

**PHASE-SPACE PROPAGATION OF THE TIME INDEPENDENT SCHRÖDINGER
EQUATION FOR ONE-DIMENSIONAL POTENTIALS.**

IVAN ENRIQUE SOLARTE RUEDA

**PROGRAMA DE QUÍMICA
FACULTAD DE INGENIERÍA, DISEÑO Y CIENCIAS APLICADAS
UNIVERSIDAD ICESI**

SANTIAGO DE CALI

2024

**PHASE-SPACE PROPAGATION OF THE TIME INDEPENDENT SCHRÖDINGER
EQUATION FOR ONE-DIMENSIONAL POTENTIALS.**

IVAN ENRIQUE SOLARTE RUEDA

TRABAJO DE GRADO PARA OPTAR AL TÍTULO DE QUÍMICO

TUTOR: CARLOS ALBERTO ARANGO MAMBUSCAY, PhD.

**PROGRAMA DE QUÍMICA
FACULTAD DE INGENIERÍA, DISEÑO Y CIENCIAS APLICADAS
UNIVERSIDAD ICESI**

SANTIAGO DE CALI

2024

AVAL PARA LA ENTREGA DE PDG II



Carlos Alberto Arango Mambuscay, Ph.D
Tutor del proyecto

Ivan Enrique Solarte Rueda

Iván Enrique Solarte Rueda
Estudiante de Química

1. Table of Contents

2. Resumen.....	7
3. Introducción	8
4. Metodología	11
4.1. Sistema computacional	11
4.2. Planteamiento de los modelos de barrera y pozo 1D en espacio de fases	11
4.3. Propagación de la función de onda en espacio de fases.....	13
4.3.1. Barrera de potencial	14
4.3.1. Pozo finito de potencial	16
4.3.1.1. Estados no ligados.....	16
4.3.1.2. Estados ligados.....	16
5. Resultados y discusión.....	17
5.1. Propiedades de la matriz de propagación unitaria	17
5.2. Propagación en la barrera de potencial	17
5.3. Fórmula de transmitancia cuántica	21
5.4. Estados no ligados del pozo de potencial	22
5.5. Estados ligados del pozo de potencial	23
5.6. Coeficiente de transmisión y ecuación diferencial	24
6. Conclusiones.....	26
7. Agradecimientos	27
8. Referencias.....	27

Lista de Figuras

ILUSTRACIÓN 1: DIAGRAMA DEL POTENCIAL DE UNA BARRERA MOSTRANDO LA FUNCIÓN DE ONDA EN LA REGIÓN INCIDENTE (ψ_L), LA REGIÓN CENTRAL (ψ_C) Y EN LA REGIÓN TRANSMITIDA (ψ_R) (OPENSTAX,S.F) ¹³	10
ILUSTRACIÓN 2: REPRESENTACIÓN GRÁFICA DE UNA ONDA LIBRE 1D $\psi(x) = \cos k_0 x$ (IZQ) Y SU REPRESENTACIÓN ELÍPTICA EN ESPACIO DE FASES (DER)	12
ILUSTRACIÓN 3: FUNCIÓN DE POTENCIAL $V(x)$ EN LOS DOS DIFERENTES MODELOS DE ESTUDIO. (IZQ) POTENCIAL DE BARRERA CON $V_0 > 0$. (DER) POZO DE POTENCIAL FINITO CON $V_0 < 0$. EN AMBOS EL ANCHO DE LA REGIÓN \mathcal{RC} ES $\Delta x = a$	13
ILUSTRACIÓN 4: CAMPO VECTORIAL ELÍPTICO EN ESPACIO DE FASES GENERADO POR LA MATRIZ $U(x, x_i, k)$ CUANDO $\mathcal{E} > V_0$ (IZQ.) Y CAMPO HIPERBÓLICO GENERADO CUANDO $\mathcal{E} < V_0$ (DER). LA LÍNEA ROJA REPRESENTA LA ÓRBITA ESTABLE DE LA HIPÉRBOLE DADA POR EL EIGENVECTOR $e_1 = (-ik, 1)$ MIENTRAS QUE LA LÍNEA NEGRA LA ÓRBITA INESTABLE DADA POR $e_2 = (ik, 1)$	14
ILUSTRACIÓN 5: REPRESENTACIÓN EN ESPACIO DE FASES DE $\Psi(x)$ A TRAVÉS DE UNA BARRERA DE POTENCIAL PARA $\mathcal{E} < V$. (IZQ) EN LA REGIÓN \mathcal{RL} , EL MAPA ELÍPTICO PRODUCE UNA ELIPSE INVARIANTE EN ROJO. (CENTR) CUANDO ENTRA A LA REGIÓN CENTRAL DE POTENCIAL \mathcal{RC} , EL MAPA HIPERBÓLICO PRODUCE UNA ROTACIÓN Y DEFORMACIÓN DE LA ELIPSE EN AZUL. (DER) DESPUÉS DE SALIR DEL POTENCIAL EN \mathcal{RR} , EL MAPA ELÍPTICO PRODUCE QUE LA ELIPSE SALIENTE (EN AZUL, DISCONTINUA) ROTE A FAVOR DE LAS MANECILLAS DEL RELOJ Y SE DEFORME (EN AZUL CONTINUA).	18
ILUSTRACIÓN 6: FUNCIÓN DE ONDA $\Psi(x)$ PROPAGADA A TRAVÉS DE UNA BARRERA DE POTENCIAL EN ESPACIO DE FASES 19	
ILUSTRACIÓN 7: REPRESENTACIÓN DE LA FUNCIÓN DE ONDA LIGADA $\Psi_b(x)$ VÁLIDA DE UN POZO DE POTENCIAL FINITO CON $\mathcal{E} = -17.3$ Y $V = -22.5$. (IZQ) EN LA REGIÓN \mathcal{RL} , EL MAPA HIPERBÓLICO PRODUCE UNA RECTA QUE SE ALINEA CON EL EIGENVECTOR INESTABLE e_1 . (CENTR) CUANDO ENTRA A LA REGIÓN CENTRAL \mathcal{RC} , EL MAPA ELÍPTICO PRODUCE UNA ROTACIÓN DE LA RECTA A FAVOR DE LA MANECILLAS DEL RELOJ (AZUL). (DER) AL ENTRA NUEVAMENTE EN EL MAPA HIPERBÓLICO, LA RECTA (AZUL) SE ALINEA CON EL EIGENVECTOR ESTABLE e_2 QUE COMPRIME LA FUNCIÓN DE ONDA.	23
ILUSTRACIÓN 8: DIAGRAMA DE LAS ENERGÍAS DE LOS ESTADOS LIGADOS $\mathcal{E}_n b$ (ROJO) Y NO LIGADOS $\mathcal{E}_n u$ (NEGRO, ESTADOS RESONANTES), PARA UNA BARRERA Y POZO RECTANGULAR. AMBOS ESTADOS COINCIDEN EN EL EJE $\mathcal{E} = 0$. LA EXTRAPOLACIÓN DE LOS ESTADOS RESONANTES $\mathcal{E}_n u$ EN LA ZONA $\mathcal{E} < 0$ SE REPRESENTA EN NEGRO DISCONTINUO.	25

Lista de símbolos y abreviaturas

t : tiempo

x : Posición

ψ : Función de onda

φ : Primera derivada de la función de onda con respecto a la posición ($\varphi = \frac{d\psi}{dx}$), la cual corresponde al momentum de la función de onda.

TDSE: Time Dependent Schrödinger Equation (Ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo)

TISE: Time Independent Schrödinger Equation (Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo)

\hat{H} : Operador hamiltoniano (Energía total)

\hat{K} : Operador energía cinética

\hat{V} : Operador energía potencial

\mathcal{R}_L : Región del espacio x al lado izquierdo (eng:Left) de la barrera o pozo de potencial

\mathcal{R}_C : Región central donde se encuentra la barrera o pozo de potencial.

\mathcal{R}_R : Región del espacio x al lado derecho (eng:Right) de la barrera o pozo de potencial

2. Resumen

Las barreras y pozos de potencial cuánticos tienen múltiples aplicaciones para representar sistemas a escalas atómicas como semiconductores, materiales ópticos o enlaces químicos. Si bien estos sistemas se pueden resolver con la ecuación de Schrödinger de manera exacta o con aproximaciones numéricas y matemáticas, sus metodologías resultan ser complejas, poco intuitivas y muy particulares para cada caso que resulta difícil generalizarlo a otras formas de potencial. Para ello, se empleó el formalismo de espacio de fases para resolver la TISE en sistemas de pozos y barreras rectangulares 1D. Se encontró que la función de onda Ψ se puede obtener mediante transformaciones lineales de figuras geométricas (elipses o rectas) que dan a los estados cuánticos. Para el caso de la barrera, se obtuvo que la transmitancia se puede representar como una razón de integrales de superficie de las elipses. Para el caso del pozo, se encontró que los estados ligados están dados por una ecuación trascendental, cuya derivada da como resultado una ecuación diferencial. Se concluyó que los casos de barreras y pozos de potencial se pueden analizar como un mismo sistema y que los estados ligados y los estados resonantes corresponden al mismo estado conectado.

Palabras clave: espacio de fases, barreras de potencial, pozos finitos de potencial, transmitancia

3. Introducción

Los sistemas de potenciales de barreras y pozos unidimensionales constituyen representaciones importantes de sistemas físicos cuya escala son lo suficientemente pequeña para que los efectos descritos por la mecánica cuántica sean importantes, como las energías de cuantización en sistemas confinados o el efecto túnel^{1,2}. Por ejemplo, la reducción en el tamaño de los semiconductores en transistores y diodos encontrados en chips de computadores (que actúan como una barrera), como los MOSFET, a escalas de nanómetros han hecho que efectos como fuga de potencial causada por el efecto túnel a través de la sean significativos, lo cual ha provocado la necesidad de formular nuevos diseños de semiconductores³⁻⁶. Fenómenos como desintegración nuclear⁷, así como la microscopia por efecto túnel (STM)^{8,9} se estudian empleando pozos y barreras de potencial. Por otra parte, el diseño de computadores cuánticos dependen de potenciales de barrera para la creación, manipulación y mantenimiento de qubits^{10,11}.

Para modelar los anteriores sistemas, es necesario resolver la ecuación de Schrödinger, cuya solución en mecánica cuántica da los eigenvectores (las funciones de onda ψ) y eigenvalores (las energías) que son válidas del sistema¹². La función de onda ψ según la interpretación de Copenhague de la mecánica cuántica, representa la distribución de probabilidad de encontrar una partícula (de poco tamaño y masa como el electrón) a lo largo de un observable, como la posición x ^{1,2,13}.

Existen dos formas de la ecuación, la dependiente del tiempo (TDSE) (eq.1) y la independiente del tiempo (TISE) (eq.2). La primera incluye el parámetro del tiempo permitiendo evaluar la función de onda a través del tiempo, lo cual resulta muy útil para sistemas donde la energía no es constante, como el experimento de la doble rendija^{1,2}. Por otro lado, la ecuación independiente del tiempo (TISE) carece de este término y se aplica para sistemas estacionarios

$$\hat{H} \psi = i\hbar \frac{\delta}{\delta t} \psi \quad (1)$$

$$\hat{H} \psi = \mathcal{E} \psi \quad (2)$$

Ambas ecuaciones poseen una función matemática conocida como el operador Hamiltoniano \hat{H} , que contiene la información de la energía total del sistema (eq.3). Esta energía se describe

como la suma de la energía cinética K y la energía potencial V , dadas por sus respectivos operadores. El operador cinético \hat{K} (eq.4) corresponde a la segunda derivada de la función de onda ψ multiplicada por $\frac{\hbar^2}{2m}$, mientras que el operador de potencial \hat{V} (eq.5) se encuentra representado por una función de potencial dependiente de la posición.

$$\hat{H} = \hat{K} + \hat{V} \quad (3)$$

$$\hat{K} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d}{dx^2} \quad (4)$$

$$\hat{V} = V(x) \quad (5)$$

Reemplazando eq.4 y eq.5 en eq. 3 da como resultado el Hamiltoniano en eq.6. Tras despejar el operador hamiltoniano en la eq.2 , se obtiene la TISE en su forma comúnmente empleada (eq.7):

$$\hat{H} = \frac{\hbar}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \quad (6)$$

$$\frac{\hbar}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi + V(x) \psi = \varepsilon \psi \quad (7)$$

Para sistemas simples como la barrera y pozos de potencial rectangular, la TISE puede resolverse con métodos analíticos. En el caso de la barrera de potencial rectangular 1D de ancho a , la función $V(x)$ es una función escalonada como se muestra en la Ilustración 1.

Para encontrar las funciones de onda ψ con diferente energía ε que pasan a través de dicha barrera empleando métodos analíticos, en la literatura se propone dividir el espacio en tres secciones diferentes (Sección antes, dentro y después de la barrera) y resolver la TISE para cada caso¹³⁻¹⁶. Esto da como resultado que ψ esté compuesta de tres funciones de onda, una en el lado izquierdo del potencial ψ_L , el centro del potencial ψ_C y el lado derecho ψ_R (Ilustración 1) . Para que sea una solución valida, la función de onda neta debe cumplir con las condiciones de continuidad, es decir, que la función de onda (eq.8 y 9) y su primera derivada (eq.9 y 10) coincidan en los puntos de intersección $x = 0$ y $x = a$ (cuando inicia y finaliza el potencial).

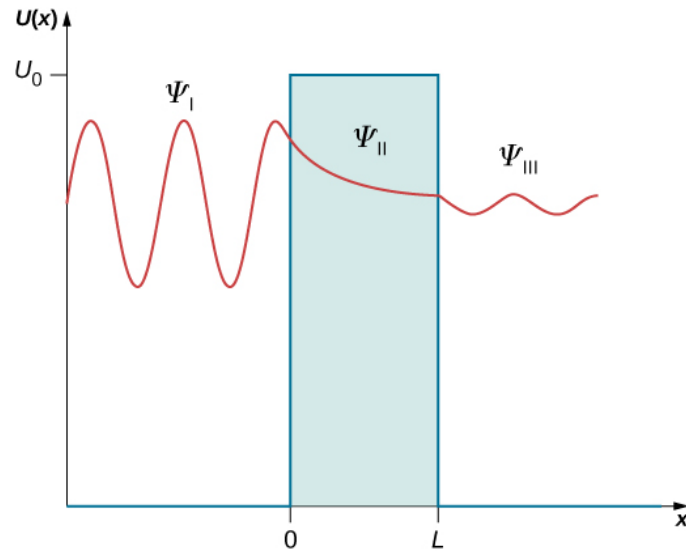


Ilustración 1: Diagrama del potencial de una barrera mostrando la función de onda en la región incidente (ψ_L), la región central (ψ_C) y en la región transmitida (ψ_R) (openstax,s.f)¹³

$$\psi_L(0) = \psi_C(0) \tag{8}$$

$$\psi_C(a) = \psi_R(a) \tag{9}$$

$$\left. \frac{d\psi_L}{dx} \right|_{x=0} = \left. \frac{d\psi_C}{dx} \right|_{x=0} \tag{10}$$

$$\left. \frac{d\psi_C}{dx} \right|_{x=a} = \left. \frac{d\psi_R}{dx} \right|_{x=a} \tag{11}$$

Lo anterior produce un sistema de ecuaciones (eq.12) que se tiene que resolver para encontrar la función de onda neta $\psi(x)$

$$\psi(x) \begin{cases} \psi_L(x) = A_C e^{ik_1x} + A_L e^{-ik_1x} \\ \psi_{II}(x) = B_R e^{ik_0x} + B_L e^{-ik_0x} \\ \psi_{III}(x) = C_R e^{ik_1x} + C_C e^{-ik_1x} \end{cases} \tag{12}$$

La anterior forma de resolver el problema analítico permite obtener la fórmula de transmitancia cuántica, la cuál se expresa por la eq.13 o una variación reorganizada de la misma ^{13,14,16}:

$$T = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2 \sin^2(k_1 a)}{4\mathcal{E}(\mathcal{E} - V)}} \tag{13}$$

Adicionalmente, varios autores han propuesto novedosos métodos que emplean la geometría para solucionar los modelos de barreras y pozos rectangulares¹⁷⁻²⁰. Por otra parte, para potenciales mas complejos (como potenciales curvados o gaussianas), se deben realizar emplear aproximaciones numéricas o matemáticas, como los métodos semiclásicos (que incluyen WKB)²¹⁻²³. A pesar de ello, los anteriores métodos presentan ciertos inconvenientes y limitaciones: su planteamiento suele ser complejo , poco intuitivas y su diseño son muy particular para el caso de estudio que limita su generalización a otras barreras o pozos de potencial (son poco robustos). Adicionalmente, no proveen una solución analítica cerrada para los estados propios de la TISE para pozos de potencial rectangular

En vista a lo anterior, se propone modelar los sistemas cuánticos de barreras y pozos de potencial 1D empleando el formalismo de espacio de fases, con el fin de obtener un modelo que sea mas intuitivo y que permite la generalización de los pozos y barreras.

4. Metodología

4.1. Sistema computacional

Las operaciones computacionales fueron programadas en el lenguaje “Wolfram language” y ejecutadas en el programa Wolfram Mathematica 12.3. Se empleó un computador personal con procesador Intel Xeon W-2223 de cuatro núcleos, GPU Nvidia Quadro P2000, 72 GB de memoria RAM y 1TB de almacenamiento interno, el cual se encuentra localizado en el laboratorio de computación científica de la Universidad Icesi.

4.2. Planteamiento de los modelos de barrera y pozo 1D en espacio de fases

La función de onda en espacio de fases se puede expresar como el vector Ψ cuyo primer elemento corresponde a la función de onda $\psi(x)$ y el segundo a su primera derivada con respecto a la posición $\varphi = \psi'(x)$:

$$\Psi = \begin{pmatrix} \psi \\ \varphi \end{pmatrix} \quad (14)$$

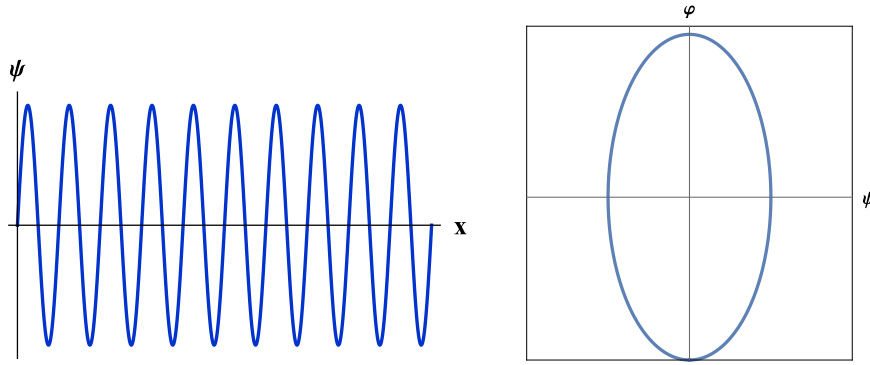


Ilustración 2: Representación gráfica de una onda libre 1D $\psi(x) = \cos k_0 x$ (izq) y su representación elíptica en espacio de fases (der)

Por lo tanto, la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo (TISE) se puede reescribir en espacio de fases como una ecuación matricial (eq.15), donde K es una matriz 2×2 que contiene el término $k = \sqrt{2m(\mathcal{E} - \mathcal{V}(x))}$ (eq.16) que proviene de un reordenamiento de los términos de energía \mathcal{E} y potencial $V(x)$ de la TISE. La matriz K contiene posee dos eigenvectores, $\mathbf{e}_1 = (ik^{-1}, 1)$ que corresponde a la órbita inestable e $\mathbf{e}_2 = (-ik^{-1}, 1)$ a la inestable.

$$\Psi' = K \Psi \quad (15)$$

$$K = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -k^2 & 0 \end{pmatrix} \quad (16)$$

El valor de k varía de acuerdo con la función de potencial $V(x)$. Para el caso de estudio de potenciales y barreras rectangulares que inician en un punto $x_i = 0$ y tienen un ancho a , la función de potencial se expresa como una diferencia entre funciones escalonadas unitaria $\theta(x)$ (eq.17, Ilustración 3) que varían de acuerdo con el valor de su argumento como se muestra en eq.18.

$$V(x) = V_0(\theta(x) - \theta(x - a)) \quad (17)$$

$$\theta(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < 0 \\ 1 & \text{si } x \geq 0 \end{cases} \quad (18)$$



Ilustración 3: Función de potencial $V(x)$ en los dos diferentes modelos de estudio. (izq) Potencial de barrera con $V_0 > 0$. (der) pozo de potencial finito con $V_0 < 0$. En ambos el ancho de la región \mathcal{R}_C es $\Delta x = a$.

Los dos modelos para estudiar se diferencian de acuerdo al valor del potencial V_0 en eq.16. El modelo de barrera corresponda aquel donde $V_0 > 0$ (Ilustración 3, izq) mientras que el del pozo finito cuando $V_0 < 0$ (Ilustración 3, der). En ambos casos, el cambio de potencial a lo largo de x permite dividir $V(x)$ en tres regiones: Una región izquierda \mathcal{R}_L entre $-\infty \leq x \leq 0$ con $V = 0$, una región central \mathcal{R}_C entre $0 < x \leq a$ con $V = V_0$ y una región derecha \mathcal{R}_R entre $a < x < \infty$.

Lo anterior implica que el valor de k varía de acuerdo con la región analizada. En \mathcal{R}_L y \mathcal{R}_R donde el potencial es 0, k se puede expresar como un $k_0 = \sqrt{2m\mathcal{E}}$, mientras que en la región \mathcal{R}_C donde se presenta el potencial, k se expresa como $k_1 = \sqrt{2m(\mathcal{E} - V_0)}$.

4.3. Propagación de la función de onda en espacio de fases

Las funciones de onda $\Psi(x)$ que son solución de la TISE en eq.15 se obtuvieron como el resultado de la propagación de una función de onda inicial $\Psi(x_i)$ (eq.19) en las tres regiones aplicando una matriz de transformación lineal $U(x, x_i, k)$ dada por la eq.20

$$\Psi(x) = U(x, x_i, k) \Psi(x_i) \quad (19)$$

$$U(x, x_i, k) = \begin{pmatrix} \cos k(x - x_i) & \frac{1}{k} \sin k(x - x_i) \\ -k \sin(k(x - x_i)) & \cos k(x - x_i) \end{pmatrix} \quad (20)$$

Donde x es la variable de posición y x_i el punto donde comienza la barrera. La matriz $U(x, x_i, k)$ genera un campo vectorial que deforma la función de onda siguiendo las líneas del campo. En los casos cuando la energía de $\Psi(x)$ es mayor que el potencial ($\mathcal{E} > V_0$), $k \in \mathbb{R}$ y por lo tanto los elementos de eq.20 permanecen como senos y cosenos que generan un campo elíptico (Ilustración 4, izq). Por otro lado, cuando $\mathcal{E} < V_0$, $k \in \mathbb{C}$ y por lo tanto los elementos de eq.20 se vuelven funciones senos y cosenos hiperbólicos que dan lugar a un campo hiperbólico (Ilustración 4, der)

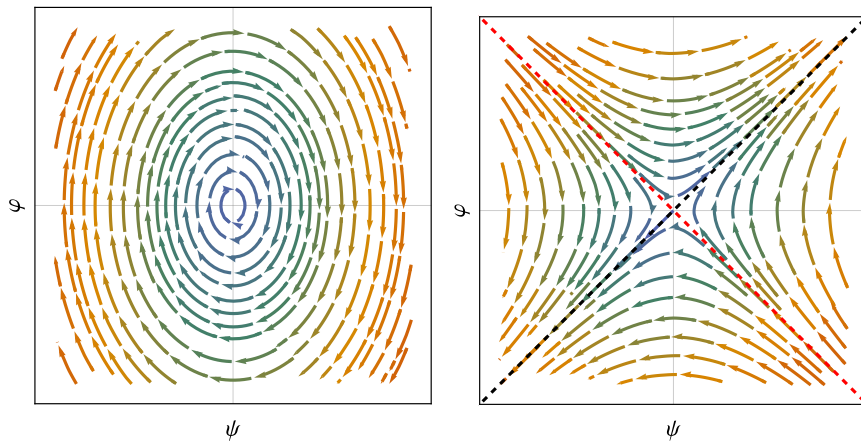


Ilustración 4: Campo vectorial elíptico en espacio de fases generado por la matriz $U(x, x_i, k)$ cuando $\mathcal{E} > V_0$ (izq.) y campo hiperbólico generado cuando $\mathcal{E} < V_0$ (der). La línea roja representa la órbita estable de la hipérbola dada por el eigenvector $\mathbf{e}_1 = (-ik_1, 1)$ mientras que la línea negra la órbita inestable dada por $\mathbf{e}_2 = (ik_1, 1)$

La propagación en espacio de fases de $\Psi(x_i)$ en la barrera y pozo de potencial fue analizada como casos por separado debido a las diferencias en la condición inicial como el de la matriz de propagación $U(x, x_i, k)$.

4.3.1. Barrera de potencial

La función de onda Ψ fue calculada en las tres regiones \mathcal{R}_L , \mathcal{R}_C y \mathcal{R}_R y posteriormente concatenadas. Para ello, primero se consideró una función de onda inicial $\Psi_L(x_i, \phi)$ dentro de la región \mathcal{R}_L como aquella que no se ve afectada por ningún potencial, por lo que en espacio de fases se puede expresar como una familia de condiciones iniciales dada por la eq.21

$$\Psi_L(x_i, \phi) = \begin{pmatrix} \cos(k_0\phi) \\ -k_0 \sin(k_0\phi) \end{pmatrix} \quad (21)$$

Siendo Φ la fase de la función de onda que se encuentra definida en un rango de $0 < \phi < \frac{2\pi}{k_0}$. Al propagar $\Psi_L(x_i, \phi)$ de izquierda a derecha ($L \rightarrow D$), toda la función de onda que se encuentra en \mathcal{R}_L se obtiene al reemplazar eq.21 en eq.19 dando la eq.22, donde la matriz de propagación unitaria se puede expresar como $U_L(x)$ tras reemplazar $k = k_0$ (eq.23)

$$\Psi_L(x) = U_L(x)\Psi_L(x_i) \quad (22)$$

$$U_L(x) = U(x, x_i, k_0) = \begin{pmatrix} \cos k_0(x - x_i) & \frac{1}{k_0} \sin k_0(x - x_i) \\ -k_0 \sin(k_0(x - x_i)) & \cos k_0(x - x_i) \end{pmatrix} \quad (23)$$

La función luego se propagó en la región del potencial \mathcal{R}_C para obtener $\Psi_C(x)$ al reemplazar Ψ_L evaluado en $x = x_i = 0$ (el extremo izquierdo de la barrera de potencial) en eq.19 dando la eq.24, siendo la matriz de propagación unitaria en la región central expresada como $U_C(x)$ tras reemplazar $k = k_1$ y $x_i = 0$ (eq.25):

$$\Psi_C(x) = U_C(x)\Psi_L(0) \quad (24)$$

$$U_C(x) = U(x, 0, k_1) = \begin{pmatrix} \cos k_1x & \frac{1}{k_1} \sin k_1x \\ -k_1 \sin k_1x & \cos k_1x \end{pmatrix} \quad (25)$$

Tras deformarse en la región dentro del potencial, la función de onda Ψ_R en la región después del potencial \mathcal{R}_R se obtuvo al evaluar Ψ_C evaluado en a (extremo derecho del potencial) en eq.19, como se muestra en eq.26, con la matriz $U_R(x)$ dado por la eq.27.

$$\Psi_R(x) = U_R(x)\Psi_C(a) \quad (26)$$

$$U_R(x) = U(x, 0, k_0) = \begin{pmatrix} \cos k_0(x - a) & \frac{1}{k_0} \sin k_1(x - a) \\ -k_0 \sin k_0(x - a) & \cos k_0(x - a) \end{pmatrix} \quad (27)$$

4.3.1. Pozo finito de potencial

En los pozos finitos de potencial, se analiza por separado las funciones de ondas de los estados no ligados Ψ^u que se encuentran por encima del pozo y los estados ligados Ψ^b dentro del pozo.

4.3.1.1. Estados no ligados

En los estados no ligados se da la condición que $\mathcal{E}^u > 0$, por lo tanto, el campo en las tres regiones siempre será elíptico. Como consecuencia, el modelo de propagación de la función de onda Ψ^u es muy similar al caso de la barrera de potencial, por lo que se obtiene fórmulas de propagación a eq.22 en \mathcal{R}_L , eq.24 en \mathcal{R}_C y eq.26 en \mathcal{R}_R con las mismas matrices

$$\Psi_L^u(x) = U_L(x)\Psi_L^u(x_i) \quad (28)$$

$$\Psi_C^u(x) = U_c(x)\Psi_L^u(0) \quad (29)$$

$$\begin{aligned} \Psi_R^u(x) &= U_R(x)\Psi_C^u(a) \\ &= U_R(x)U_c(a)\Psi_C^u(0) \end{aligned} \quad (30)$$

4.3.1.2. Estados ligados

En los estados ligados, $V_0 < \mathcal{E}^b < 0$, por lo que en \mathcal{R}_L y \mathcal{R}_R el campo vectorial es hiperbólico. Por lo tanto, se toma como condición inicial la función de onda $\Psi_L^b(x_i)$ evaluada en $x_i = 0$ dada por la eq.31:

$$\Psi_L^b(0) = \begin{pmatrix} 1 \\ -ik_0 \end{pmatrix} \quad (31)$$

Donde $\Psi_L^b(0)$ corresponde a un segmento de recta. La propagación de $\Psi_L^b(0)$ en la región antes del pozo \mathcal{R}_L se realizó aplicando la eq. 32, con la matriz de propagación dada por eq.23

$$\Psi_L^b(x) = U_L(x)\Psi_L^b(0) \quad (32)$$

En la región del pozo \mathcal{R}_C , la propagación de la condición inicial $\Psi_L^b(0) = \Psi_C^b(0)$ se realizó aplicando la eq.33, con la matriz de propagación dada por eq.25. Para que la función de onda

sea un estado válido, se debió garantizar que en el extremo derecho del pozo cuando $x = a$, Ψ_C debe coincidir con el eigenvector de la órbita estable e_2 .

$$\Psi_C^b(x) = U_C(x)\Psi_C^b(0) \quad (33)$$

$$\Psi_C^b(a) = e_2 \quad (34)$$

En la región después del pozo \mathcal{R}_R , la propagación de la función $\Psi_C^b(a)$ se realizó aplicando la eq.35, con la matriz de propagación dada por eq.27:

$$\Psi_R^b(x) = U_R(x)\Psi_C^b(a) \quad (35)$$

5. Resultados y discusión

5.1. Propiedades de la matriz de propagación unitaria

Se encontró que la matriz de propagación unitaria realiza una transformación lineal que preserva el área del espacio de fases, esto se debe a que $\det U(x, x_i, k) = 1$. Así mismo, la matriz se puede descomponer en transformaciones lineales más básicas:

$$U(x_i, x, k) = S^{-1}(k)R(\theta)S(k) \quad (36)$$

Siendo $R(\theta)$ la matriz de rotación dado por eq.37 con $\theta = k(x - x_i)$ y $S(k)$ la matriz de estiramiento dado por eq.38.

$$R(\theta) = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \quad (37)$$

$$S(k) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & k \end{pmatrix} \quad (38)$$

5.2. Propagación en la barrera de potencial

Para el caso de la barrera de potencial en la región \mathcal{R}_L , se obtuvo que la función de onda Ψ_L (eq.39) propagada por eq.21 en toda la región resultó ser invariante con respecto a la función

de condiciones iniciales $\Psi_L(x_i)$ (eq.20) . Esto se debe a que las líneas de campo en espacio de fases en \mathcal{R}_L son elípticas en $x < 0$ y coinciden con la elipse dada por eq.22 (Ilustración 5, izq), por lo que únicamente produce una rotación invariante a lo largo de x . La representación gráfica de la elipse a lo largo de $x < 0$ (Ilustración 6) se puede ver como una geometría cilíndrica (región verde izquierda) que se conserva en dicho rango.

$$\Psi_L(x) = \begin{pmatrix} \cos k_0(x - x_i + \phi) \\ -k_0 \sin k_0(x - x_i + \phi) \end{pmatrix} \quad (39)$$

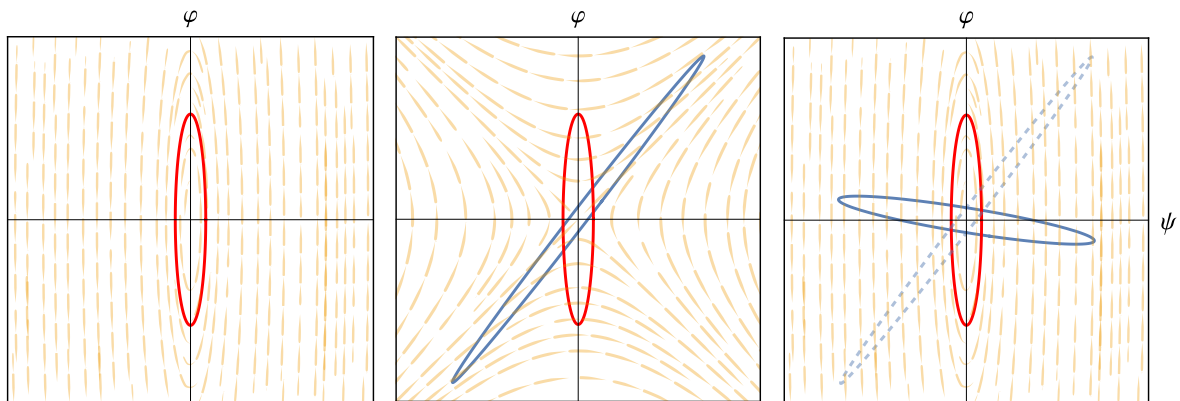


Ilustración 5: Representación en espacio de fases de $\Psi(\mathbf{x})$ a través de una barrera de potencial para $\mathcal{E} < V$. (*izq*) En la región \mathcal{R}_L , el mapa elíptico produce una elipse invariante en rojo. (*centr*) Cuando entra a la región central de potencial \mathcal{R}_C , el mapa hiperbólico produce una rotación y deformación de la elipse en azul. (*der*) Después de salir del potencial en \mathcal{R}_R , el mapa elíptico produce que la elipse saliente (en azul, discontinua) rote a favor de las manecillas del reloj y se deforme (en azul continua).

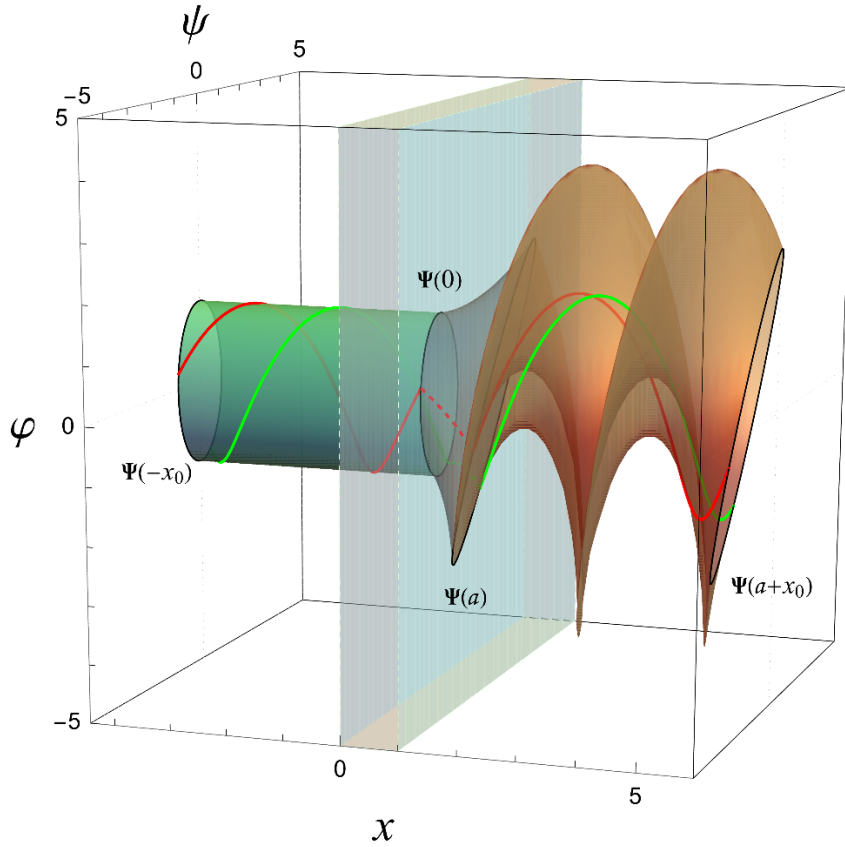


Ilustración 6: Función de onda $\Psi(x)$ propagada a través de una barrera de potencial en espacio de fases

Se encontró que los ejes semimayores y semimenores de la elipse invariante Ψ_L están dados por eq.40 y eq.41 respectivamente, los cuales son paralelos a los ejes cartesianos. En el caso de $\mathcal{E} > \frac{1}{2m}$, con $k_0 > 1$ y el eje semimayor se encuentra paralelo a la ordenada (eje Y), mientras que si $\mathcal{E} < \frac{1}{2m}$, con $k_0 < 1$ y por lo tanto será paralelo a la abscisa (eje X).

$$a_L = \max(1, k_0) \quad (40)$$

$$b_L = \min(1, k_0) \quad (41)$$

Se obtuvo que la primera y segunda excentricidad de la elipse $\Psi_L(x_i, \phi)$ esta dada por eq.42 y eq.43 respectivamente:

$$e_L = \left(1 - \frac{b_L^2}{a_L^2}\right)^{\frac{1}{2}} \quad (42)$$

$$e_L' = \left(\frac{a_L^2}{b_L^2} - 1 \right)^{\frac{1}{2}} \quad (43)$$

Lo cual permitió definir el perímetro \mathcal{P}_L y el área de la elipse \mathcal{A}_L como:

$$\mathcal{P}_L = 4a_L E(e_L) \quad (44)$$

$$\mathcal{A}_L = 2a_L^2 \Pi(-e_L'^2, 0) \quad (45)$$

Donde $E(e_L)$ y $\Pi(e_L'^2, 0)$ son integrales elípticas de segundo y tercer grado respectivamente que dependen de las excentricidades. Al evaluar \mathcal{A}_L se obtuvo que $\mathcal{A}_L = \pi k_0$, cuya área siempre se preserva debido a que $\det U(x, x_i, k) = 1$.

Al comienzo de la región central \mathcal{R}_C , $\Psi_L(0)$ deja de ser invariante por el efecto del potencial. Se encontró que en los casos cuando $\mathcal{E} < V_0$, el mapa hiperbólico en \mathcal{R}_C deforma Ψ_C de dos maneras distintas (Ilustración 5, centro): Rota la elipse y la estira siguiendo la órbita inestable dada por \mathbf{e}_1 . Como consecuencia, el semieje mayor a se alinea con \mathbf{e}_1 mientras que el semimenor se vuelve perpendicular al mismo. Este comportamiento de Ψ_C está dada por la eq.46

$$\Psi_C(x) = \begin{pmatrix} \cos k_1(x - x_i) \cos k_0\phi - \frac{k_0 \sin k_1(x - x_i) \sin k_0\phi}{k_1} \\ -k_1 \cos k_0\phi \sin k_1(x - x_i) - k_0 \cos k_1(x - x_i) \sin(k_0\phi) \end{pmatrix} \quad (46)$$

Por último, en la región \mathcal{R}_R después del potencial, el mapa vectorial U_R vuelve a ser elíptico idéntico a U_L en la región \mathcal{R}_L . Sin embargo, debido a la deformación que sufrió la elipse en \mathcal{R}_C , el efecto ya no es el mismo que en \mathcal{R}_L y por lo tanto $\Psi_R(x)$ no es invariante. Al propagar $\Psi_C(a) = \Psi_R(a)$ a lo largo de \mathcal{R}_R , Ψ_R (dada por eq.47) rota a lo largo de las líneas de campo elíptico mientras que al mismo tiempo sus ejes semimayor a y semimenor b se deforman, ya sea comprimiéndose o estirándose de acuerdo con la posición x (Ilustración 5.der). Eso se nota mejor en la Ilustración 6, donde las transformaciones generan un cilindro elíptico deformado (similar a un tornillo) en la región naranja después del potencial.

La propagación anterior descrita por eq.47 fue resultado de reemplazar eq.24 en eq.26, esta última se puede reescribir alternativamente como la aplicación de sucesiva de la matriz $U_C(a)$ y $U_R(x)$ sobre la función $\Psi_C(0)$.

$$\Psi_R(x) = U_R(x)U_C(a)\Psi_C(0) \quad (47)$$

Todo lo anterior permite definir la función total $\Psi(x)$ a través de todo el espacio como la concatenación de Ψ_L , Ψ_C y Ψ_R (eq-48). Si bien $\Psi(x)$ esta definida en $x \in \mathbb{R}$, se encontró que Ψ_L y Ψ_R presentan periodicidad cada $x_0 = \frac{2\pi}{k_0}$, por lo que para facilitar su análisis, $\Psi(x)$ se puede restringir al dominio $-x_0 \leq x \leq a + x_0$ como se muestra en la Ilustración 6 .

$$\Psi(x) = \begin{cases} \Psi_L(x) & \text{si } -x_0 \leq x < 0 \\ \Psi_C(x) & \text{si } 0 \leq x < a \\ \Psi_R(x) & \text{si } a \leq x < a + x_0 \end{cases} \quad (48)$$

5.3. Fórmula de transmitancia cuántica

La fórmula de transmitancia fue encontrada empleando integrales de superficie de la elipse en espacio de fases. A diferencia del área \mathcal{A} que se conserva en todas las transformaciones, el perímetro \mathcal{P} de la elipse varía entre \mathcal{R}_L , \mathcal{R}_C y \mathcal{R}_R (como se observa en Ilustración 5 e Ilustración 6), lo cual permitió emplear esta propiedad como un parámetro que permite diferenciar $\Psi(x)$ en la región antes y después del potencial

En la Ilustración 6, se observa geoméricamente como la función Ψ_L en verde tiene menor perímetro que Ψ_R en naranja. Por lo tanto, Ψ_L corresponde a la función de onda que se transmite a través de la barrera (y por lo tanto posee un menor perímetro) y Ψ_R aquella que se refleja (con mayor perímetro). Empleando integrales de superficie, estos perímetros se pueden representar como \mathcal{S}_L (eq.49) en \mathcal{R}_L del potencial y \mathcal{S}_R (eq.50) en \mathcal{R}_R .

$$\mathcal{S}_L(k_0) = \int_{x_0}^0 dx \int_0^{\phi_f} d\phi \left\| \frac{d\Psi_L}{d\phi} \right\|^2 \quad (49)$$

$$\mathcal{S}_R(k_0, k_1, a) = \int_{x_0}^{a+x_0} dx \int_0^{\phi_f} d\phi \left\| \frac{d\Psi_L}{d\phi} \right\|^2 \quad (50)$$

Donde $\phi_f = \frac{2\pi}{k_0}$. Tras evaluar las integrales se obtuvo que:

$$\mathcal{S}_L = 2\pi^2(1 + k_0^2) \quad (51)$$

$$\mathcal{S}_R = \frac{\mathcal{S}_L}{4k_1^2 k_0^2} ((k_1^2 + k_0^2)^2 - (k_1^2 - k_0^2)^2 \cos(2ak_1)) \quad (52)$$

Donde $\mathcal{S}_L < \mathcal{S}_R$.

Puesto que la barrera de potencial es simétrica, se encontró que la transmitancia de la función de onda depende de dos procesos, la propagación de $L \rightarrow R$ y $L \leftarrow R$. En ambos casos, a una misma \mathcal{E} y V , en ambos casos la función de onda transmitida posee la misma integral de superficie \mathcal{S}_L y la reflejada \mathcal{S}_R , lo que conlleva a que se tiene el mismo escenario duplicado. Si se considera que la transmitancia es la razón entre la superficie transmitida \mathcal{S}_L sobre la superficie incidente (la suma entre la transmitida y la reflejada, es decir $\mathcal{S}_L + \mathcal{S}_R$), al tomar en cuenta ambas direcciones la superficie total transmitida es $2\mathcal{S}_L$. Como consecuencia la fórmula de transmitancia está dada por eq.53, que al despejar \mathcal{S}_L y \mathcal{S}_R da eq.54, la cual coincide con la fórmula reportada en la literatura.

$$T(\mathcal{E}, a) = \frac{2\mathcal{S}_L}{\mathcal{S}_L + \mathcal{S}_R} \quad (53)$$

$$T(\mathcal{E}, a) = \frac{4\mathcal{E}(\mathcal{E} - V)}{4\mathcal{E}(\mathcal{E} - V) + V^2 \sin^2 k_1 a} \quad (54)$$

En el caso de $\mathcal{E} = V$, eq.54 se indetermina, por lo que su valor está dado por el límite en eq.55

$$T(V, a) = \lim_{\mathcal{E} \rightarrow V} T(\mathcal{E}, a) = \left(1 + \frac{ma^2 V}{2} \right)^{-1} \quad (55)$$

5.4. Estados no ligados del pozo de potencial

Las funciones de onda de los estados no ligados Ψ^u en \mathcal{R}_L , \mathcal{R}_C y \mathcal{R}_R resultaron ser idénticas a las obtenidas en eq.39, eq.46 y eq.47 respectivamente. Así mismo, se obtuvo que la fórmula de transmitancia dada por eq.54 se cumple para todo pozo $V_0 < 0$ siempre y cuando $\mathcal{E} > 0$, lo cual se cumple en todos los estados no ligados.

5.5. Estados ligados del pozo de potencial

Al propagar $\Psi_L^b(0)$ en la región \mathcal{R}_L , se obtuvo que la función $\Psi_L^b(x)$ esta definida por la eq.56:

$$\Psi_L^b(x) = e^{-ik_0x} \Psi_L^b(0) \quad (56)$$

La cual se representa como una recta que se encuentra en la órbita inestable dada por el eigenvector \mathbf{e}_1 (Ilustración 7,izq). A medida que se desplaza hacia la izquierda en el límite $x \rightarrow -\infty$, la longitud de Ψ_L^b se reduce hasta colapsar en el origen $\Psi^* = (0,0)$ como producto del campo hiperbólico que al desplazarse en sentido contrario ($L \leftarrow R$) produce una compresión de los puntos sobre \mathbf{e}_1 .

En la región del pozo \mathcal{R}_C , la propagación de la condición inicial produce una función de onda Ψ_C^b dada por eq.57. En esta región, la función de onda entra en el campo elíptico que genera una rotación de la recta a favor de las manecillas del reloj entre $0 < x < a$ como se ve en la Ilustración 7 central.

$$\Psi_C^b(x) = \begin{pmatrix} \cos k_1(x - x_i) - \frac{ik_0 \sin k_1(x - x_i)}{k_1} \\ -i k_0 \cos k_1(x - x_i) - k_1 \sin k_1(x - x_i) \end{pmatrix} \quad (57)$$

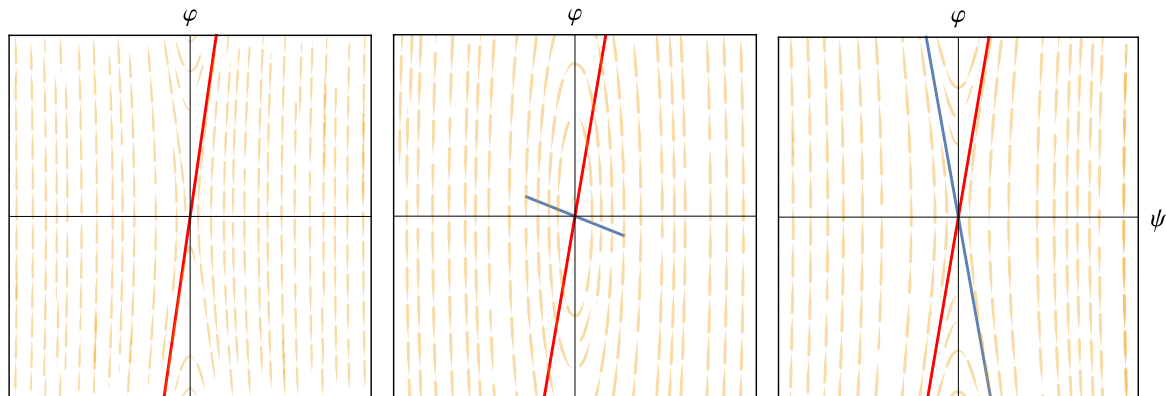


Ilustración 7: Representación de la función de onda ligada $\Psi^b(\mathbf{x})$ válida de un pozo de potencial finito con $\mathcal{E} = -17.3$ y $V = -22.5$. (izq) En la región \mathcal{R}_L , el mapa hiperbólico produce una recta que se alinea con el eigenvector inestable \mathbf{e}_1 . (centr) Cuando entra a la región central \mathcal{R}_C , el mapa elíptico produce una rotación de la recta a

favor de la manecillas del reloj (azul). (*der*) Al entra nuevamente en el mapa hiperbólico, la recta (azul) se alinea con el eigenvector estable \mathbf{e}_2 que comprime la función de onda.

En la región \mathcal{R}_R después del pozo de potencial, el campo se vuelve nuevamente hiperbólico y dependiendo del valor de \mathcal{E} habrán dos resultados distintos: Si la energía es tal que la recta no queda alineada en la órbita estable dada por el eigenvector \mathbf{e}_2 , cuando $x \rightarrow \infty$ la recta tenderá a alinearse con \mathbf{e}_1 y por lo tanto divergirá, lo que conlleva a que ese valor de energía no produzca una función de onda válida. Si \mathcal{E} es tal que la recta se alinea con la órbita estable \mathbf{e}_2 (Ilustración 7,der), la longitud de Ψ_R^b se reducirá hasta colapsar en el origen Ψ^* (similar a lo que ocurre con Ψ_L^b). Esto último produce una función de onda Ψ^b y \mathcal{E}_V^b válidos para un potencial V .

Como consecuencia, se obtuvo un sistema de dos ecuaciones dado por eq.58 cuyas soluciones corresponden a la combinación \mathcal{E}_V^b y V que producen estados válidos dentro de la región del pozo. Tras despejar $(\cos k_1 a, \sin k_1 a)^T$ en eq.58 se obtiene eq.59 que a su vez al reorganizarla producen la ecuación trascendental eq.58.

$$\begin{pmatrix} 1 & -i \frac{k_0}{k_1} \\ -ik_0 & -k_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos k_1 a \\ \sin k_1 a \end{pmatrix} = \pm \begin{pmatrix} 1 \\ ik_0 \end{pmatrix} \quad (58)$$

$$\begin{pmatrix} \cos k_1 a \\ \sin k_1 a \end{pmatrix} = \pm \frac{1}{k_0^2 - k_1^2} \begin{pmatrix} k_0^2 + k_1^2 \\ 2ik_0 k_1 \end{pmatrix} \quad (59)$$

$$\tan k_1 a = -\frac{2i k_0 k_1}{k_0^2 + k_1^2} \quad (60)$$

Se obtuvo que las soluciones de la ecuación trascendental corresponden a los estados ligados $\mathcal{E}_V^b(V)$ del pozo los cuales se representan como líneas rojas en Ilustración 8. Eq.60 presenta discontinuidad cuando $k_0^2 + k_1^2 = 0$, lo cual ocurre cuando $\mathcal{E}_V^b = \frac{V}{2}$ y se representa como la intercepción entre las líneas rojas y la recta gris en la Ilustración 8.

5.6. Coeficiente de transmisión y ecuación diferencial

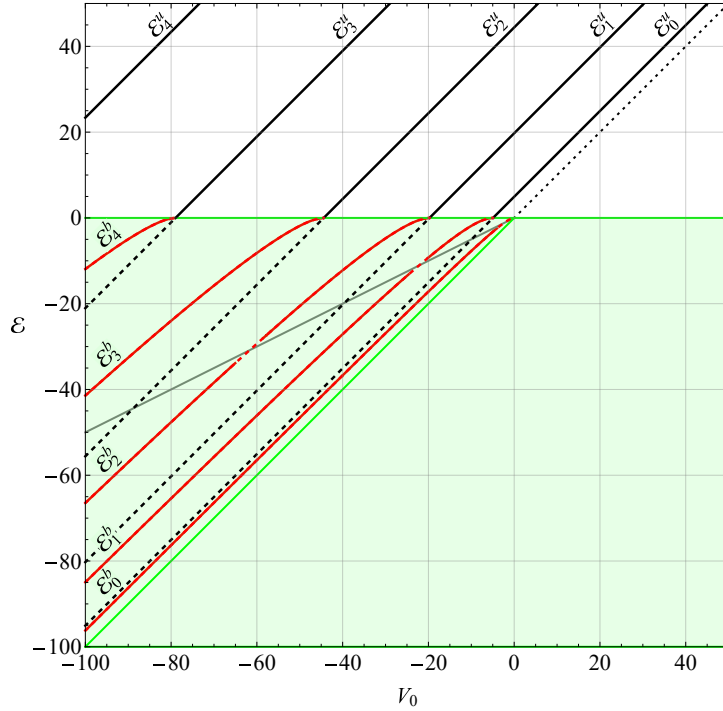


Ilustración 8: Diagrama de las energías de los estados ligados \mathcal{E}_v^b (**rojo**) y no ligados \mathcal{E}_v^u (**negro**, estados resonantes), para una barrera y pozo rectangular. Ambos estados coinciden en el eje $\mathcal{E} = 0$. La extrapolación de los estados resonantes \mathcal{E}_v^u en la zona $\mathcal{E} < 0$ se representa en **negro** discontinuo.

Se logró identificar una relación general entre el caso de transmitancia de la barrera de potencial, los estados no ligados \mathcal{E}_v^u y ligados \mathcal{E}_v^b del potencial que permite conectar los modelos de la barrera y de pozo de potencial como un mismo problema. Esta relación se muestra en la Ilustración 8.

Se encontró que los casos de máxima transmitancia dados por la eq.54 en las barreras de potencial coinciden con los estados resonantes no ligados \mathcal{E}_v^u del pozo, los cuales se representan como una línea negra continua en la Ilustración 8. Estos estados resonantes \mathcal{E}_v^u son obtenidos cuando la derivada de la eq.54 cumple con la condición $\frac{dT}{d\mathcal{E}} = 0$ y su segunda derivada $\frac{d^2T}{d\mathcal{E}^2} < 0$, lo cual corresponde con los estados máximos de la función de transmitancia que se pueden expresar como la eq.61.

$$\mathcal{E}_v^u = V + V_v \quad v = 0,1,2, \dots \quad (61)$$

Para todo potencial $V > -V_v$, con $V_v = \frac{v^2\pi^2}{2ma^2}$. Eq.61 se satisface para todo $\mathcal{E} > 0$.

Por otro lado, se encontró en la región del pozo ($\mathcal{E} < 0$ y $V < 0$), la diferenciación implícita de la ecuación trascendental eq.60 resulta en una ecuación diferencial de primer orden para los estados ligados de energía:

$$\frac{d\mathcal{E}_\nu^b}{dV} = \frac{a\sqrt{-2m\mathcal{E}_\nu^b} (2\mathcal{E}_\nu^b - V)^2 + 2V\mathcal{E}_\nu^b \cos^2 k_1 a}{a\sqrt{-2m\mathcal{E}_\nu^b} (2\mathcal{E}_\nu^b - V)^2 + 2V^2 \cos^2 k_1 a} \quad (62)$$

La cual se encuentra definida para $V \leq -V_\nu$ con $\nu = 0, 1, 2, \dots$. Eq.62 posee condiciones de fronteras definidas por eq.63 y condiciones de fronteras asintóticas dadas por eq.64

$$\mathcal{E}_\nu^b(-V_\nu) = 0 \quad (63)$$

$$\begin{aligned} \lim_{V \rightarrow \infty} (\mathcal{E}_\nu^b(V) - V) &= V_{\nu+1} \\ &= \mathcal{E}_{\nu+1}^u - V \end{aligned} \quad (64)$$

Eq.63 y eq.64 muestra la conexión entre los estados ligados \mathcal{E}^b y no ligados \mathcal{E}^u . Se encontró que en los puntos $(\mathcal{E}, V) = (0, V_\nu)$, los estados no ligados \mathcal{E}_ν^u y estados ligados $\mathcal{E}_{\nu+1}^u$ se conectan entre ellos, como se muestra en la Ilustración 8. Por lo tanto, se puede ver que el estado ligado es una continuación del estado resonante como se muestra en eq.65.

$$\mathcal{E}_\nu(V) = \begin{cases} \mathcal{E}_\nu^b(V) & \text{si } V \leq V_\nu \\ \mathcal{E}_\nu^u(V) & \text{si } V > V_\nu \end{cases} \quad (65)$$

6. Conclusiones

Se logró presentar por primera vez (hasta donde se tiene conocimiento) un esquema que unifica dos problemas frecuentemente analizados en la literatura por separado: la barreras y pozos cuadráticos de potencial en 1D. Así mismo, se obtuvo una ecuación diferencial de la energía de estados ligados con respecto al potencial que resulta ser más efectiva que la TISE para encontrar las energías válidas en el caso estudiado. También se consiguió obtener una ecuación diferencial dependiente del tiempo donde

7. Agradecimientos

Al profesor y tutor Carlos Alberto Arango Mambuscay, PhD por su constante apoyo y compromiso para la planificación, guía, realización y análisis de resultados del proyecto.

A mis compañeros integrantes del grupo de investigación de fisicoquímica teórica: Santiago Barreiro y Justin Lopez por su colaboración en la obtención de resultados y sus respectivos análisis.

8. Referencias

1. Griffiths, D. J. & Schroeter, D. F. *Introduction to Quantum Mechanics*. (Cambridge University Press, Cambridge, 2018). doi:10.1017/9781316995433.
2. *Quantum Mechanics Classical Results, Modern Systems, and Visualized Examples*. (Oxford University Press Oxford, 2006). doi:10.1093/oso/9780198530978.001.0001.
3. Wang, S. *et al.* New Floating Gate Memory with Excellent Retention Characteristics. *Adv. Electron. Mater.* **5**, 1800726 (2019).
4. Oh, T. Analysis of Surface Current by Quantum Tunneling Effect of Thin Film Transistors with Topological Insulators. *Sci. Rep.* **10**, 9509 (2020).
5. Yang, S. *et al.* Overcoming the Unfavorable Effects of “Boltzmann Tyranny:” Ultra-Low Subthreshold Swing in Organic Phototransistors via One-Transistor-One-Memristor Architecture. *Adv. Mater.* **36**, 2309337 (2024).
6. Ratnesh, R. K. *et al.* Advancement and challenges in MOSFET scaling. *Mater. Sci. Semicond. Process.* **134**, 106002 (2021).
7. Nath, S. & Mandal, P. Tunneling Through Rectangular Potential Barrier: Revisiting the Systematics of Alpha-decay. *Resonance* **27**, 733–743 (2022).

8. Tersoff, J. & Hamann, D. R. Theory of the scanning tunneling microscope. *Phys. Rev. B* **31**, 805–813 (1985).
9. Chen, C. J. *Introduction to Scanning Tunneling Microscopy*. (Oxford University PressOxford, 2007). doi:10.1093/acprof:oso/9780199211500.001.0001.
10. Paquelet Wuetz, B. *et al.* Atomic fluctuations lifting the energy degeneracy in Si/SiGe quantum dots. *Nat. Commun.* **13**, 7730 (2022).
11. Huang, H.-L., Wu, D., Fan, D. & Zhu, X. Superconducting quantum computing: a review. *Sci. China Inf. Sci.* **63**, 180501 (2020).
12. Schrödinger, E. Quantisierung als Eigenwertproblem. *Ann. Phys.* **384**, 361–376 (1926).
13. 7.7: Quantum Tunneling of Particles through Potential Barriers. *Physics LibreTexts* [https://phys.libretexts.org/Bookshelves/University_Physics/University_Physics_\(OpenStax\)/University_Physics_III_-_Optics_and_Modern_Physics_\(OpenStax\)/07%3A_Quantum_Mechanics/7.07%3A_Quantum_Tunneling_of_Particles_through_Potential_Barriers](https://phys.libretexts.org/Bookshelves/University_Physics/University_Physics_(OpenStax)/University_Physics_III_-_Optics_and_Modern_Physics_(OpenStax)/07%3A_Quantum_Mechanics/7.07%3A_Quantum_Tunneling_of_Particles_through_Potential_Barriers) (2016).
14. Razavy, M. *Quantum Theory of Tunneling*. (World Scientific, River Edge, NJ, 2003).
15. Davies, P. C. W. Quantum tunneling time. *Am. J. Phys.* **73**, 23–27 (2005).
16. Ruelle, D. A remark on bound states in potential-scattering theory. *Il Nuovo Cimento A* **61**, 655–662 (1969).
17. Sprung, D. W. L., Wu, H. & Martorell, J. A new look at the square well potential. *Eur. J. Phys.* **13**, 21–25 (1992).
18. Reed, B. C. A single equation for finite rectangular well energy eigenvalues. *Am. J. Phys.* **58**, 503–504 (1990).
19. Pitkanen, P. H. Rectangular Potential Well Problem in Quantum Mechanics. *Am. J. Phys.* **23**, 111–113 (1955).

20. Lima, F. M. S. A simpler graphical solution and an approximate formula for energy eigenvalues in finite square quantum wells. *Am. J. Phys.* **88**, 1019–1022 (2020).
21. Schmitz, K. S. Quantum Energies for Central Potentials. in *Physical Chemistry* 413–460 (Elsevier, 2017). doi:10.1016/B978-0-12-800514-9.00009-2.
22. Band, Y. B. & Avishai, Y. Approximation Methods. in *Quantum Mechanics with Applications to Nanotechnology and Information Science* 303–366 (Elsevier, 2013). doi:10.1016/B978-0-444-53786-7.00007-1.
23. Landau, L. D. & Lifshitz, E. M. THE QUASI-CLASSICAL CASE. in *Quantum Mechanics* 164–196 (Elsevier, 1977). doi:10.1016/B978-0-08-020940-1.50014-1.