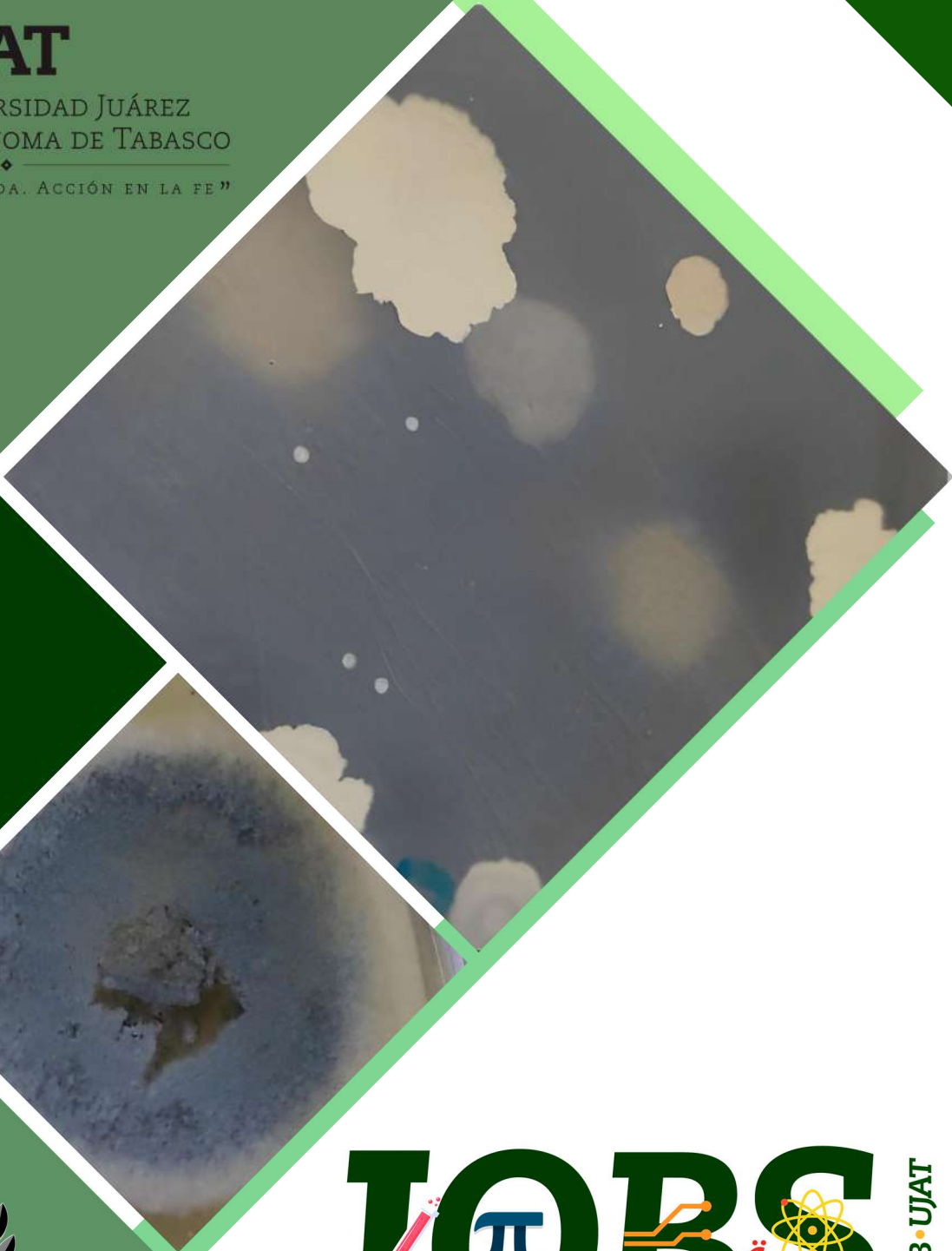




**UJAT**

UNIVERSIDAD JUÁREZ  
AUTÓNOMA DE TABASCO

“ESTUDIO EN LA DUDA. ACCIÓN EN LA FE”



# JOB $\pi$ BS

DACB • UJAT

## Journal of Basic Sciences

Volumen 10 • número 29 • septiembre-diciembre 2024

ISSN:2448-4997

<https://revistas.ujat.mx/index.php/jobs>





En el número 29 del Journal of Basic Sciences, los lectores podrán encontrar reportes de investigaciones en diversos ámbitos del quehacer de las ciencias básicas, que al generar y aplicar el conocimiento científico, se encaminan hacia la atención de problemáticas específicas y también a una mejor comprensión del universo.

Por ejemplo, el desarrollo de procedimientos analíticos para el control de calidad de productos para el consumo humano, es indispensable para asegurar los beneficios, así como disminuir los riesgos potenciales que puedan estar asociados. Es así que se presenta un estudio dirigido a la optimización de un método de preconcentración dirigido a la determinación de contaminantes derivados del ácido ftálico, que pueden estar presentes en bebidas embotelladas. El método reportado presenta una buena precisión y buenos límites de detección, por lo que se considera una buena opción en el pretratamiento de muestras. Por otro lado, se incluye una aportación dirigida a evaluar la calidad microbiológica de dos bebidas ancestrales: el aguamiel y el pulque, cuyo consumo puede representar un beneficio por el aporte de probióticos y prebióticos, aunque es necesario el establecimiento de parámetros normados de calidad e inocuidad, que puedan dar certeza a los procesos de fabricación de las mismas.

Una problemática actual en la química ambiental, son los denominados contaminantes emergentes, los cuales no están regulados en su disposición final por encontrarse en bajas concentraciones, pero que tienen la propiedad de ser bioacumulables, representando un riesgo potencial para la salud. Este es el caso de colorantes industriales como el naranja ácido 52, para el cual se presenta un estudio de su procesos de degradación mediante diversas tecnologías avanzadas de oxidación, con resultados efectivos para su remoción. En otro orden de ideas, el diseño de materiales con propiedades específicas es también un área de gran interés, como lo muestra el artículo relacionado con la evaluación de hidrogeles de carboximetilcelulosa como agentes para la liberación controlada de fármacos.

Además, en este número se presenta un estudio relacionado con la estimación de parámetros para la interacción de tres especies en un nicho ecológico: planta, plaga y agente de biocontrol, empleando la modelación matemática por un método multipasos. No menos importante, es la contribución presentada para la determinación numérica de los estados ligados de un sistema cuántico, con un pozo de potencial triangular, lo que permitió profundizar en la comprensión de este tipo de sistemas.

Así, con este número del Journal of Basic Sciences, se difunde el quehacer científico en diferentes vertientes, esperando sea de utilidad para nuestros lectores.

## DIRECTORIO INSTITUCIONAL

### Universidad Juárez Autónoma de Tabasco

- Lic. Guillermo Narváz Osorio. Rector
- Dr. Luis Manuel Hernández Govea. Secretario de Servicios Académicos
- Dr. Wilfrido Miguel Contreras Sánchez. Secretario de Investigación, Posgrado y Vinculación
- Dr. Pablo Marín Olán. Director de Difusión, Divulgación Científica y Tecnológica

### Directorio Divisional

#### División Académica de Ciencias Básicas

- Dra. Hermicenda Pérez Vidal. Directora
- Dr. Luis Manuel Martínez González. Coordinador de Investigación
- M.C. Abel Cortazar May. Coordinador de Docencia
- L.Q. Esmeralda León Ramos. Coordinador de Difusión Cultural y Extensión

### Comité Editorial

- Dr. Carlos Ernesto Lobato García. Editor en Jefe
- Dr. Adib Abiu Silahua Pavón. Gestor Editorial
- Mtra. Claudia Gisela Vázquez Cruz. Editora Asociada. Actuaría
- Mtra. María Hortensia Almaguer Cantú. Editora Asociada. Ciencias de la Computación
- Dr. José Arnold González Garrido. Editor Asociado. Ciencias Farmacéuticas
- Dr. José Luis Benítez Benítez. Editor Asociado. Física
- Mtro. Guillermo Chávez Hernández. Editor Asociado. Geofísica
- Dra. Addy Margarita Bolívar Cimé. Editora Asociada. Matemáticas
- Dra. Nancy Romero Ceronio. Editoria Asociada. Química

## CONTENIDO

	<b>Pag.</b>
<b>Determinación de ftalatos en bebidas envasadas con PET, empleando un método MSFIA acoplado a HPLC-DAD</b>	<b>1-16</b>
<b>Evaluación de la calidad microbiológica del aguamiel y pulque de San Agustín Tlaxiaca, Hgo., México</b>	<b>17-26</b>
<b>Análisis químico de la degradación del naranja ácido 52 aplicando Tecnologías Avanzadas de Oxidación</b>	<b>27-36</b>
<b>Cinética de liberación controlada del acetaminofén a partir del gel de carboximetilcelulosa</b>	<b>37-49</b>
<b>Numerical estimation of parameters in mathematical models for pest control</b>	<b>50-63</b>
<b>Método multi-escalón para determinar el espectro de energía de diferentes pozos de potencial cuánticos</b>	<b>64-72</b>

## Método multi-escalón para determinar el espectro de energía de diferentes pozos de potencial cuánticos

López-Villamil, R.E.<sup>1,\*</sup>, Pérez-Castro, I.<sup>2</sup>, Zapata-de la Cruz, M. A.<sup>3</sup>, Tiscareño-Ramirez, J.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Universidad Autónoma de Nuevo León, FIME

<sup>2</sup>Cinvestav-Zacatenco, Departamento de Física

<sup>3</sup>Universidad Nacional Autónoma de México, IF

\* ramon.lopezv@uanl.edu.mx

---

### Resumen

En este trabajo se determinan numéricamente los estados ligados de un sistema cuántico con un pozo potencial triangular. Además, se estudia un caso práctico en el que se analiza un potencial presente en dispositivos MOSFET. Para ambos casos, se emplea el método de aproximación multi-escalón, que consiste en aproximar el potencial mediante una cadena de n-potenciales escalón. A partir de este nuevo potencial, las expresiones de los coeficientes de reflexión y transmisión se determinan mediante una fórmula recursiva, la cual es una generalización de los coeficientes para el caso del potencial escalón simple. Para el sistema con un pozo triangular, se encuentran dos energías ligadas con errores relativos menores al 1%, mientras que para el potencial asociado a los dispositivos MOSFET se obtiene una sola energía ligada.

**Palabras claves:** Multi-escalón, Pozo de potencial, Ecuación de Schrödinger, Estados ligados, MOSFET

### Abstract

In this work, the bound states of a quantum system with a triangular potential well are numerically determined. Additionally, a practical case is studied in which a potential found in MOSFET devices is analyzed. In both cases, the multi-step approximation method is used, which involves approximating the potential by a chain of n-step potentials. From this new potential, the expressions for the reflection and transmission coefficients are determined through a recursive formula, which is a generalization of the coefficients for the simple step potential case. For the system with a triangular well, two bound energies are found with relative errors of less than 1%, while for the potential associated with MOSFET devices, only one bound energy is obtained

**Keywords:** Multi-step, Potential well, Schrödinger equation, Bound states, MOSFET

---

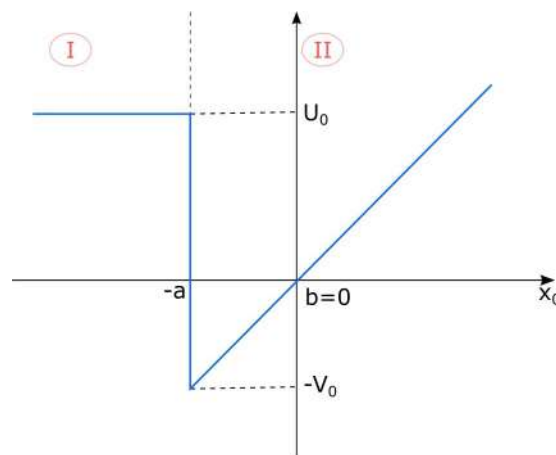
Recibido: 13 de junio de 2024, Aceptado: 04 de diciembre de 2024, Publicado: 16 de diciembre de 2024

## 1. Introducción

Cuando se conoce el potencial de un sistema cuántico, este puede analizarse mediante la ecuación de Schrödinger. Sin embargo, en ocasiones no es posible resolver la ecuación de Schrödinger de manera analítica, lo que hace imposible determinar el espectro de energía asociado al sistema cuántico. En tales casos, es necesario recurrir a métodos de aproximación [1]-[4], entre ellos el método de aproximación multi-escalón, también llamado método de aproximación multi-step [5]. Este método es aplicable a potenciales unidimensionales arbitrarios, suaves e independientes del tiempo. En este caso, se sabe que la solución a la ecuación de Schrödinger describe un estado estacionario, en el cual la función de onda asociada posee una parte espacial y una temporal. El método de aproximación multi-step permite modelar el potencial como una cadena de n-potenciales escalón.

Aplicando las condiciones de frontera a la parte espacial de la función de onda<sup>1</sup> para el caso de un único potencial escalón, podemos obtener el llamado coeficiente de reflexión  $R$ . Es bien conocida la expresión para la amplitud de reflexión, que está relacionada con el coeficiente  $R$  mediante  $|r|^2$ . Esta idea puede generalizarse para el caso de n-potenciales escalón, determinando una fórmula recursiva para la amplitud de reflexión  $r$ . A partir de esta amplitud y con la ayuda de la densidad de corriente, es posible calcular el coeficiente de reflexión  $R$ , y una vez obtenido, determinar el coeficiente de transmisión, ya que ambos están relacionados por la expresión  $T = R - 1$  [6]. Con esto, es posible identificar los estados ligados, cuasiligados y resonantes.

En este trabajo se aplica el método multi-escalón a un sistema cuántico con un potencial unidimensional del tipo barrera-lineal, con el objetivo de encontrar los espectros de energía asociados a dicho potencial y analizar la región  $(-a, x_0]$ .



**Figura 1.** Grafica del pozo potencial triangular.

Se observa que el potencial se divide en tres regiones, por lo que es posible expresar el potencial como una función a trozos, es decir:

$$V(x) = \begin{cases} U_0 & \text{si } -\infty < x < a. \\ \frac{V_0}{a}x & \text{si } x > -a. \end{cases} \quad (1)$$

En la región  $(-\infty, -a)$ , el potencial es constante, mientras que en la región  $[-a, \infty)$  el potencial es lineal, descrito por la ecuación  $mx - d$ , siendo la pendiente  $m = \frac{V_0}{a}$ .



Para analizar este sistema de manera cuántica<sup>2</sup>, es necesario resolver la ecuación de Schrödinger para el potencial dado. Así, se recuerda que, a partir de la ecuación (1), se tiene un potencial a trozos. De la ecuación de Schrödinger unidimensional, y notando que la función de onda solo depende de  $x$  y  $t$ , dado que se está trabajando con estados estacionarios, la solución es de la forma  $\psi(x,t) = \phi(x)e^{-iEt/\hbar}$  [7].

Dado que el potencial está definido en trozos, es necesario resolver la ecuación diferencial en cada región y, posteriormente, aplicar las condiciones de frontera. Además, el signo de la diferencia en  $V(x) - E$  determina el comportamiento de las soluciones de la ecuación de valores propios, por lo que se deben analizar las soluciones cuando  $-V_0 < E < 0$  y  $E > U_0$  [7, 14, 15]. Para los estados con energía  $-V_0 < E < 0$ , se obtiene que las soluciones espaciales a la ecuación de Schrödinger para cada región son:

$$\phi(x) = \begin{cases} A_1 \exp(ik_1x) + B_1 \exp(-ik_1x) & , si \ -\infty < x < -a. \\ C_1 Ai \left( \left( \frac{2m}{\hbar} \left( \frac{a}{V_0} \right)^2 \right)^{1/3} \left( \frac{V_0}{a} x - E \right) \right) & , si \ x > -a. \end{cases} \quad (2)$$

Donde  $A_1, A_2, B_1, B_2, C_1$  son constantes y con  $k_1 = \sqrt{\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}}$  y  $Ai$  es la función de Airy de primer tipo.

Mientras que para los estados con energía  $E > U_0$  se tiene que:

$$\phi(x) = \begin{cases} A_2 \exp(ik_2x) + B_2 \exp(-ik_2x) & , si \ -\infty \leq x \leq -a. \\ C_2 Ai(\xi) + iD_2 Bi(\xi) & , si \ x > -a. \end{cases} \quad (3)$$

Donde  $A_3, A_4, B_3, B_4, C_2, D_2$  son constantes y con  $k_3 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - U_0)} > 0$ ,  $Ai$  es la función de Airy y  $Bi$  es

la función relacionada de Airy, con argumento  $\xi = \left( \frac{2m}{\hbar} \left( \frac{a}{V_0} \right)^2 \right)^{1/3} \left( \frac{V_0}{a} x - E \right)$ . En principio, debería ser posible determinar la forma de los coeficientes que establecen el coeficiente de reflexión y transmisión. Sin embargo, se presenta la dificultad de trabajar con las funciones de Airy, por lo que resulta conveniente utilizar la amplitud de reflexión determinada mediante el método multi-escalón, y notar que es posible determinar de manera aproximada la energía de transmisión resonante, donde  $T = 1$ . Para calcular el rango de error relativo de las aproximaciones obtenidas con este método, se aplicará el mismo procedimiento a un pozo cuántico triangular, como los estudiados en [3, 8], y cuyo procedimiento para obtener valores exactos se detalla en [1, 9]. En estos estudios, se asume que la masa efectiva del electrón es uniforme en todas partes e igual a  $0.067 m_0$ , donde  $m_0$  es la masa libre del electrón.

Por último, se tratará de determinar el espectro de energía de un pozo de potencial de interés en la física del estado sólido, ya que la forma de este potencial es de importancia en las heteroestructuras cuánticas de semiconductores y en las estructuras de semiconductores de óxido metálico [10-12]. Un ejemplo de esto es la tecnología del transistor de efecto de campo de metal-óxido-semiconductor, o por sus siglas en inglés, MOSFET (Metal-Oxide-Semiconductor Field-Effect Transistor) los cuales son dispositivos fundamentales en la electrónica moderna, utilizados ampliamente en circuitos integrados y aplicaciones de potencia. Dado que un sólido real es tridimensional y el tratamiento matemático se complica, un modelo en una dimensión muestra parte del comportamiento cualitativo observado en tres dimensiones.

## 2. Teoría

El método de aproximación multiescalón se utiliza para determinar los estados ligados y cuasiligados asociados a un sistema cuántico con un potencial que presenta múltiples pozos arbitrarios [13]. Cuando en la ecuación de Schrödinger el potencial es independiente del tiempo, es decir,  $V(x, t) = V(x)$ , como en el caso en que se estudian múltiples pozos cuánticos, se puede resolver proponiendo la separación de variables  $\psi(x, t) = \phi(x)f(t)$ . Al sustituir en la ecuación de Schrödinger, se pueden obtener las siguientes ecuaciones:

$$i\hbar \frac{\partial f(t)}{\partial t} = E f(t). \quad (4)$$

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi(x) + V(x)\phi(x) = E\phi(x) \quad (5)$$

Resolviendo la primera ecuación utilizando las condiciones de contorno, se encuentra que la solución corresponde a un estado estacionario  $\Psi(x, t) = \phi(x) e^{-Et/\hbar}$ . Para aplicar el método de aproximación multiescalón, se considerará un potencial  $V(x)$  que se aproxima mediante  $n$ -escalones de potencial 3, tal que:

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & x < 0. \\ V_1, & 0 \leq x \leq w_1. \\ V_2, & w_1 \leq x < w_1 + w_2. \\ \vdots & \\ V_j, & \sum_i^{j-1} w_i \leq x < \sum_i^j w_i. \\ \vdots & \\ V_n, & x \geq \sum_i^{n-1} w_i. \end{cases} \quad (6)$$

Entonces:

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = - \left[ \frac{2m}{\hbar} (E - V_j) \right] \psi(x) = -k_j^2 \psi(x). \quad (7)$$

Donde la solución a la ecuación anterior resulta ser:

$$\psi_j(x) = a_j e^{ik_j x} + a'_j e^{-ik_j x}. \quad (8)$$

En donde:

$$k_j = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - V_j)}. \quad (9)$$

### 2.1 Fórmula general para la amplitud de reflexión

Considerando el caso de un único potencial [14] con el escalón en  $x = 0$ , su función de onda en las regiones 0 y 1 será de la forma:

$$\psi_0(x) = a_0 e^{ik_0 x} + a'_0 e^{-ik_0 x}. \quad (10)$$

$$\psi_1(x) = a_1 e^{ik_1 x} + a'_1 e^{-ik_1 x}. \quad (11)$$

El segundo término de la ecuación (10) debe anularse:

$$\psi_1(x) = a_1 e^{ik_0 x}. \quad (12)$$



Así que el coeficiente de reflexión será:

$$r_{01} = \frac{a'_0}{a_0} = \frac{k_0 - k_1}{k_0 + k_1}. \quad (13)$$

En lo que sigue, es conveniente introducir una expresión generalizada para el coeficiente de reflexión de límite único. Para ello, las regiones en el lado del límite están etiquetadas por  $j$  y  $l$ :

$$r_{jl} = -r_{lj} = \frac{k_j - k_l}{k_j + k_l}. \quad (14)$$

Ahora se considerará el caso en que hay dos límites de potencial con escalones en  $x = 0$  y  $x = w_1$ . De manera análoga al caso anterior, se encuentran las siguientes ecuaciones:

$$\psi_0(x) = a_0 e^{ik_0 x} + a'_0 e^{-ik_0 x}. \quad (15)$$

$$\psi_1(x) = a_1 e^{ik_1 x} + a'_1 e^{-ik_1 x}. \quad (16)$$

$$\psi_2(x) = a_2 e^{ik_2 x} + a'_2 e^{-ik_2 x}. \quad (17)$$

El segundo término de la segunda ecuación debe ser nulo, *i.e.*,  $a'_2 = 0$  porque no hay ondas reflejadas en esa región.

$$\psi_2(x) = a_2 e^{ik_2 x}. \quad (18)$$

De la condición de continuidad de la función de onda en  $x = 0$  y en  $x = w_1$

$$a_0 + a'_0 = a_1 + a'_1. \quad (I) \quad k_0(a_0 - a'_0) = k_1(a_1 - a'_1). \quad (II)$$

Por otro lado, dado que no hay ninguna singularidad en  $x = 0, w_1$ , la derivada de la función de onda debe ser continua en esos puntos.

$$a_1 e^{ik_1 w_1} + a'_1 e^{-ik_1 w_1} = a_2 e^{ik_2 w_1}. \quad (III) \quad k_1(a_1 e^{ik_1 w_1} - a'_1 e^{-ik_1 w_1}) = k_2 a_2 e^{ik_2 w_1}. \quad (IV)$$

Así, la amplitud de reflexión  $r_{012}$  será:

$$r_{012} = \frac{r_{01} - r_{l2} e^{2ik_1 w_1}}{1 + r_{01} r_{l2} e^{2ik_1 w_1}}. \quad (19)$$

### 2.1.1 Generalización de la amplitud de reflexión

Para el caso de  $n$ -ésimo, se considerará el caso en que hay  $n$  límites de potencial con escalones en  $x = 0, w_1, w_2 + w_1, \dots, \sum_{j=0}^{n-1} w_j$ , en donde se considera  $x = w_0 = 0$ . Así, se encontrarán  $n$  funciones de la forma:

$$\psi_j(x) = a_j e^{ik_j x} + a'_j e^{-ik_j x}. \quad (20)$$

Con  $j = 0, 1, 2, \dots, n - 1$ , mientras que para la última función  $\psi_n(x)$  el término  $a'_n = 0$ , por lo que:

$$\psi_n(x) = a_n e^{ik_n x}. \quad (21)$$

Tomando en cuenta que  $r_{01} = \frac{k_0 - k_1}{k_0 + k_1}$ , se obtiene que:

$$\frac{a_0}{\alpha_0} = \frac{r_{01} + \alpha_1}{1 + r_{01}\alpha_1} = \frac{r_{01} + \left( \frac{r_{12} + \alpha_2 e^{-2ik_2 w_1}}{1 + r_{12}\alpha_2 e^{-2ik_2 w_1}} \right) e^{2ik_1 w_1}}{1 + r_{01} \left( \frac{r_{12} + \alpha_2 e^{-2ik_2 w_1}}{1 + r_{12}\alpha_2 e^{-2ik_2 w_1}} \right) e^{2ik_1 w_1}}.$$

Así, tomando en cuenta los casos para  $n=2, 3$ :

$$r_{123\dots n} = \left( \frac{r_{12} + r_{23\dots n} e^{2ik_2 w_2}}{1 + r_{12} r_{23\dots n} e^{2ik_2 w_2}} \right). \quad (22)$$

Para  $n \geq 2$

$$r_{0123\dots n} = \left( \frac{r_{01} + r_{123\dots n} e^{2ik_1 w_1}}{1 + r_{12} r_{123\dots n} e^{2ik_1 w_1}} \right). \quad (23)$$

## 2.2 Estados ligados y cuasi-ligados

En mecánica cuántica, los estados ligados aparecen cuando el movimiento de una partícula, para cualquier energía, está acotado o confinado en una región finita y limitada del espacio, delimitada por los puntos de retorno clásicos. Estos estados son soluciones a la ecuación de Schrödinger estacionaria [15]. Usualmente, los estados ligados tienen energías menores que el potencial analizado, es decir,  $E < V$ . Se tiene que el espectro de energía de estos estados es discreto y se requieren condiciones de frontera para encontrar los valores de la energía.

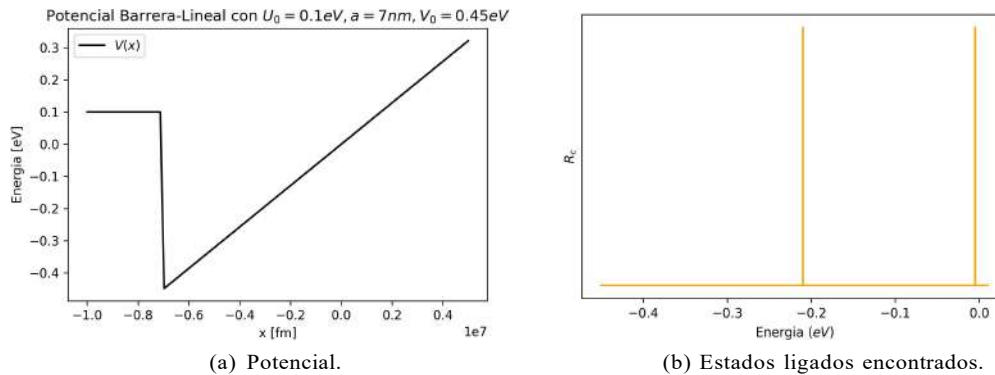
Además, dentro de las soluciones de estado estacionario también se puede encontrar un espectro continuo relacionado con los estados libres. En esta parte continua del espectro pueden existir ciertos estados cuasi-estacionarios, correspondientes a valores propios de energía complejos con partes imaginarias negativas y partes reales positivas. Como consecuencia de sus valores propios complejos, los estados cuasiestacionarios tienen la característica de resonancias, que deben decaer en el tiempo con un tiempo de vida dado por  $\hbar$  sobre la parte imaginaria de  $E$ . Las resonancias son soluciones que se comportan como ondas salientes en todos los canales de dispersión y están asociadas a valores complejos de la energía. Estas resonancias están íntimamente relacionadas con máximos de probabilidad de transmisión a través de una barrera.

Para el potencial dado en la ecuación (6), los estados ligados pueden caracterizarse como estados descritos por una solución de la ecuación (7) en forma de una onda saliente amortiguada en  $x$  en ambos lados del pozo ( $x < 0$  y  $x > \sum_i^{n-1} w_i$ ), y una onda oscilatoria en la región de  $x$  donde  $V(x)$  es un mínimo. En contraste, los estados cuasi-ligados, o estados de fuga, del mismo potencial pueden definirse como soluciones de la ecuación (7) en forma de onda saliente amortiguada solo a la izquierda del pozo (donde  $x < 0$ ).

Las energías bien definidas a las cuales el coeficiente de transmisión  $T = R - 1$  toma su valor máximo definen un fenómeno denominado *transmisión resonante*, que indica la situación en la que el potencial es prácticamente imperceptible para una partícula cuántica que atraviesa la región del potencial. Otro fenómeno que emerge junto con este es el caso contrario, que ocurre cuando el coeficiente de transmisión es mínimo, o bien cuando el coeficiente de reflexión  $R$  es máximo. A este fenómeno se le asocian estados denominados *estados de resonancia*. Debido a que la condición de resonancia es similar a la condición que establece la energía de los estados ligados, las resonancias se interpretan como energías de estados ligados, pero inestables.

### 3. Resultados y discusión

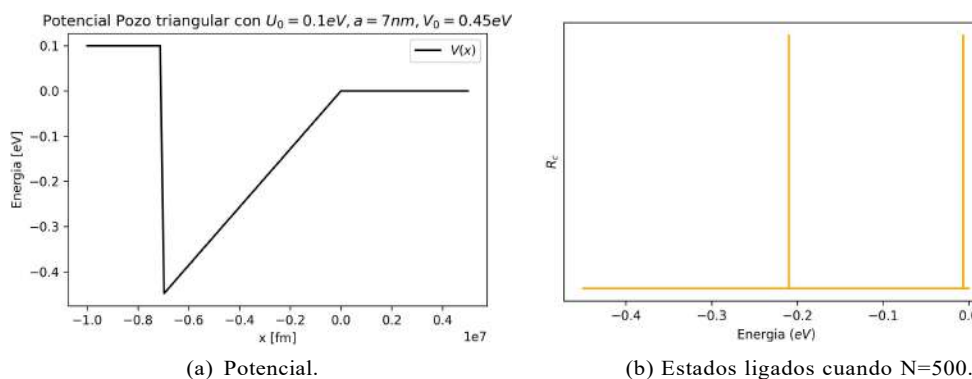
Se empleó el método de aproximación multiescalón para determinar el espectro de energía correspondiente a los estados ligados del sistema cuántico descrito en la introducción (ver Figura 1). Para ello, se supuso que la masa efectiva del electrón, al ser sometido a este potencial, es  $m^* = 0.067m_0$ . Así, se pudo observar que se obtuvieron dos estados ligados (ver Figura 2-b): el de energía  $E_1 = -209.304$  meV corresponde al estado fundamental del sistema, y el de energía  $E_2 = -4.675$  meV corresponde al primer estado excitado. Podrían existir otros estados excitados, pero en la región de interés y en el rango de energía considerado, solo se encontraron dos.



**Figura.2.** Pozo de potencial triangular.

Considerando un modelo de un potencial muy similar al propuesto en la introducción, y para el cual se han determinado las energías ligadas mediante diferentes métodos, se modifica el potencial estudiado en primera instancia. La parte lineal del potencial se trunca en cierto valor de energía  $V_l = 0$ , de modo que el potencial resultante forma un pozo triangular finito de profundidad  $V_0 = -0.45$  eV. Como se muestra en la Figura 3-a, el pozo tiene una forma irregular, ya que del lado izquierdo se presenta una especie de barrera de potencial. Potenciales de esta forma se encuentran en semiconductores de diferentes tipos.

Aplicando el método de aproximación multiescalón (MSAM, por sus siglas en inglés), se pueden obtener las energías de los estados ligados. Este modelo tiene solución analítica; en la tabla 1 se presenta una comparativa de la eficiencia del MSAM frente al resultado analítico, donde se puede observar que, a medida que el número de escalones “N” aumenta, la aproximación mejora significativamente respecto al valor analítico.



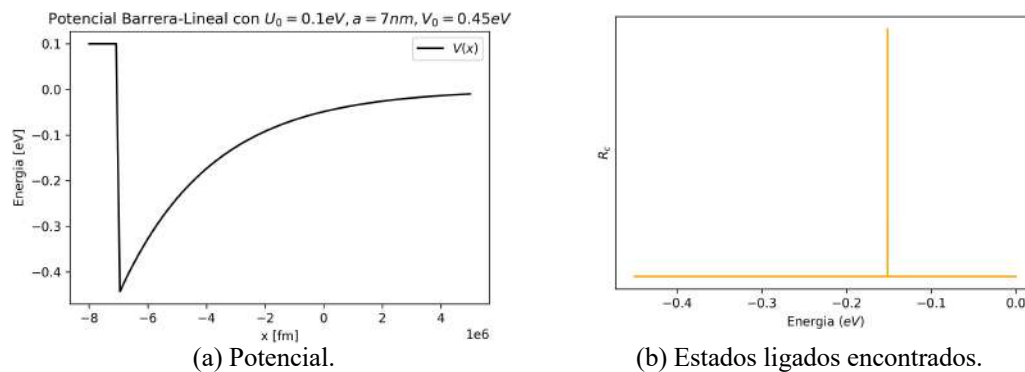
**Figura.3.** Pozo triangular con parte lineal truncada

Entonces, teniendo los valores exactos de los estados ligados, es posible hacer una comparación con los valores encontrados mediante el método MSAM para diferentes valores de  $N$ . A fin de calcular el error relativo al utilizar este método, se tomarán los valores de las energías cuando  $N = 500$ . Se encontró que el error relativo para el primer estado ligado  $E_1$  es igual a  $e_{r1} = 1.90 \times 10^{-5}$ , mientras que, para el segundo estado ligado, el error relativo encontrado es  $e_{r2} = 1.56 \times 10^{-4}$ . De lo anterior, se puede notar que los errores relativos son muy bajos, lo que indica que los valores encontrados mediante el MSAM son excelentes aproximaciones.

**Tabla 1.** Energías propias del estado ligado del pozo cuántico triangular.

Estados ligados	Valor exacto (meV)	$N = 100$	$N = 200$	$N = 300$	$N = 400$	$N = 500$
$E_1$	-209.86	-210.711	-209.676	-209.316	-210.216	-209.856
$E_2$	-6.39	-6.841	-6.301	-6.121	-6.571	-6.391

Por último, se aplicó el MSAM a un potencial de estudio dentro de la física del estado sólido, más específicamente en materiales semiconductores. Para este pozo de potencial, se identificó una parte exponencial (ver Figura 4-a), que ha sido estudiada en diferentes artículos, como los mencionados en la introducción. Usando el método MSAM, se encontró que dicho potencial solo tiene un único estado ligado (ver Figura 4-b) con energía  $E_1 = -150.765$  meV.



**Figura. 4.** Pozo con parte exponencial.

#### 4. Conclusiones

Se pudo observar que los pozos de potencial triangulares analizados tienen dos energías ligadas, las cuales están relacionadas con el estado base y el primer estado excitado. En contraste, para el potencial que se encuentra en dispositivos semiconductores, el cual tiene una forma exponencial, solo se encontró una energía ligada, que corresponde al estado base. En principio, el método multiescalón se emplea en los casos en los que el potencial a analizar es suave y la ecuación de Schrödinger asociada no necesariamente tiene solución analítica. Ante esta situación, se ha encontrado que las aproximaciones realizadas para las energías ligadas de los pozos cuánticos analizados en este trabajo son suficientemente buenas, independientemente de la forma del potencial, ya que los errores relativos encontrados al utilizar este método fueron mucho menores al 1%. También se observó que este método puede aplicarse a potenciales que se encuentran en la práctica, constituyendo, junto con el método de matriz de transferencias y otros, opciones viables para determinar de manera numérica los estados ligados.

## 5. Referencias

- [1] Jirauschek, C. (2009). Accuracy of transfer matrix approaches for solving the effective mass Schrödinger equation. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 45(9), 1059-1067.
- [2] Jonsson, B., Eng, S. T. (1990). Solving the Schrödinger equation in arbitrary quantum-well potential profiles using the transfer matrix method. *IEEE journal of quantum electronics*, 26(11), 2025-2035.
- [3] Li, W. (2010). Generalized free wave transfer matrix method for solving the Schrödinger equation with an arbitrary potential profile. *IEEE journal of quantum electronics*, 46(6), 970-975.
- [4] Ghatak, A. K., Thyagarajan, K., Shenoy, M. R. (1988). A novel numerical technique for solving the one-dimensional Schrödinger equation using matrix approach-application to quantum well structures. *IEEE Journal of Quantum electronics*, 24(8), 1524-1531.
- [5] J. M. Acosta, Método de solución multi-step y su aplicación en mecánica cuántica, Tesis para obtener el grado de licenciatura, 2019
- [6] De La Peña, L. (2014). Introducción a la mecánica cuántica. Fondo de Cultura económica, 1era edición (digital), 2014, 123-124.
- [7] Zettili, N. (2003). *Quantum mechanics: concepts and applications*, 220-224.
- [8] Zhao, Q., Aqiqi, S., You, J. F., Kria, M., Guo, K. X., Feddi, E., ... Yuan, J. H. (2020). Influence of position-dependent effective mass on the nonlinear optical properties in Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As single and double triangular quantum wells. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 115, 113707.
- [9] Lui, W. W., Fukuma, M. (1986). Exact solution of the Schrödinger equation across an arbitrary one-dimensional piecewise-linear potential barrier. *Journal of Applied Physics*, 60(5), 1555-1559.
- [10] Al, E. B., Urgan, F. A. T. I. H., Yesilgul, U., Kasapoglu, E. S. I. N., Sari, H. U. S. E. Y. I. N., Sökmen, I. (2015). Effects of applied electric and magnetic fields on the nonlinear optical properties of asymmetric GaAs/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As double inverse parabolic quantum well. *Optical Materials*, 47, 1-6.
- [11] Peyre, H., Camassel, J., Gillin, W. P., Homewood, K. P., Grey, R. (1994). Thermally induced change in the profile of GaAs/AlGaAs quantum wells. *Materials Science and Engineering: B*, 28(1-3), 332-336.
- [12] Cassan, E. (2000). On the reduction of direct tunneling leakage through ultrathin gate oxides by a one-dimensional Schrödinger-Poisson solver. *Journal of applied physics*, 87(11), 7931-7939.
- [13] Deck, R. T., Li, X. (1995). Evaluation of the eigenvalues of multiple quantum-well potentials. *American Journal of Physics*, 63(10), 920-928.
- [14] Cohen-Tannoudji, C., Diu, B., Laloë, F. (2019). *Quantum Mechanics, Volume 1: Basic Concepts, Tools, and Applications*. John Wiley Sons, 280-282.
- [15] Griffiths, D. J. (1960). *Introduction to quantum mechanics*. Pearson International Edition (Pearson Prentice Hall, Upper Saddle River, 2005).