



Universidad Autónoma de Querétaro
Facultad de Ingeniería
Maestría en Ingeniería Matemática

ECUACIÓN DE DISPERSIÓN PARA EL OPERADOR DE STURM-LIOUVILLE
MEDIANTE EL MÉTODO DE SERIES DE POTENCIAS DEL PARÁMETRO
ESPECTRAL

TESIS

Que como parte de los requisitos para obtener el grado de
Maestro en Ciencias en Ingeniería Matemática

Presenta:

L.M.A. Elohim Ortiz Caballero

Dirigido por:

Dra. Kira Khmelnytskaya Gerasimova

SINODALES

Dra. Kira Khmelnytskaya Gerasimova
Presidente


Firma

Dr. Herminio Blancarte Suárez
Secretario


Firma

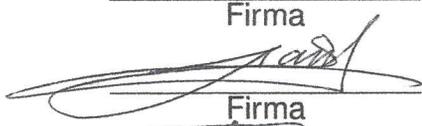
Dr. Roberto Augusto Gómez Loenzo
Vocal


Firma

Dr. Vladislav Kravchenko
Secretario


Firma

Dr. Raúl Castillo Pérez
Secretario


Firma


Dr. Aurelio Domínguez González
Director de la Facultad


Dr. Irineo Torres Pacheco
Director de Investigación y Postgrado

Centro Universitario
Querétaro, Qro.
Noviembre de 2014
México

RESUMEN

Se adapta el método de series de potencias del parámetro espectral (SPPS) para encontrar la ecuación de dispersión en forma explícita asociada al operador de Sturm-Liouville $Hu(x) = (P(x)u'(x))' + Q(x)u(x) = \lambda R(x)u(x)$ en todo el eje real. La ecuación de dispersión resulta ser de la forma $\Phi(\lambda) = 0$, donde Φ es una función analítica dada por su serie de Taylor cuyos coeficientes no dependen del parámetro espectral. Esto permite aproximar los eigenvalores del problema mediante el cálculo de los ceros de un polinomio obtenido al truncar la serie involucrada en la ecuación de dispersión. Una de las ventajas de la técnica es que es aplicable a problemas que admitan eigenvalores complejos a diferencia de métodos disponibles como el de disparo. Una de las aplicaciones de la técnica propuesta se encuentra en el cálculo de los eigenvalores de la ecuación de Schrödinger con masa dependiente de la posición (PDM), la cual se utiliza para modelar el comportamiento de partículas dentro de nanoestructuras presentes en diversos dispositivos electrónicos, tales como diodos láser, transistores y celdas solares. Para probar la eficiencia de la técnica se construyen ejemplos exactamente solubles de la ecuación de Schrödinger con PDM mediante la transformación canónica puntual (PCT), los cuales son isospectrales a modelos clásicos con masa constante. También se considera un ejemplo de la ecuación de Schrödinger exactamente soluble cuyo potencial es del tipo Pöschl-Teller y cuyos eigenvalores son complejos. Se implementa un algoritmo en Matlab que permite calcular los eigenvalores de los ejemplos de prueba mediante la ecuación de dispersión obtenida y los compara con los resultados exactos a través del error absoluto. Los resultados obtenidos son muy precisos y muestran que la técnica propuesta es altamente competitiva y de gran alcance.

Palabras clave: Sturm-Liouville, método SPPS, ecuación de dispersión, ecuación de Schrödinger con PDM.

SUMMARY

The spectral parameter power series method (SPPS) is adapted in order to find the dispersion equation in explicit form associated with the Sturm-Liouville operator $Hu(x) = (P(x)u'(x))' + Q(x)u(x) = \lambda R(x)u(x)$ on the real line. The dispersion equation is of the form $\Phi(\lambda) = 0$, where Φ is an analytic function given by its Taylor series whose coefficients do not depend on the spectral parameter. This allows us to approximate the eigenvalues of the problem by means of computing the zeros of a polynomial obtained by cutting the series involved in the dispersion equation. One of the advantages of this technique is that it can be applied to problems that admit complex eigenvalues unlike other methods available as the shooting method. One of the applications of the proposed technique can be found in the calculation of the eigenvalues of the position dependent mass Schrödinger equation (PDM) which is used to model the behavior of particles inside nanostructures contained in several electronic devices such as laser diodes, transistors and solar cells. To test the efficiency of this technique some exactly solvable examples of the PDM Schrödinger equation are constructed by the point canonical transformation (PCT), these examples are isospectral to the classical models with constant mass. In addition an example with the exactly solvable Pöschl-Teller potential whose eigenvalues are complex is considered. An algorithm in Matlab is implemented that allows us to compute the eigenvalues of the test examples by the dispersion equation obtained and are compared with the exact values through the absolute error. The results obtained are very accurate and show that the proposed technique is highly competitive and of a great scope.

Key words: Sturm-Liouville, SPPS method, dispersion equation, PDM Schrödinger equation.

AGRADECIMIENTOS

A mis padres por el apoyo que me brindaron en todo momento.

A mi aserora, la Dra. Kira por sus valiosas enseñanzas, su paciencia, su tiempo, sus comentarios y sugerencias que fueron cruciales en la realización de esta tesis.

Al Dr. Vladislav Kravchenko, por su ayuda que contribuyó a la creación de esta tesis. A mis sinodales, el Dr. Herminio, el Dr. Michael, el Dr. Raúl y el Dr. Roberto por sus valiosas sugerencias para mejorar esta tesis.

A CONACYT, por el apoyo que me brindó durante el transcurso de la maestría.

ÍNDICE GENERAL

Resumen	I
Summary	III
Agradecimientos	V
Índice general	VIII
1. Introducción	1
2. Estado del Arte	7
2.1. La ecuación de Schrödinger unidimensional en algunos modelos cuánticos . . .	7
2.1.1. Modelo atómico de Bohr	8
2.1.2. Partícula libre en el vacío	9
2.1.3. Partícula en nanoestructuras	10
2.1.4. Confinamiento cuántico de una partícula en una dimensión	14
2.1.5. Confinamiento de una partícula en dos dimensiones	17
2.1.6. Confinamiento de una partícula en tres dimensiones	20
2.2. Métodos disponibles para la solución de la ecuación de Schrödinger con PDM	22
2.2.1. Técnicas exactas	22
2.2.2. Técnicas numéricas	23
3. Metodología	25
3.1. Método SPPS	25
3.2. Algoritmo para la obtención de la ecuación de dispersión	26
3.3. Adaptación del método SPPS para la solución de la ecuación de Schrödinger .	27
3.4. Técnica para la construcción de ejemplos exactamente solubles	28
4. Resultados	33
4.1. Obtención de la ecuación de Dispersión	33
4.1.1. Solución en $(-\infty, -h]$	33

4.1.2.	Solución en $[-h, h]$	33
4.1.3.	Solución en $[h, \infty)$	36
4.2.	Derivación de ejemplos exactamente solubles	39
4.2.1.	Ecuación de Sturm-Liouville con coeficientes constantes	39
4.2.2.	Potencial Pöschl-Teller modificado con PDM	42
4.2.3.	Potencial Scarf II hiperbólico	43
4.3.	Cálculo de eigenvalores para la ecuación de Schrödinger con masa depen- diente de la posición	44
4.3.1.	Implementación numérica	45
4.3.2.	Pozo cuántico rectangular	46
4.3.3.	Potencial Pöschl-Teller modificado con masa constante	47
4.3.4.	Masa efectiva variable	50
4.3.5.	Potencial Pöschl-Teller modificado	58
4.3.6.	Potencial scarf II tipo Hiperbólico	61
4.3.7.	Potencial complejo	65
5.	Conclusiones	69
A.	Código fuente	71

ÍNDICE DE CUADROS

4.1. Eigenvalor para un pozo rectangular.	47
4.2. Eigenvalores para el potencial Pöschl-Teller modificado con masa constante. <i>Cputime</i> = 72.95s, <i>N</i> = 150, <i>NoPts</i> = 40000, <i>h</i> = 200.	49
4.3. Eigenvalores para el potencial Pöschl-Teller modificado con masa constante. <i>Cputime</i> =72.75s, <i>N</i> = 150, <i>NoPts</i> = 40000, <i>h</i> = 200.	49
4.4. Eigenvalores para el potencial Pöschl-Teller modificado con masa constante. <i>Cputime</i> =79.85s, <i>N</i> = 170, <i>NoPts</i> = 40000, <i>h</i> = 220.	49
4.5. Eigenvalores para el potencial Pöschl-Teller modificado con masa constante. <i>Cputime</i> =478.82s, <i>N</i> = 200, <i>NoPts</i> = 100000, <i>h</i> = 250.	50
4.6. Eigenvalores para pozo cuántico rectangular de amplitud 20 Å. <i>CPUtime</i> = 12.02s, <i>N</i> = 120, <i>NoPts</i> = 20000, <i>h</i> = 10.	52
4.7. Eigenvalores para pozo cuántico rectangular de amplitud 40 Å. <i>CPUtime</i> = 11.92s, <i>N</i> = 120, <i>NoPts</i> = 20000, <i>h</i> = 20.	52
4.8. Eigenvalores para pozo cuántico rectangular de amplitud 60 Å. <i>CPUtime</i> = 11.85s, <i>N</i> = 120, <i>NoPts</i> = 20000, <i>h</i> = 30.	52
4.9. Eigenvalores para pozo cuántico rectangular de amplitud 80 Å. <i>CPUtime</i> = 495.99s, <i>N</i> = 120, <i>NoPts</i> = 20000, <i>h</i> = 40.	53
4.10. Eigenvalores para pozo cuántico rectangular de amplitud 100 Å. <i>CPUtime</i> = 11.84s, <i>N</i> = 120, <i>NoPts</i> = 20000, <i>h</i> = 50.	53
4.11. Eigenvalores para pozo cuántico rectangular de amplitud 120 Å. <i>CPUtime</i> = 23.85s, <i>N</i> = 140, <i>NoPts</i> = 30000, <i>h</i> = 60.	53
4.12. Eigenvalores para pozo cuántico rectangular de amplitud 160 Å. <i>CPUtime</i> = 38.09s, <i>N</i> = 150, <i>NoPts</i> = 40000, <i>h</i> = 80.	53
4.13. Eigenvalores para pozo cuántico rectangular de amplitud 200 Å. <i>CPUtime</i> = 38.08s, <i>N</i> = 150, <i>NoPts</i> = 40000, <i>h</i> = 100.	54
4.14. Eigenvalores para un pozo cuántico rectangular de amplitud 20 Å. <i>CPUtime</i> = 15.47s, <i>N</i> = 150, <i>NoPts</i> = 20000, <i>h</i> = 10.	54
4.15. Eigenvalores para un pozo cuántico rectangular de amplitud 40 Å. <i>CPUtime</i> = 16.78s, <i>N</i> = 150, <i>NoPts</i> = 20000, <i>h</i> = 20.	55

4.16. Eigenvalores para un pozo cuántico rectangular de amplitud 60 \AA . <i>CPUtime</i> = 21.55s, $N = 150$, $NoPts = 20000$, $h = 30$	55
4.17. Eigenvalores para un pozo cuántico rectangular de amplitud 80 \AA . <i>CPUtime</i> = 19.45s, $N = 150$, $NoPts = 20000$, $h = 40$	55
4.18. Eigenvalores para un pozo cuántico rectangular de amplitud 100 \AA . <i>CPUtime</i> = 20.65s, $N = 150$, $NoPts = 20000$, $h = 50$	56
4.19. Eigenvalores para un pozo cuántico rectangular de amplitud 120 \AA . <i>CPUtime</i> = 27.42s, $N = 150$, $NoPts = 20000$, $h = 60$	56
4.20. Eigenvalores para un pozo cuántico rectangular de amplitud 160 \AA . <i>CPUtime</i> = 37.98s, $N = 150$, $NoPts = 40000$, $h = 80$	56
4.21. Eigenvalores para un pozo cuántico rectangular de amplitud 200 \AA . <i>CPUtime</i> = 42.72s, $N = 200$, $NoPts = 40000$, $h = 100$	57
4.22. Eigenvalores para un pozo cuántico rectangular de altura 225meV y amplitud 200 \AA . <i>Cputime</i> = 267.177492, $N = 120$, $Npts = 120000$, $h = 100$	57
4.23. Eigenvalores para el potencial Pöschl-Teller modificado con masa variable utilizando la rutina <i>fnint</i> para la integración de las potencias formales.	60
4.24. Eigenvalores para el potencial Pöschl-Teller modificado con masa variable utilizando el método de integración Newton-Cotes de 6 puntos.	61
4.25. Eigenvalores para el potencial Scarf II hiperbólico con masa variable utili- zando la rutina <i>fnint</i> para la integración. <i>Cputime</i> =2145.36s	64
4.26. Eigenvalores para el potencial Scarf II hiperbólico con masa variable median- te la fórmula de integración de Newton-Cotes de 6 puntos	64
4.27. Eigenvalores para el potencial complejo Pöschl-Teller con masa constante para diversos valores de h , utilizando el método de integración Newton-Cotes de 6 puntos.	67

ÍNDICE DE FIGURAS

2.1. (a) Red de Bravais cúbica, (b) Celda unitaria para el silicio y el germanio.	11
2.2. Esquema de los potenciales del cristal.	11
2.3. Diagrama de bandas para un semiconductor	12
2.4. Dos capas de semiconductores distintos (AlAs y GaAs) intercaladas formando una heteroestructura.	13
2.5. Potenciales unidimensionales para la banda de conducción y de valencia para una pozo cuántico simple.	14
2.6. Partícula confinada en un potencial unidimensional con movimiento en el plano xy	15
2.7. Subbandas de energía para una partícula confinada a un potencial unidimensional y con movimiento libre en el plano xy	17
2.8. Fabricación de un hilo cuántico (b) y el esquema del confinamiento de una partícula en dos dimensiones permitiéndola moverse en una sola dirección (c).	18
2.9. Sección transversal de un hilo cuántico rectangular con barreras finitas (a) y aproximación del potencial (b).	19
2.10. Punto cuántico (izquierda) y partícula confinada en una caja donde todos los grados de libertad son removidos (derecha).	21
2.11. Esquema de un punto cuántico esférico	21
4.1. Gráficas del potencial Pöschl-Teller modificado con masa constante para los valores del parámetro $\beta = 2, 5, 10$	48
4.2. Potencial asociado a un pozo cuántico rectangular	51
4.3. Comparación del coeficiente $P(x)$ y el exacto $-\frac{\hbar^2}{2m(x)}$ para diversos valores de h	59
4.4. Comparación del coeficiente $Q(x)$ y el exacto $V(x)$ para diversos valores de h	59
4.5. Comparación del coeficiente $Q(x)$ y el exacto $V(x)$ para los valores de $h = 9$ y $h = 3$	60
4.6. Potencial Scarf II tipo hiperbólico	62
4.7. Coeficiente $-\frac{\hbar^2}{2m(x)}$	63

4.8. Comportamiento asintótico de $\text{Re}(V(x))$ (4.48). 65

I. INTRODUCCIÓN

Se considera el problema de eigenvalores del operador de Sturm-Liouville

$$Hu(x) = (P(x)u'(x))' + Q(x)u(x) = \lambda R(x)u(x), \quad x \in \mathbb{R} \quad (1.1)$$

donde

$$P(x) = \begin{cases} p_1 & x < -h \\ p(x) & -h \leq x \leq h, \\ p_2 & x > h \end{cases}, \quad Q(x) = \begin{cases} \alpha_1 & x < -h \\ q(x) & -h \leq x \leq h, \\ \alpha_2 & x > h \end{cases}, \quad (1.2)$$

$$R(x) = \begin{cases} r_1 & x < -h \\ r(x) & -h \leq x \leq h \\ r_2 & x > h \end{cases}$$

y p, q, r son funciones continuas en $(-h, h)$, y $\alpha_1, \alpha_2, p_1, p_2, r_1, r_2$ constantes. Se buscan los valores del parámetro espectral $\lambda \in \mathbb{C}$ para los cuales

$$u \in L_2(-\infty, \infty). \quad (1.3)$$

Es importante señalar que en general el problema (1.1),(1.3) no es exactamente soluble, pero cuenta con diversas aplicaciones ya que tiene como caso particular a la ecuación de Schrödinger unidimensional independiente del tiempo con masa dependiente de la posición (PDM, por sus siglas en inglés). Esta ecuación aparece en diversas aplicaciones en las cuales se utiliza para modelar el comportamiento de partículas dentro de nanoestructuras fabricadas con semiconductores.

A continuación se citan algunos trabajos en los que se ha utilizado la ecuación de Schrödinger en distintos contextos.

Por ejemplo, la inversión de la molécula de amoniaco NH_3 ha sido un problema de gran interés en mecánica cuántica. En esta molécula el átomo de nitrógeno está sometido a un potencial con forma de pozo cuántico doble y existe la posibilidad de que éste penetre alguna de las barreras, de manera que es importante calcular los niveles de energía (eigenvalores) y

funciones de onda (eigenfunciones) del átomo de nitrógeno para conocer su comportamiento dentro de la molécula. En (Aquino et al., 1998) se propone una técnica en la que deducen una expresión, que depende de la coordenada de inversión, para la masa reducida de la molécula. Utilizan esta masa en una ecuación de Schrödinger unidimensional con un polinomio de grado par como potencial para calcular los niveles de energía y las funciones de onda correspondientes al átomo de nitrógeno asociado al problema de la inversión de NH_3 .

Por otro lado, un láser de cascada cuántica es un tipo de láser semiconductor que en general emite luz infrarroja de rango medio. En estas estructuras las transiciones de partículas ocurren entre las bandas del mismo tipo (de conducción o de valencia). Al aplicarles cierto campo eléctrico, los electrones confinados en los pozos cambian de nivel de energía y generan fotones, a su vez mediante el efecto túnel pasan a un nuevo pozo con la posibilidad de generar más fotones. Una de las aplicaciones más importantes de estas nanoestructuras es en la detección de contaminantes del aire y en algunos diagnósticos médicos. En esta área Page et al. (2001) proponen un láser de cascada cuántica que se puede operar a temperatura ambiente basado en el semiconductor GaAs. Para lograrlo utilizan una heteroestructura compuesta por GaAs/ $Al_{0.45}Ga_{0.55}As$ ya que permite mejor confinamiento de electrones que otros materiales. Para estudiar el comportamiento de los electrones en estas estructuras al variar la temperatura, mediante una ecuación de Schrödinger unidimensional calculan las funciones de onda y el espectro bajo la influencia de un campo eléctrico, permitiendo determinar la dependencia térmica del láser.

Un nanotubo de carbono es una estructura tubular con diámetro del orden del nanómetro. Estas nanoestructuras se pueden imaginar como láminas de grafito enrolladas. Entre sus aplicaciones más importantes destacan en la fabricación de supercondensadores, transistores, celdas solares y memorias RAM. En este campo Biswas et al. (2005) estudian el movimiento de electrones dentro de estructuras formadas por la unión de dos nanotubos de carbono. Para ello muestran que el comportamiento de los electrones en estas estructuras puede ser modelado por una ecuación unidimensional de Schrödinger con un potencial que representa a un pozo cuántico finito intercalado entre dos barreras que permiten el efecto túnel. Calculan los primeros niveles de energía, coeficientes de transmisión, así como aproximaciones de la masa efectiva para los electrones en cada nanotubo.

Desde el descubrimiento de los pozos cuánticos, éstos se han utilizado en diversos dispositivos debido a las propiedades y ventajas que proporcionan. Una de estas aplicaciones es en celdas solares, en donde el espectro de energía de estas estructuras es de crucial interés así como la absorción fotónica dentro de la banda de conducción. Al respecto Luque et al. (2013) presentan la aplicación del potencial conocido como KPEH para describir y obtener una mejor comprensión de las funciones de onda asociadas a las bandas de pozos cuánticos

y del proceso de absorción fotónica dentro de estas estructuras. En parte de su estudio utilizan una ecuación de Schrödinger unidimensional para representar el comportamiento de los electrones en cada uno de los pozos. Las funciones de onda y los niveles de energía de dicha ecuación les permiten obtener resultados sobre el mecanismo de absorción fotónica bajo iluminación vertical y compararlos con los obtenidos de manera experimental con un prototipo de celda solar basado en pozos cuánticos. Muestran que la absorción en celdas solares basadas en pozos cuánticos es mayor que con otras estructuras.

Otra de las aplicaciones de la ecuación de Schrödinger con PDM incluyen al problema de los muchos cuerpos (Ring and Schuck, 1980), en el estudio de propiedades de estructuras tales como cristales graduados (Geller and Kohn, 1993), clusters de metales (Puente et al., 1994), líquidos cuánticos (Arias de Saavedra et al., 1994) y clusters de helio (Barranco et al., 1997).

Por lo anterior surge la necesidad de desarrollar técnicas para calcular la solución a la ecuación de Schrödinger con PDM así como los eigenvalores asociados a ésta. Diversos métodos se han propuesto para resolverla de manera exacta, ya sea por medio de la transformación canónica puntual (PCT, por sus siglas en inglés) (De et al., 1992; Gang, 2005; Tezcan and Sever, 2007; Aktaş and Sever, 2008), técnicas de álgebra de Lie (Roy, 2005; Kerimov, 2009; Yahiaoui and Bentaiba, 2009), supersimetría (Gönül et al., 2002; Koç and Tütüncüler, 2003; Ganguly and Nieto, 2007), o algunas otras técnicas (Bagchi et al., 2004). Sin embargo en la mayoría de estos métodos la ecuación de Schrödinger con PDM es transformada a una ecuación de Schrödinger con masa constante generando isospectralidad entre ambos problemas. También existen trabajos en los cuales se resuelve de forma exacta el problema con PDM para potenciales específicos sin transformar la ecuación con PDM a una con masa constante, p.ej., (Ganguly et al., 2006). No obstante, las anteriores técnicas presentan limitaciones importantes de manera que muchos problemas de aplicación con PDM no se pueden resolver con alguna de estas técnicas exactas, por tanto se resuelven utilizando algún método numérico (Koç and Sayin, 2010), uno de los más comunes es el método de disparo (Harrison, 2006; Killingbeck, 2011), cuyas limitaciones son bien conocidas. Por ejemplo, el método no es aplicable en los problemas que admiten eigenvalores complejos.

Por esta razón en la presente tesis, en analogía con el artículo (Castillo-Perez et al., 2011) donde se considera $P(x)$ constante y $R(x) \equiv 1$, se extiende el método de series de potencias del parámetro espectral (SPPS, por sus siglas en inglés), introducido en (Kravchenko, 2008, 2009), para obtener la ecuación de dispersión (característica) en forma explícita asociada al problema (1.1),(1.3) en todo el eje real. Para probar la eficiencia de la técnica propuesta se utiliza la ecuación de dispersión para calcular numéricamente los eigenvalores

de algunos ejemplos de prueba exactamente solubles y comparar los resultados con los valores exactos. Una de las ventajas que ofrece esta técnica es la aplicabilidad a problemas que admitan eigenvalores complejos.

Para obtener la ecuación de dispersión primero se estudia el método SPPS, el cuál es una técnica que permite obtener la solución de manera analítica de la ecuación de Sturm-Liouville en forma de series de potencias del parámetro espectral. Debido a la naturaleza del método, éste se ha utilizado para resolver numéricamente diversos problemas de valor inicial, de frontera y espectrales (Kravchenko and Porter, 2010). También se ha generalizado para la solución de problemas de Sturm-Liouville de cuarto orden (Khmelnyskaya et al., 2012) y para una amplia clase de problemas singulares.

Después se adapta el método SPPS al problema (1.1),(1.3). Para ello se divide el eje real en tres subintervalos, $(-\infty, -h]$, $[-h, h]$ y $[h, \infty)$, en el primero y el último los coeficientes de la ecuación son constantes de manera que se obtiene su solución en forma cerrada considerando las condiciones de frontera (1.3). En el intervalo restante se construye con el método SPPS una solución particular u_0 de la ecuación

$$(p(x)u_0'(x))' + q(x)u_0(x) = 0,$$

y ésta se utiliza para calcular la solución de la ecuación no homogénea en términos de series de potencias del parámetro espectral y junto con las soluciones en los otros intervalos se aplican las condiciones de suavidad correspondientes en los puntos $-h$ y h . De aquí se obtiene la ecuación de dispersión requerida, la cual es de la forma $\Phi(\lambda) = 0$, donde Φ es una función analítica dada por su serie de Taylor cuyos coeficientes no dependen del parámetro espectral λ . Esto permite calcular numéricamente los eigenvalores del problema (1.1), (1.3). A saber, se trunca la serie y se calculan los ceros del polinomio resultante siendo estos últimos aproximaciones de los eigenvalores del problema de Sturm-Liouville en todo el eje.

Existe una amplia cantidad de problemas de Schrödinger unidimensionales con PDM que se pueden adaptar (truncar sus coeficientes) para obtener un problema del tipo Sturm-Liouville (1.1), (1.3) cuyas eigenfunciones y eigenvalores son aproximaciones del problema con PDM. Estos problemas aparecen en diversas aplicaciones donde se consideran nanoestructuras fabricadas con semiconductores tales como pozos, puntos e hilos cuánticos. Para comparar los resultados numéricos obtenidos con la ecuación de dispersión primero se construyen ejemplos de prueba exactamente solubles. Para esto se utiliza una técnica conocida como transformación canónica puntual (PCT, por sus siglas en inglés) (Aktaş and Sever, 2008), la cual permite construir una ecuación de Schrödinger con PDM a partir de una ecuación de Schrödinger con masa constante y con la ventaja de que ambas ecuaciones tienen los mismos

eigenvalores. De esta manera se consideran ecuaciones de Schrödinger con masa constante y potenciales bien conocidos por ser exactamente solubles, como el Pöschl-Teller y el Scarf II hiperbólico, y mediante la transformación PCT se construyen las correspondientes ecuaciones de Schrödinger con PDM exactamente solubles.

En cuanto a la experimentación numérica, para cada ejemplo de prueba se calculan los eigenvalores correspondientes mediante la ecuación de dispersión. Para ello se utiliza el software Matlab. Primero es esencial escoger el valor de N que es el número de términos a considerar en la serie de la ecuación de dispersión. En seguida se calculan las potencias formales presentes en la construcción de la solución particular u_0 , las cuales, dado que son integrales iteradas se calculan con algún método de integración (aquí se consideró el método de Newton-Cotes de 6 puntos y en algunos casos la rutina de integración *fnint* de Matlab). Después se calculan las potencias formales $\tilde{X}^{(n)}(x)$, $X^{(n)}(x)$ presentes en los coeficientes de la ecuación de dispersión mediante alguno de los métodos de integración mencionados. Lo anterior permite calcular los coeficientes del polinomio y a continuación con la rutina *roots* (o *fnzeros* para el caso real) se calculan las raíces del polinomio. Se escogen aquellas que realmente son aproximaciones de los eigenvalores del problema. Finalmente se comparan los valores obtenidos con los valores exactos mediante el error absoluto, en algunos casos también se presentan los resultados obtenidos por otros autores.

En resumen, siguiendo la metodología descrita anteriormente, en esta tesis a partir del método SPPS se obtuvo la ecuación de dispersión asociada al problema de Sturm-Liouville en forma analítica en términos de series de potencias del parámetro espectral. La naturaleza de esta ecuación resultó ser adecuada en el cálculo numérico de eigenvalores del operador de Sturm-Liouville. Esta metodología representa una nueva técnica en la aproximación de eigenvalores para el operador de Sturm-Liouville en todo el eje. Para probar su eficiencia se aplicó a diversos modelos clásicos de Schrödinger exactamente solubles con masa variable, los cuales se utilizan en diversas aplicaciones de la teoría de semiconductores. Los resultados obtenidos fueron muy precisos e incluso mejores que los de otros autores. El alcance de la técnica es amplio, ya que es totalmente aplicable a problemas en los que los eigenvalores son complejos. Por esta razón se aplicó la técnica a un problema de Schrödinger con potencial complejo y se hizo un análisis sobre la aproximación de los eigenvalores obtenidos y la relación con la longitud del intervalo de truncamiento.

El presente trabajo está organizado de la siguiente manera. En el capítulo 2 se da una introducción a la teoría de semiconductores y el papel de la ecuación de Schrödinger en la modelación del comportamiento de una partícula dentro de estructuras tales como pozos, hilos y puntos cuánticos. También en este capítulo se describen de manera breve las técnicas exactas y numéricas disponibles para la solución de la ecuación de Schrödinger con PDM.

En el capítulo 3, se presenta el método SPPS así como el algoritmo utilizado para la obtención de la ecuación de dispersión. En seguida, se describe detalladamente la adaptación del método SPPS para problemas de Schrödinger con PDM. Finalmente se explica y se deduce la transformación PCT.

En el capítulo 4 se aplica el algoritmo de la sección 3.2 para obtener la ecuación de dispersión. En 4.2.1 se deriva la ecuación de dispersión para un problema de Sturm-Liouville con coeficientes constantes. En 4.2.2 y 4.2.3 se aplica la transformación PCT para obtener dos ecuaciones de Schrödinger con PDM exactamente solubles a partir de los modelos clásicos Pöschl-Teller y Scarf II hiperbólico con masa constante. Finalmente en la sección 4.3 se presentan los resultados obtenidos con los programas en Matlab para el cálculo de eigenvalores mediante la ecuación de dispersión derivada en la sección 4.1 para los diversos ejemplos de prueba. En el capítulo 5 se presentan las conclusiones y las posibles perspectivas. En el apéndice A se muestra el código fuente para los diferentes ejemplos considerados en la tesis.

Los resultados obtenidos en esta tesis fueron publicados en los siguientes artículos: en (Khmelnyskaya et al., 2013) se presentó la ecuación de dispersión y se calcularon los eigenvalores de algunos potenciales reales con masa variable, en (Ortiz-Caballero and Khmelnyskaya, 2013) se consideró la ecuación de Hill y se presentaron algunas de sus aplicaciones en la ingeniería y otros campos de la ciencia, finalmente en (Ortiz-Caballero, 2014) se presentó una breve descripción sobre el comportamiento de electrones dentro de nanoestructuras formadas por semiconductores y su relación con la ecuación de Schrödinger unidimensional con masa variable.

II. ESTADO DEL ARTE

II.1. La ecuación de Schrödinger unidimensional en algunos modelos cuánticos

La mecánica cuántica es una rama de la física que se encarga de estudiar el comportamiento de la materia y la radiación a escalas atómica y subatómica. Por lo tanto le interesa describir y explicar las propiedades de las moléculas, átomos y sus componentes (electrones, protones y neutrones), así como las interacciones entre estos y los campos electromagnéticos.

Los inicios de la mecánica cuántica comenzaron como una consecuencia de algunas dificultades que presentó la física clásica al intentar explicar las propiedades del átomo, de sus componentes y las interacciones de estas partículas con la materia. El primer modelo cuántico se debe a Max Planck, ya que en 1900 presentó una fórmula para calcular el espectro discreto de la radiación térmica emitida por la superficie de un objeto al incrementar su temperatura. Más tarde en 1905 Albert Einstein extendió la idea de Planck sobre la cuantización de energía al postular que la luz está compuesta por partículas discretas (fotones) en lugar de ondas continuas lo cual fue la base que lo ayudó a explicar el efecto fotoeléctrico. Posteriormente en 1913 Niels Bohr propuso un nuevo modelo del átomo en el cuál cuantizaba las órbitas en las que giran los electrones alrededor del núcleo, por lo que cuando un átomo emite energía, los electrones no se mueven de manera continua si no que saltan de una órbita a otra emitiendo luz en forma de un fotón. Sin embargo este nuevo modelo dejó muchas preguntas sin responder, tales como el por qué las orbitas se debían de cuantizar de esa manera o como calcular de manera precisa los niveles de energía de los electrones. En 1924 el físico francés Louis de Broglie generalizó la idea de Einstein sobre la dualidad luz-fotón, proponiendo que cualquier partícula tiene asociada una onda, de manera que la materia puede ser vista como partículas o bien como ondas. Más tarde se realizaron experimentos que probaron cierta la hipótesis de De Broglie. Basándose en esta hipótesis, el físico austriaco Erwin Schrödinger en 1926 logró describir el comportamiento de una onda utilizando la ecuación que lleva su nombre, la cual es la base de la mecánica cuántica. Esta ecuación describe cómo un sistema físico cambia a través del tiempo. Con esta ecuación Schrödinger calculó los niveles de energía de manera exacta para el átomo de hidrógeno.

Desde entonces la mecánica cuántica ha sido una valiosa disciplina que ha probado ser de gran utilidad incluso en otras áreas como la ingeniería, la química, la física molecular, la física de materia condensada y la física del estado sólido, entre otras. Algunas aplicaciones de la mecánica cuántica están presentes en el láser, los transistores, el microscopio electrónico, semiconductores, celdas solares, etc. (Feynman et al., 2011).

II.1.1 Modelo atómico de Bohr

El modelo atómico de Bohr consiste primero en suponer que las leyes electrodinámicas de Maxwell no funcionan a niveles subatómicos (Pilar, 2013). Además también se considera que en un átomo los electrones se mueven alrededor de su núcleo en órbitas (como los planetas alrededor del sol) sin perder energía debido a la radiación. Ahora considérese un átomo simple, como el del hidrógeno (o cualquier ion con un solo electrón), de manera que solo se estudia el movimiento de un solo protón y de un solo electrón. El átomo de hidrógeno está formado por un protón localizado en el núcleo y un solo electrón que gira alrededor de éste ligado por la atracción mutua de las cargas opuestas entre esta dos partículas. La energía total del átomo de hidrógeno es

$$E = T + V, \quad (2.1)$$

donde E es la energía total, T la energía cinética y V la energía potencial. Por un lado la energía cinética rotacional es

$$T = \frac{\mu v^2}{2},$$

donde μ es la masa reducida del sistema, i.e. $\mu = \frac{m_e}{m_e + m_n}$, siendo m_e la masa del electrón y m_n la masa del núcleo y v la velocidad orbital del electrón. Por otro lado la energía potencial en este sistema se puede calcular con la ley de Coulomb, entonces

$$V = \frac{Ze^2K}{r},$$

donde Z es el número atómico ($Z = 1$, en este caso), e es la carga del electrón, r la distancia entre el electrón y el protón y $K = 1/(4\pi\epsilon_0)$, donde ϵ_0 es la permitividad del vacío. Ahora se aplican dos postulados. El postulado clásico propone que la fuerza electrostática entre el núcleo y el electrón genera una aceleración centrípeta lo que implica que el electrón se mueva en una trayectoria circular. Además la fuerza centrípeta satisface la relación

$$\frac{\mu v^2}{r} = \frac{Ze^2K}{r^2} \quad (2.2)$$

El postulado cuántico establece que el momento angular del sistema se puede cuantizar, es decir,

$$\mu v r = n \hbar, \quad n = 1, 2, \dots \quad (2.3)$$

donde \hbar es la constante reducida de Planck. Resolviendo para v y r a partir de las ecuaciones (2.2), (2.3) y sustituyendo finalmente en (2.1) se tiene que la energía total del sistema es

$$E_n = \frac{Z^2 e^2 K}{2n^2 a_H}, \quad (2.4)$$

donde $a_H = \frac{\hbar^2}{\mu e^2 K}$, es llamado el primer radio de Bohr. El subíndice de E se debe a que cada valor de n implica un valor diferente de la energía, de manera que la energía del átomo de hidrógeno se puede cuantizar. Se ha probado experimentalmente que el modelo de Bohr funciona muy bien para sistemas con un electrón. Sin embargo este modelo es incapaz de proveer información acerca del espectro de sistemas con más de un electrón. Por esta razón la ecuación de Schrödinger resultó ser de gran utilidad al proporcionar dicha información para una gran diversidad de sistemas físicos.

II.1.2 Partícula libre en el vacío

Supóngase ahora se tiene un electrón de momento p y masa m , entonces la relación de De Broglie establece que esta partícula tiene asociada una onda cuya longitud de onda λ cumple (Harrison, 2006)

$$\lambda = \frac{h}{p}, \quad (2.5)$$

donde h es la constante de Planck. Si además el electrón se mueve libremente en el vacío sin la influencia de cualquier campo electromagnético entonces la función que describe su movimiento en el tiempo está dada por

$$\psi = e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)}, \quad (2.6)$$

donde \mathbf{r} es la posición, t es el tiempo, ω es la frecuencia angular y \mathbf{k} es el vector de onda cuyo módulo es $|\mathbf{k}| = (2\pi)/\lambda$. A esta función se le conoce como *función de onda*.

En mecánica clásica, la energía cinética del electrón en el vacío es

$$T = \frac{p^2}{2m},$$

para el caso cuántico es análogo, sólo que se considera al momento ($p = -i\hbar\nabla$) y a la energía cinética como operadores actuando sobre la función de onda, es decir

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi = T\psi,$$

sustituyendo la función de onda (2.6) en la ecuación anterior se obtiene que $T = \frac{\hbar^2|\mathbf{k}|^2}{2m}$. Dado que se está considerando al electrón sin influencias de un potencial ($V = 0$), la energía total E de esta partícula es igual a la energía cinética, $E = \frac{\hbar^2|\mathbf{k}|^2}{2m}$. Por tanto la ecuación anterior se escribe como

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi = E\psi, \quad (2.7)$$

la cuál es conocida como la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo y describe la energía total de un electrón en el vacío sin la influencia de campos electromagnéticos.

II.1.3 Partícula en nanoestructuras

Ahora considérese un electrón que se mueve a lo largo de una capa de un semiconductor. Un semiconductor es un material que puede conducir electricidad según los factores a los que se encuentre sometido tales como temperatura, campos electromagnéticos, presión, etc. Su conductividad eléctrica se considera entre la de un conductor y la de un aislante. Los semiconductores tienen propiedades importantes entre las que destacan: aumentan su conductividad al incrementar su temperatura, conducen corriente eléctrica mejor en algunas direcciones que en otras, sensibilidad a la luz o al calor. Una principal característica de los semiconductores que los hace tan útiles es la posibilidad de modificar sus propiedades para alterar su conductividad eléctrica.

Los semiconductores tienen una estructura cristalina (estructura periódica), sus átomos están distribuidos de tal manera que generan una celda unitaria (patrón) que se repite a lo largo de todo el material formando una red. La mayoría de los semiconductores que se utilizan en la práctica poseen una red formada por cubos con catorce átomos (ver fig. 2.1 (a)), uno en cada vértice y uno en cada cara, conocida como red de Bravais. A este cubo se le agregan átomos (base) en ciertas posiciones y de esta manera se obtiene la celda unitaria que será el patrón que formará a toda la red del material. Por ejemplo los semiconductores más utilizados, que son el silicio (Si) y el germanio (Ge), tienen una celda unitaria equivalente a la del diamante (ver fig. 2.1 (b)). Las uniones entre los átomos indican la existencia de enlaces covalentes entre ellos. Los enlaces covalentes son creados por los electrones de valencia (electrones pertenecientes al último nivel de energía) de los átomos participantes.

Debido a la gran cantidad de átomos y a sus respectivos niveles de energía que forman la red de un semiconductor se genera un potencial bastante complejo, en el sentido en

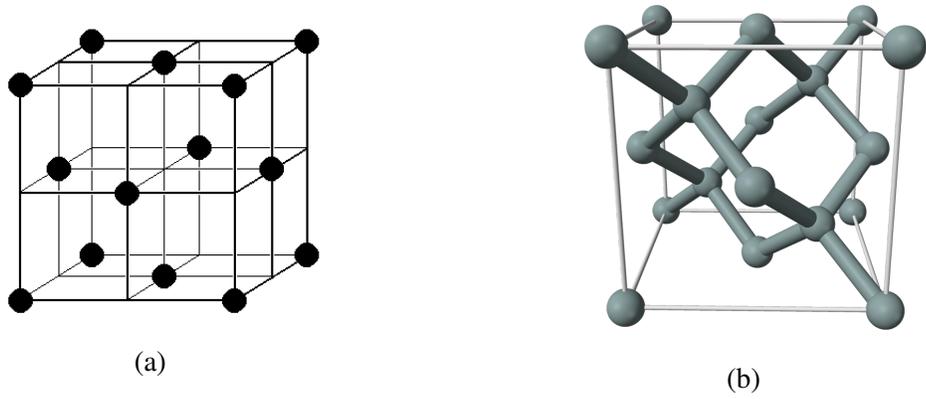


Figura 2.1: (a) Red de Bravais cúbica, (b) Celda unitaria para el silicio y el germanio.

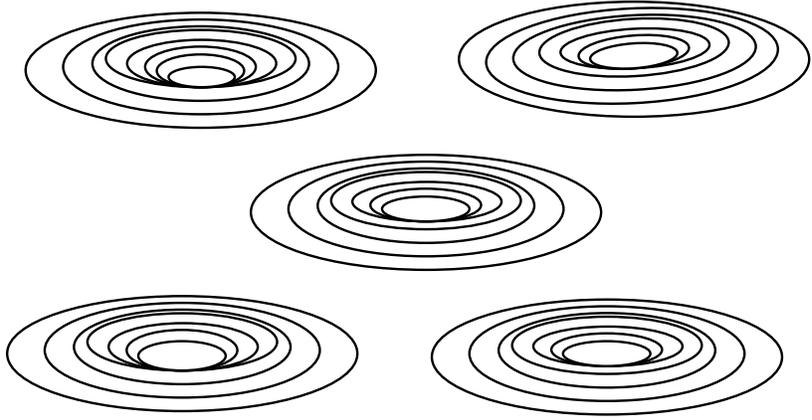


Figura 2.2: Esquema de los potenciales del cristal.

que si se considera un electrón que se desplaza a través del material entonces éste estará sometido a un campo de fuerzas muy variable respecto de la posición en que se encuentre (fig. 2.2). Por esta razón para describir la energía de un electrón se considera el potencial como constante a lo largo de todo el semiconductor. De esta manera la ecuación que describe los estados del electrón en todo el semiconductor viene dada por la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo (2.7). Sin embargo, recuérdese que dicha ecuación describe al electrón en el vacío, pero en este caso la partícula se mueve dentro de un semiconductor, por tanto se introduce un factor corrector para remediar esta diferencia, este parámetro se le llama *masa efectiva* y se denota como m^* . Así la ecuación que describe los estados y niveles de energía de la partícula en una nanoestructura es

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\nabla^2\psi = E\psi. \tag{2.8}$$

A este proceso se le denomina *aproximación de la masa efectiva*. El valor de esta masa ha sido calculado experimentalmente (Landolt-Börnstein, 1987) para distintos tipos de semiconductores. Las unidades en las que se suele expresar es en términos de la masa de un electrón en reposo m_0 . Por ejemplo, el silicio tiene una masa efectiva de $1.08 m_0$, el germanio de $0.56 m_0$ y el arseniuro de Galio (GaAs) de $0.067 m_0$.

Para entender la dinámica de un electrón dentro de un semiconductor hace falta considerar el esquema de bandas que este tipo de materiales presenta. La estructura de bandas de un semiconductor está compuesta por tres bandas: la de valencia, la banda prohibida y la de conducción. La banda de valencia está formada por todos los electrones de valencia que mantienen los enlaces covalentes entre los átomos que constituyen la red. También contiene unas partículas conocidas como huecos de electrón, que representan la ausencia de electrones. La banda prohibida es un rango de energías (energías prohibidas) que los electrones de un semiconductor no pueden adquirir. Por último la banda de conducción contiene a los electrones que provienen de la banda de valencia y que han saltado la banda prohibida ya que que han sido liberados de los enlaces covalentes al someterlos a un cierto campo de energía, dejando a su paso respectivos huecos de electrón en los átomos a los que pertenecían (fig 2.3). Estos electrones son los que contribuyen al flujo eléctrico.

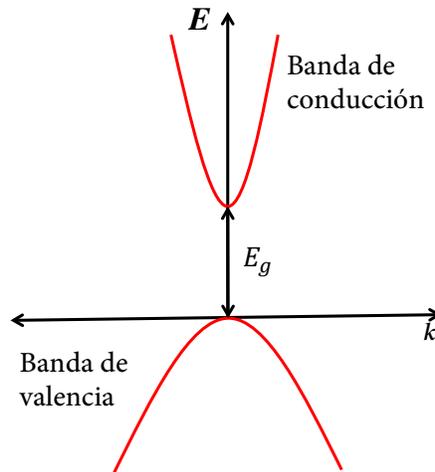


Figura 2.3: Diagrama de bandas para un semiconductor

En un aislante la banda prohibida es de gran tamaño por lo que el flujo eléctrico es nulo, mientras que en un conductor esta banda no existe provocando que las otras dos se traslapen y exista una porción de electrones de valencia libres en el material.

La manipulación del tamaño de la banda prohibida en un semiconductor es de gran interés en las aplicaciones, ya que ésta le brinda la posibilidad de funcionar como un conductor o bien

como un aislante.

Una de las ventajas que proporcionan estos materiales es la posibilidad de fabricar estructuras formadas por distintos semiconductores llamadas *heteroestructuras*, donde la unión de un semiconductor con otro se le conoce como *heterounión*. De esta manera un electrón (o hueco de electrón) dentro de una heteroestructura estará sujeto a distintas energías dependiendo de la capa del material en que se encuentre. Este tipo de variación según la posición se representa por medio de un potencial constante para cada capa de la heteroestructura. Por ejemplo en la figura (2.4) se presenta una heteroestructura muy utilizada (con dos heterouniones) formada por dos capas de semiconductores, el arseniuro de galio (GaAs) y el arseniuro de aluminio (AlAs). La figura (2.5) presenta los potenciales respectivos a la heteroestructura de la figura (2.4), la parte superior representa el potencial en la banda de conducción, mientras que la inferior es el potencial en la banda de valencia, siendo la diferencia en cada material la banda prohibida. Para este tipo de estructuras la aproximación de la masa efectiva es válida en cada porción de distinto material. Por lo tanto, considerando la misma masa efectiva para cada material (aunque ésta puede depender de la posición de la partícula), la ecuación

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \psi(z) + V(z)\psi(z) = E\psi(z) \quad (2.9)$$

describe el movimiento de un electrón (si el potencial corresponde al de la banda de conducción), o de un hueco de electrón (si el potencial corresponde al de la banda de valencia) dentro de una heteroestructura.

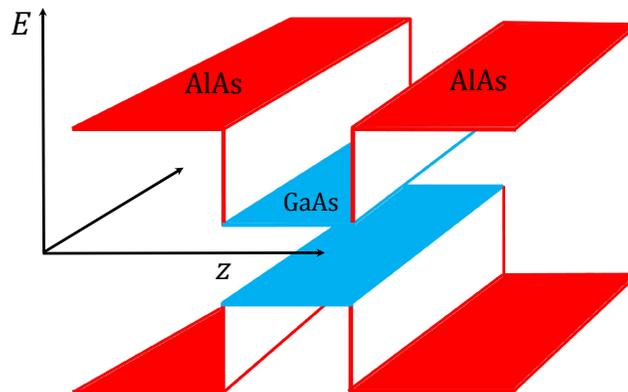


Figura 2.4: Dos capas de semiconductores distintos (AlAs y GaAs) intercaladas formando una heteroestructura.

Un pozo cuántico es una nanoestructura formada al intercalar una capa de un semiconductor (en la fig (2.4) la capa formada por GaAs) suficientemente delgada (del orden de

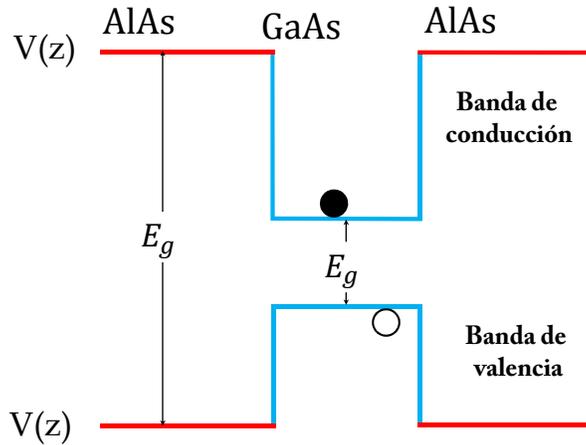


Figura 2.5: Potenciales unidimensionales para la banda de conducción y de valencia para una pozo cuántico simple.

la longitud de onda de la función de onda de la partícula) entre dos barreras de otro semiconductor (en la figura (2.4) la capa formada por AlAs). En un pozo cuántico se producen ciertos fenómenos cuánticos, uno de ellos es el confinamiento cuántico, el cuál consiste en el aislamiento de una partícula (electrón o hueco de electrón según la banda que se considere) en la cavidad formada en el pozo cuántico, donde dicha partícula trata de disminuir su energía permaneciendo con el nivel de energía menor posible en el fondo del pozo.

Existen diversas formas en las que se pueden formar heteroestructuras, algunas con pozos cuánticos múltiples, otras donde se introduce una tercera capa de semiconductor dentro del pozo, o aquellas en donde las bandas prohibidas de los distintos materiales quedan desalineadas, etc.

II.1.4 Confinamiento cuántico de una partícula en una dimensión

Supóngase se tiene una estructura tridimensional formada al alternar dos diferentes semiconductores de tal forma que las capas exteriores están constituidas por el mismo material (por ej. $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$) mientras que la capa interior es muy delgada y la forma el otro semiconductor (por ej. GaAs), ver fig (2.6). Además considérese una partícula confinada en la capa interior de dicha estructura (pozo cuántico). Debido a que la capa de esa sección es muy delgada el movimiento de la partícula en la dirección z es nulo mientras que ésta es libre de moverse en el plano xy . En consecuencia la partícula está influenciada por un potencial solamente en la dirección z de manera que ninguna fuerza influye en la partícula en las direcciones x, y .

Por lo tanto la ecuación de Schrödinger que describe los posibles estados de la par-

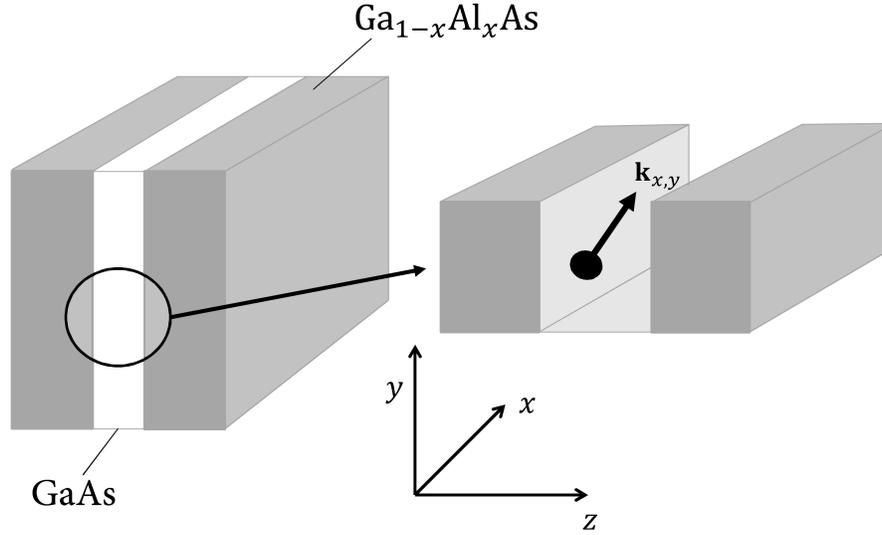


Figura 2.6: Partícula confinada en un potencial unidimensional con movimiento en el plano xy .

tícula en esta estructura es

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi + V(z)\psi = E\psi,$$

suponiendo que la solución se pueda separar como funciones de una sola variable $\psi(x, y, z) = \psi_x(x)\psi_y(y)\psi_z(z)$, la ecuación se reescribe

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi_x}{\partial x^2} \psi_y \psi_z + \frac{\partial^2 \psi_y}{\partial y^2} \psi_x \psi_z + \frac{\partial^2 \psi_z}{\partial z^2} \psi_x \psi_y \right) + V(z)\psi_x \psi_y \psi_z = E\psi_x \psi_y \psi_z,$$

o bien dividiendo por $\psi_x \psi_y \psi_z$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{\psi_x} \frac{\partial^2 \psi_x}{\partial x^2} \right) - \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{\psi_y} \frac{\partial^2 \psi_y}{\partial y^2} \right) + \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi_z} \frac{\partial^2 \psi_z}{\partial z^2} + V(z) \right) = E,$$

dado que E es una constante, de la ecuación anterior se sigue que cada una de las funciones entre paréntesis también son constantes, por lo tanto se obtienen las siguientes tres ecuaciones de Schrödinger unidimensionales

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi_x}{\partial x^2} = E_x \psi_x \quad (2.10)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi_y}{\partial y^2} = E_y \psi_y \quad (2.11)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi_z}{\partial z^2} + V(z)\psi_z = E_z \psi_z \quad (2.12)$$

donde E_x, E_y, E_z son constantes tales que $E = E_x + E_y + E_z$. El principal objetivo en este problema es encontrar las soluciones y los valores correspondientes de E para cada una de las ecuaciones anteriores, sin embargo, en general no es posible obtener la solución de (2.12) de manera analítica, aunque existen muy pocos casos en los que debido a la simplicidad del potencial $V(z)$ es posible encontrar su solución y los valores de E_z en forma cerrada.

Respecto a las ecuaciones (2.10) y (2.11) cabe señalar que en ambas direcciones x, y la partícula es libre, es decir en este caso la solución representa una partícula en movimiento, por tanto la solución se considera como una onda viajera. Entonces $\psi_x = \exp ik_x x$ y $\psi_y = \exp ik_y y$, donde k_x, k_y son las componentes respectivas del vector de onda de la solución en el plano xy . Sustituyendo estas soluciones en (2.10), (2.11) se tiene

$$\begin{aligned} \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} \exp(ik_x x) &= E_x \exp(ik_x x) \\ \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m} \exp(ik_y y) &= E_y \exp(ik_y y) \end{aligned}$$

de donde se deduce que $E_x = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m}$ y $E_y = \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m}$. Así el movimiento y los niveles de energía de una partícula confinada en un potencial unidimensional pero libre en el plano xy son respectivamente

$$\psi_{x,y}(x, y) = \frac{1}{A} \exp i(k_x x + k_y y), \quad E_{x,y} = \frac{\hbar^2 |\mathbf{k}_{x,y}|^2}{2m}$$

donde $\mathbf{k}_{x,y} = (k_x, k_y)$ y $1/A$ es la amplitud de la onda. Es importante señalar que con base en este análisis se concluye que el espectro de energías permitidas es discreto en la dirección z , mientras que en el plano xy es continuo. A estos conjuntos de energías asociadas a niveles confinados se les conoce como subbandas, ver fig (2.7).

El efecto de confinar la partícula en la dirección z resulta en la supresión de un grado de libertad, es decir restringe el movimiento de la partícula de tres a dos dimensiones. En resumen, la energía total de una partícula (electrón o hueco de electrón) con masa m^* dentro de un pozo cuántico formado por diferentes semiconductores es

$$E = E_n + \frac{\hbar^2 |\mathbf{k}_{x,y}|^2}{2m^*}$$

donde $\mathbf{k}_{x,y}$ es el momento de la partícula en el plano xy .

Note que si a la partícula confinada en el pozo cuántico anterior se le agregara un campo

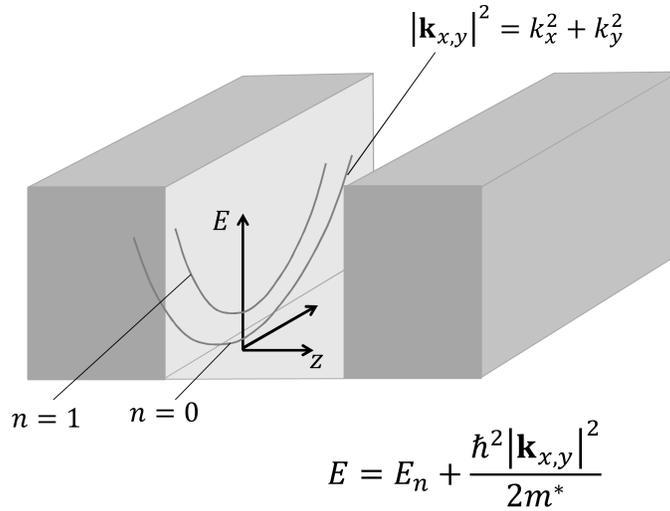


Figura 2.7: Subbandas de energía para una partícula confinada a un potencial unidimensional y con movimiento libre en el plano xy .

eléctrico de la forma $-eF(z)$ a lo largo del eje z , donde $-e$ es la carga del electrón y $F(z)$ es la fuerza del campo, entonces el análisis anterior sería válido con la excepción de que la ecuación (2.12) tendría la forma

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2 \psi(z)}{\partial z^2} + [V(z) - eF(z)] \psi(z) = E\psi(z),$$

la cuál es incluso más difícil de resolver por la adición de una nueva función de la variable z . Otro caso importante es cuando se aplica externamente un campo magnético a lo largo del eje z a una heteroestructura no magnética (como la de la figura 2.6). En este caso la separación de variables no funciona, de forma que la ecuación de Schrödinger con masa efectiva constante que describe la partícula confinada en la estructura (2.6) sometida a un campo magnético es

$$\left[-\frac{1}{2m^*} (\mathcal{P} + e\mathbf{A})^2 \mp \frac{1}{2} g^*(z) \mu_B B + V(z) \right] \psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z)$$

donde \mathbf{A} es el potencial vectorial del campo magnético, g^* es una función que depende del material (conocida como factor de Landau), μ_B es el magnetón de Bohr y B es la magnitud de la densidad de flujo magnético. Aún cuando el potencial es unidimensional, las funciones de onda no necesariamente son unidimensionales debido a la forma del potencial vectorial.

II.1.5 Confinamiento de una partícula en dos dimensiones

Considere la estructura de la sección anterior una vez que se le ha aplicado una rotación de 90 grados hacia la derecha (ver fig. 2.8), como antes una partícula es confinada en la dirección z dentro del pozo cuántico formado. Existen varias maneras de fabricar un hilo

cuántico, aquí se considera solo una. Suponga que una porción muy delgada de la estructura en la figura (2.8 a) es cortada verticalmente en la dirección paralela al eje x , entonces se obtiene un hilo (tira) de material del pozo cuántico donde la partícula está confinada en dos direcciones y, z y puede moverse libremente en dirección del eje x . Por tanto existe un

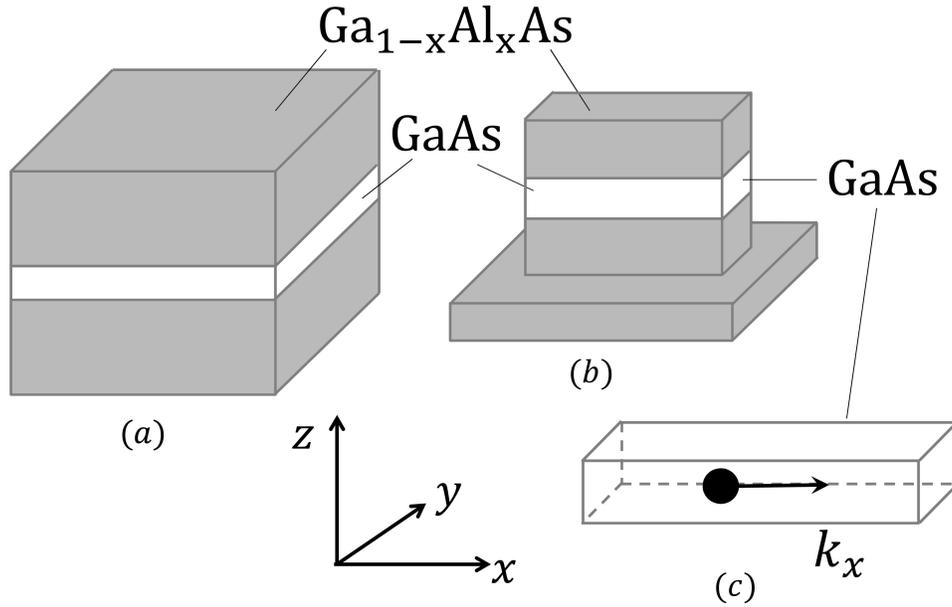


Figura 2.8: Fabricación de un hilo cuántico (b) y el esquema del confinamiento de una partícula en dos dimensiones permitiéndola moverse en una sola dirección (c).

potencial que actúa sobre la partícula en las direcciones y, z mientras que en la dirección restante no existe potencial que afecte a la partícula. De esta manera, bajo la aproximación de la masa efectiva la ecuación de Schrödinger que describe a los estados de la partícula dentro de un hilo cuántico se escribe como

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\nabla^2\psi(x, y, z) + V(y, z)\psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z). \quad (2.13)$$

Suponiendo que la función de onda se pueda escribir como $\psi(x, y, z) = \psi_x(x)\psi(y, z)$ y sustituyendo en (2.13) se tiene

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi_x(x)\psi(y, z) + V(y, z)\psi_x(x)\psi(y, z) = E\psi_x(x)\psi(y, z),$$

dividiendo por $\psi_x(x)\psi(y, z)$ y reacomodando

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\left(\frac{1}{\psi_x(x)}\frac{\partial^2\psi_x(x)}{\partial x^2} + \frac{1}{\psi(y, z)}\frac{\partial^2\psi(y, z)}{\partial y^2} + \frac{1}{\psi(y, z)}\frac{\partial^2\psi(y, z)}{\partial z^2}\right) + V(y, z) = E,$$

debido a que E es una constante y las funciones dentro del paréntesis dependen de sólo una (x) o dos variables (y, z) se sigue que la única forma en que la ecuación anterior se cumpla es que las siguientes ecuaciones de Schrödinger se satisfagan

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2 \psi_x(x)}{\partial x^2} = E_x \psi_x(x), \quad (2.14)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\partial^2 \psi(y, z)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi(y, z)}{\partial z^2} \right) + V(y, z) \psi(y, z) = E_{y,z} \psi(y, z) \quad (2.15)$$

donde E_x y $E_{y,z}$ son constantes tales que $E = E_x + E_{y,z}$. La ecuación (2.15) es la ecuación de Schrödinger que caracteriza a la partícula confinada en el plano yz mientras que la ecuación (2.14) describe el movimiento de la partícula a lo largo del eje x . Como se vió en la sección anterior la ecuación (2.14) es exactamente soluble pero la ecuación (2.15) en general no lo es.

Ahora considérese un hilo cuántico rectangular finito cuya sección transversal se presenta en la figura (2.9 a), es decir la sección de confinamiento (2.8 c) está rodeada por barreras de longitud finita. Para desacoplar el potencial en las barreras, éste se puede aproximar como se muestra en la figura (2.9 b), donde $V(y, z)$ es igual a la suma de los potenciales $V(y)$, $V(z)$ correspondientes a dos pozos finitos independientes. La aproximación ocurre en las esquinas donde la suma del potencial es $2V$, de forma que en estas áreas se espera que la solución no satisfaga completamente a la ecuación original.

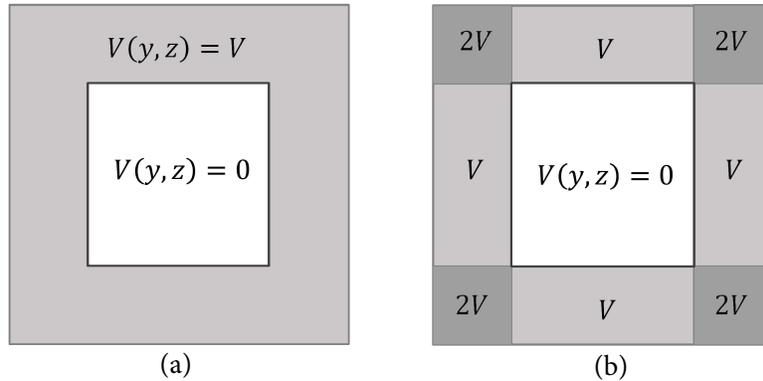


Figura 2.9: Sección transversal de un hilo cuántico rectangular con barreras finitas (a) y aproximación del potencial (b).

Considerando que la solución sea separable $\psi(y, z) = \psi(y)\psi(z)$, el potencial como $V(y, z) = V(y) + V(z)$ y sustituyendo en la ecuación (2.15)

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\psi(z) \frac{\partial^2 \psi(y)}{\partial y^2} + \psi(y) \frac{\partial^2 \psi(z)}{\partial z^2} \right) + [V(y) + V(z)] \psi(y)\psi(z) = E_{y,z} \psi(y)\psi(z),$$

dividiendo por $\psi(y)\psi(z)$ y acomodando

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{1}{\psi(y)} \frac{\partial^2 \psi(y)}{\partial y^2} + V(y)\right) + \left(-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{1}{\psi(z)} \frac{\partial^2 \psi(z)}{\partial z^2} + V(z)\right) = E_{y,z},$$

tomando en cuenta que $E_{y,z}$ es constante y las funciones entre paréntesis dependen de una sola variable entonces la única forma en la que se puede cumplir la ecuación anterior es cuando se satisfacen las siguientes ecuaciones

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2 \psi(y)}{\partial y^2} + V(y)\psi(y) = E_y \psi(y) \quad (2.16)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2 \psi(z)}{\partial z^2} + V(z)\psi(z) = E_z \psi(z) \quad (2.17)$$

donde E_y, E_z son constantes tales que $E_{y,z} = E_y + E_z$ y las ecuaciones (2.16), (2.17) son del tipo Schrödinger unidimensional. Note que si la masa se hubiese tomado dependiente de una de las variables y o z la derivación de las ecuaciones (2.16), (2.17) habría sido la misma.

II.1.6 Confinamiento de una partícula en tres dimensiones

Un punto cuántico es una nanoestructura formada por materiales semiconductores la cual confina el movimiento de partículas tales como electrones o huecos de electrón en todas las direcciones espaciales. Existen diversas técnicas utilizadas para la fabricación de puntos cuánticos. Un ejemplo de un punto cuántico, como se muestra en la figura (2.10), se obtiene al cortar verticalmente de la estructura en la figura (2.8 a) una columna suficientemente pequeña de tal forma que una partícula esté confinada en la capa intermedia y no pueda moverse en ninguna dirección. En este caso se dice que la partícula está atrapada en una caja.

Ahora considere un punto cuántico en el cual la partícula en lugar de que esté confinada en una caja, está confinada en una esfera de radio finito r . A este punto cuántico se le conoce como punto cuántico esférico, ver figura (2.11). Entonces el potencial tiene forma esférica y por tanto se espera que la función de ondas también la tenga. Por tanto la ecuación de Schrödinger con masa constante para un punto cuántico esférico se puede escribir como

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi(r) + V(r)\psi(r) = E\psi(r), \quad (2.18)$$

note que debido a la simetría esférica del sistema la función de ondas no depende de los ángulos θ, ϕ del sistema coordenado esférico. Análogamente E depende sólo de r ya que el confinamiento se considera a lo largo del radio. Para convertir la ecuación (2.18) a coordena-

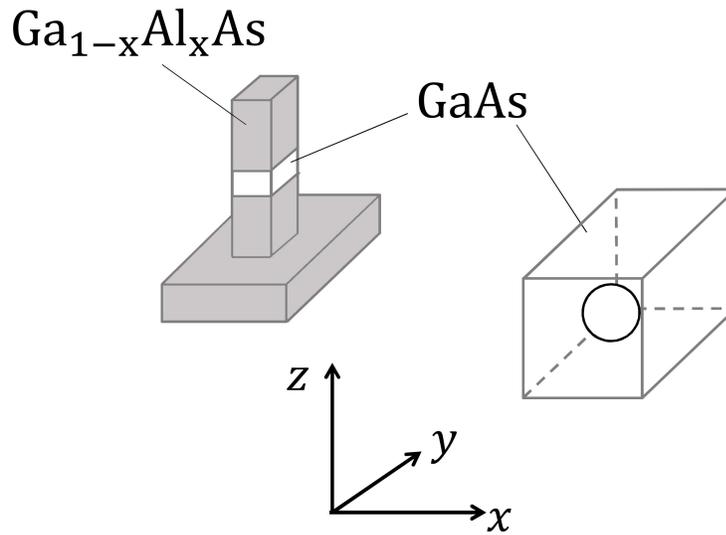


Figura 2.10: Punto cuántico (izquierda) y partícula confinada en una caja donde todos los grados de libertad son removidos (derecha).

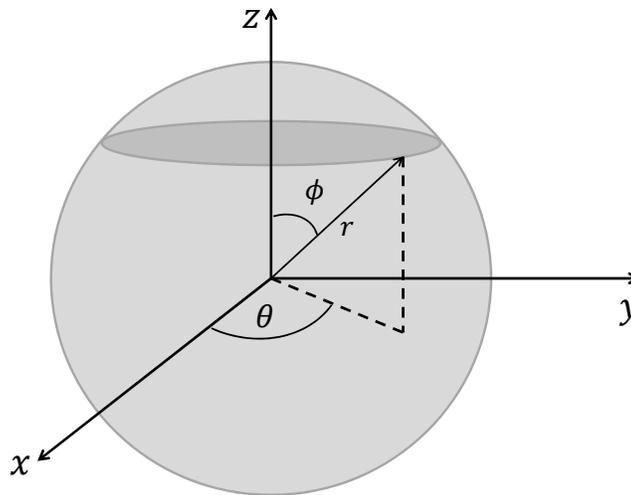


Figura 2.11: Esquema de un punto cuántico esférico

das esféricas se puede mostrar que para x

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(r) = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \psi(r) - \frac{x^2}{r^3} \frac{\partial}{\partial r} \psi(r) + \frac{x^2}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial r^2} \psi(r),$$

y similarmente para y , y z . Por lo tanto simplificando se obtiene

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi(r) = \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \psi(r) + \frac{\partial^2}{\partial r^2} \psi(r).$$

Sustituyendo lo anterior en (2.18) se tiene que

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial^2}{\partial r^2} \right) \psi(r) + V(r)\psi(r) = E\psi(r), \quad (2.19)$$

la cual es una ecuación que se puede transformar en una ecuación de Schrödinger unidimensional. A saber, considerando el cambio de variable $u(r) = r\psi(r)$ y a partir del hecho de que el operador $\frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial^2}{\partial r^2}$ se puede factorizar como $\frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r$, se sigue que la ecuación (2.19) se puede transformar en

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2 u(r)}{\partial r^2} + V(r)u(r) = Eu(r),$$

obteniéndose una ecuación de Schrödinger unidimensional independiente del tiempo.

Como se pudo apreciar, en cada uno de los modelos de confinamiento cuántico presentados aparece una ecuación de Schrödinger unidimensional con PDM. Es necesario conocer los eigenvalores de esta ecuación para poder describir a la partícula dentro de la respectiva nanoestructura. Una vez más queda justificado el desarrollo de nuevas técnicas que permitan calcular los eigenvalores de este tipo de ecuaciones con gran precisión.

II.2. Métodos disponibles para la solución de la ecuación de Schrödinger con PDM

En esta sección se presenta una breve descripción de los métodos disponibles para el cálculo exacto y numérico de los eigenvalores del problema de Schrödinger con PDM.

II.2.1 Técnicas exactas

Yahiaoui and Bentaiba (2009) desarrollan una nueva técnica que utiliza mapeos conformes para generar potenciales hipergeométricos de Natanzon con PDM bajo el álgebra $SU(1, 1)$. Utilizan esta álgebra para obtener potenciales tales como los de la clase de Ginocchio así como una expresión en forma cerrada de sus eigenvalores correspondientes.

Tezcan et al. (2008) adaptan el método de Nikiforov-Uvarov para aplicarlo a la ecuación de Schrödinger unidimensional independiente del tiempo con masa efectiva para cierta clase de potenciales y obtienen expresiones exactas para los eigenvalores y las eigenfunciones de dicha ecuación. Aplican su técnica para el potencial de Morse con masa efectiva.

Ganguly et al. (2006) presentan una técnica para calcular los eigenvalores de la ecuación de Schrödinger con potencial cuadrado y masa efectiva. Consideran dos casos, uno donde el

pozo es simétrico y el otro asimétrico. Al aplicar su método obtienen una ecuación trascendental (de dispersión) que permite calcular numéricamente los eigenvalores de la ecuación considerada.

Jirauschek (2009) analiza la eficiencia y precisión de diferentes técnicas basadas en el método de matriz de transferencia en el cálculo de los eigenvalores de la ecuación de Schrödinger con masa constante y con PDM. Propone combinar la precisión obtenida con las aproximaciones lineales del potencial y la ventaja computacional de las matrices exponenciales simétricas, ya que con este enfoque logra obtener una precisión comparable con la de las funciones de Airy pero sin los inconvenientes que suelen presentarse.

Lévai and Özer (2010) consideran una clase de la ecuación de Schrödinger unidimensional en la que el potencial permite obtener soluciones en términos de los polinomios de Laguerre generalizados y la masa es una función finita y positiva dentro del dominio de definición del problema. Mediante una transformación obtienen expresiones exactas para los eigenvalores y eigenfunciones asociados al problema.

II.2.2 Técnicas numéricas

Ou et al. (2004) aplican el método analítico de la matriz de transferencia para encontrar una expresión analítica de la ecuación de dispersión asociada a la ecuación de Schrödinger con PDM para un potencial arbitrario, sin necesidad de disponer de algún potencial para el cual la solución de la ecuación sea conocida. La ecuación de dispersión permite calcular numéricamente los eigenvalores del problema. La utilizan para obtener algunos eigenvalores para el oscilador armónico tanto con masa constante como con masa variable.

Huang et al. (2008) extienden el método WKB mediante el método de la matriz de transferencia para aplicarlo a la ecuación de Schrödinger con masa efectiva y dependiente de la posición (PDEM). Derivan un sistema de ecuaciones diferenciales de primer orden y al desacoplarlo obtienen una aproximación de la función de ondas. También calculan estimaciones para los eigenvalores del problema. Como experimento numérico consideran un pozo cuántico infinito con masa efectiva.

Koç and Sayin (2010) proponen una técnica basada en la aplicación del método asintótico de expansión en series de Taylor para resolver la ecuación de Schrödinger con PDM sin relacionar el potencial con la masa o viceversa. Deducen una expresión analítica para aproximar las eigenfunciones y eigenvalores de la ecuación. Ilustran la aplicación de la técnica con un ejemplo en el que consideran el oscilador armónico con la función de masa $m(x) = m_0(1 + \gamma x^2)$. Killingbeck (2011) modifica el método de disparo de segundo orden de Hartree para aplicarlo a la ecuación de Schrödinger con PDM. Considera los cuatro Hamiltonianos más estudiados que involucran PDM clasificados por Von Roos. Obtiene dos pares de relaciones de recurren-

cia y las utiliza para calcular numéricamente los eigenvalores del oscilador armónico para cada uno de los Hamiltonianos.

Förster et al. (2012) presentan un algoritmo matricial para el cálculo de eigenvalores de la ecuación de Schrödinger con PDM, siendo aplicable para Hamiltonianos no hermitianos incluyendo los complejos. Comprueban la eficacia del método mediante ciertos experimentos que incluyen la obtención de los eigenvalores para la molécula de amoníaco, el potencial de Morse y el oscilador armónico con PDM.

En las últimas décadas se han desarrollado ciertos métodos y se han utilizado para resolver la ecuación de Schrödinger con PDM, éstos son los llamados métodos espectrales. Estos métodos consisten en que la solución de la ecuación se aproxima como una suma parcial de funciones suaves (en general polinomios ortogonales como los de Jacobi, Chebyshev o los de Legendre). Al derivar dicha solución es posible hacerlo de manera exacta. La ecuación de Schrödinger se convierte en un sistema de ecuaciones algebraicas y el problema original se convierte en uno de eigenvalores de una matriz.

III. METODOLOGÍA

III.1. Método SPPS

A continuación se presenta el método de series de potencias del parámetro espectral (SPPS) introducido en (Kravchenko, 2009; Kravchenko and Porter, 2010).

Teorema 3.1 *Supóngase que en un intervalo $[a, b]$, la ecuación*

$$(pu'_0)' + qu_0 = 0 \quad (3.1)$$

posee una solución particular u_0 tal que las funciones $u_0^2 r$ y $1/(u_0^2 p)$ son continuas en $[a, b]$. Entonces la solución general de la ecuación

$$(pu')' + qu = \lambda ru \quad (3.2)$$

en (a, b) es de la forma

$$u = c_1 u_1 + c_2 u_2 \quad (3.3)$$

donde c_1 y c_2 son constantes complejas arbitrarias y

$$u_1 = u_0 \sum_{k=0}^{\infty} \lambda^k \tilde{X}^{(2k)} \quad y \quad u_2 = u_0 \sum_{k=0}^{\infty} \lambda^k X^{(2k+1)} \quad (3.4)$$

con \tilde{X}^n y X^n definidas como sigue

$$\tilde{X}^0 \equiv 1, \quad X^0 \equiv 1 \quad (3.5)$$

$$\tilde{X}^n(x) = \begin{cases} \int_{x_0}^x \tilde{X}^{n-1}(s) u_0^2(s) r(s), & n \text{ impar} \\ \int_{x_0}^x \tilde{X}^{n-1}(s) \frac{1}{u_0^2(s)p(s)}, & n \text{ par} \end{cases} \quad (3.6)$$

$$X^n(x) = \begin{cases} \int_{x_0}^x X^{n-1}(s) \frac{1}{u_0^2(s)p(s)}, & n \text{ impar} \\ \int_{x_0}^x X^{n-1}(s) u_0^2(s) r(s), & n \text{ par} \end{cases} \quad (3.7)$$

donde x_0 es un punto arbitrario en $[a, b]$ tal que p es continua en x_0 y $p(x_0) \neq 0$. Además ambas series convergen uniformemente en $[a, b]$.

III.2. Algoritmo para la obtención de la ecuación de dispersión

Uno de los objetivos de esta tesis es el de obtener una expresión analítica de la ecuación de dispersión asociada al problema (1.1),(1.3). Para esto se divide el eje real en tres intervalos y se calculan las soluciones correspondientes a cada intervalo considerando las condiciones de frontera (1.3). A continuación se presenta cada etapa.

1. Se calcula la solución u_1 de la ecuación (1.1) en el intervalo $(-\infty, -h]$ y se aplica la condición de regularidad $u_1 \in L_2(-\infty, -h)$, es decir que $\lim_{x \rightarrow -\infty} u_1(x) = 0$. Nótese que debido a que en este intervalo los coeficientes son constantes, la solución u_1 se obtiene en forma analítica.
2. En el intervalo $[-h, h]$ la ecuación (1.1) se convierte en una ecuación de Sturm-Liouville con coeficientes variables, de manera que mediante el método SPPS, se obtiene la solución analítica u_2 , la cual es regular.
3. Se calcula la solución u_3 en el intervalo $[h, \infty)$ considerando la condición de frontera $\lim_{x \rightarrow \infty} u_3(x) = 0$. Los coeficientes constantes en este intervalo permiten obtener una solución analítica.

Una vez obtenidas las tres soluciones se procede a construir a partir de éstas una solución $u(x)$ para el problema (1.1),(1.3) en todo el eje real. Por lo tanto dicha solución debe cumplir que tanto $u(x)$ como $P(x)u'(x)$ sean continuas. Entonces las soluciones u_1, u_2 y u_3 deben cumplir en los puntos $-h$ y h

$$\begin{aligned} u_1(-h) &= u_2(-h), & u_2(h) &= u_3(h), \\ p_1 u_1'(-h) &= p(-h) u_2'(-h), & p(h) u_2'(h) &= p_2 u_3'(h). \end{aligned}$$

Al aplicar las igualdades anteriores se obtiene una ecuación de la forma

$$\Phi(\lambda) = 0,$$

que es la ecuación de dispersión buscada.

III.3. Adaptación del método SPPS para la solución de la ecuación de Schrödinger

Como ya se ha mencionado, una de las aplicaciones más importantes de esta tesis es en el cálculo de los eigenvalores del problema de Schrödinger unidimensional con PDM, es decir la ecuación

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dx} \left(\frac{1}{m(x)} \frac{d\psi(x)}{dx} \right) + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (3.8)$$

sujeta a

$$\psi(x) \in L_2(-\infty, \infty). \quad (3.9)$$

Para poder aplicar la técnica propuesta en esta tesis, interesan las ecuaciones de Schrödinger cuyos coeficientes tengan los siguientes comportamientos asintóticos

$$\begin{aligned} \lim_{x \rightarrow -\infty} m(x) &= k_1, & \lim_{x \rightarrow \infty} m(x) &= k_2, \\ \lim_{x \rightarrow -\infty} V(x) &= \alpha_1, & \lim_{x \rightarrow \infty} V(x) &= \alpha_2. \end{aligned}$$

donde k_1, k_2, α_1 y α_2 son constantes reales.

Por lo tanto los coeficientes de este tipo de ecuaciones se pueden aproximar por unos que sean continuos por partes. Más explícitamente, se divide el eje real en tres subintervalos $(-\infty, -h)$, $[-h, h]$ y (h, ∞) y se definen los coeficientes $P(x)$, $Q(x)$ (correspondientes a la masa y al potencial respectivamente) de tal forma que en el intervalo $[-h, h]$ estén definidos como los coeficientes originales y en el resto de los intervalos se definen de acuerdo al comportamiento asintótico de la masa y el potencial, respectivamente. Específicamente

$$P(x) = \begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2k_1} & x < -h \\ -\frac{\hbar^2}{2m(x)} & -h \leq x \leq h, \\ -\frac{\hbar^2}{2k_2} & h < x \end{cases}, \quad Q(x) = \begin{cases} \alpha_1 & x < -h \\ V(x) & -h \leq x \leq h, \\ \alpha_2 & x > h \end{cases}$$

De esta manera, el problema (3.8),(3.9) (con el comportamiento asintótico mencionado) se puede aproximar por la ecuación

$$\frac{d}{dx} \left(P(x) \frac{d\psi(x)}{dx} \right) + Q(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (3.10)$$

sujeta a

$$\psi(x) \in L_2(-\infty, \infty). \quad (3.11)$$

El valor de h se escoge de tal forma que las diferencias

$$\left| P(-h) + \frac{\hbar^2}{2k_1} \right|, \quad \left| P(h) + \frac{\hbar^2}{2k_2} \right|, \quad |Q(-h) - \alpha_1|, \quad |Q(h) - \alpha_2|$$

sean suficientemente pequeñas. Es importante señalar que el problema (3.10),(3.11) es del tipo (1.1),(1.3), con $R(x) = 1$, por lo tanto los eigenvalores de (3.10),(3.11) se pueden calcular al resolver la ecuación de dispersión asociada, obteniendo aproximaciones a los eigenvalores del problema original (3.8),(3.9).

III.4. Técnica para la construcción de ejemplos exactamente solubles

La transformación canónica puntual (PCT, point canonical transformation) es una técnica que consiste en transformar una ecuación de Schrödinger exactamente soluble con masa constante en una ecuación con masa variable que es también exactamente soluble (Aktaş and Sever, 2008). Una de las ventajas de esta transformación es que ambas ecuaciones tienen los mismos eigenvalores (o bien hasta una constante mutiplicativa), es decir son isospectrales. Otra característica es que el potencial de la ecuación resultante depende de la masa variable y sus eigenfunciones se definen en términos de las de la ecuación con masa constante. A continuación se presenta esta transformación.

Considérese la ecuación de Schrödinger unidimensional independiente del tiempo con masa variable $m(x)$

$$-\frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{1}{m(x)} u'(x) \right]' + V(x)u(x) = Eu(x)$$

reescribiendo la ecuación anterior se tiene

$$u''(x) - \left(\frac{m'}{m} \right) u'(x) + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(x)] u(x) = 0. \quad (3.12)$$

Por otro lado considérese la ecuación de Schrödinger exactamente soluble con masa constante M

$$\Phi''(y) + \frac{2M}{\hbar^2} [\varepsilon - V(y)] \Phi(y) = 0. \quad (3.13)$$

Se propone la transformación $y = f(x)$. Sea

$$\Phi(y) = g(x)u(x) \quad (3.14)$$

entonces aplicando la regla de la cadena y la derivada de la inversa de una función

$$\begin{aligned}\frac{d\Phi}{dy} &= \frac{dg(x)}{dy}u(x) + g(x)\frac{du(x)}{dy} = g'(x)\frac{dx}{dy}u(x) + g(x)u'(x)\frac{dx}{dy} \\ &= \frac{g'}{f'}u(x) + \frac{g}{f'}u'(x),\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\frac{d^2\Phi}{dy^2} &= \frac{d}{dy}\left(\frac{g'}{f'}\right)u(x) + \frac{g'}{f'}\frac{du(x)}{dy} + g\frac{d}{dy}\left(\frac{u'(x)}{f'}\right) + \frac{dg}{dy}\frac{u'(x)}{f'} \\ &= \frac{f'\frac{dg'}{dy} - g'\frac{df'}{dy}}{(f')^2}u(x) + \frac{g'}{f'}\frac{u'(x)}{f'} + g\frac{f'\frac{du'(x)}{dy} - u'(x)\frac{df'}{dy}}{(f')^2} + \frac{g'}{f'}\frac{u'(x)}{f'} \\ &= \frac{f'g'' - g'f''}{(f')^2}u(x) + g\frac{f'u''(x) - u'(x)f''}{(f')^2} + 2\frac{g'u'(x)}{(f')^2} \\ &= \frac{g'' - g'\frac{f''}{f'}}{(f')^2}u(x) + g\frac{u''(x) - u'(x)\frac{f''}{f'}}{(f')^2} + 2\frac{g'u'(x)}{(f')^2} \\ &= \frac{1}{(f')^2}\left[\left(g'' - g'\frac{f''}{f'}\right)u(x) + \left(2g' - g\frac{f''}{f'}\right)u'(x) + gu''(x)\right].\end{aligned}\quad (3.15)$$

Sustituyendo (3.14) y (3.15) en (3.13) se tiene

$$\frac{1}{(f')^2}\left[\left(g'' - g'\frac{f''}{f'}\right)u(x) + \left(2g' - g\frac{f''}{f'}\right)u'(x) + gu''(x)\right] + \frac{2M}{\hbar^2}[\varepsilon - V(f(x))]gu(x) = 0$$

Multiplicando por $\frac{(f')^2}{g}$ a la ecuación anterior se obtiene

$$u''(x) + 2\left(\frac{g'}{g} - \frac{f''}{2f'}\right)u'(x) + \left[\left(\frac{g''}{g} - \frac{f''g'}{f'g}\right) + \frac{2M}{\hbar^2}(f')^2(\varepsilon - V(f(x)))\right]u(x) = 0\quad (3.16)$$

Igualando (3.12) y (3.16) se tienen las siguientes dos ecuaciones

$$-\frac{m'}{m} = 2\left(\frac{g'}{g} - \frac{f''}{2f'}\right)\quad (3.17)$$

$$\frac{2m}{\hbar^2}[E - V(x)] = \left(\frac{g''}{g} - \frac{f''g'}{f'g}\right) + \frac{2M}{\hbar^2}(f')^2(\varepsilon - V(f(x)))\quad (3.18)$$

Resolviendo (3.17)

$$(\ln m)' = 2\left[\frac{1}{2}(\ln f')' - (\ln g)'\right]$$

$$\begin{aligned}
\ln m &= 2 \left[\ln (f')^{\frac{1}{2}} - \ln g \right] \\
&= 2 \ln \left(\frac{(f')^{\frac{1}{2}}}{g} \right) \\
m &= \frac{f'}{g^2}
\end{aligned}$$

en consecuencia

$$g = \left(\frac{f'}{m} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (3.19)$$

Para que (3.18) se cumpla y además los eigenvalores de ambas ecuaciones satisfagan $E = M\varepsilon$, se debe cumplir que

$$(f')^2 = m, \quad (3.20)$$

$$V(x) = \frac{M(f')^2}{m} V(f(x)) - \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{g''}{g} - \frac{f'' g'}{f' g} \right), \quad (3.21)$$

sustituyendo (3.20) en (3.19)

$$g = \frac{1}{m^{\frac{1}{4}}}, \quad (3.22)$$

de donde

$$\begin{aligned}
g' &= -\frac{m'}{4m^{5/4}} \quad \text{y} \quad g'' = -\frac{4m^{5/4}m'' - m'(5m^{1/4}m')}{16m^{5/2}} = -\frac{m''}{4m^{5/4}} + \frac{5(m')^2}{16m^{9/4}}, \\
\frac{g'}{g} &= -\frac{m'm^{1/4}}{4m^{5/4}} = -\frac{m'}{4m} \\
\frac{g''}{g} &= -\frac{m''m^{1/4}}{4m^{5/4}} + \frac{5(m')^2m^{1/4}}{16m^{9/4}} = -\frac{m''}{4m} + \frac{5}{16} \left(\frac{m'}{m} \right)^2 \\
f' &= m^{1/2}, \quad f'' = \frac{m'}{2m^{1/2}} \\
\frac{f''}{f'} &= \frac{m'}{2m} \\
\frac{f'' g'}{f' g} &= \frac{m'}{2m} \left(-\frac{m'}{4m} \right) = -\frac{1}{8} \left(\frac{m'}{m} \right)^2.
\end{aligned}$$

Entonces

$$\begin{aligned}
\frac{g''}{g} - \frac{f'' g'}{f' g} &= -\frac{m''}{4m} + \frac{5}{16} \left(\frac{m'}{m} \right)^2 + \frac{1}{8} \left(\frac{m'}{m} \right)^2 = -\frac{m''}{4m} + \frac{7}{16} \left(\frac{m'}{m} \right)^2 \\
&= -\frac{1}{4} \left[\frac{m''}{m} - \frac{7}{4} \left(\frac{m'}{m} \right)^2 \right] \quad (3.23)
\end{aligned}$$

De las ecuaciones (3.14), (3.18), (3.21) y (3.23) se concluye que

$$\begin{aligned} E_n &= M\varepsilon_n, \\ V(x) &= MV(f(x)) + \frac{\hbar^2}{8m} \left[\frac{m''}{m} - \frac{7}{4} \left(\frac{m'}{m} \right)^2 \right], \\ u_n(x) &= (m(x))^{1/4} \Phi_n(f(x)). \end{aligned} \tag{3.24}$$

De esta manera, se tiene que la ecuación de Schrödinger con PDM (3.12) es exactamente soluble.

IV. RESULTADOS

IV.1. Obtención de la ecuación de Dispersión

Se requiere encontrar los valores del parámetro espectral $\lambda \in \mathbb{C}$ para los cuales la ecuación de Sturm-Liouville

$$(P(x)u')' + Q(x)u = \lambda R(x)u \quad (4.1)$$

tenga una solución regular

$$u \in L_2(-\infty, \infty), \quad (4.2)$$

donde los coeficientes $P(x)$, $Q(x)$ y $R(x)$ están definidos en (1.2)

IV.1.1 Solución en $(-\infty, -h]$

En el primer subintervalo $x < -h$ la ecuación (4.1) toma la forma

$$u'' - \left(\frac{\lambda r_1 - \alpha_1}{p_1} \right) u = 0.$$

Su solución general es

$$u(x) = c_1 e^{\mu(x+h)} + c_2 e^{-\mu(x+h)},$$

con $\mu := \sqrt{\frac{\lambda r_1 - \alpha_1}{p_1}}$ y c_1, c_2 constantes complejas. Para satisfacer (4.2) la solución debe cumplir $\lim_{x \rightarrow -\infty} u(x) = 0$, por lo que se obtiene $Re(\mu) > 0$ y $c_2 = 0$. Entonces para $x \leq -h$ la solución requerida es $u_1(x) = e^{\mu(x+h)}$, a partir de la cual se calculan los valores en el punto $-h$ que debe cumplir la solución del siguiente subintervalo

$$u_1(-h) = 1 \quad \text{y} \quad p_1 u_1'(-h) = p_1 \mu. \quad (4.3)$$

IV.1.2 Solución en $[-h, h]$

En el segundo subintervalo los coeficientes de la ecuación (4.1) son funciones arbitrarias que satisfacen las condiciones de suavidad requeridas. El método SPPS (Kravchenko and Porter, 2010) nos permite obtener su solución general en forma de series de potencias del

parámetro espectral. La ecuación (4.1) en el subintervalo considerado es

$$(pu')' + q(x)u = \lambda ru. \quad (4.4)$$

Sea $u_0 \in C^2(-h, h) \cap C^1[-h, h]$ una solución sin ceros (en general compleja valuada) en $[-h, h]$ de la ecuación

$$(pu_0')' + q(x)u_0 = 0, \quad -h < x < h. \quad (4.5)$$

Entonces la solución general de (4.4) es de la forma

$$u(x) = c_1 v_1 + c_2 v_2 \quad (4.6)$$

donde c_1 y c_2 son constantes complejas arbitrarias y

$$v_1 = u_0 \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n \tilde{X}^{(2n)} \quad \text{y} \quad v_2 = u_0 \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n X^{(2n+1)}. \quad (4.7)$$

Las funciones $\tilde{X}^{(n)}$ y $X^{(n)}$ están definidas como

$$\tilde{X}^{(0)} \equiv 1 \quad X^{(0)} \equiv 1$$

$$\tilde{X}^{(n)}(x) = \int_{-h}^x \tilde{X}^{(n-1)}(s) (u_0^2(s))^{(-1)^{n-1}} (p(s))^{-\frac{1+(-1)^n}{2}} (r(s))^{\frac{1+(-1)^{n-1}}{2}} ds \quad (4.8)$$

$$X^{(n)}(x) = \int_{-h}^x X^{(n-1)}(s) (u_0^2(s))^{(-1)^n} (p(s))^{-\frac{1+(-1)^{n-1}}{2}} (r(s))^{\frac{1+(-1)^n}{2}} ds \quad (4.9)$$

donde ambas series convergen uniformemente en $[-h, h]$. En el caso regular la solución u_0 se puede obtener mediante el mismo método SPPS. De acuerdo al teorema de separación de Sturm (Al-Gwaiz, 2008), dadas dos soluciones linealmente independientes y_1 y y_2 de (4.5), los ceros de estas funciones se alternan. Así, tomando

$$u_0 = y_1 + iy_2, \quad (4.10)$$

u_0 no se desvanece en $[-h, h]$. La construcción de tales soluciones y_1 y y_2 se puede realizar con el mismo método SPPS como sigue, ver (Kravchenko, 2009) o (Kravchenko and Porter,

2010):

$$y_1 = \sum_{n=0}^{\infty} \tilde{Y}^{(2n)}, \quad y_2 = \sum_{n=0}^{\infty} Y^{(2n+1)} \quad (4.11)$$

donde

$$\tilde{Y}^{(0)} \equiv 1 \quad Y^{(0)} \equiv 1 \quad (4.12)$$

$$\tilde{Y}^{(n)}(x) = \int_{-h}^x \tilde{Y}^{(n-1)}(s) (q(s))^{\frac{1+(-1)^{n-1}}{2}} (-p(s))^{-\frac{1+(-1)^{n-1}}{2}} ds \quad (4.13)$$

$$Y^{(n)}(x) = \int_{-h}^x Y^{(n-1)}(s) (q(s))^{\frac{1+(-1)^n}{2}} (-p(s))^{-\frac{1+(-1)^n}{2}} ds \quad (4.14)$$

y las series en y_1 y y_2 convergen uniformemente en $[-h, h]$ y

$$y_1(-h) = 1, \quad y_2(-h) = 0, \quad y \quad y_1'(-h) = 0, \quad y_2'(-h) = \frac{-1}{p(-h)}. \quad (4.15)$$

Note que la construcción de la solución particular antes mencionada sólo es para los casos en los que el parámetro espectral toma valores reales. Para el caso complejo la elección de la solución particular depende del ejemplo en particular que se considere. De esta manera, la construcción de la solución general en $[-h, h]$, para el caso real, consiste de dos etapas, en la primera se obtiene la solución u_0 de (4.5) a partir de (4.10) donde y_1 y y_2 se calculan con las fórmulas (4.11)-(4.14). En la segunda etapa, se obtienen las soluciones linealmente independientes de (4.4) a partir de (4.7)-(4.9).

En general suponga que la solución particular u_0 satisface las condiciones

$$u_0(-h) = a, \quad u_0'(-h) = b,$$

donde $a, b \in \mathbb{C}$. Por tanto

$$\begin{aligned} v_1(-h) &= u_0(-h) = a, & v_1'(-h) &= u_0'(-h) = b, \\ v_2(-h) &= 0, & v_2'(-h) &= \frac{1}{u_0(-h)p(-h)} = \frac{1}{ap(-h)}. \end{aligned} \quad (4.16)$$

Para determinar las constantes c_1 y c_2 en (4.6) y obtener una solución u_2 que satisfaga las condiciones requeridas (4.3) se debe cumplir

$$c_1 v_1(-h) + c_2 v_2(-h) = 1,$$

$$p(-h)(c_1 v_1'(-h) + c_2 v_2'(-h)) = p_1 \mu.$$

Utilizando las relaciones (4.16) se tiene que $c_1 = 1/a$ y $c_2 = ap_1 \mu - bp(-h)$, de donde la solución del problema (4.4) que satisface las condiciones (4.3) es

$$u_2(x) = \frac{1}{a} v_1(x) + [ap_1 \mu - bp(-h)] v_2(x), \quad -h \leq x \leq h. \quad (4.17)$$

IV.1.3 Solución en $[h, \infty)$

Para $x \geq h$ la solución general de la ecuación (4.1) es de la forma

$$u(x) = c_1 e^{-\nu(x-h)} + c_2 e^{\nu(x-h)}, \quad (4.18)$$

donde $\nu := \sqrt{\frac{\lambda r_2 - \alpha_2}{p_2}}$, para que $u \in L_2(-\infty, \infty)$ se considera $Re(\nu) > 0$ y $c_2 = 0$.

Entonces la solución de la ecuación (4.1) en el subintervalo $[h, \infty)$ es $u_3(x) = ce^{-\nu(x-h)}$ donde c es una constante arbitraria, y por tanto $u_3(h) = c$, $u_3'(h) = -\nu c$. Por lo anterior y para obtener una solución regular de la ecuación (4.1) en todo el eje real, las soluciones u_2 y u_3 deben cumplir

$$u_2(h) = u_3(h), \quad p(h)u_2'(h) = p_2 u_3'(h),$$

es decir

$$\begin{aligned} u_2(h) &= c \\ p(h)u_2'(h) &= -p_2 \nu c \end{aligned}$$

de donde se sigue que

$$u_2'(h) + \frac{p_2}{p(h)} \nu u_2(h) = 0, \quad (4.19)$$

por lo tanto los eigenvalores del problema son los valores de λ tales que la solución (4.17) satisface la condición (4.19).

Nótese que las derivadas de las soluciones v_1 y v_2 son

$$v_1' = \frac{u_0'}{u_0} v_1 + \frac{\lambda}{u_0 p} \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n \tilde{X}^{(2n+1)} \quad v_2' = \frac{u_0'}{u_0} v_2 + \frac{1}{u_0 p} \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n X^{(2n)}, \quad (4.20)$$

de modo que la derivada de u_2 se puede escribir como

$$u_2'(x) = \frac{1}{a} v_1'(x) + [ap_1 \mu - bp(-h)] v_2'(x)$$

$$= \frac{u'_0}{u_0} u_2 + \frac{1}{u_0 p} \left[\frac{1}{a} \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^{n+1} \tilde{X}^{(2n+1)} + [ap_1 \mu - bp(-h)] \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n X^{(2n)} \right].$$

Al sustituir $u'_2(x)$ y $u_2(h)$ por sus expresiones en términos del parámetro espectral en (4.19), se obtiene la ecuación de dispersión en forma explícita

$$\begin{aligned} u'_0(h) & \left[\frac{1}{a} \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n \tilde{X}^{(2n)}(h) + [ap_1 \mu - bp(-h)] \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n X^{(2n+1)}(h) \right] \\ & + \frac{1}{u_0(h)p(h)} \left[\frac{1}{a} \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^{n+1} \tilde{X}^{(2n+1)}(h) + [ap_1 \mu - bp(-h)] \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n X^{(2n)}(h) \right] \\ & + \frac{p_2}{p(h)} \nu u_0(h) \left[\frac{1}{a} \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n \tilde{X}^{(2n)}(h) + [ap_1 \mu - bp(-h)] \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n X^{(2n+1)}(h) \right] = 0. \end{aligned}$$

Las raíces de la ecuación de dispersión coinciden con los eigenvalores del problema. Por simplicidad consideremos el problema donde $\alpha_1 = \alpha_2$, pues éste siempre se puede reducir al caso $\alpha_1 = \alpha_2 = 0$. Entonces se tiene $\mu = \sqrt{\frac{\lambda r_1}{p_1}}$, $\lambda^n = \frac{p_1^n \mu^{2n}}{r_1^n}$ y $\nu = \sqrt{\frac{\lambda r_2}{p_2}} = \mu \sqrt{\frac{p_1 r_2}{p_2 r_1}}$. Escribiendo la ecuación de dispersión en términos de μ

$$\begin{aligned} & \frac{u'_0(h)}{a} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{p_1^n \mu^{2n}}{r_1^n} \tilde{X}^{(2n)}(h) - bp(-h) u'_0(h) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{p_1^n \mu^{2n}}{r_1^n} X^{(2n+1)}(h) \\ & - \frac{bp(-h)}{u_0(h)p(h)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{p_1^n \mu^{2n}}{r_1^n} X^{(2n)}(h) + \frac{1}{au_0(h)p(h)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{p_1^{n+1} \mu^{2(n+1)}}{r_1^{n+1}} \tilde{X}^{(2n+1)}(h) \\ & + ap_1 u'_0(h) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{p_1^n \mu^{2n+1}}{r_1^n} X^{(2n+1)}(h) + \frac{ap_1}{u_0(h)p(h)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{p_1^n \mu^{2n+1}}{r_1^n} X^{(2n)}(h) \\ & + \frac{ap_1 p_2 u_0(h)}{p(h)} \sqrt{\frac{p_1 r_2}{p_2 r_1}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{p_1^n \mu^{2(n+1)}}{r_1^n} X^{(2n+1)}(h) + \frac{p_2 u_0(h)}{ap(h)} \sqrt{\frac{p_1 r_2}{p_2 r_1}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{p_1^n \mu^{2n+1}}{r_1^n} \tilde{X}^{(2n)}(h) \\ & - \frac{bp_2 u_0(h)p(-h)}{p(h)} \sqrt{\frac{p_1 r_2}{p_2 r_1}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{p_1^n \mu^{2n+1}}{r_1^n} X^{(2n+1)}(h) = 0 \end{aligned}$$

reescribiendo y haciendo algunos cambios de índices

$$\frac{u'_0(h)}{a} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{p_1^n \mu^{2n}}{r_1^n} \tilde{X}^{(2n)}(h) - bp(-h) u'_0(h) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{p_1^n \mu^{2n}}{r_1^n} X^{(2n+1)}(h)$$

$$\begin{aligned}
& - \frac{bp(-h)}{u_0(h)p(h)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{p_1^n \mu^{2n}}{r_1^n} X^{(2n)}(h) + \frac{1}{au_0(h)p(h)} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{p_1^n \mu^{2n}}{r_1^n} \tilde{X}^{(2n-1)}(h) \\
& + \frac{ap_2 r_1 u_0(h)}{p(h)} \sqrt{\frac{p_1 r_2}{p_2 r_1}} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{p_1^n \mu^{2n}}{r_1^n} X^{(2n-1)}(h) + ap_1 u_0'(h) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{p_1^n \mu^{2n+1}}{r_1^n} X^{(2n+1)}(h) \\
& + \frac{ap_1}{u_0(h)p(h)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{p_1^n \mu^{2n+1}}{r_1^n} X^{(2n)}(h) + \frac{p_2 u_0(h)}{ap(h)} \sqrt{\frac{p_1 r_2}{p_2 r_1}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{p_1^n \mu^{2n+1}}{r_1^n} \tilde{X}^{(2n)}(h) \\
& - \frac{bp_2 u_0(h)p(-h)}{p(h)} \sqrt{\frac{p_1 r_2}{p_2 r_1}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{p_1^n \mu^{2n+1}}{r_1^n} X^{(2n+1)}(h) = 0
\end{aligned}$$

agrupando las potencias pares e impares de μ

$$\begin{aligned}
& u_0'(h) \left(\frac{1}{a} - bp(-h)X^{(1)}(h) \right) - \frac{bp(-h)}{u_0(h)p(h)} \\
& + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{p_1^n \mu^{2n}}{r_1^n} \left[\frac{u_0'(h)}{a} \tilde{X}^{(2n)}(h) - bp(-h)u_0'(h)X^{(2n+1)}(h) - \frac{bp(-h)}{u_0(h)p(h)} X^{(2n)}(h) \right. \\
& \quad \left. + \frac{1}{au_0(h)p(h)} \tilde{X}^{(2n-1)}(h) + \frac{ap_2 r_1 u_0(h)}{p(h)} \sqrt{\frac{p_1 r_2}{p_2 r_1}} X^{(2n-1)}(h) \right] \\
& + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{p_1^n \mu^{2n+1}}{r_1^n} \left[ap_1 u_0'(h)X^{(2n+1)}(h) + \frac{ap_1}{u_0(h)p(h)} X^{(2n)}(h) \right. \\
& \quad \left. + \frac{p_2 u_0(h)}{ap(h)} \sqrt{\frac{p_1 r_2}{p_2 r_1}} \tilde{X}^{(2n)}(h) - \frac{bp_2 u_0(h)p(-h)}{p(h)} \sqrt{\frac{p_1 r_2}{p_2 r_1}} X^{(2n+1)}(h) \right] = 0.
\end{aligned}$$

Así, la ecuación de dispersión es de la forma

$$\sum_{k=0}^{\infty} a_k \mu^k = 0 \tag{4.21}$$

donde

$$\begin{aligned}
a_0 &= u_0'(h) \left(\frac{1}{a} - bp(-h)X^{(1)}(h) \right) - \frac{bp(-h)}{u_0(h)p(h)}, \\
a_{2n} &= \frac{p_1^n}{r_1^n} \left[\frac{u_0'(h)}{a} \tilde{X}^{(2n)}(h) - bp(-h)u_0'(h)X^{(2n+1)}(h) - \frac{bp(-h)}{u_0(h)p(h)} X^{(2n)}(h) \right. \\
& \quad \left. + \frac{1}{au_0(h)p(h)} \tilde{X}^{(2n-1)}(h) + \frac{ap_2 r_1 u_0(h)}{p(h)} \sqrt{\frac{p_1 r_2}{p_2 r_1}} X^{(2n-1)}(h) \right],
\end{aligned}$$

$$a_{2n+1} = \frac{p_1^n}{r_1^n} \left[ap_1 u_0'(h) X^{(2n+1)}(h) + \frac{ap_1}{u_0(h)p(h)} X^{(2n)}(h) + \frac{p_2 u_0(h)}{ap(h)} \sqrt{\frac{p_1 r_2}{p_2 r_1}} \tilde{X}^{(2n)}(h) - \frac{bp_2 u_0(h)p(-h)}{p(h)} \sqrt{\frac{p_1 r_2}{p_2 r_1}} X^{(2n+1)}(h) \right].$$

De manera que el problema de encontrar los eigenvalores del problema (4.1),(4.2) se convierte en encontrar los ceros de una función analítica dada por sus serie de Taylor cuyos coeficientes están dados por las expresiones anteriores.

Es importante señalar que los valores μ que satisfacen la ecuación (4.21) no son los eigenvalores del problema, sin embargo recordando que $\mu = \sqrt{\frac{\lambda r_1}{p_1}}$, una vez calculados dichos valores de μ es posible obtener mediante la relación $\lambda = \frac{p_1 \mu^2}{r_1}$ los eigenvalores del problema considerado.

IV.2. Derivación de ejemplos exactamente solubles

En esta sección se construyen tres ejemplos exactamente solubles. Se obtiene la ecuación de dispersión asociada al primer ejemplo que corresponde a una ecuación de Sturm-Liouville con coeficientes constantes. Se utiliza la transformación PCT para construir dos ejemplos de la ecuación de Schrödinger con PDM a partir de dos ecuaciones con masa constante cuyos potenciales son conocidos como Pöschl-Teller y Scarf II hiperbólico respectivamente.

IV.2.1 Ecuación de Sturm-Liouville con coeficientes constantes

Considérese la ecuación de Sturm-Liouville

$$P(x)u''(x) + Q(x)u(x) = \lambda R(x)u(x), \quad (4.22)$$

con los coeficientes P , Q y R definidos como

$$P(x) = \begin{cases} p_1 & x < -h \\ p & -h \leq x \leq h \\ p_2 & x > h \end{cases}, \quad Q(x) = \begin{cases} 0 & x < -h \\ q & -h \leq x \leq h \\ 0 & x > h \end{cases},$$

$$R(x) = \begin{cases} r_1 & x < -h \\ r & -h \leq x \leq h \\ r_2 & x > h \end{cases},$$

donde p, p_1, p_2, q, r, r_1 y r_2 son constantes, sujeta a la condición

$$u(x) \in L_2(-\infty, \infty). \quad (4.23)$$

Se requiere encontrar la ecuación de dispersión asociada al problema (4.22),(4.23). Para ello, se procede con el algoritmo descrito en la sección 3.1 con la diferencia que en el segundo paso no se utiliza el método SPPS. Debido a que los coeficientes de la ecuación anterior son constantes, en cada subintervalo posee solución analítica. Las soluciones en cada subintervalo son

$$\begin{aligned} u_1(x) &= c_1 e^{\mu(x+h)} + c_2 e^{-\mu(x+h)}, & x \leq -h \\ u_2(x) &= k_1 e^{\nu x} + k_2 e^{-\nu x}, & -h \leq x \leq h \\ u_3(x) &= s_1 e^{\xi(x-h)} + s_2 e^{-\xi(x-h)}, & h \leq x \end{aligned}$$

donde $\mu = \sqrt{\frac{\lambda r_1}{p_1}}$, $\nu = \sqrt{\frac{q-\lambda r}{p}}$, $\xi = \sqrt{\frac{\lambda r_2}{p_2}}$ y $c_1, c_2, k_1, k_2, s_1, s_2$ son constantes complejas. Para que las condiciones de frontera

$$\lim_{x \rightarrow -\infty} u_1(x) = 0 \quad \text{y} \quad \lim_{x \rightarrow +\infty} u_3(x) = 0$$

se satisfagan, se debe cumplir que $\text{Re}(\mu) > 0$, $c_2 = 0$ y $\text{Re}(\xi) > 0$, $s_1 = 0$. Por simplicidad se toma $c_1 = 1$. Por lo tanto las soluciones se pueden reescribir como

$$\begin{aligned} u_1(x) &= e^{\mu(x+h)}, & x \leq -h \\ u_2(x) &= k_1 e^{\nu x} + k_2 e^{-\nu x}, & -h \leq x \leq h \\ u_3(x) &= s_2 e^{-\xi(x-h)}, & h \leq x. \end{aligned}$$

Para satisfacer la continuidad de la solución en todo el eje real y de su derivada se debe cumplir

$$u_1(-h) = u_2(-h), \quad p_1 u_1'(-h) = p_2 u_2'(-h) \quad (4.24)$$

$$u_2(h) = u_3(h), \quad p_2 u_2'(h) = p_2 u_3'(h). \quad (4.25)$$

Aplicando las condiciones (4.24) se tiene

$$\begin{aligned} k_1 e^{-\nu h} + k_2 e^{\nu h} &= 1, \\ p k_1 \nu e^{-\nu h} - p k_2 \nu e^{\nu h} &= p_1 \mu, \end{aligned}$$

resolviendo por Cramer

$$k_1 = \frac{\begin{vmatrix} 1 & e^{\nu h} \\ p_1\mu & -p\nu e^{\nu h} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} e^{-\nu h} & e^{\nu h} \\ p\nu e^{-\nu h} & -p\nu e^{\nu h} \end{vmatrix}} = \frac{(p_1\mu + p\nu)e^{\nu h}}{2p\nu},$$

$$k_2 = \frac{\begin{vmatrix} e^{-\nu h} & 1 \\ p\nu e^{-\nu h} & p_1\mu \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} e^{-\nu h} & e^{\nu h} \\ p\nu e^{-\nu h} & -p\nu e^{\nu h} \end{vmatrix}} = -\frac{(p_1\mu - p\nu)e^{-\nu h}}{2p\nu}.$$

Por lo tanto la solución u_2 se puede reescribir como

$$u_2(x) = \frac{(p_1\mu + p\nu)e^{\nu h}}{2p\nu}e^{\nu x} - \frac{(p_1\mu - p\nu)e^{-\nu h}}{2p\nu}e^{-\nu x}, \quad -h \leq x \leq h.$$

Aplicando las condiciones (4.25) se tiene

$$\begin{aligned} u_2(h) &= s_2, \\ pu_2'(h) &= -p_2\xi s_2, \end{aligned}$$

de donde se obtiene la ecuación de dispersión

$$pu_2'(h) + p_2\xi u_2(h) = 0,$$

más explícitamente

$$\frac{p\nu(p_1\mu + p\nu)}{2p\nu}e^{2\nu h} + \frac{p\nu(p_1\mu - p\nu)}{2p\nu}e^{-2\nu h} + \frac{p_2\xi(p_1\mu + p\nu)}{2p\nu}e^{2\nu h} - \frac{p_2\xi(p_1\mu - p\nu)}{2p\nu}e^{-2\nu h} = 0$$

simplificando

$$(p\nu + p_2\xi)(p_1\mu + p\nu)e^{2\nu h} + (p\nu - p_2\xi)(p_1\mu - p\nu)e^{-2\nu h} = 0. \quad (4.26)$$

De esta manera los valores del parámetro λ tales que satisfacen la ecuación (4.26) son los eigenvalores del problema (4.22), (4.23).

IV.2.2 Potencial Pöschl-Teller modificado con PDM

La ecuación de Schrödinger con masa constante M cuyo potencial es el llamado Pöschl-Teller modificado (Flügge, 1999), $V(y) = -\frac{4U_0}{(e^{\alpha y} + e^{-\alpha y})^2}$ es

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2\psi(y)}{dy^2} + V(y)\psi(y) = E\psi(y)$$

donde $U_0 = \frac{\hbar^2\alpha^2}{2M}\beta(\beta - 1)$, con α, β constantes positivas. La solución analítica para esta ecuación es conocida. Los eigenvalores están dados por

$$\varepsilon_n = -\frac{\hbar^2\alpha^2}{2M}(\beta - 1 - n)^2, \quad 0 \leq n \leq \beta - 1. \quad (4.27)$$

Se considera la distribución de masa $m(x) = \left(\frac{1}{x^2+q} + \alpha^2\right)^2$, donde q es un real positivo. Se aplica la transformación PCT para obtener una ecuación con PDM. Sustituyendo la masa considerada en la fórmula (3.20) se tiene

$$f(x) = \int m(x)^{1/2} dx = \alpha^2 x + \frac{\arctan\left(\frac{x}{\sqrt{q}}\right)}{\sqrt{q}},$$

por lo tanto

$$\begin{aligned} V(f(x)) &= \frac{-4U_0}{\left[\exp\left(\alpha^3 x + \frac{\alpha \arctan\left(\frac{x}{\sqrt{q}}\right)}{\sqrt{q}}\right) + \exp\left(-\alpha^3 x - \frac{\alpha \arctan\left(\frac{x}{\sqrt{q}}\right)}{\sqrt{q}}\right)\right]^2} \\ &= -U_0 \operatorname{sech}^2\left(\alpha^3 x + \frac{\alpha \arctan\left(\frac{x}{\sqrt{q}}\right)}{\sqrt{q}}\right). \end{aligned} \quad (4.28)$$

Calculando el segundo sumando de (3.24)

$$\begin{aligned} \frac{m''(x)}{m(x)} &= \frac{-4\alpha^2(x^2 + q)(-3x^2 + q) + 20x^2 - 4q}{(\alpha^2(x^2 + q)^2 + x^2 + q)^2} \\ -\frac{7}{4} \left(\frac{m'(x)}{m(x)}\right)^2 &= -\frac{28x^2}{(\alpha^2(x^2 + q)^2 + x^2 + q)^2} \\ \frac{1}{8m(x)} \left[\frac{m''(x)}{m(x)} - \frac{7}{4} \left(\frac{m'(x)}{m(x)}\right)^2\right] &= \frac{\alpha^2(x^2 + q)(3x^2 - q) - 2x^2 - q}{2(\alpha^2(x^2 + q) + 1)^4}. \end{aligned} \quad (4.29)$$

sustituyendo (4.28) y (4.29) en (3.24) se obtiene el potencial correspondiente a la ecuación de Schrödinger con PDM. Esta ecuación se escribe como

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dx} \left(\frac{1}{m(x)} \frac{du(x)}{dx} \right) + V(x)u(x) = Eu(x) \quad (4.30)$$

donde

$$m(x) = \left(\frac{1}{x^2 + q} + \alpha^2 \right)^2, \quad (4.31)$$

$$V(x) = -MU_0 \operatorname{sech}^2 \left(\alpha^3 x + \frac{\alpha \arctan \left(\frac{x}{\sqrt{q}} \right)}{\sqrt{q}} \right) + \hbar^2 \frac{\alpha^2 (x^2 + q)(3x^2 - q) - 2x^2 - q}{2(\alpha^2 (x^2 + q) + 1)^4} \quad (4.32)$$

$$E = -\frac{\hbar^2 \alpha^2}{2} (\beta - 1 - n)^2, \quad 0 \leq n \leq \beta - 1. \quad (4.33)$$

IV.2.3 Potencial Scarf II hiperbólico

La ecuación de Schrödinger unidimensional con masa constante M

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2 \psi(y)}{dy^2} + V(y)\psi(y) = \varepsilon \psi(y)$$

donde

$$V(y) = A^2 + \left(B^2 - A^2 - \frac{A\alpha\hbar}{\sqrt{2M}} \right) \operatorname{sech}^2(\alpha y) + B \left(2A + \frac{\alpha\hbar}{\sqrt{2M}} \right) \operatorname{sech}(\alpha y) \tanh(\alpha y),$$

es el potencial conocido como Scarf II hiperbólico (Levai, 1989; De et al., 1992), tiene solución analítica. Sus eigenvalores están dados por

$$\varepsilon_n = A^2 - \left(A - \frac{n\alpha\hbar}{\sqrt{2M}} \right)^2, \quad 0 \leq n \leq \frac{\sqrt{2M}A}{\alpha\hbar}, \quad n \in \mathbb{N}.$$

Considérese la distribución de masa $m(x) = (\tanh^2 x + \alpha^2)^2$, donde $\alpha > 0$, para construir una ecuación de Schrödinger con PDM exactamente soluble. Con el fin de aplicar la transformación PCT, se requiere calcular

$$f(x) = \int m(x)^{1/2} dx = (\alpha^2 + 1)x + \tanh x,$$

de donde

$$V(f(x)) = A^2 + \left(B^2 - A^2 - \frac{A\alpha\hbar}{\sqrt{2M}} \right) \operatorname{sech}^2 [\alpha(\alpha^2 + 1)x + \alpha \tanh x] \\ + B \left(2A + \frac{\alpha\hbar}{\sqrt{2M}} \right) \operatorname{sech} [\alpha(\alpha^2 + 1)x + \alpha \tanh x] \tanh [\alpha(\alpha^2 + 1)x + \alpha \tanh x],$$

y además

$$\frac{m''(x)}{m(x)} = \frac{-20 \operatorname{sech}^6 x + 4(3\alpha^2 + 7) \operatorname{sech}^4 x - 8(\alpha^2 + 1) \operatorname{sech}^2 x}{(\tanh^2 x + \alpha^2)^2}, \\ -\frac{7}{4} \left(\frac{m'(x)}{m(x)} \right)^2 = -\frac{28 \operatorname{sech}^4 x \tanh^2 x}{(\tanh^2 x + \alpha^2)^2}, \\ \frac{1}{8m(x)} \left[\frac{m''(x)}{m(x)} - \frac{7}{4} \left(\frac{m'(x)}{m(x)} \right)^2 \right] = \frac{2 \operatorname{sech}^6 x + 3\alpha^2 \operatorname{sech}^4 x - 2(\alpha^2 + 1) \operatorname{sech}^2 x}{2(\tanh^2 x + \alpha^2)^4},$$

sustituyendo lo anterior en (3.24) se obtiene el potencial asociado a una ecuación de Schrödinger unidimensional con PDM exactamente soluble que tiene la forma

$$-\frac{\hbar}{2} \frac{d}{dx} \left(\frac{1}{m(x)} \frac{du(x)}{dx} \right) + V(x)u(x) = Eu(x) \quad (4.34)$$

donde

$$m(x) = (\tanh^2 x + \alpha^2)^2, \quad (4.35)$$

$$V(x) = MA^2 + M \left(B^2 - A^2 - \frac{A\alpha\hbar}{\sqrt{2M}} \right) \operatorname{sech}^2 [\alpha(\alpha^2 + 1)x + \alpha \tanh x] \\ + MB \left(2A + \frac{\alpha\hbar}{\sqrt{2M}} \right) \operatorname{sech} [\alpha(\alpha^2 + 1)x + \alpha \tanh x] \tanh [\alpha(\alpha^2 + 1)x + \alpha \tanh x] \\ + \hbar^2 \frac{2 \operatorname{sech}^6 x + 3\alpha^2 \operatorname{sech}^4 x - 2(\alpha^2 + 1) \operatorname{sech}^2 x}{2(\tanh^2 x + \alpha^2)^4}, \quad (4.36)$$

$$E = A^2 - \left(A - \frac{n\alpha\hbar}{\sqrt{2M}} \right)^2, \quad 0 \leq n \leq \frac{\sqrt{2M}A}{\alpha\hbar}, \quad n \in \mathbb{N}. \quad (4.37)$$

IV.3. Cálculo de eigenvalores para la ecuación de Schrödinger con masa dependiente de la posición

En este apartado se consideran algunos ejemplos exactamente solubles de la ecuación de Schrödinger con masa variable y se calculan los eigenvalores de estos problemas

numéricamente, mediante la ecuación de dispersión (4.21), con el fin de compararlos con los valores exactos correspondientes. En la primera sección se describe el algoritmo que se utilizó para calcular numéricamente los eigenvalores de los distintos ejemplos presentados. Posteriormente se muestran los ejemplos y los resultados obtenidos.

IV.3.1 Implementación numérica

El software utilizado en esta tesis fue Matlab. A continuación se presentan los pasos que se siguieron para calcular los eigenvalores de cada uno de los ejemplos considerados.

- De acuerdo al comportamiento asintótico de la masa $m(x)$ y el potencial $V(x)$, se construyen los coeficientes $P(x)$, $Q(x)$ y $R(x)$ de la forma (1.2).
- Se elige el valor de N que representa el número de términos de la serie en la ecuación de dispersión (4.21) y determinará el grado del polinomio cuyas raíces nos interesan. También se elige el número de puntos *NoPts* que formarán una partición uniforme para la integración utilizada al calcular las funciones $\tilde{X}^n(x)$, $X^n(x)$, $\tilde{Y}^n(x)$ y $Y^n(x)$ en el intervalo $[-h, h]$.
- Para el caso real, se construyen las potencias formales $\tilde{Y}^n(x)$, $Y^n(x)$ que forman las soluciones y_1, y_2 en (4.11) y con éstas la solución particular u_0 en (4.10). Así mismo se construye la derivada de la solución particular a partir de las mismas potencias formales $\tilde{Y}^n(x)$, $Y^n(x)$. La solución particular y su derivada se evalúan en el punto h . Para el caso complejo la construcción de la solución particular varía dependiendo del ejemplo que se considere.
- Se calculan las potencias $\tilde{X}^n(x)$ y $X^n(x)$ y se evalúan en el punto h .
- Se calculan los coeficientes del polinomio de grado N definidos en (4.21).
- Se calculan las raíces del polinomio cuyos coeficientes se obtuvieron en el paso anterior. Para el caso real, las raíces se pueden calcular de dos maneras. La primera es utilizando la rutina de Matlab *roots*. La segunda consiste en representar al polinomio en un intervalo mediante un spline (con la rutina *spline*) y calcular sus raíces con la rutina *fzzeros*. Para el caso complejo la primera de las anteriores se utiliza.
- De las raíces del polinomio obtenidas se eligen aquellas que son aproximaciones a los eigenvalores del problema considerado. Para el caso real esto se puede realizar de dos maneras.
 1. La primera es cuando las raíces se han calculado con *roots* y se eligen las raíces cuya parte imaginaria es cercana a cero.

2. La segunda es cuando se calculan las raíces con *fnzeros* y consiste en considerar el intervalo definido por $\left[0, \sqrt{\min q(x)r_1/p_1}\right)$, que nos asegura que en este intervalo las raíces del polinomio son precisamente los eigenvalores del problema y por tanto al calcular las raíces en ese intervalo se obtendrán los eigenvalores requeridos.

Para el caso complejo, se aplica el teorema de Rouché para seleccionar de las raíces del polinomio aquellas que en realidad son aproximaciones de los eigenvalores del problema, ver ejemplo 4.3.7.

La integración utilizada para calcular las integrales involucradas en las potencias formales fue con la fórmula del método Newton-Cotes de 6 puntos. En algunos ejemplos también se utilizó la rutina *fnint* de Matlab con propósitos de comparación con el método anterior.

En cada ejemplo de experimentación numérica considerado en esta tesis se presentan los eigenvalores obtenidos con la técnica propuesta (bajo la leyenda "SPPS"), los valores exactos y en algunos casos los obtenidos por otros autores. También se muestran los valores absolutos entre los valores exactos y los de cada autor, para una mejor interpretación de los resultados. Se consideran tres parámetros: *Cputime* que es el tiempo que tomó el programa en Matlab en calcular los eigenvalores para el problema en cuestión, *N* el número de términos en la serie de la ecuación de dispersión (4.21) y *NoPts* que es la cantidad de puntos considerados para la integración numérica de las potencias formales.

IV.3.2 Pozo cuántico rectangular

Considere el problema de Sturm-Liouville (4.22),(4.23). En física cuántica la ecuación (4.22) es una ecuación de Schrödinger que describe el movimiento de una partícula en dos posibles estructuras: un pozo cuántico rectangular o una barrera. El primer caso ya se ha descrito anteriormente. Con respecto al segundo, la ecuación describe a una partícula que se mueve hacia la derecha y que choca en la barrera (representada por el potencial), existen dos posibilidades, que la partícula siga su trayectoria a través de la barrera o que sea reflejada por ésta misma. De cualquier forma la probabilidad de que sucedan ambas opciones se puede calcular mediante la ecuación de Schrödinger. Sin embargo para ello primero es necesario conocer los valores del parámetro λ .

La ecuación de dispersión (representación analítica) de este problema es:

$$(\mu + \psi)(\nu + \psi)e^{2a\psi} - (\mu - \psi)(\nu - \psi)e^{-2a\psi} = 0, \quad (4.38)$$

donde $\psi = \sqrt{\frac{\lambda r - q}{p}}$, $\mu = \sqrt{\frac{\lambda r_1}{p_1}}$, $\nu = \sqrt{\frac{\lambda r_2}{p_2}}$.

En este ejemplo se considera un pozo cuántico para el cuál existe sólo un eigenvalor. Los

valores de los parámetros respectivos que se tomaron fueron $h = 1, p_1 = -6, p_2 = 9, p = -11, q = -13, r_1 = 5, r_2 = -1/2, r = 1/2$. La tabla 4.1 muestra el eigenvalor calculado con la ecuación (4.38) y con la ecuación (4.21), como se puede observar se obtuvo un resultado bastante preciso. Se consideraron $N = 80$ términos en la serie de la ecuación de dispersión

λ (Ec. 4.38)	λ (SPPS)	Error Absoluto
-7.511647826709273	-7.511647826706495	2.7773e-012

Tabla 4.1: Eigenvalor para un pozo rectangular.

(4.21) y una partición uniforme de 8000 puntos. La ecuación (4.38) se resolvió utilizando la función *fsolve* de Matlab.

IV.3.3 Potencial Pöschl-Teller modificado con masa constante

Considere la ecuación de Schrödinger unidimensional con masa constante M

$$-\frac{\hbar^2}{2M}u''(x) + V(x)u(x) = Eu(x) \quad (4.39)$$

donde $V(x)$ es el llamado potencial Pöschl-Teller modificado

$$V(x) = -\frac{\hbar^2}{2M}\alpha^2\frac{\beta(\beta-1)}{\cosh^2\alpha x},$$

con $x \in (-\infty, \infty)$, y α, β parámetros que representan la amplitud y la profundidad del pozo cuántico, respectivamente. Este es un ejemplo importante ya que tiene la ventaja de tener solución analítica. Los eigenvalores de (4.39) están dados por la fórmula (Harrison, 2006)

$$E_n = -\frac{\hbar^2\alpha^2}{2M}(\beta-1-n)^2, \quad n < \beta-1. \quad (4.40)$$

Observe que aunque el potencial se extiende sobre todo el eje real, el valor absoluto de éste tiende hacia 0 cuando $x \rightarrow \pm\infty$, de manera que se puede aplicar la aproximación descrita en la sección 3.3 y por tanto utilizar la ecuación de dispersión (4.21) para aproximar los eigenvalores del problema original. La figura 4.1 muestra este comportamiento, sin embargo es importante señalar que el potencial no tiende tan rápido hacia cero conforme x se hace grande. Por esta razón para aplicar dicha aproximación el intervalo de truncamiento que se toma no es pequeño, por ejemplo el valor de $V(\pm 200) = -1.0548e-04$ para $\beta = 10$ y $V(\pm 200) = -2.3441e-06$ para $\beta = 2$.

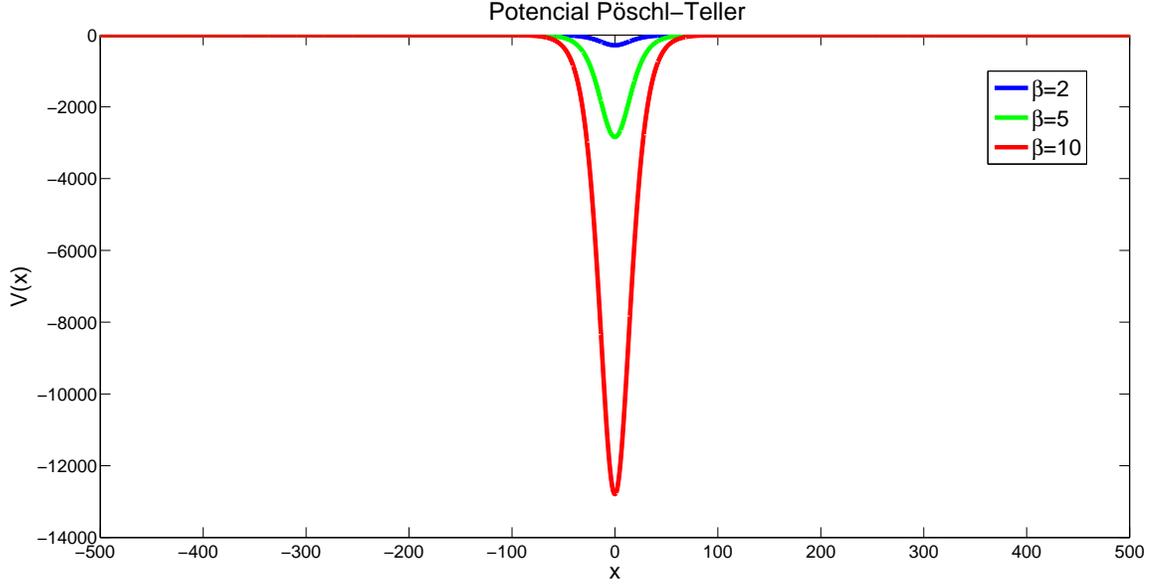


Figura 4.1: Gráficas del potencial Pöschl-Teller modificado con masa constante para los valores del parámetro $\beta = 2, 5, 10$.

Aplicando dicha adaptación, se obtiene una ecuación del tipo (1.1) sujeta a la condición (1.3) cuyos coeficientes están definidos por

$$P(x) = \begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2M} & x < -h \\ -\frac{\hbar^2}{2M} & -h \leq x \leq h, \\ -\frac{\hbar^2}{2M} & x > h \end{cases}, \quad Q(x) = \begin{cases} 0 & x < -h \\ V(x) & -h \leq x \leq h, \\ 0 & x > h \end{cases}, \quad (4.41)$$

$$R(x) = \begin{cases} 1 & x < -h \\ 1 & -h \leq x \leq h, \\ 1 & x > h \end{cases}$$

de manera que $E_n \approx \lambda_n$. Las tablas 4.2-4.5 presentan los eigenvalores E_n obtenidos de forma analítica (utilizando 4.40) y los calculados con la ecuación de dispersión (4.21) para diferentes valores de β . Se consideraron los valores de los parámetros $\alpha = 0.05, \beta = 1.5, 2, 5, 10$, $\hbar = 87.292744948 \text{ \AA} \sqrt{m_0 \text{ meV}}$ y $M = 0.067 m_0$.

$\beta = 1.5$					
n	λ_n (exacta)	λ_n (Harrison, 2006)		λ_n (SPPS)	
	(meV)	(meV)	Error Absoluto	(meV)	Error Absoluto
0	-35.541153547372119	-35.442724	9.8430e-2	-35.541153547357645	1.447376e-11

Tabla 4.2: Eigenvalores para el potencial Pöschl-Teller modificado con masa constante. $Cputime=72.95s$, $N=150$, $NoPts=40000$, $h=200$.

$\beta = 2$					
n	λ_n (exacta)	λ_n (Harrison, 2006)		λ_n (SPPS)	
	(meV)	(meV)	Error Absoluto	(meV)	Error Absoluto
0	-142.164614189488470	-142.178093	1.3479e-2	-142.164614189511670	2.319211e-11

Tabla 4.3: Eigenvalores para el potencial Pöschl-Teller modificado con masa constante. $Cputime=72.75s$, $N=150$, $NoPts=40000$, $h=200$.

$\beta = 5$					
n	E_n (exacta)	E_n (Harrison, 2006)		E_n (SPPS)	
	(meV)	(meV)	Error Absoluto	(meV)	Error Absoluto
0	-2274.633827031815600	-2274.633858	3.0968e-5	-2274.633827030275400	1.540229e-09
1	-1279.481527705396300	-1279.481631	1.0329e-4	-1279.481527700092800	5.303491e-09
2	-568.658456757953900	-	-	-568.658456756403440	1.550461e-09
3	-142.164614189488470	-	-	-142.164614198935480	9.447007e-09

Tabla 4.4: Eigenvalores para el potencial Pöschl-Teller modificado con masa constante. $Cputime=79.85s$, $N=170$, $NoPts=40000$, $h=220$.

$\beta = 10$					
n	E_n (exacta)	E_n (Harrison, 2006)		E_n (SPPS)	
	(meV)	(meV)	Error Absoluto	(meV)	Error Absoluto
0	-11515.333749348562338	-11517.014128	1.6804	-11515.33636483042	2.6155e-3
1	-9098.5353081272591316	-9105.712331	7.1770	-9098.53532305413	1.4927e-5
2	-6966.066095284932772	-	-	-6966.0660960899	8.0497e-7
3	-5117.926110821583261	-	-	-5117.92611650225	5.6807e-6
4	-3554.115354737210598	-	-	-3554.11536436294	9.6257e-6
5	-2274.633827031814782	-	-	-2274.63383017386	3.1420e-6
6	-1279.481527705395815	-	-	-1279.48153290138	5.1960e-6
7	-568.658456757953695	-	-	-568.65845565096	1.1070e-6
8	-142.164614189488423	-	-	-142.16425060699	3.6358e-4

Tabla 4.5: Eigenvalores para el potencial Pöschl-Teller modificado con masa constante. $Cputime=478.82s$, $N = 200$, $NoPts = 100000$, $h = 250$.

Como se puede observar en las tablas 4.2-4.5 los resultados obtenidos con la técnica propuesta en general son muy precisos. Conforme el valor de β , es decir la profundidad del pozo, aumenta la cantidad de niveles de energía posibles para la partícula también incrementa, perdiéndose un poco de precisión al calcular estos valores.

IV.3.4 Masa efectiva variable

Considere una partícula (electrón o hueco de electrón) dentro de un pozo cuántico rectangular de amplitud l_w (fig. 4.2) con la característica de que en cada capa de distinto material la masa de la partícula es diferente, en las barreras tiene masa m_b mientras que en el pozo m_w . De acuerdo a la aproximación de la masa efectiva, los estados de la partícula se pueden describir con la ecuación de Schrödinger en cada región respectiva, donde el potencial $V(x)$ representa las discontinuidades provocadas por la diferencia entre las bandas prohibidas de cada material

$$\begin{aligned}
-\frac{\hbar^2}{2m_b^*}u''(x) + V(x)u(x) &= Eu(x), & x \leq -\frac{l_w}{2} \\
-\frac{\hbar^2}{2m_w^*}u''(x) &= Eu(x), & -\frac{l_w}{2} \leq x \leq \frac{l_w}{2} \\
-\frac{\hbar^2}{2m_b^*}u''(x) + V(x)u(x) &= Eu(x), & \frac{l_w}{2} \leq x
\end{aligned} \tag{4.42}$$

sujetas a las condiciones

$$\frac{1}{m^*(x)} \frac{du(x)}{dx}, u(x) \in C(-\infty, \infty) \quad \text{y} \quad \int_{-\infty}^{\infty} |u(x)|^2 dx < \infty,$$

donde $m^*(x) = m_w^*(x)$ para $x \in [-\frac{l_w}{2}, \frac{l_w}{2}]$ y $m^*(x) = m_b^*(x)$ en otro caso. Los eigenvalores asociados a este problema vienen dados por las soluciones de las ecuaciones (Harrison, 2006):

$$\frac{k}{m_w^*} \tan\left(\frac{kl_w}{2}\right) - \frac{\kappa}{m_b^*} = 0, \quad \text{para } n \text{ par} \quad (4.43)$$

$$\frac{k}{m_w^*} \cot\left(\frac{kl_w}{2}\right) + \frac{\kappa}{m_b^*} = 0, \quad \text{para } n \text{ impar} \quad (4.44)$$

donde

$$k = \frac{\sqrt{2m_w^*E_n}}{\hbar}, \quad \kappa = \frac{\sqrt{2m_b^*(V - E_n)}}{\hbar}.$$

Para aplicar la ecuación de dispersión (4.21) hay que reescribir adecuadamente las ecuaciones de Schrödinger (4.42). Debido a que al calcular la ecuación de dispersión se hizo la suposición de que $\alpha_1 = \alpha_2 = 0$ en (1.2), entonces es necesario reescribir las ecuaciones (4.42) como

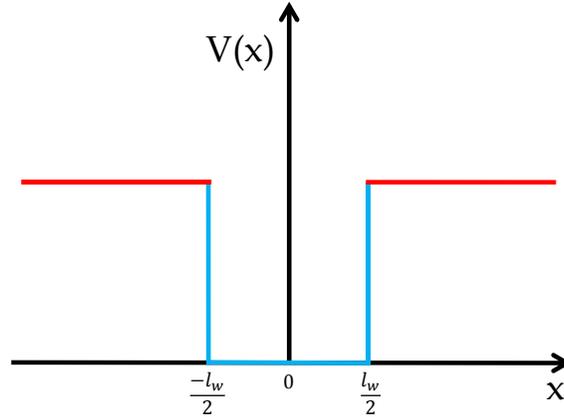


Figura 4.2: Potencial asociado a un pozo cuántico rectangular

Debido a que al calcular la ecuación de dispersión se hizo la suposición de que $\alpha_1 = \alpha_2 = 0$ en (1.2), entonces es necesario reescribir las ecuaciones (4.42) como

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m_b^*} u''(x) &= [E - V(x)] u(x), & x \leq -\frac{l_w}{2}, \\ -\frac{\hbar^2}{2m_w^*} u''(x) - V(x)u(x) &= [E - V(x)] u(x), & -\frac{l_w}{2} \leq x \leq \frac{l_w}{2}, \\ -\frac{\hbar^2}{2m_b^*} u''(x) &= [E - V(x)] u(x), & \frac{l_w}{2} \leq x, \end{aligned}$$

de esta manera las ecuaciones resultantes satisfacen la suposición mencionada y es posible utilizar la ecuación de dispersión (4.21). En (1.2) se toman los coeficientes $p(x) = -\frac{\hbar^2}{2m_w^*}$, $p_1 = p_2 = -\frac{\hbar^2}{2m_b^*}$, $q(x) = -V(x)$, $\alpha_1 = \alpha_2 = 0$ y $r(x) = r_1 = r_2 = 1$. Los eigenvalores obtenidos con (4.21) corresponderán a $\lambda = E - V(x)$, por tanto los eigenvalores de interés se obtienen con la relación $E = \lambda + V(x)$.

Las tablas 4.6 a 4.13 presentan las soluciones obtenidas al resolver las ecuaciones (4.43),(4.44) con la función *fsolve* y las obtenidas utilizando la ecuación de dispersión (4.21) al considerar un pozo cuántico (formado por GaAs) rodeado por las barreras de Ga_{0.8}Al_{0.2}As. En este caso el potencial en las barreras es constante $V = 167.098$ meV, y los valores de los parámetros involucrados son $\hbar = 87.292744948 \text{ \AA} \sqrt{m_0 \text{meV}}$, $m_w = 0.067 m_0$, $m_b = 0.0836 m_0$. Se toman diversos valores de la amplitud del pozo l_w , esto es $h = \frac{l_w}{2}$.

$l_w = 20(\text{\AA})$			
n	E_n (exacta)	E_n (SPPS)	
	(meV)	(meV)	Error Absoluto
1	126.22762005773041476	126.2276200577274	3.0127e-12

Tabla 4.6: Eigenvalores para pozo cuántico rectangular de amplitud 20 Å. *CPUtime* = 12.02s, $N = 120$, *NoPts* = 20000, $h = 10$.

$l_w = 40(\text{\AA})$			
n	E_n (exacta)	E_n (SPPS)	
	(meV)	(meV)	Error Absoluto
1	80.111241939480241257	80.111241939554262	7.4024e-11

Tabla 4.7: Eigenvalores para pozo cuántico rectangular de amplitud 40 Å. *CPUtime* = 11.92s, $N = 120$, *NoPts* = 20000, $h = 20$.

$l_w = 60(\text{\AA})$			
n	λ_n (exacta)	λ_n (SPPS)	
	(meV)	(meV)	Error Absoluto
1	53.276362542984325739	53.2763625429674	1.6925e-11
2	166.52155641760602249	166.5215564176072	1.1652e-12

Tabla 4.8: Eigenvalores para pozo cuántico rectangular de amplitud 60 Å. *CPUtime* = 11.85s, $N = 120$, *NoPts* = 20000, $h = 30$.

$l_w = 80(\text{\AA})$			
n	λ_n (exacta)	λ_n (SPPS)	
	(meV)	(meV)	Error Absoluto
1	37.619785300312372375	37.6197853002580	1.2559e-10
2	137.33008771793937657	137.3300877179391	2.5579e-13

Tabla 4.9: Eigenvalores para pozo cuántico rectangular de amplitud 80 \AA . $CPUtime = 495.99s$, $N = 120$, $NoPts = 20000$, $h = 40$.

$l_w = 100(\text{\AA})$			
n	λ_n (exacta)	λ_n (SPPS)	
	(meV)	(meV)	Error Absoluto
1	27.884788613103472517	27.8847886130916	1.1873e-11
2	106.55777103089106761	106.5577710308724	1.8658e-11

Tabla 4.10: Eigenvalores para pozo cuántico rectangular de amplitud 100 \AA . $CPUtime = 11.84s$, $N = 120$, $NoPts = 20000$, $h = 50$.

$l_w = 120(\text{\AA})$			
n	λ_n (exacta)	λ_n (SPPS)	
	(meV)	(meV)	Error Absoluto
1	21.463955511816535478	21.4639555121317	3.1516e-10
2	83.606705829717346341	83.6067058300290	3.1165e-10
3	165.29389827860004751	165.2938982786010	9.6633e-13

Tabla 4.11: Eigenvalores para pozo cuántico rectangular de amplitud 120 \AA . $CPUtime = 23.85s$, $N = 140$, $NoPts = 30000$, $h = 60$.

$l_w = 160(\text{\AA})$			
n	λ_n (exacta)	λ_n (SPPS)	
	(meV)	(meV)	Error Absoluto
1	13.820465125431847813	13.8204651245037	9.2814e-10
2	54.647097556553531779	54.6470975540213	2.5322e-09
3	118.97147809599959075	118.9714780931141	2.8854e-09

Tabla 4.12: Eigenvalores para pozo cuántico rectangular de amplitud 160 \AA . $CPUtime = 38.09s$, $N = 150$, $NoPts = 40000$, $h = 80$.

$l_w = 200(\text{\AA})$			
n	λ_n (exacta)	λ_n (SPPS)	
	(meV)	(meV)	Error Absoluto
1	9.6293890573455545871	9.6293890534170	3.9285e-09
2	38.282361745585340701	38.2823617410092	4.5761e-09
3	84.893622349596418329	84.8936223498354	2.3898e-10
4	144.96039583021339785	144.9603958280937	2.1196e-09

Tabla 4.13: Eigenvalores para pozo cuántico rectangular de amplitud 200 Å. $CPUtime = 38.08s$, $N = 150$, $NoPts = 40000$, $h = 100$.

Como se puede observar en las tablas 4.6 a 4.13 al incrementar la amplitud del pozo cuántico se va perdiendo precisión en los eigenvalores. Sin embargo incluso para un pozo de amplitud 200 Å las aproximaciones obtenidas en un sólo cálculo fueron muy buenas y sobre todo en poco tiempo. El tipo de integración utilizado fue la fórmula de Newton-Cotes de 6 puntos. El programa mediante el cuál se obtuvieron todos los resultados anteriores se presenta en el apéndice (A.1).

Ahora se considera un pozo cuántico cuyas barreras están formadas por el compuesto $Ga_{0.25}Al_{0.75}As$ y el pozo por GaAs. Se sigue el mismo procedimiento que en el ejemplo anterior sólo que los valores de los coeficientes de las ecuaciones (4.42) son diferentes. Las tablas 4.14 a 4.21 muestran los eigenvalores obtenidos al resolver las ecuaciones (4.43), (4.44) con la rutina *fsolve*, los calculados con la ecuación de dispersión (4.21) y los obtenidos en (Harrison, 2006). Se presentan los errores absolutos entre los valores aproximados y los exactos. El potencial considerado en las barreras fue $V = 626.6175$ meV y los valores de los parámetros fueron $\hbar = 87.292744948 \text{ \AA} \sqrt{m_0 \text{meV}}$, $m_w = 0.067 m_0$, $m_b = 0.12925 m_0$.

$l_w = 20(\text{\AA})$					
n	λ_n (exacta)	λ_n (Harrison, 2006)		λ_n (SPPS)	
	(meV)	(meV)	Error Absoluto	(meV)	Error Absoluto
1	270.764969120675124	270.762139	2.8301e-3	270.7649690923558	2.8319e-8

Tabla 4.14: Eigenvalores para un pozo cuántico rectangular de amplitud 20 Å. $CPUtime = 15.47s$, $N = 150$, $NoPts = 20000$, $h = 10$.

$l_w = 40(\text{\AA})$					
n	$\lambda_n(\text{exacta})$	$\lambda_n(\text{Harrison, 2006})$		$\lambda_n(\text{SPPS})$	
	(meV)	(meV)	Error Absoluto	(meV)	Error Absoluto
1	129.450671400739412	129.247261	2.0341e-1	129.4506714002840	4.5542e-10
2	512.393112742520306	512.047324	3.4579e-1	512.3931127426460	1.2573e-10

Tabla 4.15: Eigenvalores para un pozo cuántico rectangular de amplitud 40 Å. $CPUtime = 16.78s$, $N = 150$, $NoPts = 20000$, $h = 20$.

$l_w = 60(\text{\AA})$					
n	$\lambda_n(\text{exacta})$	$\lambda_n(\text{Harrison, 2006})$		$\lambda_n(\text{SPPS})$	
	(meV)	(meV)	Error Absoluto	(meV)	Error Absoluto
1	75.774671913609358	75.669905	1.0477e-1	75.7746719199033	6.2939e-09
2	307.023048741088826	306.736857	2.8619e-1	307.0230487480563	6.9674e-09
3	626.551039573782654	-	-	626.5510395737990	1.6370e-11

Tabla 4.16: Eigenvalores para un pozo cuántico rectangular de amplitud 60 Å. $CPUtime = 21.55s$, $N = 150$, $NoPts = 20000$, $h = 30$.

$l_w = 80(\text{\AA})$					
n	$\lambda_n(\text{exacta})$	$\lambda_n(\text{Harrison, 2006})$		$\lambda_n(\text{SPPS})$	
	(meV)	(meV)	Error Absoluto	(meV)	Error Absoluto
1	49.774623537869715714	49.715086	5.9538e-2	49.7746235438623	5.9926e-09
2	201.17684262232593993	200.986873	1.8997e-1	201.1768426254812	3.1553e-09
3	451.29731467884571182	-	-	451.2973146837592	4.9135e-9

Tabla 4.17: Eigenvalores para un pozo cuántico rectangular de amplitud 80 Å. $CPUtime = 19.45s$, $N = 150$, $NoPts = 20000$, $h = 40$.

$l_w = 100(\text{\AA})$					
n	λ_n (exacta)	λ_n (Harrison, 2006)		λ_n (SPPS)	
	(meV)	(meV)	Error Absoluto	(meV)	Error Absoluto
1	35.204788280066753481	35.168092	3.6696e-2	35.2047882833708	3.3041e-9
2	141.85128839399221975	141.724429	1.2686e-1	141.8512883822391	1.1753e-8
3	320.64546530093256937	-	-	320.6454653031178	2.1852e-9
4	559.06164033905925716	-	-	559.0616403326302	6.4291e-9

Tabla 4.18: Eigenvalores para un pozo cuántico rectangular de amplitud 100 Å. $CPUtime = 20.65s$, $N = 150$, $NoPts = 20000$, $h = 50$.

$l_w = 120(\text{\AA})$					
n	λ_n (exacta)	λ_n (Harrison, 2006)		λ_n (SPPS)	
	(meV)	(meV)	Error Absoluto	(meV)	Error Absoluto
1	26.217761120146589218	26.193670	2.4091e-2	26.2177602431234	8.7702e-7
2	105.41130613842327427	105.323933	8.7373e-2	105.4113039242876	2.2141e-6
3	238.37887942407942044	-	-	238.3788769950708	2.4290e-6
4	423.11008503703880253	-	-	423.1100838523584	1.1847e-6
5	626.38139165921026712	-	-	626.3813916592576	4.7294e-11

Tabla 4.19: Eigenvalores para un pozo cuántico rectangular de amplitud 120 Å. $CPUtime = 27.42s$, $N = 150$, $NoPts = 20000$, $h = 60$.

$l_w = 160(\text{\AA})$					
n	λ_n (exacta)	λ_n Harrison (2006)		λ_n (SPPS)	
	(meV)	(meV)	Error Absoluto	(meV)	Error Absoluto
1	16.158834931386001924	16.146909	1.1926e-2	16.1588335597974	1.3716e-6
2	64.812071375490374469	64.766509	4.5562e-2	64.8120702411479	1.1343e-6
3	146.33898455551311671	-	-	146.3389843920223	1.6349e-7
4	260.85954315338342181	-	-	260.8595414184626	1.7349e-6
5	407.16935465366179877	-	-	407.1693543572649	2.9640e-7
6	577.39086985174281432	-	-	577.3908692247814	6.2696e-7

Tabla 4.20: Eigenvalores para un pozo cuántico rectangular de amplitud 160 Å. $CPUtime = 37.98s$, $N = 150$, $NoPts = 40000$, $h = 80$.

$l_w = 200(\text{\AA})$					
n	λ_n	λ_n (Harrison, 2006)		λ_n (SPPS)	
	(meV)	(meV)	Error Absoluto	(meV)	Error Absoluto
1	10.949827093171095838	10.943102	6.7251e-3	10.9498276477422	5.5457e-7
2	43.86923332595333178	43.842871	2.6362e-2	43.8692352157203	1.8898e-6
3	98.928711303572961037	-	-	98.9287153485284	4.0450e-6
4	176.28423437150609078	-	-	176.2842410114716	6.6400e-6
5	275.87101698888409817	-	-	275.8710262954573	9.3066e-6
6	396.95855948919252722	-	-	396.9585711704029	1.1681e-5
7	536.36941504011152374	-	-	536.3694283508925	1.3311e-5

Tabla 4.21: Eigenvalores para un pozo cuántico rectangular de amplitud 200\AA .
CPUtime = 42.72s, $N = 200$, *NoPts* = 40000, $h = 100$.

Como se puede observar en los dos ejemplos anteriores la precisión obtenida con la técnica propuesta es superior a la de (Harrison, 2006). Además se presenta la ventaja de que todos los eigenvalores se obtienen en un sólo cálculo y no se calculan uno por uno a diferencia de (Harrison, 2006) en donde utilizan el método de disparo. El código utilizado para calcular todos los eigenvalores de las tablas 4.14 a 4.21 se muestra en el apéndice (A.2). Se consideró la integración basada en la fórmula de Newton-Cotes de 6 puntos.

En la tabla 4.22 se comparan los eigenvalores obtenidos con las ecuaciones (4.43), (4.44), con la ecuación de dispersión (4.21) y los obtenidos por los autores (Nakamura et al., 1989) y (Jonsson and Eng, 1990), para un pozo cuántico rectangular de altura $V = 225 \text{ meV}$ y amplitud $l_w = 200 \text{\AA}$, formado por GaAs cuyas barreras son de $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$.

Tabla 4.22: Eigenvalores para un pozo cuántico rectangular de altura 225 meV y amplitud 200\AA .
Cputime = 267.177492, $N = 120$, *Npts* = 120000, $h = 100$.

n	λ_n (exacta)	λ_n^a	λ_n^b	λ_n (SPPS)	
	(meV)	(meV)	(meV)	(meV)	Error Absoluto
1	9.9656824070385609005	9.997	9.996	9.9656824948422	8.7803e-08
2	39.765875503174519559	39.77	39.77	39.7658757358468	2.3267e-07
3	88.920439205390700799	88.93	88.92	88.9204394679732	2.6258e-07
4	155.5860945054416616	155.61	155.59	155.5860946350282	1.2958e-07
5	224.98560882618537793	-	-	224.9856088258230	3.6237e-10

^a(Nakamura et al., 1989)

^b(Jonsson and Eng, 1990)

Los valores de los parámetros utilizados fueron $\hbar = 87.292744948 \text{ \AA} \sqrt{m_0 \text{meV}}$, $m_w = 0.067 m_0$, $m_b = 0.0919 m_0$. De la tabla 4.22 se puede ver que los resultados obtenidos con la técnica propuesta son bastante mejores que los de los otros autores. Una vez más se comprueba que la ecuación de dispersión derivada permite calcular muy buenas aproximaciones a los eigenvalores de la ecuación de Schrödinger con masa variable. El código fuente utilizado para obtener los anteriores valores se presenta en el apéndice (A.3)

IV.3.5 Potencial Pöschl-Teller modificado

Considere la ecuación (4.30) con la masa (4.31), el potencial (4.32) y la condición (1.3), construida en la sección (4.2.2), cuyos eigenvalores están dados por (4.33). Observe que

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} V(x) = 0 \quad \text{y} \quad \lim_{x \rightarrow \pm\infty} m(x) = \alpha^4,$$

de manera que es posible utilizar el procedimiento de la sección (3.3).

Utilizando la idea de la sección (3.3) se puede adaptar el problema (4.30), (4.31), (4.32), (1.3) y aproximar sus eigenvalores mediante la ecuación de dispersión (4.21) asociada al problema (1.1), (1.3) con coeficientes (1.2) dados por

$$P(x) = \begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2\alpha^4} & x < -h \\ -\frac{\hbar^2}{2\left(\frac{1}{x^2+q} + \alpha^2\right)^2} & -h \leq x \leq h, \\ -\frac{\hbar^2}{2\alpha^4} & x > h \end{cases}, \quad Q(x) = \begin{cases} 0 & x < -h \\ V(x) & -h \leq x \leq h, \\ 0 & x > h \end{cases}, \quad (4.45)$$

$$R(x) = \begin{cases} 1 & x < -h \\ 1 & -h \leq x \leq h \\ 1 & x > h \end{cases}$$

donde el valor de h se toma lo más grande posible.

Para el cálculo numérico se consideran los valores de los parámetros $\alpha = 1$, $\beta = 5$, $\hbar = 1$, $M = 1$, $q = 1$ en los respectivos coeficientes (4.31), (4.32) y en (4.33).

Las siguientes figuras muestran diferentes elecciones de h y los respectivos gráficos de los coeficientes $P(x)$, $Q(x)$ en (4.45) (obtenidos al truncar las funciones originales) comparándolos con las funciones del problema original $-\frac{\hbar^2}{2m(x)}$, $V(x)$, respectivamente.

Como se puede apreciar en la figura (4.3) al considerar el valor de $h = 3$ la aproximación del coeficiente $P(x)$ al exacto no es tan buena, por tanto es necesario considerar en

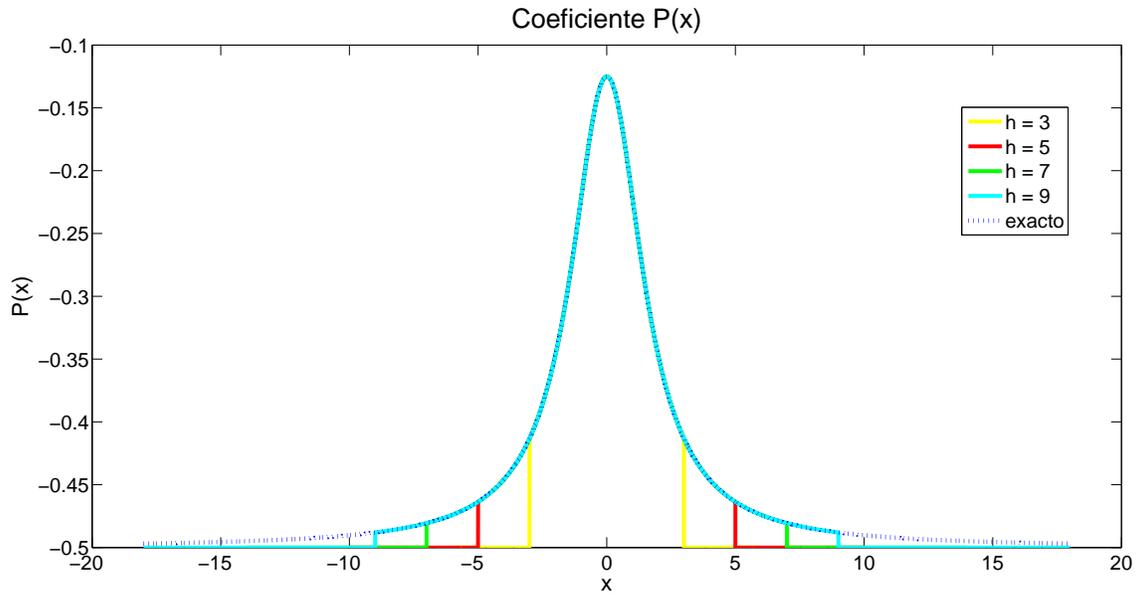


Figura 4.3: Comparación del coeficiente $P(x)$ y el exacto $-\frac{\hbar^2}{2m(x)}$ para diversos valores de h

los cálculos un valor mayor de h para obtener una mejor aproximación. En la figura (4.4) se puede notar que a simple vista las aproximaciones $Q(x)$ no difieren drásticamente de $V(x)$ para los distintos valores de h considerados, sin embargo al acercarse más en los puntos de truncamiento la figura (4.5) nos muestra la diferencia entre la aproximación y el coeficiente exacto para $h = 3$.

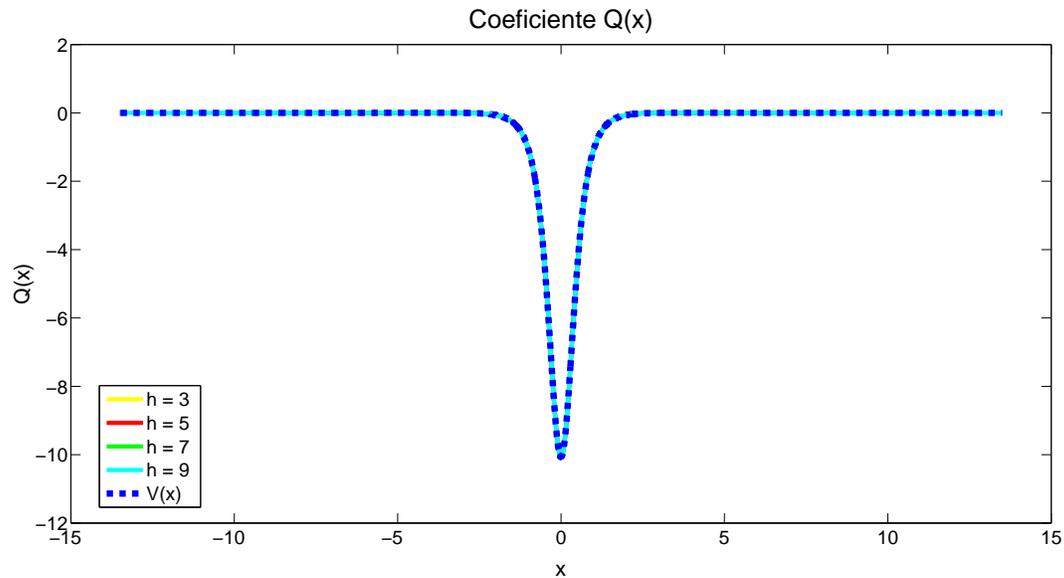


Figura 4.4: Comparación del coeficiente $Q(x)$ y el exacto $V(x)$ para diversos valores de h

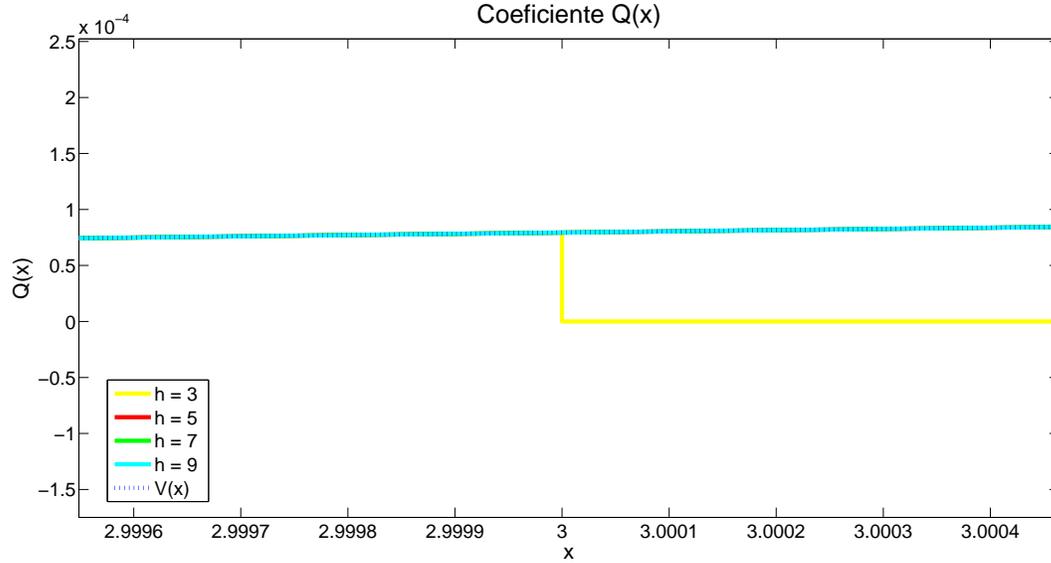


Figura 4.5: Comparación del coeficiente $Q(x)$ y el exacto $V(x)$ para los valores de $h = 9$ y $h = 3$

La siguiente tabla contiene los eigenvalores obtenidos con (4.33) y con la ecuación de dispersión (4.21) asociada al problema (4.30),(4.31),(4.32),(1.3) tomando los valores ya mencionados de los parámetros. En este cálculo se consideró $h = 5$.

n	λ_n (exacta)	λ_n (SPPS)	
	(meV)	(meV)	Error Absoluto
0	-8	-8.000000067347806	6.7348e-8
1	-4.5	-4.499999999777412	2.2259e-10
2	-2	-1.999999999972320	2.7680e-11
3	-0.5	-0.499998185007073	1.8150e-6
4	0	-0.000020016515173	2.0017e-5

Tabla 4.23: Eigenvalores para el potencial Pöschl-Teller modificado con masa variable utilizando la rutina *fnint* para la integración de las potencias formales.

Se truncó la serie (4.21) en $N = 100$ y se utilizó una partición uniforme de $NoPts = 40000$ puntos. El tiempo que tardó el programa para calcular los eigenvalores fue de 2131.4s. La integración de las funciones $\tilde{X}^n(x)$ y $X^n(x)$ presentes en los coeficientes de la serie de la ecuación de dispersión se realizó con la rutina de Matlab *fnint*. De los resultados de la tabla 4.23 se observa que las aproximaciones de los eigenvalores obtenidas con la técnica propuesta

en esta tesis son muy satisfactorios. El código fuente para este ejemplo se encuentra en el apéndice (A.4). La siguiente tabla muestra los resultados para el mismo problema sólo que esta vez se utilizó el método de integración Newton-Cotes de 6 puntos y el valor de $h = 7$.

n	λ_n (exacta)	λ_n (SPPS)	
	(meV)	(meV)	Error Absoluto
0	-8	-8.000000000680899	6.8089e-10
1	-4.5	-4.499999999265324	7.3467e-10
2	-2	-1.999999995519846	4.4801e-09
3	-0.5	-0.499999977319230	2.2680e-08
4	0	-0.000003366362162	3.3663e-06

Tabla 4.24: Eigenvalores para el potencial Pöschl-Teller modificado con masa variable utilizando el método de integración Newton-Cotes de 6 puntos.

En el experimento anterior se utilizaron $N = 130$ términos de la serie en la ecuación de dispersión (4.21) y una partición uniforme de $NoPts = 180,000$ puntos. El tiempo que tardó el programa para calcular los eigenvalores de la tabla anterior fueron 591.86s. El código fuente se presenta en el apéndice A.5. Comparando los resultados obtenidos con los dos métodos de integración se puede ver que en el último caso el error de aproximación fue menor para la mayoría de eigenvalores, es decir, se obtuvo mejores resultados y en mucho menor tiempo.

IV.3.6 Potencial scarf II tipo Hiperbólico

Considere la ecuación de Schrödinger (4.34) sujeta a la condición (1.3), en la cual la masa se define como (4.35) y el potencial es de la forma (4.36). De la sección (4.2.3) se tiene que es exactamente soluble y sus eigenvalores están dados por (4.37). De nuevo, como

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} V(x) = MA^2 \quad \lim_{x \rightarrow \pm\infty} m(x) = (1 + \alpha^2)^2,$$

es posible aplicar la adaptación de la sección (3.3). A saber, truncando las funciones $V(x)$ y $m(x)$ en cierto valor h , los eigenvalores del problema (1.1),(1.3) con coeficientes (1.2)

definidos por

$$P(x) = \begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2(1+\alpha^2)^2} & x < -h \\ -\frac{\hbar^2}{2(\tanh^2 x + \alpha^2)^2} & -h \leq x \leq h, \\ -\frac{\hbar^2}{2(1+\alpha^2)^2} & x > h \end{cases}, \quad Q(x) = \begin{cases} A^2 & x < -h \\ V(x) & -h \leq x \leq h, \\ A^2 & x > h \end{cases} \quad (4.46)$$

$$R(x) = \begin{cases} 1 & x < -h \\ 1 & -h \leq x \leq h \\ 1 & x > h \end{cases}$$

son aproximaciones a los eigenvalores del problema (4.34),(4.35),(4.36),(1.3). Para el experimento numérico se consideraron los valores de los parámetros $A = 3$, $B = 1$, $\alpha = 1$, $\hbar = 1$, $M = 1$ en los coeficientes $V(x)$, $m(x)$. La figura (4.6) presenta la gráfica del potencial $V(x)$ mostrando el comportamiento asintótico requerido.

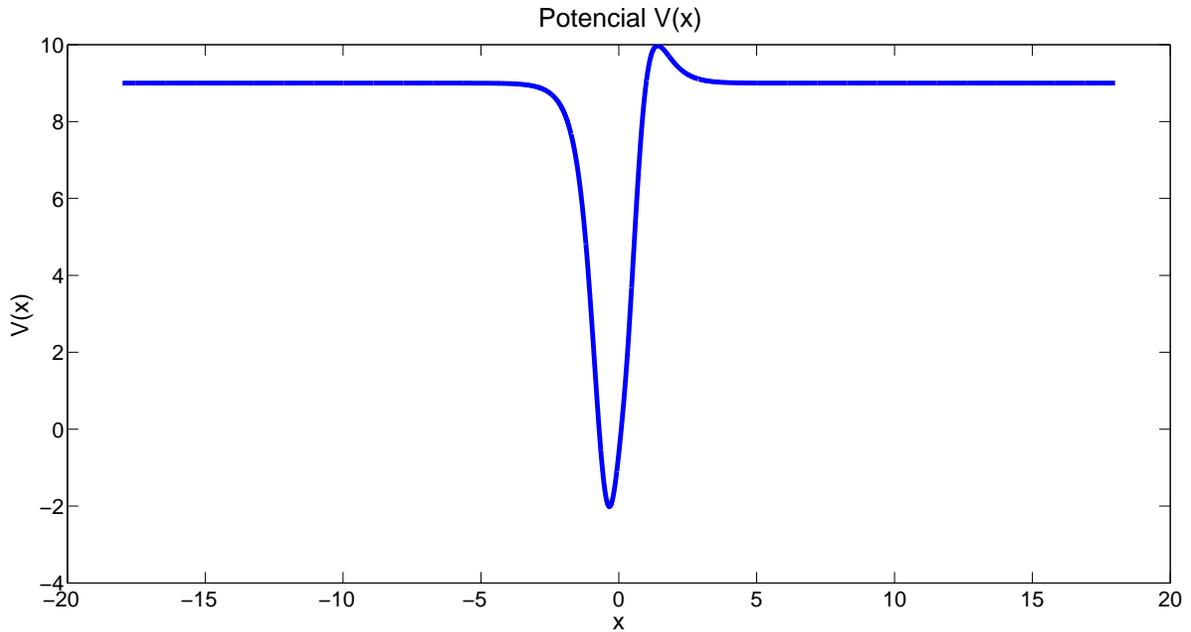


Figura 4.6: Potencial Scarf II tipo hiperbólico

La figura (4.7) muestra la gráfica del coeficiente $-\frac{\hbar^2}{2m(x)}$ corroborando el comportamiento de la masa dependiente de la posición.

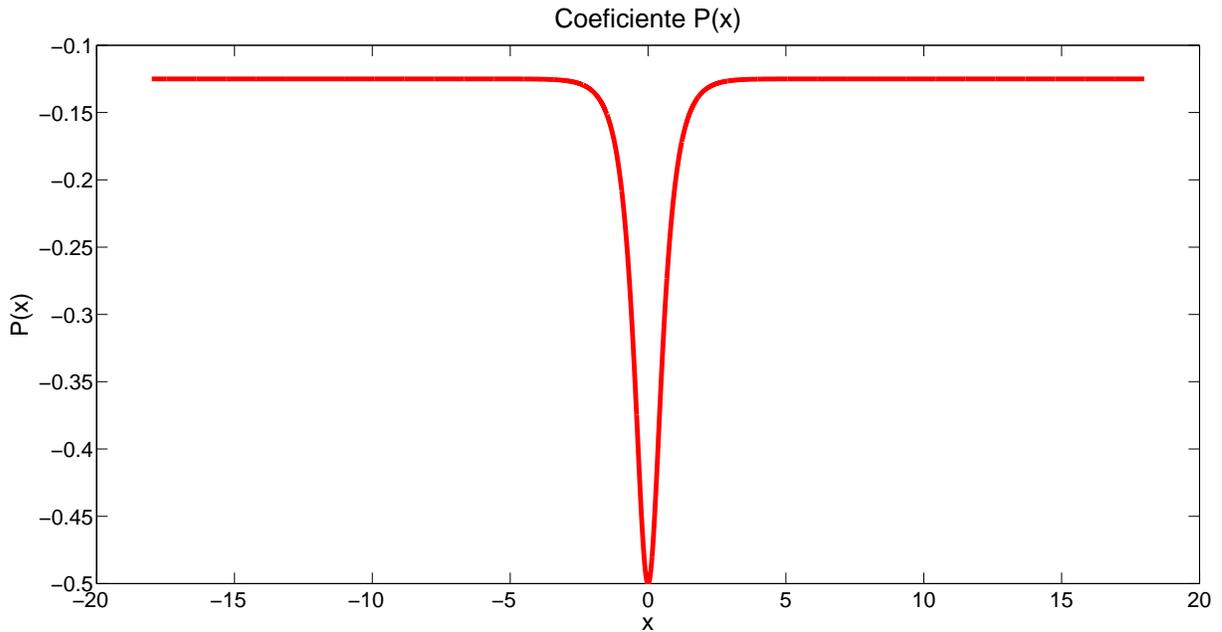


Figura 4.7: Coeficiente $-\frac{\hbar^2}{2m(x)}$

Es importante señalar que en la derivación de la ecuación de dispersión (4.21) se hizo el supuesto de que en el coeficiente $Q(x)$ los valores $\alpha_1 = \alpha_2 = 0$, por tanto es necesario reescribir el problema. La adaptación al problema original en cada subintervalo se puede reescribir como

$$\begin{aligned} P(x)u''(x) &= \lambda u(x) & x < -h \\ (P(x)u'(x))' + (V(x) - A^2)u(x) &= \lambda u(x) & -h \leq x \leq h \\ P(x)u''(x) &= \lambda u(x) & x > h \end{aligned}$$

donde $\lambda = E - A^2$, de manera que ahora si es posible utilizar la ecuación (4.21) para aproximar los eigenvalores del problema original. Los valores obtenidos corresponderán a λ sin embargo solamente hay que calcular la relación $E = \lambda + A^2$ para encontrar los eigenvalores requeridos.

La tabla 4.25 presenta los eigenvalores obtenidos con la fórmula (4.37) y los valores calculados numéricamente con la ecuación de dispersión (4.21) truncando la respectiva serie en $N = 80$, con los valores de los parámetros ya mencionados y $h = 5$. Se utilizó la rutina de Matlab *fnint* para calcular las integrales en las respectivas potencias formales.

Por otro lado la tabla 4.26 contiene los eigenvalores para el mismo problema con la diferencia que se utilizó el método de integración de Newton-Cotes de 6 puntos para el

n	$\lambda_n(\text{exacta})$	λ_n (SPPS)	
	(meV)	(meV)	Error Absoluto
0	0	-0.000000000455312	4.5531e-10
1	3.742640687119285	3.742640687106012	1.3273e-11
2	6.485281374238570	6.485281374103526	1.3504e-10
3	8.227922061357855	8.227922061434173	7.6318e-11
4	8.970562748477141	8.970605725410321	4.2977e-5

Tabla 4.25: Eigenvalores para el potencial Scarf II hiperbólico con masa variable utilizando la rutina *fnint* para la integración. *Cputime*=2145.36s

cálculo de las potencias formales.

n	λ_n (exacta)	λ_n (SPPS)	
	(meV)	(meV)	Error Absoluto
0	0	0.000000007502493	7.5024e-09
1	3.742640687119285	3.742640685646010	1.4732e-09
2	6.485281374238570	6.485281392860134	1.8621e-08
3	8.227922061357855	8.227922134163796	7.2805e-08
4	8.970562748477141	8.970562991590704	2.4311e-07

Tabla 4.26: Eigenvalores para el potencial Scarf II hiperbólico con masa variable mediante la fórmula de integración de Newton-Cotes de 6 puntos

En este caso se utilizaron $N = 200$ términos de la serie en (4.21) y el programa tardó 768.59s en calcular los eigenvalores presentados.

Comparando las dos tablas presentadas se ve que con el primer método de integración los primeros cuatro eigenvalores se calculan con mejor precisión, no obstante el tiempo que tarda el primer programa es bastante mayor comparado con el segundo. Ambos resultados muestran que la técnica propuesta permite calcular muy buenas aproximaciones a los eigenvalores de la ecuación de Schrödinger con masa variable. El código fuente para calcular los eigenvalores de las tablas (4.25), (4.26) se encuentran en el apéndice (A.6) y (A.7), respectivamente.

IV.3.7 Potencial complejo

Debido a que la técnica propuesta en esta tesis es aplicable a problemas que admiten eigenvalores complejos, para testar su eficiencia se considera un ejemplo de prueba cuyo potencial y eigenvalores correspondientes son complejos.

La ecuación de Schrödinger unidimensional con masa constante M

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2 u(x)}{dx^2} + V(x)u(x) = Eu(x) \quad (4.47)$$

donde el potencial es del tipo Scarf

$$V(x) = -V_1 \operatorname{sech}^2(x) - iV_2 \operatorname{sech}(x) \tanh(x), \quad (4.48)$$

con V_1, V_2 parámetros tales que $V_1 > 0$ y $|V_2| > V_1 + \frac{1}{4}$, tiene como eigenvalores (Jia et al., 2002)

$$E_n = - \left[n + \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \left(\sqrt{V_1 + V_2 + \frac{1}{4}} \pm i \sqrt{V_2 - V_1 - \frac{1}{4}} \right) \right]^2, \quad (4.49)$$

donde $0 \leq n < \frac{1}{2} \sqrt{V_1 + V_2 + \frac{1}{4}} - \frac{1}{2}$.

El comportamiento asintótico del potencial $V(x)$, es decir $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} V(x) = 0$, permite la aplicación de la adaptación de la sección 3.3 a la ecuación (4.47). Ver figura (4.8).

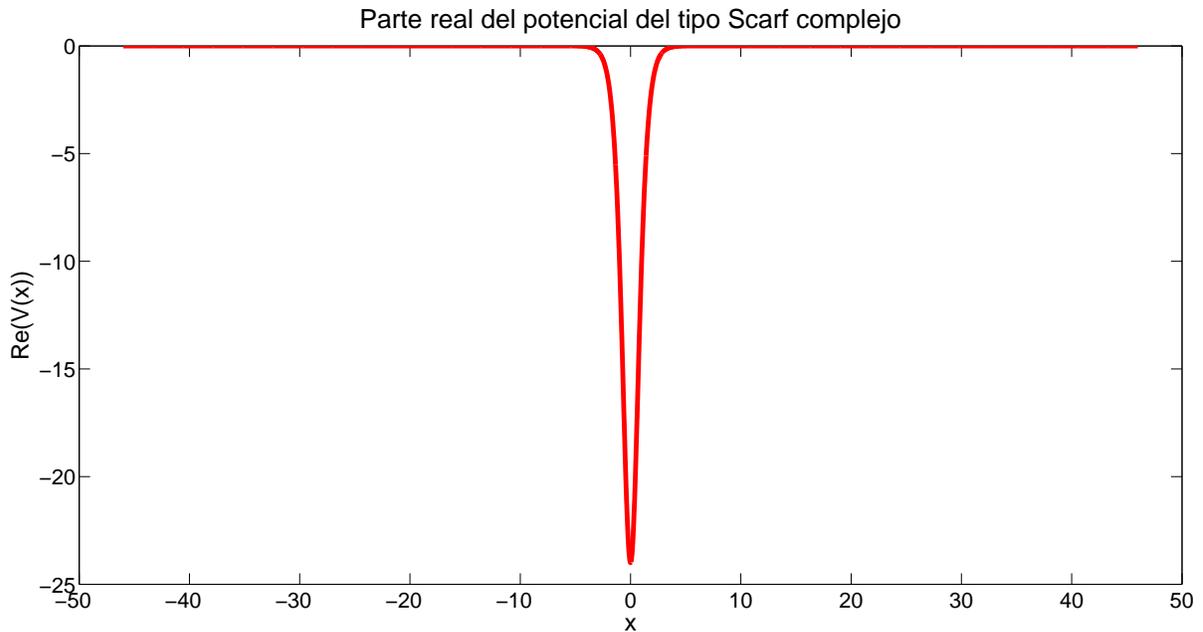


Figura 4.8: Comportamiento asintótico de $\operatorname{Re}(V(x))$ (4.48).

Por consiguiente, los eigenvalores λ_n asociados al problema (1.1),(1.3) con los coeficientes definidos como

$$P(x) = \begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2M} & x < -h \\ -\frac{\hbar^2}{2M} & -h \leq x \leq h, \\ -\frac{\hbar^2}{2M} & x > h \end{cases}, \quad Q(x) = \begin{cases} 0 & x < -h \\ V(x) & -h \leq x \leq h, \\ 0 & x > h \end{cases}, \quad (4.50)$$

$$R(x) = \begin{cases} 1 & x < -h \\ 1 & -h \leq x \leq h \\ 1 & x > h \end{cases}$$

son aproximaciones a los eigenvalores (4.49) de la ecuación de Schrödinger (4.47).

En los coeficientes (4.50) note la presencia de h , el parámetro que indica donde se trunca el potencial $V(x)$ para definir el coeficiente $Q(x)$. De cierta manera el valor de este parámetro influye en la precisión de los resultados numéricos obtenidos. Esto se debe a que si se considera un valor de h tal que el potencial $V(h)$ no esté suficientemente cerca de 0 entonces el problema (1.1),(1.3) con (4.50) no será una buena aproximación al problema original de Schrödinger donde los coeficientes son continuos en todo el eje real. A continuación se presenta un análisis en el cual se consideran diversos valores de h y se calculan los eigenvalores por medio de la ecuación de dispersión (4.21).

En las tablas (4.27) se presentan los errores absolutos entre los eigenvalores exactos (calculados con (4.49)) y los aproximados (obtenidos con (4.21)) para diversos valores de h . Los valores de los parámetros que se consideraron son $\hbar = 1$, $M = 1$, $V_1 = 24$ y $V_2 = 25$.

De las tablas (4.27) se puede apreciar que conforme el parámetro h crece, la precisión obtenida al calcular el último eigenvalor mejora. Por ejemplo para el valor de $h = 5$ no se alcanza a obtener el cuarto eigenvalor, sin embargo si se considera $h = 19$, sí se obtiene el cuarto eigenvalor y además con una precisión de 7 dígitos.

La razón por la cuál se pierde precisión en intervalos pequeños (valores de h pequeños) es la siguiente. Primero note que para eigenvalores grandes (cuyo módulo sea grande) la diferencia $Q(x) - \lambda$ no se ve tan afectada por el truncamiento, ya que el valor del potencial es pequeño para valores $|x| > h$, y por tanto no se pierde tanta precisión en los cálculos numéricos. No obstante para eigenvalores pequeños el truncamiento afecta considerablemente a la diferencia $Q(x) - \lambda$ debido a que el valor del potencial y el de λ son comparables y al considerar $Q(x) = 0$ para $|x| > h$ provoca que la ecuación resultante se vea

h	$ Q(h) $	n	$ \lambda - \lambda_n $
5	3.3687e-01	1	2.5003e-10
		2	3.0253e-07
		3	9.7875e-04
		4	—

h	$ Q(h) $	n	$ \lambda - \lambda_n $
7	4.5594e-02	1	1.9646e-10
		2	4.5067e-09
		3	2.4583e-06
		4	2.2703e-02

h	$ Q(h) $	n	$ \lambda - \lambda_n $
9	6.1704e-03	1	3.3633e-11
		2	3.6427e-09
		3	1.9742e-08
		4	3.0854e-03

h	$ Q(h) $	n	$ \lambda - \lambda_n $
11	8.3508e-04	1	1.1517e-10
		2	5.4982e-09
		3	3.4847e-08
		4	4.2040e-04

h	$ Q(h) $	n	$ \lambda - \lambda_n $
13	1.1301e-04	1	1.0259e-10
		2	3.7091e-10
		3	2.4159e-08
		4	5.5175e-05

h	$ Q(h) $	n	$ \lambda - \lambda_n $
15	1.5295e-05	1	2.1292e-10
		2	4.3370e-09
		3	3.1254e-08
		4	7.1312e-06

h	$ Q(h) $	n	$ \lambda - \lambda_n $
17	2.0699e-06	1	2.0052e-10
		2	2.5360e-09
		3	1.8727e-08
		4	1.1364e-06

h	$ Q(h) $	n	$ \lambda - \lambda_n $
19	2.8013e-07	1	4.6499e-10
		2	6.4166e-09
		3	2.7820e-08
		4	1.6791e-07

Tabla 4.27: Eigenvalores para el potencial complejo Pöschl-Teller con masa constante para diversos valores de h , utilizando el método de integración Newton-Cotes de 6 puntos.

afectada en gran medida. Es por esto que en los resultados presentados el cuarto eigenvalor ($0.0089172119045497 - 0.4330127018922193i$) se calcula con bastante menor precisión que el primero ($3.0089172119045497 + 0.4330127018922193i$) cuyo módulo es considerablemente mayor.

La cantidad de términos en la serie de la ecuación de dispersión fue $N = 200$ y el tiempo de cálculo en promedio fue de 800s. El código fuente para este experimento se proporciona en el apéndice (A.8).

V. CONCLUSIONES

En esta tesis se presenta una nueva técnica para el cálculo numérico de eigenvalores del operador de Sturm-Liouville en todo el eje real. Esta técnica consiste en extender el método SPPS a todo el eje real para obtener en forma explícita la ecuación de dispersión asociada al operador. Dicha ecuación es de la forma $\Phi(\lambda) = 0$, donde Φ es una función analítica dada por su serie de Taylor y λ el parámetro espectral. Los ceros de la función Φ son precisamente los eigenvalores del operador. La naturaleza de la ecuación de dispersión y del método SPPS permiten desarrollar un algoritmo sencillo de implementarse en programas de cómputo numérico como Matlab. A saber, se trunca la serie involucrada en la ecuación de dispersión y se calculan los ceros del polinomio resultante, a partir de los cuales con ayuda de criterios como el teorema de Rouché, se filtran aquellos que representan aproximaciones a los eigenvalores del problema. Una de las aplicaciones de esta tesis radica en el cálculo de eigenvalores para la ecuación de Schrödinger con PDM. Este tipo de modelos aparecen en diversas aplicaciones en las cuales es indispensable calcular los niveles de energía (eigenvalores) de una partícula atrapada en nanoestructuras tales como pozos, hilos y puntos cuánticos utilizados en la fabricación de diodos láser, celdas solares, transistores, entre otros. La aplicación de la técnica propuesta a modelos clásicos como son los potenciales Pöschl-Teller y Scarf II hiperbólico con masa variable permitió testar la eficiencia del método obteniendo aproximaciones muy precisas, incluso para casos en los que el operador admite eigenvalores complejos, lo cual representa una ventaja respecto de los métodos disponibles como lo es del de disparo. Otra ventaja que presenta la técnica es que todos los eigenvalores de un problema se obtienen en un solo cálculo a diferencia de otros métodos en los que cada eigenvalor se calcula por separado.

Una de las posibles mejoras a esta técnica es la aplicación del desplazamiento espectral considerada en (Castillo-Pérez et al., 2013), ya que permite calcular los eigenvalores lejanos al cero con mayor precisión. Esta técnica consiste en construir la representación en series del método SPPS de la solución en el intervalo $[-h, h]$ a partir de una solución particular para algún $\lambda = \lambda_0$ arbitrario en lugar de $\lambda = 0$, tal como se consideró en el presente trabajo. Otra mejora se basa en utilizar el reciente método SPPS modificado (Kravchenko and Torba, 2014) para la construcción de la ecuación de dispersión, el cual tiene mucho mayor alcance

y permite calcular los eigenvalores con mayor precisión, además tiene la ventaja de poder utilizar una solución particular con ceros a diferencia del método anterior.

Dentro de los trabajos prospectivos destaca la aplicación del método SPPS en la construcción de la ecuación de dispersión de ecuaciones de Schrödinger con potenciales singulares y masa variable.

I. CÓDIGO FUENTE

Programa A.1: Pozo cuántico rectangular de la sección 4.3.4 correspondiente a las tablas (4.6 - 4.13)

```
1 tic
2 clear all;
3 clc
4
5 format long
6 SplineOrder = 4;
7 a0=-1; a=1; %Intervalo [-h,h]
8 Pts=10000; %NoPts = 2*Pts
9 Points1=linspace(a0,0,Pts);
10 Points2=linspace(0,a,Pts);
11 usedPoints=[Points1 Points2(2:Pts)]; %Partición del intervalo
12
13 N=120; %Términos de la serie en ec. de dispersión
14 lw=20; %Amplitud del pozo
15 ChangeVar=lw/2;
16 %-----Potencial rectangular-----
17 h=87.292744948; %Constante de Planck
18 V=167.098; %Altura del pozo
19 q = -V*ones(1,length(usedPoints));
20 %-----Valores de p(x)-----
21 mw = 0.067; %masa en el pozo
22 mb = 0.0836; %masa en las barreras
23 p=-((h^2)/(2*mw))*ones(1,length(usedPoints))*(1/ChangeVar^2);
24 p1=-((h^2)/(2*mb))*(1/ChangeVar^2);
25 p2=-((h^2)/(2*mb))*(1/ChangeVar^2);
26 pAtmH=p(1);
27 pAtH=p(length(usedPoints));
28 %-----Valores de r(x)-----
29 r=(1)*ones(1,length(usedPoints));
30 r1=1;
31 r2=1;
32 %----Intervalo en dónde calcular los ceros del polinomio-----
33 lambdamin=0;
```

```

34 lambdamax=sqrt(min(q)*r1/p1)-0.01;
35
36 %-----Construcción de U0, sol de ec (pU0')'+qU0=0-----
37 [Y,Ytil]=PowersX(1,p,-q,N+1,usedPoints,a-a0);
38 for count = 1:N+1
39     YatH(count) = Y(count,length(usedPoints));
40     YAtusedPoints(count,:) = Y(count,:);
41     YtilAtusedPoints(count,:) = Ytil(count,:);
42     YtilAtH(count) = Ytil(count,length(usedPoints));
43 end
44 z1=ones(1,length(usedPoints)); z2=zeros(1,length(usedPoints));
45 Z1Der = zeros(1,length(usedPoints));
46 Z2Der = ones(1,length(usedPoints));
47 for j=1:N
48     if rem(j,2)==0
49         Ztil = Ytil(j,:);
50         z1 = z1 + Ztil;
51     else
52         Z = Y(j,:);
53         z2 = z2 + Z;
54     end
55 end
56 U0Sol = z1+1i*z2;      U0=U0Sol/U0Sol(1);
57 u0AtH = U0(length(usedPoints));
58 %-----Construcción de derivada de u0-----
59 u0DerivativeAtH = 1i*(1/pAtH);
60 for count = 1:N/2
61     u0DerivativeAtH = u0DerivativeAtH + (1/pAtH)*YtilAtH(2*count-1)...
62         +(1/pAtH)*YatH(2*count)*1i;
63 end
64 error1 = Error(p, U0, q, 0, 0, usedPoints, SplineOrder);
65 plot(usedPoints,error1);
66 %-----Cálculo de potencias formales Xtil^n y X^n-----
67 [X,Xtil]=PowersX(U0,p,r,N+1,usedPoints,a-a0);
68 for count = 1:N+1
69     XatH(count) = X(count,length(usedPoints));
70     XAtusedPoints(count,:) = X(count,:);
71     XtilAtusedPoints(count,:) = Xtil(count,:);
72     XtilAtH(count) = Xtil(count,length(usedPoints));
73 end
74 %---Cálculo de coefs. del polinomio mediante ec. dispersión-----
75 lambda = linspace(lambdamin,lambdamax,10000);
76 EvenPowersOfMiu(1) = u0DerivativeAtH*(1+1i*XatH(1))+1i/(u0AtH*pAtH);
77 OddPowersOfMiu(1) = (p1*u0DerivativeAtH*XatH(1) + p1*1/(u0AtH*pAtH))...

```

```

78         + (p2*u0AtH/pAtH)*((p1*r2/(p2*r1))^(1/2))*(1+ li*XatH(1));
79 for n=1:N/2
80     m = n;
81     EvenPowersOfMiu(n+1)=(p1/r1)^n*(u0DerivativeAtH*XtilAtH(2*n)...
82         + 1/(u0AtH*pAtH)*XtilAtH(2*n-1)...
83         +li*u0DerivativeAtH*XatH(2*n+1)+ li/(u0AtH*pAtH)*XatH(2*n)...
84         + (p2*r1*u0AtH/pAtH)*(((p1*r2)/(p2*r1))^(1/2))*XatH(2*n-1));
85     OddPowersOfMiu(n+1)=(p1/r1)^m*(p1*(u0DerivativeAtH*XatH(2*m+1)...
86         + 1/(u0AtH*pAtH)*XatH(2*m))...
87         + (p2*u0AtH/pAtH)*((p1*r2/(p2*r1))^(1/2))*(XtilAtH(2*m)...
88         + li*XatH(2*m+1)));
89 end
90 %-----Formación de polinomio-----
91 Poly = zeros(1,N+1);
92 for n=0:N
93     if rem(n,2) == 0
94         Poly(N+1 - n) = EvenPowersOfMiu(n/2+1);
95     else
96         Poly(N+1 - n) = OddPowersOfMiu((n+1)/2);
97     end
98 end
99 %-----Cálculo de raíces del polinomio-----
100 SumaTotal=polyval(Poly,lambda);
101 SumaSpline = spapi(SplineOrder,lambda,real(SumaTotal));
102 lambdasViaSpline=sort(fnzeros(SumaSpline)');
103 raices = roots(Poly);
104 k=1;
105 for i = 1:length(raices)
106     if abs(imag(raices(i)))< 0.01
107         Raices(k)=raices(i);
108         k=k+1;
109     end
110 end
111 %-----Eigenvalores del problema-----
112 (lambdasViaSpline(:,1).^2)*p1/r1 +V
113 Lambdasviaroots=(real(Raices)').^2*p1/r1 +V
114
115 toc

```

Programa A.2: Pozo cuántico rectangular de la sección 4.3.4 correspondiente a las tablas (4.14 - 4.21)

```

1 tic
2 clear all;
3 clc
4
5 format long
6 SplineOrder = 4;
7 a0=-1; a=1; %Intervalo [-h,h]
8 Pts=60000; %NoPts = 2*Pts
9 Points1=linspace(a0,0,Pts);
10 Points2=linspace(0,a,Pts);
11 usedPoints=[Points1 Points2(2:Pts)]; %Partición del intervalo
12
13 N=150; %Términos de la serie en ec. de dispersión
14 lw=60; %Amplitud del pozo
15 ChangeVar=lw/2;
16 %-----Potencial rectangular-----
17 h=87.292744948; %Constante de Planck
18 V=626.6175; %Altura del pozo
19 q = -V*ones(1,length(usedPoints));
20 %-----Valores de p(x)-----
21 mw = 0.067; %masa en el pozo
22 mb = 0.12925; %masa en las barreras
23 p=-((h^2)/(2*mw))*ones(1,length(usedPoints))*(1/ChangeVar^2);
24 p1=-((h^2)/(2*mb))*(1/ChangeVar^2);
25 p2=-((h^2)/(2*mb))*(1/ChangeVar^2);
26 pAtmH=p(1);
27 pAtH=p(length(usedPoints));
28 %-----Valores de r(x)-----
29 r=(1)*ones(1,length(usedPoints));
30 r1=1;
31 r2=1;
32 %----Intervalo en dónde calcular los ceros del polinomio-----
33 lambdamin=0;
34 lambdamax=sqrt(min(q)*r1/p1)-0.01;
35
36 %----Construcción de U0, sol de ec (pU0)'+qU0=0-----
37 [Y,Ytil]=PowersX(1,p,-q,N+1,usedPoints,a-a0);
38 for count = 1:N+1
39     YatH(count) = Y(count,length(usedPoints));
40     YAtusedPoints(count,:) = Y(count,:);
41     YtilAtusedPoints(count,:) = Ytil(count,:);

```

```

42     YtilAtH(count) = Ytil(count,length(usedPoints));
43 end
44 z1=ones(1,length(usedPoints)); z2=zeros(1,length(usedPoints));
45 Z1Der = zeros(1,length(usedPoints));
46 Z2Der = ones(1,length(usedPoints));
47 for j=1:N
48     if rem(j,2)==0
49         Ztil = Ytil(j,:);
50         z1 = z1 + Ztil;
51     else
52         Z = Y(j,:);
53         z2 = z2 + Z;
54     end
55 end
56 U0Sol = z1+1i*z2;      U0=U0Sol/U0Sol(1);
57 u0AtH = U0(length(usedPoints));
58 %-----Construcción de derivada de u0-----
59 u0DerivativeAtH = 1i*(1/pAtH);
60 for count = 1:N/2
61     u0DerivativeAtH = u0DerivativeAtH + (1/pAtH)*YtilAtH(2*count-1)...
62         +(1/pAtH)*YatH(2*count)*1i;
63 end
64 error1 = Error(p, U0, q, 0, 0, usedPoints, SplineOrder);
65 plot(usedPoints,error1);
66 %-----Cálculo de potencias formales Xtil^n y X^n-----
67 [X,Xtil]=PowersX(U0,p,r,N+1,usedPoints,a-a0);
68 for count = 1:N+1
69     XatH(count) = X(count,length(usedPoints));
70     XAtusedPoints(count,:) = X(count,:);
71     XtilAtusedPoints(count,:) = Xtil(count,:);
72     XtilAtH(count) = Xtil(count,length(usedPoints));
73 end
74 %---Cálculo de coefs. del polinomio mediante ec. dispersión-----
75 lambda = linspace(lambdamin,lambdamax,10000);
76 EvenPowersOfMiu(1) = u0DerivativeAtH*(1+1i*XatH(1))+1i/(u0AtH*pAtH);
77 OddPowersOfMiu(1) = (p1*u0DerivativeAtH*XatH(1) + p1*1/(u0AtH*pAtH))...
78     + (p2*u0AtH/pAtH)*((p1*r2/(p2*r1))^(1/2))*(1+ 1i*XatH(1));
79 for n=1:N/2
80     m = n;
81     EvenPowersOfMiu(n+1)=(p1/r1)^n*(u0DerivativeAtH*XtilAtH(2*n)...
82         + 1/(u0AtH*pAtH)*XtilAtH(2*n-1)...
83         +1i*u0DerivativeAtH*XatH(2*n+1)+ 1i/(u0AtH*pAtH)*XatH(2*n)...
84         + (p2*r1*u0AtH/pAtH)*((p1*r2)/(p2*r1))^(1/2)*XatH(2*n-1));
85     OddPowersOfMiu(n+1)=(p1/r1)^m*(p1*(u0DerivativeAtH*XatH(2*m+1)...

```

```

86     + 1/(u0AtH*pAtH)*XatH(2*m)...
87     + (p2*u0AtH/pAtH)*((p1*r2/(p2*r1))^(1/2))*(XtilAtH(2*m)...
88     + li*XatH(2*m+1));
89 end
90 %-----Formación de polinomio-----
91 Poly = zeros(1,N+1);
92 for n=0:N
93     if rem(n,2) == 0
94         Poly(N+1 - n) = EvenPowersOfMiu(n/2+1);
95     else
96         Poly(N+1 - n) = OddPowersOfMiu((n+1)/2);
97     end
98 end
99 %-----Cálculo de raíces del polinomio-----
100 SumaTotal=polyval(Poly,lambda);
101 SumaSpline = spapi(SplineOrder,lambda,real(SumaTotal));
102 lambdasViaSpline=sort(fnzeros(SumaSpline)');
103 raices = roots(Poly);
104 k=1;
105 for i = 1:length(raices)
106     if abs(imag(raices(i)))< 0.01
107         Raices(k)=raices(i);
108         k=k+1;
109     end
110 end
111 %-----Eigenvalores del problema-----
112 (lambdasViaSpline(:,1).^2)*p1/r1 +V
113 Lambdasviaroots=(real(Raices)').^2*p1/r1 +V
114
115 toc

```

Programa A.3: Pozo cuántico rectangular de la sección 4.3.4 correspondiente a la tabla 4.22

```

1 tic
2 clear all;
3 clc
4
5 format long
6 SplineOrder = 4;
7 a0=-1; a=1; %Intervalo [-h,h]
8 Pts=60000; %NoPts = 2*Pts
9 Points1=linspace(a0,0,Pts);
10 Points2=linspace(0,a,Pts);
11 usedPoints=[Points1 Points2(2:Pts)]; %Partición del intervalo
12
13 N=120; %Términos de la serie en ec. de dispersión
14 lw=200; %Amplitud del pozo
15 ChangeVar=lw/2;
16 %-----Potencial rectangular-----
17 h=87.292744948; %Constante de Planck
18 V=225; %Altura del pozo
19 q = -V*ones(1,length(usedPoints));
20 %-----Valores de p(x)-----
21 mw = 0.067; %masa en el pozo
22 mb = 0.0919; %masa en las barreras
23 p=-((h^2)/(2*mw))*ones(1,length(usedPoints))*(1/ChangeVar^2);
24 p1=-((h^2)/(2*mb))*(1/ChangeVar^2);
25 p2=-((h^2)/(2*mb))*(1/ChangeVar^2);
26 pAtmH=p(1);
27 pAtH=p(length(usedPoints));
28 %-----Valores de r(x)-----
29 r=(1)*ones(1,length(usedPoints));
30 r1=1;
31 r2=1;
32 %----Intervalo en dónde calcular los ceros del polinomio-----
33 lambdamin=0;
34 lambdamax=sqrt(min(q)*r1/p1)-0.01;
35
36 %----Construcción de U0, sol de ec (pU0')'+qU0=0-----
37 [Y,Ytil]=PowersX(1,p,-q,N+1,usedPoints,a-a0);
38 for count = 1:N+1
39     YatH(count) = Y(count,length(usedPoints));
40     YAtusedPoints(count,:) = Y(count,:);
41     YtilAtusedPoints(count,:) = Ytil(count,:);
42     YtilAtH(count) = Ytil(count,length(usedPoints));

```

```

43 end
44 z1=ones(1,length(usedPoints)); z2=zeros(1,length(usedPoints));
45 Z1Der = zeros(1,length(usedPoints));
46 Z2Der = ones(1,length(usedPoints));
47 for j=1:N
48     if rem(j,2)==0
49         Ztil = Ytil(j,:);
50         z1 = z1 + Ztil;
51     else
52         Z = Y(j,:);
53         z2 = z2 + Z;
54     end
55 end
56 U0Sol = z1+1i*z2;      U0=U0Sol/U0Sol(1);
57 u0AtH = U0(length(usedPoints));
58 %-----Construcción de derivada de u0-----
59 u0DerivativeAtH = 1i*(1/pAtH);
60 for count = 1:N/2
61     u0DerivativeAtH = u0DerivativeAtH + (1/pAtH)*YtilAtH(2*count-1)...
62         +(1/pAtH)*YatH(2*count)*1i;
63 end
64 error1 = Error(p, U0, q, 0, 0, usedPoints, SplineOrder);
65 plot(usedPoints,error1);
66 %-----Cálculo de potencias formales Xtil^n y X^n-----
67 [X,Xtil]=PowersX(U0,p,r,N+1,usedPoints,a-a0);
68 for count = 1:N+1
69     XatH(count) = X(count,length(usedPoints));
70     XAtusedPoints(count,:) = X(count,:);
71     XtilAtusedPoints(count,:) = Xtil(count,:);
72     XtilAtH(count) = Xtil(count,length(usedPoints));
73 end
74 %---Cálculo de coefs. del polinomio mediante ec. dispersión-----
75 lambda = linspace(lambdamin,lambdamax,10000);
76 EvenPowersOfMiu(1) = u0DerivativeAtH*(1+1i*XatH(1))+1i/(u0AtH*pAtH);
77 OddPowersOfMiu(1) = (p1*u0DerivativeAtH*XatH(1) + p1*1/(u0AtH*pAtH))...
78     + (p2*u0AtH/pAtH)*((p1*r2/(p2*r1))^(1/2))*(1+ 1i*XatH(1));
79 for n=1:N/2
80     m = n;
81     EvenPowersOfMiu(n+1)=((p1/r1)^n)*(u0DerivativeAtH*XtilAtH(2*n)...
82         + 1/(u0AtH*pAtH)*XtilAtH(2*n-1)...
83         +1i*u0DerivativeAtH*XatH(2*n+1)+ 1i/(u0AtH*pAtH)*XatH(2*n)...
84         + (p2*r1*u0AtH/pAtH)*(((p1*r2)/(p2*r1))^(1/2))*XatH(2*n-1));
85     OddPowersOfMiu(n+1)=((p1/r1)^m)*(p1*(u0DerivativeAtH*XatH(2*m+1)...
86         + 1/(u0AtH*pAtH)*XatH(2*m))...

```

```

87     + (p2*u0AtH/pAtH)*((p1*r2/(p2*r1))^(1/2))*(XtilAtH(2*m)...
88     + li*XatH(2*m+1));
89 end
90 %-----Formación de polinomio-----
91 Poly = zeros(1,N+1);
92 for n=0:N
93     if rem(n,2) == 0
94         Poly(N+1 - n) = EvenPowersOfMiu(n/2+1);
95     else
96         Poly(N+1 - n) = OddPowersOfMiu((n+1)/2);
97     end
98 end
99 %-----Cálculo de raíces del polinomio-----
100 SumaTotal=polyval(Poly,lambda);
101 SumaSpline = spapi(SplineOrder,lambda,real(SumaTotal));
102 lambdasViaSpline=sort(fnzeros(SumaSpline)');
103 raices = roots(Poly);
104 k=1;
105 for i = 1:length(raices)
106     if abs(imag(raices(i)))< 0.01
107         Raices(k)=raices(i);
108         k=k+1;
109     end
110 end
111 %-----Eigenvalores del problema-----
112 (lambdasViaSpline(:,1).^2)*p1/r1 +V
113 Lambdasviaroots=(real(Raices)').^2*p1/r1 +V
114
115 toc

```

Programa A.4: Potencial Pöschl-Teller modificado con masa variable (*fnint*)(4.23)

```

1 tic
2 clear all;
3 clc
4
5 format long
6 SplineOrder = 5;      %+ Orden para aproximar las potencias formales
7 Precision=10^-15;
8 a0=-1;  a=1;
9 Pts=10000;           %NoPts=2*Pts
10 Points1=linspace(a0,0,Pts);
11 Points2=linspace(0,a,Pts);
12 usedPoints=[Points1 Points2(2:Pts)];  %artición uniforme
13 N=100;      %Cantidad de términos considerados en la ec. de dispersión
14
15 CV = 5;          % Cambio de variable
16 Points = CV*usedPoints;
17 %-----Potencial Poschl-Teller-----
18 h = 1;          %Constante reducida de planck
19 alpha = 1;  ConstMass = 1;  Beta= 5;  qq = 1;  %Parámetros
20 U0 = h^2*alpha^2*Beta*(Beta-1)/(2*ConstMass);
21 q = PoschlTellerPDM(alpha,qq,U0,Points);
22 %-----Valores de p(x)-----
23 mw = (1./(Points.^2 + qq) + alpha^2).^2;      % Masa en el pozo
24 mwAtA = mw(length(Points));
25 mb = alpha^4;
26 p=- (h^2./(2*mw)) * (1/CV^2);
27 p1=- (h^2/(2*mb)) * (1/CV^2);
28 p2=- (h^2/(2*mb)) * (1/CV^2);
29 pAt0=p(1);
30 pAtA=p(length(usedPoints));
31 lambda0=0;
32 %-----Valores de r(x)-----
33 r=1*ones(1,length(usedPoints));
34 r1=1;
35 r2=1;
36 %-----Intervalo en dónde calcular los ceros del polinomio-----
37 lambdamin=0;
38 lambdamax=sqrt(min(q)*r1/p1)-0.01;
39 %[g1value]=ConstructionOfParticularSolution(q1, -p , 1, 0,
40 %          usedPoints, a0, a, N, SplineOrder, Precision);
41 %[g2value]=ConstructionOfParticularSolution(q1, -p , 0, 1,
42 %          usedPoints, a0, a, N, SplineOrder, Precision);

```

```

43 %u0 = g1value + i*g2value;
44 %--Construcción de sol. part. U0, sol de ec (pU0')'+qU0=0-----
45 [X,Xtil]=PowersX(q,-(1./p),N+1,usedPoints, SplineOrder);
46 for count = 1:N+1
47     XatA(count) = fnval(X(count),a);
48     XAtusedPoints(count,:) = fnval(X(count),usedPoints);
49     XtilAtusedPoints(count,:) = fnval(Xtil(count),usedPoints);
50     XtilAtA(count) = fnval(Xtil(count),a);
51 end
52 y1=ones(1,length(usedPoints)); y2=zeros(1,length(usedPoints));
53 y1Der = zeros(1,length(usedPoints));
54 y2Der = ones(1,length(usedPoints));
55 for j=1:N
56     if rem(j,2)==0
57         Ytil = fnval(Xtil(j),usedPoints);
58         Y = fnval(X(j),usedPoints);
59         y1 = y1 + Ytil;
60         y2Der = y2Der + Y;
61     else
62         Y = fnval(X(j),usedPoints);
63         Ytil = fnval(Xtil(j),usedPoints);
64         y2 = y2 + Y;
65         y1Der = y1Der + Ytil;
66     end
67 end
68 u0Sol = y1+1i*y2;      u0=u0Sol;
69 u0spl=spapi(SplineOrder,usedPoints,u0);
70 u0AtA=fnval(u0spl,a);
71 %-----Construcción de la derivada de u0-----
72 u0DerAtA = 1i*(-1/pAtA);
73 for count = 1:N/2
74     u0DerAtA = u0DerAtA+(-1/pAtA)*XtilAtA(2*count-1)...
75         + (-1/pAtA)*XatA(2*count)*1i;
76 end
77 %-----Cálculo de potencias formales Xtil^n y X^n-----
78 q11=(u0.^2).*r;
79 q12=1./(p.*(u0.^2));
80 [X,Xtil]=PowersX(q11,q12,N+1,usedPoints, SplineOrder);
81 for count = 1:N+1
82     XatA(count) = fnval(X(count),a);
83     XAtusedPoints(count,:) = fnval(X(count),usedPoints);
84     XtilAtusedPoints(count,:) = fnval(Xtil(count),usedPoints);
85     XtilAtA(count) = fnval(Xtil(count),a);
86 end

```

```

87 %-----Cálculo de los coeficientes del polinomio-----
88 EvenPowersOfMiu(1) = (mb/mwAtA)*(u0DerAtA*(1+1i*XatA(1))...
89     +1i/(u0AtA*pAtA));
90 OddPowersOfMiu(1) = u0DerAtA*pAt0*XatA(1) + pAt0/(u0AtA*pAtA)...
91     + u0AtA*((p1*r2/(r1*p2))^(1/2)) ...
92     + 1i*u0AtA*((p1*r2/(r1*p2))^(1/2))*XatA(1);
93 for n=1:N/2
94     m = n;
95     EvenPowersOfMiu(n+1)=(p1/r1)^n*((mb/mwAtA)*u0DerAtA*XtilAtA(2*n)...
96         + (mb/mwAtA)*1i*u0DerAtA*XatA(2*n+1) ...
97         + (mb/mwAtA)*XatA(2*n)*1i/(u0AtA*pAtA) ...
98         + (mb/mwAtA)*XtilAtA(2*n-1)*1/(u0AtA*pAtA) ...
99     + (mwAtA/mb)*((r1/p1)^(1/2))*((r2/p2)^(1/2))*u0AtA*pAt0*XatA(2*n-1));
100     OddPowersOfMiu(n+1)=(p1/r1)^m*(u0DerAtA*pAt0*XatA(2*m+1)...
101         + XatA(2*m)*pAt0/(u0AtA*pAtA)...
102         + u0AtA*((p1*r2/(r1*p2))^(1/2))*XtilAtA(2*m)...
103         + 1i*u0AtA*((p1*r2/(r1*p2))^(1/2))*XatA(2*m+1));
104 end
105 %-----Construcción del polinomio-----
106 P1 = zeros(1,N+1);
107 for n=0:N
108     if rem(n,2) == 0
109         P1(N+1 - n) = EvenPowersOfMiu(n/2+1);
110     else
111         P1(N+1 - n) = OddPowersOfMiu((n+1)/2);
112     end
113 end
114 %-----Cálculo de raíces del polinomio-----
115 lambdaPoints=linspace(lambdamin,lambdamax,10000);
116 rinlambda=polyval(P1,lambdaPoints);
117 rinlambdaspline=spapi(SplineOrder,lambdaPoints,real(rinlambda));
118 lambdaviaspline=fnzeros(rinlambdaspline)+lambda0
119 p1*(lambdaviaspline.^2)/r1
120 toc

```

Programa A.5: Potencial Pöschl-Teller modificado con masa variable (Cotes) (4.24)

```

1  tic
2  clear all;
3  clc
4
5  format long
6  SplineOrder = 4;
7  a0=-7;  a=7;                               % Intervalo [-h,h]
8  Pts=90000;                                % NoPts=2*Pts
9  Points1=linspace(a0,0,Pts);
10 Points2=linspace(0,a,Pts);
11 usedPoints=[Points1 Points2(2:Pts)];      %Partición uniforme
12 N=130;          %Términos considerados en la serie de la ec. de dispersión
13
14 %-----Potencial-Poschl-Teller-----
15 h = 1;      alpha = 1;      M = 1;
16 beta= 5;   qu = 1;      K=0;
17 U0 = h^2*alpha^2*beta*(beta-1)/(2*M);
18 q = PoschlTellerPDM(alpha,qu,U0,usedPoints);
19 %-----Valores de p(x)-----
20 mw = (1./(usedPoints.^2 + qu) + alpha^2).^2; %Masa del pozo
21 mwAtH = mw(length(usedPoints));
22 mwAtmH = mw(1);
23 mbAtmH = alpha^4;          %Masa en la barrera izquierda
24 mbAtH = alpha^4;          %Masa en la barrera derecha
25 alpha1 = 0;  alpha2 = 0;
26 p=- (h^2./(2*mw));
27 p1=- (h^2/(2*mbAtmH));
28 p2=- (h^2/(2*mbAtH));
29 pAtmH=p(1);
30 pAtH=p(length(usedPoints));
31 %-----Valores de r(x)-----
32 r=1*ones(1,length(usedPoints));
33 r1=1;
34 r2=1;
35 %-----Intervalo en dónde calcular los ceros del polinomio-----
36 lambdamin=0;
37 lambdamax=sqrt(min(q)*r1/p1)-0.01;
38 %--Construcción de sol. part. U0, sol de ec (pU0)'+qU0=0-----
39 [Y,Ytil]=PowersX(1,p,-q,N+1,usedPoints,a-a0);
40 for count = 1:N+1
41     YatH(count) = Y(count,length(usedPoints));
42     YAtusedPoints(count,:) = Y(count,:);

```

```

43     YtilAtusedPoints(count,:) = Ytil(count,:);
44     YtilAtH(count) = Ytil(count,length(usedPoints));
45 end
46 z1=ones(1,length(usedPoints));
47 z2=zeros(1,length(usedPoints));
48 for j=1:N
49     if rem(j,2)==0
50         Ztil = Ytil(j,:);
51         z1 = z1 + Ztil;
52     else
53         Z = Y(j,:);
54         z2 = z2 + Z;
55     end
56 end
57 U0Sol = z1+1i*z2;      U0=U0Sol/U0Sol(1);
58 u0AtH = U0(length(usedPoints));
59 %-----Construcción de la derivada de u0-----
60 u0DerivativeAtH = 1i*(1/pAtH);
61 for count = 1:N/2
62     u0DerivativeAtH = u0DerivativeAtH + (1/pAtH)*YtilAtH(2*count-1)...
63         + (1/pAtH)*YatH(2*count)*1i;
64 end
65 error1 = Error(p, U0, q, 0, 0, usedPoints, SplineOrder);
66 plot(usedPoints,error1);
67 %-----Cálculo de potencias formales Xtil^n y X^n-----
68 [X,Xtil]=PowersX(U0,p,r,N+1,usedPoints,a-a0);
69 for count = 1:N+1
70     XatH(count) = X(count,length(usedPoints));
71     XAtusedPoints(count,:) = X(count,:);
72     XtilAtusedPoints(count,:) = Xtil(count,:);
73     XtilAtH(count) = Xtil(count,length(usedPoints));
74 end
75 %-----Cálculo de los coeficientes del polinomio-----
76 lambda = linspace(0,lambda_max,10000);
77 EvenPowersOfMiu(1) = u0DerivativeAtH*(1+1i*XatH(1))+1i/(u0AtH*pAtH);
78 OddPowersOfMiu(1) = mwAtmH/mbAtmH*pAtmH*(u0DerivativeAtH*XatH(1)...
79     +1/(u0AtH*pAtH))...
80     + u0AtH*mwAtH/mbAtH*((p1*r2/(r1*p2))^(1/2))*(1+ 1i*XatH(1));
81 for n=1:N/2
82     m = n;
83     EvenPowersOfMiu(n+1) = ((p1/r1)^n)*(u0DerivativeAtH*XtilAtH(2*n) ...
84         + 1/(u0AtH*pAtH)*XtilAtH(2*n-1)...
85         +1i*u0DerivativeAtH*XatH(2*n+1)+ 1i/(u0AtH*pAtH)*XatH(2*n)...
86         + u0AtH*pAtmH*(mwAtH/mbAtH) * (mwAtmH/mbAtmH) ...

```

```

87         *((r1/p1)^(1/2))*((r2/p2)^(1/2))*XatH(2*n-1));
88     OddPowersOfMiu(n+1) =...
89         ((p1/r1)^m)*(mwAtmH/mbAtmH*pAtmH*(u0DerivativeAtH*XatH(2*m+1)...
90         + 1/(u0AtH*pAtH)*XatH(2*m))...
91         + u0AtH*(mwAtH/mbAtH)*((p1*r2/(r1*p2))^(1/2))*XtilAtH(2*m)...
92         + li*XatH(2*m+1));
93 end
94 %-----Construcción del polinomio-----
95 Poly = zeros(1,N+1);
96 for n=0:N
97     if rem(n,2) == 0
98         Poly(N+1 - n) = EvenPowersOfMiu(n/2+1);
99     else
100        Poly(N+1 - n) = OddPowersOfMiu((n+1)/2);
101    end
102 end
103 %-----Cálculo de raíces del polinomio-----
104 SumaTotal=polyval(Poly,lambda);
105 SumaSpline = spapi(SplineOrder,lambda,real(SumaTotal));
106 lambdasViaSpline=sort(fnzeros(SumaSpline)');
107 raices = roots(Poly);
108 k=1;
109 for i = 1:length(raices)
110     if abs(imag(raices(i)))< 0.01
111         Raices(k)=raices(i);
112         k=k+1;
113     end
114 end
115 %-----Eigenvalores aproximados-----
116 LambdasAprox=(lambdasViaSpline(:,1).^2)*p1/r1;
117 Lambdasviaroots=(real(Raices)').^2*p1/r1;
118 %-----Eigenvalores exactos-----
119 for n = 0:beta-1
120     E(n+1) = -(h/2)*alpha^2*(beta-1-n)^2;
121 end
122 %-----Errores absolutos-----
123 flag = 0;
124 fprintf(['\tEigenvalor Exacto\t\t',...
125         '\t\t Eigenvalor Aproximado\tError Absoluto\n']);
126 for i=1:length(LambdasAprox)
127     for k = 1:length(E)
128         if abs(LambdasAprox(i)-E(k))< 9e-2
129             if LambdasAprox(i)>0
130                 fprintf(' %.15f \t\t %.15f \t\t %i\n',...

```

```

131         E(k),LambdasAprox(i),abs(E(k)-LambdasAprox(i)));
132     else
133         fprintf(' %.15f \t\t %.15f \t\t %i\n',...
134             E(k),LambdasAprox(i),abs(E(k)-LambdasAprox(i)));
135     end
136     flag=1;
137 end
138 end
139 if flag == 0
140     if LambdasAprox(i)>0
141         fprintf('No existe valor exacto \t %.15f \n',LambdasAprox(i));
142     else
143         fprintf('No existe valor exacto \t %.15f \n',LambdasAprox(i));
144     end
145 end
146 end
147 toc

```

Programa A.6: Potencial Scarf II hiperbólico con masa variable (*fnint*) (4.25)

```

1 tic
2 clear all;
3 clc
4
5 format long          %1 + Orden para aproximar las potencias formales
6 SplineOrder = 3;
7 Precision=10^-15
8 a0=-1; a=1;
9 Pts=10000;          %NoPts=2*Pts
10 Points1=linspace(a0,0,Pts);
11 Points2=linspace(0,a,Pts);
12 usedPoints=[Points1 Points2(2:Pts)]; %Partición uniforme
13 N=150; %Cantidad de términos considerados en la ec. de dispersión
14
15 CV = 4; %Cambio de variable
16 Points = CV*usedPoints;
17 %-----Potencial Poschl-Teller-----
18 h = 1; %Constante reducida de planck
19 alpha = 1; A = 3; B = 1; qq = 1; K = A^2; %Parámetros
20 q = ScarfIIPDM(A,B,K,h,alpha,qq,Points);
21 %-----Valores de p(x)-----
22 mw = (tanh(Points).^2 + alpha^2).^2;
23 mwAtA = mw(length(Points));
24 mb = (1 + alpha^2)^2;
25 p=- (h^2./ (2*mw)) * (1/CV^2);
26 p1=- (h^2/ (2*mb)) * (1/CV^2);
27 p2=- (h^2/ (2*mb)) * (1/CV^2);
28 pAt0=p(1);
29 pAtA=p(length(usedPoints));
30 lambda0=0;
31 %-----Valores de r(x)-----
32 r=1*ones(1,length(usedPoints));
33 r1=1;
34 r2=1;
35 %-----Intervalo en dónde calcular los ceros del polinomio-----
36 lambdamin=0;
37 lambdamax=sqrt(min(q)*r1/p1)-0.01;
38
39 q1=q-lambda0;
40 q22=- (1./p);
41
42 %--Construcción de sol. part. U0, sol de ec (pU0')'+qU0=0-----

```

```

43 %g1value]=ConstructionOfParticularSolution(q1, -p , 1, 0,...
44     usedPoints, a0, a, N, SplineOrder, Precision);
45 %g2value]=ConstructionOfParticularSolution(q1, -p , 0, 1,...
46     usedPoints, a0, a, N, SplineOrder, Precision);
47 %u0 = g1value + i*g2value;
48 [X,Xtil]=PowersX(q1,q22,N+1,usedPoints, SplineOrder);
49 for count = 1:N+1
50     XatA(count) = fnval(X(count),a);
51     XtilAtA(count) = fnval(Xtil(count),a);
52 end
53
54 y1=ones(1,length(usedPoints)); y2=zeros(1,length(usedPoints));
55 y1Der = zeros(1,length(usedPoints));
56 y2Der = ones(1,length(usedPoints));
57 for j=1:N
58     if rem(j,2)==0
59         Ytil = fnval(Xtil(j),usedPoints);
60         Y = fnval(X(j),usedPoints);
61         y1 = y1 + Ytil;
62         y2Der = y2Der + Y;
63     else
64         Y = fnval(X(j),usedPoints);
65         Ytil = fnval(Xtil(j),usedPoints);
66         y2 = y2 + Y;
67         y1Der = y1Der + Ytil;
68     end
69 end
70 u0Sol = y1+1i*y2;      u0=u0Sol;
71 u0Der = (-1./p).*(y1Der + 1i*y2Der);
72 u0spl=spapi(SplineOrder,usedPoints,u0);
73
74 u0DerivativeAtA = 1i*(-1/pAtA);
75 for count = 1:N/2
76     u0DerivativeAtA=u0DerivativeAtA+(-1/pAtA)*XtilAtA(2*count-1)+...
77         (-1/pAtA)*XatA(2*count)*1i;
78 end
79 %-----Cálculo de potencias formales Xtil^n y X^n-----
80 q11=(u0.^2).*r;
81 q12=1./(p.*(u0.^2));
82 [X,Xtil]=PowersX(q11,q12,N+1,usedPoints, SplineOrder);
83 for count = 1:N+1
84     XatA(count) = fnval(X(count),a);
85     XtilAtA(count) = fnval(Xtil(count),a);
86 end

```

```

87  %-----Cálculo de los coeficientes del polinomio-----
88  EvenPowersOfMiu(1)=(mb/mwAtA)*(u0DerivativeAtA*(1+li*XatA(1))...
89      +li/(u0AtA*pAtA));
90  OddPowersOfMiu(1) = u0DerivativeAtA*pAt0*XatA(1) +...
91      pAt0/(u0AtA*pAtA) + u0AtA*((p1*r2/(r1*p2))^(1/2)) +...
92      li*u0AtA*((p1*r2/(r1*p2))^(1/2))*XatA(1);
93  for n=1:N/2
94      m = n;
95      EvenPowersOfMiu(n+1)=
96          ((p1/r1)^n)*((mb/mwAtA)*u0DerivativeAtA*XtilAtA(2*n) +...
97              (mb/mwAtA)*li*u0DerivativeAtA*XatA(2*n+1) +...
98              (mb/mwAtA)*XatA(2*n)*li/(u0AtA*pAtA) +...
99              (mb/mwAtA)*XtilAtA(2*n-1)*1/(u0AtA*pAtA) +...
100          (mwAtA/mb)*((r1/p1)^(1/2))*((r2/p2)^(1/2))*u0AtA*pAt0*XatA(2*n-1));
101  OddPowersOfMiu(n+1)=((p1/r1)^m)*(u0DerivativeAtA*pAt0*XatA(2*m+1)+...
102      XatA(2*m)*pAt0/(u0AtA*pAtA) +...
103      u0AtA*((p1*r2/(r1*p2))^(1/2))*XtilAtA(2*m) +...
104      li*u0AtA*((p1*r2/(r1*p2))^(1/2))*XatA(2*m+1));
105  end
106  %-----Construcción del polinomio-----
107  P1 = zeros(1,N+1);
108  for n=0:N
109      if rem(n,2) == 0
110          P1(N+1 - n) = EvenPowersOfMiu(n/2+1);
111      else
112          P1(N+1 - n) = OddPowersOfMiu((n+1)/2);
113      end
114  end
115  %-----Cálculo de raíces del polinomio-----
116  lambdaPoints=linspace(lambdamin,lambdamax,10000);
117  rinlambda=polyval(P1,lambdaPoints);
118  rinlambdaspline=spapi(SplineOrder,lambdaPoints,real(rinlambda));
119  lambdaviaspline=fnzeros(rinlambdaspline)+lambda0
120  p1*(lambdaviaspline.^2)/r1 + K
121  toc

```

Programa A.7: Potencial Scarf II hiperbólico con masa variable (Cotes) (4.26)

```

1  tic
2  clear all;
3  clc
4
5  format long
6  SplineOrder = 4;
7  a0=-7;    a=7;                                %Intervalo [-h,h]
8  Pts=100000;                                %NoPts=2*Pts
9  Points1=linspace(a0,0,Pts);
10 Points2=linspace(0,a,Pts);
11 usedPoints=[Points1 Points2(2:Pts)];    %Partición uniforme
12 N=200;                                %Términos en la serie de la ec. de dispersión
13 %-----Potencial-Scarf II Hiperbólico-----
14 h = 1;    alpha = 1;    A = 3; B = 1;    M = 1;    K = A^2;    %Parámetros
15 Q = ScarfIIPDM(A,B,K,h,alpha,M,usedPoints);    %Potencial
16 %-----Valores de P(x)-----
17 mw = (tanh(usedPoints).^2 + alpha^2).^2;    %Masa en el pozo
18 mwAtH = mw(length(usedPoints));
19 mwAtmH = mw(1);
20 mbAtmH = (1 + alpha^2)^2;    %Masa en la barrera izquierda
21 mbAtH = (1 + alpha^2)^2;    %Masa en la barrera derecha
22 alpha1 = K;    alpha2 = K;
23 p=- (h^2./ (2*mw));
24 p1=- (h^2/ (2*mbAtmH));
25 p2=- (h^2/ (2*mbAtH));
26 pAtmH=p(1);
27 pAtH=p(length(usedPoints));
28 %-----Valores de R(x)-----
29 r=1*ones(1,length(usedPoints));
30 r1=1;
31 r2=1;
32 %-----Intervalo en dónde calcular los ceros del polinomio-----
33 lambdamin=0;
34 lambdamax=sqrt(min(Q)*r1/p1)-0.01;
35 %---Construcción de sol. particular U0, sol. de ec (pU0)'+qU0=0-----
36 [Y,Ytil]=PowersX(1,p,-Q,N+1,usedPoints,a-a0);
37 for count = 1:N+1
38     YatH(count) = Y(count,length(usedPoints));
39     YAtusedPoints(count,:) = Y(count,:);
40     YtilAtusedPoints(count,:) = Ytil(count,:);
41     YtilAtH(count) = Ytil(count,length(usedPoints));
42 end

```

```

43 z1=ones(1,length(usedPoints)); z2=zeros(1,length(usedPoints));
44 for j=1:N
45     if rem(j,2)==0
46         Ztil = Ytil(j,:);
47         z1 = z1 + Ztil;
48     else
49         Z = Y(j,:);
50         z2 = z2 + Z;
51     end
52 end
53 U0Sol = z1+1i*z2;      U0=U0Sol/U0Sol(1);
54 u0AtH = U0(length(usedPoints));
55 %-----Cálculo de la derivada de u0-----
56 u0DerivativeAtH = 1i*(1/pAtH);
57 for count = 1:N/2
58     u0DerivativeAtH = u0DerivativeAtH + (1/pAtH)*YtilAtH(2*count-1)...
59         + (1/pAtH)*YatH(2*count)*1i;
60 end
61 error1 = Error(p, U0, Q, 0, 0, usedPoints, SplineOrder);
62 plot(usedPoints,error1);
63 %-----Cálculo de potencias formales Xtil^n y X^n-----
64 [X,Xtil]=PowersX(U0,p,r,N+1,usedPoints,a-a0);
65 for count = 1:N+1
66     XatH(count) = X(count,length(usedPoints));
67     XAtusedPoints(count,:) = X(count,:);
68     XtilAtusedPoints(count,:) = Xtil(count,:);
69     XtilAtH(count) = Xtil(count,length(usedPoints));
70 end
71 %-----Cálculo de coeficientes del polinomio-----
72 lambda = linspace(lambdamin,lambdamax,10000);
73 EvenPowersOfMiu(1) = u0DerivativeAtH*(1+1i*XatH(1))+1i/(u0AtH*pAtH);
74 OddPowersOfMiu(1) = (p1*u0DerivativeAtH*XatH(1) + p1*1/(u0AtH*pAtH))...
75     + (p2*u0AtH/pAtH)*((p1*r2/(p2*r1))^(1/2))*(1+ 1i*XatH(1));
76 for n=1:N/2
77     m = n;
78     EvenPowersOfMiu(n+1)=(p1/r1)^n*(u0DerivativeAtH*XtilAtH(2*n) ...
79         + 1/(u0AtH*pAtH)*XtilAtH(2*n-1)...
80         + 1i*u0DerivativeAtH*XatH(2*n+1)+ 1i/(u0AtH*pAtH)*XatH(2*n)...
81         + (p2*r1*u0AtH/pAtH)*(((p1*r2)/(p2*r1))^(1/2))*XatH(2*n-1));
82     OddPowersOfMiu(n+1)=(p1/r1)^m*(p1*(u0DerivativeAtH*XatH(2*m+1)...
83         + 1/(u0AtH*pAtH)*XatH(2*m))...
84         + (p2*u0AtH/pAtH)*((p1*r2/(p2*r1))^(1/2))*XtilAtH(2*m)...
85         + 1i*XatH(2*m+1));
86 end

```

```

87  %-----Construcción del polinomio-----
88  Poly = zeros(1,N+1);
89  for n=0:N
90      if rem(n,2) == 0
91          Poly(N+1 - n) = EvenPowersOfMiu(n/2+1);
92      else
93          Poly(N+1 - n) = OddPowersOfMiu((n+1)/2);
94      end
95  end
96  %-----Cálculo de raíces del polinomio-----
97  SumaTotal=polyval(Poly,lambda);
98  SumaSpline = spapi(SplineOrder,lambda,real(SumaTotal));
99  lambdasViaSpline=sort(fnzeros(SumaSpline)');
100 raices = roots(Poly);
101 k=1;
102 for i = 1:length(raices)
103     if abs(imag(raices(i)))< 0.01
104         Raices(k)=raices(i);
105         k=k+1;
106     end
107 end
108 %-----Eigenvalores aproximados-----
109 LambdasAprox=(lambdasViaSpline(:,1).^2)*p1/r1 + K;
110 Lambdasviaroots=(real(Raices)').^2*p1/r1 + K;
111 %-----Eigenvalores exactos-----
112 for n = 0:sqrt(2*M)*A/(alpha*h)
113     E(n+1) = A^2-(A-n*alpha*h/(sqrt(2*M)))^2;
114 end
115 %-----Errores absolutos-----
116 flag = 0;
117 fprintf(['\tEigenvalor Exacto\t\t',...
118         '\tEigenvalor Aproximado\t\tError Absoluto\n']);
119 for i=1:length(LambdasAprox)
120     for k = 1:length(E)
121         if abs(LambdasAprox(i)-E(k))< 9e-2
122             if LambdasAprox(i)>0
123                 fprintf(' %.15f \t\t %.15f \t\t %i\n',...
124                     E(k),LambdasAprox(i),abs(E(k)-LambdasAprox(i)));
125             else
126                 fprintf(' %.15f \t\t %.15f \t\t %i\n',...
127                     E(k),LambdasAprox(i),abs(E(k)-LambdasAprox(i)));
128             end
129             flag=1;
130         end

```

```
131 end
132 if flag == 0
133     if LambdasAprox(i)>0
134         fprintf('No existe valor exacto \t %.15f \n',LambdasAprox(i));
135     else
136         fprintf('No existe valor exacto \t  %.15f \n',LambdasAprox(i));
137     end
138 end
139 end
140 toc
```

Programa A.8: Potencial Poschl-Teller complejo (4.27)

```

1 tic
2 clear all;
3 clc
4
5 format long
6 SplineOrder = 4;
7 a0=-19; a=19; % Intervalo [-h,h]
8 Pts=100000; % NoPts=2*Pts
9 Points1=linspace(a0,0,Pts);
10 Points2=linspace(0,a,Pts);
11 usedPoints=[Points1 Points2(2:Pts)]; %Partición uniforme
12 N=200; %Términos en la serie de la ec. de dispersión
13
14 %-----Potencial-Poschl-Teller-----
15 h = 1; V1 =24; V2 = 25;
16 Q = ComplexPoschlTellerPotential(V1,V2,usedPoints);
17 %-----Valores de p(x)-----
18 mw = (1/2)*ones(1,length(usedPoints)); %Masa del pozo
19 mwAtmH = mw(1);
20 mwAtH = mw(length(usedPoints));
21 mbAtmH = 1/2; %Masa en la barrera izquierda
22 mbAtH = 1/2; %Masa en la barrera derecha
23 alpha1 = 0; alpha2 = 0;
24 p=- (h^2./(2*mw));
25 p1=- (h^2/(2*mbAtmH));
26 p2=- (h^2/(2*mbAtH));
27 pAtmH=p(1);
28 pAtH=p(length(usedPoints));
29 %-----Valores de r(x)-----
30 r=1*ones(1,length(usedPoints));
31 r1=1;
32 r2=1;
33 %--Construcción de sol. part. U0, sol de ec (pU0')'+qU0=0-----
34 [Y,Ytil]=PowersX(1,p,-Q,N+1,usedPoints,a-a0);
35 for count = 1:N+1
36 YatH(count) = Y(count,length(usedPoints));
37 YAtusedPoints(count,:) = Y(count,:);
38 YtilAtusedPoints(count,:) = Ytil(count,:);
39 YtilAtH(count) = Ytil(count,length(usedPoints));
40 end
41 z1=ones(1,length(usedPoints));
42 z2=zeros(1,length(usedPoints));

```

```

43 for j=1:N
44     if rem(j,2)==0
45         Ztil = Ytil(j,:);
46         z1 = z1 + Ztil;
47     else
48         Z = Y(j,:);
49         z2 = z2 + Z;
50     end
51 end
52 U0Sol = z1;      U0=U0Sol/U0Sol(1);
53 u0AtH = U0(length(usedPoints));
54 %-----Construcción de la derivada de u0-----
55 u0DerivativeAtH = 0;
56 for count = 1:N/2
57     u0DerivativeAtH = u0DerivativeAtH + (1/pAtH)*YtilAtH(2*count-1);
58 end
59 error1 = Error(p, U0, Q, 0, 0, usedPoints, SplineOrder);
60 %plot(usedPoints,error1);
61 %pause
62 %-----Cálculo de potencias formales Xtil^n y X^n-----
63 [X,Xtil]=PowersX(U0,p,r,N+1,usedPoints,a-a0);
64 for count = 1:N+1
65     XatH(count) = X(count,length(usedPoints));
66     XAtusedPoints(count,:) = X(count,:);
67     XtilAtusedPoints(count,:) = Xtil(count,:);
68     XtilAtH(count) = Xtil(count,length(usedPoints));
69 end
70 %-----Cálculo de los coeficientes del polinomio-----
71 EvenPowersOfMiu(1) = u0DerivativeAtH;
72 OddPowersOfMiu(1) = u0DerivativeAtH*p1*XatH(1)+p1/(u0AtH*pAtH)...
73     + p2*u0AtH/pAtH*((p1*r2/(r1*p2))^(1/2));
74 for n=1:N/2
75     m = n;
76     EvenPowersOfMiu(n+1) = ((p1/r1)^n)*(u0DerivativeAtH*XtilAtH(2*n) ...
77         + 1/(u0AtH*pAtH)*XtilAtH(2*n-1)...
78         + (1/pAtH)*p2*r1*u0AtH*((p1*r2/(p2*r1))^(1/2))*XatH(2*n-1));
79     OddPowersOfMiu(n+1) =...
80         ((p1/r1)^m)*(u0DerivativeAtH*p1*XatH(2*m+1)...
81         + p1/(u0AtH*pAtH)*XatH(2*m)...
82         + p2*u0AtH*(1/pAtH)*((p1*r2/(r1*p2))^(1/2))*XtilAtH(2*m));
83 end
84 %-----Construcción del polinomio-----
85 Poly = zeros(1,N+1);
86 for n=0:N

```



```

131         ==floor((abs(real(ExactMu(k)))*10)
132         && floor((abs(imag(RealMus(i)))*10)
133         ==floor((abs(imag(ExactMu(k)))*10))
134     if imag(RealMus(i))>0
135         fprintf('%.16f +%.16fi  %.16f +%.16fi \t %i\n',real(RealMus(i)),
136         imag(RealMus(i)),real(ExactMu(k)),imag(ExactMu(k)),
137         abs(RealMus(i)-ExactMu(k)));
138     else
139         fprintf('%.16f %.16fi  %.16f %.16fi \t %i\n',real(RealMus(i)),
140         imag(RealMus(i)),real(ExactMu(k)),imag(ExactMu(k)),
141         abs(RealMus(i)-ExactMu(k)));
142     end
143     flag=1;
144 end
145 end
146 end
147 if flag == 0
148     if imag(RealMus(i))>0
149         fprintf('%.16f +%.16fi \t\t\t No existe valor exacto \t \n',
150         real(RealMus(i)),imag(RealMus(i)));
151     else
152         fprintf('%.16f %.16fi \t\t\t No existe valor exacto \t \n',
153         real(RealMus(i)),imag(RealMus(i)));
154     end
155 end
156 end
157 %-----Principio de Argumento-----
158 tPoints = linspace(0,2*pi,50000);
159 Contour = Radius*(cos(tPoints) + 1i*sin(tPoints));
160 PolyDer = polyder(Poly);
161 PhiN = polyval(Poly,Contour);
162 PhiNDer = polyval(PolyDer,Contour);
163 Integral = ninteg((PhiNDer./PhiN).*(-Radius*sin(tPoints)...
164         +Radius*1i*cos(tPoints)),2*pi);
165 Integralwithninteg=Integral(length(Integral))/(2*pi*1i);
166 IntegralwithTrapz = trapz(tPoints,(PhiNDer./PhiN)...
167     .*(-Radius*sin(tPoints)+1i*Radius*cos(tPoints)))/(2*pi*1i);
168 %-----Plot log(PhiN)-----
169 Noxx = 1000; Noyy = 1000;
170 xx = linspace(-3.5,3.5,Noxx);
171 yy = linspace(-3.5,3.5,Noyy);
172 %ComplexPoints = xx + 1i*yy;
173 for i = 1:Noxx
174     for j = 1:Noyy

```

```
175         MatrixPoints(i,j) = xx(i) + li*yy(j);
176     end
177 end
178 PolyVals = polyval(Poly,MatrixPoints);
179 zz = -log(abs(PolyVals));
180 %mesh(xx,yy,zz)
181 surf(xx,yy,zz)
182 shading interp
183 colormap(jet(256))
184 camlight right
185 lighting phong
186 axis([-5 5 -5 5 -30 2])
187 toc
```

BIBLIOGRAFÍA

- Aktaş, M. and R. Sever. 2008. Effective mass Schrödinger equation for exactly solvable class of one-dimensional potentials. *J. Math. Chem.* 43(1):92–100.
- Al-Gwaiz, M. A. 2008. *Sturm-Liouville Theory and its Applications*. Springer-Verlag, London.
- Aquino, N., G. Campoy, and H. Yee-Madeira. 1998. The inversion potential for NH_3 using a DFT approach. *Chem. Phys. Lett.* 296:111–116.
- Arias de Saavedra, F., J. Boronat, A. Polls, and A. Fabrocini. 1994. Effective mass of one ^4He atom in liquid ^3He . *Phys. Rev. B.* 50(6):4248–4251.
- Bagchi, B., P. Gorain, C. Quesne, and R. Roychoudhury. 2004. A general scheme for the effective-mass Schrödinger equation and the generation of the associated potentials. *Mod. Phys. Lett. A.* 19(37):2765–2775.
- Barranco, M., M. Pi, S. M. Gatica, E. S. Hernández, and J. Navarro. 1997. Structure and energetics of mixed ^4He - ^3He drops. *Phys. Rev. B.* 56(14):8997–9003.
- Biswas, S. K., L. J. Schowalter, Y. J. Jung, A. Vijayaraghavan, P. M. Ajayan, and R. Vajtai. 2005. Room-temperature resonant tunneling of electrons in carbon nanotube junction quantum wells. *Appl. Phys. Lett.* 86(18):183101(1–3).
- Castillo-Perez, R., V. V. Kravchenko, H. Oviedo-Galdeano, and V. S. Rabinovich. 2011. Dispersion equation and eigenvalues for quantum wells using spectral parameter power series. *J. Math. Phys.* 52(4):043522–10.
- Castillo-Pérez, R., V. V. Kravchenko, and S. M. Torba. 2013. Spectral parameter power series for perturbed Bessel equations. *Appl. Math. Comput.* 220(0):676–694.
- De, R., R. Dutt, and U. Sukhatme. 1992. Mapping of shape invariant potentials under point canonical transformations. *J. Phys. A: Math. Gen.* 25(13):L843.
- Feynman, R., R. Leighton, and M. Sands. 2011. *The Feynman Lectures on Physics: Quantum Mechanics*. Basic Books.
- Flügge, S. 1999. *Practical quantum mechanics*. Springer, Berlin.
- Förster, J., A. Saenz, and U. Wolff. 2012. Matrix algorithm for solving Schrödinger equations with position-dependent mass or complex optical potentials. *Phys. Rev. E.* 86(1):016701.

- Gang, C. 2005. Mapping of the position-dependent mass Schrödinger equation under point canonical transformation. *Chinese Phys.* 14(3):460.
- Ganguly, A. and L. M. Nieto. 2007. Shape-invariant quantum Hamiltonian with position-dependent effective mass through second-order supersymmetry. *J. Phys. A: Math. Theor.* 40(26):7265.
- Ganguly, A., . Kuru, J. Negro, and L. Nieto. 2006. A study of the bound states for square potential wells with position-dependent mass. *Phys. Lett. A.* 360(2):228–233.
- Geller, M. and W. Kohn. 1993. Quantum mechanics of electrons in crystals with graded composition. *Phys. Rev. Lett.* 70:3103–3106.
- Gönül, B., O. Özer, B. Gönül, and F. Üzgün. 2002. Exact solutions of effective-mass Schrödinger equations. *Mod. Phys. Lett. A.* 17(37):2453–2465.
- Harrison, P. 2006. *Quantum wells, wires and dots theoretical and computational physics of semiconductor nanostructures*, (2nd ed.). Wiley-Interscience, England.
- Huang, C., S. Chao, D. Hang, and Y. Lee. 2008. On the transfer matrix method and the WKB approximation for the Schrödinger equation with position-dependent effective mass. *Chinese J. Phys.* 46(3):231–241.
- Jia, C.-S., X.-L. Zeng, and L.-T. Sun. 2002. PT symmetry and shape invariance for a potential well with a barrier. *Phys. Lett. A.* 294(3–4):185–189.
- Jirauschek, C. 2009. Accuracy of Transfer Matrix Approaches for Solving the Effective Mass Schrödinger Equation. *IEEE J. Quantum Elect.* 45(9):1059–1067.
- Jonsson, B. and S. Eng. 1990. Solving the Schrodinger equation in arbitrary quantum-well potential profiles using the transfer matrix method. *IEEE J. Quantum Elect.* 26(11):2025–2035.
- Kerimov, G. A. 2009. Exactly solvable position-dependent mass Hamiltonians related to non-compact semi-simple Lie groups. *J. Phys. A: Math. Theor.* 42(44):445210(1–12).
- Khmelnyskaya, K. V., V. V. Kravchenko, and J. A. Baldenebro-Obeso. 2012. Spectral parameter power series for fourth-order Sturm–Liouville problems. *Appl. Math. Comput.* 219(8):3610–3624.
- Khmelnyskaya, K. V., V. V. Kravchenko, and E. Ortiz-Caballero. 2013. Cálculo de niveles de energía de pozos cuánticos mediante el método de series de potencias en términos del parámetro espectral. In: *9th Int. Congr. Eng., UAQ, Querétaro, México*.
- Killingbeck, J. P. 2011. The Schrödinger equation with position-dependent mass. *J. Phys. A: Math. Theor.* 44(28):285208.
- Koç, R. and S. Sayin. 2010. Remarks on the solution of the position-dependent mass Schrödinger equation. *J. Phys. A: Math. Theor.* 43(45):455203.

- Koç, R. and H. Tütüncüler. 2003. Exact solution of position dependent mass Schrödinger equation by supersymmetric quantum mechanics. *Ann. Phys.-Berlin*. 12(11-12):684–691.
- Kravchenko, V. V. 2008. A representation for solutions of the Sturm–Liouville equation. *Complex Var. Elliptic*. 53(8):775–789.
- Kravchenko, V. V. 2009. *Applied Pseudoanalytic Function Theory*. Birkhäuser, Basel.
- Kravchenko, V. V. and R. M. Porter. 2010. Spectral parameter power series for Sturm–Liouville problems. *Math. Method Appl. Sci*. 33(4):459–468.
- Kravchenko, V. V. and S. M. Torba. 2014. Modified spectral parameter power series representations for solutions of Sturm–Liouville equations and their applications. *Appl. Math. Comput*. 238(0):82–105.
- Landolt-Börnstein. 1987. *Numerical data and functional relationships in science and technology*, volume 22a of series III. Springer-Verlag, Berlin.
- Levai, G. 1989. A search for shape-invariant solvable potentials. *J. Phys. A: Math. Gen*. 22(6):689.
- Luque, A., E. Antolín, P. Linares, I. Ramiro, A. Mellor, I. Tobías, and A. Martí. 2013. Interband optical absorption in quantum well solar cells. *Sol. Energ. Mat. Sol. C*. 112: 20–26.
- Lévai, G. and O. Özer. 2010. An exactly solvable Schrödinger equation with finite positive position-dependent effective mass. *J. Math. Phys*. 51(9).
- Nakamura, K., A. Shimizu, M. Koshiba, and K. Hayata. 1989. Finite-element analysis of quantum wells of arbitrary semiconductors with arbitrary potential profiles. *IEEE J. Quantum Elect*. 25(5):889–895.
- Ortiz-Caballero, E. 2014. Application of the one-dimensional Schrödinger equation with variable mass to nanostructures. In: *10th Int. Congr. Eng.: Engineering and its Applications*. vol. 1. Querétaro, México. p. 191.
- Ortiz-Caballero, E. and K. V. Khmelnytskaya. 2013. La ecuación de Hill y sus aplicaciones. In: *7th PG. Symp. DIPFI-UAQ*. Querétaro, México. p. 169.
- Ou, Y. C., Z. Cao, and Q. Shen. 2004. Energy eigenvalues for the systems with position-dependent effective mass. *J. Phys. A: Math. Gen*. 37(14):4283.
- Page, H., C. Becker, A. Robertson, G. Glastre, V. Ortiz, and C. Sirtori. 2001. 300 K operation of a GaAs-based quantum-cascade laser at $\lambda \approx 9\mu m$. *Appl. Phys. Lett*. 78(22):3529–3531.
- Pilar, F. 2013. *Elementary Quantum Chemistry*, (2nd ed.). Dover Publications, New York.
- Puente, A., L. Serra, and M. Casas. 1994. Dipole excitation of Na clusters with a non-local energy density functional. *Z. Phys. D*. 31:283–286.

- Ring, P. and P. Schuck. 1980. *The Nuclear Many-Body Problem*. Springer-Verlag, Berlin.
- Roy, B. 2005. Lie algebraic approach to singular oscillator with a position-dependent mass. *Europhys. Lett.* 72(1):1–6.
- Tezcan, C. and R. Sever. 2007. Exact solutions of the Schrödinger equation with position-dependent effective mass via general point canonical transformation. *J. Math. Chem.* 42(3):387–395.
- Tezcan, C., R. Sever, and z. Yeşiltaş. 2008. A New Approach to the Exact Solutions of the Effective Mass Schrödinger Equation. *Int. J. Theor. Phys.* 47(6):1713–1721.
- Yahiaoui, S.-A. and M. Bentaiba. 2009. A group-theoretical method for Natanzon potentials in position-dependent mass background by means of conformal mappings. *Int. J. Theor. Phys.* 48(2):315–322.