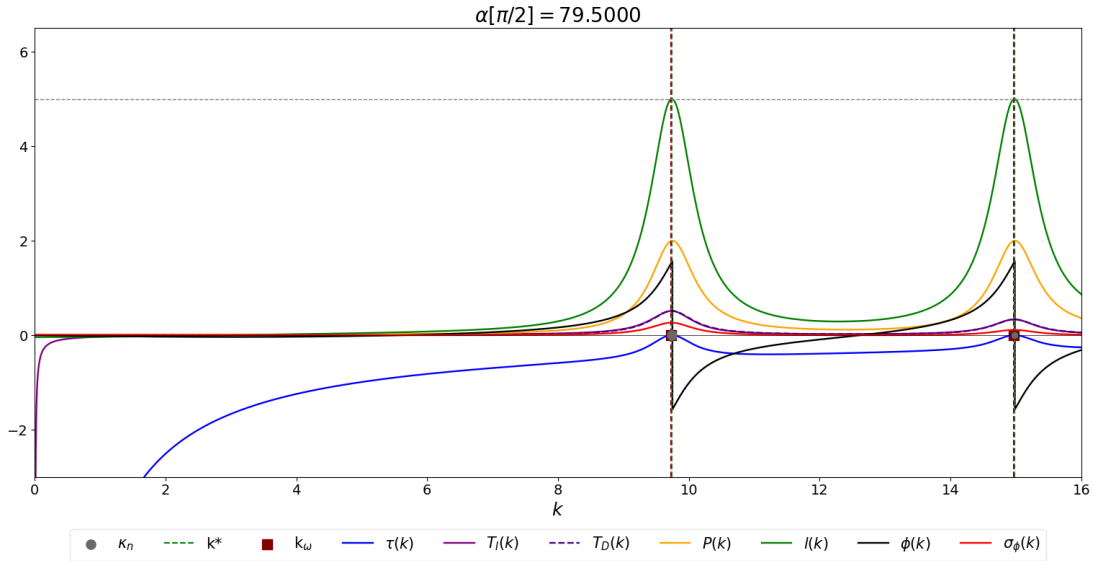


Figura 5.24: Gráficas del caso 15, donde el valor de α es intermedio entre un múltiplo impar y un múltiplo par de $\pi/2$. El comportamiento de las funciones de dispersión sigue la descripción del caso 7. Las diferencias más notables se observan en el ancho de los picos y en la separación entre los polos resonantes. Además, el primer polo resonante ocurre muy lejos del origen.

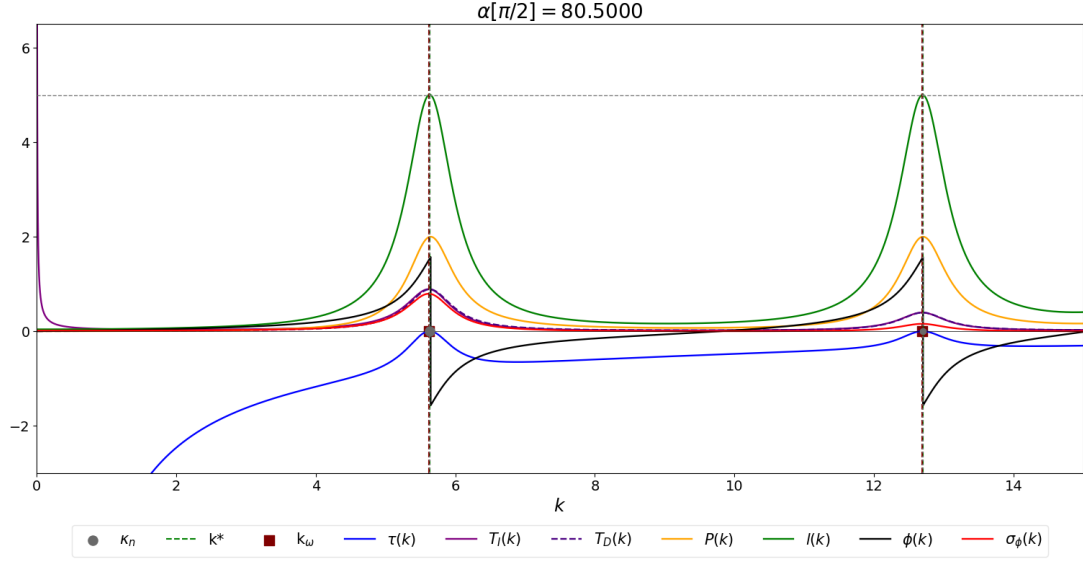


Figura 5.25: Gráficas del caso 16, donde el valor de α es intermedio entre un múltiplo par y un múltiplo impar de $\pi/2$. El comportamiento de las funciones de dispersión sigue la descripción del caso 8. Las diferencias más notables se observan en el ancho de los picos y en la separación entre los polos resonantes. Además, el primer polo resonante ocurre lejos del origen.

5.2 Resultados numéricos

5.2.1 Datos numéricos de la posición de los máximos de las funciones de dispersión

A través de técnicas computacionales (para mayor detalle, revisar el Apéndice C.1) se calculó la posición de los máximos de las funciones de dispersión en su forma exacta de manera numérica, así como la posición de las partes real e imaginaria de los polos (4.6), la magnitud del polo y el valor k_ω asociado al polo (para mayor detalle, revisar el Apéndice C.1). Estos valores se presentan en las tablas (5.4), (5.5), (5.6) y (5.7). Dado que queremos relacionar la manifestación del polo resonante con las funciones de dispersión, busquemos cuál cantidad es la más cercana a cada parte del polo de S . Las posiciones de los máximos de las funciones de dispersión se denotan como: k_l para el recorrido efectivo ($l(k)$), k_τ para el tiempo de demora ($\tau(k)$), k_{T_I} para el tiempo de interacción ($T_I(k)$), k_{T_D} para el tiempo de permanencia ($T_D(k)$), k_P para la probabilidad de atrapamiento ($P(k)$) y k_{σ_ϕ} para la sección transversal resonante ($\sigma_\phi(k)$). Para las partes de los polos tenemos: κ_n para la parte real, η_n para la parte imaginaria, k_ω para el número de onda y $|K_n|$ para la magnitud.

Para comparar los máximos de las funciones de dispersión con las cantidades de los polos resonantes, utilizamos la diferencia relativa. Esta diferencia se define de la siguiente forma:

$$\frac{|\kappa_S - k_j|}{|\kappa_i|} \quad (5.3)$$

donde $i = l, \tau, T_I, T_D, P, \sigma_\phi$ es la función cuya posición del máximo es más cercana a la cantidad κ_S , que puede ser $\kappa_n, k_\omega, |K_n|$, dependiendo de la cantidad con la que se desee comparar. A través de las diferencias relativas, buscamos determinar si existe una función cuya posición de su máximo sea consistentemente la más cercana a alguna parte del polo, y si se presenta algún patrón de cercanía.

El uso del patrón de colores facilita la identificación visual de las funciones que presentan la menor diferencia relativa con respecto a las cantidades de los polos. Esto permite observar de manera rápida y clara qué funciones se encuentran más cerca de las partes reales e imaginarias de los polos. Este orden de cercanía se representa mediante un patrón de colores en las tablas (5.8), (5.9), (5.10), (5.11), (5.12) y (5.13), donde el color verde indica la diferencia relativa más pequeña (es decir, la cantidad más cercana), y el color rojo indica la diferencia relativa más grande (la cantidad más lejana).

El número de decimales utilizado en la presentación de los datos se ha ajustado de manera que sea lo suficientemente preciso para distinguir las pequeñas diferencias numéricas entre las posiciones de los máximos.

En la tabla (5.3), se resume la información obtenida de las tablas (5.8), (5.9), (5.10), (5.11), (5.12) y (5.13), que contienen las diferencias relativas. En ella se indica cuál posición del máximo es la más cercana a la parte real del polo, permitiendo observar que, dependiendo del número de resonancia, distintas funciones tienen su máximo más cercano a κ_n . De manera notable, se observa que conforme las resonancias se vuelven más aisladas, la posición de los máximos del tiempo de demora es la mejor para ubicar la parte real del polo. Además, siempre que el máximo del tiempo de demora sea el más cercano, la segunda cantidad más cercana será la posición de los máximos del recorrido efectivo.

k_i	Número del caso
k_l	10.1
k_τ	3.1, 4.1, 5.1, 6.1, 7.1, 8.1, 9, 10.2-5, 11 - 16
k_{T_I}	—
k_{T_D}	2.1
k_P	—
k_{σ_ϕ}	1, 2.2-5, 3.2-5, 4.2-5, 5.2-5, 6.2-5, 7.2-5, 8.2-5

Tabla 5.3: Clasificación de la posición del máximo más cercano a la parte real del polo (κ_n)

En cuanto al número de onda (k_ω) y la magnitud del polo ($|K_n|$), se identificó que existe una función cuya posición de su máximo es consistentemente la más cercana a cada parte. Para k_ω , la función más cercana es el tiempo de interacción, mientras que para $|K_n|$, la función más cercana es la probabilidad de atrapamiento.

Caso	k_l	k_τ	k_{T_I}	k_{T_D}	k_P	k_{σ_ϕ}
1.1	3.531578	3.531506	3.493929	3.531817	3.554306	3.508964
1.2	5.316378	5.316357	5.279205	5.316483	5.331459	5.301347
1.3	6.871223	6.871213	6.831062	6.871291	6.882885	6.859590
1.4	8.325967	8.325962	8.281799	8.326018	8.335587	8.316365
2.1	0.096731	—	—	0.313419	0.469518	—
2.2	3.562654	3.562583	3.524912	3.562889	3.585183	3.540236
2.3	5.337071	5.337050	5.299617	5.337176	5.352094	5.322098
2.4	6.887246	6.887236	6.846716	6.887314	6.898880	6.875640
3.1	3.500047	3.499972	3.462478	3.500289	3.522979	3.477228
3.2	5.295485	5.295464	5.258587	5.295590	5.310626	5.280395
3.3	6.855071	6.855061	6.815272	6.855139	6.866760	6.843410
3.4	8.312642	8.312637	8.268907	8.312693	8.322277	8.303024
4.1	2.559263	2.559073	2.518971	2.559740	2.590624	2.528055
4.2	4.726738	4.726708	4.694676	4.726852	4.743701	4.709832
4.3	6.425880	6.425867	6.393001	6.425943	6.438349	6.413440
4.4	7.962409	7.962403	7.927082	7.962454	7.972468	7.952368
5.1	2.608044	2.607864	2.568147	2.608499	2.638818	2.577420
5.2	4.753324	4.753294	4.721123	4.753437	4.770192	4.736512
5.3	6.445460	6.445448	6.412352	6.445524	6.457892	6.433058
5.4	7.978220	7.978213	7.942607	7.978264	7.988259	7.968198
6.1	2.509282	2.509080	2.468550	2.509782	2.541267	2.477452
6.2	4.699868	4.699837	4.667940	4.699983	4.716927	4.682865
6.3	6.406140	6.406128	6.373487	6.406204	6.418648	6.393662
6.4	7.946488	7.946481	7.911442	7.946532	7.956567	7.936426
7.1	3.099953	3.099846	3.062430	3.100260	3.125845	3.074189
7.2	5.040006	5.039981	5.005827	5.040114	5.055915	5.024151
7.3	6.659693	6.659682	6.623602	6.659758	6.671725	6.647690
7.4	8.152272	8.152266	8.113002	8.152319	8.162097	8.142465
8.1	1.814366	1.813836	1.762608	1.815536	1.858591	1.770337
8.2	4.368642	4.368604	4.337871	4.368770	4.386995	4.350350
8.3	6.167248	6.167234	6.136893	6.167311	6.180240	6.154286
8.4	7.755191	7.755184	7.723065	7.755233	7.765519	7.744881

Tabla 5.4: Posiciones de los máximos locales de las funciones de dispersión. La estructura de la columna “Caso” está organizada de tal manera que el primer dígito corresponde al número del caso, y el segundo al número de la resonancia.

Caso	k_l	k_τ	k_{T_I}	k_{T_D}	k_P	k_{σ_ϕ}
9.1	11.232581	11.232579	11.225085	11.232586	11.239703	11.225459
9.2	15.989375	15.989374	15.983849	15.989377	15.994378	15.984372
9.3	19.705522	19.705522	19.700821	19.705523	19.709582	19.701462
9.4	22.893522	22.893522	22.889283	22.893523	22.897017	22.890028
10.1	1.527006	1.526122	1.470344	1.528742	1.579362	1.474585
10.2	11.343072	11.343070	11.335642	11.343077	11.350124	11.336020
10.3	16.067188	16.067187	16.061683	16.067189	16.072166	16.062209
10.4	19.768713	19.768713	19.764022	19.768714	19.772759	19.764666
11.1	11.120936	11.120933	11.113372	11.120941	11.128129	11.113742
11.2	15.911142	15.911142	15.905595	15.911144	15.916170	15.906115
11.3	19.642096	19.642096	19.637384	19.642097	19.646169	19.638023
11.4	22.838951	22.838951	22.834707	22.838952	22.842454	22.835449
12.1	7.962421	7.962414	7.952096	7.962434	7.972467	7.952374
12.2	13.888464	13.888462	13.882259	13.888466	13.894224	13.882704
12.3	18.042642	18.042641	18.037634	18.042643	18.047075	18.038208
12.4	21.478889	21.478889	21.474483	21.478890	21.482613	21.475165
13.1	8.119491	8.119485	8.109356	8.119503	8.129343	8.109638
13.2	13.979106	13.979105	13.972935	13.979109	13.984829	13.973383
13.3	18.112507	18.112506	18.107514	18.112508	18.116924	18.108090
13.4	21.537611	21.537610	21.533212	21.537611	21.541325	21.533896
14.1	7.802108	7.802101	7.791580	7.802122	7.812361	7.791855
14.2	13.797180	13.797179	13.790940	13.797182	13.802978	13.791382
14.3	17.972470	17.972469	17.967448	17.972471	17.976921	17.968019
14.4	21.419977	21.419977	21.415564	21.419978	21.423712	21.416243
15.1	9.740853	9.740849	9.732314	9.740860	9.749065	9.732640
15.2	14.979101	14.979100	14.973276	14.979103	14.984441	14.973760
15.3	18.894998	18.894998	18.890157	18.894999	18.899232	18.890764
15.4	22.199701	22.199701	22.195384	22.199702	22.203304	22.196097
16.1	5.631928	5.631910	5.617474	5.631964	5.646131	5.617724
16.2	12.696771	12.696769	12.690066	12.696774	12.703071	12.690470
16.3	17.142213	17.142213	17.137008	17.142215	17.146880	17.137547
16.4	20.728272	20.728271	20.723763	20.728273	20.732131	20.724412

Tabla 5.5: Posiciones de los máximos locales de las funciones de dispersión. La estructura de la columna “Caso” está organizada de tal manera que el primer dígito corresponde al número del caso, y el segundo al número de la resonancia. (Continuación)

Caso	κ_n	η_n	k_ω	$ K_n $
1.1	3.520118	0.469584	3.488656	3.551301
1.2	5.302292	0.530394	5.275697	5.328754
1.3	6.856099	0.583680	6.831209	6.880900
1.4	8.310478	0.631058	8.286483	8.334403
2.1	0.243927	0.400418	-	0.468866
2.2	3.551022	0.471260	3.519612	3.582156
2.3	5.322855	0.532178	5.296184	5.349392
2.4	6.872012	0.585545	6.847021	6.896914
3.1	3.488757	0.467920	3.457236	3.519997
3.2	5.281529	0.528623	5.255007	5.307917
3.3	6.840056	0.581829	6.815265	6.864757
3.4	8.297248	0.629145	8.273361	8.321066
4.1	2.552200	0.431444	2.515469	2.588411
4.2	4.715723	0.489665	4.690232	4.741078
4.3	6.413310	0.541003	6.390450	6.436088
4.4	7.949141	0.586871	7.927448	7.970776
5.1	2.600791	0.432843	2.564519	2.636563
5.2	4.742191	0.491164	4.716687	4.767559
5.3	6.432794	0.542577	6.409872	6.455636
5.4	7.964869	0.588505	7.943097	7.986581
6.1	2.502412	0.430054	2.465181	2.539097
6.2	4.688970	0.488176	4.663488	4.714314
6.3	6.393666	0.539438	6.370869	6.416382
6.4	7.933302	0.585247	7.911686	7.954860
7.1	3.090637	0.449653	3.057752	3.123175
7.2	5.027496	0.509145	5.001648	5.053211
7.3	6.645889	0.561444	6.622131	6.669562
7.4	8.137933	0.608060	8.115184	8.160618
8.1	1.810111	0.414732	1.761959	1.857015
8.2	4.359070	0.471726	4.333470	4.384520
8.3	6.155841	0.522129	6.133658	6.177945
8.4	7.742927	0.567267	7.722120	7.763679

Tabla 5.6: Valores de los polos del coeficiente S . En la columna “Caso”, el primer dígito indica el número del caso, mientras que el segundo corresponde al número del polo resonante.

Caso	κ_n	η_n	k_ω	$ K_n $
9.1	11.232227	0.406692	11.224862	11.239587
9.2	15.988879	0.413293	15.983537	15.994220
9.3	19.704924	0.419797	19.700452	19.709395
9.4	22.892842	0.426207	22.888874	22.896809
10.1	1.527825	0.400126	1.474499	1.579351
10.2	11.342714	0.406828	11.335416	11.350008
10.3	16.066689	0.413431	16.061369	16.072008
10.4	19.768112	0.419936	19.763651	19.772572
11.1	11.120585	0.406556	11.113151	11.128014
11.2	15.910649	0.413155	15.905284	15.916013
11.3	19.641500	0.419658	19.637016	19.645983
11.4	22.838273	0.426067	22.834298	22.842247
12.1	7.962178	0.403313	7.951957	7.972386
12.2	13.888039	0.409881	13.881990	13.894087
12.3	18.042101	0.416354	18.037297	18.046905
12.4	21.478259	0.422733	21.474099	21.482419
13.1	8.119243	0.403447	8.109213	8.129260
13.2	13.978679	0.410016	13.972664	13.984691
13.3	18.111964	0.416490	18.107175	18.116752
13.4	21.536979	0.422871	21.532827	21.541130
14.1	7.801871	0.403179	7.791446	7.812281
14.2	13.796759	0.409746	13.790673	13.802842
14.3	17.971932	0.416217	17.967112	17.976751
14.4	21.419350	0.422595	21.415180	21.423518
15.1	9.740549	0.404995	9.732126	9.748965
15.2	14.978640	0.411580	14.972984	14.984294
15.3	18.894429	0.418068	18.889803	18.899053
15.4	22.199045	0.424462	22.194987	22.203103
16.1	5.631771	0.401645	5.617431	5.646075
16.2	12.696386	0.408197	12.689822	12.702946
16.3	17.141704	0.414654	17.136688	17.146718
16.4	20.727668	0.421019	20.723392	20.731943

Tabla 5.7: Valores de los polos del coeficiente S . En la columna “Caso”, el primer dígito indica el número del caso, mientras que el segundo corresponde al número del polo resonante. (Continuación)

Tomando en cuenta los máximos de las funciones de dispersión y las cantidades asociadas a los polos (Tablas 5.4, 5.5, 5.6, 5.7), se identifican dos patrones de aparición y cercanía de las resonancias, descritos por las siguientes ecuaciones:

$$k_\omega \approx k_{T_I} < k_{\sigma_\phi} < \kappa \approx k_\tau < k^* < k_{T_D} < |K| \approx k_P \quad (5.4)$$

$$k_\omega \approx k_{T_I} < k_{\sigma_\phi} \approx \kappa < k_\tau < k^* < k_{T_D} < |K| \approx k_P \quad (5.5)$$

Ambos patrones son consistentes con el comportamiento esperado según la ecuación (3.50). Los resultados numéricos muestran que, a energías más altas, el tiempo de interacción disminuye, llegando a ser menor que k_ω . Sin embargo, sigue siendo la cantidad que mejor describe el número de onda en esta región.

Cabe destacar un caso particular en el que el patrón de aparición y cercanía no se cumple. Este ocurre cuando α es cercano a un múltiplo impar de $\pi/2$, como sucede en el caso (2). En esta situación, las funciones del tiempo de demora $\tau(k)$, el tiempo de interacción $T_I(k)$ y la sección transversal resonante $\sigma_\phi(k)$ no presentan un máximo local en el primer polo resonante, y tampoco existe k_ω asociado a dicho polo. El patrón de aparición y cercanía en este caso especial se expresa como:

$$k^* < \kappa < k_{T_D} < k_P \approx |K|. \quad (5.6)$$

La completitud de las reglas en el patrón de aparición descrito por la ecuación (3.50) se confirma y se complementa con las ecuaciones (5.4) y (5.5), así como con los resultados numéricos obtenidos en las Tablas 5.8, 5.9, 5.10, 5.11, 5.12 y 5.13.

Caso	$\frac{ k_I - \kappa_n }{ \kappa_n }$	$\frac{ k_T - \kappa_n }{ \kappa_n }$	$\frac{ k_{T_L} - \kappa_n }{ \kappa_n }$	$\frac{ k_{T_D} - \kappa_n }{ \kappa_n }$	$\frac{ k_P - \kappa_n }{ \kappa_n }$	$\frac{ k_{\sigma_\phi} - \kappa_n }{ \kappa_n }$
1.1	0.0032557	0.0032350	0.0074399	0.0033234	0.0097122	0.0031688
1.2	0.0026566	0.0026526	0.0043541	0.0026764	0.0055009	0.0001782
1.3	0.0022059	0.0022044	0.0036518	0.0022158	0.0039068	0.0005091
1.4	0.0018639	0.0018632	0.0034509	0.0018700	0.0030214	0.0007084
2.1	0.6034430	-	-	0.2848854	0.9248258	-
2.2	0.0032756	0.0032557	0.0073528	0.0033417	0.0096201	0.0030374
2.3	0.0026708	0.0026668	0.0043657	0.0026905	0.0054931	0.0001421
2.4	0.0022167	0.0022153	0.0036811	0.0022267	0.0039097	0.0005278
3.1	0.0032358	0.0032145	0.0075325	0.0033052	0.0098092	0.0033048
3.2	0.0026425	0.0026384	0.0043437	0.0026624	0.0055093	0.0002146
3.3	0.0021951	0.0021937	0.0036234	0.0022050	0.0039040	0.0004903
3.4	0.0018554	0.0018547	0.0034156	0.0018615	0.0030166	0.0006962
4.1	0.0027674	0.0026928	0.0130199	0.0029541	0.0150550	0.0094605
4.2	0.0023358	0.0023294	0.0044631	0.0023600	0.0059329	0.0012492
4.3	0.0019600	0.0019581	0.0031667	0.0019699	0.0039043	0.0000203
4.4	0.0016691	0.0016683	0.0027750	0.0016747	0.0029345	0.0004059
5.1	0.0027888	0.0027197	0.0125516	0.0029638	0.0146214	0.0089861
5.2	0.0023475	0.0023412	0.0044428	0.0023714	0.0059045	0.0011976
5.3	0.0019690	0.0019671	0.0031779	0.0019788	0.0039015	0.0000410
5.4	0.0016762	0.0016754	0.0027950	0.0016818	0.0029367	0.0004180
6.1	0.0027453	0.0026647	0.0135315	0.0029453	0.0155270	0.0099743
6.2	0.0023242	0.0023176	0.0044850	0.0023487	0.0059624	0.0013019
6.3	0.0019511	0.0019491	0.0031561	0.0019610	0.0039074	0.0000006
6.4	0.0016620	0.0016612	0.0027555	0.0016676	0.0029325	0.0003938
7.1	0.0030144	0.0029797	0.0091266	0.0031135	0.0113920	0.0053217
7.2	0.0024885	0.0024835	0.0043100	0.0025098	0.0056528	0.0006652
7.3	0.0020771	0.0020755	0.0033535	0.0020869	0.0038875	0.0002710
7.4	0.0017621	0.0017613	0.0030635	0.0017679	0.0029694	0.0005569
8.1	0.0023508	0.0020576	0.0262435	0.0029971	0.0267829	0.0219733
8.2	0.0021959	0.0021871	0.0048631	0.0022253	0.0064062	0.0020003
8.3	0.0018529	0.0018507	0.0030781	0.0018633	0.0039635	0.0002526
8.4	0.0015838	0.0015830	0.0025652	0.0015893	0.0029177	0.0002524

Tabla 5.8: Diferencias relativas entre los máximos de las funciones de dispersión y la parte real del polo κ_n para los primeros 8 casos. Los valores de las diferencias relativas se representan con un patrón de colores, donde el verde indica la diferencia más pequeña (más cercana) y el rojo la más grande (más lejana).

Caso	$\frac{ k_I - \kappa_n }{ \kappa_n }$	$\frac{ k_T - \kappa_n }{ \kappa_n }$	$\frac{ k_{T_I} - \kappa_n }{ \kappa_n }$	$\frac{ k_{T_D} - \kappa_n }{ \kappa_n }$	$\frac{ k_P - \kappa_n }{ \kappa_n }$	$\frac{ k_{\sigma_\phi} - \kappa_n }{ \kappa_n }$
9.1	0.0000315	0.0000313	0.0006358	0.0000320	0.0006656	0.0006025
9.2	0.0000310	0.0000310	0.0003146	0.0000311	0.0003439	0.0002819
9.3	0.0000304	0.0000303	0.0002082	0.0000304	0.0002364	0.0001757
9.4	0.0000297	0.0000297	0.0001554	0.0000298	0.0001824	0.0001229
10.1	0.0005364	0.0011148	0.0376227	0.0005999	0.0337320	0.0348470
10.2	0.0000316	0.0000314	0.0006235	0.0000320	0.0006533	0.0005902
10.3	0.0000310	0.0000310	0.0003116	0.0000311	0.0003409	0.0002789
10.4	0.0000304	0.0000304	0.0002069	0.0000304	0.0002351	0.0001743
11.1	0.0000315	0.0000313	0.0006487	0.0000320	0.0006784	0.0006153
11.2	0.0000310	0.0000309	0.0003177	0.0000311	0.0003470	0.0002850
11.3	0.0000303	0.0000303	0.0002095	0.0000304	0.0002377	0.0001770
11.4	0.0000297	0.0000297	0.0001561	0.0000297	0.0001831	0.0001237
12.1	0.0000305	0.0000297	0.0012663	0.0000321	0.0012923	0.0012314
12.2	0.0000305	0.0000304	0.0004162	0.0000307	0.0004453	0.0003842
12.3	0.0000299	0.0000299	0.0002476	0.0000300	0.0002757	0.0002158
12.4	0.0000293	0.0000293	0.0001758	0.0000294	0.0002027	0.0001441
13.1	0.0000306	0.0000298	0.0012176	0.0000321	0.0012440	0.0011829
13.2	0.0000306	0.0000305	0.0004109	0.0000307	0.0004399	0.0003788
13.3	0.0000300	0.0000299	0.0002457	0.0000300	0.0002738	0.0002139
13.4	0.0000293	0.0000293	0.0001749	0.0000294	0.0002018	0.0001431
14.1	0.0000304	0.0000295	0.0013190	0.0000322	0.0013446	0.0012838
14.2	0.0000305	0.0000304	0.0004217	0.0000307	0.0004507	0.0003897
14.3	0.0000299	0.0000299	0.0002495	0.0000300	0.0002776	0.0002177
14.4	0.0000293	0.0000293	0.0001768	0.0000293	0.0002037	0.0001450
15.1	0.0000312	0.0000308	0.0008455	0.0000319	0.0008743	0.0008120
15.2	0.0000308	0.0000307	0.0003581	0.0000309	0.0003873	0.0003258
15.3	0.0000302	0.0000301	0.0002261	0.0000302	0.0002542	0.0001939
15.4	0.0000295	0.0000295	0.0001649	0.0000296	0.0001919	0.0001328
16.1	0.0000279	0.0000247	0.0025386	0.0000343	0.0025498	0.0024943
16.2	0.0000303	0.0000302	0.0004977	0.0000306	0.0005265	0.0004660
16.3	0.0000297	0.0000297	0.0002740	0.0000298	0.0003019	0.0002425
16.4	0.0000291	0.0000291	0.0001884	0.0000292	0.0002153	0.0001571

Tabla 5.9: Diferencias relativas entre los máximos de las funciones de dispersión y la parte real del polo κ_n para los últimos 8 casos. Los valores de las diferencias relativas se representan con un patrón de colores, donde el verde indica la diferencia más pequeña (más cercana) y el rojo la más grande (más lejana).

Caso	$\frac{ k_I - k_\omega }{ k_\omega }$	$\frac{ k_T - k_\omega }{ k_\omega }$	$\frac{ k_{T_L} - k_\omega }{ k_\omega }$	$\frac{ k_{T_D} - k_\omega }{ k_\omega }$	$\frac{ k_P - k_\omega }{ k_\omega }$	$\frac{ k_{\sigma_\phi} - k_\omega }{ k_\omega }$
1.1	0.0123033	0.0122825	0.0015114	0.0123717	0.0188181	0.0058209
1.2	0.0077110	0.0077069	0.0006649	0.0077308	0.0105696	0.0048619
1.3	0.0058576	0.0058561	0.0000215	0.0058675	0.0075646	0.0041546
1.4	0.0047649	0.0047642	0.0005652	0.0047710	0.0059258	0.0036060
2.1	-	-	-	-	-	-
2.2	0.0122290	0.0122089	0.0015057	0.0122957	0.0186302	0.0058597
2.3	0.0077200	0.0077160	0.0006481	0.0077398	0.0105566	0.0048930
2.4	0.0058749	0.0058734	0.0000446	0.0058848	0.0075740	0.0041798
3.1	0.0123829	0.0123614	0.0015164	0.0124529	0.0190162	0.0057827
3.2	0.0077027	0.0076986	0.0006812	0.0077227	0.0105839	0.0048311
3.3	0.0058406	0.0058392	0.0000010	0.0058505	0.0075557	0.0041296
3.4	0.0047480	0.0047473	0.0005382	0.0047541	0.0059126	0.0035854
4.1	0.0174101	0.0173345	0.0013922	0.0175996	0.0298772	0.0050037
4.2	0.0077835	0.0077771	0.0009476	0.0078078	0.0114001	0.0041790
4.3	0.0055441	0.0055422	0.0003991	0.0055540	0.0074953	0.0035975
4.4	0.0044102	0.0044093	0.0000461	0.0044158	0.0056791	0.0031435
5.1	0.0169718	0.0169017	0.0014144	0.0171492	0.0289717	0.0050303
5.2	0.0077675	0.0077611	0.0009405	0.0077915	0.0113437	0.0042032
5.3	0.0055522	0.0055503	0.0003869	0.0055621	0.0074916	0.0036174
5.4	0.0044217	0.0044209	0.0000617	0.0044274	0.0056856	0.0031601
6.1	0.0178894	0.0178076	0.0013667	0.0180924	0.0308641	0.0049777
6.2	0.0078009	0.0077943	0.0009546	0.0078256	0.0114591	0.0041550
6.3	0.0055364	0.0055344	0.0004109	0.0055463	0.0074997	0.0035777
6.4	0.0043988	0.0043980	0.0000308	0.0044044	0.0056728	0.0031271
7.1	0.0138013	0.0137662	0.0015298	0.0139015	0.0222690	0.0053756
7.2	0.0076692	0.0076642	0.0008356	0.0076906	0.0108498	0.0044992
7.3	0.0056722	0.0056706	0.0002221	0.0056820	0.0074891	0.0038597
7.4	0.0045702	0.0045695	0.0002689	0.0045760	0.0057809	0.0033617
8.1	0.0297437	0.0294425	0.0003680	0.0304077	0.0548435	0.0047548
8.2	0.0081163	0.0081074	0.0010156	0.0081458	0.0123515	0.0038952
8.3	0.0054762	0.0054740	0.0005274	0.0054866	0.0075944	0.0033631
8.4	0.0042827	0.0042818	0.0001225	0.0042882	0.0056201	0.0029476

Tabla 5.10: Diferencias relativas entre los máximos de las funciones de dispersión y el número de onda k_ω para los primeros 8 casos. Los valores de las diferencias relativas se representan con un patrón de colores, donde el verde indica la diferencia más pequeña (más cercana) y el rojo la más grande (más lejana).

Caso	$\frac{ k_I - k_\omega }{ k_\omega }$	$\frac{ k_T - k_\omega }{ k_\omega }$	$\frac{ k_{T_I} - k_\omega }{ k_\omega }$	$\frac{ k_{T_D} - k_\omega }{ k_\omega }$	$\frac{ k_P - k_\omega }{ k_\omega }$	$\frac{ k_{\sigma_\phi} - k_\omega }{ k_\omega }$
9.1	0.0006877	0.0006875	0.0000199	0.0006881	0.0013221	0.0000532
9.2	0.0003653	0.0003652	0.0000195	0.0003654	0.0006783	0.0000522
9.3	0.0002574	0.0002574	0.0000187	0.0002574	0.0004634	0.0000513
9.4	0.0002031	0.0002031	0.0000179	0.0002031	0.0003557	0.0000504
10.1	0.0356096	0.0350102	0.0028180	0.0367869	0.0711173	0.0000581
10.2	0.0006754	0.0006752	0.0000199	0.0006758	0.0012976	0.0000533
10.3	0.0003623	0.0003622	0.0000196	0.0003624	0.0006723	0.0000523
10.4	0.0002561	0.0002561	0.0000187	0.0002561	0.0004608	0.0000513
11.1	0.0007005	0.0007003	0.0000199	0.0007009	0.0013478	0.0000532
11.2	0.0003683	0.0003683	0.0000195	0.0003684	0.0006844	0.0000522
11.3	0.0002587	0.0002587	0.0000187	0.0002587	0.0004661	0.0000513
11.4	0.0002038	0.0002038	0.0000179	0.0002038	0.0003572	0.0000504
12.1	0.0013159	0.0013151	0.0000175	0.0013175	0.0025793	0.0000524
12.2	0.0004663	0.0004663	0.0000194	0.0004665	0.0008813	0.0000514
12.3	0.0002963	0.0002963	0.0000187	0.0002964	0.0005421	0.0000505
12.4	0.0002231	0.0002231	0.0000179	0.0002231	0.0003965	0.0000496
13.1	0.0012675	0.0012667	0.0000177	0.0012690	0.0024824	0.0000525
13.2	0.0004610	0.0004609	0.0000194	0.0004612	0.0008706	0.0000514
13.3	0.0002945	0.0002944	0.0000187	0.0002945	0.0005384	0.0000505
13.4	0.0002222	0.0002221	0.0000179	0.0002222	0.0003946	0.0000497
14.1	0.0013684	0.0013675	0.0000172	0.0013702	0.0026843	0.0000524
14.2	0.0004718	0.0004717	0.0000194	0.0004720	0.0008922	0.0000514
14.3	0.0002982	0.0002982	0.0000187	0.0002983	0.0005459	0.0000505
14.4	0.0002240	0.0002240	0.0000179	0.0002240	0.0003984	0.0000496
15.1	0.0008967	0.0008963	0.0000192	0.0008974	0.0017405	0.0000528
15.2	0.0004085	0.0004085	0.0000195	0.0004087	0.0007652	0.0000518
15.3	0.0002750	0.0002750	0.0000187	0.0002751	0.0004992	0.0000509
15.4	0.0002124	0.0002124	0.0000179	0.0002124	0.0003747	0.0000500
16.1	0.0025808	0.0025776	0.0000078	0.0025872	0.0051092	0.0000521
16.2	0.0005476	0.0005474	0.0000192	0.0005478	0.0010440	0.0000510
16.3	0.0003224	0.0003224	0.0000187	0.0003225	0.0005947	0.0000501
16.4	0.0002355	0.0002355	0.0000179	0.0002355	0.0004217	0.0000493

Tabla 5.11: Diferencias relativas entre los máximos de las funciones de dispersión y el número de onda k_ω para los últimos 8 casos. Los valores de las diferencias relativas se representan con un patrón de colores, donde el verde indica la diferencia más pequeña (más cercana) y el rojo la más grande (más lejana).

Caso	$\frac{ k_l - K }{ K }$	$\frac{ k_r - K }{ K }$	$\frac{ k_{T_l} - K }{ K }$	$\frac{ k_{T_D} - K }{ K }$	$\frac{ k_P - K }{ K }$	$\frac{ k_{\sigma_\phi} - K }{ K }$
1.1	0.0055537	0.0055741	0.0161553	0.0054866	0.0008462	0.0119217
1.2	0.0023225	0.0023264	0.0092984	0.0023028	0.0005077	0.0051432
1.3	0.0014063	0.0014077	0.0072429	0.0013964	0.0002884	0.0030970
1.4	0.0010122	0.0010128	0.0063116	0.0010060	0.0001421	0.0021643
2.1	0.7936911	-	-	0.3315381	0.0013910	-
2.2	0.0054444	0.0054641	0.0159804	0.0053788	0.0008450	0.0117025
2.3	0.0023033	0.0023072	0.0093049	0.0022837	0.0005051	0.0051022
2.4	0.0014017	0.0014032	0.0072783	0.0013919	0.0002851	0.0030846
3.1	0.0056677	0.0056889	0.0163404	0.0055989	0.0008473	0.0121502
3.2	0.0023422	0.0023463	0.0092937	0.0023224	0.0005103	0.0051852
3.3	0.0014110	0.0014125	0.0072086	0.0014012	0.0002917	0.0031097
3.4	0.0010124	0.0010130	0.0062683	0.0010063	0.0001456	0.0021683
4.1	0.0112608	0.0113343	0.0268272	0.0110766	0.0008550	0.0233176
4.2	0.0030245	0.0030309	0.0097871	0.0030004	0.0005533	0.0065904
4.3	0.0015861	0.0015879	0.0066946	0.0015762	0.0003514	0.0035189
4.4	0.0010497	0.0010505	0.0054817	0.0010441	0.0002124	0.0023094
5.1	0.0108168	0.0108850	0.0259491	0.0106442	0.0008552	0.0224320
5.2	0.0029859	0.0029922	0.0097401	0.0029621	0.0005521	0.0065121
5.3	0.0015762	0.0015781	0.0067049	0.0015664	0.0003495	0.0034973
5.4	0.0010469	0.0010477	0.0055060	0.0010413	0.0002101	0.0023017
6.1	0.0117423	0.0118218	0.0277840	0.0115452	0.0008547	0.0242781
6.2	0.0030642	0.0030708	0.0098368	0.0030399	0.0005544	0.0066709
6.3	0.0015962	0.0015981	0.0066852	0.0015863	0.0003532	0.0035409
6.4	0.0010525	0.0010533	0.0054581	0.0010470	0.0002145	0.0023173
7.1	0.0074354	0.0074697	0.0194499	0.0073373	0.0008549	0.0156846
7.2	0.0026131	0.0026180	0.0093769	0.0025919	0.0005351	0.0057507
7.3	0.0014797	0.0014813	0.0068911	0.0014700	0.0003243	0.0032794
7.4	0.0010227	0.0010234	0.0058349	0.0010169	0.0001813	0.0022245
8.1	0.0229663	0.0232520	0.0508383	0.0223363	0.0008487	0.0466760
8.2	0.0036214	0.0036301	0.0106394	0.0035922	0.0005645	0.0077933
8.3	0.0017315	0.0017337	0.0066449	0.0017212	0.0003715	0.0038295
8.4	0.0010934	0.0010942	0.0052313	0.0010879	0.0002370	0.0024213

Tabla 5.12: Diferencias relativas entre los máximos de las funciones de dispersión y la magnitud del polo $|K|$ para los primeros 8 casos. Los valores de las diferencias relativas se representan con un patrón de colores, donde el verde indica la diferencia más pequeña (más cercana) y el rojo la más grande (más lejana).

Caso	$\frac{ k_l - K }{ K }$	$\frac{ k_r - K }{ K }$	$\frac{ k_{T_l} - K }{ K }$	$\frac{ k_{T_D} - K }{ K }$	$\frac{ k_P - K }{ K }$	$\frac{ k_{\sigma_\phi} - K }{ K }$
9.1	0.0006233	0.0006235	0.0012903	0.0006229	0.0000103	0.0012570
9.2	0.0003029	0.0003030	0.0006484	0.0003028	0.0000099	0.0006157
9.3	0.0001965	0.0001965	0.0004350	0.0001964	0.0000095	0.0004025
9.4	0.0001435	0.0001436	0.0003287	0.0001435	0.0000091	0.0002961
10.1	0.0331438	0.0337034	0.0690202	0.0320446	0.0000066	0.0663351
10.2	0.0006111	0.0006113	0.0012657	0.0006106	0.0000103	0.0012324
10.3	0.0002999	0.0002999	0.0006424	0.0002998	0.0000099	0.0006097
10.4	0.0001952	0.0001952	0.0004324	0.0001951	0.0000095	0.0003998
11.1	0.0006361	0.0006363	0.0013158	0.0006357	0.0000103	0.0012825
11.2	0.0003060	0.0003060	0.0006546	0.0003059	0.0000099	0.0006219
11.3	0.0001978	0.0001979	0.0004377	0.0001978	0.0000095	0.0004051
11.4	0.0001443	0.0001443	0.0003301	0.0001442	0.0000091	0.0002976
12.1	0.0012500	0.0012508	0.0025451	0.0012483	0.0000102	0.0025102
12.2	0.0004047	0.0004048	0.0008513	0.0004045	0.0000099	0.0008193
12.3	0.0002362	0.0002362	0.0005137	0.0002362	0.0000094	0.0004819
12.4	0.0001643	0.0001643	0.0003694	0.0001643	0.0000090	0.0003377
13.1	0.0012017	0.0012025	0.0024484	0.0012002	0.0000102	0.0024137
13.2	0.0003993	0.0003994	0.0008406	0.0003992	0.0000099	0.0008086
13.3	0.0002343	0.0002344	0.0005100	0.0002343	0.0000095	0.0004781
13.4	0.0001634	0.0001634	0.0003676	0.0001633	0.0000090	0.0003358
14.1	0.0013022	0.0013031	0.0026499	0.0013005	0.0000102	0.0026147
14.2	0.0004102	0.0004103	0.0008623	0.0004100	0.0000098	0.0008303
14.3	0.0002381	0.0002382	0.0005175	0.0002381	0.0000094	0.0004858
14.4	0.0001653	0.0001653	0.0003713	0.0001652	0.0000091	0.0003396
15.1	0.0008321	0.0008325	0.0017080	0.0008314	0.0000102	0.0016745
15.2	0.0003465	0.0003466	0.0007353	0.0003464	0.0000099	0.0007029
15.3	0.0002146	0.0002146	0.0004707	0.0002145	0.0000095	0.0004386
15.4	0.0001532	0.0001532	0.0003477	0.0001532	0.0000091	0.0003155
16.1	0.0025056	0.0025088	0.0050656	0.0024992	0.0000099	0.0050215
16.2	0.0004861	0.0004863	0.0010139	0.0004859	0.0000098	0.0009822
16.3	0.0002627	0.0002628	0.0005663	0.0002626	0.0000094	0.0005349
16.4	0.0001771	0.0001771	0.0003946	0.0001771	0.0000090	0.0003633

Tabla 5.13: Diferencias relativas entre los máximos de las funciones de dispersión y la magnitud del polo $|K|$ para los últimos 8 casos. Los valores de las diferencias relativas se representan con un patrón de colores, donde el verde indica la diferencia más pequeña (más cercana) y el rojo la más grande (más lejana).

5.2.2 Resultados de la primera aproximación para los polos y gráficas de $l^{(1)}(k)$

Mediante la primera aproximación de la matriz de reacción, se obtuvieron expresiones analíticas para las partes real e imaginaria de los polos de S (3.36). Considerando que k_{B_λ} toma como valores las posiciones de los máximos del recorrido efectivo k^* . El valor de B se obtiene evaluando ϕ en k^* , con la relación (4.12).

A continuación, se presentan los resultados que muestran cómo, al conocer k^* , es posible aproximar tanto la parte real como la imaginaria de los polos de S . Esta información está incluida en las tablas (5.14), (5.15), (5.16), (5.17), de las cuales se observan los siguientes puntos. La aproximación para la parte real, según la ecuación (3.36), indica que cuando B/r_0 es ligeramente mayor que $|\Phi_{B_\lambda}|^2/4$, la posición aproximada del polo se encuentra a la derecha de k^* . El único caso en que esto no ocurre es cuando la primera resonancia está muy cerca del origen (como en el Caso 2), donde el valor de B/r_0 es significativamente mayor que $|\Phi_{B_\lambda}|^2/4$, en comparación con otros casos. Se observa que el comportamiento general de B/r_0 y $|\Phi_{B_\lambda}|^2/4$ entre casos es casi constante, con la excepción del caso 2 en la primera resonancia. La aproximación a un nivel funciona de manera excelente para polos cercanos al origen, dado que la parte imaginaria tiende a alcanzar un valor límite, y la coincidencia entre la aproximación y el valor exacto es muy buena. Además, dado que la aproximación de la parte real depende de la parte imaginaria, también mejora significativamente en estos casos. Se prefiere utilizar los máximos de $l(k)$ en lugar de $\tau(k)$, debido a que, en casos como el 2.1, donde $\tau(k)$ no tiene un máximo local, $l(k)$ sí lo presenta. A pesar de que los máximos de $\tau(k)$ pueden ser más precisos en ciertos casos, $l(k)$ es igualmente una excelente opción para aproximar κ , y su consistencia en la presentación de máximos locales lo convierte en una opción preferida para varios casos.

En general, la aproximación a un nivel es muy precisa para la parte real de los polos y adecuada para la parte imaginaria, especialmente en resonancias alejadas del origen. Sin embargo, cuando las resonancias están muy cerca del origen, la aproximación es excelente para ambas partes del polo. Se comenta que esto es solo en base a los resultados numéricos, ya que aún queda como incógnita el mecanismo detrás de la excelente aproximación en los casos donde el valor de α se acerca por debajo a un múltiplo de $\pi/2$. Posterior a las tablas de datos, se muestran las gráficas de comparación entre la forma exacta y la primera aproximación del recorrido efectivo, donde se muestran los casos representativos [1,2,3,9,10,11].

$\alpha[\pi/2]$	7.00	6.96	7.04	8.00	7.96	8.04	7.50	8.50
Q_α	4.00	3.98	4.02	4.50	4.48	4.52	4.25	4.75
k_1^*	3.53158	0.09673	3.50005	2.55926	2.60804	2.50928	3.09995	1.81437
$ \Phi_{B_1} ^2/4$	0.20025	0.20038	0.20025	0.20025	0.20025	0.20025	0.20025	0.20025
κ_1	3.52012	0.24393	3.48876	2.55220	2.60079	2.50241	3.09064	1.81011
$\kappa_1^{(1)}$	3.53168	0.24478	3.50015	2.55949	2.60826	2.50952	3.10009	1.81495
η_1	0.46958	0.40042	0.46792	0.43144	0.43284	0.43005	0.44965	0.41473
$\eta_1^{(1)}$	0.40050	0.40075	0.40050	0.40050	0.40050	0.40050	0.40050	0.40050
$ K_1 $	3.55130	0.46887	3.51999	2.58841	2.63656	2.53910	3.12318	1.85702
$ K_1^{(1)} $	3.55432	0.46960	3.52299	2.59064	2.63883	2.54128	3.12586	1.85861
$2/l(k_1^*)$	0.39922	0.27463	0.39920	0.39808	0.39817	0.39799	0.39885	0.39574
B/r_0	0.20114	0.26346	0.20115	0.20171	0.20167	0.20176	0.20133	0.20288
$\phi^*[\pi/2]$	0.96378	0.22401	0.96345	0.94993	0.95087	0.94892	0.95871	0.92911

Tabla 5.14: Primera aproximación, primera resonancia para los primeros 8 casos, se escribe el valor de α en múltiplos de $\pi/2$ y el valor de Q_α . Aquí k_1^* es la posición del primer máximo de la función $l(k)$, $K_1 = \kappa_1 - i\eta_1$ es el valor exacto del polo y $K_1^{(1)} = \kappa_1^{(1)} - i\eta_1^{(1)}$ es el polo de la aproximación a primer nivel, además del valor de $2/l(k^*)$ (3.44). El valor de B es el valor $B(k_1^*)$ resonante y ϕ^* es el “phase shift” resonante asociado a k_1^* .

$\alpha[\pi/2]$	79.00	78.96	79.04	80.00	79.96	80.04	79.50	80.50
Q_α	40.00	39.98	40.02	40.50	40.48	40.52	40.25	40.75
k_1^*	11.23258	1.52701	11.12094	7.96242	8.11949	7.80211	9.74085	5.63193
$ \Phi_{B_1} ^2/4$	0.20000	0.20000	0.20000	0.20000	0.20000	0.20000	0.20000	0.20000
κ_1	11.23223	1.52783	11.12059	7.96218	8.11924	7.80187	9.74055	5.63177
$\kappa_1^{(1)}$	11.23258	1.52787	11.12094	7.96243	8.11950	7.80212	9.74086	5.63195
η_1	0.40669	0.40013	0.40656	0.40331	0.40345	0.40318	0.40500	0.40165
$\eta_1^{(1)}$	0.40001	0.40001	0.40001	0.40001	0.40001	0.40001	0.40001	0.40001
$ K_1 $	11.23959	1.57935	11.12801	7.97239	8.12926	7.81228	9.74897	5.64608
$ K_1^{(1)} $	11.23970	1.57937	11.12813	7.97247	8.12934	7.81236	9.74907	5.64613
$2/l(k_1^*)$	0.39988	0.39338	0.39988	0.39975	0.39976	0.39974	0.39984	0.39950
B/r_0	0.20007	0.20332	0.20007	0.20014	0.20013	0.20014	0.20009	0.20026
$\phi^*[\pi/2]$	0.98866	0.91573	0.98855	0.98400	0.98431	0.98367	0.98693	0.97737

Tabla 5.15: Primera aproximación, primera resonancia para los últimos 8 casos, se escribe el valor de α en múltiplos de $\pi/2$ y el valor de Q_α . Aquí k_1^* es la posición del primer máximo de la función $l(k)$, $K_1 = \kappa_1 - i\eta_1$ es el valor exacto del polo y $K_1^{(1)} = \kappa_1^{(1)} - i\eta_1^{(1)}$ es el polo de la aproximación a primer nivel. El valor de B es el valor $B(k_1^*)$ resonante y ϕ^* es el “phase shift” resonante asociado a k_1^* .

$\alpha[\pi/2]$	7.00	6.96	7.04	8.00	7.96	8.04	7.50	8.50
Q_α	4.00	3.98	4.02	4.50	4.48	4.52	4.25	4.75
k_2^*	5.31638	3.56265	5.29549	4.72674	4.75332	4.69987	5.04001	4.36864
$ \Phi_{B_2} ^2/4$	0.20017	0.20025	0.20017	0.20017	0.20017	0.20017	0.20017	0.20017
κ_2	5.30229	3.55102	5.28153	4.71572	4.74219	4.68897	5.02750	4.35907
$\kappa_2^{(1)}$	5.31641	3.56275	5.29552	4.72678	4.75337	4.69991	5.04005	4.36870
η_2	0.53039	0.47126	0.52862	0.48967	0.49116	0.48818	0.50915	0.47173
$\eta_2^{(1)}$	0.40034	0.40050	0.40034	0.40034	0.40034	0.40034	0.40034	0.40034
$ K_2 $	5.32875	3.58216	5.30792	4.74108	4.76756	4.71431	5.05321	4.38452
$ K_2^{(1)} $	5.33146	3.58519	5.31063	4.74371	4.77020	4.71693	5.05592	4.38700
$2/l(k_2^*)$	0.39977	0.39925	0.39977	0.39962	0.39963	0.39961	0.39971	0.39950
B/r_0	0.20062	0.20113	0.20062	0.20069	0.20069	0.20070	0.20065	0.20075
$\phi^*[\pi/2]$	0.97599	0.96410	0.97589	0.97299	0.97314	0.97283	0.97467	0.97077

Tabla 5.16: Primera aproximación, segunda resonancia para los primeros 8 casos, se escribe el valor de α en múltiplos de $\pi/2$ y el valor de Q_α . Aquí k_2^* es la posición del segundo máximo de la función $l(k)$, $K_2 = \kappa_2 - i\eta_2$ es el valor exacto del polo y $K_2^{(1)} = \kappa_2^{(1)} - i\eta_2^{(1)}$ es el polo de la aproximación a primer nivel. El valor de B es el valor $B(k_2^*)$ resonante y ϕ^* es el “phase shift” resonante asociado a k_2^* .

$\alpha[\pi/2]$	79.00	78.96	79.04	80.00	79.96	80.04	79.50	80.50
Q_α	40.00	39.98	40.02	40.50	40.48	40.52	40.25	40.75
k_2^*	15.98937	11.34307	15.91114	13.88846	13.97911	13.79718	14.97910	12.69677
$ \Phi_{B_2} ^2/4$	0.20000	0.20000	0.20000	0.20000	0.20000	0.20000	0.20000	0.20000
κ_2	15.98888	11.34271	15.91065	13.88804	13.97868	13.79676	14.97864	12.69639
$\kappa_2^{(1)}$	15.98938	11.34307	15.91114	13.88847	13.97911	13.79718	14.97910	12.69677
η_2	0.41329	0.40683	0.41316	0.40988	0.41002	0.40975	0.41158	0.40820
$\eta_2^{(1)}$	0.40001	0.40001	0.40001	0.40001	0.40001	0.40001	0.40001	0.40001
$ K_2 $	15.99422	11.35001	15.91601	13.89409	13.98469	13.80284	14.98429	12.70295
$ K_2^{(1)} $	15.99438	11.35013	15.91617	13.89422	13.98483	13.80298	14.98444	12.70307
$2/l(k_2^*)$	0.39994	0.39988	0.39994	0.39992	0.39992	0.39992	0.39993	0.39991
B/r_0	0.20004	0.20007	0.20004	0.20005	0.20005	0.20005	0.20004	0.20005
$\phi^*[\pi/2]$	0.99204	0.98877	0.99200	0.99083	0.99089	0.99077	0.99150	0.98997

Tabla 5.17: Primera aproximación, segunda resonancia para los últimos 8 casos, se escribe el valor de α en múltiplos de $\pi/2$ y el valor de Q_α . Aquí k_2^* es la posición del segundo máximo de la función $l(k)$, $K_2 = \kappa_2 - i\eta_2$ es el valor exacto del polo y $K_2^{(1)} = \kappa_2^{(1)} - i\eta_2^{(1)}$ es el polo de la aproximación a primer nivel. El valor de B es el valor $B(k_2^*)$ resonante y ϕ^* es el “phase shift” resonante asociado a k_2^* .

Se puede observar que la aproximación a un nivel funciona en una vecindad pequeña para los tres primeros casos, ya que la coincidencia entre las gráficas solo sucede en el pico de la función, siendo la excepción la primera resonancia del segundo caso, donde la coincidencia es muy buena en una vecindad más amplia. Para los tres casos posteriores (valores de α 10 veces mayores), la aproximación tiene mejor coincidencia en un mayor rango. Al igual que en el conjunto anterior, para la primera resonancia del caso 10, la coincidencia entre gráficas es excelente. Esto sugiere que la aproximación a un nivel es más precisa en resonancias cercanas al origen y para valores grandes de α .

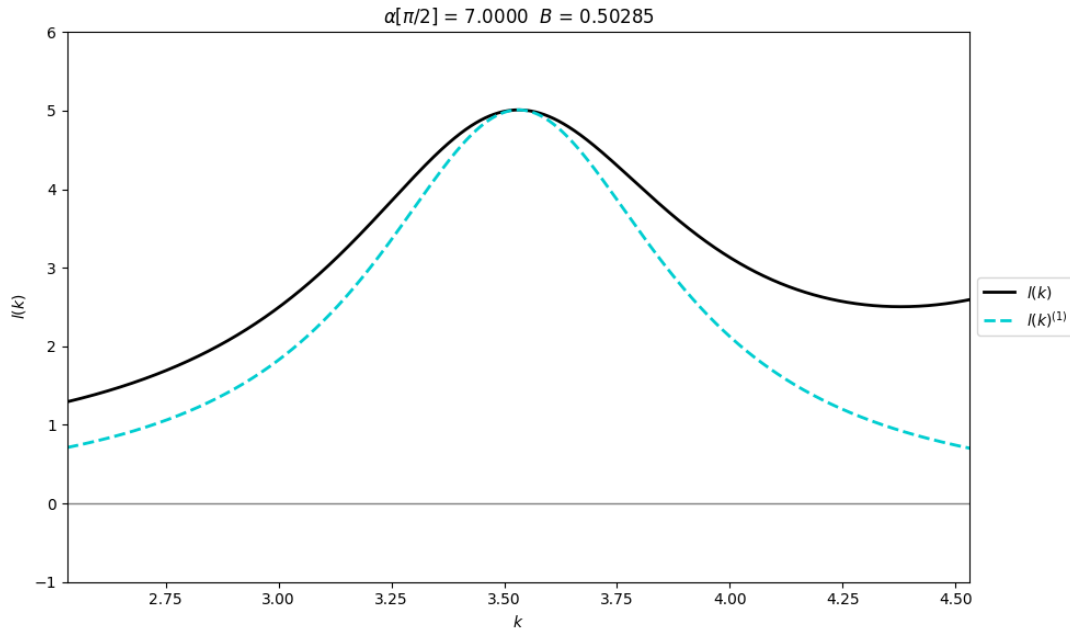


Figura 5.26: Comparación gráfica entre el recorrido efectivo exacto $l(k)$ (línea negra) y el recorrido efectivo a primer nivel $l^{(1)}(k)$ (línea punteada turquesa) para la primera resonancia del caso 1. La coincidencia entre ambas gráficas solo sucede en una vecindad muy pequeña alrededor del máximo de $l(k)$.

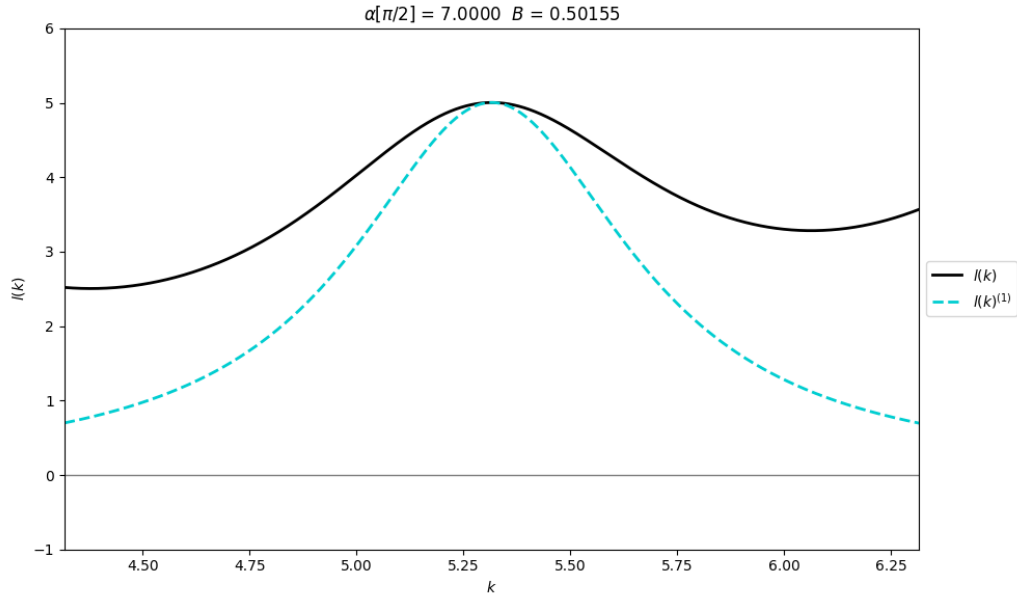


Figura 5.27: Comparación grafica entre el recorrido efectivo exacto $l(k)$ (línea negra) y el recorrido efectivo a primer nivel $l^{(1)}(k)$ (línea punteada turquesa) para la segunda resonancia del caso 1. Sucede lo mismo que en el primer caso.

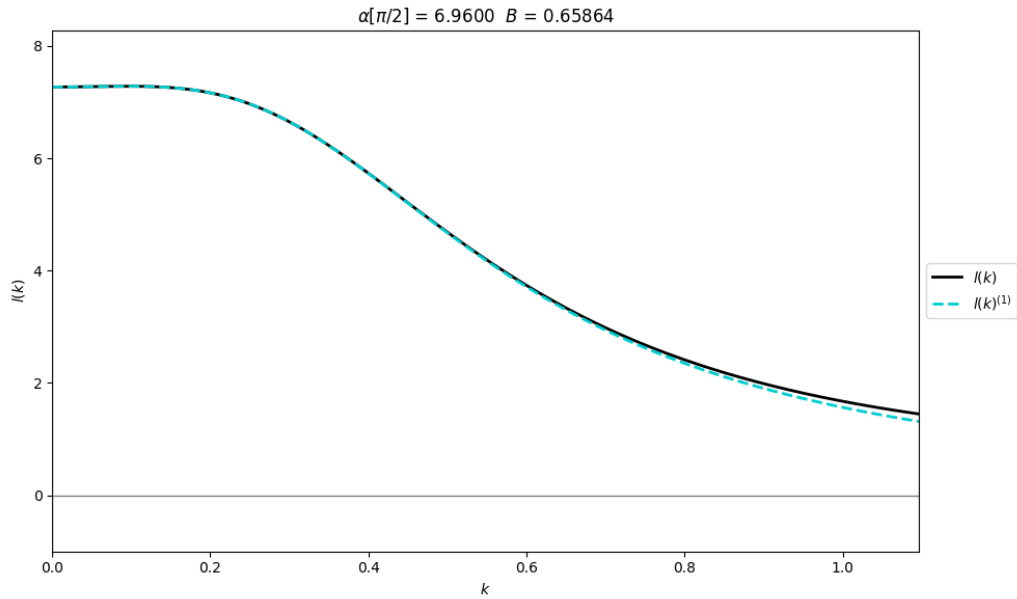


Figura 5.28: Comparación grafica entre el recorrido efectivo exacto $l(k)$ (línea negra) y el recorrido efectivo a primer nivel $l^{(1)}(k)$ (línea punteada turquesa) para la primera resonancia del caso 2. La coincidencia entre graficas es excelente, esto debido a que en la tabla 5.14, la aproximación de cada parte del polo es excelente.

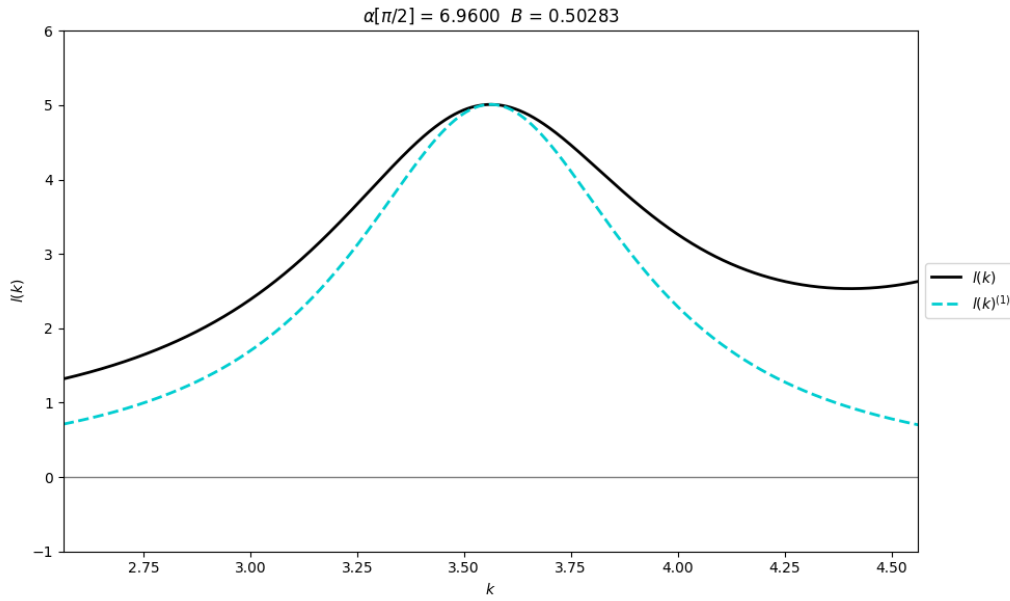


Figura 5.29: Comparación grafica entre el recorrido efectivo exacto $l(k)$ (línea negra) y el recorrido efectivo a primer nivel $l^{(1)}(k)$ (línea punteada turquesa) para la segunda resonancia del caso 2. Sucede lo mismo que en el primer caso.

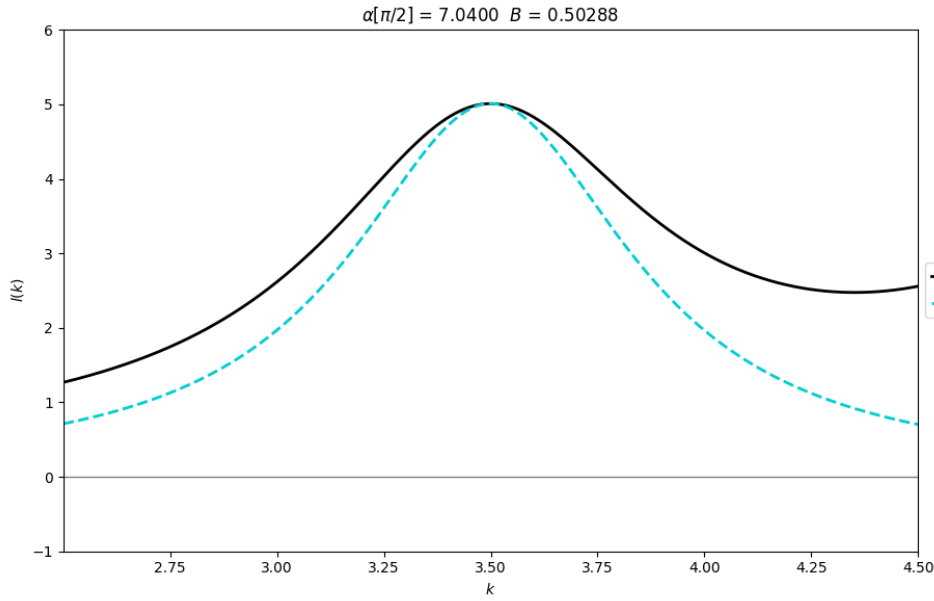


Figura 5.30: Comparación grafica entre el recorrido efectivo exacto $l(k)$ (línea negra) y el recorrido efectivo a primer nivel $l^{(1)}(k)$ (línea punteada turquesa) para la primera resonancia del caso 3. Sucede lo mismo que en el primer caso.

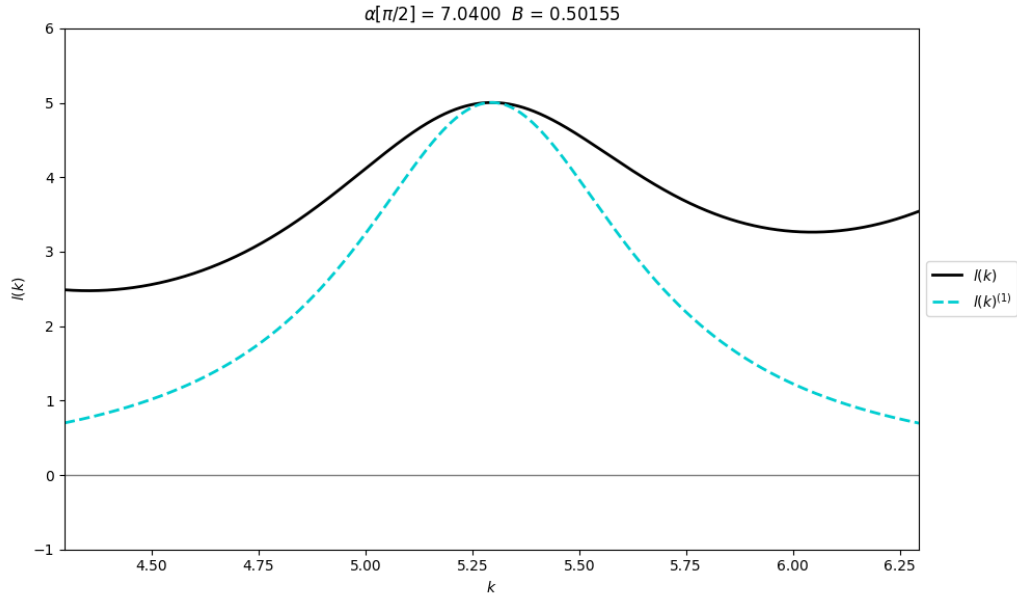


Figura 5.31: Comparación grafica entre el recorrido efectivo exacto $l(k)$ (línea negra) y el recorrido efectivo a primer nivel $l^{(1)}(k)$ (línea punteada turquesa) para la segunda resonancia del caso 3. Sucede lo mismo que en el primer caso.

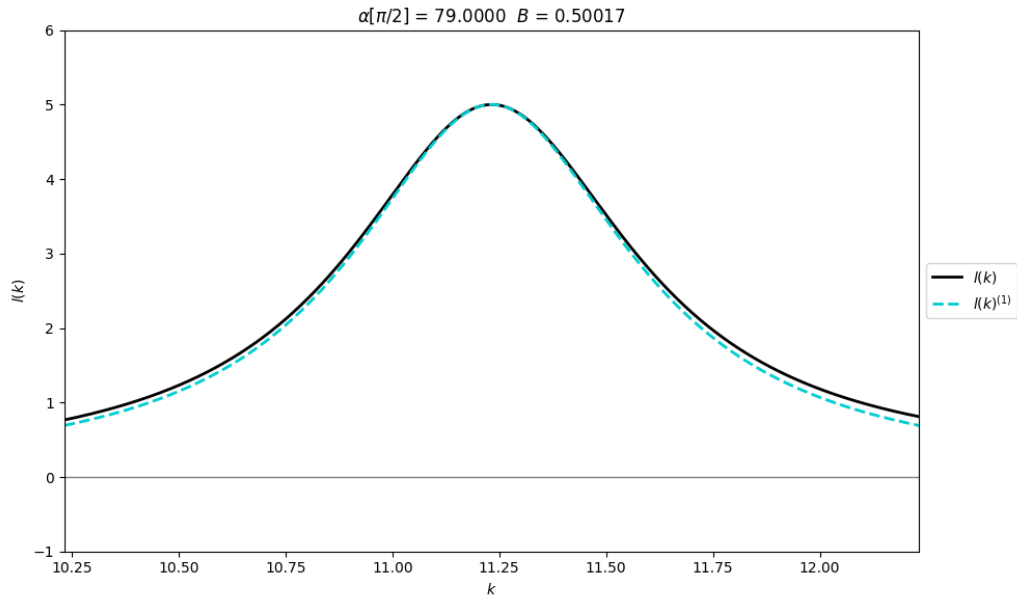


Figura 5.32: Comparación grafica entre el recorrido efectivo exacto $l(k)$ (línea negra) y el recorrido efectivo a primer nivel $l^{(1)}(k)$ (línea punteada turquesa) para la primera resonancia del caso 9. La coincidencia entre las graficas es mejor que en los casos anteriores, esto debido al aumento en el valor de α que se refleja en picos más aislados.

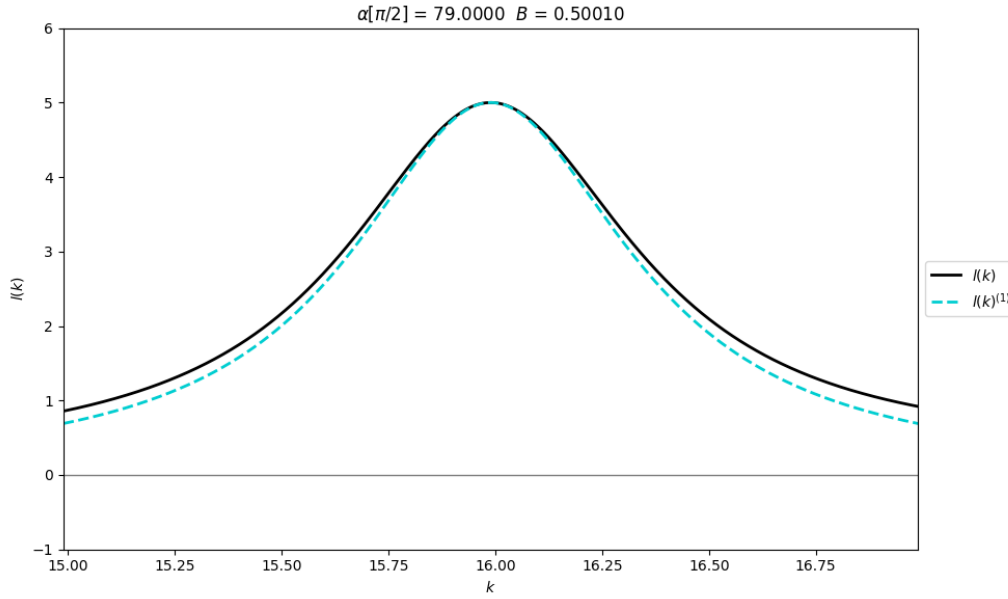


Figura 5.33: Comparación grafica entre el recorrido efectivo exacto $l(k)$ (línea negra) y el recorrido efectivo a primer nivel $l^{(1)}(k)$ (línea punteada turquesa) para la segunda resonancia del caso 9. Sucede lo mismo que en el noveno caso y la primera resonancia.

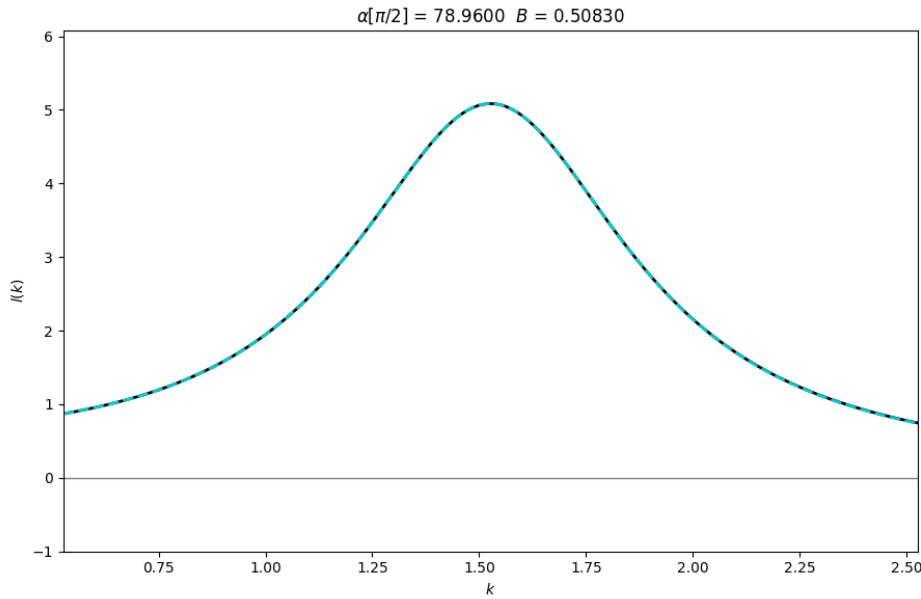


Figura 5.34: Comparación grafica entre el recorrido efectivo exacto $l(k)$ (línea negra) y el recorrido efectivo a primer nivel $l^{(1)}(k)$ (línea punteada turquesa) para la primera resonancia del caso 10. La coincidencia entre graficas es la mejor, esto debido a que la aproximación a un nivel para los polos es excelente (5.16) y también se tiene un valor de α grande.

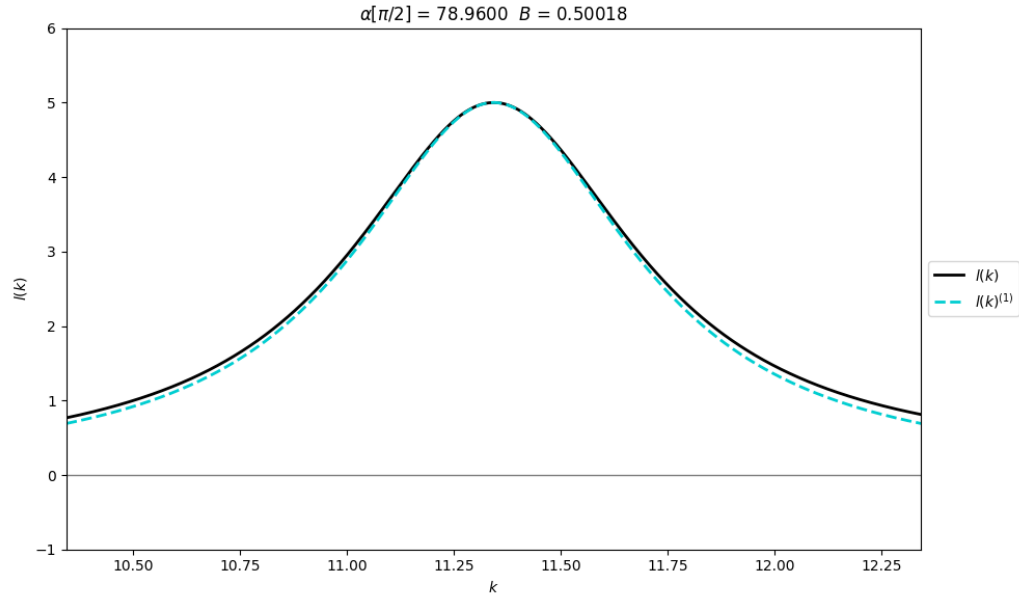


Figura 5.35: Comparación grafica entre el recorrido efectivo exacto $l(k)$ (línea negra) y el recorrido efectivo a primer nivel $l^{(1)}(k)$ (línea punteada turquesa) para la segunda resonancia del caso 10. Sucede lo mismo que en el noveno caso y la primera resonancia.

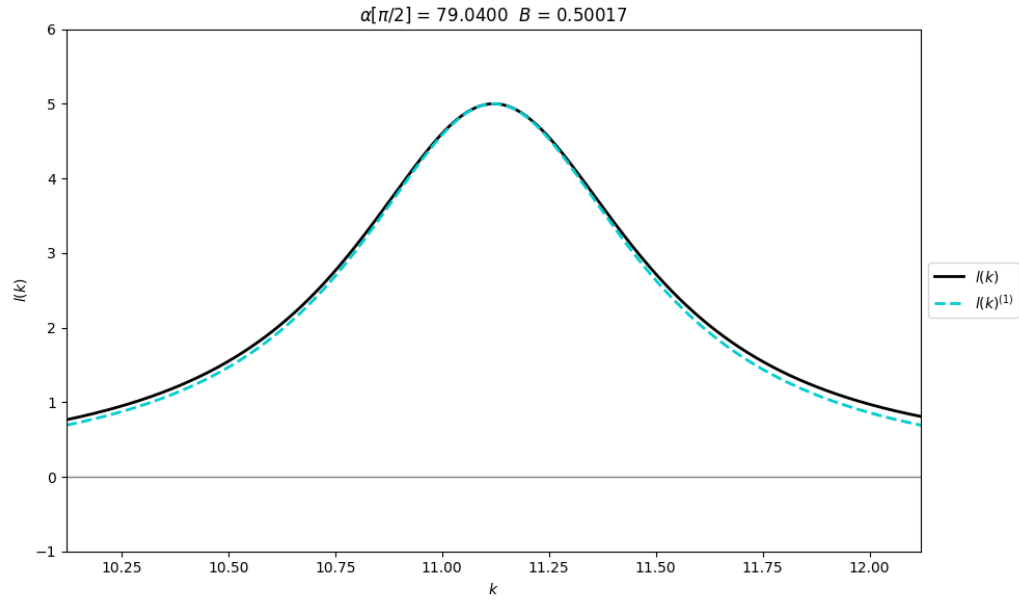


Figura 5.36: Comparación grafica entre el recorrido efectivo exacto $l(k)$ (línea negra) y el recorrido efectivo a primer nivel $l^{(1)}(k)$ (línea punteada turquesa) para la primera resonancia del caso 11. Sucede lo mismo que en el noveno caso y la primera resonancia.

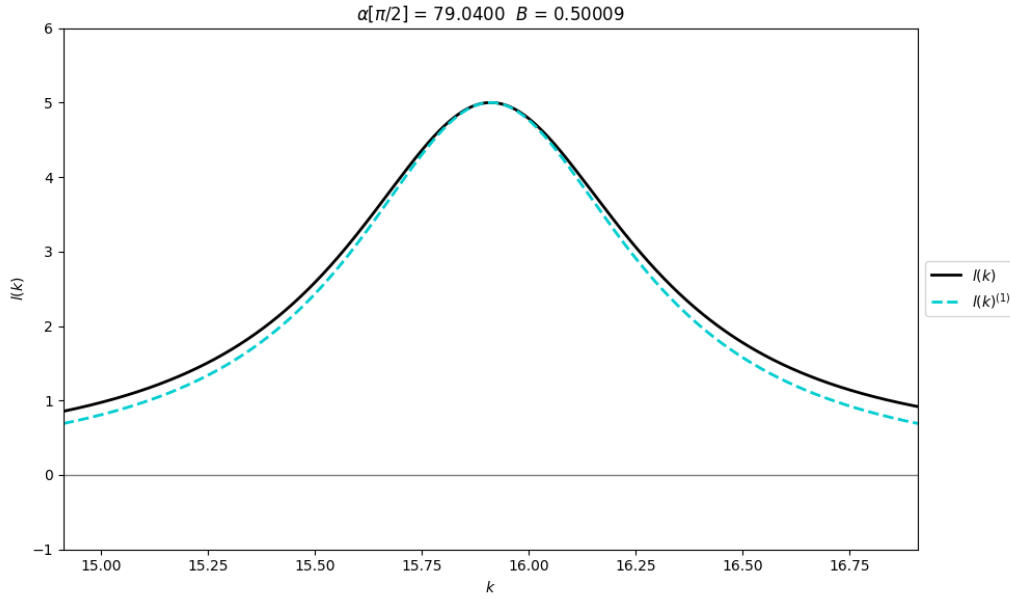


Figura 5.37: Comparación grafica entre el recorrido efectivo exacto $l(k)$ (línea negra) y el recorrido efectivo a primer nivel $l^{(1)}(k)$ (línea punteada turquesa) para la segunda resonancia del caso 11. Sucede lo mismo que en el noveno caso y la primera resonancia.

5.2.3 Máximos de las funciones de dispersión a primer nivel

Con base en las ecuaciones (3.45), (3.46), (3.47) y (3.49), se calcularon las posiciones aproximadas de los máximos de las funciones de dispersión a primer nivel, para luego compararlas con los valores exactos. En la mayoría de los casos, se encuentra una buena concordancia entre el valor exacto y el aproximado, con la excepción del segundo caso, donde el máximo del tiempo de demora, que no aparece en la forma exacta, está presente en la aproximación.

Se observó que la aproximación a primer nivel puede mejorarse si se usa el valor exacto de la parte imaginaria de los polos de S , en lugar de la aproximación presentada en la ecuación (3.36). A pesar de ello, la posición de los máximos a primer nivel es bien descrita en general, lo que respalda la idea de que, al conocer la posición del máximo de alguna función de dispersión en este modelo, las posiciones de los máximos restantes quedan determinadas con buena precisión.

$\alpha[\pi/2]$	k_τ	$k_\tau^{(1)}$	k_{T_I}	$k_{T_I}^{(1)}$	k_P	$k_P^{(1)}$	k_{σ_ϕ}	$k_{\sigma_\phi}^{(1)}$
7.00	3.53151	3.53153	3.49393	3.50872	3.55431	3.55422	3.50896	3.50890
6.96	-	0.09829	-	-	0.46952	0.41226	-	-
7.04	3.49997	3.50009	3.46248	3.47698	3.52298	3.52289	3.47723	3.47716
8.00	2.55907	2.55941	2.51897	2.52754	2.59062	2.59041	2.52806	2.52796
7.96	2.60786	2.60819	2.56815	2.57693	2.63882	2.63862	2.57742	2.57733
8.04	2.50908	2.50944	2.46855	2.47691	2.54127	2.54104	2.47745	2.47736
7.50	3.09985	3.10003	3.06243	3.07386	3.12585	3.12572	3.07419	3.07411
8.50	1.81384	1.81484	1.76261	1.76907	1.85859	1.85804	1.77034	1.77020
79.00	11.23258	11.23258	11.22508	11.22545	11.23970	11.23970	11.22546	11.22546
78.96	1.52612	1.52789	1.47034	1.47277	1.57936	1.57853	1.47458	1.47458
79.04	11.12093	11.12094	11.11337	11.11374	11.12813	11.12813	11.11374	11.11374
80.00	7.96241	7.96243	7.95210	7.95236	7.97247	7.97246	7.95237	7.95237
79.96	8.11949	8.11950	8.10936	8.10963	8.12934	8.12934	8.10964	8.10964
80.04	7.80210	7.80211	7.79158	7.79184	7.81236	7.81236	7.79185	7.79185
79.50	9.74085	9.74086	9.73231	9.73263	9.74907	9.74906	9.73264	9.73264
80.50	5.63191	5.63195	5.61747	5.61769	5.64613	5.64612	5.61772	5.61772

Tabla 5.18: Aproximación de los máximos de las funciones de dispersión a partir de conocer la posición del máximo del recorrido efectivo para la primera resonancia. Se observa que la aproximación es bastante buena para la mayoría de los casos.

Capítulo 6

Conclusiones

En este trabajo se consideró la dispersión cuántica de una partícula con momento angular cero en potenciales centrales con radio finito r_0 utilizando la matriz de reacción de Wigner como herramienta fundamental y el conocimiento de las condiciones de frontera de la función de onda en $r = r_0$. Este enfoque permitió derivar expresiones analíticas para los polos de la matriz de dispersión S y para varias funciones de dispersión, tales como la sección transversal, el tiempo de demora, de permanencia, de interacción, la probabilidad de atrapamiento y el recorrido efectivo. Estas expresiones se obtuvieron bajo la aproximación a un solo nivel de la matriz de reacción $R_B(k)$:

$$R_B(k) \approx \sum \frac{|\Phi_{B_\lambda}|^2/r_0}{k_{B_\lambda}^2 - k^2} \approx \frac{|\Phi_{B_\lambda}|^2/r_0}{k_{B_\lambda}^2 - k^2},$$

donde $B \equiv r_0 \left. \frac{d\Phi_{B_\lambda}/dr}{\Phi_{B_\lambda}} \right|_{r_0}$, $\forall \lambda$ es el parámetro que fija la condición de frontera de las eigenfunciones de reacción $\Phi_{B_\lambda}(r)$ y su espectro de reacción $\{k_{B_\lambda}, \lambda = 1, \dots, \infty\}$.

Formalmente, cualquier valor real de B es válido para expandir en $r < r_0$ la función de onda de dispersión. Se usó esta libertad para escoger B igual al valor físico o natural de $r_0\psi'/\psi$ en $r = r_0$ bajo condiciones de resonancia. Es decir, se escogió B tal que:

$$B = kr_0 \cot \phi, \quad \forall \lambda.$$

Los principales resultados pueden resumirse en los siguientes puntos:

1. Predicción de los polos de resonancia

- La aproximación propuesta permitió estimar en buena medida los polos de la matriz S en el espacio k , incluyendo tanto su parte real κ_n como la parte imaginaria

η_n .

- Se identificaron los valores de k en los que ocurren las resonancias asociadas a diferentes funciones de dispersión, estableciendo una secuencia coherente de posiciones:

$$k_\omega \approx k_{T_I} < k_{\sigma_\phi} \approx \kappa < k_\tau < k^* < k_{T_D} < |K| \approx k_P.$$

Esta secuencia coincide con las predicciones teóricas a primer nivel.

2. Diferencias en las funciones de dispersión

- Se encontró que las distintas funciones de dispersión (tiempo de demora, permanencia e interacción) no coinciden en sus posiciones de resonancia, particularmente en los primeros polos. Estas diferencias disminuyen para resonancias de mayor orden.
- Se plantea la pregunta sobre cuál de estas funciones describe de manera más adecuada el tiempo de vida de una partícula cuasi-estable asociada a una resonancia, dejando abierta esta cuestión para investigaciones futuras.

3. Importancia del recorrido efectivo

- La función de recorrido efectivo $l(k) = 2 \frac{d\phi}{dk}$ resultó particularmente útil, ya que las resonancias ocurren muy cercanas a los valores reales de los polos de S .
- Se mostró que en los puntos k_n^* el recorrido efectivo satisface:

$$l(k_n^*) = \frac{2}{\eta_n}.$$

Finalmente, se reafirma que la aproximación a un solo nivel de la matriz de reacción proporciona una buena descripción de los polos de resonancia y de las funciones de dispersión. Se concluye que el uso combinado de varias funciones de dispersión permite caracterizar de manera más completa el fenómeno de resonancia, identificando patrones clave en sus posiciones y amplitudes.

Tradicionalmente, la sección eficaz ha sido la cantidad experimental de referencia para identificar y caracterizar resonancias, debido a su conexión directa con observables medibles. Sin embargo, avances recientes en técnicas ultrarrápidas, como pulsos láser modulados [4, 37], el “attosecond streaking” y el “attoclock” [21, 28], han demostrado que es posible medir la fase de dispersión y el tiempo de demora de Wigner de manera experimental.

Apéndice A

Análisis de dispersión a bajas energías

A.1 Desarrollo de las funciones de dispersión cerca de $k = 0$

Todas las funciones de dispersión dependen de ϕ . Para el sistema de pozo cuadrado con un canal, se tiene la relación:

$$\tan \phi = \frac{k}{q} \tan \delta, \quad (\text{A.1})$$

donde $\delta(k)$ está definida como:

$$\delta(k) \equiv qr_0, \quad (\text{A.2})$$

con $q = \sqrt{2V_0 + k^2}$ siendo el número de onda dentro del pozo cuadrado, y k el número de onda en la región exterior, donde el potencial es cero.

Es de interés determinar el comportamiento de las funciones de dispersión para valores pequeños de k , por lo que se analiza el comportamiento de $\delta(k)$ mediante una expansión alrededor de $k = 0$:

$$\delta(k) = \delta(0) + \delta'(0)k + \frac{\delta''(0)}{2}k^2 + \mathcal{O}(k^3), \quad (\text{A.3})$$

donde:

$$\delta(0) = \alpha, \quad (\text{A.4a})$$

$$\delta'(k) = \frac{k}{q} r_0, \quad (\text{A.4b})$$

$$\delta'(0) = 0, \quad (\text{A.4c})$$

$$\delta''(k) = \frac{2V_0}{q^3} r_0, \quad (\text{A.4d})$$

$$\delta''(0) = \frac{1}{\sqrt{2V_0}} r_0. \quad (\text{A.4e})$$

Considerando hasta el segundo orden en valores pequeños de k , se tiene:

$$\tan \phi \approx \frac{k}{q} \tan \left(\alpha + \frac{\delta''(0)}{2} k^2 \right). \quad (\text{A.5})$$

Al expandir en serie de Taylor alrededor de $k = 0$, se obtiene:

$$\tan \phi \approx \frac{k}{q} \tan(\alpha) + \frac{k^3}{q} \sec^2(\alpha) \frac{\delta''(0)}{2}. \quad (\text{A.6})$$

Este es el comportamiento general. De esta ecuación se obtiene que si α es un múltiplo impar de $\pi/2$ (α_N), el comportamiento límite de $\tan(\phi)$ es distinto al caso donde α es cualquier otro valor. Si $\alpha \neq \alpha_N$, se concluye que:

$$\phi \rightarrow 0 \quad \text{cuando} \quad k \rightarrow 0. \quad (\text{A.7})$$

Mientras que si $\alpha = \alpha_N$, se sustituye este valor en la ecuación (A.5):

$$\tan \phi = -\frac{k}{q} \cot \left(\frac{\delta''(0)}{2} k^2 \right) = -\frac{k}{q} \frac{1}{\tan \left(\frac{\delta''(0)}{2} k^2 \right)}, \quad (\text{A.8a})$$

$$\tan \phi \approx -\frac{k}{q} \frac{2}{\delta''(0)} \frac{1}{k^2} = -\frac{2}{\sqrt{2V_0}} \frac{1}{\delta''(0)k}. \quad (\text{A.8b})$$

Donde, conforme k se acerque a cero, el valor de $\tan \phi \rightarrow -\infty$ y por lo tanto $\phi \rightarrow -\pi/2$ conforme $k \rightarrow 0$. Expandiendo esta ecuación en serie de Taylor alrededor de $k = 0$, se tiene:

$$\phi(k) \approx -\frac{\pi}{2} + \frac{\sqrt{2V_0}}{2} \delta''(0)k - \left(\frac{\sqrt{2V_0}}{2} \delta''(0) \right)^3 \frac{k^3}{3}. \quad (\text{A.9})$$

Resumiendo, se tiene que el comportamiento de ϕ cerca de $k = 0$ está dado por:

$$\phi(k) \approx \begin{cases} \frac{k}{\sqrt{2V_0}} \tan \alpha + \frac{k^3}{\sqrt{2V_0}} \sec^2 \alpha \frac{\delta''(0)}{2}, & \text{si } \alpha \neq \alpha_N, \\ -\pi/2 + \frac{\sqrt{2V_0}}{2} \delta''(0)k - \frac{k^3}{3} \left(\frac{\sqrt{2V_0}}{2} \delta''(0) \right)^3, & \text{si } \alpha = \alpha_N. \end{cases} \quad (\text{A.10})$$

Y en el límite $k \rightarrow 0$:

$$\phi(k \rightarrow 0) \rightarrow \begin{cases} 0, & \text{si } \alpha \neq \alpha_N, \\ -\pi/2, & \text{si } \alpha = \alpha_N. \end{cases} \quad (\text{A.11})$$

Utilizando la ecuación (A.10), es posible derivar el comportamiento de $l(k)$ cerca y en $k = 0$, obteniendo:

$$l(k) = 2 \frac{d\phi}{dk} \approx \begin{cases} \frac{2 \tan \alpha}{\sqrt{2V_0}} + \frac{6k^2}{\sqrt{2V_0}} \delta''(0) \sec^2 \alpha, & \text{si } \alpha \neq \alpha_N, \\ \sqrt{2V_0} \delta''(0) + \left(\frac{\sqrt{2V_0} \delta''(0)}{2} \right)^3 k^2, & \text{si } \alpha = \alpha_N. \end{cases} \quad (\text{A.12})$$

De forma exacta:

$$l(0) = l_0 \rightarrow \begin{cases} 2 \frac{\tan \alpha}{\sqrt{2V_0}}, & \text{si } \alpha \neq \alpha_N, \\ r_0, & \text{si } \alpha = \alpha_N. \end{cases} \quad (\text{A.13})$$

Conociendo estas cantidades para l_0 es posible obtener el valor del tiempo de interacción cerca de $k = 0$:

$$T_I(k) = \frac{\mu}{\hbar k} 2 \frac{d\phi}{dk} \approx \begin{cases} \frac{\mu}{\hbar} \left[\frac{2 \tan \alpha}{k \sqrt{2V_0}} + \frac{6k}{\sqrt{2V_0}} \delta''(0) \sec^2 \alpha \right], & \text{si } \alpha \neq \alpha_N, \\ \frac{\mu}{\hbar} \left[\frac{\sqrt{2V_0}}{k} \delta''(0) + \left(\frac{\sqrt{2V_0} \delta''(0)}{2} \right)^3 k \right], & \text{si } \alpha = \alpha_N. \end{cases} \quad (\text{A.14})$$

De forma exacta:

$$T_I(0) = T_{I_0} \rightarrow \begin{cases} \frac{\mu \tan \alpha}{\hbar k}, & \text{si } \alpha \neq \alpha_N, \\ \infty, & \text{si } \alpha = \alpha_N. \end{cases} \quad (\text{A.15})$$

El valor de $l(k)$ cerca de $k = 0$ determina el comportamiento de $\tau(k)$ en esta misma región:

$$\tau(k) = \frac{\mu}{\hbar k} \left(2 \frac{d\phi}{dk} - 2r_0 \right) \approx \begin{cases} \frac{\mu}{\hbar} \left[\frac{2 \tan \alpha}{k \sqrt{2V_0}} + \frac{6k}{\sqrt{2V_0}} \delta''(0) \sec^2 \alpha - 2r_0 \right], & \text{si } \alpha \neq \alpha_N, \\ \frac{\mu}{\hbar} \left[\frac{\sqrt{2V_0}}{k} \delta''(0) + \left(\frac{\sqrt{2V_0} \delta''(0)}{2} \right)^3 k - 2r_0 \right], & \text{si } \alpha = \alpha_N. \end{cases} \quad (\text{A.16})$$

Y el valor límite en $k \rightarrow 0$ es:

$$\tau(0) = \tau_0 \rightarrow \begin{cases} \tau_0 \rightarrow -\infty, & \text{si } l_0 < 0, \\ \tau_0 = 0, & \text{si } l_0 = 0, \\ \tau_0 \rightarrow \infty, & \text{si } l_0 > 0. \end{cases} \quad (\text{A.17})$$

Usando la ecuación (A.10), se tiene la relación:

$$\sin \phi = \frac{k \tan \delta}{\sqrt{q^2 + k^2 \tan^2 \delta}}.$$

El comportamiento general de la sección transversal resonante está dado por:

$$\sigma_\phi \approx 4\pi \left(\frac{\tan^2 \delta}{q^2 + k^2 \tan^2 \delta} \right). \quad (\text{A.18})$$

Dependiendo del valor de α , se tienen dos formas distintas cerca de $k = 0$:

$$\sigma_\phi(k) = \frac{4\pi}{k^2} \sin \phi \approx \begin{cases} 4\pi \frac{\tan^2 \alpha}{(\sqrt{2V_0})^2}, & \text{si } \alpha \neq \alpha_N, \\ \frac{4\pi}{k^2} - \pi r_0^2, & \text{si } \alpha = \alpha_N. \end{cases} \quad (\text{A.19})$$

Evalutando en $k \rightarrow 0$:

$$\sigma_\phi(0) = \sigma_{\phi_0} \begin{cases} 4\pi \frac{\tan^2 \alpha}{2|V_0|}, & \text{si } \alpha \neq \alpha_N, \\ \infty, & \text{si } \alpha = \alpha_N. \end{cases} \quad (\text{A.20})$$

Para la probabilidad de atrapamiento, se parte de la ecuación:

$$P(k) = \frac{1}{r_0} \left(l(k) - \frac{\sin(2\phi)}{k} \right), \quad (\text{A.21})$$

lo cual permite obtener el comportamiento cerca de $k = 0$:

$$P(k) \approx \begin{cases} \frac{k^2 r_0}{(\sqrt{2V_0})^3} \sec \alpha, & \text{si } \alpha \neq \alpha_N, \\ \frac{1}{r_0} \left[\sqrt{2V_0} \delta''(0) + \frac{k^2}{3} \left(\frac{\sqrt{2V_0} \delta''(0)}{2} \right) \right], & \text{si } \alpha = \alpha_N. \end{cases} \quad (\text{A.22})$$

De forma exacta en $k = 0$:

$$P(0) \rightarrow \begin{cases} 0, & \text{si } \alpha \neq \alpha_N, \\ 2, & \text{si } \alpha = \alpha_N. \end{cases} \quad (\text{A.23})$$

Finalmente, conociendo el comportamiento de la probabilidad de atrapamiento para valores pequeños de k , se tiene que el tiempo de permanencia es:

$$T_D(k) \approx \begin{cases} \frac{m}{\hbar} \frac{k r_0^2}{(\sqrt{2V_0})^3} \sec \alpha, & \text{si } \alpha \neq \alpha_N, \\ \frac{m}{\hbar} \left[\frac{\sqrt{2V_0}}{k} \delta''(0) + \frac{k}{3} \left(\frac{\sqrt{2V_0} \delta''(0)}{2} \right) \right], & \text{si } \alpha = \alpha_N. \end{cases} \quad (\text{A.24})$$

Y de forma exacta en $k = 0$:

$$T_D(0) \rightarrow \begin{cases} 0, & \text{si } \alpha \neq \alpha_N, \\ \infty, & \text{si } \alpha = \alpha_N. \end{cases} \quad (\text{A.25})$$

Apéndice B

Posición de los máximos de las funciones de dispersión a un nivel

Dado a que se conocen las funciones de dispersión a primer orden, dadas en el capítulo 3, y su relación con el recorrido efectivo $l(k)$, ahora se busca encontrar una relación entre la posición de los máximos de cada función de dispersión con la posición los máximos de $l(k)$, denotados por k^* .

B.1 Posición de los máximos (Tiempo de demora y Recorrido efectivo)

Comenzando por el tiempo de demora, sabemos que este se puede escribir como:

$$\tau(k) = \frac{m}{\hbar k} (l(k) - 2r_0) \quad (\text{B.1})$$

Alrededor de k^* , es posible expandir $l(k)$ mediante una serie de Taylor:

$$l(k) \approx l(k^*) + \frac{l''(k^*)}{2}(k - k^*)^2, \quad (\text{B.2})$$

ya que el término lineal desaparece debido a que $l'(k^*) = 0$. Sustituyendo esta aproximación en $\tau(k)$, obtenemos:

$$\tau(k) \approx \frac{m}{\hbar k} \left(l(k^*) + \frac{l''(k^*)}{2}(k - k^*)^2 - 2r_0 \right). \quad (\text{B.3})$$

Para encontrar el máximo de $\tau(k)$, se deriva respecto a k y se obtiene:

$$\tau'(k) = \frac{m}{\hbar} \left[\frac{l''(k^*)}{2} \left[\frac{k^2 - (k^*)^2}{k^2} \right] + \frac{(2r_0 - l(k^*))}{k^2} \right] \quad (\text{B.4})$$

Igualando a cero para encontrar el punto crítico, se tiene que la posición de los máximos del tiempo de demora están dados por:

$$k_\tau^2 = (k^*)^2 - \frac{2(2r_0 - l(k^*))}{l''(k^*)}. \quad (\text{B.5})$$

Para derivar el recorrido efectivo, se usa la expresión (3.41), que es el recorrido efectivo a primer nivel. La primera derivada da como resultado:

$$l'^{(1)}(k) = \frac{8\eta_n^{(1)}k \left((|K_n^{(1)}|^2 - k^2)^2 + (2k\eta_n^{(1)})^2 \right)}{\left((|K_n^{(1)}|^2 - k^2)^2 + (2k\eta_n^{(1)})^2 \right)^2} - \frac{4\eta_n^{(1)} \left(|K_n^{(1)}|^2 + k^2 \right) \left(-4k \left(|K_n^{(1)}|^2 - k^2 \right) + 8k \left(\eta_n^{(1)} \right)^2 \right)}{\left((|K_n^{(1)}|^2 - k^2)^2 + (2k\eta_n^{(1)})^2 \right)^2}. \quad (\text{B.6})$$

de la cual se obtiene el valor de $k_{(1)}^*$ al tomar $l'^{(1)}(k^*) = 0$, siendo la solución que asegura ser tener un máximo:

$$\left(k_{(1)}^* \right)^2 = -|K_n^{(1)}|^2 + 2|K_n^{(1)}| \sqrt{|K_n^{(1)}|^2 - \left(\eta_n^{(1)} \right)^2}. \quad (\text{B.7})$$

Utilizando la aproximación binomial, esta solución puede aproximarse a:

$$\left(k_{(1)}^* \right) \approx \kappa_n^{(1)} \left(1 - \frac{1}{8} \left(\frac{\eta_n^{(1)}}{\kappa_n^{(1)}} \right) \right). \quad (\text{B.8})$$

La cual predice que la posición de los máximos del recorrido efectivo es cercana a la parte real del polo a primer nivel. Evaluando la ecuación (3.41) en $k_{(1)}^*$, y el valor de $\eta_n^{(1)}$ (3.36), se encuentra que para valores de B pequeños:

$$l \left(k_{(1)}^* \right) \approx \frac{2}{\eta_n^{(1)}}. \quad (\text{B.9})$$

Debido a la complejidad de la segunda derivada del recorrido efectivo, esta se deriva de forma computacional. Una vez obtenida la segunda derivada, se sustituye el valor de $k_{(1)}^*$ y se toma a consideración que η es pequeño, lo que conduce a obtener:

$$l''^{(1)}(k^*) \approx -\frac{4}{\left(\eta_n^{(1)} \right)^3}. \quad (\text{B.10})$$

Sustituyendo esta expresión en (B.5), se obtiene que la posición de los máximos del tiempo de demora a primer nivel están dados por:

$$\left(k_\tau^{(1)} \right)^2 \approx (k^*)^2 + \frac{(2r_0 - l(k^*))}{2} \left(\eta_n^{(1)} \right)^3. \quad (\text{B.11})$$

B.2 Posición de los máximos (Tiempo de interacción)

El tiempo de interacción esta dado por la expresión (2.30). Expresando esta ecuación en términos del recorrido efectivo, se tiene:

$$T_I(k) = \frac{m}{\hbar k} l(k). \quad (\text{B.12})$$

Como sabemos por anterioridad, alrededor de k^* es posible expandir $l(k)$ en serie de Taylor (B.2). Al sustituir esta expansión, se tiene:

$$T_I(k) \approx \frac{m}{\hbar k} \left(l(k^*) + \frac{l''(k^*)}{2} (k - k^*)^2 \right). \quad (\text{B.13})$$

Para encontrar el máximo de $T_I(k)$, se deriva respecto a k y se obtiene:

$$T'_I(k) = \frac{m}{\hbar} \left[\frac{l''(k^*)}{2} \left[\frac{k^2 - (k^*)^2}{k^2} \right] - \frac{l(k^*)}{k^2} \right] \quad (\text{B.14})$$

Por lo que siguiendo el mismo procedimiento que en la sección anterior, utilizando (B.6), (B.7) y (B.10), se obtiene que la posición de los máximos del tiempo de interacción a primer nivel están dados por:

$$\left(k_{T_I}^{(1)} \right)^2 \approx (k^*)^2 - \frac{l(k^*)}{2} \left(\eta_n^{(1)} \right)^3. \quad (\text{B.15})$$

B.3 Posición de los máximos (Probabilidad de atrapamiento)

Siguiendo el tratamiento, ahora se buscan los máximos de la probabilidad de atrapamiento a primer nivel $P^{(1)}(k)$. Expresando el recorrido efectivo $l^{(1)}(k)$ (3.41) y la fase $\phi^{(1)}$ (3.39), en la ecuación:

$$P^{(1)}(k) = \frac{1}{r_0} \left(l^{(1)}(k) - \frac{\sin(2\phi^{(1)}(k))}{k} \right),$$

la probabilidad de atrapamiento un nivel esta dada por:

$$P^{(1)}(k) = \frac{8\eta k^2}{r_0 \left((|K_n^{(1)}|^2 - k^2)^2 + 4k^2 \left(\eta_n^{(1)} \right)^2 \right)}. \quad (\text{B.16})$$

Para determinar la posición de sus máximos, calculamos la primera derivada de $P^{(1)}(k)$ respecto a k :

$$P'^{(1)}(k) = \frac{16k\eta(-k^4 + |K_n^{(1)}|^4)}{r_0 \left((|K_n^{(1)}|^2 - k^2)^2 + 4k^2 \left(\eta_n^{(1)} \right)^2 \right)^2}. \quad (\text{B.17})$$

Al igualar esta derivada a cero y despejar para encontrar el máximo $k = k_P^{(1)}$, se obtiene que los máximos de la probabilidad de atrapamiento ocurren cuando $k = |K_n^{(1)}|$. Por lo tanto, los máximos de $P(k)$ en la aproximación a un nivel están dados por:

$$k_P^{(1)} = |K_n^{(1)}|. \quad (\text{B.18})$$

B.4 Posición de los máximos (Tiempo de permanencia)

El tiempo de permanencia a primer nivel se define como:

$$T_D^{(1)}(k) = \frac{mr_0 P^{(1)}(k)}{\hbar k}, \quad (\text{B.19})$$

donde la probabilidad de atrapamiento $P^{(1)}(k)$ está dada por (B.16). Se sabe que $P^{(1)}(k)$ alcanza su máximo en $k = |K_n^{(1)}|$. Por lo tanto, expandiendo $P^{(1)}(k)$ alrededor de $k = |K_n^{(1)}|$ utilizando una serie de Taylor:

$$P^{(1)}(k) \approx P^{(1)}(|K_n^{(1)}|) + \frac{P''^{(1)}(|K_n^{(1)}|)}{2} (k - |K_n^{(1)}|)^2. \quad (\text{B.20})$$

Sustituyendo esta expansión en la expresión de $T_D^{(1)}(k)$, se obtiene:

$$T_D^{(1)}(k) \approx \frac{mr_0}{\hbar k} \left(P^{(1)}(|K_n^{(1)}|) + \frac{P''^{(1)}(|K_n^{(1)}|)}{2} (k - |K_n^{(1)}|)^2 \right). \quad (\text{B.21})$$

Para encontrar los máximos de $T_D^{(1)}(k)$, derivamos respecto a k :

$$T_D'^{(1)}(k) = \frac{mr_0}{\hbar} \left[-\frac{1}{k^2} \left(P^{(1)}(|K_n^{(1)}|) + \frac{P''^{(1)}(|K_n^{(1)}|)}{2} (k - |K_n^{(1)}|)^2 \right) + \frac{1}{k} P''^{(1)}(|K_n^{(1)}|) (k - |K_n^{(1)}|) \right], \quad (\text{B.22})$$

e igualamos a cero. Resolviendo esta ecuación, se obtiene que los máximos del tiempo de permanencia a primer nivel están dados por:

$$\left(k_{T_D}^{(1)} \right)^2 \approx |K_n^{(1)}|^2 + \frac{2P^{(1)}(|K_n^{(1)}|)}{P''^{(1)}(|K_n^{(1)}|)}. \quad (\text{B.23})$$

La segunda derivada de la probabilidad de atrapamiento $P(k)$ se obtiene utilizando métodos computacionales debido a la complejidad de su expresión. Al evaluar en $k = |K_n^{(1)}|$, se obtienen los siguientes resultados:

$$P^{(1)}(|K_n^{(1)}|) = \frac{2}{r_0 \left(\eta_n^{(1)} \right)}, \quad (\text{B.24})$$

$$P''^{(1)}(|K_n^{(1)}|) = -\frac{4}{r_0 \left(\eta_n^{(1)}\right)^3}. \quad (\text{B.25})$$

Sustituyendo estos resultados en la ecuación para los máximos del tiempo de permanencia, se tiene:

$$\left(k_{TD}^{(1)}\right)^2 \approx |K_n^{(1)}|^2 + \frac{2 \left(\frac{2}{r_0 \left(\eta_n^{(1)}\right)}\right)}{-\frac{4}{r_0 \left(\eta_n^{(1)}\right)^3}}. \quad (\text{B.26})$$

Simplificando la expresión, se encuentra:

$$\left(k_{TD}^{(1)}\right)^2 \approx |K_n^{(1)}|^2 - \left(\eta_n^{(1)}\right)^2 = \left(\kappa_n^{(1)}\right)^2. \quad (\text{B.27})$$

B.5 Posición de los máximos (Sección transversal resonante)

La sección transversal resonante a primer nivel está dada por:

$$\sigma_\phi^{(1)}(k) = \frac{4 \left(\eta_n^{(1)}\right)^2}{4k^2 \left(\eta_n^{(1)}\right)^2 + \left(|K_n^{(1)}|^2 - k^2\right)^2}. \quad (\text{B.28})$$

Para encontrar los puntos donde esta función alcanza su máximo, derivamos directamente respecto a k . La primera derivada de $\sigma_\phi^{(1)}(k)$ es:

$$\sigma_\phi'^{(1)}(k) = -\frac{16k \left(\eta_n^{(1)}\right)^2 \left(k^2 - |K_n^{(1)}|^2 + 2 \left(\eta_n^{(1)}\right)^2\right)}{\left(\left(k^2 - |K_n^{(1)}|^2\right)^2 + 4k^2 \left(\eta_n^{(1)}\right)^2\right)^2}. \quad (\text{B.29})$$

Al buscar los puntos críticos, es decir, donde $\sigma_\phi'^{(1)}(k) = 0$, se obtiene que la función alcanza su máximo cuando:

$$k^2 = |K_n^{(1)}|^2 - 2\eta^2 = k_\omega^2. \quad (\text{B.30})$$

Por lo tanto, los máximos de la sección transversal resonante a primer nivel ocurren en:

$$k_{\sigma_\phi}^{(1)} = \sqrt{|K_n^{(1)}|^2 - 2 \left(\eta_n^{(1)}\right)^2} = k_\omega^{(1)}. \quad (\text{B.31})$$

Apéndice C

Estados acotados

C.1 Detalles del método numérico y scripts de cálculo

En este anexo se presenta una descripción técnica de los programas utilizados para el cálculo numérico de los máximos de las funciones de dispersión y de los polos asociados, así como una breve mención del script de visualización de resultados. Con ello, se busca justificar el método numérico, detallar el control de error y mostrar la forma en que se integran estas rutinas en el desarrollo del texto principal.

C.1.1 Cálculo de máximos y polos (archivo principal)

El programa que calcula la posición de los máximos de las funciones de dispersión y los polos del coeficiente S se encarga de dos tareas principales:

- **Detección de máximos** (picos) en las distintas funciones de dispersión (tiempo de demora, recorrido efectivo, probabilidad de atrapamiento, entre otras) mediante la función `find_peaks` de `scipy.signal`.
- **Búsqueda de polos** de la función compleja $S(k)$ usando *Newton-Raphson* en el plano complejo.

Discretización y muestreo de k

Se define un rango para k , desde $k = 0$ hasta cierto valor máximo (dependiendo del caso), subdividiéndolo en un número muy alto de puntos (en el orden de 10^9). Este

refinamiento de la malla es esencial: se incrementa progresivamente el número de puntos hasta verificar que la posición de los máximos apenas varíe ($\sim 10^{-13}$ en la variable k). Así se garantiza la convergencia de las posiciones de los máximos de las funciones de dispersión.

Detección de máximos con `find_peaks`

Cada función de dispersión se evalúa sobre la malla descrita. Posteriormente, se aplica la función `find_peaks` de `scipy.signal`, que identifica los índices donde la función presenta máximos locales. Con esos índices, se obtiene el conjunto $\{k_i\}$ de posiciones de máximos.

Búsqueda de polos con Newton-Raphson

La segunda parte del programa aplica *Newton-Raphson* para hallar ceros de la función compleja

$$S_{den}(k) = q \cos(qr_0) - i k \sin(qr_0),$$

donde q y otras magnitudes dependen de k y parámetros del potencial (por ejemplo, V_0 y L).

1. **Valores iniciales:** se toman los máximos de $l(k)$ u otras funciones, añadiéndoles una pequeña parte imaginaria, para explorar el plano complejo.
2. **Iteraciones de Newton:** Se calcula

$$f = S_{den}(k^{(n)}), \quad df \approx \frac{S_{den}(k^{(n)} + \epsilon i) - S_{den}(k^{(n)})}{\epsilon i},$$

con $\epsilon \approx 10^{-8}$ a 10^{-12} . Luego,

$$k^{(n+1)} = k^{(n)} - \frac{f}{df}.$$

3. **Criterio de convergencia:** la iteración continúa hasta que $|f/df|$ sea menor que una tolerancia (10^{-12}). Se descartan los valores que no convergen o que resultan duplicados.

Así se identifican los *polos* de la función $S(k)$. Posteriormente, se clasifican según sus partes real e imaginaria (resonantes, virtuales, acotados, etc.).

C.1.2 Generación de gráficas (script de visualización)

El segundo programa se dedica a la **visualización** de los resultados:

- Graficar las curvas de $\tau(k)$, $l(k)$, $\phi(k)$, $\sigma_\phi(k)$, entre otras.
- Resaltar la ubicación de los *máximos* encontrados con `find_peaks`.
- Indicar las posiciones de los *polos* detectados por Newton-Raphson, trazando líneas verticales o marcadores que facilitan la comparación entre polos y máximos.

Para ello, se emplea la librería `matplotlib` (Python), generando figuras de alta resolución y permitiendo hacer zoom alrededor de las resonancias.

C.1.3 Control de error y convergencia

Refinamiento de malla

Se inicia con un número básico de puntos en $\{k\}$ y se incrementa el muestreo. Tras cada refinamiento, se recalculan los máximos y las posiciones de polos, comprobando la **estabilidad** de los resultados. Se considera que hay convergencia numérica cuando la diferencia en la posición de los máximos es despreciable (por ejemplo, $\lesssim 10^{-13}$).

Tolerancia en Newton-Raphson

En la iteración de Newton, la corrección $\Delta k = -f/df$ debe caer por debajo de la tolerancia establecida (10^{-12}). Si no converge en un número razonable de iteraciones, se ajusta la tolerancia, la magnitud ϵ para la derivada o se cambian las semillas iniciales.

Clasificación y validación física

Las posiciones de los polos se comparan con los máximos de las funciones de dispersión: en el régimen resonante, se verifica que haya correspondencia cercana entre la parte real del polo y el máximo de la sección transversal, el recorrido efectivo o el tiempo de demora, entre otras.

C.1.4 Implementación numérica

Los scripts están escritos en *Python 3*, utilizando las bibliotecas `numpy`, `matplotlib`, `pandas` y `scipy`. A continuación se muestra el código principal para el **cálculo** (Newton-Raphson y detección de máximos), que constituye la base numérica para la localización de polos y el análisis de las funciones de dispersión:

```
import numpy as np
import pandas as pd
import matplotlib.pyplot as plt
from scipy.signal import find_peaks
import gc

# Definir el caso que deseas analizar, usa 'None' para todos los casos
selected_cases = None # Cambia a None para procesar todos los casos

# Definiciones de funciones
def S_function(k, V2, L):
    q = np.sqrt(2 * V2 + k**2)
    gamma = q * L
    argdelta = (k / q) * np.tan(gamma)
    phi = np.arctan(argdelta)
    S = q * np.cos(gamma) - 1j * k * np.sin(gamma)
    return S

def newton_raphson(initial_guesses, max_iterations, tolerance, V2, L):
    poles = []
    iterations = []
    for initial_guess in initial_guesses:
        current_guess = initial_guess
        for iteration in range(max_iterations):
            f = S_function(current_guess, V2, L)
            df = (S_function(current_guess + 1e-12j, V2, L) - f) / 1e-12j
            energy_correction = -f / df
            current_guess += energy_correction
            if np.abs(energy_correction) < tolerance:
                poles.append(current_guess)
                iterations.append(iteration + 1)
            break
    return np.array(poles), iterations

def process_k_segment(k_segment, V2, L):
    q = np.sqrt(2 * V2 + k_segment**2)
    gamma = q * L
```

```

tan_gamma = np.tan(gamma)
cos_gamma = np.cos(gamma)
cos_phi = np.cos(np.arctan((k_segment / q) * tan_gamma))
phi = np.arctan((k_segment / q) * tan_gamma)
theta = phi - k_segment * L
tan_gamma_sq = tan_gamma**2
lk = ((2 * q) / (q**2 + k_segment**2 * tan_gamma_sq)) * (
    (1 - (k_segment**2 / q**2)) * tan_gamma + (k_segment**2 / q) * L * (1 / cos_gamma)**2)
tau = (1 / k_segment) * (lk - 2 * L)
Tdt = (1 / k_segment) * lk
TdP = (1 / k_segment) * (lk - (np.sin(2 * phi) / k_segment))
Pk = (k_segment**2 / (L * q**3)) * (2 * q * L - np.sin(2 * gamma))
    * (cos_phi**2 / cos_gamma**2)
sigmaphi = 2 * ((4 * np.pi) / k_segment**2) * np.sin(phi)**2

return tau, Tdt, TdP, lk, Pk, sigmaphi

# Función para depurar polos duplicados
def filter_poles(poles, tol_imag=1e-6, tol_real=1e-6):
    unique_poles = []
    for pole in poles:
        is_duplicate = any(np.abs(pole.imag - u_pole.imag) < tol_imag and
            np.abs(pole.real - u_pole.real) < tol_real
            for u_pole in unique_poles)
        if not is_duplicate:
            unique_poles.append(pole)
    return unique_poles

# Cargar los parámetros desde un archivo
parametros_df = pd.read_csv('parametrosModVF.txt', delim_whitespace=True)
iniciales_df = pd.read_csv('InicialesModVF.txt', delim_whitespace=True)

# Filtrar los casos si se selecciona una lista específica
if selected_cases is not None:
    parametros_df = parametros_df[parametros_df['Caso'].isin(selected_cases)]

# Lista para almacenar los resultados antes de concatenar
rows_list = []

# Iterar sobre cada fila de parámetros
for _, row in parametros_df.iterrows():
    a, b = row['a'], row['b']
    mx = row['mx']
    fcambio = row['Factor']

```

```

L = b - a

# Obtener el valor de delta0 correspondiente al caso actual
delta0 = iniciales_df[iniciales_df['Caso'] == row['Caso']]['delta0'].values[0]
incrementodel = iniciales_df[iniciales_df['Caso'] == row['Caso']]['Incremento'].values[0]

# Calcular V2 basado en delta0
V2 = (((delta0 * (np.pi / 2))) / L)**2 / 2

# Espacio de k manejable
k_segments = np.array_split(np.linspace(0, 2 * mx, 1000000000), 10)

for k_segment in k_segments:
    tau, Tdt, TdP, lk, Pk, sigmaphi = process_k_segment(k_segment, V2, L)

# Encontrar los máximos
indexes_tau_max = find_peaks(tau)[0]
indexes_T_max = find_peaks(Tdt)[0]
indexes_TP_max = find_peaks(TdP)[0]
indexes_lk_max = find_peaks(lk)[0]
indexes_Pk_max = find_peaks(Pk)[0]
indexes_sigmaphi_max = find_peaks(sigmaphi)[0]

# Suposiciones iniciales para los polos
initial_guesses = np.append(k_segment[indexes_lk_max] - 0.1j, 0.001)

# Calcular polos
poles, pole_iterations = newton_raphson(initial_guesses, max_iterations=2000,
tolerance=1e-13, V2=V2, L=L)

# Filtrar polos duplicados
unique_poles = filter_poles(poles)

for i, pole in enumerate(unique_poles):
    # Hallar valores de k cercanos a la parte real del polo
    closest_k_lk = (k_segment[indexes_lk_max][np.abs(k_segment[indexes_lk_max]
- pole.real).argmin()])
    if indexes_lk_max.size > 0 else np.nan)
    closest_k_tau = (k_segment[indexes_tau_max][np.abs(k_segment[indexes_tau_max]
- pole.real).argmin()])
    if indexes_tau_max.size > 0 else np.nan)
    closest_k_T_max = (k_segment[indexes_T_max][np.abs(k_segment[indexes_T_max]
- pole.real).argmin()])
    if indexes_T_max.size > 0 else np.nan)

```

```

closest_k_TP_max = (k_segment[indexes_TP_max[np.abs(k_segment[indexes_TP_max]
- pole.real).argmin()]])
if indexes_TP_max.size > 0 else np.nan)
closest_k_Pk = (k_segment[indexes_Pk_max[np.abs(k_segment[indexes_Pk_max]
- pole.real).argmin()]])
if indexes_Pk_max.size > 0 else np.nan)
closest_k_sigmaphi = (k_segment[indexes_sigmaphi_max[np.abs(k_segment[indexes_sigmaphi_
- pole.real).argmin()]])
if indexes_sigmaphi_max.size > 0 else np.nan)

row_dict = {
    'Caso': row['Caso'],
    'k_max_lk': closest_k_lk,
    'k_max_tau': closest_k_tau,
    'k_T_max': closest_k_T_max,
    'k_Td0_max': closest_k_TP_max,
    'k_max_Pk': closest_k_Pk,
    'k_sigmaphi_max': closest_k_sigmaphi,
    'Polo_S_parte_real': pole.real,
    'Polo_S_parte_imaginaria': pole.imag,
    'Omega': np.sqrt(pole.real**2 - pole.imag**2),
    'Magnitud del polo': np.sqrt(pole.real**2 + pole.imag**2),
    'Numero_de_iteraciones': pole_iterations[i]
}
rows_list.append(row_dict)

# Liberar memoria
del tau, Tdt, TdP, lk, Pk, sigmaphi
gc.collect()

# Convertir la lista de diccionarios en un DataFrame y concatenarlo
resultados_df = pd.DataFrame(rows_list)

# Guardar los resultados
resultados_df.to_csv('Resultados_Modelo_InfinitoVFF.csv', index=False)
print("Los resultados depurados han sido guardados en 'Resultados_Modelo_InfinitoVFF.csv")

```

Bibliografía

- [1] S. Albeverio and R. Høegh-Krohn, “Perturbation of resonances in quantum mechanics,” *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, vol. 101, no. 2, pp. 491–513, 1984. DOI: [10.1016/0022-247x\(84\)90115-x](https://doi.org/10.1016/0022-247x(84)90115-x).
- [2] Ławniczak, Michał y Sirko, Leszek. *Investigation of the diagonal elements of the Wigner’s reaction matrix for networks with violated time reversal invariance*. Scientific Reports, Nature Portfolio, abril de 2019, volumen 9, número 1. Disponible en: <https://doi.org/10.1038/s41598-019-42123-y>.
- [3] Böhm, Arno y Loewe, M. *Quantum Mechanics*. Springer, enero de 1993.
- [4] R. Bourgain, J. Pellegrino, Y.R.P. Sortais, A. Browaeys, *Direct measurement of the Wigner time delay for the scattering of light by a single atom*, Optics Letters, **38**(11), 1963–1965 (2013).
- [5] M. Büttiker, “Larmor precession and the traversal time for tunneling,” *Physical Review B*, vol. 27, no. 10, pp. 6178–6188, May 1983. <https://doi.org/10.1103/physrevb.27.6178>
- [6] C. A. A. de Carvalho, H. M. Nussenzveig, *Time delay*, Physics Reports, Vol. 364, pp. 83–174, 2002.
- [7] C. J. Davisson and L. H. Germer, “The Scattering of Electrons by a Single Crystal of Nickel,” *Nature*, vol. 119, no. 2998, pp. 558–560, 1927. DOI: [10.1038/119558A0](https://doi.org/10.1038/119558A0).
- [8] Clarito, Samuel. *The Scattering matrix Properties and one-dimensional examples*. Karlstads Universitet, mayo de 2022. Disponible en: <https://www.diva-portal.org/smash/get/diva2:1662818/FULLTEXT01.pdf>.

- [9] Cohen-Tannoudji, Claude, Bernard Diu, y Franck Lalöe. *Quantum Mechanics*. Wiley-Interscience, 1977.
- [10] Csedreki, L., Gyürky, Gy., y Szücs, T. *Precise resonance parameter measurement in the $^{12}\text{C}(p,\gamma)^{13}\text{N}$ astrophysically important reaction*. Nuclear Physics A, septiembre de 2023, volumen 1037, página 122705. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.nuclphysa.2023.122705>.
- [11] M. S. De Bianchi, “Time-delay of classical and quantum scattering processes: a conceptual overview and a general definition,” *Open Physics*, vol. 10, no. 2, pp. 282–319, 2011. DOI: [10.2478/s11534-011-0105-5](https://doi.org/10.2478/s11534-011-0105-5).
- [12] P.C. Deshmukh, K. Toyoda, A. Fursa, I. Bray, A.S. Kheifets, *Eisenbud–Wigner–Smith time delay in atom–laser interactions*, Physica Scripta, **96**(9), 094003 (2021).
- [13] R. Dupuy, J. Vincent, G. Méjean, and L. Arissian, *Direct and Accurate Calculation of Dwell Times and Time Delays Using Quantum Trajectories*, arXiv:1903.614 (2019).
- [14] Eisenbud, Leonard. *The formal properties of nuclear collisions*. ProQuest, enero de 1942.
- [15] Fares, Hesham, Robb, G. R. M., y Piovella, N. *Density matrix approach for quantum free-electron lasers*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, noviembre de 2018, volumen 909, páginas 276–281. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.nima.2018.03.015>.
- [16] A. Fernández Marín, *Dispersión de ondas en una y cuasi una dimensión. Métodos de la matriz de reacción, de transferencia y del hamiltoniano efectivo*, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, (2014), <https://hdl.handle.net/20.500.12371/5474>.
- [17] E. Fermi, *Nuclear Physics*, University of Chicago Press, 1950.
- [18] M.D. Frye and J.M. Hutson, *Time delays in ultracold atomic and molecular collisions*, Physical Review Research, **1**, 033023 (2019).
- [19] Fu, Jun, Li, Weisheng, Peng, Xiuxiu, Du, Jiao, Ouyang, Aijia, Wang, Qian, y Chen, Xin. *MDRANet: A multiscale dense residual attention network for magnetic resonance*

- and nuclear medicine image fusion*. Biomedical Signal Processing and Control, febrero de 2023, volumen 80, página 104382. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.bspc.2022.104382>.
- [20] V. Gasparian, *Büttiker–Landauer tunneling time through one-dimensional barriers of arbitrary shape*. Superlattices and Microstructures, vol. 23, no. 3-4, pp. 809–821, Mar. 1998. doi: [10.1006/spmi.1997.0542](https://doi.org/10.1006/spmi.1997.0542).
- [21] Z. Guo, P. Ge, Y. Fang, Y. Dou, X. Yu, J. Wang, Q. Gong, and Y. Liu, *Probing Molecular Frame Wigner Time Delay and Electron Wavepacket Phase Structure of CO Molecule*, Ultrafast Science, **2022**, 9802917 (2022). DOI:10.34133/2022/9802917.
- [22] V.I. Kukulin, V.M. Krasnopolsky, and J. Horáček, *Theory of resonances*, Springer Science & Business Media, (2013).
- [23] A. M. Lane and R. G. Thomas, *R-Matrix theory of nuclear reactions*, Rev. Mod. Phys., **30**, 257–353 (1958), doi:10.1103/revmodphys.30.257.
- [24] Luna-Acosta, G. A., Fernández-Marín, A. A., Méndez-Bermúdez, J. A., y Poli, Charles. *Cross section versus time delay and trapping probability*. Physics Letters, Elsevier BV, julio de 2016. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.physleta.2016.06.001>.
- [25] Z.-Q. Ma, “The Levinson theorem,” *Journal of Physics A: Mathematical and General*, vol. 39, no. 48, pp. R625–R659, 2006. DOI: [10.1088/0305-4470/39/48/r01](https://doi.org/10.1088/0305-4470/39/48/r01).
- [26] A. Manaselyan, V. Mughnetsyan, and A. Kirakosyan, *Planar quantum dots: Theoretical approaches*, in Elsevier eBooks, pp. 297–307, Jan. 2024. doi: [10.1016/b978-0-323-90800-9.00016-0](https://doi.org/10.1016/b978-0-323-90800-9.00016-0).
- [27] Moshinsky, M., Sadurní, E., y del Campo, A. *Alternative Method for Determining the Feynman Propagator of a Non-Relativistic Quantum Mechanical Problem*. SIGMA, 3 (2007), 110, 12 pp.
- [28] S. Nagele, R. Pazourek, M. Wais, G. Wachter, J. Burgdörfer, *Time-resolved photoemission using attosecond streaking*, Journal of Physics: Conference Series, **488**, 012004 (2014).

- [29] Neuling, Nick Ruben, Allert, Robin D., y Bucher, Dominik B. *Prospects of single-cell nuclear magnetic resonance spectroscopy with quantum sensors*. Current Opinion in Biotechnology, octubre de 2023, volumen 83, página 102975. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.copbio.2023.102975>.
- [30] Newton, R.G. *Scattering theory of waves and particles*. Springer Science & Business Media, noviembre de 2013.
- [31] H. M. Nussenzveig, *The poles of the S-matrix of a rectangular potential well of barrier*, Nuclear Physics, vol. 11, pp. 499–521, May 1959. doi: [10.1016/0029-5582\(59\)90293-7](https://doi.org/10.1016/0029-5582(59)90293-7).
- [32] I. J. Thompson, “Introduction to R-matrix Theory,” United States, 2016. Disponible en: <https://www.osti.gov/biblio/1281675>.
- [33] R. L. Workman et al., *Review of Particle Physics*, Progress of Theoretical and Experimental Physics, vol. 2022, p. 083C01, 2022, Particle Data Group. doi: [10.1093/ptep/ptac097](https://doi.org/10.1093/ptep/ptac097).
- [34] Rosenberg, Leonard y Spruch, Larry. *Bounds on scattering phase shifts for compound systems*. Physical Review, marzo de 1961, volumen 121, número 6, páginas 1720–1726. Disponible en: <https://doi.org/10.1103/physrev.121.1720>.
- [35] J. J. Sakurai and Jim J. Napolitano, *Modern Quantum Mechanics*, Pearson Higher Ed, 2014.
- [36] Shankar, R. *Principles of Quantum Mechanics*. Plenum Press, 1994.
- [37] M. Strauß, A. Schmidgall, C. Schneider, S. Höfling, M. Kamp, and S. Reitzenstein, *Wigner time delay induced by a single quantum dot*, Physical Review B, **99**, 205302 (2019).
- [38] Taylor, John R. *Scattering theory*. John Wiley & Sons, junio de 1972.
- [39] Tycko, Robert. *Micron-Scale magnetic resonance imaging based on low temperatures and dynamic nuclear polarization*. Progress in Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy, octubre de 2023. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.pnmrs.2023.10.001>.

- [40] Valeriano Tomás, Iván. *Estudio de las condiciones de frontera para sistemas dispersivos en uno y dos canales*. Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, marzo de 2023. Disponible en: <https://hdl.handle.net/20.500.12371/18941>.
- [41] Y. Wang, *Finite Square Well and its Applications*, Highlights in Science, Engineering and Technology, vol. 61, pp. 70–79, Jul. 2023. doi: [10.54097/hset.v61i.10269](https://doi.org/10.54097/hset.v61i.10269).
- [42] E. P. Wigner, *Lower Limit for the Energy Derivative of the Scattering Phase Shift*, Physical Review, Vol. 98, No. 1, April 1955.
- [43] E. P. Wigner, *On the statistical distribution of the widths and spacings of nuclear resonance levels*, Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society, vol. 47, no. 4, pp. 790–798, 1951. doi: [10.1017/S0305004100027237](https://doi.org/10.1017/S0305004100027237).
- [44] N. Zettili, *Quantum Mechanics*, John Wiley & Sons, 2009.
- [45] Zhang, Wenkai, Zhang, Zhihai, y Gao, Lingxiao. *Study of using complementary S matrix to enhance SNR in Hadamard spectrometer*. Optik, febrero de 2014, volumen 125, número 3, páginas 1124–1127. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.ijleo.2013.07.139>.
- [46] Zwiebach, Barton. *Quantum Physics I, Lecture Notes 18*. MITOPENCOURSEWARE, 2016, volumen 18. Disponible en: https://ocw.mit.edu/courses/8-04-quantum-physics-i-spring-2016/resources/mit8_04s16_lecnotes18/.
- [47] Zwiebach, Barton. *Quantum Physics I, Lecture Notes 19*. MITOPENCOURSEWARE, 2016, volumen 19. Disponible en: https://ocw.mit.edu/courses/8-04-quantum-physics-i-spring-2016/resources/mit8_04s16_lecnotes19/.