



# BENEMÉRITA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE PUEBLA

INSTITUTO DE FÍSICA "LUIS RIVERA TERRAZAS"

**Estudio de las condiciones de frontera para sistemas  
dispersivos en uno y dos canales**

**Tesis  
para obtener el grado de:**

**MAESTRÍA EN CIENCIAS  
(FÍSICA)**

PRESENTA  
**Iván Antonio Valeriano Tomás**

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

**No. de CVU: 1079647**

**Marzo 2023**



*A mi madre...*



# Agradecimientos

Al Instituto de Física “Luis Rivera Terrazas” por abrirme las puertas para formar parte del posgrado en Física así como al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (Conacyt) por el financiamiento otorgado durante todo el programa de estudios.

Al Dr. Germán Luna Acosta quien fue parte fundamental durante todo el proyecto, por enseñarme las herramientas necesarias para llevar a cabo este trabajo así como su guía y paciencia constante que me permitieron entender los conceptos usados y resultados obtenidos.

A todos los docentes que formaron parte de mi preparación académica y a los miembros del comité evaluador quienes me asesoraron para mejorar aspectos importantes de la tesis.

Por otro lado, quiero agradecer ampliamente a mi madre, María del Carmen Tomás Ruiz, quien siempre me ha apoyado en todos los sentidos y me alienta a alcanzar mis sueños. A mis hermanos, Citlaly e Iram Tomás por estar dispuestos a levantarme cuando más lo necesito y recordarme que juntos somos más fuertes.

A Ricardo Marín, Scarlett García, Marisol Hernández, Fernando Ocaña, David García y José Iván Olivera por motivarme a dar lo mejor de mí y alumbrar el camino cuando más oscuro se torna.



# Índice general

Agradecimientos	v
Resumen	ix
<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
1.1. Matriz de dispersión . . . . .	1
1.2. Tiempo de demora . . . . .	2
1.3. Sección transversal . . . . .	3
1.4. Probabilidad de atrapamiento . . . . .	4
1.5. Definiciones usuales de resonancia . . . . .	5
1.6. Objetivos . . . . .	7
1.6.1. Objetivo general . . . . .	7
1.6.2. Objetivos particulares . . . . .	7
1.7. Hipótesis . . . . .	8
<b>2. Modelo</b>	<b>9</b>
2.1. Barrera y pozo de potencial . . . . .	9
2.2. Funciones de dispersión para el modelo barrera-pozo de potencial . . . . .	12
2.3. Polos de la matriz S en el espacio k . . . . .	13
<b>3. Resultados</b>	<b>15</b>
3.1. Gráficas de las funciones de dispersión . . . . .	15
3.2. Resonancias en el modelo de barrera y pozo de potencial . . . . .	25
<b>4. Conclusiones</b>	<b>35</b>
Referencias	40
A. Caso límite de las funciones de dispersión	41





# Resumen

En sistemas cuánticos dispersivos la posición de los picos de resonancia de la sección transversal  $\sigma$  coinciden con los del tiempo de demora  $\tau$ . Esta coincidencia es fundamental para relacionar las resonancias con la formación de estados cuasi-estables. Utilizando un sistema cuántico sencillo de un canal, demostramos que esta coincidencia no se cumple cuando las resonancias dejan de ser angostas y estudiamos el efecto que tienen los polos resonantes en los perfiles de  $\sigma$ ,  $\tau$  y también en la probabilidad de atrapamiento  $P(k)$  y de la distancia transversal efectiva  $l(k)$ . Encontramos que, en general, para resonancias no angostas las posiciones en momento  $k$  de los picos de  $\tau$ ,  $l$ ,  $\kappa$ ,  $\sigma$  y  $P$  son, respectivamente,  $k_\tau < k_l \approx \kappa_n < k_\sigma < k_P$ , donde  $\kappa_n$  es la parte real del polo en espacio de momento  $\hbar k$ . La distancia  $|k_l - \kappa_n|$  es menor que la distancia entre  $\kappa_n$  y las otras posiciones, mostrando que  $l(k)$  es la función de dispersión que señala con más precisión la posición del polo de la matriz para resonancias tanto agudas como anchas. Demostramos también que el parámetro de frontera (la derivada logarítmica de la función de onda evaluada en la frontera con el potencial dispersivo) determina el comportamiento de las funciones de dispersión para energías cercanas a cero.



# Capítulo 1

## Introducción

En problemas de dispersión cuántica, la forma usual de localizar resonancias es mediante la sección transversal ( $\sigma$ ) pues se considera que un cambio brusco en ésta indica la presencia de resonancias. Usualmente, en los sistemas cuánticos dispersivos, la sección transversal tiene picos muy delgados (o agudos) y coinciden con los picos de otra función llamada tiempo de demora  $\tau$  [1–3]. El tiempo de demora permite relacionar a las resonancias con la formación de estados cuasi-estables por lo que también se pueden definir con ayuda de  $\tau$ . Todo parece funcionar bien, sin embargo, existen sistemas los cuales no necesariamente presentan resonancias delgadas. En este caso, se podría esperar una separación de los picos lo que se traduciría en un conflicto sobre qué definición se debe tomar en cuenta al momento de buscar resonancias.

El tema central de este trabajo son las resonancias en problemas de dispersión. Para esto, es necesario introducir algunos conceptos que están relacionados a estas, como sección transversal o tiempo de demora ya mencionados. En este capítulo se describirán de las herramientas más usuales para definir a las resonancias. Definiciones que fueron propuestas hace muchos años y que siguen vigentes en la actualidad, así como unas más recientes. Además, se da un panorama de cómo la posición de las resonancias varía según la definición que se use, lo cual nos da pie a pensar que debe existir una cantidad que sea más adecuada al determinar resonancias. El objetivo de este trabajo es determinar si hay una función que sea mejor para esta tarea o bajo qué condiciones funcionan bien estas definiciones.

### 1.1. Matriz de dispersión

La matriz de dispersión es un formalismo de la física de partículas usado para analizar problemas de dispersión [4]. El método, en términos muy generales, consiste en pensar

que los estados inicial y final del sistema son estados propios del hamiltoniano libre. En el estado inicial se considera un estado donde las partículas aún no interactúan pero están muy lejos entre sí, esto es, un pasado remoto. El estado final también se considera como un estado libre pero después de que las partículas interactuaron y ya están lo suficientemente lejos como para ejercer alguna influencia mutua.

En este trabajo, lo que nos interesa de la matriz de dispersión son los polos, los cuales, en general, son complejos. Estos representan diferentes situaciones físicas según su ubicación en el plano complejo. En el espacio  $K$ , los polos que nos interesan son los que están en el cuarto cuadrante del plano (parte real positiva e imaginaria negativa), ya que, como se verá más adelante, estos están asociados a estados resonantes [2, 5].

## 1.2. Tiempo de demora

El tiempo de vida de un estado cuasiestacionario formado en un experimento de dispersión es medido por el tiempo en el cual el proyectil es demorado o retardado en la sección de dispersión como consecuencia de su interacción [2]. A continuación, se presenta la derivación de Wigner. Dado un paquete de onda unidimensional

$$\psi(x, t) = \int A(k) \exp [i(kx - \omega(k)t)] dk \quad (1.1)$$

donde  $A(k) = |A(k)| \exp [i\delta(k)]$ ,  $|A(k)|$  una amplitud con un máximo alrededor de un número de onda  $k_0$  y  $\delta(k)$  una fase. La pregunta aquí es si, en un régimen de longitud de onda corta, alrededor de qué valor de  $x$  tendrá su máximo el paquete de onda para un tiempo dado  $t$ . Tomando a (1.1) como una superposición de ondas monocromáticas, se puede argumentar que una rápida variación de la fase generalmente conduce a una interferencia destructiva, de modo que la situación más favorable ocurrirá cuando  $k_0$  coincide con un punto donde la fase es estacionaria [6],

$$x - x_0 - \left( \frac{d\omega}{dk} \right)_{k_0} t = 0 \quad (1.2)$$

donde  $x_0 = -(d\delta/dk)_{k_0}$ . El paquete de onda se propaga con una velocidad de grupo  $v_g = (d\omega/dk)_{k_0}$  que es diferente a la velocidad de fase  $v_\phi = (\omega/k)_{k_0}$  si el medio es dispersivo [7].

Considerando dispersión de ondas  $s$  por un centro de dispersión esféricamente simétrico, para largas distancias del centro se tiene que

$$r\psi_{in} \approx \int_0^\infty |A(E)| \exp \left[ i \left( -\frac{p}{\hbar} r - \frac{E}{\hbar} t + \delta(E) \right) \right] dE \quad (r \rightarrow \infty) \quad (1.3)$$

es un paquete de ondas entrante centrado en el punto de fase estacionaria

$$t = -\frac{r}{v} + t_0 \quad (1.4)$$

evaluado en el pico de  $|A(E)|$ . Aquí,  $t_0 = \hbar(d\delta/dE)$ , y

$$v = \frac{dE}{dp} = \frac{d}{dp} \left( \frac{p^2}{2m} \right) = \frac{p}{m} \quad (1.5)$$

es la velocidad de la partícula de masa  $m$ .

El correspondiente paquete de ondas saliente,

$$r\psi_{out} \approx \int_0^\infty |A(E)| \exp \left[ i \left( \frac{p}{\hbar} r - \frac{E}{\hbar} t + 2\theta(E) + \delta(E) \right) \right] dE \quad (r \rightarrow \infty) \quad (1.6)$$

donde  $S(E) = \exp[2i\theta(E)]$  es la función S con  $\theta(E)$  el corrimiento de fase en función de la energía y está centrada en

$$t = \frac{r}{v} + t_0 + \Delta t \quad (1.7)$$

donde

$$\Delta t = 2\hbar \frac{d\theta}{dE} = -i\hbar S^{-1}(E) \frac{dS}{dE} \quad (1.8)$$

es el tiempo de demora que demostraron Wigner y Eisenbud [8, 9], actualmente representado por  $\tau(E)$ . Esta cantidad es importante, ya que, se sabe que un estado cuasiestacionario ocurre en aquellos valores de  $E = E_0$  para los cuales  $\tau(E)$  tiene un máximo agudo [2].

### 1.3. Sección transversal

Para derivar la expresión de la sección transversal total, se puede partir introduciendo la función [10]

$$f(E) = \left( \frac{d\theta(E)}{dE} \right)^{-1}. \quad (1.9)$$

En la sección anterior se dijo que  $d\theta/dE$  debe tener un máximo en  $E = E_0$  para que se trate de un estado cuasiestacionario, así que la ecuación (1.9) debe tener un mínimo en  $E = E_0$ . Esto es que

$$f'(E)_{E=E_0} = 0 \quad \text{y} \quad f''(E)_{E=E_0} \quad \text{sea grande}$$

Con estas condiciones, es posible desarrollar a  $f(E)$  en series de Taylor alrededor de  $E = E_0$

$$f(E) = f + \frac{f''}{2}(E - E_0)^2 + F(E - E_0)$$

donde  $F$  es un término remanente

$$F(E - E_0) = \frac{f'''}{3!}(E - E_0)^3 + \dots + \frac{f^{(n)}}{n!}(E - E_0)^n + \dots$$

Si se asume que el término  $F(E - E_0)$  es muy pequeño (idealmente cero) en cierto rango de energía alrededor de  $E_0$  y con la ecuación (1.9) se tiene que

$$\theta(E) = \int \frac{dE}{f + (f''/2)(E - E_0)^2}$$

donde definiendo  $r = \sqrt{2/ff''}$  y  $\Gamma = 2\sqrt{2f/f''}$  y considerando  $\Gamma \ll 2E_0$  se llega a

$$\theta(E) = r \arctan \frac{\Gamma/2}{E_0 - E}. \quad (1.10)$$

La forma usual de definir a la matriz de dispersión es  $S = -e^{2i\theta}$  donde se pide que sea analítica [1, 2]. Entonces, la función

$$\arctan \frac{\Gamma/2}{E_0 - E} = \frac{i}{2} [\ln(E - E_0 + i\Gamma/2) - \ln(E - E_0 - i\Gamma/2)]$$

sugiere que

$$S(E) \rightarrow S(E)e^{2\pi ir}$$

y debido a que  $S(E)$  debe ser una función analítica, los valores posibles para  $r = 0, 1, 2, \dots$  y para el caso más simple y no trivial se puede tomar  $r = 1$ .

La forma usual de definir a la matriz de dispersión es  $S = -e^{2i\theta}$  por lo que, con la ecuación (1.10)

$$S(E) = \frac{E_0 + i\Gamma/2 - E}{E_0 - i\Gamma/2 - E}$$

Por lo que, de la definición de la sección transversal  $\sigma(E)$  [2]

$$\sigma(E) = \frac{4\pi}{p^2} \frac{(\Gamma/2)^2}{(E_0 - E)^2 + (\Gamma/2)^2} \quad (1.11)$$

que es llamada la fórmula de Breit-Wigner.

## 1.4. Probabilidad de atrapamiento

Para un potencial finito con un radio de interacción  $L$ , la cantidad [11]

$$P(k) = \frac{1}{L} \int_{int} |\psi(k; r)|^2 dr \quad (1.12)$$

donde  $\psi(k; r)$  es la función de onda de dispersión, es la probabilidad relativa de atrapamiento en la región de interacción.

## 1.5. Definiciones usuales de resonancia

Existen diferentes definiciones para resonancias en el contexto de física de partículas. Usualmente, las resonancias se pueden identificar con picos agudos en la sección transversal total como una función de la energía [3, 12]. Las definiciones usuales de resonancia sugieren una fuerte variación de la sección transversal a cierta energía  $E_R$ , la cual está relacionada con la existencia de un estado “casi” ligado en un sistema proyectil-objetivo con energía  $E_R$ . En este tipo de sistemas, cuando el proyectil es enviado a esta energía (llamada energía de resonancia), puede ser “capturado” temporalmente en este estado metaestable.

La energía y ancho de resonancia para una resonancia amplia no es definida de forma única y hay varias definiciones las cuales han sido usadas en la literatura. Por ejemplo, Barker [5], hace algunos comentarios sobre otros trabajos y las definiciones que estos utilizan. Esto se profundiza más en otra publicación [13], en la cual, hace uso de las definiciones para analizar el estado excitado de cierto modelo. Barker, obtiene la energía del primer estado excitado de  $^9\text{B}$  a partir de la medición de la energía de un estado análogo en  $^9\text{Be}$  y considerando el desplazamiento de energía de Coulomb. En este proceso, Baker encuentra que para muchos casos, los niveles encontrados son ligados y, por lo tanto, no hay ambigüedad en la definición de los niveles de energía. Sin embargo, existen otros (a los que llama “niveles no ligados”) en los cuales definiciones diferentes son posibles. Menciona que este trabajo entra en conflicto con uno previo, Sherr y Bertsch (1985) [14], en el cual, presentan diferencias significativas en los niveles de energía para ambos sistemas que, se asume, son análogos. También encuentran que, para un mismo sistema, diferentes definiciones dan diferentes energías de resonancia. Las definiciones que menciona Baker para la energía de los niveles no ligados son:

- la parte real de la energía de un polo en la matriz de dispersión;
- la energía en el máximo de

$$\rho_1(E) = \int_0^\infty \Psi_E^2(r) \frac{dV}{dr} r^2 dr, \quad (1.13)$$

con la función de onda  $\Psi_E(r)$  normalizada por

$$\Psi_E(r) \longrightarrow \frac{\text{sen}(kr + \delta)}{k^{1/2}r} \quad (1.14)$$

cuando  $r \rightarrow \infty$ , donde  $\delta$  es el corrimiento de fase total;

- la energía en el máximo de

$$\rho_2(E) = \frac{d\delta}{dE}; \quad (1.15)$$

- y la energía en el máximo de

$$\rho_3(E) = \left| \int \Psi_E(r) r \phi_0(r) r^2 dr \right|^2 \quad (1.16)$$

con  $\phi_0(r)$  la función de onda del estado ligado que describe al estado base del sistema.

Usualmente, la definición usada es la primera [1, 3]. Se puede demostrar que esta definición tiene relación con los máximos de la sección transversal total. Sea  $E_C$  un polo de la matriz S en el espacio de energía, de la forma

$$E_C = E_0 - i\frac{\Gamma}{2} \quad (1.17)$$

entonces la fórmula de Breit-Wigner para la sección transversal es

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \frac{(\Gamma/2)^2}{(E - E_0)^2 + \Gamma^2/4} \quad (1.18)$$

Con esto, es posible considerar que  $\Gamma$  sea el ancho completo a la mitad del máximo del pico, siempre que la resonancia sea lo suficientemente estrecha para que la variación de  $1/k^2$  pueda ser ignorada [12].

La segunda definición se refiere a tomar la energía que maximiza una amplitud de la función de onda apropiadamente normalizada dentro de la zona de interacción (el núcleo, para este caso) [14]. Se puede pensar que el ancho de las resonancias y la energía no son las mismas que las obtenidas por el ajuste de Breit-Wigner para la resonancia de dispersión elástica, sin embargo, cuando  $\Gamma \ll E_0$ , la diferencia será despreciable. [12]

La tercera definición de resonancia, representada por la ecuación (1.15), es la energía a la cual la tasa de incremento del corrimiento de fase es máximo. Es importante destacar que esta definición es equivalente a la presentada en algunos textos [1–3], en los cuales se habla de las resonancias como un pico en la sección transversal con un incremento rápido en el corrimiento de fase cuando pasa por  $\pi/2$  lo cual, está ligado a la formación de estados cuasiestacionarios. Esto nos lleva a pensar que el tiempo de demora está involucrado. El tiempo de demora se define como [2]

$$\tau(k) = 2\hbar \frac{\partial \theta}{\partial E} \quad (1.19)$$



Sherr y Bertsch comparan estas dos últimas definiciones para ciertas configuraciones. Se observan diferencias en la ubicación de los picos de cada función.

La ecuación (1.16) es una amplitud que es proporcional a la probabilidad de crear un estado continuo desde el estado base con el operador  $r$  [14]. Sea  $E_r$  la energía de resonancia obtenida cuando el corrimiento de fase es  $\pi/2$  y  $E_m$  la energía a la que las diferentes funciones de densidad  $\rho$  tienen máximos locales, se encuentra que, en general,  $E_r \neq E_m$ . Todo lo anterior da paso a preguntar ¿qué sucede cuando no hay picos estrechos?, ¿cuál o cuáles de las definiciones anteriores (o nuevas) son las mejores para encontrar resonancias? y ¿es posible generalizar la definición de resonancia? Estas preguntas se intentan contestar en este trabajo. En el segundo capítulo se habla del modelo propuesto. Se calculan las funciones de onda y de dispersión así como algunas cantidades que ayudarán a caracterizar el problema. También se habla de la forma de calcular los polos de la matriz  $S$ .

En el tercer capítulo se presentan las configuraciones usadas para evaluar todas las cantidades encontradas en el capítulo 2. El objetivo de esto es ver cómo se comportan las funciones y tratar de encontrar algún patrón en su forma y en las ubicaciones de los máximos.

En el cuarto capítulo se recaba toda la información que nos brindaron las gráficas y tablas y se describen los patrones encontrados. Se responde a la pregunta qué función de dispersión es mejor para encontrar resonancias.

## 1.6. Objetivos

### 1.6.1. Objetivo general

Entender el efecto de los polos resonantes de la matriz  $S$  en diferentes funciones de dispersión en el caso de resonancias no angostas en un sistema 1D cuántico sencillo.

### 1.6.2. Objetivos particulares

- Una vez resuelto el problema cuántico con el potencial propuesto y encontrado las funciones de dispersión, encontrar configuraciones para el alto de la barrera y la profundidad y ancho del pozo de tal forma que las funciones de dispersión presenten resonancias no angostas.
- Calcular numéricamente la posición de todos los máximos locales que presentan las funciones de dispersión, así como los polos de la matriz  $S$ . Ordenar las posiciones de los máximos y analizar la cercanía de estos con la parte real del polo de  $S$ .

- Observar si existe alguna regla o patrón que se cumpla en la cercanía de los máximos a la parte real del polo de  $S$  o en el orden de los máximos locales de las funciones de dispersión. Concluir si existe una función que mejor señale la posición de los polos en sistemas donde las resonancias no son angostas.

## 1.7. Hipótesis

La forma usual de detectar y definir resonancias en un sistema cuántico dispersivo es a través de la sección transversal  $\sigma(k)$ . El tiempo de demora  $\tau(k)$  tiene máximos muy cercanos a los de  $\sigma(k)$  para resonancias muy angostas. Esto sugiere que otras funciones de dispersión como son la probabilidad de atrapamiento  $P(k)$  y la “distancia transversal efectiva”  $l(k)$  tengan máximos en ubicaciones muy cercanas a los máximos de  $\sigma(k)$  y  $\tau(k)$ . Lo que significará que, en el límite de resonancias angostas, cualquiera de estas funciones detecta resonancias de manera adecuada.

Nos preguntamos si este comportamiento se sigue obedeciendo para resonancias anchas. En caso de no ser cierto, cuál sería la función que se puede asociar de mejor manera a la posición de la parte real del polo de la matriz  $S$ .

Las cuatro funciones de dispersión que se van a utilizar, pueden ser divididas en dos grupos. El tiempo de demora y la distancia efectiva son variaciones en la fase de dispersión respecto a la energía o al momento. Por otro lado, la probabilidad de atrapamiento y la sección transversal representan probabilidades (amplitud de la función de onda dentro del potencial de interacción y cociente entre flujos de salida y entrada, respectivamente). La cercanía de un polo al eje real de  $k$  es la que genera cambios de fase y entre más cerca los cambios son más drásticos por lo que esperamos que las variaciones rápidas de la fase puedan detectar mejor la presencia de la parte real del polo.

## Capítulo 2

# Modelo

El modelo empleado en este trabajo consta de una barrera y un pozo de potencial finitos. La barrera tiene alcance infinito mientras que el pozo tiene una anchura  $L$ . Se considera así porque ya existe un trabajo donde la altura de la barrera se toma infinita [11]. También, existen estudios de modelos físicos que incluyen potenciales de este estilo. Por ejemplo, heteroestructuras semiconductoras [15, 16] donde se crean potenciales periódicos que representan la unión de materiales con diferentes propiedades eléctricas. Algo similar sería en los cristales fotónicos [17] la diferencia es que aquí, se tienen índices de refracción periódicos que tienen la forma del potencial planteado. Al potencial considerado se le calcula la función de onda y diferentes funciones de dispersión las cuales será evaluadas para varias configuraciones.

### 2.1. Barrera y pozo de potencial

Se considera el potencial mostrado en la figura (2.1) con  $V_1 < E < V_3$ .

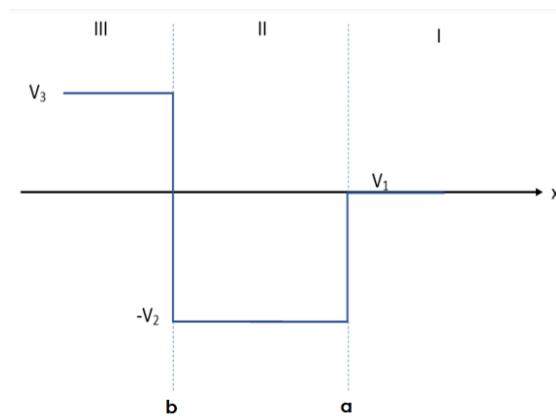


FIGURA 2.1: Potencial considerado

Sin pérdida de generalidad, se toma  $V_1 = 0$ . El modelo tiene las siguientes funciones de onda

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{-ikx} + Se^{ikx}, & x \geq a \\ A_2 \sin(qx + \gamma), & b < x < a \\ A_3 e^{\kappa_3 x}, & x \leq b \end{cases} \quad (2.1)$$

Donde  $S$  es la matriz de dispersión que, para el caso 1D es un escalar definido por

$$S = -e^{2i\theta}, \quad (2.2)$$

y

$$\begin{aligned} q &= \sqrt{2V_2 + k^2} \\ \kappa_3 &= \sqrt{2V_3 - k^2} \end{aligned} \quad (2.3)$$

En términos de la energía

$$\begin{aligned} k &= \sqrt{2E} \\ q &= \sqrt{2(V_2 + E)} \\ \kappa_3 &= \sqrt{2(V_3 - E)} \end{aligned} \quad (2.4)$$

Evaluando la derivada logarítmica de la función de onda I en la frontera se tiene

$$\begin{aligned} \frac{\psi'_I(x)}{\psi_I(x)} &= \frac{-ik [e^{-ikx} + e^{2i\theta} e^{ikx}]}{e^{-ikx} - e^{2i\theta} e^{ikx}} \\ &= -ik \frac{e^{i\theta} [e^{-i\theta} e^{-ikx} + e^{i\theta} e^{ikx}]}{e^{i\theta} [e^{-i\theta} e^{-ikx} - e^{i\theta} e^{ikx}]} \\ &= -ik \frac{e^{i\theta} e^{ikx} + e^{-i\theta} e^{-ikx}}{-e^{i\theta} e^{ikx} + e^{-i\theta} e^{-ikx}} \\ &= ik \frac{e^{i(kx+\theta)} + e^{-i(kx+\theta)}}{e^{i(kx+\theta)} - e^{-i(kx+\theta)}} \\ &= ik \frac{2 \cos(kx + \theta)}{2i \sin(kx + \theta)} = k \cot(kx + \theta) \end{aligned}$$

Evaluando en  $x = a$  se obtiene el parámetro de frontera  $B(k)$

$$B(k) = k \cot \phi \quad (2.5)$$

en la cual se definió

$$\phi(k) = ka + \theta(k) \quad (2.6)$$

Para hallar el valor de las constantes se utilizan las condiciones de frontera aplicadas a la ecuación (2.1). Es decir

$$\begin{aligned} \psi_I(a) &= \psi_{II}(a) & \psi'_I(a) &= \psi'_{II}(a) \\ \psi_{II}(b) &= \psi_{III}(b) & \psi'_{II}(b) &= \psi'_{III}(b) \end{aligned} \quad (2.7)$$

De donde se obtienen el siguiente sistema de ecuaciones

$$\begin{cases} e^{-ika} + Se^{ika} = A_2 \sin(qa + \gamma) \\ -ik(e^{-ika} - Se^{ika}) = A_2 q \cos(qa + \gamma) \\ A_2 \sin(qb + \gamma) = A_3 e^{\kappa_3 b} \\ A_2 q \cos(qb + \gamma) = A_3 \kappa_3 e^{\kappa_3 b} \end{cases} \quad (2.8)$$

De las últimas 2 ecuaciones, se obtiene que

$$\gamma = \tan^{-1} \left( \frac{q}{\kappa_3} \right) - qb \quad (2.9)$$

Para hallar  $\theta$  (y, en consecuencia,  $S$ ), se dividen las dos primeras ecuaciones de (2.8), obteniendo

$$\tan(qa + \gamma) = \frac{iq e^{-ika} + Se^{ika}}{k e^{-ika} - Se^{ika}}$$

Sustituyendo (2.9)

$$\tan \left( qL + \tan^{-1} \left( \frac{q}{\kappa_3} \right) \right) = \frac{iq e^{-ika} + Se^{ika}}{k e^{-ika} - Se^{ika}}$$

donde  $L = a - b$ . Ahora, definiendo

$$\delta = qL + \tan^{-1} \left( \frac{q}{\kappa_3} \right) \quad (2.10)$$

y sustituyendo (2.2) la expresión anterior queda como

$$\begin{aligned} \tan \delta &= \frac{iq e^{-ika} - e^{2i\theta} e^{ika}}{k e^{-ika} + e^{2i\theta} e^{ika}} \\ &= \frac{iq e^{-i\theta} e^{-ika} - e^{i\theta} e^{ika}}{k e^{-i\theta} e^{-ika} + e^{i\theta} e^{ika}} \\ &= \frac{iq e^{-i(k a + \theta)} - e^{i(k a + \theta)}}{k e^{-i(k a + \theta)} + e^{i(k a + \theta)}} \\ &= \frac{q}{k} \tan(k a + \theta) \end{aligned}$$

Por lo que, usando la ecuación (2.6) se tiene

$$k \tan \delta = q \tan \phi \quad (2.11)$$

Despejando  $\theta$  de la expresión (2.11) se encuentra

$$\theta(k) = \tan^{-1} \left( \frac{k}{q} \tan \delta \right) - ka \quad (2.12)$$

Determinadas  $S$  y  $\gamma$ , las constantes  $A_2$  y  $A_3$  se encuentran a partir de (2.8).

$$A_2 = -2i \frac{k}{q} e^{i\theta} \frac{\cos \phi}{\cos \delta} \quad (2.13)$$

$$A_3 = A_2 e^{-\kappa_3 b} \frac{q}{\sqrt{q^2 + \kappa_3^2}}. \quad (2.14)$$

## 2.2. Funciones de dispersión para el modelo barrera-pozo de potencial

Con la función de onda completa, es posible calcular las funciones de dispersión como la sección transversal  $\sigma(k)$ , la distancia transversal efectiva  $l(k)$  o el tiempo de demora  $\tau(k)$ .

La distancia transversal efectiva  $l(k)$  se define como

$$l(k) = 2 \frac{\partial \phi}{\partial k} \quad (2.15)$$

por lo que, usando la expresión (2.6) se tiene

$$l(k) = \frac{2q}{q^2 + k^2 \tan^2 \delta} \left[ \left( 1 - \frac{k^2}{q^2} \right) \tan \delta + \frac{k^2}{q} \left( \frac{1}{\kappa_3} + L \right) \sec^2 \delta \right] \quad (2.16)$$

y con la ecuación (2.11) se puede reacomodar como

$$l(k) = \frac{2}{q^2} \left[ \frac{V_2}{k} \sin(2\phi) + k^2 \left( L + \frac{1}{\kappa_3} \right) + 2V_2 \left( L + \frac{1}{\kappa_3} \right) \sin^2 \phi \right] \quad (2.17)$$

El tiempo de demora se define con la expresión

$$\tau(k) = 2\hbar \frac{\partial \theta}{\partial E} = \frac{\mu}{\hbar k} 2 \frac{\partial \theta}{\partial k} \quad (2.18)$$

La cantidad  $2(\partial\theta/\partial k)$  es llamada *distancia de retardo*. Sustituyendo  $\theta$  de la expresión (2.6) se tiene

$$\begin{aligned}\tau(k) &= \frac{\mu}{\hbar k} 2 \frac{\partial}{\partial k} (\phi(k) - ka) \\ &= \frac{\mu}{\hbar k} 2 \left( \frac{\partial\phi}{\partial k} - \frac{\partial(ka)}{\partial k} \right) \\ &= \frac{\mu}{\hbar k} \left( 2 \frac{\partial\phi}{\partial k} - 2a \right)\end{aligned}$$

El primer término dentro del paréntesis es la definición de  $l(k)$  (ecuación (2.15)) por lo que la expresión para  $\tau$  queda como

$$\tau(k) = \frac{\mu}{\hbar k} [l(k) - 2a] \quad (2.19)$$

La sección transversal se calcula como

$$\sigma(k) = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \theta \quad (2.20)$$

Una variante de la sección transversal que será de ayuda es

$$\sigma'(k) = k^2 \sigma(k) = 4\pi \sin^2 \theta \quad (2.21)$$

### 2.3. Polos de la matriz S en el espacio k

Adicional a lo anterior, también será necesario calcular los polos de S ya que, como se ha mencionado, la parte real del polo está relacionado con la existencia de resonancias [14]. Entonces, los polos se calculan numéricamente al encontrar los ceros complejos del denominador de S [11]. A partir de las ecuaciones (2.2) y (2.6), S se puede escribir como

$$S = -e^{-2ika} e^{2i\phi} = -e^{-2ika} \frac{1 + i \tan \phi}{1 - i \tan \phi}$$

Finalmente, usando (2.11) se llega a

$$S = -e^{-2ika} \frac{1 + i(k/q) \tan \delta}{1 - i(k/q) \tan \delta} = -e^{-2ika} \frac{\cos \delta + i(k/q) \sin \delta}{\cos \delta - i(k/q) \sin \delta} \quad (2.22)$$

Por lo tanto, de la ecuación (2.22), se ve que la ecuación a resolver es

$$q - ik \tan(qL + \arctan(q/\kappa_3)) = 0 \quad (2.23)$$

donde  $k$ , al ser complejo, tiene la forma

$$k = \kappa_n - i\gamma_n \quad (2.24)$$

Por lo tanto, la energía compleja (definida como  $E_C = k^2/2$ ), es

$$E_C = \frac{\kappa_n^2 - \gamma_n^2}{2} - i\kappa_n\gamma_n \equiv E_r + i\Gamma/2 \quad (2.25)$$

Donde  $E_r = \frac{\kappa_n^2 - \gamma_n^2}{2}$  es la parte real de la energía y  $\Gamma = 2\kappa_n\gamma_n$  es la parte imaginaria. Además, se puede calcular el número de onda  $k_\omega$  asociado a la parte real de la energía, esto es

$$k_\omega = \sqrt{\kappa_n^2 - \gamma_n^2}. \quad (2.26)$$



## Capítulo 3

# Resultados

### 3.1. Gráficas de las funciones de dispersión

Las cantidades que son independientes en este sistema son  $V_2$ ,  $V_3$  y  $L$ . Para esta última, se decidió dejar fijo el extremo derecho del pozo en  $a = 0$  y el extremo izquierdo en  $b = -L$ . La tabla (3.1) muestra las configuraciones que se usaron para graficar las funciones de dispersión así como  $\delta_0$  que es la ecuación (2.10) y el parámetro de frontera  $B$  evaluados en  $k = 0$ .

Caso	L	$V_2$	$V_3$	$\delta_0[\pi/2]$	$B_0$
1	4	20	20	16.60535	4.51438
2	4	20.9	20	16.97074	0.29741
3	4	20.93	20	16.98278	0.17509
4	1	25.3	100	4.82520	2.00377
5	1	53	100	6.95501	0.72876
6	1	52	125	6.85695	2.33083
7	1	26	74	4.93137	0.78044
8	1	54	150	6.95999	0.65402
9	1	90.5	175	8.96174	0.80948
10	1	138	149.4288	11.06366	-1.66688
11	1	55	141.4998	7.03183	-0.52484
12	1	38	52.0681	6	$\infty$
13	1	39	69.4733	6.03183	176.48775
14	1	38	63.8797	5.96817	-174.20999
15	4	21	21.4091	17	0
16	4	21	17.5240	17.03183	-0.32430

TABLA 3.1: Valores de las cantidades independientes del sistema,  $\delta_0$  y  $B_0$ .

El proceso para seleccionar estas cantidades fue buscar valores específicos para  $\delta_0$  ya que, como se verá más adelante, determina el comportamiento de las funciones de dispersión para bajas energías. También se calcularon los valores  $B_i$  (parámetro de frontera) evaluados en  $k = 0$  y en las posiciones de los máximos de  $l(k)$ .

Las imágenes siguientes son las gráficas para las funciones de dispersión y la fase  $\phi(k)$  para las diferentes configuraciones mencionadas en la tabla (3.1). Las líneas verticales señalan las ubicaciones de los máximos para  $l(k)$ , los puntos azules sobre el eje  $x$  son la parte real de los polos de  $S$ .

De manera general, se pueden apreciar que, mientras más cercana está la parte real del polo  $\kappa_n$  a  $k = 0$ , más separados están los máximos de las funciones de dispersión. En todos los casos, se observa que mientras más grande es  $\kappa_n$ , los máximos están más juntos entre sí.

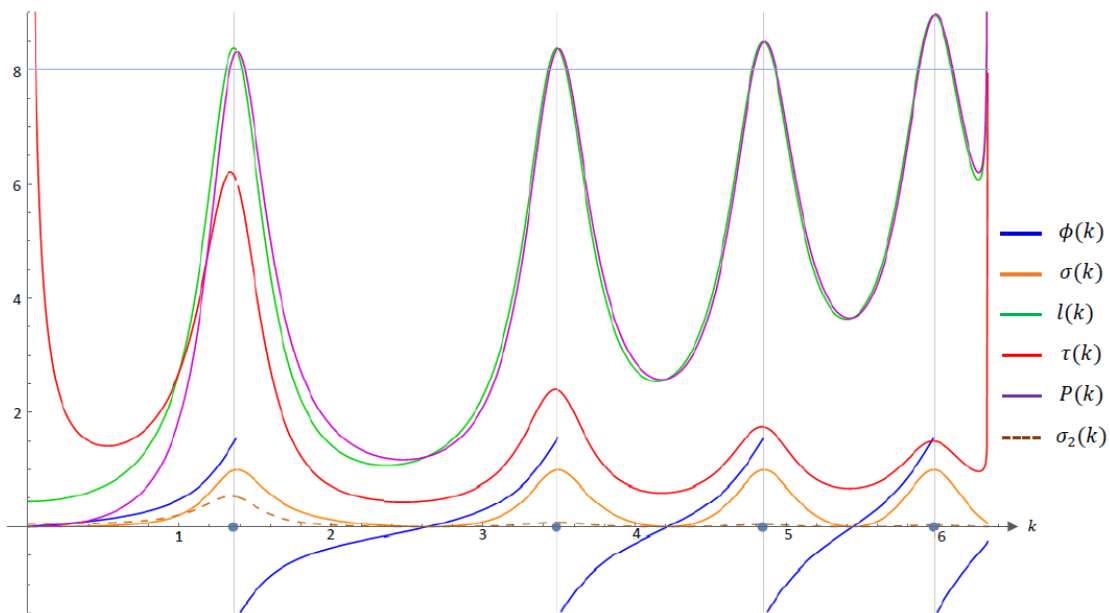


FIGURA 3.1: Funciones de dispersión para el caso 1.  
 $B_0 = 4.51438$ ,  $B_1 = 0.12091$ ,  $B_2 = 0.11648$ ,  $B_3 = 0.10244$ ,  $B_4 = -0.07670$

La figura (3.1) representa un caso completamente arbitrario. Lo que se buscó con esta configuración fue ver el comportamiento general de las funciones. Se observa que hay una cercanía muy grande entre los máximos locales de las funciones lo cual nos dice que existe un límite en el cual, estos máximos podrían coincidir. Sin embargo, era necesario encontrar algunos casos donde los máximos se separaran.

Al cambiar algunos valores de las cantidades independientes, se observó que si se hacía más profundo el pozo (es decir,  $V_2$  era más grande), los picos y la parte real del polo de  $S$  ( $\kappa_n$ ) se recorrían a la izquierda y ahí empezaban a separarse. Esto se puede ver en las figuras (3.2) y (3.3), caso 2 y 3, respectivamente. Lo interesante es que el cambio

de profundidad fue mínima (ver Tabla 3.1), sin embargo, el recorrido de los primeros máximos locales es grande. Ahora, sí se ve una diferencia considerable en los picos de las funciones de dispersión y  $\kappa_n$ . Esta diferencia crece a medida que se van acercando a  $k = 0$ .

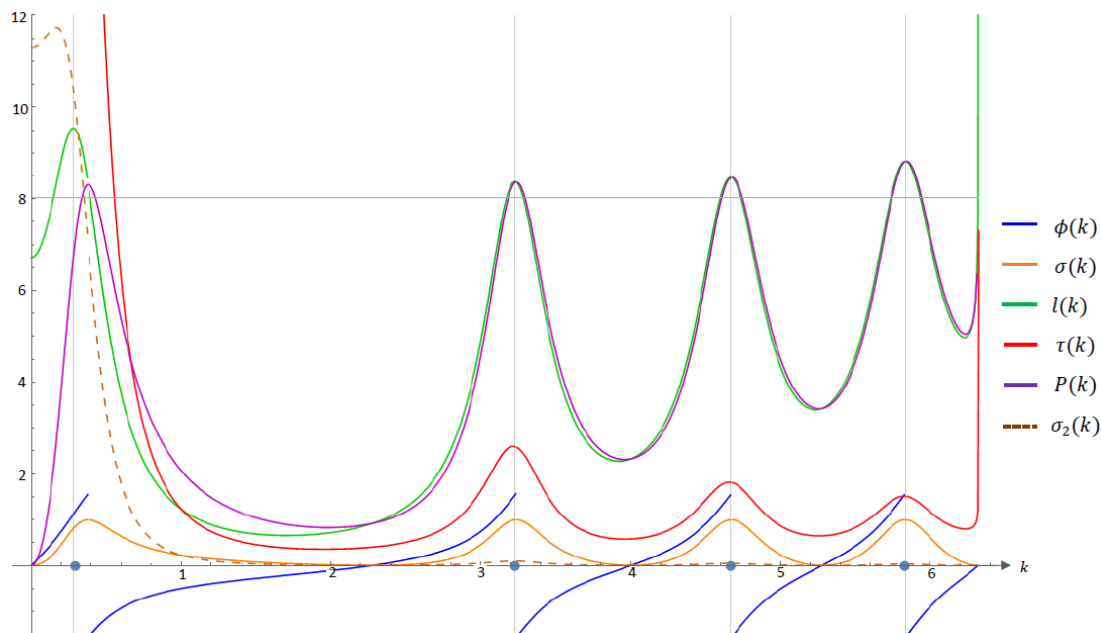


FIGURA 3.2: Funciones de dispersión para el caso 2.  
 $B_0 = 0.29741$ ,  $B_1 = 0.13580$ ,  $B_2 = 0.11743$ ,  $B_3 = 0.10634$ ,  $B_4 = 0.00476$

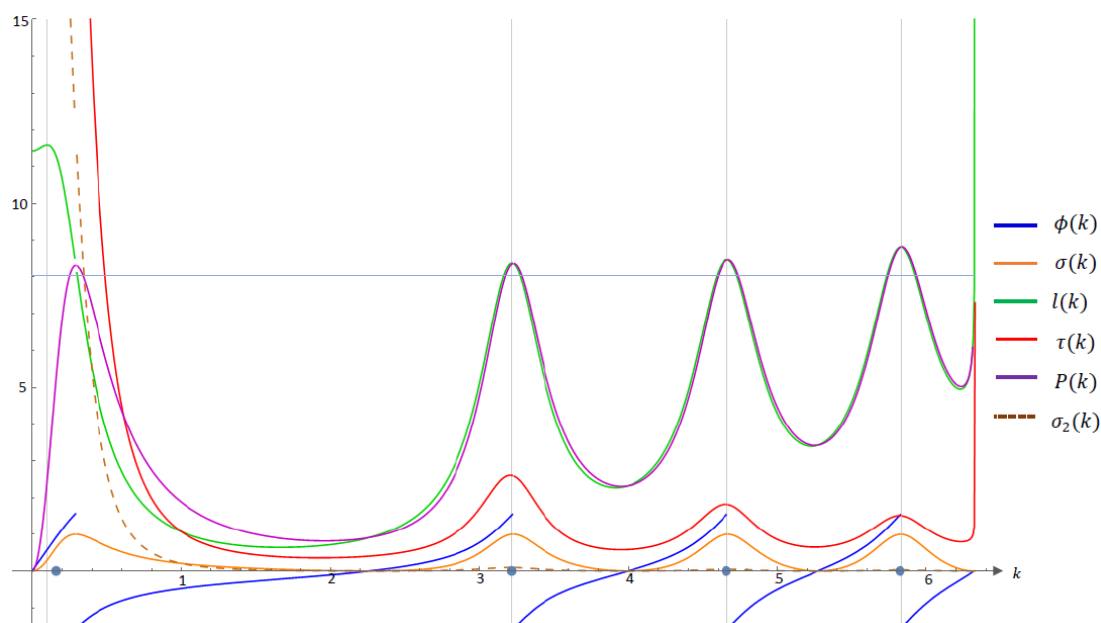


FIGURA 3.3: Funciones de dispersión para el caso 3.  
 $B_0 = 0.17509$ ,  $B_1 = 0.15427$ ,  $B_2 = 0.11746$ ,  $B_3 = 0.10645$ ,  $B_4 = 0.00655$

También, algo destacable es que los demás picos no tienen una variación significativa respecto al caso original. Están posicionados en lugares similares. Por lo que, si se quiere encontrar otro comportamiento en ellos, es necesario cambiar completamente las cantidades.

En la figura (3.4) se ven unas formas más anchas y con los máximos separados aunque no se esté tan cerca de  $k = 0$  como en el caso anterior así que no es posible decir qué tan cerca debe estar  $\kappa_n$  al origen para que las resonancias estén separadas. Para esto, se calcula  $\delta_0$  en la última columna de la tabla (3.1). Se observa que hay una tendencia a ir a un múltiplo impar de  $\pi/2$ , por lo que ahora, el objetivo es acercarse lo más posible a un múltiplo de este tipo.

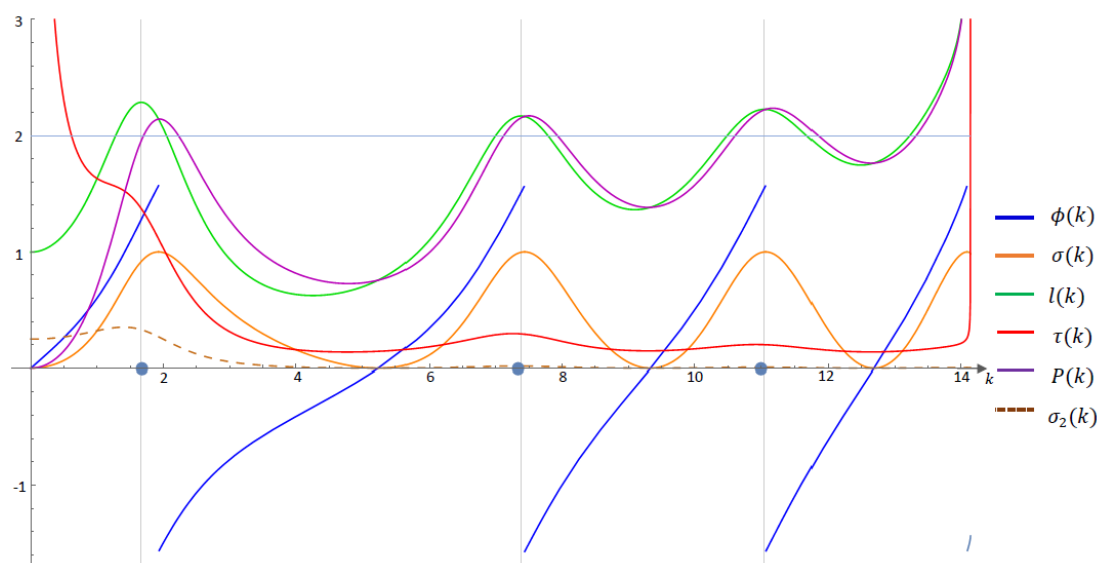


FIGURA 3.4: Funciones de dispersión para el caso 4.  
 $B_0 = 2.00377$ ,  $B_1 = 0.50133$ ,  $B_2 = 0.43796$ ,  $B_3 = 0.20578$

Las imágenes (3.5) y (3.6) (casos 5 y 6) ilustran qué sucede cuando  $\delta_0$  se aleja del múltiplo impar  $\pi/2$ . Del caso 5 al 6 se observa un alejamiento de  $\kappa_n$  del origen que es como se esperaba ya que  $\delta_0$  nos anticipó esto.

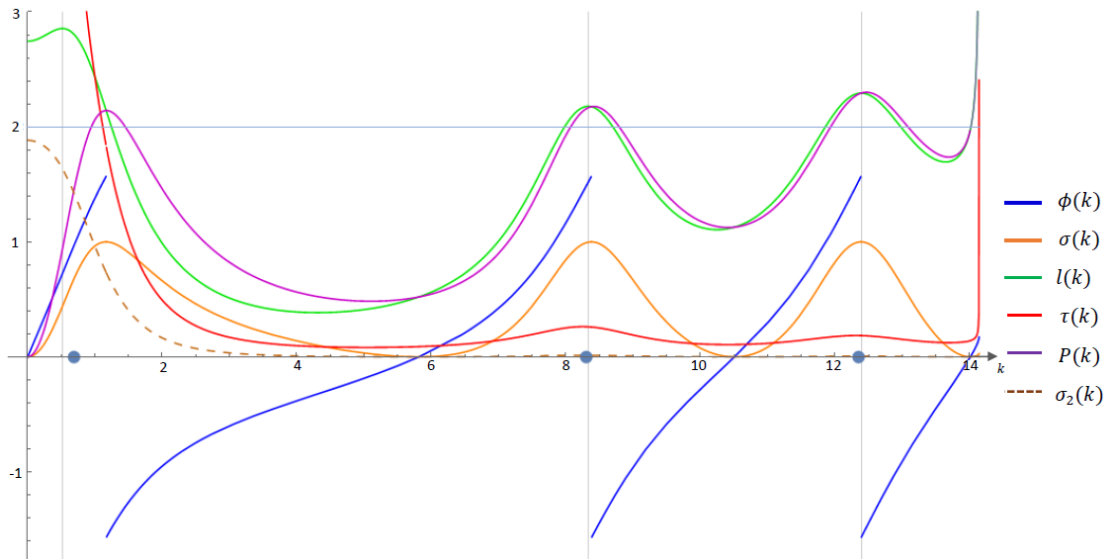


FIGURA 3.5: Funciones de dispersión para el caso 5.  
 $B_0 = 0.72876$ ,  $B_1 = 0.58563$ ,  $B_2 = 0.42970$ ,  $B_3 = -0.01489$

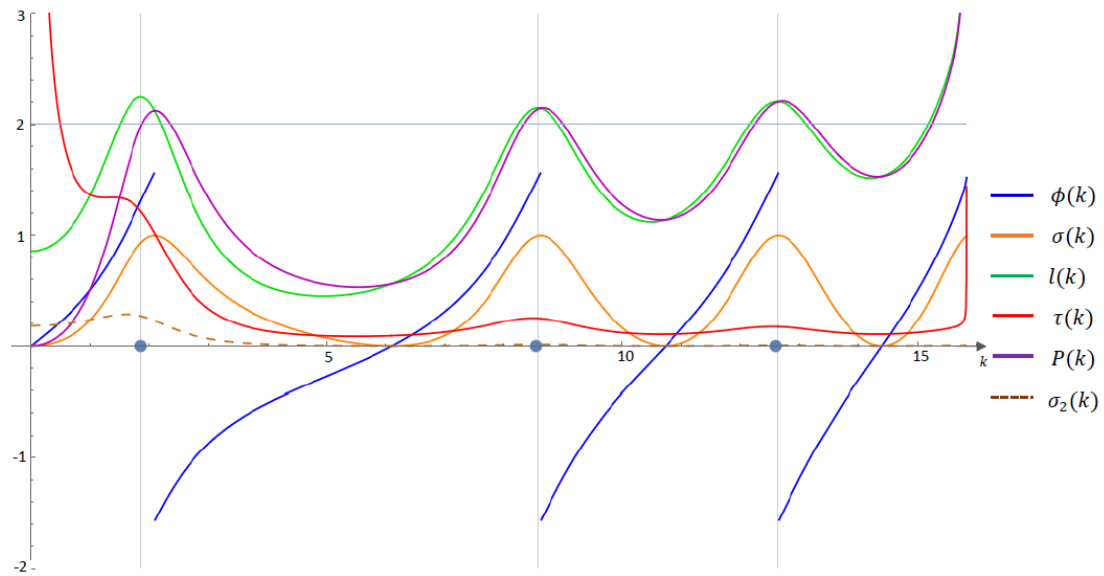


FIGURA 3.6: Funciones de dispersión para el caso 6.  
 $B_0 = 2.33083$ ,  $B_1 = 0.49826$ ,  $B_2 = 0.44448$ ,  $B_3 = 0.26299$

La figura (3.7) tiene un valor de  $\delta_0$  parecido al del caso 4, sin embargo, la forma de las funciones es muy distinta, así como el número de máximos locales de cada función. El rango de todas las funciones de dispersión está dado por  $\kappa_3$ .

Otra cosa interesante a destacar es la gráfica de la fase  $\phi$ . Vemos que en todos los casos inicia en  $k = 0$ . Es necesario ver si  $\delta_0$  puede anticipar cómo inicia esta fase.

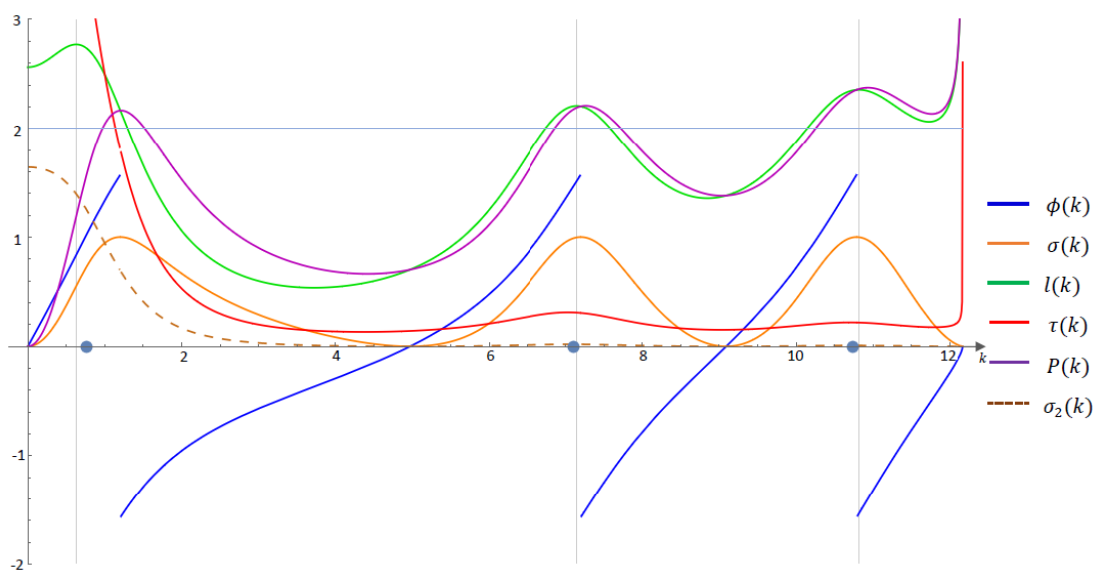


FIGURA 3.7: Funciones de dispersión para el caso 7.  
 $B_0 = 0.78044$ ,  $B_1 = 0.56716$ ,  $B_2 = 0.41374$ ,  $B_3 = -0.37300$

En un intento de cambiar el comportamiento de  $\phi(k)$  surgen los casos 8 y 9 (Figura 3.8 y 3.9, respectivamente). Se ve que las funciones se comportan de manera similar que los casos anteriores. Ahora es más evidente en el caso 8 que los primeros picos locales son muy diferentes entre sí mientras que en los demás, todas las funciones están demasiado cerca a  $\kappa_n$ . Sin embargo, solo se tenían casos donde  $\delta_0$  se acercaba a un múltiplo entero de  $\pi/2$  pero por abajo de este. Es natural preguntar qué sucede cuando se está en las cercanías de ese valor pero ahora por arriba.

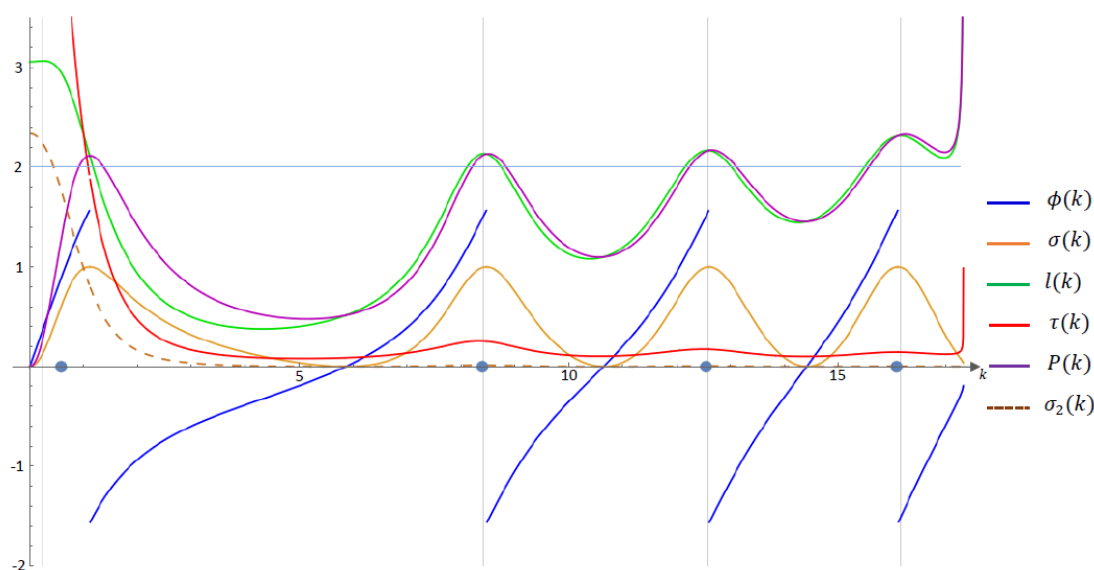


FIGURA 3.8: Funciones de dispersión para el caso 8.  
 $B_0 = 0.65402$ ,  $B_1 = 0.62106$ ,  $B_2 = 0.45668$ ,  $B_3 = 0.36427$ ,  $B_4 = -0.94944$

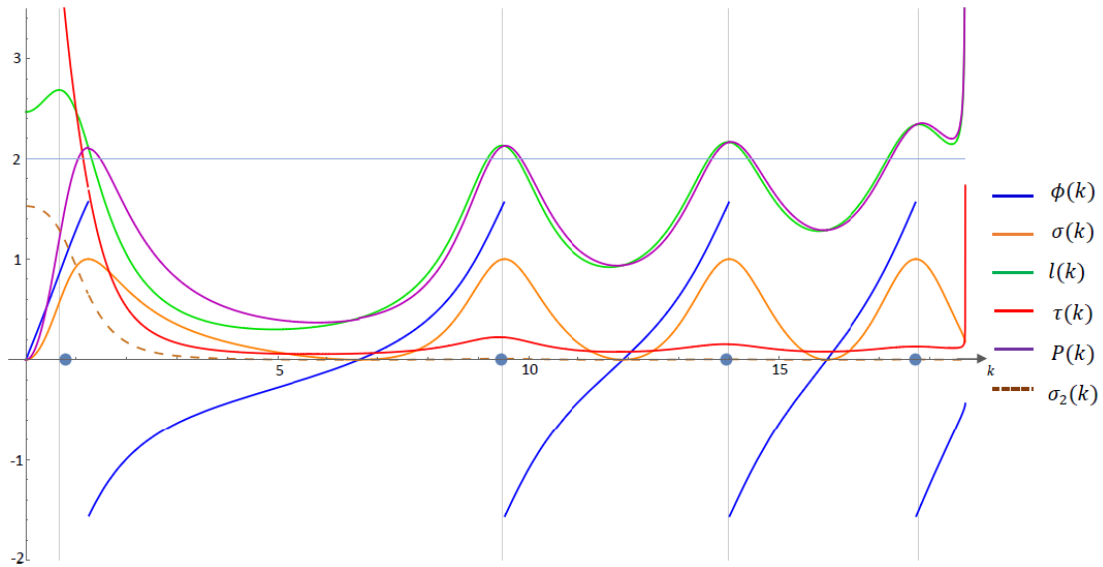


FIGURA 3.9: Funciones de dispersión para el caso 9.  
 $B_0 = 0.80948$ ,  $B_1 = 0.57873$ ,  $B_2 = 0.45857$ ,  $B_3 = 0.37329$ ,  $B_4 = -1.20559$

Con esta pregunta llegan los casos 10 y 11 (Figuras 3.10 y 3.11). Aquí  $\delta_0$  rebasa por poco a un múltiplo entero de  $\pi/2$  y los cambios son muy grandes. Primero no hay un valor de  $\kappa_n$  cerca del origen, lo que resulta un tanto extraño ya que algunas funciones como la probabilidad de atrapamiento y la sección transversal aún presentan un máximo. Lo segundo es que, aunque  $\phi(k)$  siga empezando en 0, ahora la pendiente es negativa y después de subir, toma su comportamiento habitual. Esto también sucede en el caso 16 mostrado en la figura (3.16). Algo similar sucede con el tiempo de demora  $\tau(k)$  y  $l(k)$ , salen de valores negativos y después se comportan de la manera habitual. Debido a la lejanía que existe entre  $k = 0$  y el primer valor de  $\kappa_n$ , los picos que las funciones están muy cerca entre sí, por lo que estos casos no ayudan a diferenciar una definición de otra.

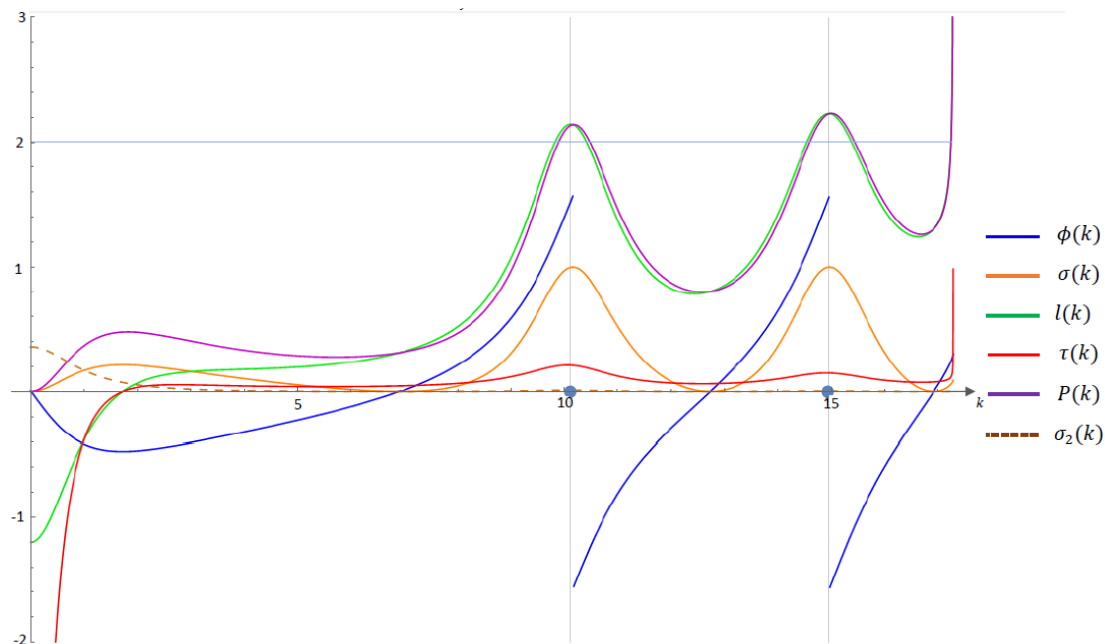


FIGURA 3.10: Funciones de dispersión para el caso 10.  
 $B_0 = -1.66688, B_1 = 0.44607, B_2 = 0.19952$

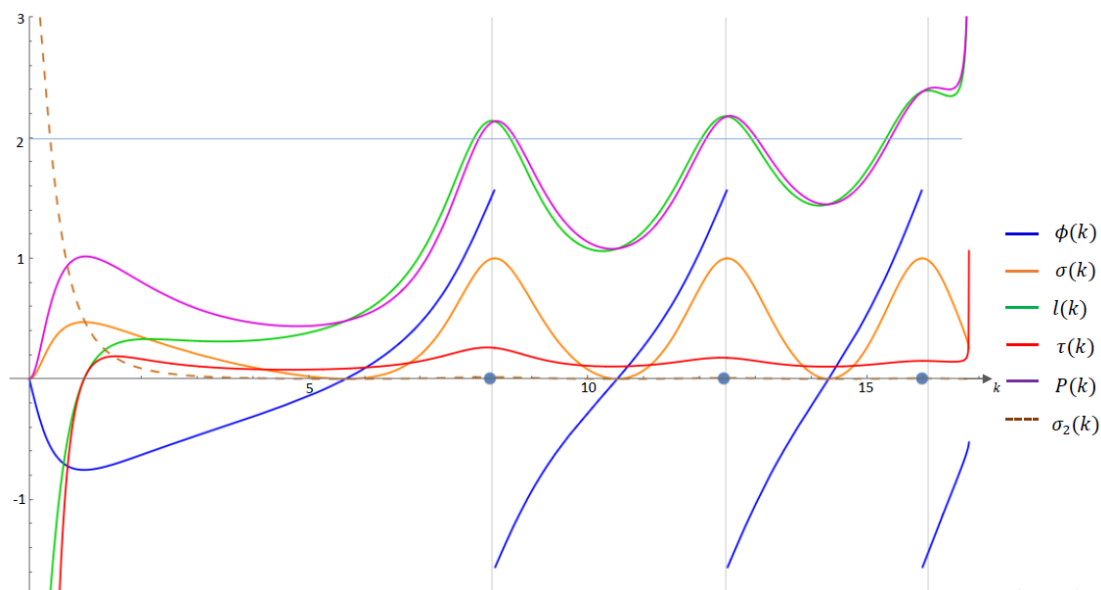


FIGURA 3.11: Funciones de dispersión para el caso 11.  
 $B_0 = -0.52484, B_1 = 0.45515, B_2 = 0.35073, B_3 = -2.24858$

Se observó qué sucede cuando  $\delta_0$  toma valores cercanos a múltiplos impares de  $\pi/2$  por arriba y por abajo, por lo que también interesa ver qué sucede cuando se acerca a un múltiplo par de  $\pi/2$ . Las figuras (3.12), (3.13) y (3.14) son los que muestran este caso. En el caso 12, donde  $\delta_0 = 6(\pi/2)$ , lo más llamativo es que todas las funciones salen de cero y después tiene sus comportamientos comunes. En los otros dos casos, se mueve el



valor de  $\delta_0$  hacia arriba y hacia abajo siendo los afectados  $\tau(k)$  y  $l(k)$  los cuales cambian su punto de partida hacia arriba y abajo, respectivamente.

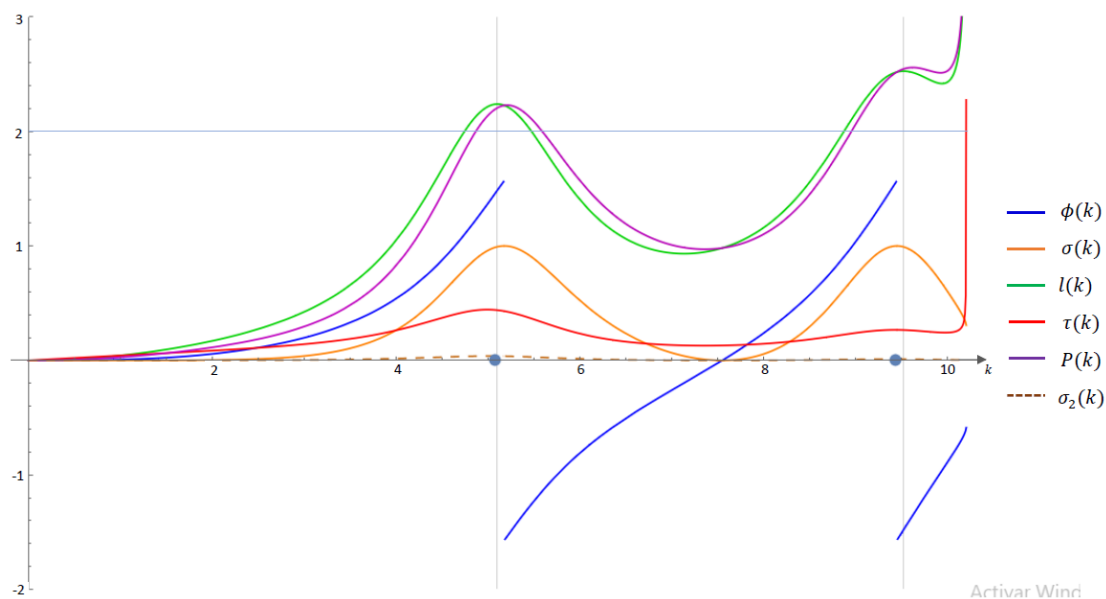


FIGURA 3.12: Funciones de dispersión para el caso 12.  
 $B_0 = \infty, B_1 = 0.43404, B_2 = -0.88228$

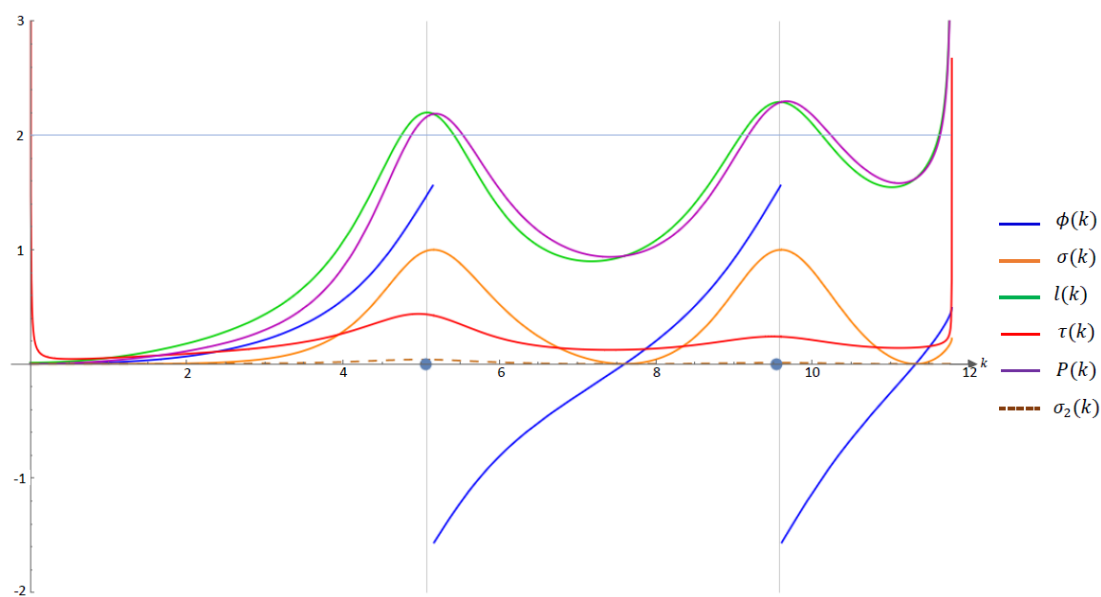


FIGURA 3.13: Funciones de dispersión para el caso 13.  
 $B_0 = 176.48775, B_1 = 0.45066, B_2 = 0.20137$

Aunque interesantes por el comportamiento inicial de las funciones de dispersión, nuevamente estos casos no nos brindan diferencias grandes en los picos locales de las funciones.

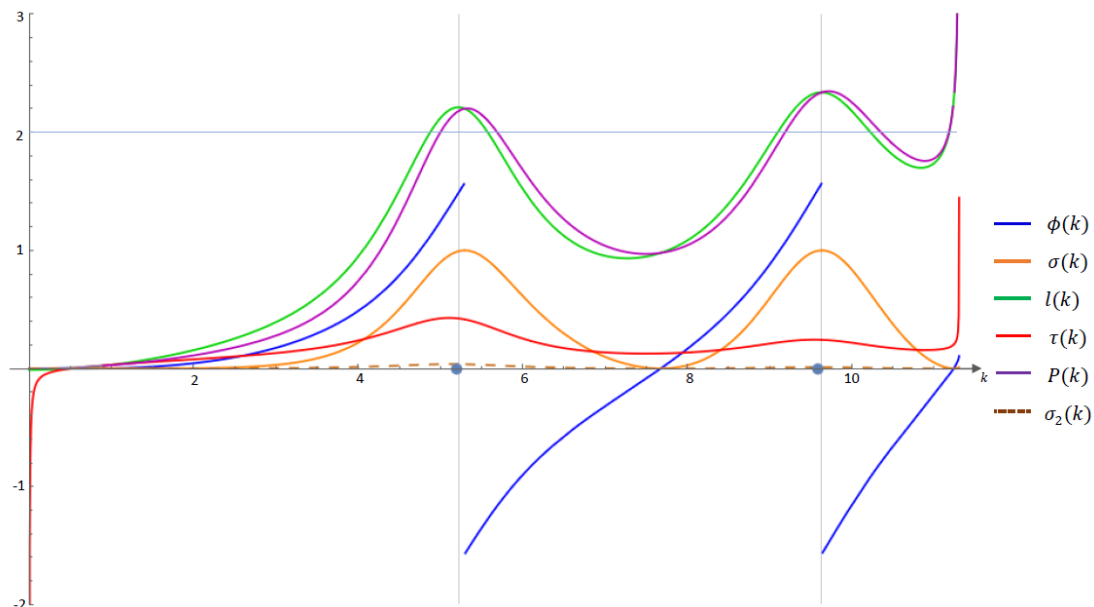


FIGURA 3.14: Funciones de dispersión para el caso 14.  
 $B_0 = -174.20999$ ,  $B_1 = 0.44477$ ,  $B_2 = 0.06531$

Finalmente, un caso no abordado es cuando  $\delta_0$  es exactamente un múltiplo entero de  $\pi/2$ . Aquí ya hay una diferencia significativa en  $\phi(k)$  porque cambia su punto de inicio a  $-\pi/2$ . Otra cosa a destacar es que tampoco existe un polo complejo cerca de  $k = 0$  así que, este caso no ayuda a diferenciar las definiciones de resonancia.

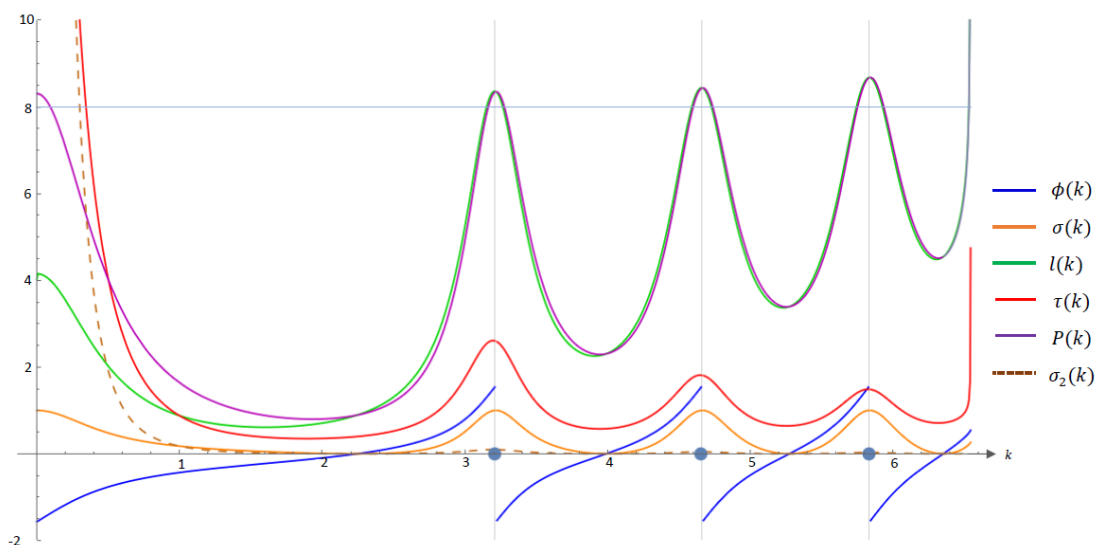


FIGURA 3.15: Funciones de dispersión para el caso 15.  
 $B_0 = 0$ ,  $B_1 = 0.11800$ ,  $B_2 = 0.10915$ ,  $B_3 = 0.05244$

Al mover un poco hacia arriba el valor de  $\delta_0$  se tiene un caso ya mencionado (Figura 3.16). Como se esperaba, parte de cero y baja para después tomar el comportamiento habitual mientras que las demás funciones no presentan diferencias significativas en la

ubicación de sus máximos, esto debido a que los valores de  $\kappa_n$  están en  $k$  alejados de cero.

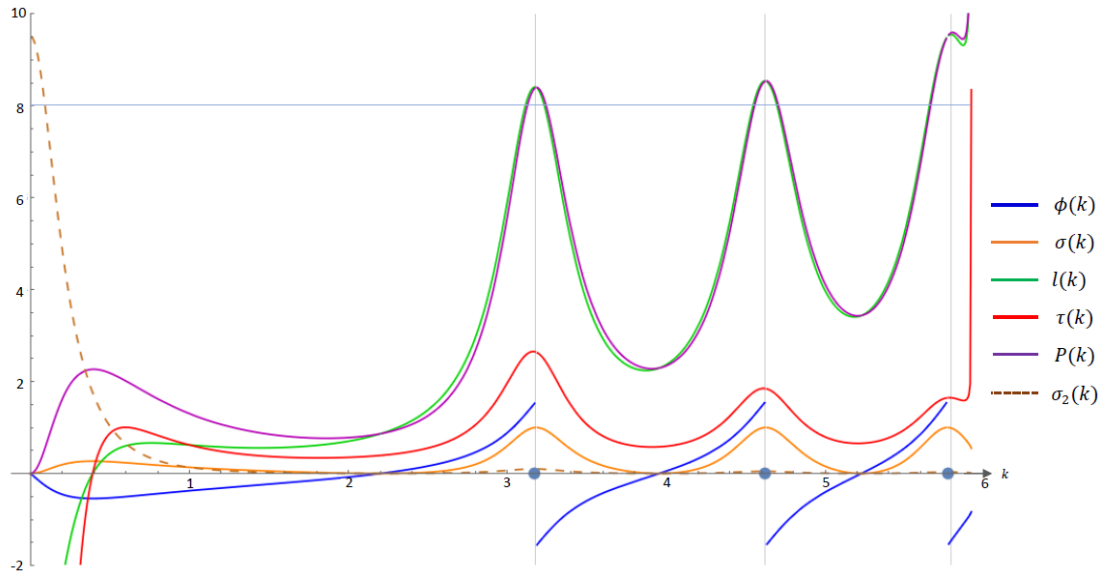


FIGURA 3.16: Funciones de dispersión para el caso 16.  
 $B_0 = -0.32430$ ,  $B_1 = 0.11644$ ,  $B_2 = 0.09978$ ,  $B_3 = -0.62021$

### 3.2. Resonancias en el modelo de barrera y pozo de potencial

Numéricamente, fueron calculadas las ubicaciones de todos los máximos de las funciones de dispersión, así como los valores de la parte real del polo de  $S$  ( $\kappa_n$ ) y el número de onda asociada a la parte real del polo en el espacio de energías,  $k_\omega$ . Toda esa información se encuentra en las tablas (3.2) y (3.3). Como es mencionado en diversos documentos [2, 5, 13], la parte real del polo es la que se toma como verdadera, entonces, se quiere ver qué tan cercanas son las demás cantidades a  $\kappa_n$ . Sea  $k_l$  la ubicación del máximo local de la distancia transversal efectiva  $l(k)$ ,  $k_\sigma$  la ubicación de los máximos de la sección transversal  $\sigma(k)$ ,  $k_\tau$  la del tiempo de demora  $\tau(k)$  y  $k_P$  la de la probabilidad de atrapamiento, entonces, el objetivo es encontrar qué diferencia de la forma

$$\frac{|\kappa_n - k_i|}{\kappa_n} \quad (3.1)$$

donde  $i = l, \sigma, \tau, P$ , es la más pequeña para cada caso. En principio, se espera encontrar que suceda lo mismo en todos los casos, es decir, que exista una sola función que se acerque a  $\kappa_n$  más que las otras. El número de decimales que se usaron es escogido según la diferencia (3.1) ya que se esperan encontrar valores cercanos entre sí pero no iguales.

Caso	$k_l$	$\kappa_n$	$k_\omega$	$k_\sigma$	$k_\tau$	$k_P$
1	1.35979	1.35900	1.33693	1.38099	1.33685	1.38204
1	3.48732	3.48511	3.47537	3.495289	3.47662	3.49799
1	4.84758	4.84475	4.83702	4.85255	4.83847	4.85668
1	5.97430	5.96919	5.96283	5.97143	5.96614	5.98244
2	0.27881	0.29171	0.16486	0.37824	—	0.37851
2	3.22688	3.22489	3.21462	3.23557	3.21576	3.23795
2	4.66661	4.66396	4.65610	4.67199	4.65749	4.67572
2	5.83297	5.82911	5.82260	5.83315	5.82484	5.84108
3	0.10010	0.16229	0.17755i	0.29024	—	0.29044
3	3.21783	3.21585	3.20556	3.22654	3.20670	3.22892
3	4.66045	4.65781	4.64995	4.66584	4.65133	4.66955
3	5.82819	5.82437	5.81786	5.82845	5.82007	5.83631
4	1.66565	1.67030	1.37332	1.92690	—	1.94415
4	7.37805	7.33373	7.24064	7.43273	7.25649	7.49956
4	11.05053	10.99466	10.91622	11.06725	10.92377	11.17680
5	0.51750	0.69627	0.62472i	1.16756	—	1.17258
5	8.33360	8.30690	8.23610	8.38091	8.24863	8.41827
5	12.38988	12.34872	12.29385	12.38883	12.31200	12.46765
6	1.84817	1.85453	1.59240	2.08659	1.39003	2.09578
6	8.56466	8.53669	8.46493	8.61282	8.47762	8.65145
6	12.61673	12.58064	12.52205	12.63559	12.53360	12.69982
7	0.62880	0.76079	0.53066i	1.20266	—	1.21301
7	7.14860	7.10667	7.01629	7.20100	7.03253	7.26450
7	10.81636	10.74199	10.67075	10.78710	10.69901	10.93368
8	0.24987	0.58265	0.74586i	1.11287	—	1.11761
8	8.42613	8.39899	8.32611	8.47686	8.33866	8.51332
8	12.57834	12.54432	12.48436	12.60504	12.49436	12.66232
8	16.15947	16.08812	16.03748	16.10879	16.07206	16.24695
9	0.66218	0.79533	0.52028i	1.24021	—	1.24340
9	9.47550	9.45620	9.39510	9.52098	9.40487	9.54582
9	13.97756	13.95281	13.90381	14.00226	13.91346	14.04116
9	17.78440	17.71949	17.67932	17.72646	17.71961	17.84949
10	10.11660	10.10266	10.04952	10.15768	10.05706	10.17585
10	14.95421	14.93396	14.89431	14.96617	14.90484	15.00352

TABLA 3.2: Ubicación de los máximos para cada función de dispersión y parte real de los polos de la matriz S en el espacio  $k$  (continuación).

Caso	$k_l$	$\kappa_n$	$k_\omega$	$k_\sigma$	$k_\tau$	$k_P$
11	8.28131	8.25495	8.18204	8.33263	8.19444	8.36784
11	12.46789	12.43437	12.37513	12.49371	12.38558	12.55019
11	16.09980	15.97919	15.93059	15.98358	16.00065	16.20889
12	5.10132	5.07795	4.98051	5.17727	4.99166	5.20886
12	9.52364	9.43596	9.37764	9.45046	9.43097	9.62221
13	5.07806	5.05477	4.95404	5.15864	4.96500	5.18882
13	9.58735	9.54814	9.48205	9.60566	9.49860	9.67598
14	5.21750	5.19325	5.09497	5.29453	5.10655	5.32643
14	9.62879	9.58524	9.52085	9.63459	9.54086	9.71660
15	3.20840	3.20642	3.19608	3.21720	3.19721	3.21955
15	4.65823	4.65560	4.64768	4.66378	4.64905	4.66740
15	5.83392	5.83055	5.82386	5.83599	5.82561	5.84223
16	3.17339	3.17145	3.16114	3.18212	3.16226	3.18448
16	4.62124	4.61862	4.61085	4.62629	4.61225	4.63021
16	5.79250	5.77468	5.76877	5.77014	5.78304	5.80234

TABLA 3.3: Ubicación de los máximos para cada función de dispersión y parte real de los polos de la matriz S en el espacio  $k$  (continuación).

Las ubicaciones deben ser comparadas unas con otras, de tal forma que se encuentren cuáles están más cercanas a las de interés. Las tablas (3.4) y (3.5) muestran las diferencias relativas entre las posiciones de los máximos de las funciones de dispersión con la parte real del polo de S,  $\kappa_n$ . Se observa un claro patrón cuando se trata de las primeras resonancias y de las intermedias. En estos casos,  $l(k)$  es la función que guarda la menor distancia. En las últimas resonancias no hay un patrón claro.

También comparamos la ubicaciones de los máximos con el número de onda asociado a la parte real de la energía  $k_\omega$ . Las diferencias relativas se encuentran en las tablas (3.6) y (3.7). Nuevamente existe un patrón para las resonancias primeras e intermedias. La columna correspondiente al tiempo de demora  $\tau$  tiene las diferencias menores.

Por último, la magnitud del polo  $|K| = \sqrt{\kappa_n^2 + \gamma_n^2}$  también fue comparado con las demás cantidades. Las diferencias relativas se encuentran en las tablas (3.8) y (3.9). Ahora, la posición de los máximos de la sección transversal  $\sigma$  están más cercanos a la magnitud del polo.

Caso	$\frac{ k_l - \kappa_n }{\kappa_n}$	$\frac{ k_\omega - \kappa_n }{\kappa_n}$	$\frac{ k_\sigma - \kappa_n }{\kappa_n}$	$\frac{ k_\tau - \kappa_n }{\kappa_n}$	$\frac{ k_p - \kappa_n }{\kappa_n}$
1	0.00058	0.01624	0.01618	0.0163	0.01692
1	0.00063	0.00280	0.00292	0.00244	0.00363
1	0.00058	0.00159	0.00161	0.0013	0.00231
1	0.00086	0.00107	0.00038	0.00051	0.001
2	0.04422	0.43484	0.29664		0.29754
2	0.00062	0.00318	0.00331	0.00283	0.004
2	0.00057	0.00169	0.00172	0.00139	0.00239
2	0.00066	0.00112	0.00069	0.00073	0.00131
3	0.38325	0.09399	0.78833		0.78956
3	0.00062	0.0032	0.00333	0.00284	0.00401
3	0.00057	0.00169	0.00172	0.00139	0.00239
3	0.00066	0.00112	0.0007	0.00074	0.00132
4	0.00278	0.1778	0.15363		0.16377
4	0.00604	0.01269	0.0135	0.01053	0.02211
4	0.00508	0.00713	0.0066	0.00645	0.01459
5	0.25676	0.10276	0.67687		0.68384
5	0.00321	0.00852	0.00891	0.00702	0.01295
5	0.00333	0.00444	0.00325	0.00297	0.00685
6	0.00343	0.14134	0.12513	0.25047	0.12996
6	0.00328	0.00841	0.00892	0.00692	0.01314
6	0.00287	0.00466	0.00437	0.00374	0.00832
7	0.17349	0.30248	0.5808		0.59404
7	0.0059	0.01272	0.01327	0.01043	0.02136
7	0.00692	0.00663	0.0042	0.00400	0.0111
8	0.57114	0.28013	0.91002		0.918
8	0.00323	0.00868	0.00927	0.00718	0.01341
8	0.00271	0.00478	0.00484	0.00398	0.00881
8	0.00443	0.00315	0.00128	0.00100	0.00472
9	0.16742	0.34582	0.55937		0.56328
9	0.00204	0.00646	0.00685	0.00543	0.00933
9	0.00177	0.00351	0.00354	0.00282	0.00592
9	0.00366	0.00227	0.00039	0.00001	0.00241
10	0.00138	0.00526	0.00545	0.00451	0.00724
10	0.00136	0.00265	0.00216	0.00195	0.00466

TABLA 3.4: Diferencias relativas entre la ubicación de los máximos de las funciones de dispersión y la parte real del polo.

Caso	$\frac{ k_I - \kappa_n }{\kappa_n}$	$\frac{ k_\omega - \kappa_n }{\kappa_n}$	$\frac{ k_\sigma - \kappa_n }{\kappa_n}$	$\frac{ k_\tau - \kappa_n }{\kappa_n}$	$\frac{ k_P - \kappa_n }{\kappa_n}$
11	0.00319	0.00883	0.00941	0.00733	0.01368
11	0.0027	0.00476	0.00477	0.00392	0.00931
11	0.00755	0.00304	0.00027	0.00134	0.01438
12	0.0046	0.01919	0.01956	0.01699	0.02578
12	0.00929	0.00618	0.00154	0.00053	0.01974
13	0.00461	0.01993	0.02055	0.01776	0.02652
13	0.00411	0.00692	0.00603	0.00519	0.01339
14	0.00467	0.01892	0.0195	0.01669	0.02564
14	0.00454	0.00672	0.00515	0.00463	0.0137
15	0.00062	0.00323	0.00336	0.00287	0.00409
15	0.00057	0.0017	0.00176	0.00141	0.00253
15	0.00058	0.00115	0.00093	0.00085	0.002
16	0.00061	0.00325	0.00336	0.0029	0.00411
16	0.00057	0.00168	0.00166	0.00138	0.00251
16	0.00309	0.00102	0.00079	0.00145	0.00479

TABLA 3.5: Diferencias relativas entre la ubicación de los máximos de las funciones de dispersión y la parte real del polo (continuación).

Caso	$\frac{ k_I - k_\omega }{k_\omega}$	$\frac{ \kappa_n  - k_\omega}{k_\omega}$	$\frac{ k_\sigma - k_\omega }{k_\omega}$	$\frac{ k_\tau - k_\omega }{k_\omega}$	$\frac{ k_P - k_\omega }{k_\omega}$
1	0.0171	0.01651	0.03296	0.00006	0.0337
1	0.00344	0.0028	0.00573	0.00036	0.00645
1	0.00218	0.0016	0.00321	0.0003	0.00391
1	0.00192	0.00107	0.00144	0.00056	0.00207
2	0.69118	0.76942	1.2943		1.29589
2	0.00381	0.00319	0.00652	0.00036	0.0072
2	0.00226	0.00169	0.00341	0.0003	0.00408
2	0.00178	0.00112	0.00181	0.00038	0.00243
3	0.43623	0.08592	0.63468		0.63581
3	0.00383	0.00321	0.00655	0.00035	0.00723
3	0.00226	0.00169	0.00342	0.0003	0.00409
3	0.00178	0.00112	0.00182	0.00038	0.00244
4	0.21287	0.21625	0.4031		0.41543
4	0.01898	0.01286	0.02653	0.00219	0.03525

TABLA 3.6: Diferencias relativas entre las  $k_i$ s y  $k_\omega$ .

Caso	$\frac{ k_l - k_\omega }{k_\omega}$	$\frac{ \kappa_n  - k_\omega}{k_\omega}$	$\frac{ k_\sigma - k_\omega }{k_\omega}$	$\frac{ k_\tau - k_\omega }{k_\omega}$	$\frac{ k_p - k_\omega }{k_\omega}$
4	0.0123	0.00719	0.01384	0.00069	0.02188
5	0.17164	0.11453	0.86893		0.87669
5	0.01184	0.0086	0.01758	0.00152	0.02166
5	0.00781	0.00446	0.00773	0.00148	0.01134
6	0.16061	0.16461	0.31034	0.12709	0.31596
6	0.01178	0.00848	0.01747	0.0015	0.02172
6	0.00756	0.00468	0.00907	0.00092	0.01304
7	0.18494	0.43365	1.26633		1.2853
7	0.01886	0.01288	0.02633	0.00231	0.03452
7	0.01365	0.00668	0.0109	0.00265	0.01785
8	0.66499	0.21883	0.49205		0.49829
8	0.01201	0.00875	0.01811	0.00151	0.02228
8	0.00753	0.0048	0.00967	0.0008	0.01365
8	0.00761	0.00316	0.00445	0.00216	0.0079
9	0.27272	0.52864	1.38373		1.3897
9	0.00856	0.0065	0.0134	0.00104	0.01589
9	0.0053	0.00352	0.00708	0.00069	0.00947
9	0.00594	0.00227	0.00267	0.00228	0.00469
10	0.00667	0.00529	0.01076	0.00075	0.01257
10	0.00402	0.00266	0.00482	0.00071	0.00733
11	0.01213	0.00891	0.01841	0.00152	0.02271
11	0.0075	0.00479	0.00958	0.00084	0.01415
11	0.01062	0.00305	0.00333	0.0044	0.01747
12	0.02426	0.01956	0.03951	0.00224	0.04585
12	0.01557	0.00622	0.00777	0.00569	0.02608
13	0.02503	0.02033	0.0413	0.00221	0.04739
13	0.0111	0.00697	0.01304	0.00175	0.02045
14	0.02405	0.01929	0.03917	0.00227	0.04543
14	0.01134	0.00676	0.01195	0.0021	0.02056
15	0.00386	0.00324	0.00661	0.00036	0.00734
15	0.00227	0.0017	0.00346	0.0003	0.00424
15	0.00173	0.00115	0.00208	0.0003	0.00315
16	0.00388	0.00326	0.00664	0.00035	0.00739
16	0.00225	0.00168	0.00335	0.0003	0.0042
16	0.00411	0.00102	0.00024	0.00247	0.00582

TABLA 3.7: Diferencias relativas entre las  $k_i$ s y  $k_\omega$  (continuación).



Caso	$\frac{  K -k_l }{ K }$	$\frac{  K -\kappa_n }{ K }$	$\frac{  K -k_\omega }{ K }$	$\frac{  K -k_\sigma }{ K }$	$\frac{  K -k_\tau }{ K }$	$\frac{  K -k_P }{ K }$
1	0.01516	0.01573	0.03171	0.0002	0.03177	0.00092
1	0.00215	0.00278	0.00557	0.00013	0.00521	0.00084
1	0.00101	0.00159	0.00318	0.00002	0.00288	0.00071
1	0.00021	0.00106	0.00213	0.00069	0.00157	0.00007
2	0.26273	0.22862	0.56405	0.0002		0.0009
2	0.00255	0.00316	0.00634	0.00014	0.00598	0.00082
2	0.00111	0.00168	0.00336	0.00004	0.00306	0.00071
2	0.00045	0.00111	0.00223	0.00042	0.00185	0.00019
3	0.65505	0.4407	0.38814	0.0002		0.00089
3	0.00256	0.00318	0.00637	0.00014	0.00601	0.00082
3	0.00112	0.00168	0.00337	0.00004	0.00307	0.00071
3	0.00046	0.00112	0.00223	0.00042	0.00185	0.0002
4	0.13334	0.13092	0.28545	0.00259		0.0114
4	0.00641	0.01238	0.02492	0.00095	0.02278	0.00945
4	0.00199	0.00704	0.01412	0.00048	0.01344	0.00745
5	0.55623	0.40292	0.46428	0.00122		0.00538
5	0.00519	0.00838	0.01683	0.00045	0.01534	0.00447
5	0.00108	0.0044	0.00883	0.00117	0.00736	0.00241
6	0.11314	0.11009	0.23587	0.00127	0.33298	0.00557
6	0.00502	0.00827	0.0166	0.00058	0.01513	0.00476
6	0.00176	0.00461	0.00925	0.00026	0.00833	0.00368
7	0.47585	0.36583	0.55766	0.00249		0.01089
7	0.00658	0.0124	0.02496	0.00071	0.02271	0.00869
7	0.00034	0.00654	0.01313	0.00237	0.01051	0.00449
8	0.77518	0.47577	0.32891	0.0013		0.00548
8	0.00533	0.00853	0.01713	0.00066	0.01565	0.00476
8	0.00203	0.00473	0.00949	0.00008	0.0087	0.00403
8	0.00129	0.00313	0.00626	0.00185	0.00412	0.00158
9	0.46567	0.35823	0.58017	0.00076		0.00327
9	0.00435	0.00638	0.0128	0.00043	0.01177	0.00289
9	0.00172	0.00349	0.00699	0.00005	0.0063	0.00242
9	0.0014	0.00226	0.00452	0.00186	0.00225	0.00015
10	0.00383	0.00521	0.01044	0.00021	0.0097	0.002
10	0.00129	0.00264	0.00529	0.00049	0.00459	0.002

TABLA 3.8: Diferencias relativas entre las  $k_i$ s y la magnitud del polo  $|K|$ .

Caso	$\frac{  K -k_l }{ K }$	$\frac{  K -\kappa_n }{ K }$	$\frac{  K -k_\omega }{ K }$	$\frac{  K -k_\sigma }{ K }$	$\frac{  K -k_\tau }{ K }$	$\frac{  K -k_P }{ K }$
11	0.00551	0.00868	0.01743	0.00065	0.01595	0.00488
11	0.00204	0.00472	0.00946	0.00003	0.00862	0.00455
11	0.0045	0.00302	0.00606	0.00275	0.00168	0.01131
12	0.01396	0.01848	0.03731	0.00072	0.03516	0.00682
12	0.00313	0.00611	0.01225	0.00458	0.00663	0.01351
13	0.01464	0.01916	0.03871	0.00099	0.03658	0.00685
13	0.00275	0.00683	0.0137	0.00084	0.01198	0.00647
14	0.01365	0.01823	0.03681	0.00091	0.03462	0.00694
14	0.00212	0.00663	0.0133	0.00151	0.01123	0.00698
15	0.00259	0.00321	0.00642	0.00014	0.00607	0.00087
15	0.00113	0.0017	0.00339	0.00006	0.0031	0.00084
15	0.00057	0.00114	0.00229	0.00021	0.00199	0.00086
16	0.00262	0.00323	0.00647	0.00012	0.00612	0.00087
16	0.00111	0.00168	0.00335	0.00002	0.00305	0.00083
16	0.00206	0.00102	0.00204	0.00181	0.00043	0.00376

TABLA 3.9: Diferencias relativas entre las  $k_i$ s y la magnitud del polo  $|K|$  (continuación).

En la tabla (3.10) fueron separados los casos dependiendo qué función de dispersión tiene su máximo más cercano a  $\kappa_n$ . Se observa que en un mismo caso, diferentes funciones son más cercanas a  $\kappa_n$ .

$k_i$	Número del caso
$k_l$	1-3, 5-17, 19-23, 25-27, 29-31
$k_\sigma$	4
$k_\tau$	18, 24, 28, 32
$k_P$	—

TABLA 3.10: Clasificación de la ubicación de los máximos.

El parámetro de frontera  $B(k)$ , es evaluado en  $k = 0$  y en cada  $k_l$  para todos los casos. La tabla (3.11) contiene esa información.

Finalmente, es posible corroborar que las funciones están correctas si se observa su comportamiento en  $k = 0$  porque se espera que este límite, los valores dados por las gráficas coincidan con los valores analíticos. En el Apéndice A se muestran las expresiones para este caso. Se observa que, efectivamente, las funciones son diferentes dependiendo del valor de  $\delta_0$ . La tabla (3.12) muestra los valores encontrado para  $l(0)$  en las gráficas y analíticamente.

Caso	$B_0$	$B_1$	$B_2$	$B_3$	$B_4$
1	4.51438	0.12091	0.11648	0.10244	-0.0767
2	0.29741	0.13580	0.11743	0.10634	0.00476
3	0.17509	0.15427	0.11746	0.10645	0.00655
4	2.00377	0.50133	0.43796	0.20578	
5	0.72876	0.58563	0.4297	-0.01489	
6	2.33083	0.49826	0.44448	0.26299	
7	0.78044	0.56716	0.41374	-0.373	
8	0.65402	0.62106	0.45668	0.36427	-0.94944
9	0.80948	0.57873	0.45857	0.37329	-1.20559
10	-1.66688	0.44607	0.19952		
11	-0.52484	0.45515	0.35073	-2.24858	
12	$\infty$	0.43404	-0.88228		
13	176.48775	0.45066	0.20137		
14	-174.20999	0.44477	0.06531		
15	0	0.11800	0.10915	0.05244	
16	-0.32430	0.11644	0.09978	-0.62021	

TABLA 3.11: Parámetros de frontera evaluados en  $k = 0$  y en las resonancias  $k_l$ .

Caso	L	$V_2$	$\delta_0[\pi/2]$	$\tan \delta_0$	$l(0)$
1	4	20	16.60535	1.40098	0.4432
2	4	20.9	16.97074	21.73882	6.7278
3	4	20.93	16.98278	36.95176	11.4188
4	1	25.3	4.82520	3.54999	0.9981
5	1	53	6.95501	14.12769	2.7442
6	1	52	6.85695	4.37529	0.8580
7	1	26	4.93137	9.23976	2.5626
8	1	54	6.95999	15.88996	3.0580
9	1	90.5	8.96174	16.62018	2.4707
10	1	138	11.06366	-9.96664	-1.1999
11	1	55	7.03183	-19.98332	-3.8108
12	1	38	6	0	0
13	1	39	6.03183	0.05004	0.0113
14	1	38	5.96817	-0.05004	-0.0115
15	4	21	17	$\infty$	4.1528
16	4	21	17.03183	-19.98332	-6.1672

TABLA 3.12: Valores de  $\delta_0$  y  $l(k = 0)$  para todos los casos.



## Capítulo 4

# Conclusiones

Interesados en obtener la relación entre los polos y los máximos locales de diferentes funciones de dispersión, calculamos la sección transversal, tiempo de demora, probabilidad de atrapamiento y distancia transversal efectiva para valores representativos de los parámetros del sistema pozo-barrera.

Demostramos que, en las configuraciones donde las resonancias no son angostas, los máximos de diferentes funciones de dispersión se separan entre sí. Obtuvimos 3 diferentes patrones, dependiendo si se trataba de la primera resonancia, la última o las intermedias. Por ejemplo, si el sistema presenta 10 resonancias menores a la altura de la barrera, hay 8 intermedias. Estas 8 obedecen el mismo patrón: la función de dispersión cuyo máximo local sucede a valores de  $k$  más cercano al valor de la parte real del polo en el espacio complejo es  $l(k)$ . Ordenando la ubicación de los máximos se ve que en todos los casos intermedios, el orden de aparición de las resonancias es el mismo. Esto es,  $k_\tau < k_l \approx \kappa_n < k_\sigma < k_P$ , donde  $\kappa_n$ . Por otro lado, sobre la cercanía de los máximos de las diferentes funciones a la parte real del polo en el espacio complejo, notamos que en todos los casos de resonancias intermedias,  $l(k)$  es la función que señala con más precisión el valor de  $\kappa_n$ . Para la última resonancia, este patrón no se cumple. Existen casos donde sí sucede que los máximos de  $l(k)$  son los más cercanos, sin embargo, están otros donde se observa que las funciones  $\tau(k)$  y  $\sigma(k)$  son más próximas a  $\kappa_n$ . Respecto al orden, sigue el mismo que el de los casos intermedios. Primero está el máximo de  $\tau(k)$  y al final el de  $P(k)$ . Las demás funciones tienen sus máximos dentro de ese intervalo sin ningún orden particular.

Finalmente, para la primera resonancia, suceden dos cosas interesantes. Primero, al igual que los casos intermedios,  $l(k)$  tiene su máximo más cercano a  $\kappa_n$  y el orden de aparición es el mismo. En el límite cuando  $k \rightarrow 0$ , las funciones de resonancia pierden simetría respecto a su máximo y los polos de S se dividen en dos tipos. Recordemos que el polo de S en el espacio K tiene la forma  $k = \kappa_n + i\gamma$ . Algunos estudios [18, 19] sólo consideran

el caso donde  $\gamma < \kappa$ , sin embargo, en nuestras primeras resonancias, hay configuraciones donde  $\gamma > \kappa$ . Estos polos se encuentran por debajo de la bisectriz del cuarto cuadrante del espacio complejo. En la tabla (3.2), se ven que los casos 3, 5, 7, 8 y 9 no pertenecen a los casos considerados en otros estudios, llamemos anómalos a esos casos. En el espacio de energía, estos polos tienen su parte real negativa ya que

$$E = \frac{K^2}{2} = \frac{\kappa_n^2 - \gamma_n^2}{2} - i\kappa_n\gamma = E_{real} - iE_{imag}$$

y por lo tanto  $E_{real}$  es negativa. Mukhamedzhanov [20], llama a estos casos como resonancias amplias subumbral. Si se graficaran las funciones de dispersión como función de  $E$ , la energía del proyectil, la resonancia no se manifiesta para  $E \geq 0$ . Esta inconveniencia no ocurre si las funciones de dispersión se grafican en función del vector de onda  $k$ .

Al analizar el comportamiento de las funciones de dispersión cuando  $k \rightarrow 0$ , se llega a una división de casos;

- $\delta_0 = (2n + 1)\frac{\pi}{2}$
- $\delta_0 = n\pi$
- $n\pi < \delta_0 < (2n + 1)\frac{\pi}{2}$

donde  $n = 1, 2, 3, \dots$ . Las ecuaciones (2.5) y (2.11) permiten escribir el parámetro de frontera en términos de  $\delta$  de la forma

$$B(k) = q(k) \cot \delta(k)$$

por lo que, para cada caso, el parámetro de frontera  $B(0) \equiv B_0$  tiene los siguientes valores

- $B_0 = 0$
- $B_0 \rightarrow \infty$
- $-\infty < B_0 < 0$  y  $0 < B_0 < \infty$

Los dos primeros valores representan las condiciones de frontera de Neumann y Dirichlet, respectivamente. Esto se puede ver directamente de la definición de  $B$  en la ecuación (2.5). El tercer caso trata con un tipo de condiciones de frontera más generales, llamadas condición de frontera de Robin [21, 22]. Por lo tanto, el perfil va a depender del parámetro de frontera de la función de onda de dispersión.

Si bien la sección transversal ha sido muy útil para estudiar resonancias delgadas, con los ejemplos que fueron analizados se observa que  $l(k)$  es la que mejor señala la posición del polo en el espacio  $k$ , principalmente para resonancias no agudas. De aquí la propuesta de que la trayectoria efectiva sea la que se utilice para caracterizar resonancias anchas en lugar de la sección transversal,  $\sigma(k)$ . Esto puede ser una consecuencia de la definición de  $l(k)$  como una derivada de la fase respecto a  $k$ . Esto es, como las resonancias están relacionadas a los cambios de la fase, el máximo de  $l(k)$  nos brinda el valor de  $k$  en el cual la fase cambia más rápido.

Para los casos anómalos, vimos que los polos sí existen y las funciones de dispersión pueden detectar las resonancias como función de  $k$ . En espacio de energía, las gráficas de las funciones no manifiestan resonancias ya que la energía del proyectil es igual o mayor a cero. De esta forma, estos polos no presentan ningún conflicto en su interpretación, lo único que nos dicen es que la variable correcta es el vector de onda  $k$  y no la energía cuando esta es cercana a cero.

Por último, hacemos la aclaración que no nos fue posible abordar el caso de dos canales ya que, durante el proceso, surgieron otras problemas interesantes a resolver como la cercanía de los máximos locales de las funciones de dispersión con otras cantidades a  $\kappa_n$  y su comportamiento. Pensamos abordar este caso en trabajos futuros.





# Referencias

- [1] RG Newton. *Scattering theory of waves and particles*. Springer Science & Business Media, 2013.
- [2] AR Böhm. *Quantum mechanics: foundations and applications*. Springer Science & Business Media, 1993.
- [3] JR Taylor. *Scattering theory: the quantum theory of nonrelativistic collisions*. Courier Corporation, 2006.
- [4] RJ Eden. The theory of the scattering matrix for the interactions of fundamental particles, 1968.
- [5] FC Barker. Comment on “energies and widths of low-lying levels in  $^{11}\text{Be}$  and  $^{11}\text{n}$ ”. *Physical Review C*, 53(3):1449, 1996.
- [6] CAA de Carvalho and HM Nussenzveig. Time delay. *Physics Reports*, 364(2): 83–174, 2002.
- [7] E Hecht. *Optics*. Pearson Education India, 2012.
- [8] EP Wigner. Lower limit for the energy derivative of the scattering phase shift. *Physical Review*, 98(1):145, 1955.
- [9] L Eisenbud. *The formal properties of nuclear collisions*. Princeton University, 1948.
- [10] ML Goldberger and KM Watson. Lifetime and decay of unstable particles in s-matrix theory. *Physical Review*, 136(5B):B1472, 1964.
- [11] GA Luna-Acosta, AA Fernández-Marín, JA Méndez-Bermúdez, and Charles Poli. Cross section versus time delay and trapping probability. *Physics Letters A*, 380(33):2494–2500, 2016.
- [12] JJ Sakurai and ED Commins. Modern quantum mechanics, revised edition, 1995.
- [13] FC Barker. The first excited state of  $^9\text{Be}$ . *Australian Journal of Physics*, 40(3): 307–318, 1987.

- 
- [14] R Sherr and G Bertsch. Coulomb energy systematics and the missing  $j = \pi(1/2) +$  state in b 9. *Physical Review C*, 32(6):1809, 1985.
- [15] M Fox and R Ispasoiu. Quantum wells, superlattices, and band-gap engineering. *Springer Handbook of Electronic and Photonic Materials*, pages 1–1, 2017.
- [16] P Harrison and A Valavanis. *Quantum wells, wires and dots: theoretical and computational physics of semiconductor nanostructures*. John Wiley & Sons, 2016.
- [17] JM Lourtioz, H Benisty, V Berger, JM Gerard, D Maystre, and A Tchebnokov. Photonic crystals. *Towards Nanoscale Photonic Devices*, 2005.
- [18] HM Nussenzveig. The poles of the s-matrix of a rectangular potential well of barrier. *Nuclear Physics*, 11:499–521, 1959.
- [19] W Schützer and J Tiomno. On the connection of the scattering and derivative matrices with causality. *Physical Review*, 83(2):249, 1951.
- [20] AM Mukhamedzhanov, BF Irgaziev, VZ Goldberg, Yu V Orlov, and I Qazi. Bound, virtual, and resonance s-matrix poles from the schrödinger equation. *Physical Review C*, 81(5):054314, 2010.
- [21] L Lanzani and Z Shen. On the robin boundary condition for laplace’s equation in lipschitz domains. *Communications in Partial Differential Equations*, 29, 2005.
- [22] K Gustafson and T Abe. The third boundary condition—was it robin’s? *The Mathematical Intelligencer*, 20:63–71, 1998.

## Apéndice A

# Caso límite de las funciones de dispersión

Funciones de dispersión cuando  $k \rightarrow 0$

A partir de la ecuación (2.9) y (2.3), se puede ver qué sucede con  $\gamma$  cuando  $k \rightarrow 0$  ( $\gamma_0$ ).

$$\gamma_0 = \tan^{-1} \left( \sqrt{\frac{V_2}{V_3}} \right) - \sqrt{2V_2}b$$

En el caso de  $\delta(k=0) \equiv \delta_0$  se tiene algo similar a partir de la ecuación (2.10)

$$\delta_0 = \sqrt{2V_2}L + \tan^{-1} \left( \sqrt{\frac{V_2}{V_3}} \right) \quad (\text{A.1})$$

Para  $\phi$  y  $\theta$ , revisar el límite cuando  $k=0$  es sencillo a partir de (2.6), (2.12) y (A.1)

$$\phi(k=0) \equiv \phi_0 = 0 \quad (\text{A.2})$$

$$\theta(k=0) \equiv \theta_0 = 0 \quad (\text{A.3})$$

Sin embargo, es importante notar que esto solo es si  $\delta_0 \neq \pi/2$ . El caso para  $\delta_0 = \pi/2$  presenta una indeterminación ya que, de la ecuación (2.11), se puede ver que cuando  $k \rightarrow 0$  y  $\delta_0 = \pi/2$ , entonces  $\tan \phi = (0)(\infty)$ . Para resolver esto se desarrolla en series para  $k$  pequeño

$$\delta(k) = \delta(0) + \delta'(0)k + \frac{\delta''(0)}{2}k^2 + O(k^3)$$

donde

$$\delta'(k) = \frac{k}{q}(L + \kappa^{-1})$$

$$\delta''(k) = \frac{1}{q} \frac{2V_2}{q^2} (L + \kappa^{-1}) + \frac{k^2}{q\kappa^3}$$

por lo que  $\delta'(0) = 0$  y

$$\delta''(0) = \frac{1}{\sqrt{2V_2}} \left( L + \frac{1}{\sqrt{2V_3}} \right)$$

Por lo tanto

$$\tan \phi \approx \frac{k}{q} \tan \left( \delta(0) + \frac{\delta''(0)}{2} k^2 \right). \quad (\text{A.4})$$

Sustituyendo  $\delta(0) = \pi/2$  en (A.4)

$$\tan \phi \approx -\frac{k}{q} \cot \left( \frac{\delta''(0)}{2} k^2 \right) = -\frac{k}{q} \frac{1}{\tan \left( \frac{\delta''(0)}{2} k^2 \right)}.$$

Como  $k$  es pequeño, podemos hacer  $\tan \left( \frac{\delta''(0)}{2} k^2 \right) \approx \frac{\delta''(0)}{2} k^2$

$$\tan \phi \approx -\frac{2}{kq\delta''(0)}.$$

Consecuentemente,  $\tan \phi \rightarrow -\infty$  si  $k \rightarrow 0$  y, por lo tanto,  $\phi \rightarrow -\pi/2$ . Por lo que tenemos dos casos diferentes

$$\phi(k \rightarrow 0) \rightarrow \begin{cases} 0 & \text{si } \delta_0 \neq \pi/2 \pmod{\pi} \\ -\pi/2 & \text{si } \delta_0 = \pi/2 \pmod{\pi} \end{cases} \quad (\text{A.5})$$

Para cercanías a  $k = 0$  se analizan ambos casos por separado. Expandiendo la expresión (A.4) alrededor de  $k = 0$  y tomando  $\tan \phi \approx \phi$  se obtiene que para  $\delta_0 \neq \pi/2$

$$\phi \approx \frac{k}{q} \tan \delta_0 + \frac{k^3}{q} \frac{\delta''(0)}{2} \sec^2 \delta_0.$$

Para el caso  $\delta_0 = \pi/2$  se parte de la expresión

$$\tan \phi \approx -\frac{2}{kq\delta''(0)}.$$

la cual se reacomoda como

$$\phi \approx \cot^{-1} \left( -\frac{q_0 k}{2} \delta''(0) \right).$$

Expandiendo alrededor de  $k = 0$

$$\phi \approx -\pi/2 + \frac{q_0}{2} \delta''(0) k - \left( \frac{q_0}{2} \delta''(0) \right)^3 \frac{k^3}{3}$$

Por lo tanto, el comportamiento de  $\phi$  para valores cercanos a  $k = 0$  es

$$\phi(k \approx 0) \approx \begin{cases} \frac{k}{q} \tan \delta_0 + \frac{k^3}{q} \delta''(0) \sec^2 \delta_0 & \text{si } \delta_0 \neq \pi/2 \pmod{\pi} \\ -\pi/2 + \frac{q_0}{2} \delta''(0) k - \left(\frac{q_0}{2} \delta''(0)\right)^3 \frac{k^3}{3} & \text{si } \delta_0 = \pi/2 \pmod{\pi} \end{cases} \quad (\text{A.6})$$

Para la función  $l(k)$  se usan las ecuaciones (2.17) y (A.2)

$$\begin{aligned} l(k \rightarrow 0) \equiv l_0 &= \lim_{k \rightarrow 0} \left( \frac{2V_2}{q^2 k} \sin 2\phi \right) \\ &= \lim_{k \rightarrow 0} \left( \frac{2 \sin \phi \cos \phi}{k} \right) \\ &= 2 \lim_{k \rightarrow 0} \left( \frac{\sin \phi}{k} \right) \end{aligned}$$

De la ecuación (2.11), es posible encontrar las relaciones

$$\begin{aligned} \sin \phi &= \frac{k \tan \delta}{\sqrt{q^2 + k^2 \tan^2 \delta}} \\ \cos \phi &= \frac{q}{\sqrt{q^2 + k^2 \tan^2 \delta}} \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

Sustituyendo la expresión para  $\sin \phi$  de la ecuación (A.7) en el límite

$$\begin{aligned} l_0 &= 2 \lim_{k \rightarrow 0} \left( \frac{\tan \delta}{\sqrt{q^2 + k^2 \tan^2 \delta}} \right) \\ &= 2 \left( \frac{\tan \delta_0}{\sqrt{2V_2}} \right) \end{aligned}$$

si  $\delta_0 \neq \pi/2$ , ya que se tendría un límite del tipo  $0 * \infty$ . Por lo tanto

$$l_0 = \frac{2 \tan \delta_0}{\sqrt{2V_2}} \quad (\text{A.8})$$

Para el caso  $\delta_0 = \pi/2$ , se retoma el problema desde

$$l_0 = \lim_{k \rightarrow 0} \left( \frac{2 \sin \phi \cos \phi}{k} \right)$$

Sustituyendo  $\sin \phi$  y  $\cos \phi$  de la ecuación (A.7)

$$l_0 = 2 \lim_{k \rightarrow 0} \left( \frac{q \tan \delta}{q^2 + k^2 \tan^2 \delta} \right)$$

Dividiendo arriba y abajo entre  $\tan^2 \delta$

$$l_0 = 2 \lim_{k \rightarrow 0} \left( \frac{q \cot \delta}{q^2 \cot^2 \delta + k^2} \right)$$

Se puede ver que, evaluando directamente  $k = 0$ , se llega a una indeterminación del tipo  $0/0$  por lo que, es necesario aplicar la regla de L'Hôpital. Derivando en función de  $k$  ambas partes del cociente y reduciendo términos se tiene que

$$l_0 = 2 \lim_{k \rightarrow 0} \left( \frac{\kappa_3 \cot \delta - q(1 + \kappa_3 L) \csc^2 \delta}{q\kappa_3 \csc^2 \delta - q^2(1 + \kappa_3) \csc \delta \cot \delta} \right)$$

Considerando que  $\kappa_3(k = 0) = \sqrt{2V_3}$ ,  $q(k = 0) = \sqrt{2V_2}$ ,  $\cot(\delta_0 = \pi/2) = 0$  y  $\csc(\delta_0 = \pi/2) = 1$  se llega a

$$l_0 = \frac{\sqrt{2V_2}(1 + \sqrt{2V_3}L)}{2\sqrt{V_2V_3}} \quad \text{si } \delta_0 = \frac{\pi}{2} \quad (\text{A.9})$$

Con la primera relación de la ecuación (A.7) el cálculo para  $\sigma_0 \equiv \sigma(k \rightarrow 0)$  es simple

$$\begin{aligned} \sigma_0 &= \lim_{k \rightarrow 0} \left( \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \theta \right) \\ &= 4\pi \lim_{k \rightarrow 0} \frac{1}{k^2} \left( \frac{k \tan \delta}{\sqrt{q^2 + k^2 \tan^2 \delta}} \right)^2 \\ &= 4\pi \lim_{k \rightarrow 0} \left( \frac{\tan^2 \delta}{q^2 + k^2 \tan^2 \delta} \right) \end{aligned}$$

Y si  $\delta_0 \neq \pi/2$  se encuentra que

$$\sigma_0 = 4\pi \frac{\tan^2 \delta_0}{2V_2} \quad (\text{A.10})$$

Si  $\delta_0 = \pi/2$ , entonces el límite es distinto. Se parte de

$$\sigma = 4\pi \lim_{k \rightarrow 0} \left( \frac{\tan^2 \delta}{q^2 + k^2 \tan^2 \delta} \right)$$

Dividiendo ambas partes del cociente entre  $\tan^2 \delta$

$$\sigma = 4\pi \lim_{k \rightarrow 0} \left( \frac{1}{q^2 \cot^2 \delta + k^2} \right)$$

Se ve que el denominador tiende a cero conforme  $k$  lo hace también, por lo tanto

$$\sigma_0 \rightarrow \infty \quad \text{si } \delta_0 = \frac{\pi}{2} \quad (\text{A.11})$$

El tiempo de demora  $\tau_0 \equiv \tau(k \rightarrow 0)$  se calcula con ayuda de la ecuación (2.19)

$$\begin{aligned}\tau_0 &= \lim_{k \rightarrow 0} \frac{\mu}{\hbar k} [l(k) - 2a] \\ &= \frac{\mu}{\hbar} \left( \lim_{k \rightarrow 0} \frac{1}{k} \right) \left( \lim_{k \rightarrow 0} [l(k) - 2a] \right) \\ &= \frac{\mu}{\hbar} \left( \lim_{k \rightarrow 0} \frac{1}{k} \right) [l_0 - 2a]\end{aligned}$$

El término entre corchetes es finito y el límite entre paréntesis tiende a infinito, por lo tanto

$$\tau_0 \rightarrow \infty \tag{A.12}$$

