



**UNIVERSIDAD  
AUTÓNOMA  
METROPOLITANA  
Unidad Iztapalapa**

---

División de Ciencias Básicas e Ingeniería  
Licenciatura en Física

Proyecto Terminal I: Investigación teórica

**ANÁLISIS INFORMATACIONAL DE DOS  
PARTÍCULAS INDISTINGUIBLES  
CONFINADAS EN UN DOBLE POZO  
INFINITO**

REALIZADO POR: **César Augusto Casares Pérez** César A. Casares P.

MATRÍCULA: **2183052559**

PARA OBTENER EL GRADO DE: **Licenciatura en Física**

Co-ASESOR: **DR. MIGUEL ANGEL BASTARRACHEA MAGNANI** 

Co-ASESOR: **DR. HUMBERTO LAGUNA GALINDO** 

Co-ASESOR: **DR. ERNESTO BENÍTEZ RODRÍGUEZ** 

COORDINADOR: **DR. MARCO ANTONIO MACEDA SANTAMARÍA** 

---

MAYO DE 2025

IZTAPALAPA, CIUDAD DE MÉXICO

# Índice

<b>1. Resumen</b>	<b>2</b>
<b>2. Introducción</b>	<b>3</b>
2.1. Ecuación de Schrödinger . . . . .	3
2.2. Mecánica cuántica de varias partículas . . . . .	4
2.3. Teoría de la información . . . . .	6
<b>3. Solución para una partícula</b>	<b>9</b>
3.1. Solución para dos partículas . . . . .	18
<b>4. Variaciones del ancho del potencial</b>	<b>21</b>
4.1. Densidad reducida . . . . .	33
4.2. Varianza . . . . .	44
4.3. Información mutua . . . . .	45
4.4. Coeficiente de correlación . . . . .	47
<b>5. Variaciones del alto del potencial</b>	<b>48</b>
5.1. Densidad reducida . . . . .	57
5.2. Varianza . . . . .	58
5.3. Información mutua . . . . .	59
5.4. Coeficiente de correlación . . . . .	60
<b>6. Conclusiones</b>	<b>61</b>
<b>A. Constantes de normalización</b>	<b>62</b>

## 1. Resumen

Este trabajo presenta un análisis teórico de un sistema cuántico formado por dos partículas indistinguibles confinadas en un doble pozo infinito de potencial. Primero se resuelve la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para una partícula y, a partir de ahí, se construyen las funciones de onda simétrica y antisimétrica que describen al sistema de dos partículas. Posteriormente, se cuantifica la localización o deslocalización espacial de la densidad de probabilidad conjunta y de las densidades reducidas mediante medidas de teoría de la información, como la entropía de Shannon, y de correlación, como la información mutua, el coeficiente de correlación de Pearson y la varianza al realizar variaciones de los parámetros del sistema, tales como, el ancho del pozo ( $b$ ) y la altura de la barrera ( $V$ ).

Palabras clave: Mecánica cuántica, ecuación de Schrödinger, doble pozo infinito de potencial, entropía de Shannon, información mutua, coeficiente de correlación de Pearson, varianza, deslocalización espacial.

## 2. Introducción

La mecánica cuántica surge a principios del siglo XX como una rama de la física para describir el comportamiento de fenómenos a nivel atómico, ya que la mecánica clásica no podía describir de manera apropiada ciertos fenómenos tales como la radiación de cuerpo negro, el efecto fotoeléctrico, o la estabilidad de los átomos, esta rama impulsó la búsqueda de nuevos conceptos para brindar una explicación. El primer descubrimiento llegó alrededor del año 1900 cuando Max Planck introdujo el concepto de *cuanto* [9], postulando que el intercambio de energía entre la radiación y sus alrededores se da en forma de paquetes cuantizados [3]. En 1905, Albert Einstein ayudó a consolidar el concepto de *cuanto* propuesto por Planck [10], reconociendo que la cuantización de ondas electromagnéticas también debía ser válida para la luz, de modo que propuso que la luz en sí misma está hecha de pequeños pedazos de energía o pequeñas partículas llamadas fotones, dando la oportunidad a Einstein de dar una explicación al efecto fotoeléctrico. Estos trabajos así como el realizado por Compton [13] dieron las bases teóricas y experimentales para el desarrollo de la mecánica cuántica. Una partícula confinada en una caja es uno de los sistemas más simples a estudiar en mecánica cuántica, el análisis de este tipo de sistemas tiene su origen en la segunda década del siglo XX con el origen de la mecánica cuántica, con la formulación ondulatoria propuesta por Schrödinger [14], este permite analizar fenómenos fundamentales de la mecánica cuántica, tales como estados ligados y la cuantización de energía. En este proyecto se estudia un sistema compuesto por dos partículas indistinguibles confinadas en un doble pozo de potencial. Abordaremos el problema en una dimensión, haciendo un análisis mediante herramientas de teoría de la información. Entre los conceptos que se utilizarán se encuentra la entropía de Shannon, que puede ser interpretada como una medida de incertidumbre en una distribución probabilística, o la información mutua, que puede ser entendida como la información contenida en una variable acerca de otra correlacionada, dando paso a estudiar estas medidas en el espacio de posición para así analizar las diferencias entre las densidades provenientes de las funciones de onda simétrica y antisimétrica, de modo que se pueda establecer una comparación entre medidas como lo son la entropía de Shannon, entropía de las densidades reducidas, y la varianza para así determinar cuál de estas medidas captura mejor el comportamiento de la densidad de pares al variar los parámetros del sistema en comparación con cantidades como la varianza que es otra medida de la deslocalización espacial, y en términos de medidas de correlación, estudiar la información mutua y el coeficiente de correlación para poder determinar, cuál de estas medidas refleja de manera más precisa la correlación entre las posiciones de las partículas al variar los parámetros del sistema.

### 2.1. Ecuación de Schrödinger

A principios del siglo XX, los modelos atómicos clásicos como el propuesto por Niels Bohr [16], habían logrado explicar ciertos aspectos del átomo de hidrógeno; esta propuesta postulaba que la materia poseía propiedades ondulatorias y sentó las bases para que se reconsiderara la naturaleza de la partícula. Inspirado por esas ideas, Schrödinger [14] introdujo una ecuación diferencial en la que la función de onda  $\Psi(\vec{r}, t)$  no era más que una herramienta matemática para predecir la probabilidad de encontrar una partícula en determinada región del espacio.

Esta nueva ecuación respondía a una necesidad crucial, explicar por qué los átomos poseen niveles discretos de energía y cómo se organiza la distribución de los electrones en los orbitales. En su forma general, la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo para una partícula de masa  $m$  en un potencial  $V(\vec{r}, t)$  se expresa como:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}, t) \right] \Psi(\vec{r}, t). \quad (2.1)$$

Donde el operador  $\nabla^2$  es el *laplaciano*, este término representa la energía cinética del sistema y tiene la siguiente forma:

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (2.2)$$

$V(\vec{r}, t)$  corresponde al potencial externo que actúa sobre la partícula; este puede depender tanto del tiempo como de la posición, y representa la energía potencial del sistema.

Para sistemas en estado estacionario, se asume una solución separable en función espacial y temporal  $\Psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r})e^{-\frac{iE_t}{\hbar}}$ , que lleva a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}) + V(\vec{r})\psi(\vec{r}) = E_n \psi(\vec{r}). \quad (2.3)$$

Esta ecuación se formula como un problema de valores propios, donde las funciones de onda  $\psi_n(\vec{r})$  son las funciones propias y los correspondientes valores  $E_n$  constituyen el conjunto de niveles de energía permitidos. Así, cada índice  $n$  identifica un valor propio  $E_n$ , y la cuantización de la energía se deriva de las condiciones de contorno y normalización que restringen las soluciones no triviales [14]. La normalización de la función de onda y la imposición de condiciones de contorno como las asociadas a este problema en las cuales la función se anula en regiones para las cuales  $V \rightarrow \infty$ , garantizan que las soluciones sean físicamente aceptables. Para sistemas ideales como una partícula en un pozo infinito de potencial, un oscilador armónico, las soluciones dadas son analíticas. Entre estos, el problema del doble pozo cuadrado de potencial infinito representa un caso en el que las soluciones de la ecuación de Schrödinger pueden obtenerse de forma analítica en cada región del potencial; sin embargo, la imposición de las condiciones de frontera en este problema origina ecuaciones trascendentales para los valores propios (energías), es decir, estas ecuaciones implican expresiones en las que las funciones trigonométricas y exponenciales se combinan con los parámetros energéticos y para las cuales las soluciones deben encontrarse mediante métodos numéricos. Esto representa un problema de valores propios en los que existen infinitas raíces, para estos hay algoritmos como el método de Newton-Raphson [15] que requiere tener una estimación inicial, y si la estimación inicial no es buena esto podría llevar a una convergencia errónea o incluso a una divergencia en el cálculo.

## 2.2. Mecánica cuántica de varias partículas

Dado que este sistema está compuesto por dos partículas, es necesario describir la dinámica de un sistema de  $N$  partículas, esto se puede obtener a partir de la descripción para

una partícula. Se sabe que el estado de un sistema de N partículas sin espín está dado por una función de onda  $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, t)$ , donde el cuadrado de esta función de onda representa la densidad de probabilidad al tiempo t de encontrar la partícula 1 en el elemento de volumen  $d^3 r_1$  centrado en  $\vec{r}_1$ , la partícula 2 en su respectivo volumen respectivamente hasta la N-ésima partícula [3].

Esta función de onda,  $\Psi$ , evoluciona en el tiempo acorde con la ecuación de Schrödinger:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, t)}{\partial t} = H\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, t). \quad (2.4)$$

Donde el operador  $\hat{H}$  es el operador hamiltoniano y tiene la siguiente forma que es una generalización del caso de una sola partícula:

$$H = \sum_{j=1}^N \frac{\hbar^2}{2m_j} \nabla_j^2 + V(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, t). \quad (2.5)$$

En el problema tratado en este proyecto, se estará considerando el caso en el que el potencial es independiente del tiempo, de modo que la solución de la ecuación de Schrödinger estará dada por estados estacionarios:

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, t) = \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) e^{-iEt/\hbar}. \quad (2.6)$$

Donde E es la energía total del sistema y  $\psi$  es la solución a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo  $\hat{H}\psi = E\psi$ .

$$\left[ \sum_{j=1}^N \frac{\hbar^2}{2m_j} \nabla_j^2 + V(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) \right] \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = E\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N). \quad (2.7)$$

En mecánica clásica, si un sistema está compuesto por N partículas idénticas, es posible distinguir cada partícula; sin embargo, en mecánica cuántica esto es imposible, ya que para describir una partícula no podemos hacer más que especificar un conjunto completo de observables que commutan, y no existe un mecanismo para etiquetar partículas; además, el principio de incertidumbre hace que el concepto de trayectoria pierda sentido, y aun si la posición fuera completamente determinada a algún tiempo, es imposible especificar cuál será su posición en el instante que sigue, por lo tanto, el concepto de distinguibilidad pierde sentido en mecánica cuántica.

Consideremos un sistema de N partículas cuya función de onda es  $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)$ , si estas partículas son mezcladas no hay forma de determinar cuál partícula tiene la coordenada  $r_1$ , o cuál tiene la coordenada  $r_2$  y así sucesivamente, de modo que la única medición que se puede realizar es aquella que especifique la probabilidad de alguna partícula de estar localizada en  $r_1$  otra en  $r_2$ , hasta  $r_N$ . Como resultado de esto, la probabilidad no debe cambiar al intercambiar partículas, esto es, si cambiamos la partícula  $i$  con la partícula  $j$ , esta densidad de probabilidad debe ser idéntica, por lo tanto, debe ser de la siguiente forma [3]:

$$|\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_j, \dots, \vec{r}_N)|^2 = |\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_j, \dots, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_N)|^2. \quad (2.8)$$

Por lo tanto, se tiene:

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_j, \dots, \vec{r}_N) = \pm \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_j, \dots, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_N). \quad (2.9)$$

Esto implica que la función de onda para un sistema de  $N$  partículas indistinguibles puede ser simétrica o antisimétrica ante el intercambio de un par de partículas. Podría proponerse una solución de la siguiente forma:

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n) = \psi_1(\vec{r}_1)\psi_2(\vec{r}_2)\dots\psi_n(\vec{r}_n). \quad (2.10)$$

El problema con esta propuesta es que está considerando que se pueden etiquetar partículas en este contexto haciéndolas distinguibles, pero eso no es posible ya que, como se mencionó, en mecánica cuántica es imposible hacer esta distinción y además el producto de estas funciones no necesariamente tiene definida una simetría, que es un requisito para sistemas de  $N$  partículas cuyas funciones son simétricas o antisimétricas como ya se ha mencionado. Para construir estas funciones, consideremos un sistema como el planteado en este trabajo, es decir, un sistema de dos partículas indistinguibles, ya que para este caso la función de onda simétrica y anti simétrica será:

$$\Psi_s(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) + \Psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1)]. \quad (2.11)$$

$$\Psi_a(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) - \Psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1)]. \quad (2.12)$$

Donde  $1/\sqrt{2}$  es un factor de normalización, y  $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$  se propone como una solución separable  $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_1(\vec{r}_1)\psi_2(\vec{r}_2)$ , de modo que las funciones tanto simétrica como antisimétrica serán:

$$\Psi_s(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_1(\vec{r}_1)\psi_2(\vec{r}_2) + \psi_1(\vec{r}_2)\psi_2(\vec{r}_1)]. \quad (2.13)$$

$$\Psi_a(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_1(\vec{r}_1)\psi_2(\vec{r}_2) - \psi_1(\vec{r}_2)\psi_2(\vec{r}_1)]. \quad (2.14)$$

Para el caso en que ambas partículas comparten el mismo estado cuántico la función de onda simétrica está dada por  $\Psi_s(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_{n_1}(\vec{r}_1)\psi_{n_2}(\vec{r}_2)$  y la función antisimétrica es cero, en este caso existe una restricción en la función anti simétrica, esta restricción viene del principio de exclusión de Pauli [12], ya que la función antisimétrica está asociada a fermiones y estos obedecen este principio de exclusión. Esta construcción puede extenderse al caso de  $N$  partículas, pero dado el objetivo de este trabajo que es hacer el análisis para dos partículas, esta construcción es más que suficiente.

## 2.3. Teoría de la información

La teoría de la información surge en la primera mitad del siglo XX; Claude Shannon sentó las bases de esta teoría [11]. Se estudiaba cómo se transmite, procesa y almacena la información en diversos sistemas de comunicación. El trabajo de Shannon introdujo conceptos

esenciales como la entropía, definida como una medida cuantitativa de la incertidumbre. La entropía de Shannon está definida de la siguiente forma:

$$S = - \sum_k p_k \log p_k. \quad (2.15)$$

Donde  $p_k$  es la distribución de probabilidad. Dada la interpretación probabilística de la función de onda, es posible establecer una conexión entre ambas teorías [2]. Entonces, podemos entender la entropía de Shannon como una medida de la incertidumbre asociada al sistema o como una medida de localización si se trata de una distribución de probabilidad [1]. Es decir, la entropía de Shannon mide qué tan concentrada está dicha densidad en una región del espacio. Una distribución “localizada” significa que casi toda la probabilidad se acumula en una zona pequeña, mientras que una “distribución deslocalizada” está extendida en un área amplia.

El uso de la entropía en teoría de la información encaja perfectamente con la naturaleza estadística de las mediciones en mecánica cuántica, por lo que lo único que se debe hacer es insertar el conjunto de probabilidades obtenidas de la función de onda en la entropía de Shannon.

Dado que el cuadrado de la función de onda representa una distribución de probabilidad continua, es necesario definir la entropía para una distribución continua [3]:

$$S = - \int_{-\infty}^{\infty} p(x) \log p(x) dx. \quad (2.16)$$

Donde  $p(x)$  es la distribución de probabilidad  $p(x) = |\psi(x)|^2$ . Para un sistema de dos partículas se considera la entropía conjunta, para el caso discreto, la entropía conjunta de una pareja de variables discretas se define como:

$$S(X, Y) = - \sum_{x \in X} \sum_{y \in Y} p(x, y) \log p(x). \quad (2.17)$$

Donde  $p(x, y)$  es el cuadrado de la función de onda, ya sea simétrica o antisimétrica. De forma similar al caso de una variable, la entropía conjunta para un conjunto de variables aleatorias continuas, se define como: [4]

$$h(X_1, X_2, \dots, X_n) = - \int f(x^n) \log f(x^n) dx^n. \quad (2.18)$$

Para este sistema la entropía de pares será calculada de la siguiente forma: [1, 6]

$$S(x_1, x_2) = - \int \rho(x_1, x_2) \ln \rho(x_1, x_2) dx_1 dx_2. \quad (2.19)$$

Donde  $\rho(x_1, x_2)$  es la densidad de probabilidad asociada al sistema. Igualmente es posible definir una entropía relativa conjunta cuya distribución de referencia es el producto de las marginales, definida como información mutua: [1]

$$I_x = \int \int \rho(x_1, x_2) \ln \frac{\rho(x_1, x_2)}{\rho(x_1)\rho(x_2)} dx_1 dx_2. \quad (2.20)$$

Donde  $\rho(x_1)$  y  $\rho(x_2)$  se definen como las marginales de la distribución y es la distribución de una variable aleatoria sin tener en cuenta las demás variables del sistema. Si  $x_1$  y  $x_2$  tienen una distribución conjunta, la marginal de  $x_1$  se obtiene integrando sobre  $x_2$ :

$$\rho(x_1) = \int \rho(x_1, x_2) dx_2. \quad (2.21)$$

Esta cantidad responde a la pregunta ¿cuál es la probabilidad de que  $x_1 = x$  sin importar el valor de  $x_2$ . Dado que es una distribución de probabilidad, debe cumplir con la propiedad de normalización. De igual forma puede calcularse otra medida de correlación estadística entre las variables de este sistema, y esa es el coeficiente de correlación de Pearson [1], que detecta correlación lineal entre variables continuas.

$$\tau = \frac{\langle x_1 x_2 \rangle - \langle x_1 \rangle \langle x_2 \rangle}{\sqrt{\langle x_1^2 \rangle - \langle x_1 \rangle^2} \sqrt{\langle x_2^2 \rangle - \langle x_2 \rangle^2}}. \quad (2.22)$$

Cuyo rango de valores está entre  $\pm 1$ , siendo  $+1$  una correlación lineal positiva, indicando que si una variable aumenta la otra aumenta en proporción constante, si el coeficiente es  $-1$  tendremos una correlación lineal negativa, a medida que una variable aumenta la otra disminuye, si  $\tau = 0$  esto indica que no existe correlación lineal, es decir, podría no existir correlación entre ninguna de las variables o en su defecto el tipo de correlación entre las variables puede no ser lineal. Esta correlación puede ser interpretada como una medida de la separabilidad del sistema ya que si la descripción de un sistema requiere de dos (o más) variables, se dice que estas están estadísticamente correlacionadas si su función de distribución no puede separarse como producto de cada una de ellas [5].

### 3. Solución para una partícula

Una vez dado el contexto y los fundamentos teóricos del trabajo, se procede a explicar el planteamiento del problema para una partícula y, posteriormente, hacer la transición a dos partículas.

Se tiene una partícula confinada en la siguiente región de potencial.

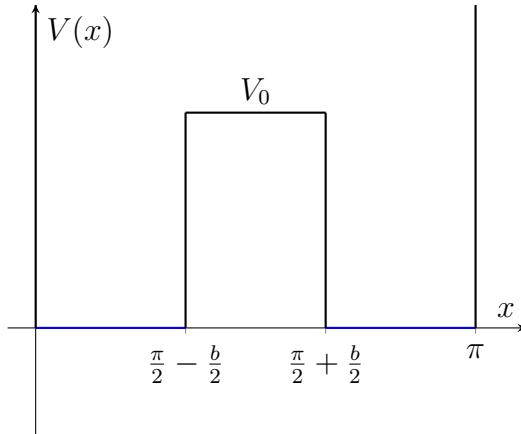


Figura 1: Doble pozo cuadrado de potencial de paredes infinitas y longitud  $\pi$  centrado en  $\frac{\pi}{2}$  con una barrera de ancho  $b$  y alto  $V_0$ .

Cuyas regiones son las siguientes:

$$V(x) = \begin{cases} \infty, & x \leq 0 \text{ o } x \geq \pi, \\ 0, & 0 < x < \frac{\pi}{2} - \frac{b}{2}, \\ V_0, & \frac{\pi}{2} - \frac{b}{2} \leq x \leq \frac{\pi}{2} + \frac{b}{2}, \\ 0, & \frac{\pi}{2} + \frac{b}{2} < x < \pi. \end{cases} \quad (3.1)$$

Su descripción está dada por la ecuación de Schrödinger.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E_n\psi(x). \quad (3.2)$$

Dividimos este problema en tres regiones de interés.

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < \frac{\pi}{2} - \frac{b}{2}, \\ V_0, & \frac{\pi}{2} - \frac{b}{2} \leq x \leq \frac{\pi}{2} + \frac{b}{2}, \\ 0, & \frac{\pi}{2} + \frac{b}{2} < x < \pi. \end{cases} \quad (3.3)$$

Se considerarán unidades atómicas, es decir,  $\hbar = 1$  y  $m = 1$ , y para las cuales la ecuación de Schrödinger tiene la siguiente forma.

Para la primera región:

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} = E_n\psi_1(x). \quad (3.4)$$

Transformando la ecuación se obtiene:

$$\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} + 2E_n\psi_1(x) = 0. \quad (3.5)$$

Es claro que es una ecuación de oscilador armónico, y proponemos la solución de la forma:

$$\psi_1(x) = e^{\lambda_n x}. \quad (3.6)$$

Se define entonces  $\lambda_n$

$$\lambda_n^2 = 2E_n.$$

La propuesta de solución hecha dará una solución en términos de senos y cosenos.

$$\psi_1(x) = A \sin \lambda_n x + B \cos \lambda_n x. \quad (3.7)$$

Para la segunda región:

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2} + V_0\psi_2(x) = E_n\psi_2(x). \quad (3.8)$$

$$\frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2} - 2(V_0 - E_n)\psi_2(x) = 0. \quad (3.9)$$

Se define  $\kappa$  en términos de  $\lambda$  como:

$$\kappa_n^2 = 2V_0 - \lambda_n^2.$$

Para regiones en las que la energía del sistema sea menor que la barrera de potencial ( $E < V_0$ ) se tendrán soluciones reales.

$$\psi_2(x) = e^{\kappa_n x}. \quad (3.10)$$

Cuyas soluciones serán:

$$\psi_2(x) = C \sinh \kappa_n x + D \cosh \kappa_n x. \quad (3.11)$$

Para la tercera región, las soluciones serán muy parecidas a las obtenidas en la primera región.

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2\psi_3(x)}{dx^2} = E_n\psi_3(x). \quad (3.12)$$

$$\psi_1(x) = A \sin \lambda_n(\pi - x) + B \cos \lambda_n(\pi - x). \quad (3.13)$$

Por lo tanto, el conjunto de soluciones para cada región del espacio es el siguiente:

$$\psi(x) = \begin{cases} A \sin \lambda_n x + B \cos \lambda_n x, & 0 < x < \frac{\pi}{2} - \frac{b}{2}, \\ C \sinh \kappa_n x + D \cosh \kappa_n x, & \frac{\pi}{2} - \frac{b}{2} \leq x \leq \frac{\pi}{2} + \frac{b}{2}, \\ A \sin \lambda_n x + B \cos \lambda_n x, & \frac{\pi}{2} + \frac{b}{2} < x < \pi. \end{cases} \quad (3.14)$$

Es necesario analizar la forma de la función en las distintas regiones poniendo ciertas condiciones de frontera y, a partir de aquí, determinar las constantes y los valores propios, es decir, las energías. Así mismo, se debe considerar la paridad de la función de onda,

ya que esta dará posteriormente los estados energéticos de la función. Para estados con número cuántico  $n = 2l - 1$  se asociarán estados pares de la función de onda, y para estados con número cuántico  $n = 2l$  se asociarán estados impares de la función de onda, i.e., para soluciones pares consideraremos soluciones en la región central asociadas al seno hiperbólico, y para soluciones impares serán aquellas asociadas al seno hiperbólico. De igual manera se obtendrán dos conjuntos de soluciones asociadas a las constantes de normalización, un conjunto para las regiones pares, y otro para las impares. Se comenzará haciendo el análisis para la región par.

En  $x = 0$  se debe cumplir que

$$\psi_1(0) = 0. \quad (3.15)$$

Evaluando la función:

$$\psi_1(0) = A \sin \lambda_n 0 + B \cos \lambda_n 0 = 0. \quad (3.16)$$

Resultando así que  $B = 0$ , entonces  $\psi_1(x) = A_1 \sin \lambda_n x$ .

Para la segunda región, la función de onda será:

$$\psi_2(x) = D \cosh \kappa_n x. \quad (3.17)$$

La solución en esta región debe estar centrada en  $\frac{\pi}{2}$  de modo que al evaluarla en el centro, esta se anule, por lo que  $\psi_2$  es:

$$\psi_2(x) = D \cosh \kappa_n \left( x - \frac{\pi}{2} \right). \quad (3.18)$$

En  $x = \pi$  debe cumplirse que la función de onda debe anularse,  $\psi_3(\pi) = 0$

$$\psi_3(\pi) = A \sin \lambda_n \pi + B \cos \lambda_n \pi. \quad (3.19)$$

Esto tiene un grave problema ya que la condición para que esto se anule está completamente en  $\lambda_n$ , por lo que es necesario escribir la función de onda de tal forma que en ese intervalo al llegar a  $\pi$  se anule, por lo tanto, la función tendría la siguiente forma:

$$\psi_3(x) = A \sin \lambda_n (\pi - x) + B \cos \lambda_n (\pi - x). \quad (3.20)$$

De esta forma, si evaluamos la función de onda en  $\pi$

$$\psi_3(\pi) = A \sin \lambda_n 0 + B \cos \lambda_n 0. \quad (3.21)$$

Por lo que para esta región  $B$  también es cero, entonces

$$\psi_3(x) = A_1 \sin \lambda_n (\pi - x). \quad (3.22)$$

Por lo tanto, el conjunto de soluciones para la región par es:

$$\psi(x, \lambda_n) = \begin{cases} A_1 \sin \lambda_n x, & 0 < x < \frac{\pi}{2} - \frac{b}{2}, \\ D \cosh \kappa_n (x - \frac{\pi}{2}), & \frac{\pi}{2} - \frac{b}{2} \leq x \leq \frac{\pi}{2} + \frac{b}{2}, \\ A_1 \sin \lambda_n (\pi - x), & \frac{\pi}{2} + \frac{b}{2} < x < \pi. \end{cases} \quad (3.23)$$

Se debe garantizar la continuidad de la función de onda en todas las regiones del pozo de potencial; por lo tanto, es necesario considerar las siguientes condiciones de continuidad:

$$\psi_1\left(\frac{\pi}{2} - \frac{b}{2}\right) = \psi_2\left(\frac{\pi}{2} - \frac{b}{2}\right), \quad (3.24)$$

$$\psi_2\left(\frac{\pi}{2} + \frac{b}{2}\right) = \psi_3\left(\frac{\pi}{2} + \frac{b}{2}\right), \quad (3.25)$$

$$\psi'_1\left(\frac{\pi}{2} - \frac{b}{2}\right) = \psi'_2\left(\frac{\pi}{2} - \frac{b}{2}\right), \quad (3.26)$$

$$\psi'_2\left(\frac{\pi}{2} + \frac{b}{2}\right) = \psi'_3\left(\frac{\pi}{2} + \frac{b}{2}\right). \quad (3.27)$$

De la primera condición se obtiene:

$$A_1 \sin \lambda_n \left(\frac{\pi - b}{2}\right) = D \cosh \kappa_n \frac{b}{2}. \quad (3.28)$$

De la segunda condición se obtiene:

$$A_1 \sin \lambda_n \left(\frac{\pi - b}{2}\right) = D \cosh \kappa_n \frac{b}{2}. \quad (3.29)$$

Y es obvio que se obtiene la misma ecuación que en el primer intervalo, por lo que hay que considerar la continuidad de las derivadas de la función de onda:

$$A_1 \lambda_n \cos \lambda_n \left(\frac{\pi - b}{2}\right) = -D \kappa_n \sinh \kappa_n \frac{b}{2}. \quad (3.30)$$

Para la última región:

$$A_1 \lambda_n \cos \lambda_n \left(\frac{\pi - b}{2}\right) = -D \kappa_n \sinh \kappa_n \frac{b}{2}. \quad (3.31)$$

Se obtiene la misma ecuación, por lo que haciendo el cociente entre las ecuaciones 3.29 y 3.31, obtenemos una ecuación trascendental para determinar  $\lambda_n$ :

$$\lambda_n \cot \lambda_n \left(\frac{\pi - b}{2}\right) = -\kappa_n \tanh \kappa_n \frac{b}{2}. \quad (3.32)$$

Cuya solución debe ser determinada de forma numérica. Estas soluciones para  $\lambda$  corresponden a los niveles energéticos. Como es bien sabido, la función de onda por su interpretación estadística como densidad de probabilidad, debe cumplir con la siguiente condición:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1. \quad (3.33)$$

Es decir, esta función debe estar normalizada. Por lo que la condición de normalización para esta solución es la siguiente:

$$\int_0^{\frac{\pi-b}{2}} (A_1 \sin \lambda_n x)^2 dx + \int_{\frac{\pi-b}{2}}^{\frac{\pi+b}{2}} (D \cosh \kappa_n (x - \frac{\pi}{2}))^2 dx + \int_{\frac{\pi+b}{2}}^{\pi} (A_1 \sin \lambda_n (\pi - x))^2 dx = 1. \quad (3.34)$$

Teniendo entonces un sistema de 2 ecuaciones para dos variables,  $A_1$  y  $D$ , que son las respectivas constantes de normalización que serán función del potencial  $V_0$ , de  $b$  y de  $\lambda$ , cuya expresión completa está en el apéndice A.

Pasando ahora al caso impar, en la región central se tendrá una función  $-C \sinh \kappa_n (\frac{\pi}{2} - x)$ , y en la tercera región habrá un cambio de signo, es decir, tendremos  $-A_2 \sin \lambda_n (x - \pi)$  así como las siguientes condiciones de frontera y las respectivas constantes de normalización:

$$\psi_1 \left( \frac{\pi}{2} - \frac{b}{2} \right) = \psi_2 \left( \frac{\pi}{2} - \frac{b}{2} \right), \quad (3.35)$$

$$\psi_2 \left( \frac{\pi}{2} + \frac{b}{2} \right) = \psi_3 \left( \frac{\pi}{2} + \frac{b}{2} \right), \quad (3.36)$$

$$\psi'_1 \left( \frac{\pi}{2} - \frac{b}{2} \right) = \psi'_2 \left( \frac{\pi}{2} - \frac{b}{2} \right), \quad (3.37)$$

$$\psi'_2 \left( \frac{\pi}{2} + \frac{b}{2} \right) = \psi'_3 \left( \frac{\pi}{2} + \frac{b}{2} \right). \quad (3.38)$$

$$\int_0^{\frac{\pi-b}{2}} (A_2 \sin \lambda_n x)^2 dx + \int_{\frac{\pi-b}{2}}^{\frac{\pi+b}{2}} (C \sinh \kappa_n (\frac{\pi}{2} - x))^2 dx + \int_{\frac{\pi+b}{2}}^{\pi} (A_2 \sin \lambda_n (x - \pi))^2 dx = 1. \quad (3.39)$$

De las condiciones de continuidad obtendremos las siguientes ecuaciones:

$$A_2 \sin \lambda_n \left( \frac{\pi - b}{2} \right) = C \sinh \kappa_n \frac{b}{2}. \quad (3.40)$$

De la segunda condición se obtiene:

$$A_2 \sin \lambda_n \left( \frac{\pi - b}{2} \right) = C \sinh \kappa_n \frac{b}{2}. \quad (3.41)$$

De la tercera y cuarta condición se tiene:

$$A_2 \lambda_n \cos \lambda_n \left( \frac{\pi - b}{2} \right) = -C \kappa_n \cosh \kappa_n \frac{b}{2}. \quad (3.42)$$

Dando entonces un sistema de 2 ecuaciones para dos variables,  $A_2$  y  $C$ , que son las respectivas constantes de normalización para funciones impares que serán función del potencial  $V_0$ , de  $b$  y de  $\lambda_n$ , cuya expresión completa está expresada en el apéndice A. Ahora, si se dividen estas dos ecuaciones se obtiene la siguiente ecuación trascendental:

$$\lambda_n \cot \lambda_n \left( \frac{\pi - b}{2} \right) = -\kappa_n \coth \kappa_n \frac{b}{2}. \quad (3.43)$$

Que es crucial para encontrar las respectivas raíces para las soluciones impares. De modo que el conjunto de soluciones para esta región es el siguiente:

$$\psi(x, \lambda_n) = \begin{cases} A_2 \sin \lambda_n x, & 0 < x < \frac{\pi}{2} - \frac{b}{2}, \\ -C \sinh \kappa_n \left( x - \frac{\pi}{2} \right), & \frac{\pi}{2} - \frac{b}{2} \leq x \leq \frac{\pi}{2} + \frac{b}{2}, \\ A_2 \sin \lambda_n (\pi - x), & \frac{\pi}{2} + \frac{b}{2} < x < \pi. \end{cases} \quad (3.44)$$

Una vez hecho este análisis es posible dar la función de onda, para este trabajo se consideraron 4 números cuánticos, es decir, 4 niveles energéticos dentro de este sistema de doble pozo infinito, consideraremos que  $n$  va de 1 a 4, por lo tanto las funciones de onda para cada uno de estos valores están graficadas en la Fig. 2 a la Fig. 5. Los estados se clasifican por su paridad: los valores  $n = 2l - 1$  corresponden a funciones de onda pares y los valores  $n = 2l$  a funciones impares. El estado fundamental ( $n = 1$ ) no muestra ningún nodo (Fig. 2), el primer excitado ( $n = 2$ ) presenta un nodo en el centro y lóbulos de signo opuesto a ambos lados (Fig. 3), el segundo excitado ( $n = 3$ ) recobra la simetría par con dos nodos dentro de los pozos y un mayor número de oscilaciones (Fig. 4), y el tercer excitado (Fig. 5) muestra tres nodos, es decir, para cada estado se tienen  $n - 1$  nodos.

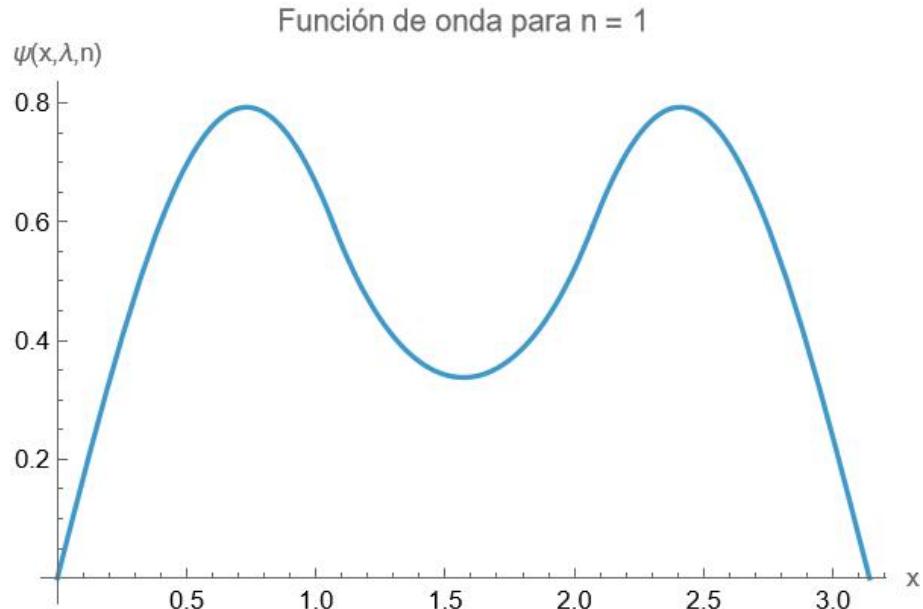


Figura 2: Función de onda para  $n = 1$ ,  $V_0 = 5$ ,  $b = 1$ .

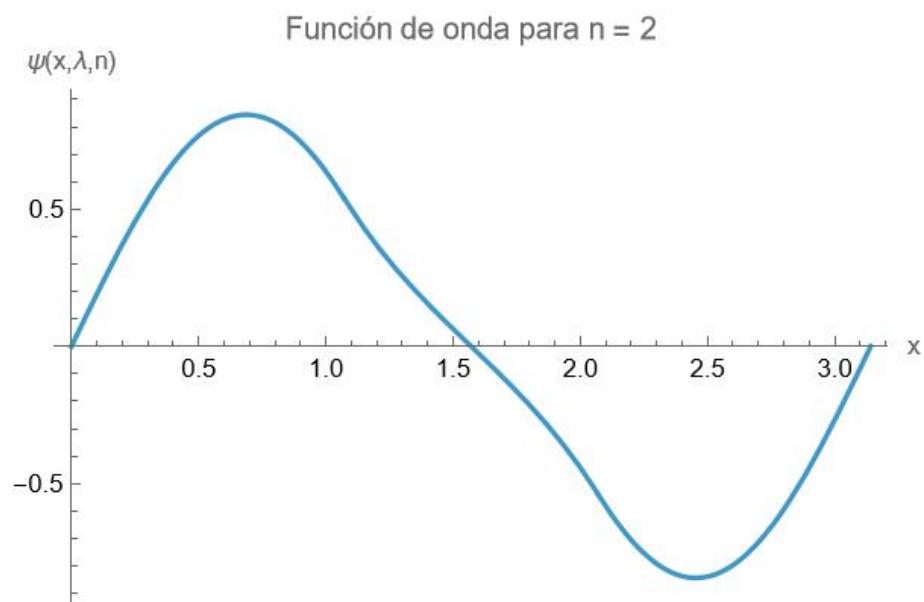


Figura 3: Función de onda para  $n = 2, V_0 = 5, b = 1$ .

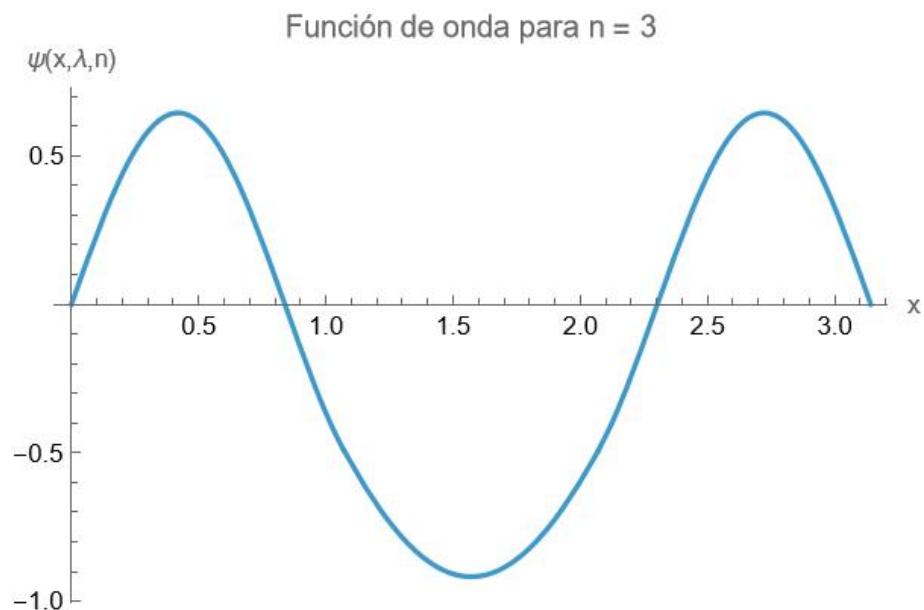


Figura 4: Función de onda para  $n = 3, V_0 = 5, b = 1$ .

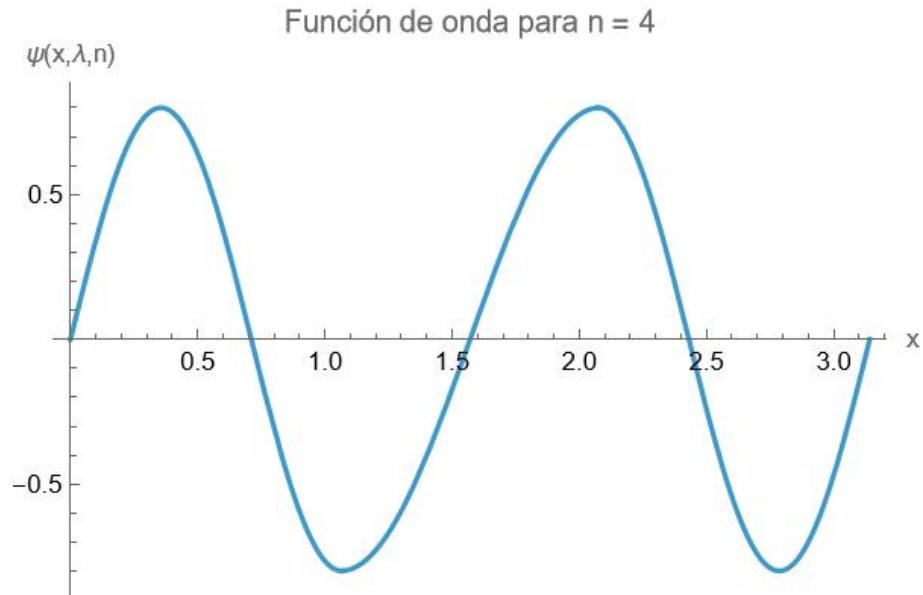


Figura 5: Función de onda para  $n = 4, V_0 = 5, b = 1$ .

Estas funciones de onda en comparación con las funciones de onda de una partícula en un pozo cuadrado de potencial poseen una diferencia en la simetría y estructura. Para un pozo cuadrado ( $V_0 = 0$  y  $b = 0$ ) las funciones de onda tienen una forma senoidal, en este caso al observar la Fig. 2 vemos en la región central se tiene un pequeño valle, esta región está asociada al escalón de potencial y este pequeño valle es originado por un fenómeno de tunelamiento [17, 18], es una región en la que la probabilidad de encontrar la partícula en la región del escalón, mientras que en el pozo cuadrado las funciones de onda están distribuidas en una región como podemos ver a continuación en la Fig. 6 a la Fig. 9. Para  $n = 1$  la función de onda presenta un solo lóbulo sin nodos internos (Fig. 6); para  $n = 2$  aparece un nodo en el centro y dos lóbulos de signo opuesto (Fig. 7); para  $n = 3$  hay dos nodos internos y tres lóbulos alternados (Fig. 8); y para  $n = 4$  se observan tres nodos internos con cuatro lóbulos (Fig. 9). Cada función de onda tiene al igual que en el doble pozo cuadrado  $n - 1$  nodos y su forma refleja el incremento en energía y en el número de oscilaciones con  $n$ , es decir a mayor nivel energético  $E_n$  mayor cantidad de oscilaciones.

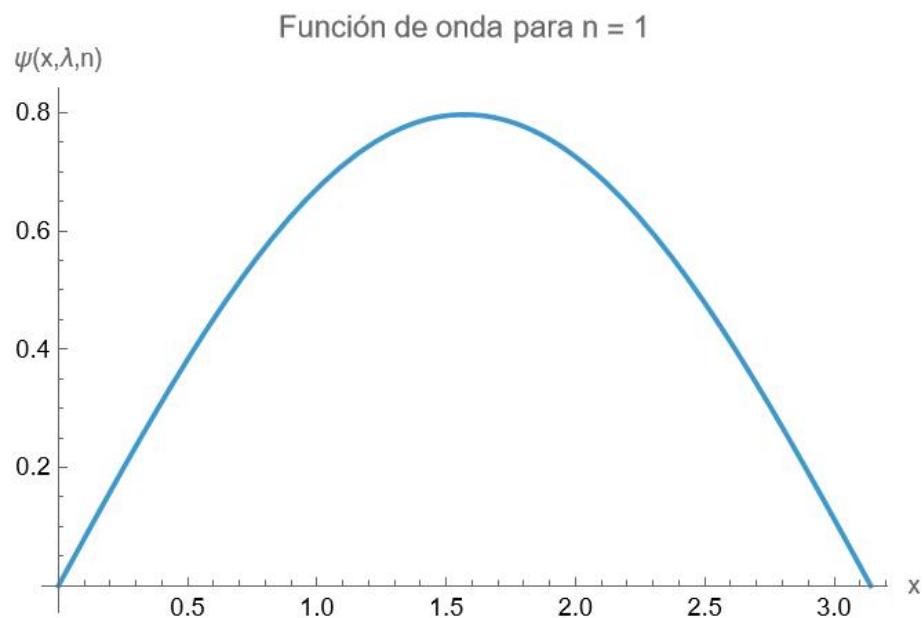


Figura 6: Función de onda en un pozo cuadrado para  $n = 1, V_0 = 0, b = 0$ .

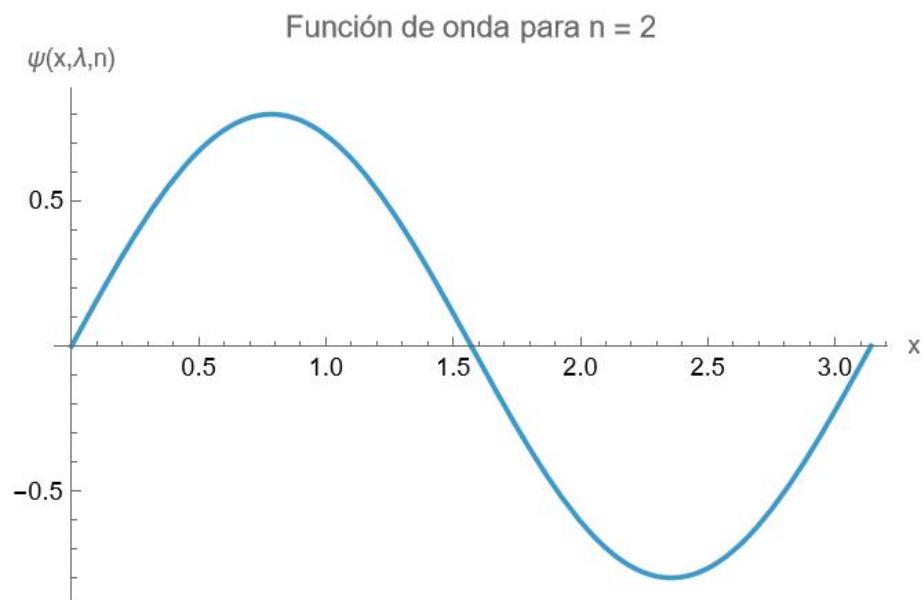


Figura 7: Función de onda en un pozo cuadrado para  $n = 2, V_0 = 0, b = 0$ .

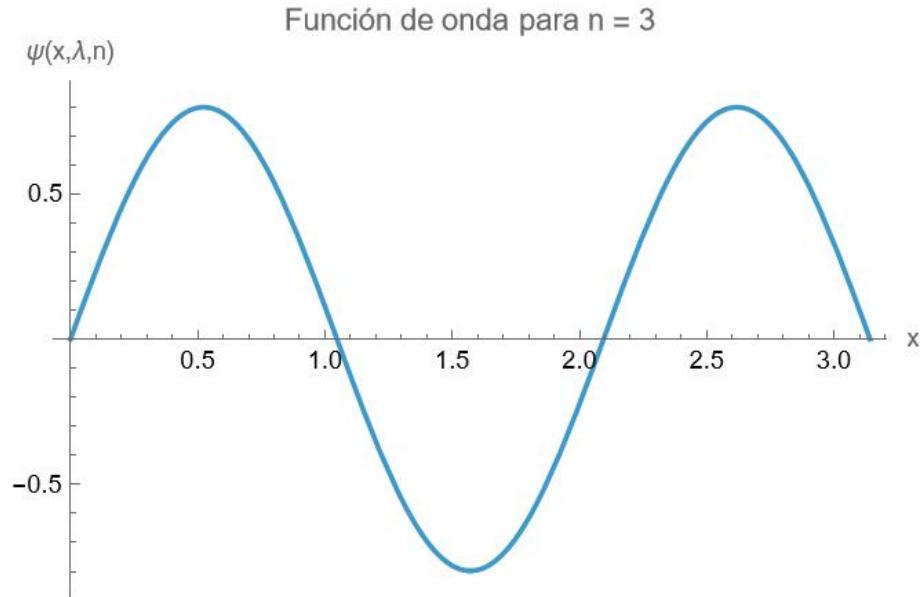


Figura 8: Función de onda en un pozo cuadrado para  $n = 3, V_0 = 0, b = 0$ .

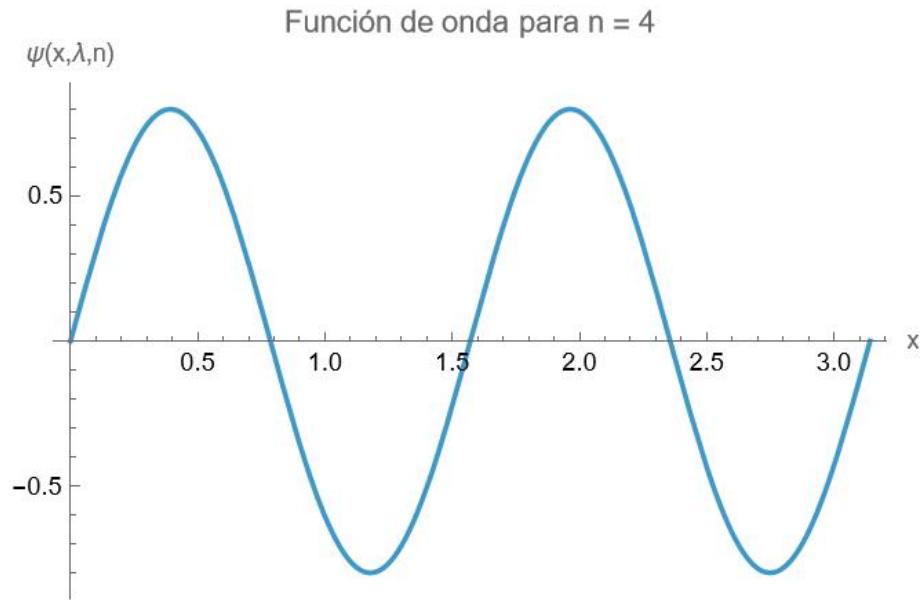


Figura 9: Función de onda en un pozo cuadrado para  $n = 4, V_0 = 0, b = 0$ .

### 3.1. Solución para dos partículas

En este punto se puede pasar a explicar la metodología para el sistema de dos partículas indistinguibles no interactuantes. Como ya se mencionó, para hacer el análisis de este tipo de sistemas se puede partir de las soluciones construidas para una partícula, de modo que puede construirse la función de onda para dos partículas de la siguiente forma:

$$\Psi_+(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\Psi(x_1, x_2) + \Psi(x_2, x_1)]. \quad (3.45)$$

$$\Psi_-(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\Psi(x_1, x_2) - \Psi(x_2, x_1)]. \quad (3.46)$$

Donde  $\Psi_+(x_1, x_2)$  y  $\Psi_-(x_1, x_2)$  representan las funciones simétrica y antisimétrica respectivamente, donde  $\Psi(x_1, x_2)$  es el producto de las funciones de onda de cada partícula  $\psi_1(x_1)\psi_2(x_2)$ , y  $\Psi(x_2, x_1)$  es el producto de las funciones de onda de cada partícula al intercambiar las posiciones de cada una, es decir  $\psi_1(x_2)\psi_2(x_1)$ . Una vez obtenidas estas funciones de onda, es posible hacer el análisis de las respectivas cantidades de interés del sistema, tales como la entropía de Shannon para la densidad de pares, la entropía de Shannon para las marginales, la información mutua, el coeficiente de correlación de Pearson, y la varianza. Estas cantidades se construyen de la siguiente manera: como ya se mencionó, la entropía de Shannon es una medida de la incertidumbre o de localización de la densidad de probabilidad, es decir, mide qué tan acumulada está la densidad de probabilidad en una región del espacio, si una densidad de probabilidad está deslocalizada, quiere decir que las probabilidades están más distribuidas en el espacio, si está localizada quiere decir que esta está concentrada en alguna región del espacio, es importante recordar que la función de onda tiene una interpretación probabilística, por lo que la conexión es bastante directa, esta entropía para nuestro caso puede ser calculada de la siguiente manera:

$$S_{x_1, x_2} = - \int_0^\pi \int_0^\pi |\Psi_\pm(x_1, x_2)|^2 \ln |\Psi_\pm(x_1, x_2)|^2 dx_1 dx_2. \quad (3.47)$$

Esto permitirá analizar la localización o deslocalización de la densidad de pares del sistema. De igual forma se puede definir la densidad reducida para calcular la entropía de las densidades reducidas para así comparar ambas densidades de probabilidad. Se define la densidad reducida o marginal como:

$$\rho(x_{1,2}) = \int_0^\pi |\Psi_\pm(x_1, x_2)|^2 dx_{1,2}. \quad (3.48)$$

Estas densidades reducidas son iguales para las densidades simétrica y antisimétrica dada la ortonormalidad de las funciones de onda y es algo que solo ocurre en sistemas de partículas no interactuantes como el que se está planteando. Una vez definido esto, puede calcularse la entropía de Shannon para esta distribución.

$$S_{x_1} = - \int_0^\pi \rho(x_1) \ln \rho(x_1) dx_1. \quad (3.49)$$

Como ya se mencionó, la información mutua se define como una entropía relativa entre distribuciones de más de una variable. para este problema esta se calcula de la siguiente forma:

$$I_x = \int \int |\Psi(x_1, x_2)|^2 \ln \frac{|\Psi(x_1, x_2)|^2}{\rho(x_1)\rho(x_2)} dx_1 dx_2 = 2S_{x_1} - S_{x_1, x_2}. \quad (3.50)$$

El coeficiente de correlación para este sistema se construye de la siguiente manera:

$$\tau = \frac{\langle x_1 x_2 \rangle - \langle x_1 \rangle \langle x_2 \rangle}{\sqrt{\langle x_1^2 \rangle - \langle x_1 \rangle^2} \sqrt{\langle x_2^2 \rangle - \langle x_2 \rangle^2}}. \quad (3.51)$$

Donde los valores esperados se calculan de la siguiente forma:

$$\langle x_1 x_2 \rangle = \int_0^\pi \int_0^\pi x_1 x_2 |\Psi_\pm(x_1, x_2)|^2 dx_1 dx_2. \quad (3.52)$$

$$\langle x_{1,2} \rangle = \int_0^\pi x_{1,2} \rho(x_{1,2}) dx_{1,2}. \quad (3.53)$$

Es necesario precisar que esto es lo mismo que haber hecho la siguiente integral:

$$\langle x_1 \rangle = \int_0^\pi \int_0^\pi x_1 |\Psi_\pm(x_1, x_2)|^2 dx_1 dx_2. \quad (3.54)$$

Ya que si se realiza la integración sobre  $x_2$  se obtiene la distribución marginal sobre  $x_1$ , entonces cualquiera de las dos formas de escritura para el valor esperado de una sola de las variables de posición es válida (ecuación 3.53 o 3.54). Los términos en el denominador de la ecuación 3.51 son la desviación estándar de la distribución.

## 4. Variaciones del ancho del potencial

Comencemos el análisis con las entropías de Shannon para variaciones del ancho de la barrera de potencial para distintos valores del escalón en la Fig. 10. Se tomaron cuatro estados del sistema,  $n_1 = 1$  y  $n_2 = 2$ ;  $n_1 = 1$  y  $n_2 = 3$ ;  $n_1 = 2$  y  $n_2 = 3$ ;  $n_1 = 2$  y  $n_2 = 4$ ; así como 4 distintos valores del alto del escalón de potencial,  $V = 1, V = 5, V = 10, V = 20$ , para cada una de las gráficas, se calcularon 20 puntos ya que el costo computacional se elevaba al intentar calcular más puntos, partiendo de  $b = 0.001$  hasta  $b = \pi/20$ .

Al hacer el cálculo de las entropías para la densidad de pares se observa que para estados  $n_1 = 1$  y  $n_2 = 2$ ;  $n_1 = 2$  y  $n_2 = 3$  el comportamiento de la entropía de ambas densidades tanto simétrica como anti simétrica es igual, los estados restantes ( $n_1 = 1$  y  $n_2 = 3$ ;  $n_1 = 2$  y  $n_2 = 4$ ) presentan un comportamiento distinto en ambas densidades, aunque en regiones parecen tocarse, en la mayoría de los casos es distinta y presenta mayor deslocalización la densidad anti simétrica. Esto puede explicarse pensando en la restricción ya mencionada en funciones anti simétricas, dando una restricción sobre la densidad de probabilidad, haciendo que la probabilidad de encontrar a las dos partículas en el mismo punto es cero y la probabilidad de encontrarlas cerca es muy pequeña, teniendo efecto en la localización de la densidad de pares ya que en promedio el espacio disponible para la otra partícula es menor, generando cierta clase de repulsión entre ellas a pesar de ser no interactuantes.

Esto lleva a pensar que en los casos con  $n_1 = 1$  y  $n_2 = 2$ ;  $n_1 = 2$  y  $n_2 = 3$  dado que la función simétrica está igualmente localizada que la antisimétrica, debe tener un hueco. En los casos límite, se observa que se recupera el valor de dos partículas libres en una caja, esto se observa en el valor de la entropía en estos casos, ya que se obtiene el mismo valor de entropía en ambos límites. De igual forma se observa que en cada gráfica se presentan máximos y mínimos, como ya se ha mencionado, la entropía de Shannon es una medida de la localización o deslocalización de una densidad de probabilidad, en estos casos se observa como al aumentar el ancho de la barrera de potencial, se tiene un fenómeno de localización (disminución de entropía) o deslocalización (aumento de entropía).

## 4 VARIACIONES DEL ANCHO DEL POTENCIAL

---

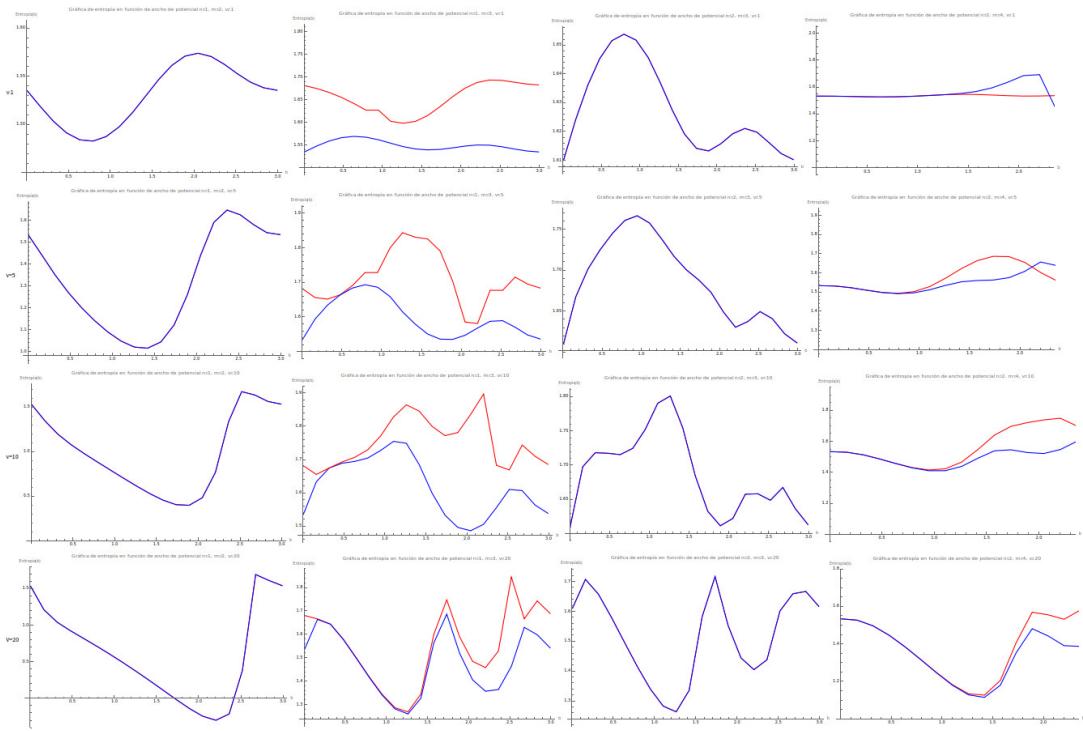


Figura 10: Entropía de Shannon vs ancho de la barrera, curva roja: densidad simétrica, curva azul: densidad antisimétrica, primera columna  $n_1 = 1$  y  $n_2 = 2$ , segunda columna  $n_1 = 1$  y  $n_2 = 3$ , tercera columna  $n_1 = 2$  y  $n_2 = 3$ , cuarta columna  $n_1 = 2$  y  $n_2 = 4$ ,  $V = 1$  en la primera fila,  $V = 5$  en la segunda fila,  $V = 10$  en la tercera fila, y  $V = 20$  en la última fila.

Analizando la primera columna de la Fig.10 para el estado  $n_1 = 1$  y  $n_2 = 2$  al aumentar el ancho del escalón se observa que las densidades se localizan y el mínimo a partir del cual se empiezan a deslocalizar depende del valor de  $V$ , ya que al aumentar este valor, la densidad se deslocaliza a mayores valores de  $b$ , viendo las densidades de pares para estos estados.

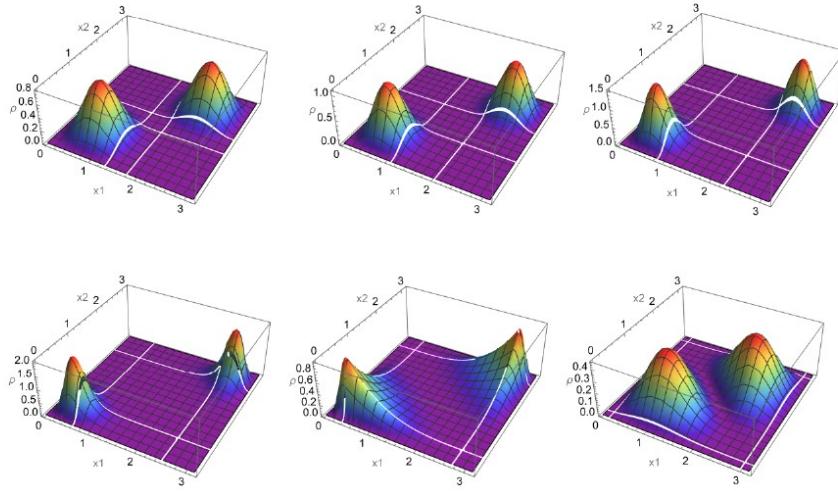


Figura 11: Densidad de la función de onda de dos partículas para el estado  $n_1 = 1$  y  $n_2 = 2$ ,  $V = 5$  al cambiar el ancho de la barrera de potencial marcado por las líneas blancas.

Se observa en la Fig. 11 cómo al aumentar el ancho de la barrera de potencial (*b*) la densidad de la función de onda se localiza en los extremos del doble pozo. El cambio en este ancho puede verse en las líneas blancas en las figuras de las densidades, ya que estas líneas blancas representan los límites de la barrera de potencial.

Al analizar la segunda columna de la Fig. 10 (estado  $n_1 = 1$  y  $n_2 = 3$ ), la densidad simétrica se presenta mayor deslocalización mientras la densidad antisimétrica presenta menores valores de entropía indicando así menor deslocalización. Al realizar aumentos en el alto del escalón de potencial, se observa que las entropías de ambas funciones tienden a acercarse más, al grado que para  $V = 20$  las curvas en una cierta región son muy cercanas. La Fig. 12 muestra la densidad de onda simétrica para el estado  $n_1 = 1$  y  $n_2 = 3$  para distintos valores del ancho de la barrera de potencial, es notable como la densidad de la función de onda simétrica se deslocaliza conforme aumenta el valor del ancho del escalón, comportamiento que se refleja en el análisis de la segunda columna de las gráficas de la entropía de la densidad de pares.

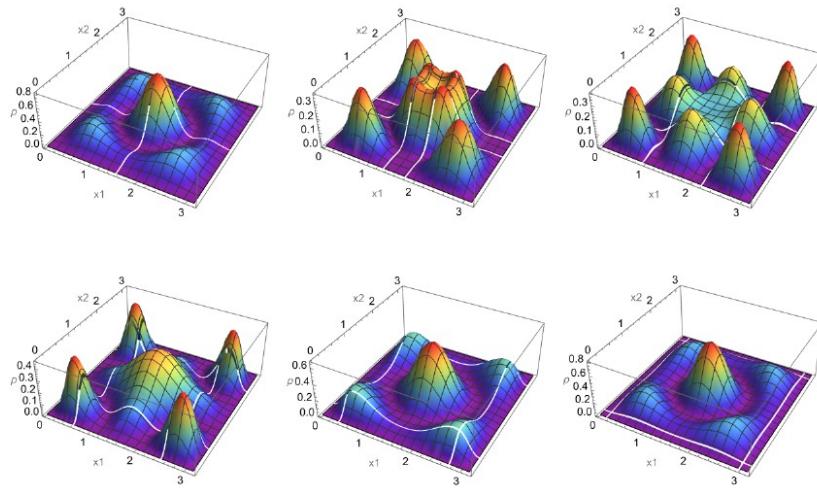


Figura 12: Densidad de la función de onda simétrica de dos partículas para el estado  $n_1 = 1$ ,  $n_2 = 3$  y  $V = 5$  al cambiar el ancho de la barrera de potencial marcado por las líneas blancas.

Si ahora se observa la densidad antisimétrica en la Fig. 13, se nota que en términos generales, la deslocalización que experimenta esta función es menor. Ahora resulta interesante ver para ese estado el comportamiento de la densidad simétrica y anti simétrica para  $V = 20$  en la Fig.14 y Fig.15 ya que en una región en la que  $0.16 < b < 1.10$  la entropía toma los mismos valores para ambas funciones.

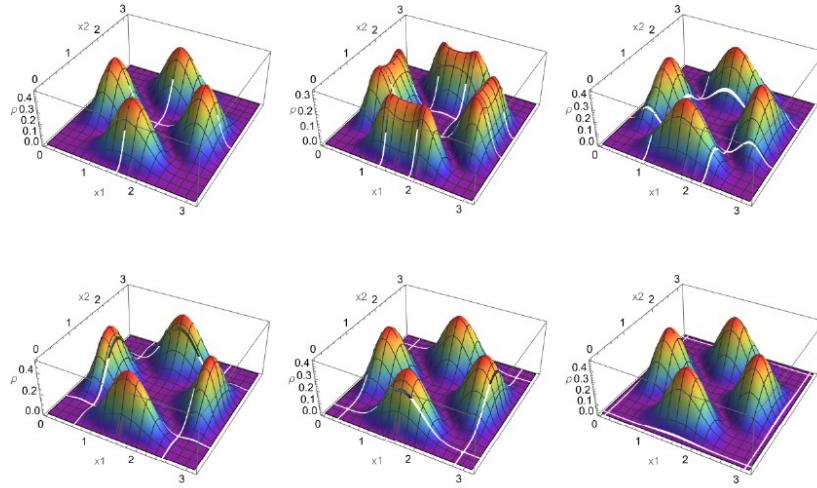


Figura 13: Densidad de la función de onda antisimétrica de dos partículas para el estado  $n_1 = 1$ ,  $n_2 = 3$  y  $V = 5$  al cambiar el ancho de la barrera de potencial marcado por las líneas blancas.

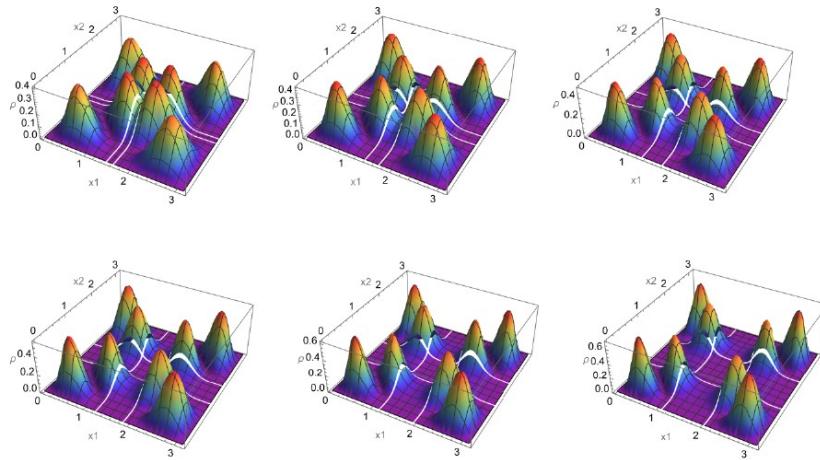


Figura 14: Densidad de la función de onda simétrica de dos partículas para el estado  $n_1 = 1$ ,  $n_2 = 3$  y  $V = 20$  al cambiar el ancho de la barrera de potencial marcado por las líneas blancas.

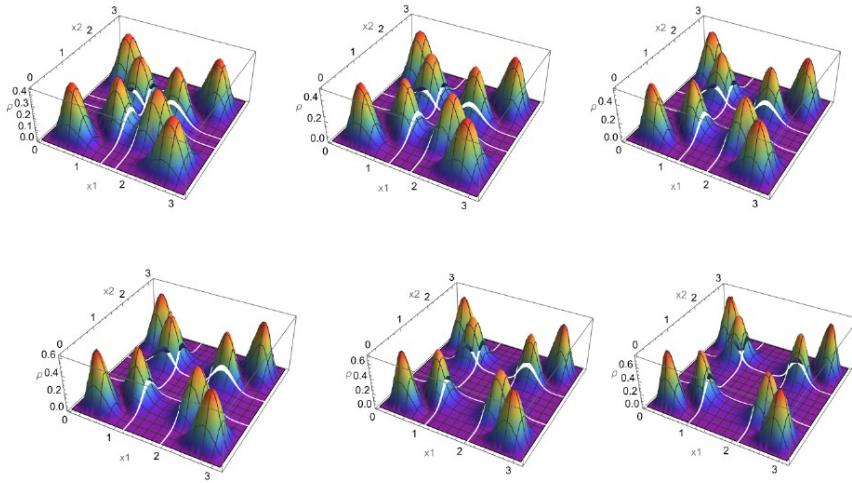


Figura 15: Densidad de la función de onda antisimétrica de dos partículas para el estado  $n_1 = 1$ ,  $n_2 = 3$  y  $V = 20$  al cambiar el ancho de la barrera de potencial marcado por las líneas blancas.

Ambas funciones de onda tienen comportamientos similares en esa región del espacio del doble pozo, dando así lugar a que la entropía de ambas tome el mismo valor. Para el estado  $n_1 = 2$ ,  $n_2 = 3$  (tercera columna de la Fig. 10) como ya se mencionó tanto la densidad simétrica como anti simétrica presentan el mismo comportamiento, pero parece ser que el número de máximos y mínimos de la entropía aumentan conforme  $V$  aumenta, para corroborar esto resulta importante visualizar las densidades de pares tanto simétrica como antisimétrica para los distintos valores de  $V$  en los cuales se encuentran esos máximos y mínimos. Para el primer valor de  $V$  en la Fig. 16 y Fig. 17.

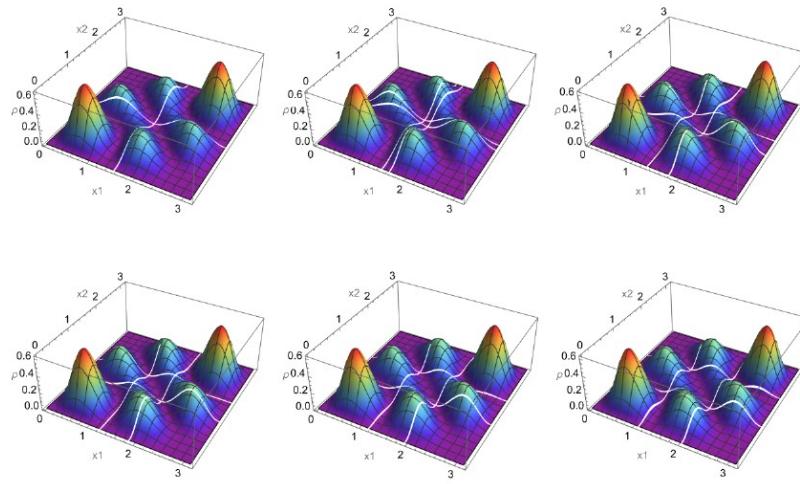


Figura 16: Deslocalización de la densidad de la función de onda simétrica de dos partículas para el estado  $n_1 = 2$ ,  $n_2 = 3$  y  $V = 1$  al cambiar el ancho de la barrera de potencial marcado por las líneas blancas.

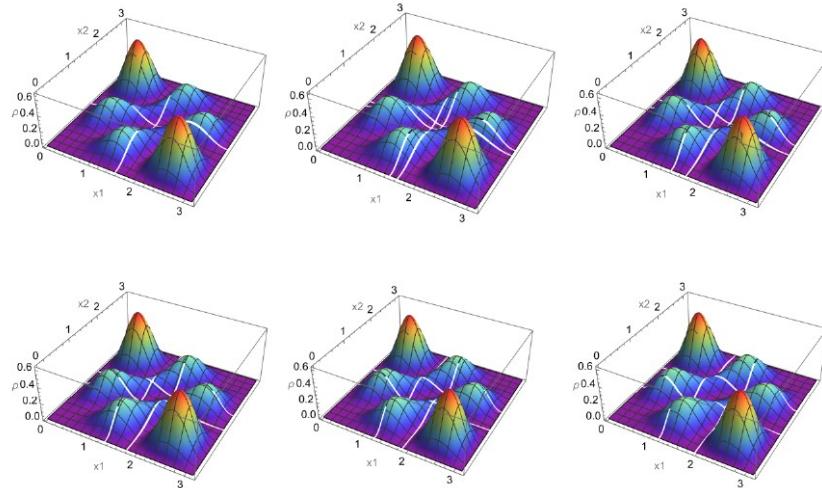


Figura 17: Deslocalización de la densidad de la función de onda antisimétrica de dos partículas para el estado  $n_1 = 2$ ,  $n_2 = 3$  y  $V = 1$  al cambiar el ancho de la barrera de potencial marcado por las líneas blancas.

Para la Fig. 16 y Fig. 17 dado que el alto del escalón es pequeño, el cambio en la localización de densidad es muy pequeño, por lo que la localización puede parecer imperceptible. Si ahora visualizamos este cambio con mayores valores del alto del escalón, la localización o deslocalización serán más evidentes, esto se refleja en la Fig. 18 a Fig. 21 en la que es notable el cambio en la localización de la densidad de la función de onda, ya que al aumentar el ancho del escalón es evidente que esta densidad se deslocaliza.

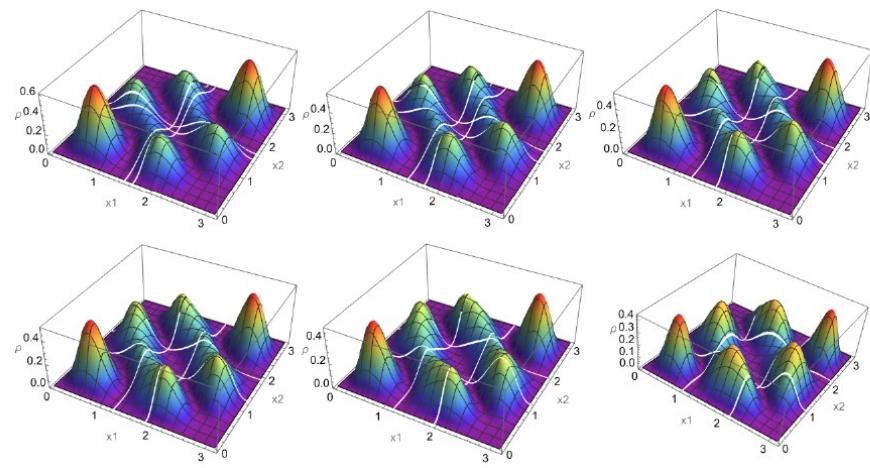


Figura 18: Deslocalización de la densidad de la función de onda simétrica de dos partículas para el estado  $n_1 = 2$ ,  $n_2 = 3$  y  $V = 5$  al cambiar el ancho de la barrera de potencial marcado por las líneas blancas.

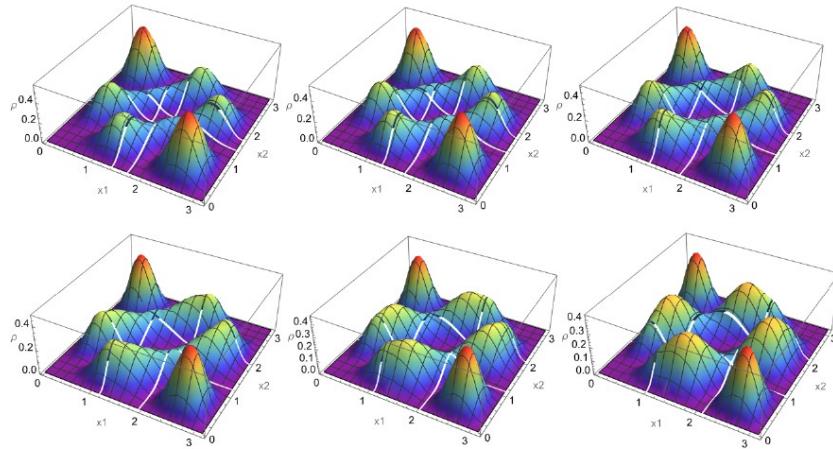


Figura 19: Deslocalización de la densidad de la función de onda antisimétrica de dos partículas para el estado  $n_1 = 2$ ,  $n_2 = 3$  y  $V = 5$  al cambiar el ancho de la barrera de potencial marcado por las líneas blancas.

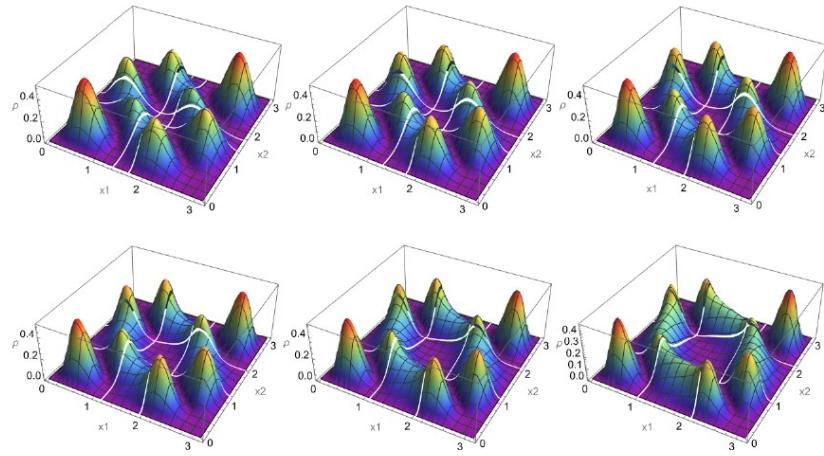


Figura 20: Deslocalización de la densidad de la función de onda simétrica de dos partículas para el estado  $n_1 = 2$ ,  $n_2 = 3$  y  $V = 10$  al cambiar el ancho de la barrera de potencial marcado por las líneas blancas.

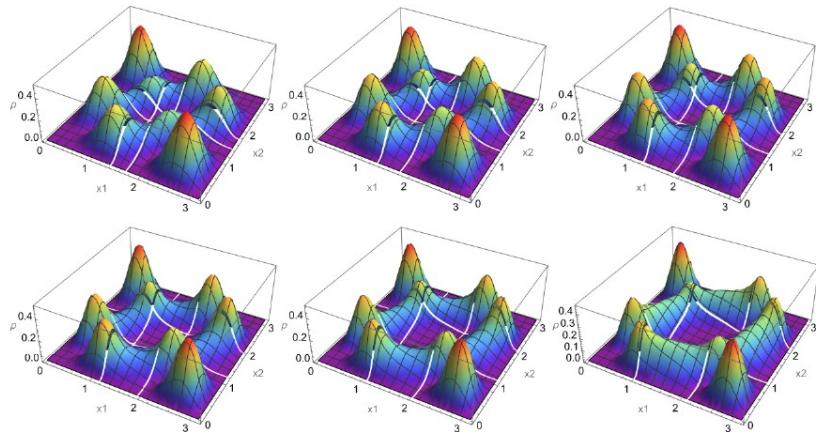


Figura 21: Deslocalización de la densidad de la función de onda antisimétrica de dos partículas para el estado  $n_1 = 2$ ,  $n_2 = 3$  y  $V = 10$  al cambiar el ancho de la barrera de potencial marcado por las líneas blancas.

Ahora hay que observar cómo ocurre la localización de estos estados. En la Fig.22 a la Fig.25 podemos observar la localización de ambas densidades de la función de onda tanto simétrica como antisimétrica para un valor fijo de  $V = 5$  en la Fig.22 y la Fig.23 y para un valor fijo de  $V = 10$  en la Fig.24 y la Fig.25.

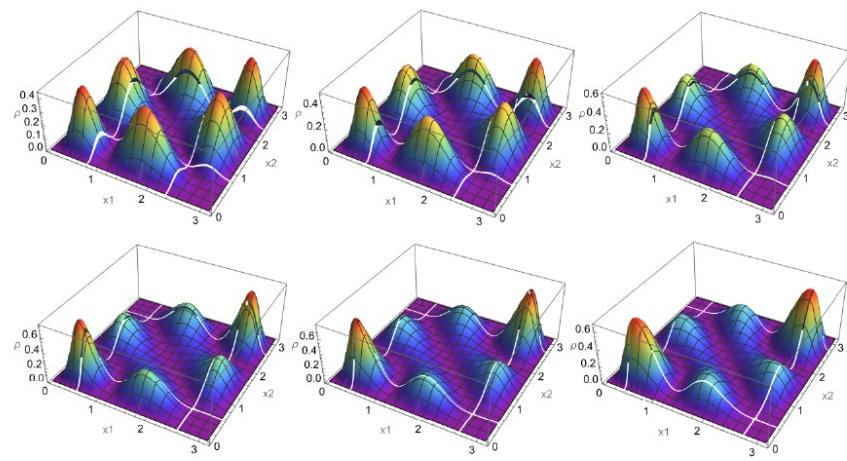


Figura 22: Localización de la densidad de la función de onda simétrica de dos partículas para el estado  $n_1 = 2$ ,  $n_2 = 3$  y  $V = 5$  al cambiar el ancho de la barrera de potencial marcado por las líneas blancas.

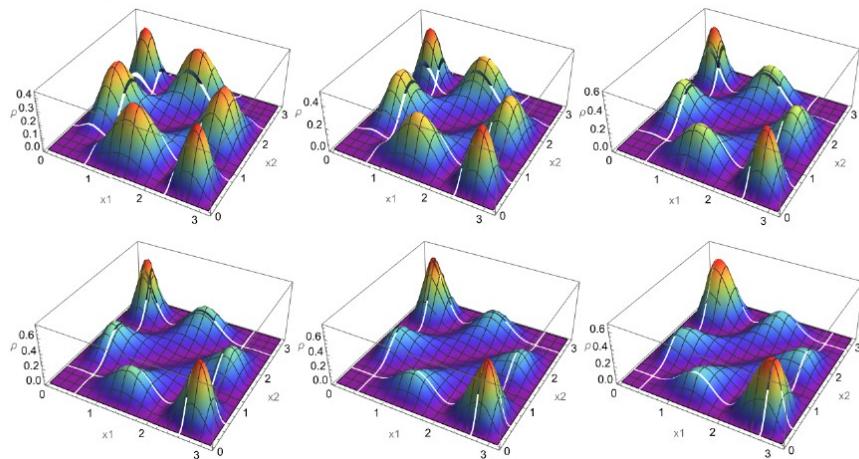


Figura 23: Localización de la densidad de la función de onda antisimétrica de dos partículas para el estado  $n_1 = 2$ ,  $n_2 = 3$  y  $V = 5$  al cambiar el ancho de la barrera de potencial marcado por las líneas blancas.

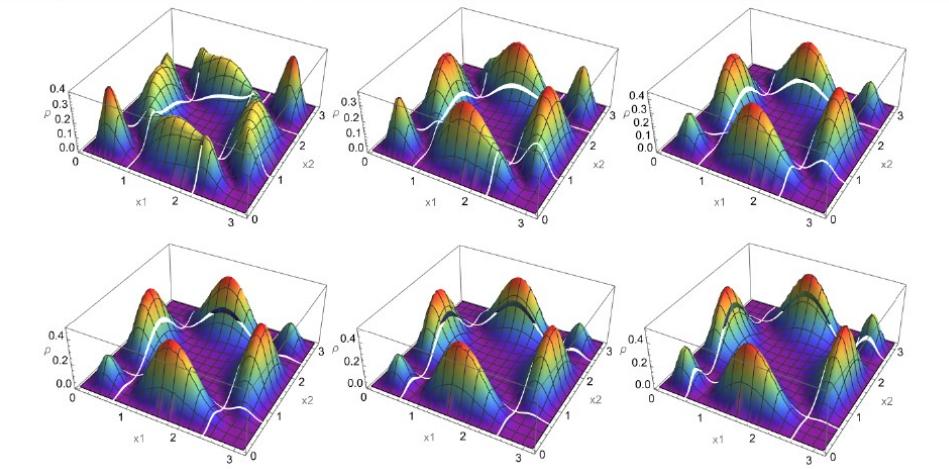


Figura 24: Localización de la densidad de la función onda simétrica de dos partículas para el estado  $n_1 = 2, n_2 = 3$  y  $V = 10$  al cambiar el ancho de la barrera de potencial marcadas por las líneas blancas.

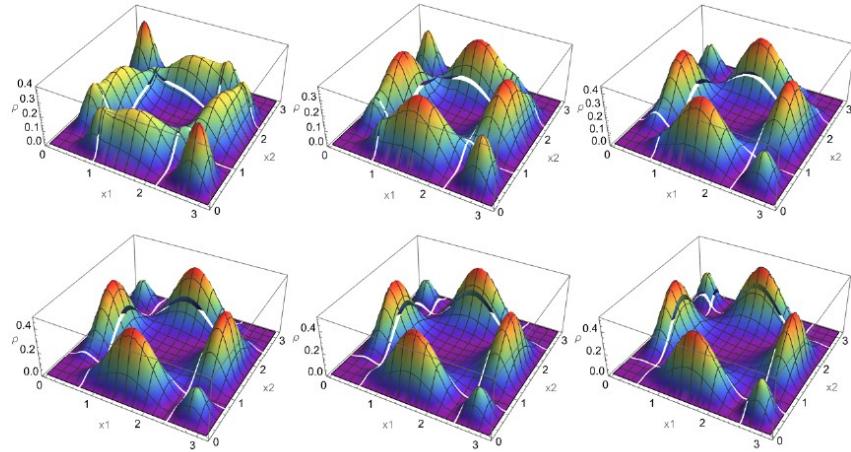


Figura 25: Localización de la densidad de la función de onda antisimétrica de dos partículas para el estado  $n_1 = 2, n_2 = 3$  y  $V = 10$  al cambiar el ancho de la barrera de potencial marcado por las líneas blancas.

En estas figuras (Fig.22 a la Fig.25) se observa que el comportamiento de la densidad de la función de onda, tanto simétrica como antisimétrica es consistente con lo reflejado en la entropía de Shannon, aunque es pertinente aclarar los picos de la entropía, como ya se hizo mención, estos se tomaron 20 puntos para realizar estas gráficas ya que el costo computacional aumentaba muchísimo, de modo que estos picos pueden deberse a la falta de valores para graficar, ya que 20 puntos podrían no ser suficientes para suavizar estas gráficas, de igual forma, estos podrían deberse a errores numéricos generados por *Mathematica*, ya que como se mencionó, el costo computacional aumenta bastante debido a que el cálculo de las entropías de Shannon es bastante costoso, por lo que esto podría inducir errores pequeños en los cálculos llevando a tener picos en la localización o en la deslocalización de la función de onda pudiendo no reflejar el comportamiento en ciertos estados, como puede ser el estado  $n_1 = 2, n_2 = 4$  que se discute a continuación.

Para el estado  $n_1 = 2$ ,  $n_2 = 4$  graficado en la Fig. 26 a la Fig. 29 se observa que el comportamiento es muy similar en ambas entropías, de modo que se puede pensar que son similares las densidades, el problema es que al aumentar el ancho del escalón de potencial y hacerlo tender al caso límite en que  $b = \pi$ , se debe recuperar el sistema de 2 partículas libres no interactuantes en una caja, es decir, los valores de entropía en  $b \sim 0$  y  $b \sim \pi$  deberían ser los mismos o muy cercanos, pero esto no ocurre y posiblemente esto debe a errores numéricos generados por los métodos para calcular la entropía de Shannon como ya se mencionó, si bien la densidad de la función de onda tanto simétrica como antisimétrica no presentan irregularidades, el cálculo de la entropía de Shannon refleja estos errores numéricos. En la Fig. 26 y Fig. 27 están graficadas las densidades de la función de onda para  $V = 1$  y tal como en los casos anteriores el valor del alto del escalón no es el suficiente para mostrar un comportamiento de localización o deslocalización, pero es algo que no se ve reflejado en la primera gráfica de la cuarta columna de la Fig. 10, de modo que podemos decir que existen ciertos errores numéricos asociados al cálculo de la entropía de Shannon. Para casos en que el alto de la barrera de potencial es mayor, es más notable el efecto de localización de las densidades de pares, para esto, en la Fig. 28 y Fig. 29 se grafican las densidades de la función de onda para  $V = 10$  para así poder visualizar el comportamiento ya mencionado.

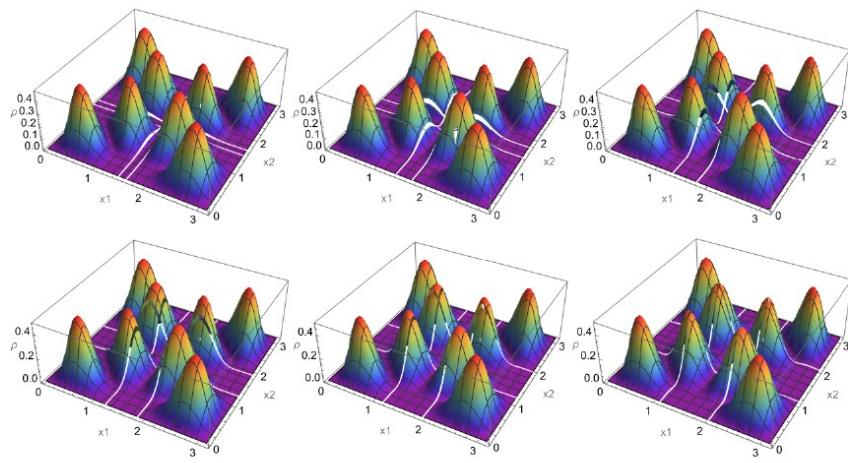


Figura 26: Densidad de la función de onda simétrica de dos partículas para el estado  $n_1 = 2$ ,  $n_2 = 4$  y  $V = 1$  al cambiar el ancho de la barrera de potencial marcado por las líneas blancas.

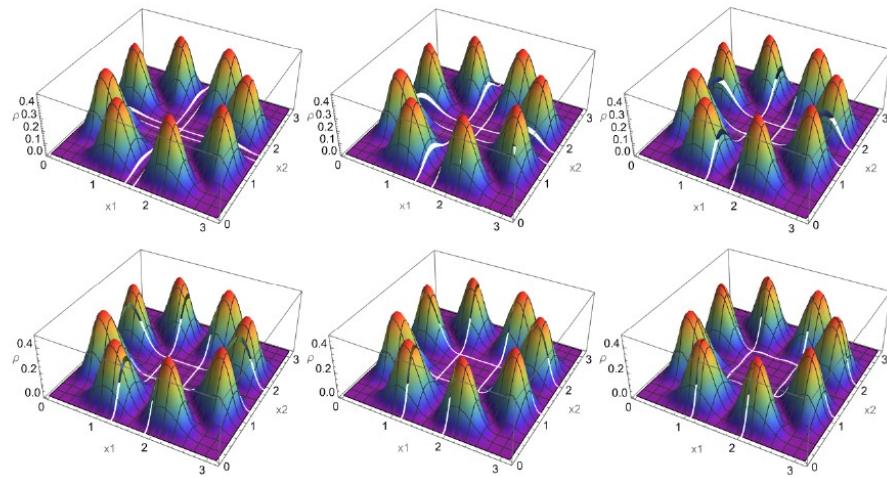


Figura 27: Densidad de la función de onda antisimétrica de dos partículas para el estado  $n_1 = 2$ ,  $n_2 = 4$  y  $V = 1$  al cambiar el ancho de la barrera de potencial marcado por las líneas blancas.

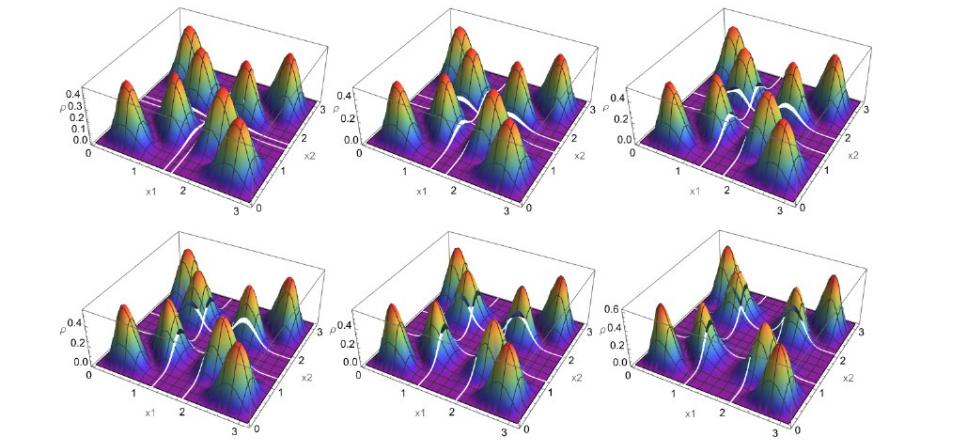


Figura 28: Densidad de la función de onda simétrica de dos partículas para el estado  $n_1 = 2$ ,  $n_2 = 4$  y  $V = 10$  al cambiar el ancho de la barrera de potencial marcado por las líneas blancas.

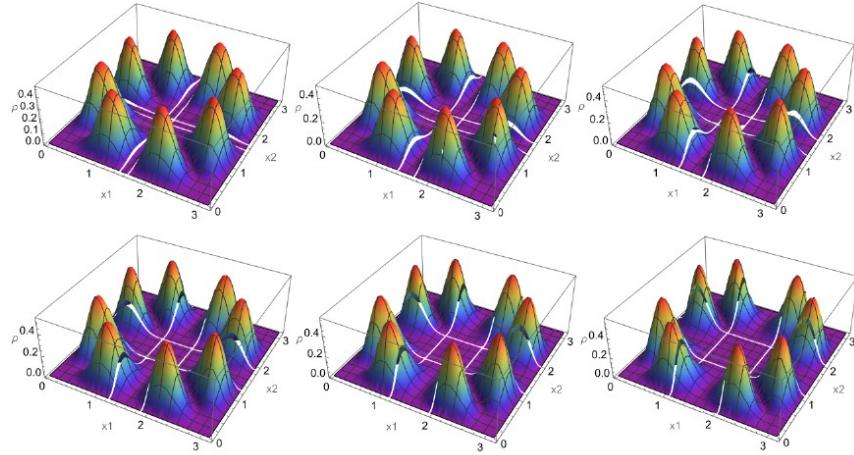


Figura 29: Densidad de la función de onda antisimétrica de dos partículas para el estado  $n_1 = 2$ ,  $n_2 = 4$  y  $V = 10$  al cambiar el ancho de la barrera de potencial marcado por las líneas blancas.

#### 4.1. Densidad reducida

En la Fig. 30 se tiene una gráfica de las entropías de las densidades reducidas para cada una de las funciones de onda y para las variaciones del ancho del potencial.

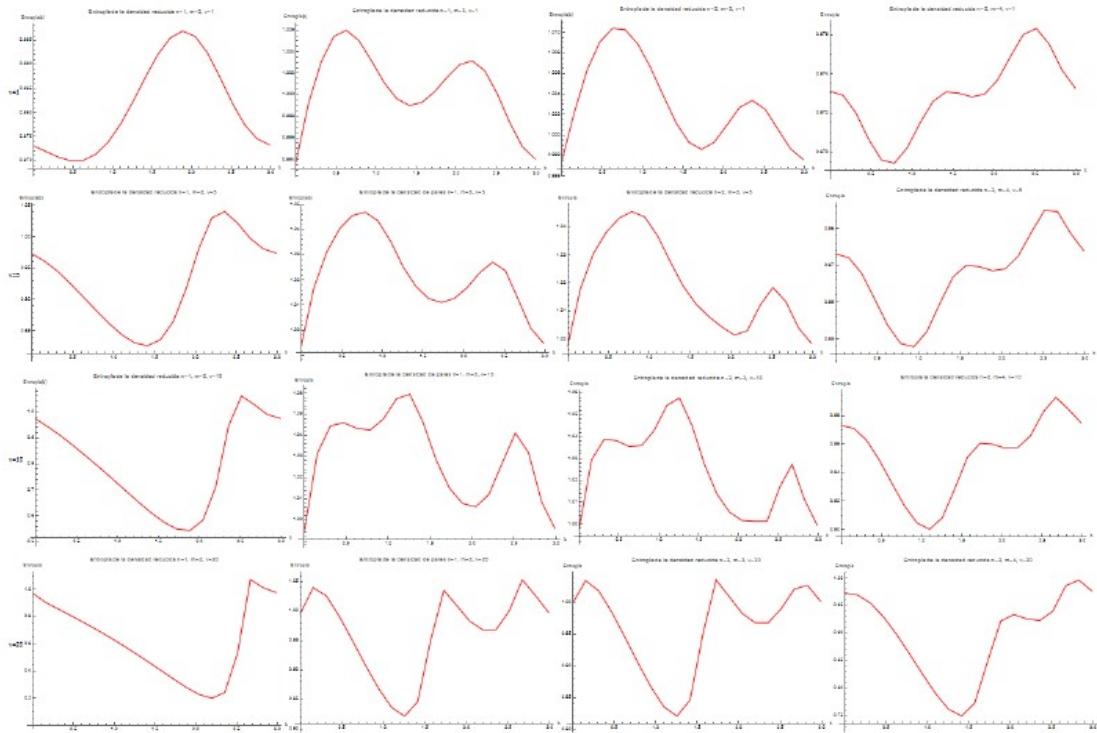


Figura 30: Entropía de las densidades reducidas vs ancho de la barrera, primera columna  $n_1 = 1$  y  $n_2 = 2$ , segunda columna  $n_1 = 1$  y  $n_2 = 3$ , tercera columna  $n_1 = 2$  y  $n_2 = 3$ , cuarta columna  $n_1 = 2$  y  $n_2 = 4$ ,  $V = 1$  en la primera fila,  $V = 5$  en la segunda fila,  $V = 10$  en la tercera fila, y  $V = 20$  en la última fila.

Estas densidades reducidas para funciones simétricas y antisimétricas son iguales debido a las propiedades de ortonormalidad de las funciones de una partícula. Esto solo es posible en sistemas no interactuantes. Si se observa la primera columna el comportamiento es parecido al de las densidades de pares. Una pregunta natural que puede surgir de ver el comportamiento tanto de la densidad de pares como de la densidad reducida, es si comparten los máximos y los mínimos, para esto hay que ver las gráficas para cada uno de los casos.

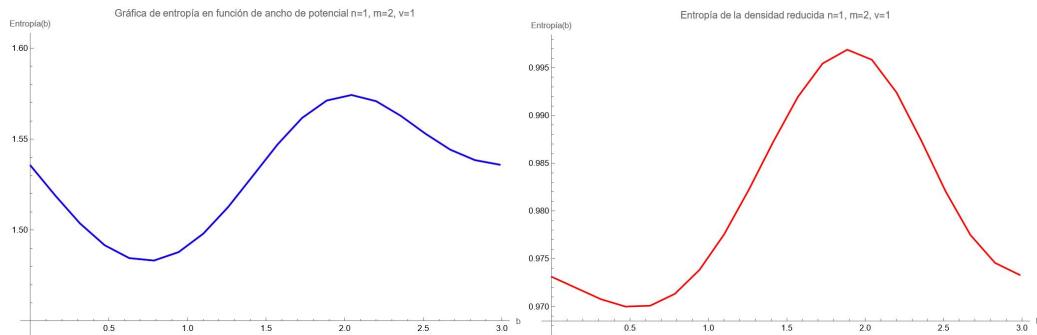


Figura 31: Entropía de la densidad de pares (curva azul) y de la densidad reducida (curva roja)  $n_1 = 1, n_2 = 2$  y  $V = 1$ .

Para el caso presentado en la Fig.31, parece ser que comparten solo el máximo de la curva,

y el mínimo en el caso de la densidad de pares está desplazado a un valor ligeramente mayor de  $b$ . Pasando al caso para  $V = 5$  en la Fig. 32, es notable que tanto los máximos como los mínimos de la función entropía tanto para las densidades de pares como la densidad reducida, son los mismos. Este comportamiento se repite para los demás valores del alto del escalón de potencial (Fig. 33 y Fig. 34).

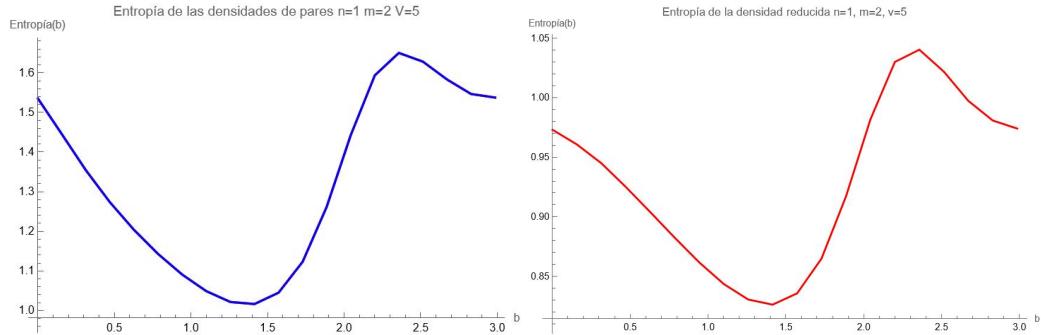


Figura 32: Entropía de la densidad de pares (curva azul) y de la densidad reducida (curva roja)  $n_1 = 1, n_2 = 2$  y  $V = 5$ .

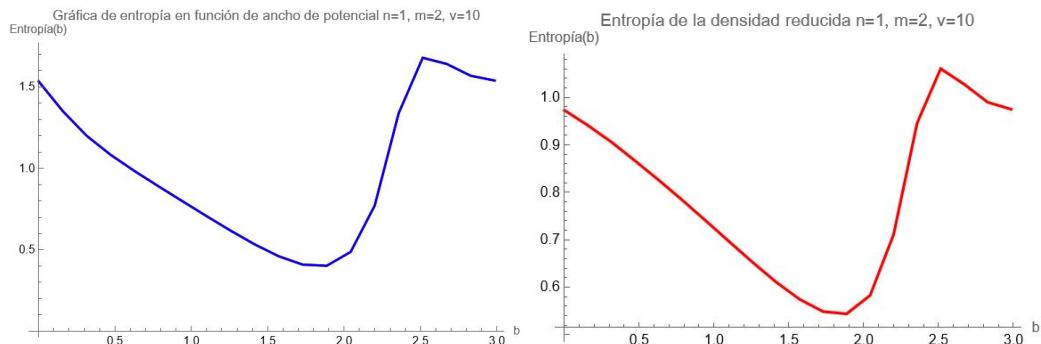


Figura 33: Entropía de la densidad de pares (curva azul) y de la densidad reducida (curva roja)  $n_1 = 1, n_2 = 2$  y  $V = 10$ .

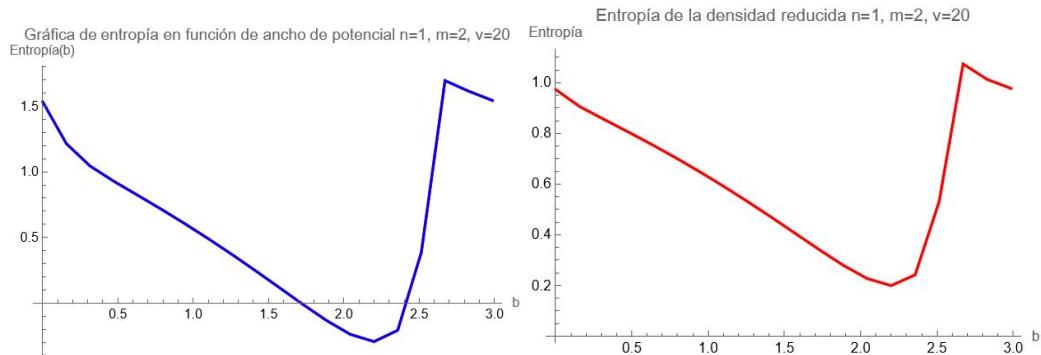


Figura 34: Entropía de la densidad de pares (curva azul) y de la densidad reducida (curva roja) del estado  $n_1 = 1, n_2 = 2$  y  $V = 20$ .

Para el estado  $n_1 = 1, n_2 = 3$ , a simple vista parece ser que el comportamiento de las densidades de pares difiere de la densidad reducida (Fig. 35), pero al aumentar la escala de visualización, la densidad de pares antisimétrica tiene comportamiento similar a la densidad reducida, que si bien no comparte los máximos ni los mínimos, estos tienden a ocurrir en valores similares de  $b$ , Fig. 36. En la Fig. 37 se observa la localización de la función de onda al rededor de valores de  $0.78 \leq b \leq 1.73$ .

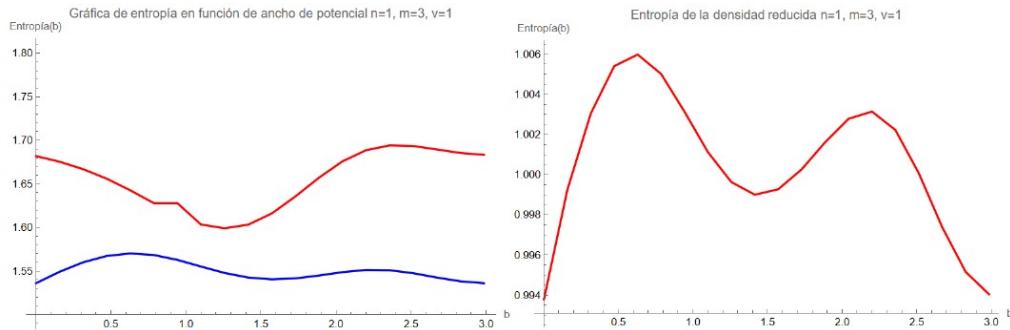


Figura 35: Entropía de la densidad de pares (curva azul) y de la densidad reducida (curva roja) del estado  $n_1 = 1, n_2 = 3$  y  $V = 1$ .

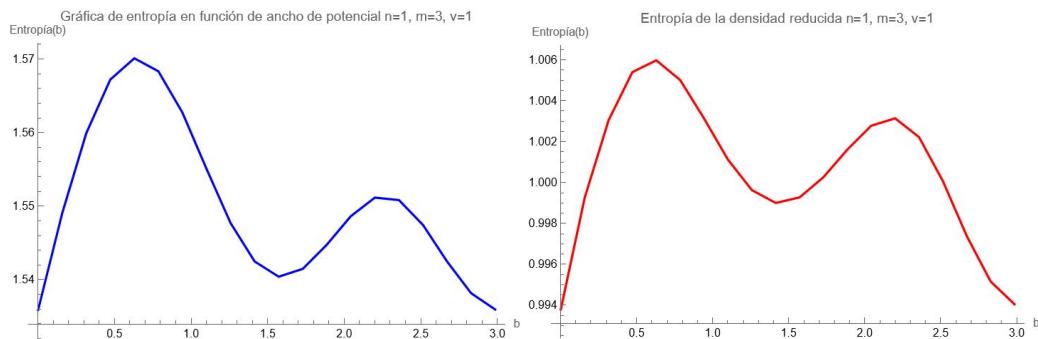


Figura 36: Entropía de la densidad de pares anti simétrica (curva azul) y de la densidad reducida (curva roja) del estado  $n_1 = 1, n_2 = 3$  y  $V = 1$ .

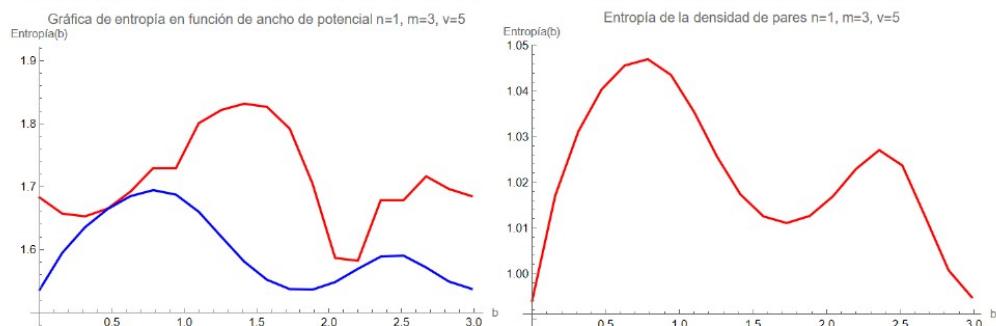


Figura 37: Entropía de la densidad de pares (curva azul) y de la densidad reducida (curva roja) del estado  $n_1 = 1, n_2 = 3$  y  $V = 5$ .

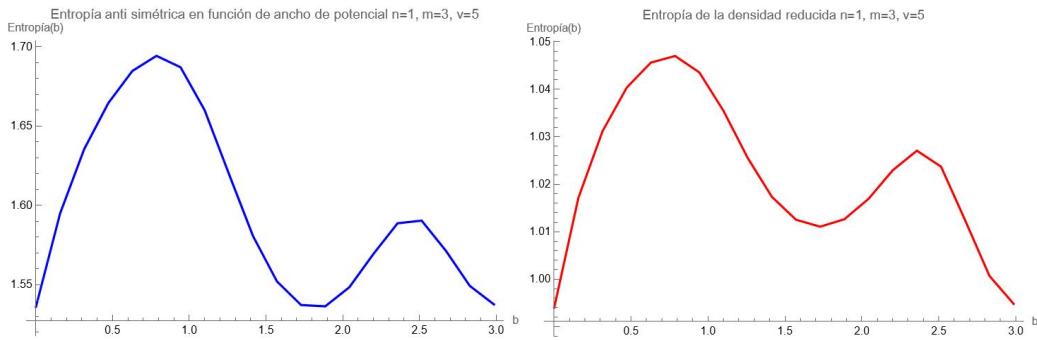


Figura 38: Entropía de la densidad de pares anti simétrica (curva azul) y de la densidad reducida (curva roja) del estado  $n_1 = 1, n_2 = 3$  y  $V = 5$ .

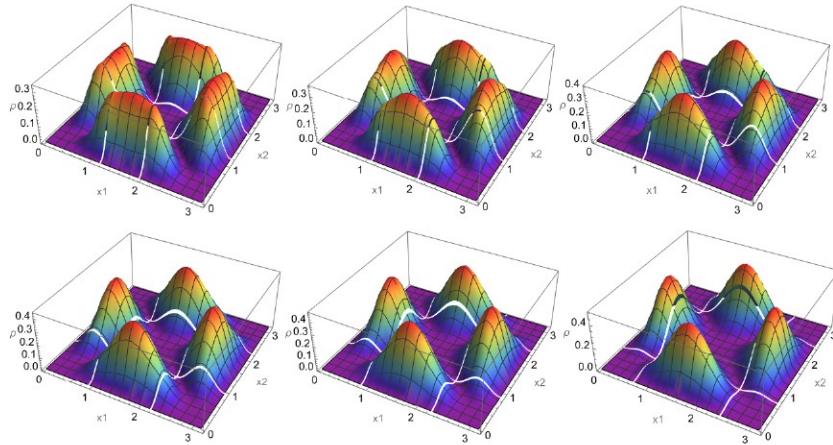


Figura 39: Localización de la densidad de onda anti simétrica de dos partículas para el estado  $n_1 = 2, n_2 = 3$  y  $V = 5$  para valores  $0.78 \leq b \leq 1.73$ .

Se observa que el comportamiento de la función de onda es consistente con lo reflejado en la entropía de Shannon, para casos en que  $V = 10, V = 20$  pasa algo similar, el comportamiento de la entropía reducida es similar al observado para la densidad de pares antisimétrica.

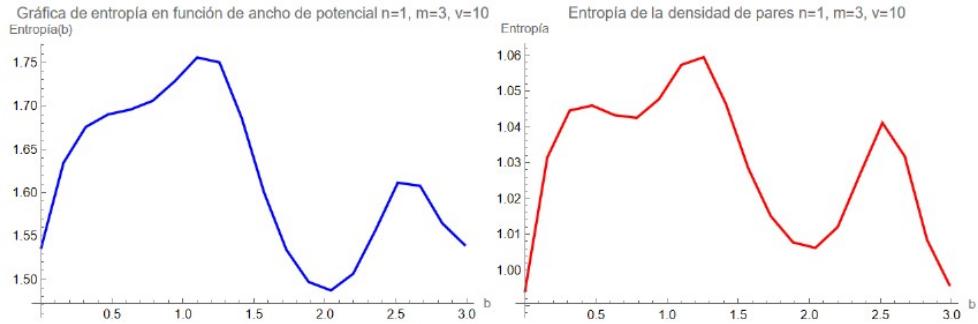


Figura 40: Entropía de la densidad de pares anti simétrica (curva azul) y de la densidad reducida (curva roja) del estado  $n_1 = 1, n_2 = 3$  y  $V = 10$ .

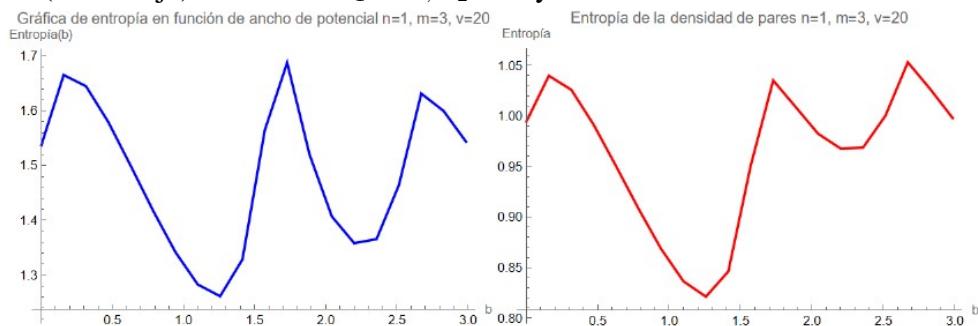


Figura 41: Entropía de la densidad de pares anti simétrica (curva azul) y de la densidad reducida (curva roja) del estado  $n_1 = 1, n_2 = 3$  y  $V = 20$ .

Pasando al siguiente estado  $n_1 = 2, n_2 = 3$  cuyas entropías se encuentran en la Fig.42 a la Fig.45 se observa lo mismo que en el caso  $n_1 = 1, n_2 = 2$ , es decir, el comportamiento de la entropía de la densidad de pares tanto simétrica como antisimétrica es análogo al comportamiento de la densidad reducida, esto se refleja en las siguientes gráficas, además los máximos y mínimos se encuentran en los mismos puntos. **Es necesario recordar que los picos presentados en las gráficas están inducidos por la cantidad de puntos tomados para hacer el análisis.**

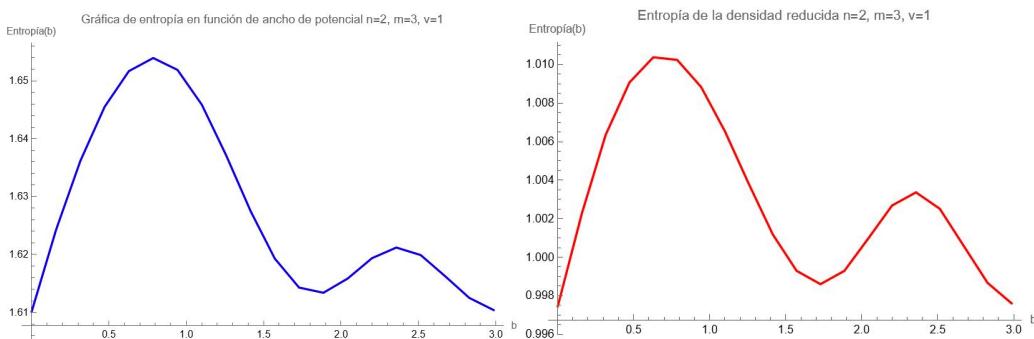
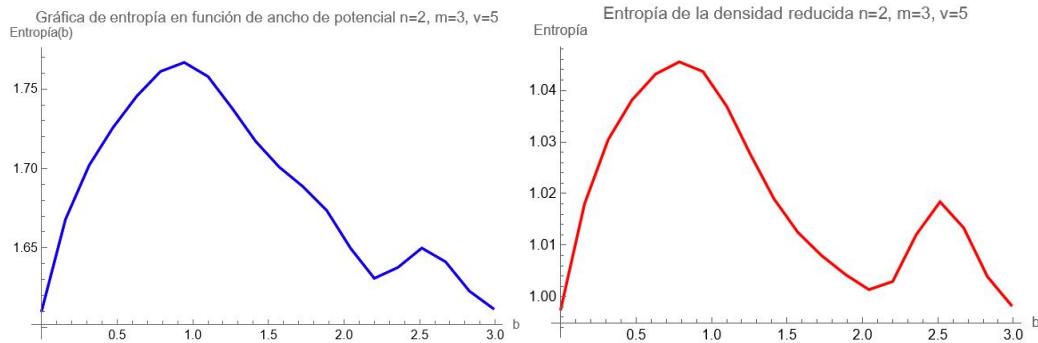
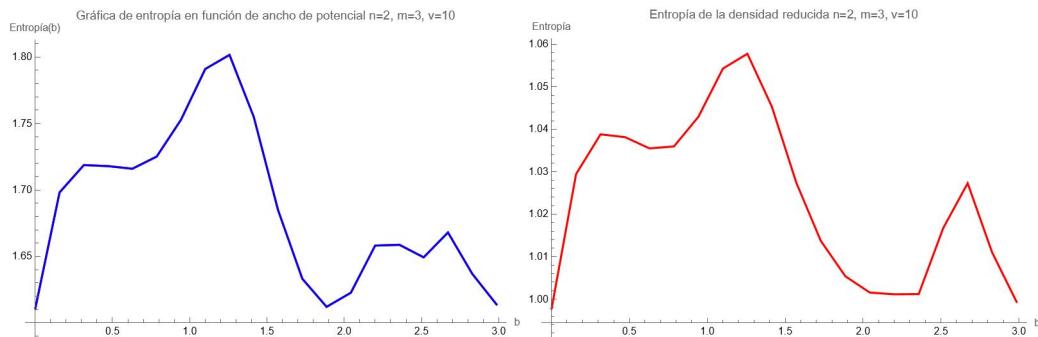
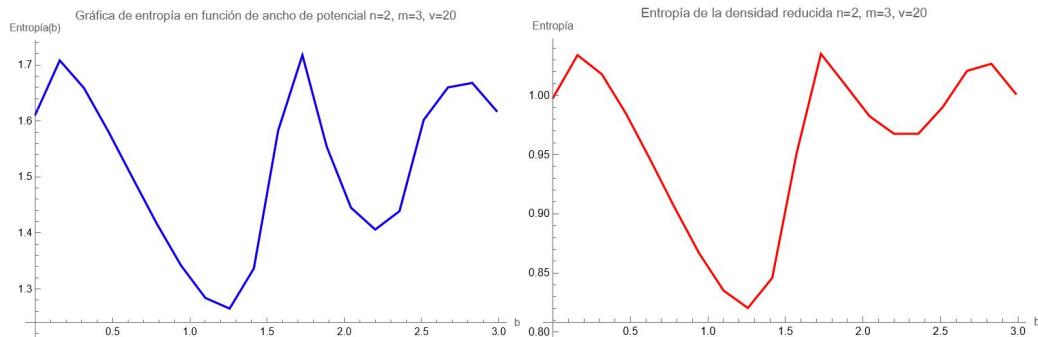


Figura 42: Entropía de la densidad de pares y reducida del estado  $n_1 = 2, n_2 = 3$  y  $V = 1$ .

Figura 43: Entropía de la densidad de pares y reducida del estado  $n_1 = 2, n_2 = 3$  y  $V = 5$ .Figura 44: Entropía de la densidad de pares y reducida del estado  $n_1 = 2, n_2 = 3$  y  $V = 10$ .Figura 45: Entropía de la densidad de pares y reducida del estado  $n_1 = 2, n_2 = 3$  y  $V = 20$ .

Para el estado  $n_1 = 2, n_2 = 4$  como ya se mencionó, existen ciertos problemas numéricos derivados del cálculo de la entropía en los últimos valores de  $b$ , de modo que las siguientes gráficas presentadas de la entropía de pares simétrica y antisimétrica están recortadas (Fig. 46 a la Fig. 49) de modo que no se muestran los problemas numéricos asociados a este estado y a esos respectivos valores del ancho del escalón de potencial, pero el comportamiento de estas densidades es consistente en ciertas regiones, lo cual se puede comprobar observando las densidades de pares de la función de onda y su respectivo comportamiento. Se observa en la Fig. 50 a la Fig. 57 que la localización comienza a ser más evidente

para valores de  $V$  cada vez mayores, para valores menores parece estar sucediendo que la energía asociada a ese estado es mayor que el alto del escalón de potencial, generando que sea menos evidente la localización.

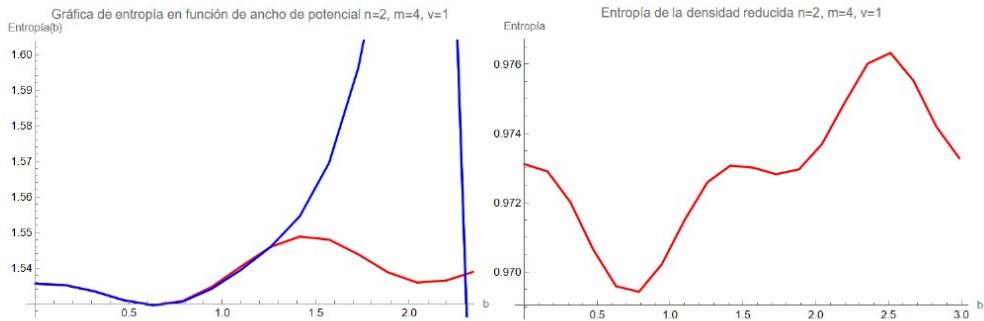


Figura 46: Entropía de la densidad de pares y reducida del estado  $n_1 = 2, n_2 = 4$  y  $V = 1$ .

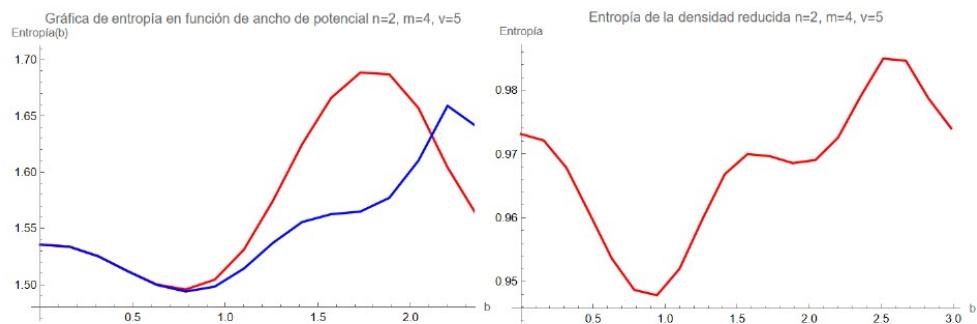


Figura 47: Entropía de la densidad de pares antisimétrica y reducida del estado  $n_1 = 2, n_2 = 4$  y  $V = 5$ .

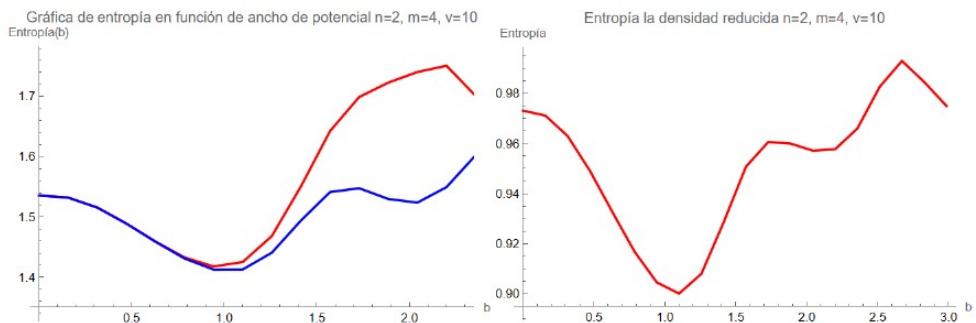


Figura 48: Entropía de la densidad de pares y reducida del estado  $n_1 = 2, n_2 = 4$  y  $V = 10$ .

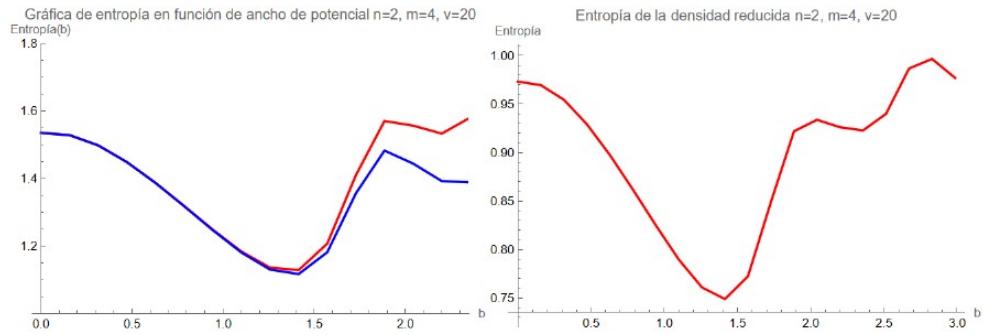


Figura 49: Entropía de la densidad de pares antisimétrica y reducida del estado  $n_1 = 2, n_2 = 4$  y  $V = 20$ .

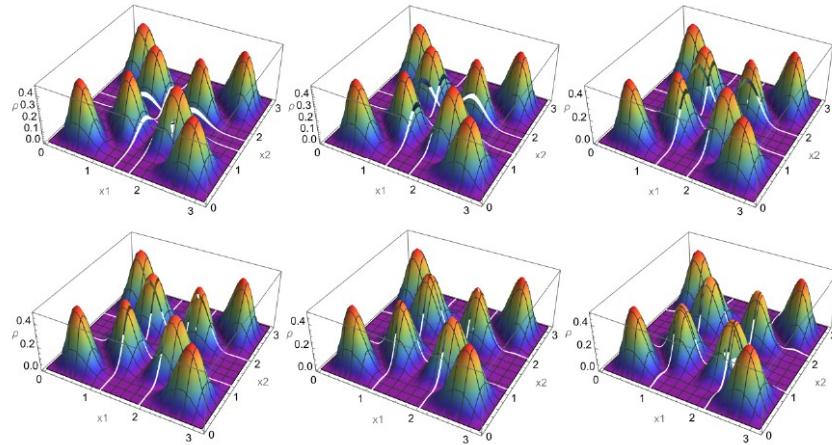


Figura 50: Densidad de onda simétrica de dos partículas para el estado  $n_1 = 2, n_2 = 4$  y  $V = 1$ .

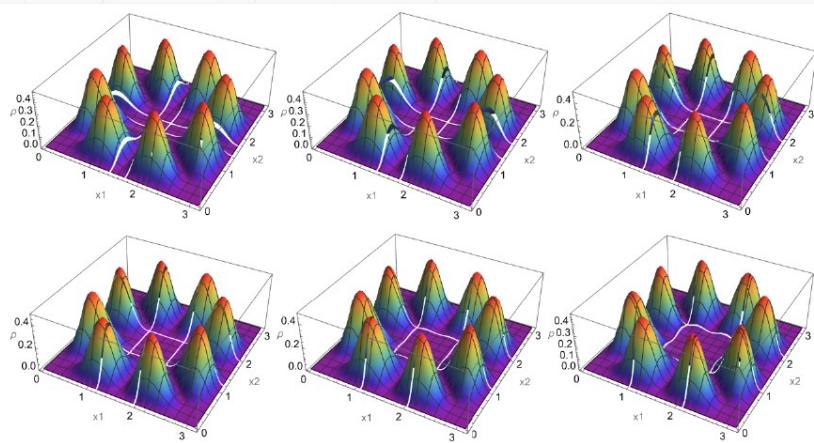


Figura 51: Densidad de onda antisimétrica de dos partículas para el estado  $n_1 = 2, n_2 = 4$  y  $V = 1$ .

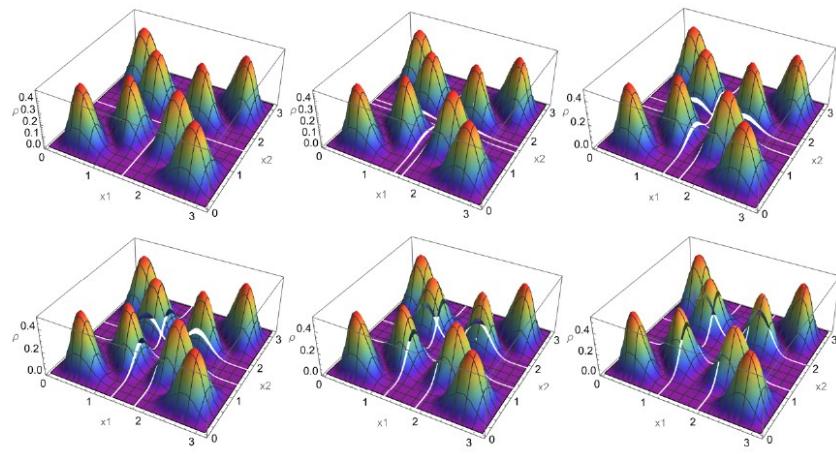


Figura 52: Densidad de onda simétrica de dos partículas para el estado  $n_1 = 2$ ,  $n_2 = 4$  y  $V = 5$ .

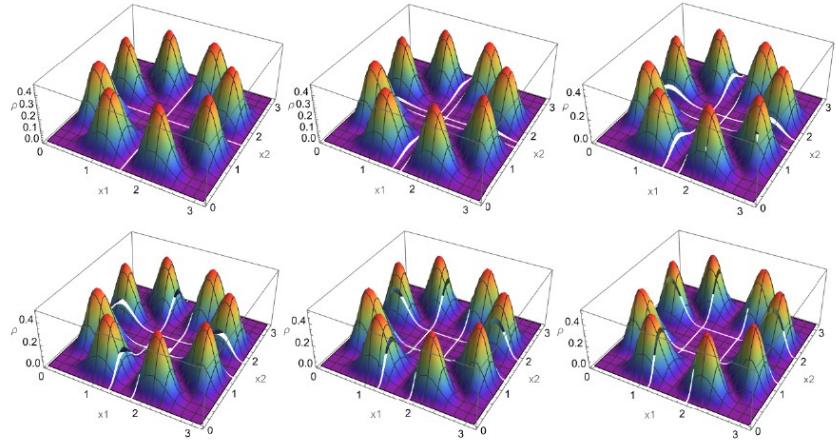


Figura 53: Densidad de onda antisimétrica de dos partículas para el estado  $n_1 = 2$ ,  $n_2 = 4$  y  $V = 5$ .

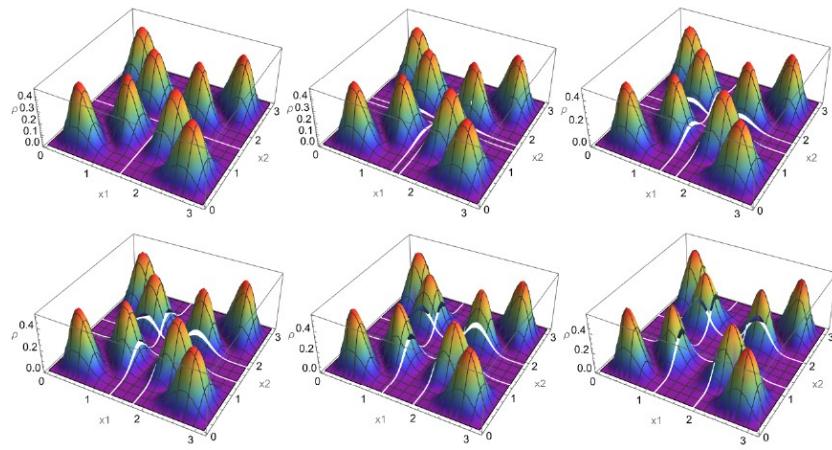


Figura 54: Densidad de onda simétrica de dos partículas para el estado  $n_1 = 2$ ,  $n_2 = 4$  y  $V = 10$ .

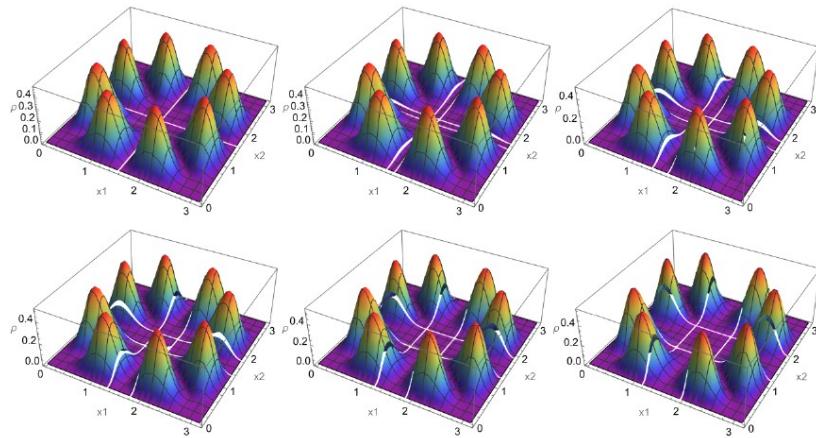


Figura 55: Densidad de onda antisimétrica de dos partículas para el estado  $n_1 = 2$ ,  $n_2 = 4$  y  $V = 10$ .

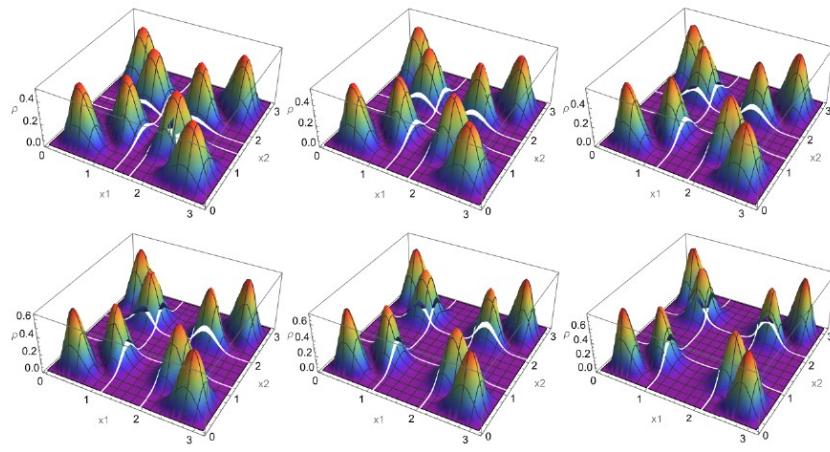


Figura 56: Densidad de onda simétrica de dos partículas para el estado  $n_1 = 2, n_2 = 4$  y  $V = 20$ .

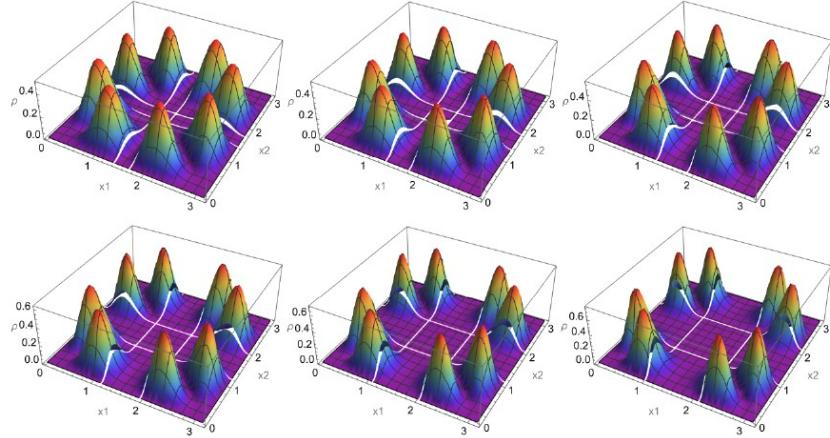


Figura 57: Densidad de onda antisimétrica de dos partículas para el estado  $n_1 = 2, n_2 = 4$  y  $V = 20$ .

## 4.2. Varianza

Otra medida de deslocalización de una densidad de probabilidad, es la varianza, y dado que se busca comparar las medidas de teoría de la información con otras medidas estadísticas es necesario calcular la varianza y preguntar ¿qué nos dice la varianza para cada uno de estos casos? En la Fig. 58 se pueden observar las varianzas para cada estado.

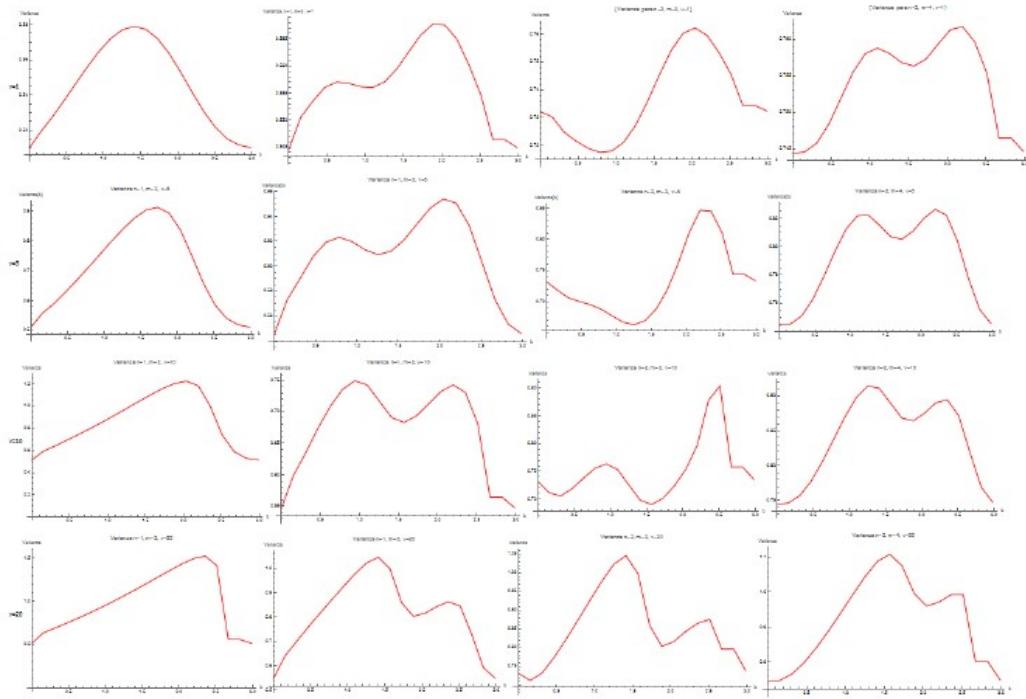


Figura 58: Varianza vs ancho de la barrera, curva roja: densidad simétrica, curva azul: densidad antisimétrica, primera columna  $n_1 = 1$  y  $n_2 = 2$ , segunda columna  $n_1 = 1$  y  $n_2 = 3$ , tercera columna  $n_1 = 2$  y  $n_2 = 3$ , cuarta columna  $n_1 = 2$  y  $n_2 = 4$ ,  $V = 1$  en la primera fila,  $V = 5$  en la segunda fila,  $V = 10$  en la tercera fila, y  $V = 20$  en la última fila.

Viendo la primera columna de la Fig. 58 la varianza muestra que la densidad se deslocaliza conforme aumenta  $b$ , pero ¿es esto cierto?, no necesariamente una forma de comprobar esto es viendo la Fig. 10, en esta figura se grafican las entropías de pares de varios estados de la función de onda, al observar la primera columna asociada al estado  $n_1 = 1$  y  $n_2 = 2$  se observa que conforme aumenta el valor de  $b$  la densidad se localiza y cuando  $b$  alcanza un valor cercano a  $\pi$  se deslocaliza la densidad, y la varianza está diciendo lo contrario. La segunda columna de la Fig. 58 parece estar indicando que la densidad se deslocaliza, para los primeros valores de  $b$ , pero esto no necesariamente es cierto ya que si bien en la densidad antisimétrica en el estado  $n_1 = 1, n_2 = 3$  se observa una deslocalización, esto no es cierto para la densidad simétrica (ver Fig. 10). Ahora si se observa la Fig. 30 de la entropía de la densidad reducida, se puede notar que esta capta mejor el comportamiento de la densidad de la función de onda a pesar de reflejar un comportamiento similar solamente para la densidad antisimétrica.

### 4.3. Información mutua

Como ya se mencionó, la información mutua, es una medida de la correlación entre dos variables. En la Fig. 59 se observa que conforme  $b$  aumenta a partir de cero en el caso  $n_1 = 1$  y  $n_2 = 2$  la correlación entre las dos densidades es la misma tal y como se ha observado en las entropías de pares, este valor de información mutua crece rápidamente,

y al alcanzar un máximo disminuye rápidamente, pero conforme el valor de  $V$  aumenta parece que el valor máximo se mantiene constante en mayor parte del intervalo. Para el  $n_1 = 1$  y  $n_2 = 3$ , este valor sigue siendo positivo pero el comportamiento es distinto, si bien hay valores de  $b$  en los que la información mutua tiene el mismo valor, en términos generales la densidad anti simétrica posee mayor correlación. Observando la segunda columna de la Fig. 59, la correlación de la función anti simétrica disminuye en tanto que la correlación de la función simétrica aumenta. La función antisimétrica alcanza un mínimo y comienza a aumentar hasta llegar a un máximo, indicando un aumento en la correlación y disminuyendo hasta tomar un valor similar al obtenido para  $b = 0$ , y como ya se mencionó en secciones anteriores, esto es consistente con recuperar el sistema de dos partículas confinadas en una caja, y parece que las posiciones del mínimo y el máximo se desplazan hacia  $b$  cada vez mayores conforme  $V$  crece. De igual modo se puede ver que el comportamiento de la densidad simétrica es más complicado aumentando el número de máximos y mínimos conforme  $V$  aumenta. Para el estado  $n_1 = 2$  y  $n_2 = 4$  como ya se mencionó se tienen ciertos problemas numéricos los cuales hacen que el rango de visualización se haya tenido que recortar, pero en términos generales se tiene un comportamiento en el que la correlación es igual para ambas densidades en cierta región, pero aumenta la correlación de la función anti simétrica a partir de cierto valor de  $b$  que es diferente para todos los valores de  $V$ .

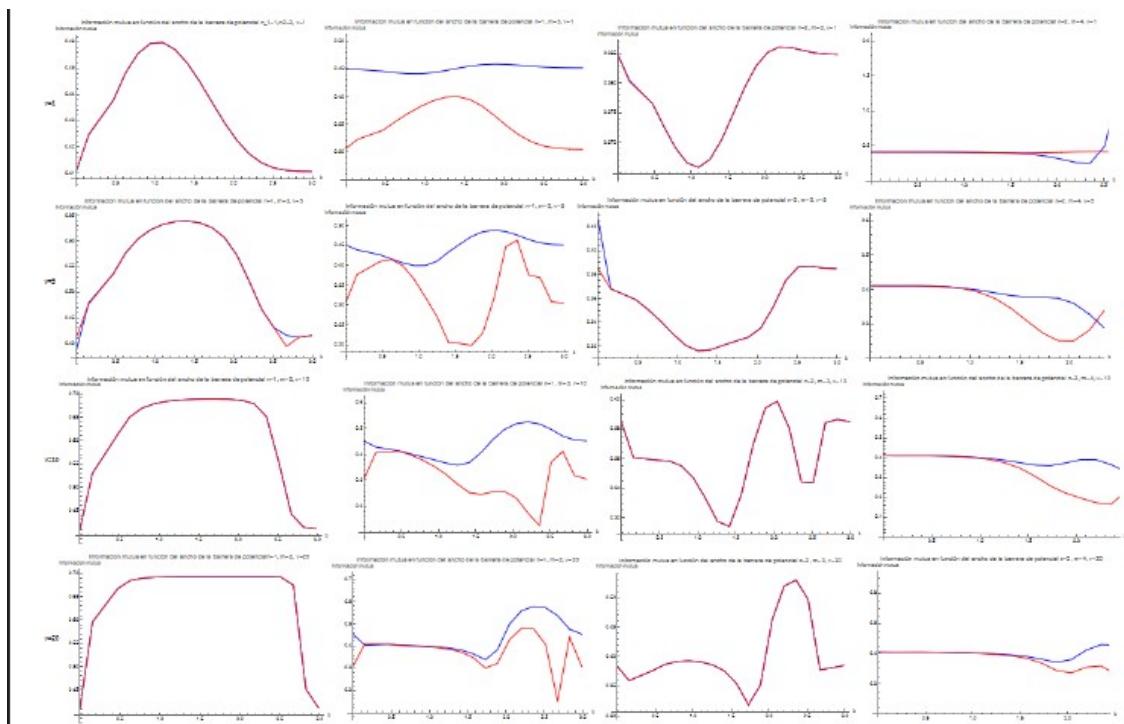


Figura 59: Información mutua vs ancho de la barrera, curva roja: densidad simétrica, curva azul: densidad antisimétrica, primera columna  $n_1 = 1$  y  $n_2 = 2$ , segunda columna  $n_1 = 1$  y  $n_2 = 3$ , tercera columna  $n_1 = 2$  y  $n_2 = 3$ , cuarta columna  $n_1 = 2$  y  $n_2 = 4$ ,  $V = 1$  en la primera fila,  $V = 5$  en la segunda fila,  $V = 10$  en la tercera fila, y  $V = 20$  en la última fila.

## 4.4. Coeficiente de correlación

Una vez dicho esto, una pregunta natural que surge de observar el comportamiento de la información mutua es ¿cómo se comporta el coeficiente de correlación para este sistema? ¿tiene un comportamiento similar a la información mutua? En la Fig. 60 se encuentran graficados los coeficientes de correlación para los distintos estados. Se observa en la Fig. 60 que en el caso de los estados  $n_1 = 1, n_2 = 2$  y  $n_1 = 1, n_2 = 3$  el valor absoluto del coeficiente de correlación es el mismo, pero el comportamiento de forma general difiere a la información mutua. En el caso de los estados  $n_1 = 2, n_2 = 3$  y  $n_1 = 2, n_2 = 4$  la correlación lineal calculada es cero para estos estados, pero no necesariamente implica que no haya correlación, ya que la información mutua como medida de correlación parece detectar mejor esta que la correlación lineal.

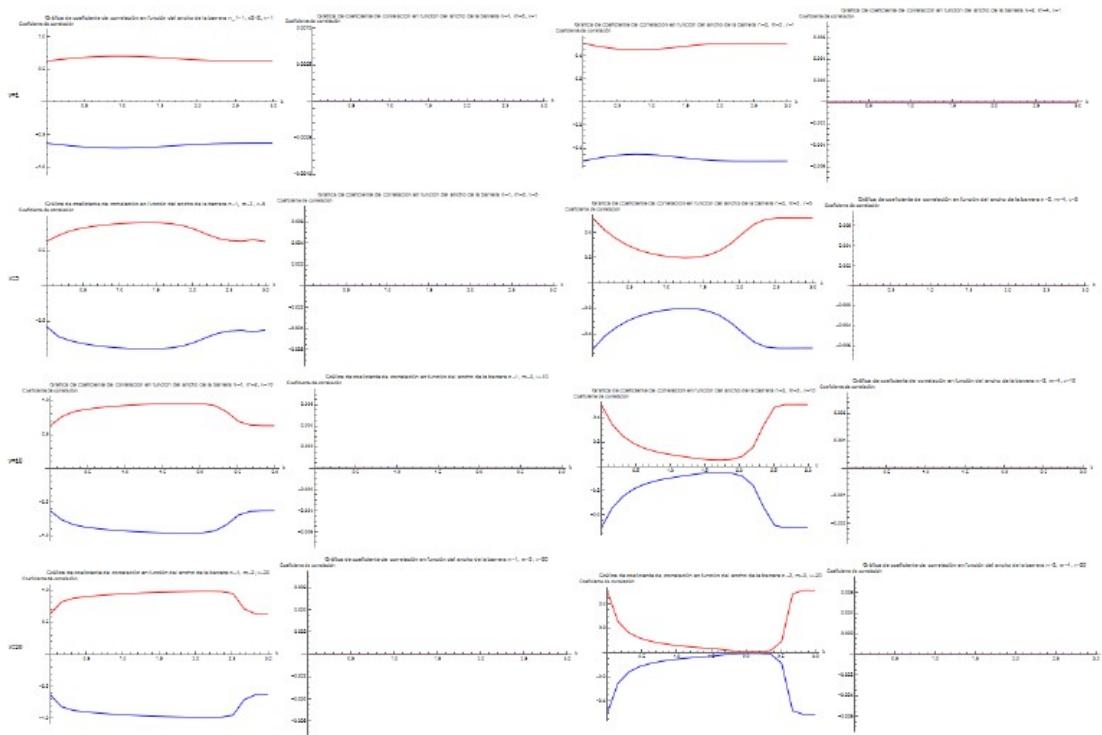


Figura 60: Coeficiente de correlación lineal vs ancho de la barrera, curva roja: densidad simétrica, curva azul: densidad antisimétrica, primera columna  $n_1 = 1$  y  $n_2 = 2$ , segunda columna  $n_1 = 1$  y  $n_2 = 3$ , tercera columna  $n_1 = 2$  y  $n_2 = 3$ , cuarta columna  $n_1 = 2$  y  $n_2 = 4$ ,  $V = 1$  en la primera fila,  $V = 5$  en la segunda fila,  $V = 10$  en la tercera fila, y  $V = 20$  en la última fila.

## 5. Variaciones del alto del potencial

En la Fig. 61 se tienen las entropías de Shannon para las variaciones del alto del escalón de potencial.

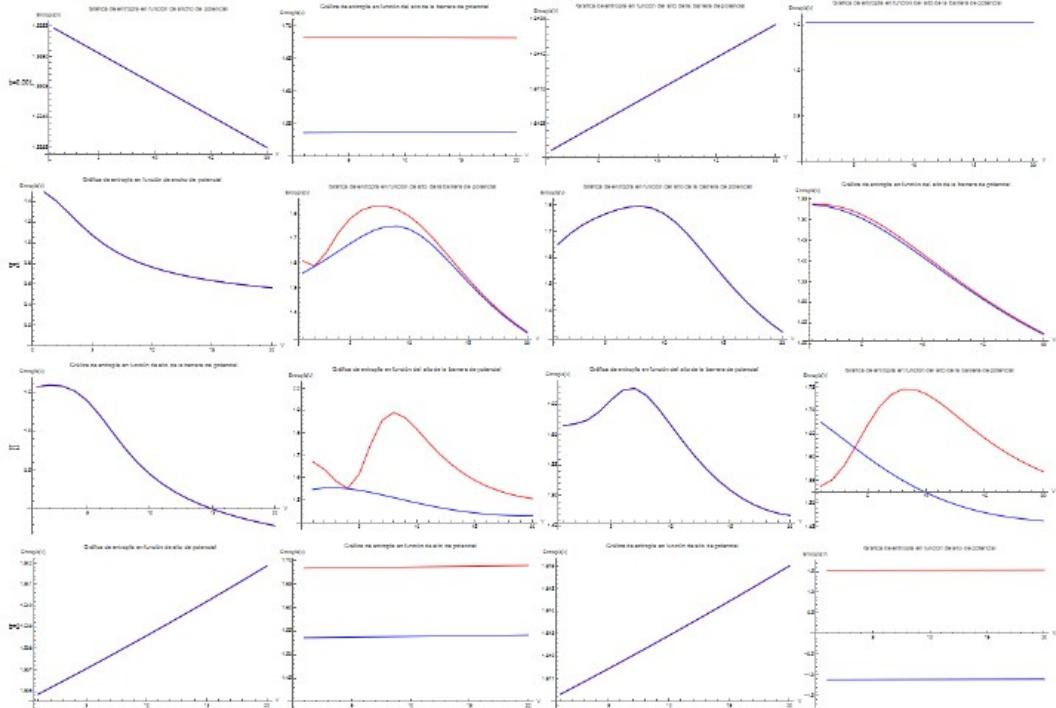


Figura 61: Entropía de Shannon vs alto de la barrera, curva roja: densidad simétrica, curva azul: densidad antisimétrica, primera columna  $n_1 = 1$  y  $n_2 = 2$ , segunda columna  $n_1 = 1$  y  $n_2 = 3$ , tercera columna  $n_1 = 2$  y  $n_2 = 3$ , cuarta columna  $n_1 = 2$  y  $n_2 = 4$ ,  $b = 0.001$  en la primera fila,  $b = 1$  en la segunda fila,  $b = 2$  en la tercera fila, y  $b = 3$  en la última fila.

A medida que se incrementa la altura del escalón de potencial, se observa un comportamiento diferenciado en la entropía de las densidades de pares, dependiendo del valor del parámetro  $b$  y del par de estados considerados. Para el caso  $n_1 = 1$  y  $n_2 = 2$ , se aprecia que, con valores de  $b = 0.001$ , la entropía tiende a disminuir conforme aumenta la altura del potencial pero esta disminuye a partir de valores cercanos a  $10^{-3}$ , lo que sugiere una tendencia a la localización de las densidades pero casi imperceptible (Fig. 62). En contraste, cuando  $b$  aumenta a 1 o a 2 la disminución de entropía es más evidente, haciendo notorio el efecto de localización, y si  $b$  se aproxima a  $\pi$  (por ejemplo,  $b = 3$ ), la entropía crece, indicando una mayor deslocalización, pero en el mismo rango de valores que la entropía para el menor valor de  $b$ .

Para los estados en la primera y tercera columna de la Fig. 61 ( $n_1 = 1$  y  $n_2 = 2$  y  $n_1 = 2$  y  $n_2 = 3$ ) ambas densidades presentan un comportamiento igual ante variaciones del alto del escalón, manteniendo valores de entropía equivalentes, aunque no necesariamente evoluciones idénticas. Esta similitud sugiere que las densidades de pares en estos casos

responden de manera análoga a cambios en el potencial, posiblemente debido a la cercanía energética de los estados implicados.

En los casos en la segunda y cuarta columna de la Fig. 61 ( $n_1 = 1$  y  $n_2 = 3$  y  $n_1 = 2$  y  $n_2 = 4$ ), el comportamiento de la entropía difiere significativamente entre las densidades simétrica y antisimétrica. Para  $b = 0.001$ , ambas densidades presentan una entropía creciente a partir del orden de  $10^{-3}$ , aunque la simétrica (asociada a la línea roja en las gráficas) se encuentra más deslocalizada. Para  $b = 1$  y  $b = 2$ , se observa un aumento en la entropía, es decir, una deslocalización hasta aproximadamente  $V = 8$ , punto a partir del cual la densidad simétrica comienza a localizarse. En el caso antisimétrico, para  $b = 1$  la localización ocurre en el mismo intervalo de  $v$ , mientras que para  $b = 2$  se anticipa alrededor de  $v = 4$ .

En la tercera columna de la Fig. 61  $n_1 = 2$  y  $n_2 = 3$ , se repite el patrón observado en  $n_1 = 1$  y  $n_2 = 2$ : para  $b = 0.001$  y  $b = 3$ , la entropía tiende a aumentar con el alto del potencial, mientras que para  $b = 1$  y  $b = 2$  se identifica una fase inicial de deslocalización seguida de una localización hacia  $V = 8$ . Este cambio puede deberse a que, una vez que el potencial supera la energía del estado, las funciones de onda tienden a confinarse más, reflejándose en una disminución de la entropía.

Por último, en el estado  $n_1 = 2$  y  $n_2 = 4$  en la cuarta columna de la Fig. 61 la entropía se mantiene constante para  $b = 0.001$ , con valores idénticos en ambas densidades. Para  $b = 1$ , ambas densidades aumentan su entropía con el potencial, pero la simétrica se deslocaliza en mayor medida. En  $b = 2$ , la densidad simétrica comienza más localizada para bajos valores de  $v$ , pero se deslocaliza conforme este crece, al igual que la antisimétrica. En el caso de  $b = 3$ , ambas densidades muestran nuevamente un comportamiento constante. ¿Son estas observaciones consistentes con la densidad de la función de onda para el respectivo estado?

Para el estado  $n_1 = 1$ ,  $n_2 = 2$  la variación en la entropía es muy pequeña como ya se hizo mención, se puede visualizar la densidad para comprobar esto.

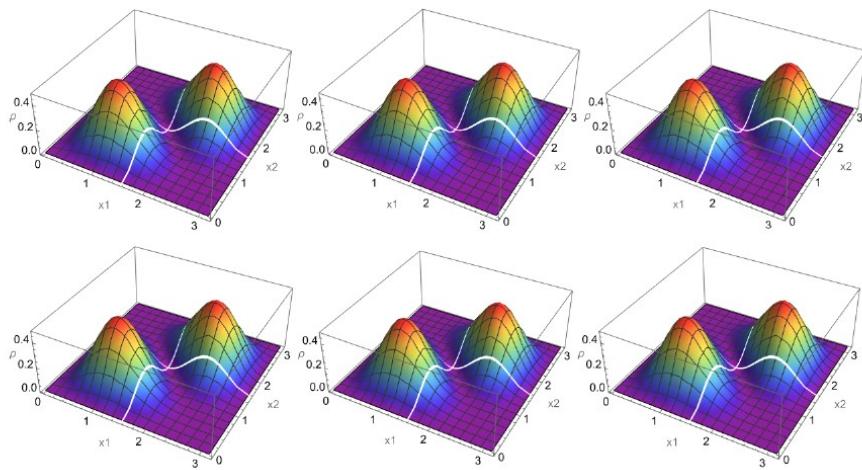


Figura 62: Densidad de onda simétrica para el estado  $n_1 = 1$ ,  $n_2 = 2$  y ancho del escalón  $b = 0.001$ .

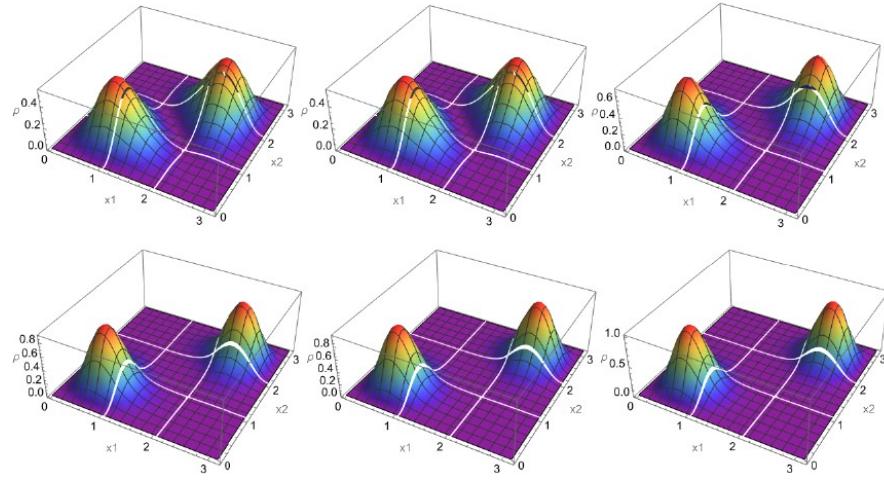


Figura 63: Densidad de onda simétrica para el estado  $n_1 = 1$ ,  $n_2 = 2$  y ancho del escalón  $b = 1$ .

Se nota en la Fig. 62 que el efecto de localización es prácticamente imperceptible por lo delgado de la barrera, y es consistente con lo reflejado en la entropía, el cambio es tan pequeño que podría decirse que es constante. Si se aumenta el valor del ancho del escalón, este efecto de localización es cada vez más evidente, como podemos observar en la Fig. 63 y Fig. 64

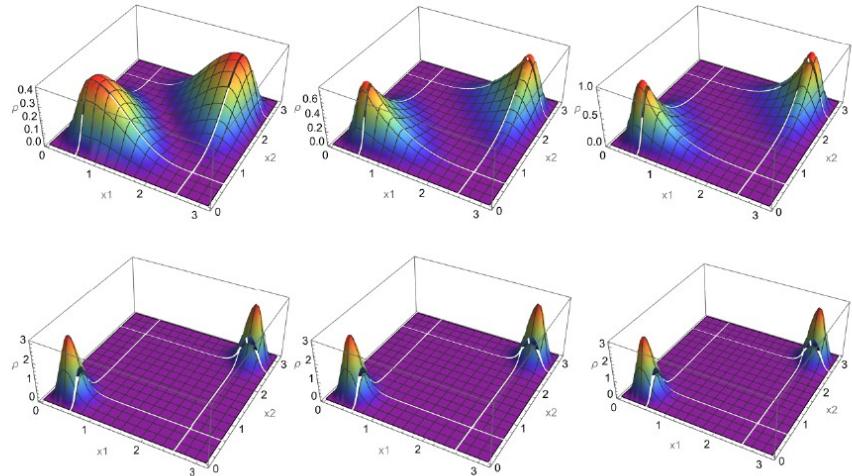


Figura 64: Densidad de onda simétrica para el estado  $n_1 = 1$ ,  $n_2 = 2$  y ancho del escalón  $b = 2$ .

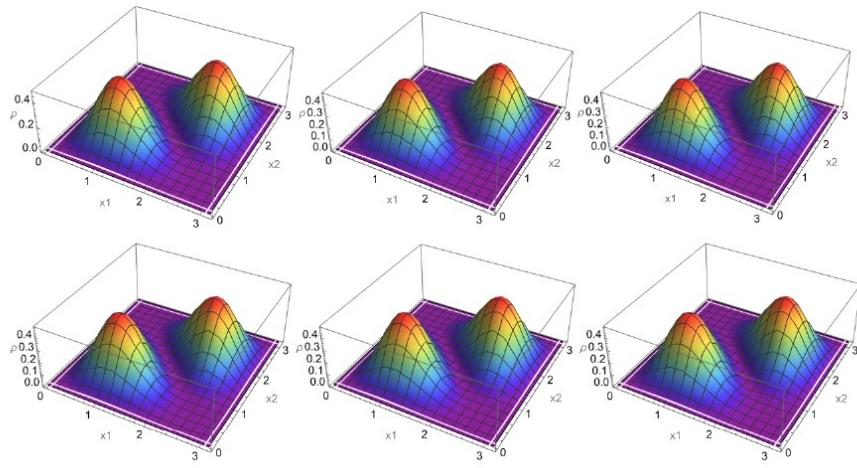


Figura 65: Densidad de onda simétrica para el estado  $n_1 = 1$ ,  $n_2 = 2$  y ancho del escalón  $b = 3$ .

Para el primer estado en el caso de  $b = 3$ , se tiene algo muy similar a  $b = 0.001$  (Fig. 62), la deslocalización es imperceptible ya que es equivalente a tener dos partículas en una caja tal como se refleja en la Fig. 65.

Para el estado  $n_1 = 1$ ,  $n_2 = 3$  las densidades de la función de onda graficadas en la Fig. 66 a la Fig. 72 se comportan de forma similar, para  $b = 0.001$  es imperceptible la localización, y ambas densidades parecen tener entropías constantes, tanto para el caso  $b = 0.001$  como para  $b = 3$ . En  $b = 1$  y  $b = 2$ , el comportamiento es distinto, a continuación se muestran las densidades para estos dos valores de  $b$  tanto para el caso simétrico como el antisimétrico.

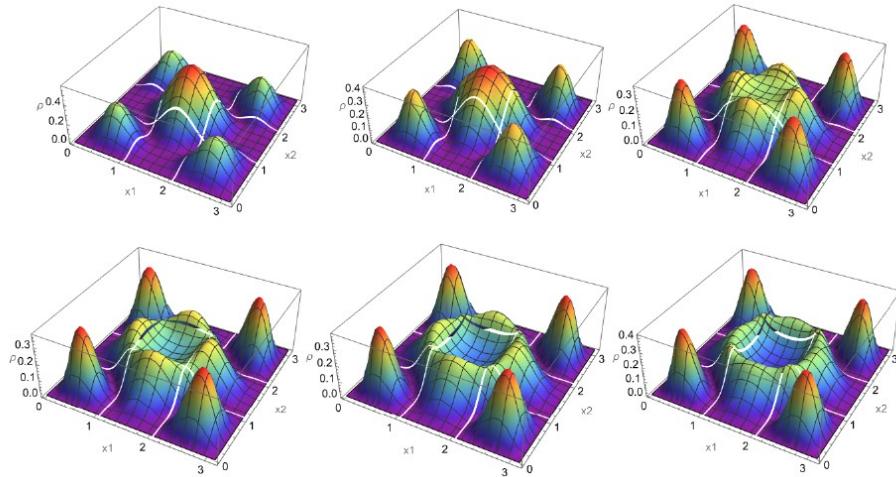


Figura 66: Deslocalización de la función de onda simétrica para el estado  $n_1 = 1$ ,  $n_2 = 3$  y ancho del escalón  $b = 1$ .

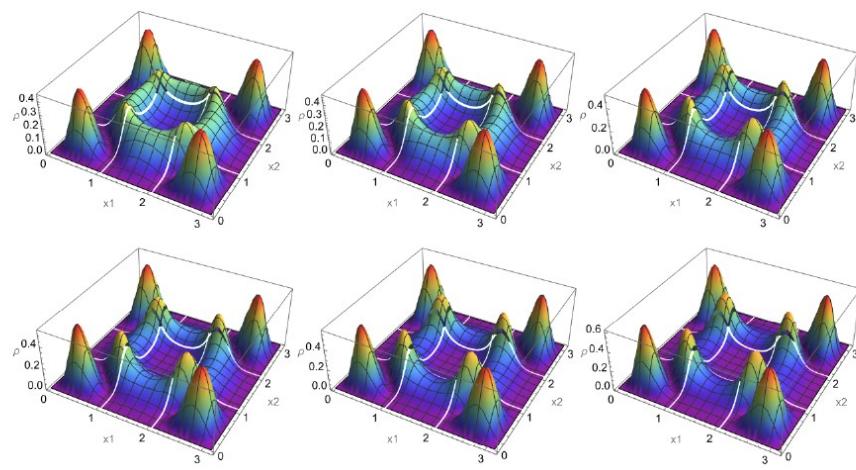


Figura 67: Deslocalización de la función de onda simétrica para el estado  $n_1 = 1$ ,  $n_2 = 3$  y ancho del escalón  $b = 1$ .

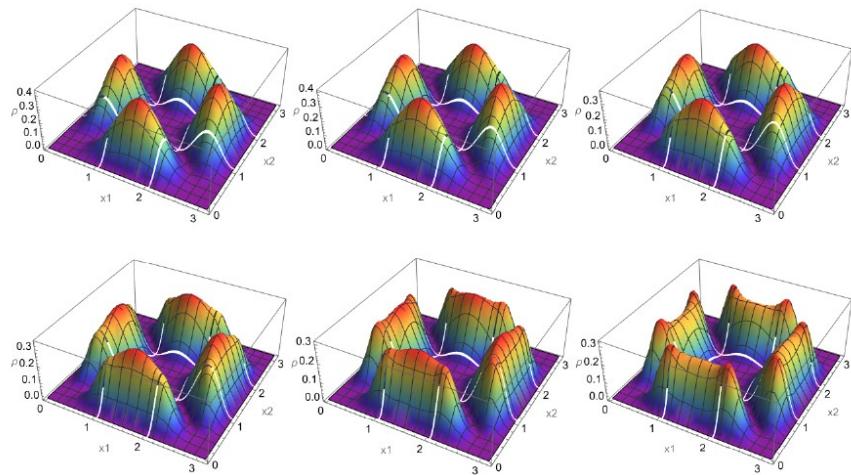


Figura 68: Deslocalización de la función de onda anti simétrica para el estado  $n_1 = 1$ ,  $n_2 = 3$  y ancho del escalón  $b = 1$ .

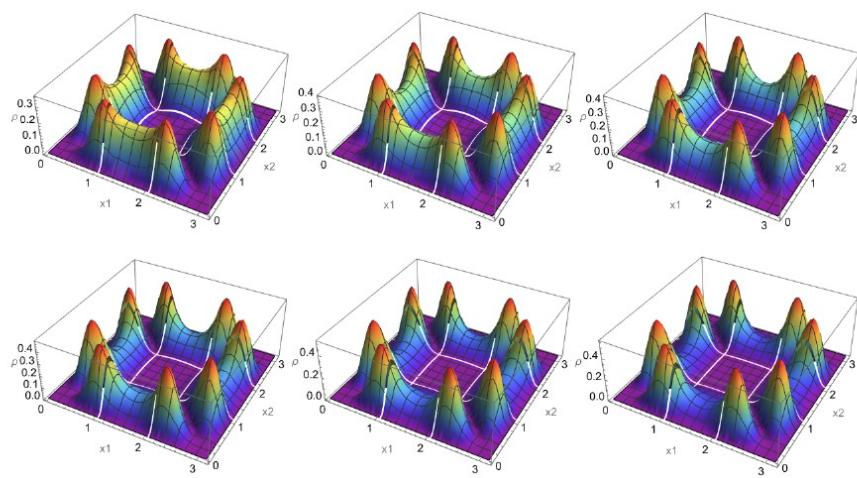


Figura 69: Localización de la función de onda anti simétrica para el estado  $n_1 = 1, n_2 = 3$  y ancho del escalón  $b = 1$ .

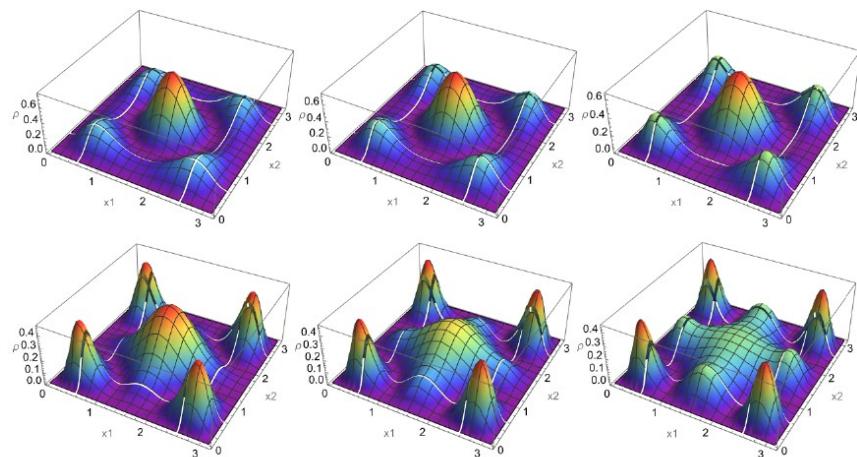


Figura 70: Deslocalización de la función de onda simétrica para el estado  $n_1 = 1, n_2 = 3$  y ancho del escalón  $b = 2$ .

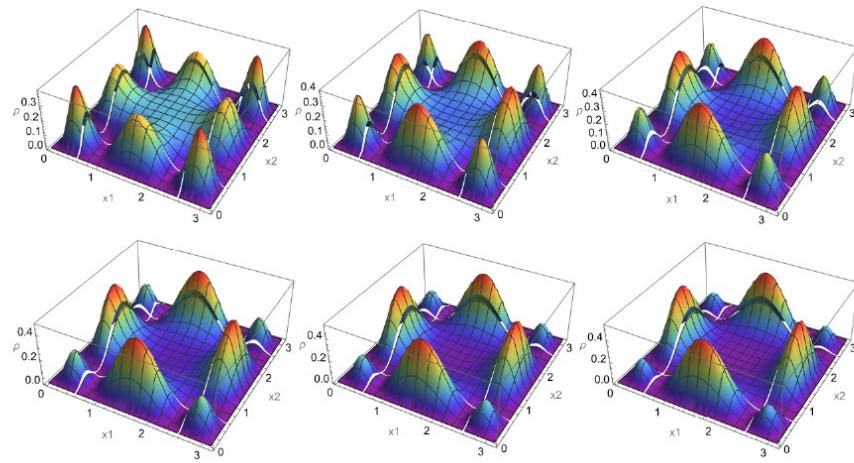


Figura 71: Localización de la función de onda simétrica para el estado  $n_1 = 1$ ,  $n_2 = 3$  y ancho del escalón  $b = 2$ .

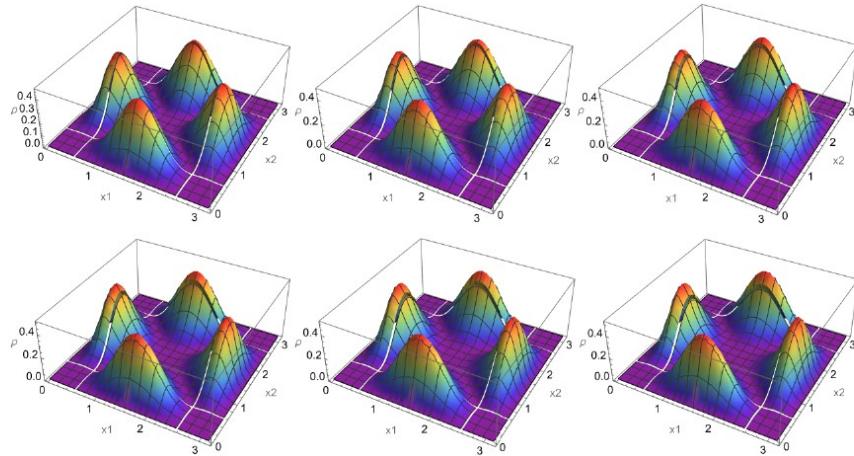


Figura 72: Localización de la función de onda anti simétrica para el estado  $n_1 = 1$ ,  $n_2 = 3$  y ancho del escalón  $b = 2$ .

Se tiene que la entropía de Shannon obsevada en la Fig. 60 es consistente con lo observado en la localización o deslocalización de la densidad de la función de onda en los estados ya mostrados en la Fig. 62 a la Fig. 72. En el caso  $n_1 = 2$ ,  $n_2 = 3$  se tiene un comportamiento análogo al caso  $n_1 = 1$ ,  $n_2 = 2$  en el que la entropía de ambas densidades es igual. Para el caso  $n_1 = 2$ ,  $n_2 = 4$  las densidades se comportan de la siguiente manera.

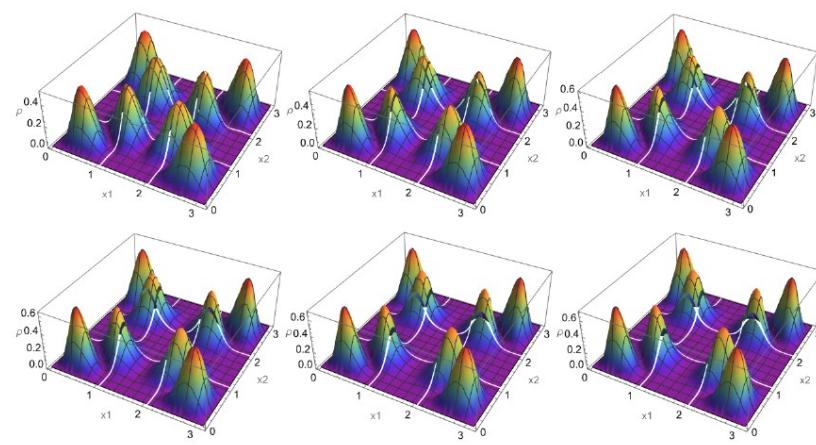


Figura 73: Localización de la función de onda simétrica para el estado  $n_1 = 2, n_2 = 4$  y ancho del escalón  $b = 1$ .

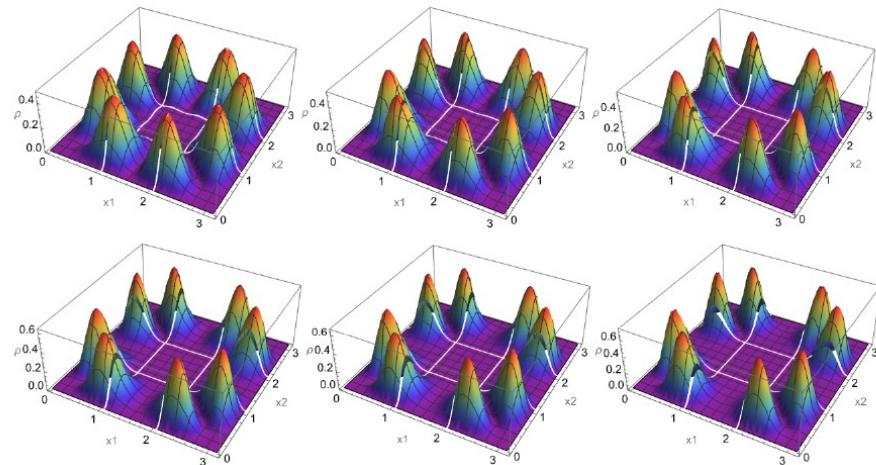


Figura 74: Deslocalización de la función de onda simétrica para el estado  $n_1 = 2, n_2 = 4$  y ancho del escalón  $b = 1$ .

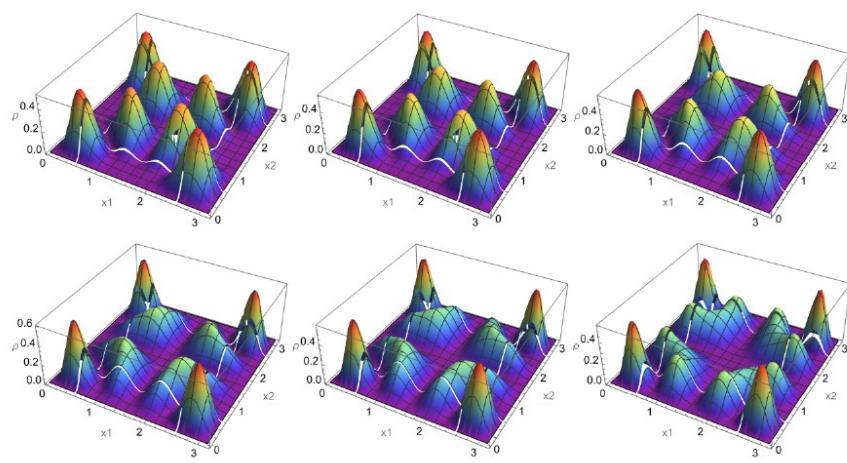


Figura 75: Deslocalización de la función de onda anti simétrica para el estado  $n_1 = 2$ ,  $n_2 = 4$  y ancho del escalón  $b = 2$ .

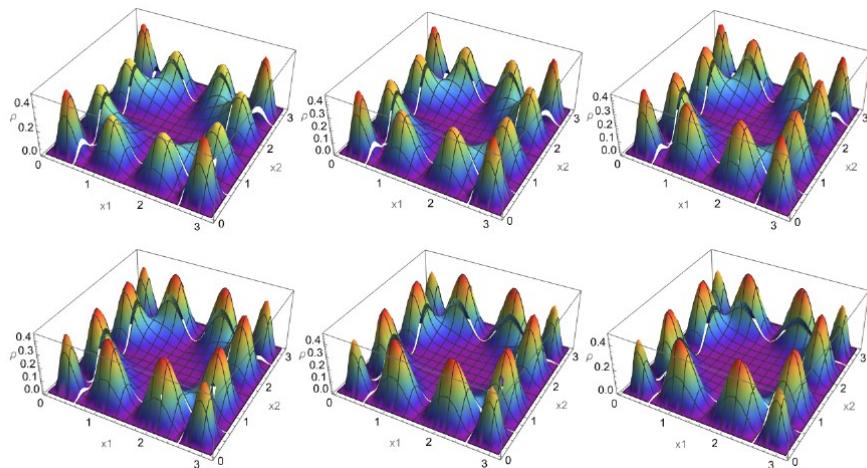


Figura 76: Localización de la función de onda anti simétrica para el estado  $n_1 = 2$ ,  $n_2 = 4$  y ancho del escalón  $b = 2$ .

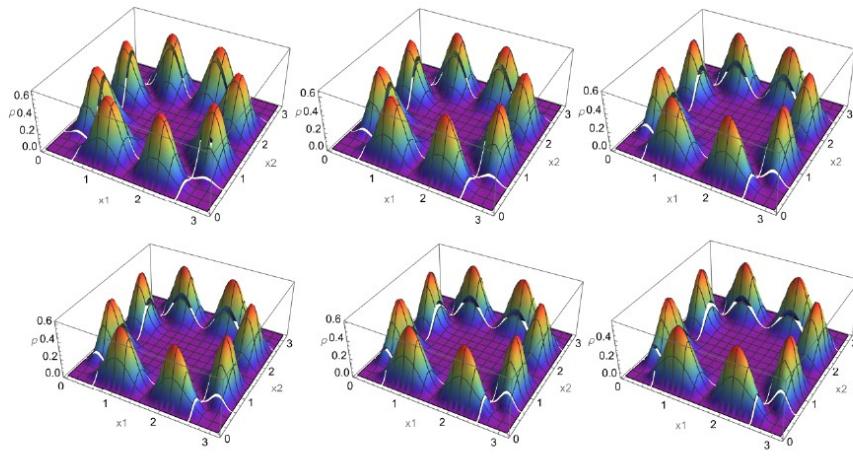


Figura 77: Localización de la función de onda simétrica para el estado  $n_1 = 2$ ,  $n_2 = 4$  y ancho del escalón  $b = 2$ .

## 5.1. Densidad reducida

Tal como se hizo para variaciones en el ancho del escalón, se busca comparar la entropía de la densidad de pares con la entropía de la densidad reducida. A continuación se grafican estas entropías en la Fig. 78.

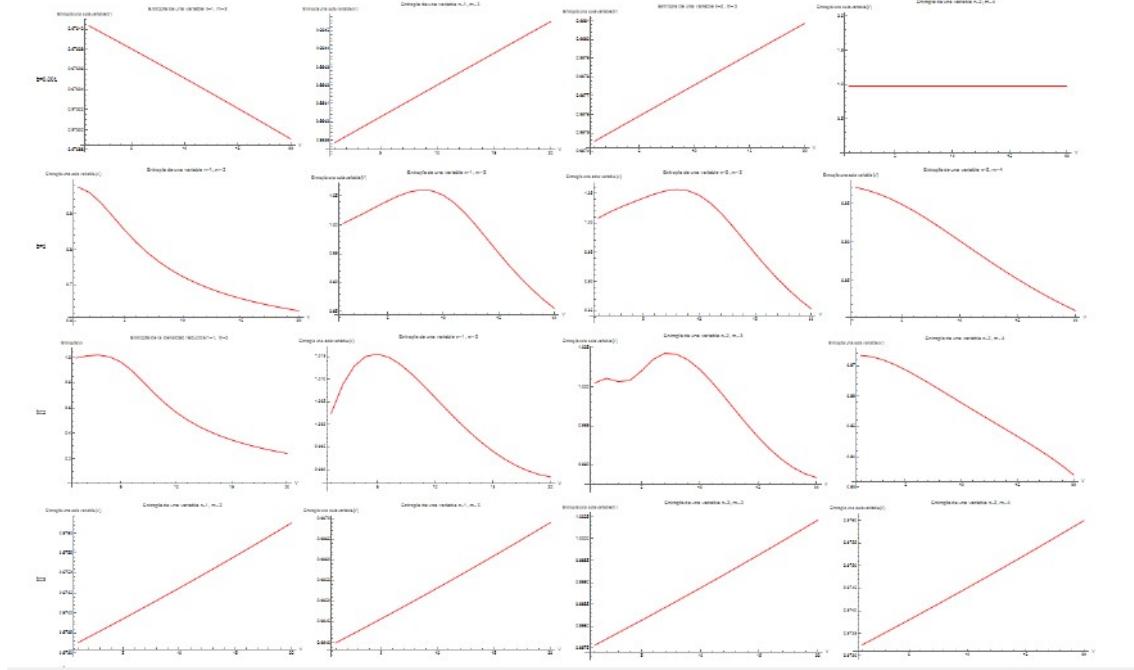


Figura 78: Entropía de las densidades reducidas vs alto de la barrera, primera columna  $n_1 = 1$  y  $n_2 = 2$ , segunda columna  $n_1 = 1$  y  $n_2 = 3$ , tercera columna  $n_1 = 2$  y  $n_2 = 3$ , cuarta columna  $n_1 = 2$  y  $n_2 = 4$ ,  $b = 0.001$  en la primera fila,  $b = 1$  en la segunda fila,  $b = 2$  en la tercera fila, y  $b = 3$  en la última fila.

Se observa que estas entropías presentan un comportamiento similar al obtenido en la entropía de la densidad reducida al realizar variaciones del ancho de la barrera de potencial Fig. 30 aunque no la misma evolución, ambos casos presentan comportamientos similares a la densidad de pares antisimétrica compartiendo máximos en los casos en los que esta variación de entropía es notable, en los casos en los que se tiene una variación lineal de la entropía tanto creciente como decreciente no se puede establecer un criterio de similaridad a una densidad de pares o a otra, ya que si bien ambas comparten comportamientos crecientes a orden muy bajo, no podría decirse entonces que la densidad reducida y la anti simétrica o simétrica son similares. Esta similaridad mencionada se da en casos en los que  $b = 1$  y  $b = 2$  excepto para el estado  $n_1 = 2, n_2 = 4$  para  $b = 2$ , este caso es la excepción, ya que la densidad reducida no se comporta como la densidad simétrica ni anti simétrica.

## 5.2. Varianza

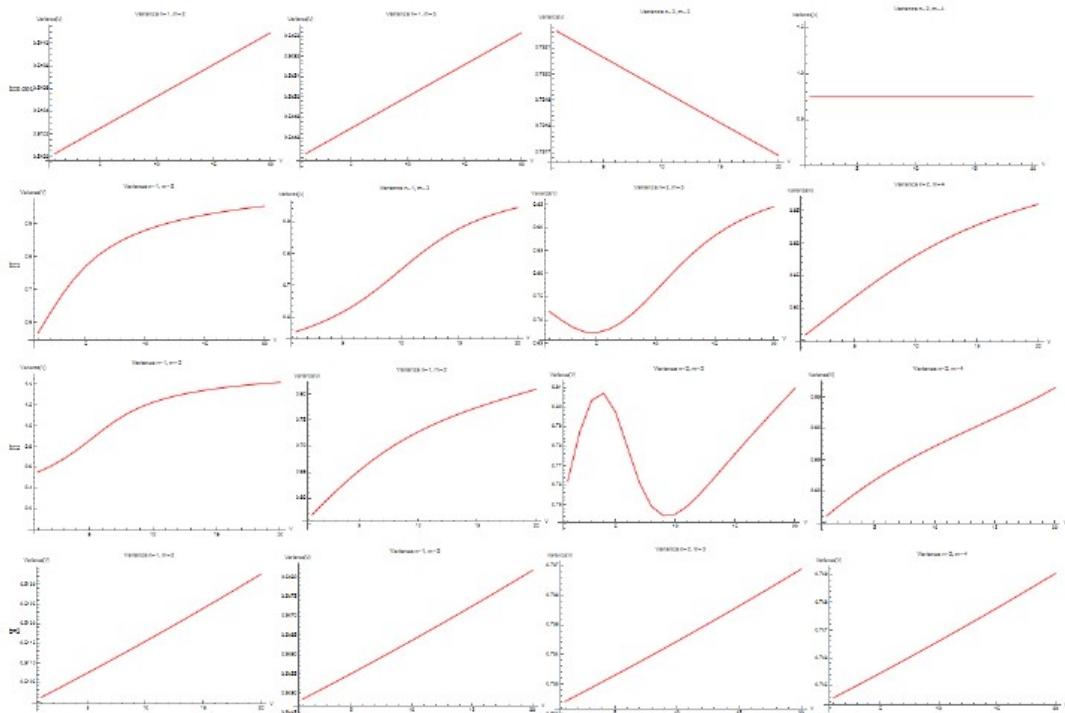


Figura 79: Varianza vs alto de la barrera

La varianza ante variaciones en el alto de la barrera de potencial tampoco refleja el comportamiento observado en las densidades de pares de la función de onda (Fig. 79). En la primera columna la varianza está diciendo que se tiene el comportamiento contrario al observado en la densidad reducida y en las densidades de pares, en la cuarta fila asociada a un valor de  $b \sim \pi$  el aumento en la varianza se da al mismo orden en el que se presentan variaciones en la entropía de Shannon al variar el alto de potencial para ese valor fijo de  $b (10^{-3})$ , de modo que podríamos decir que tanto la varianza como la entropía es constante. En la segunda columna solo difieren la segunda y tercera gráfica, mostrando que la varianza detecta deslocalización cuando lo presentado en términos de la entropía

de Shannon y la densidad de pares es distinto a esto, se tienen intervalos de localización y deslocalización y es algo que la varianza no detecta. En la tercera columna la primera, segunda y tercer gráfica difieren por completo de lo observado en la entropía de Shannon, y coincide en la última gráfica como ya se hizo mención. En la cuarta columna coinciden solamente la primera y última gráficas, de modo que podría pensarse que tal como en el caso anterior para variaciones del ancho del escalón, que la varianza de esta distribución no logra detectar la localización o deslocalización de la densidad.

### 5.3. Información mutua

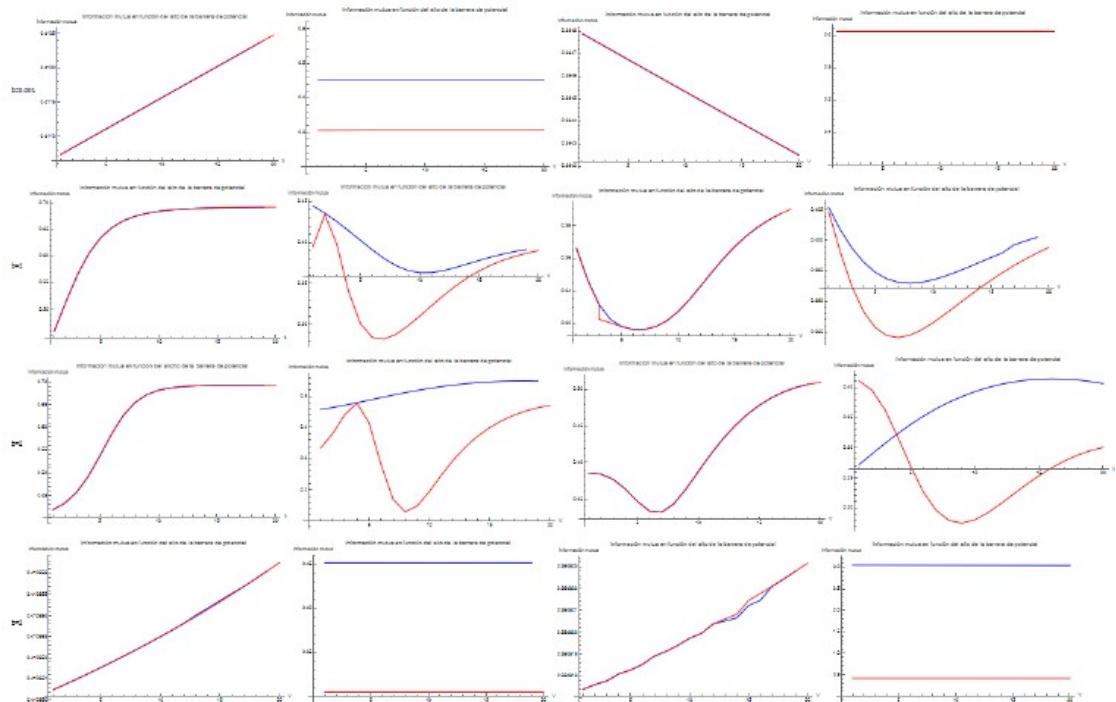


Figura 80: Información mutua vs alto de la barrera , curva roja: densidad simétrica, curva azul: densidad antisimétrica, primera columna  $n_1 = 1$  y  $n_2 = 2$ , segunda columna  $n_1 = 1$  y  $n_2 = 3$ , tercera columna  $n_1 = 2$  y  $n_2 = 3$ , cuarta columna  $n_1 = 2$  y  $n_2 = 4$ .

La información mutua en la Fig. 80, muestra que al aumentar  $V$ , en la primera columna, es decir, el estado  $n_1 = 1$  y  $n_2 = 2$ , la correlación crece, para  $b = 1$  y  $b = 2$  en la segunda y tercera fila de la Fig. 80 se tiene un incremento de correlación bastante grande en el momento en que la densidad de pares se localiza en el sistema. Para  $n_1 = 1$  y  $n_2 = 3$  en la segunda columna, de la primera y última gráfica puede decirse que la correlación es constante, pero para  $b = 1$  en la segunda fila se tiene una pérdida en la correlación bastante abrupta en el rango en que se deslocaliza la densidad de pares (Fig. 61) y para  $b = 2$  la correlación en la densidad anti simétrica es mayor que en la densidad simétrica, y esta correlación tal como ya se mencionó aumenta o disminuye en los valores en los que la densidad de pares se localiza o deslocaliza respectivamente y este análisis es análogo para los otros 2 estados, conforme se localiza la densidad de pares la información mutua crece

y conforme esta densidad se deslocaliza se pierde correlación, es decir, la información mutua decrece. ¿Este comportamiento se ve reflejado en el coeficiente de correlación?

## 5.4. Coeficiente de correlación

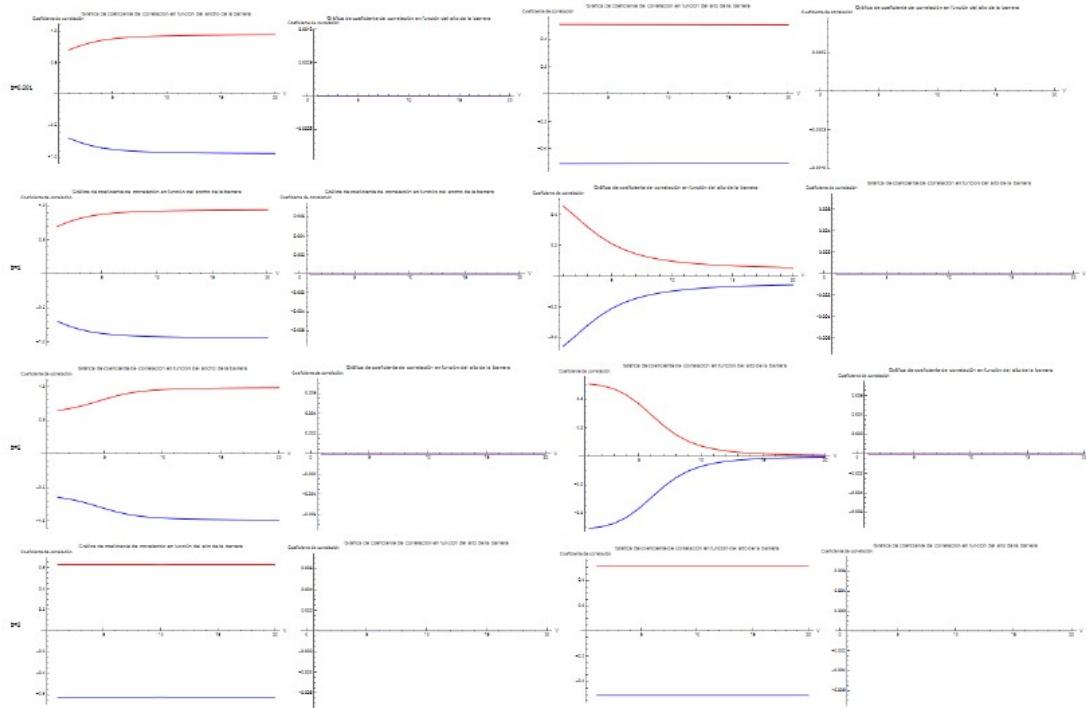


Figura 81: Coeficiente de correlación lineal vs alto de la barrera, curva roja: densidad simétrica, curva azul: densidad antisimétrica, primera columna  $n_1 = 1$  y  $n_2 = 2$ , segunda columna  $n_1 = 1$  y  $n_2 = 3$ , tercera columna  $n_1 = 2$  y  $n_2 = 3$ , cuarta columna  $n_1 = 2$  y  $n_2 = 4$

Tal como se vio en la sección anterior en la Fig. 59, para estados impares de la función de onda ( $n_1 = 1, n_2 = 2$  y  $n_1 = 2, n_2 = 3$ ) el valor absoluto del coeficiente de correlación es mayor a cero, y es igual para ambos casos, y en casos del primer estado en la primera columna de la Fig. 81 en valores de  $b = 1$  y  $b = 2$  (segunda y tercera fila Fig. 81) se tiene una correlación o anti correlación casi perfecta donde  $|\tau| \sim 0.98$ . En el caso  $n_1 = 2$  y  $n_2 = 3$  en la tercera columna de la Fig. 81, en  $b = 1$  y  $b = 2$  se pierde correlación al aumentar el valor del alto del potencial, pero esto es contradictorio a lo observado en la densidad de pares, ya que al confinar las partículas se gana correlación, y por lo tanto esta pérdida de correlación es contradictoria a lo observado. Para estados pares de la densidad de pares tales como  $n_1 = 1, n_2 = 3$  y  $n_1 = 2, n_2 = 4$  nuevamente no se está detectando correlación lineal en estos estados, indicando que posiblemente la paridad juega un papel fundamental en la detección de correlación en este sistema.

## 6. Conclusiones

A lo largo de este trabajo se resolvió la Ec. de Schrödinger independiente del tiempo en el doble pozo cuadrado de potencial para una partícula para dar paso a construir la solución para dos partículas no interactuantes confinadas en este sistema, y se ha encontrado que la paridad de la función de onda, juega un papel importante en la detección de correlación lineal en el sistema, ya que al momento de calcularla, no fue posible detectarla para estados pares, y queda la pregunta abierta ¿por qué sucede esto? dando lugar así a mostrar que la información mutua en este contexto detecta de mejor forma las correlaciones entre variables. De igual forma, la entropía de Shannon calculada para la densidad de pares captura de mejor forma las transiciones entre localización y deslocalización tanto al variar  $b$  como al variar  $V$  comparada con la varianza de la distribución de la función de onda. En particular la densidad antisimétrica posee una restricción a lo largo de la diagonal  $x_1 = x_2$ , esto debido al principio de exclusión de Pauli [12], impidiendo que en las regiones en las que la posición de ambas partículas sea igual que los picos de densidad tengan una región prohibida entre ellos, lo que se traduce en una mayor localización, y por lo tanto una caída en la entropía que es algo que se observó en los casos pares de la función de onda, la entropía antisimétrica mostraba, en la gran mayoría de los casos, valores menores que los de la entropía simétrica. En este proyecto, se han analizado las medidas de teoría de correlación para poder comparar cómo es que se obtiene información sobre el estado de la función de onda al variar los parámetros del sistema, todo este análisis resalta la ventaja de las medidas de teoría de la información en este sistema para detectar correlaciones de origen cuántico, y cómo estas medidas brindan mayor claridad sobre los estados de la densidad de la función de onda y cómo los cambios en los parámetros del sistema inducen cambios en la localización o deslocalización de la densidad de pares. El próximo proyecto contemplará la construcción de la función de Wigner para este sistema para hacer un análisis de las marginales y la negatividad de esta, así como calcular las medidas de teoría de la información calculadas en este proyecto para así entender el comportamiento de esta función en el espacio fase.

## A. Constantes de normalización

$$\begin{aligned}
 A_1(v, b, \lambda_n) = & \frac{\sqrt{2} \sqrt{-\lambda_n \cosh^2 \left( \frac{b}{2} \sqrt{2v - \lambda_n^2} \right)} \left[ (2v - \lambda_n^2) \cosh^2 \left( \frac{b}{2} \sqrt{2v - \lambda_n^2} \right) \right.}{\sqrt{2b\lambda_n(-2v + \lambda_n^2) \cosh^2 \left( \frac{b}{2} \sqrt{2v - \lambda_n^2} \right)}} \\
 & \times ((b - \pi)\lambda_n + \sin((\pi - b)\lambda_n)) + \lambda_n \sin^2 \left( \frac{(\pi - b)\lambda_n}{2} \right) \left( b(-2v + \lambda_n^2) \right. \\
 & \left. + \sqrt{2v - \lambda_n^2} \sinh \left( b\sqrt{2v - \lambda_n^2} \right) \right) \\
 & \left/ \left[ \sin^2 \left( \frac{(\pi - b)\lambda_n}{2} \right) ((b - \pi)\lambda_n + \sin((\pi - b)\lambda_n)) \right. \right. \\
 & \left. + (2v - \lambda_n^2) \cosh^4 \left( \frac{b}{2} \sqrt{2v - \lambda_n^2} \right) ((b - \pi)\lambda_n + \sin((\pi - b)\lambda_n))^2 \right. \\
 & \left. - \lambda_n^2 \sin^4 \left( \frac{(\pi - b)\lambda_n}{2} \right) \left( b^2(-2v + \lambda_n^2) + \sinh^2 \left( b\sqrt{2v - \lambda_n^2} \right) \right) \right] \quad (\text{A.1})
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 A_2(v, b, \lambda_n) = & \frac{\sqrt{2} \sqrt{-\lambda_n \sinh^2 \left( \frac{b}{2} \sqrt{2v - \lambda_n^2} \right)} \left[ (2v - \lambda_n^2) ((b - \pi)\lambda_n + \sin((\pi - b)\lambda_n)) \right.}{\sqrt{-2b\lambda_n(-2v + \lambda_n^2) \sin^2 \left( \frac{(\pi - b)\lambda_n}{2} \right)}} \\
 & \times \sinh^2 \left( \frac{b}{2} \sqrt{2v - \lambda_n^2} \right) + \lambda_n \sin^2 \left( \frac{(\pi - b)\lambda_n}{2} \right) \left( 2bv - b\lambda_n^2 \right. \\
 & \left. + \sqrt{2v - \lambda_n^2} \sinh \left( b\sqrt{2v - \lambda_n^2} \right) \right) \\
 & \left/ \left[ \sin^2 \left( \frac{(\pi - b)\lambda_n}{2} \right) ((b - \pi)\lambda_n + \sin((\pi - b)\lambda_n)) \right. \right. \\
 & \times \sinh^2 \left( \frac{b}{2} \sqrt{2v - \lambda_n^2} \right) + (2v - \lambda_n^2) ((b - \pi)\lambda_n + \sin((\pi - b)\lambda_n))^2 \\
 & \times \sinh^4 \left( \frac{b}{2} \sqrt{2v - \lambda_n^2} \right) - \lambda_n^2 \sin^4 \left( \frac{(\pi - b)\lambda_n}{2} \right) \left( b^2(-2v + \lambda_n^2) \right. \\
 & \left. + \sinh^2 \left( b\sqrt{2v - \lambda_n^2} \right) \right) \right] \quad (\text{A.2})
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 D(v, b, \lambda_n) = & -\frac{\sqrt{2} \operatorname{sech}\left(\frac{b}{2} \sqrt{2v - \lambda_n^2}\right) \sin\left(\frac{(\pi-b)\lambda_n}{2}\right)}{\sqrt{-b^2 \lambda_n^2 (-2v + \lambda_n^2) \sin^4\left(\frac{(\pi-b)\lambda_n}{2}\right) + 2b\lambda_n(-2v + \lambda_n^2) \cosh^2\left(\frac{b}{2} \sqrt{2v - \lambda_n^2}\right)}} \\
 & \times \sqrt{-\lambda_n \cosh^4\left(\frac{b}{2} \sqrt{2v - \lambda_n^2}\right) \left(b\lambda_n(-2v + \lambda_n^2) \operatorname{sech}^2\left(\frac{b}{2} \sqrt{2v - \lambda_n^2}\right)\right.} \\
 & \times \sin^2\left(\frac{(\pi-b)\lambda_n}{2}\right) - (2v - \lambda_n^2) [-b\lambda_n + \pi\lambda_n - \sin((\pi-b)\lambda_n)] + 2\lambda_n \sqrt{2v - \lambda_n^2} \\
 & \times \sin^2\left(\frac{(\pi-b)\lambda_n}{2}\right) \tanh\left(\frac{b}{2} \sqrt{2v - \lambda_n^2}\right) \Bigg) / \\
 & \left[ (2v - \lambda_n^2) \cosh^4\left(\frac{b}{2} \sqrt{2v - \lambda_n^2}\right) [(b - \pi)\lambda_n + \sin((\pi-b)\lambda_n)]^2 \right. \\
 & \left. - \lambda_n^2 \sin^4\left(\frac{(\pi-b)\lambda_n}{2}\right) \sinh^2\left(b \sqrt{2v - \lambda_n^2}\right) \right] \quad (\text{A.3})
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 C(v, b, \lambda_n) = & -\frac{\sqrt{2} \operatorname{csch}\left(\frac{b}{2} \sqrt{2v - \lambda_n^2}\right) \sin\left(\frac{(\pi-b)\lambda_n}{2}\right)}{\sqrt{-b^2 \lambda_n^2 (-2v + \lambda_n^2) \sin^4\left(\frac{(\pi-b)\lambda_n}{2}\right) - 2b\lambda_n(-2v + \lambda_n^2) \sin^2\left(\frac{(\pi-b)\lambda_n}{2}\right)}} \\
 & \times \sqrt{-\lambda_n \sinh^4\left(\frac{b}{2} \sqrt{2v - \lambda_n^2}\right) \left(2\lambda_n \sqrt{2v - \lambda_n^2} \coth\left(\frac{b}{2} \sqrt{2v - \lambda_n^2}\right) \sin^2\left(\frac{(\pi-b)\lambda_n}{2}\right)\right.} \\
 & - (2v - \lambda_n^2) \left[ -b\lambda_n + \pi\lambda_n - b\lambda_n \operatorname{csch}^2\left(\frac{b}{2} \sqrt{2v - \lambda_n^2}\right) \sin^2\left(\frac{(\pi-b)\lambda_n}{2}\right) - \sin((\pi-b)\lambda_n) \right] \\
 & \left[ (2v - \lambda_n^2) \sinh^4\left(\frac{b}{2} \sqrt{2v - \lambda_n^2}\right) [(b - \pi)\lambda_n + \sin((\pi-b)\lambda_n)]^2 \right. \\
 & \left. - \lambda_n^2 \sin^4\left(\frac{(\pi-b)\lambda_n}{2}\right) \sinh^2\left(b \sqrt{2v - \lambda_n^2}\right) \right] \quad (\text{A.4})
 \end{aligned}$$

## Referencias

1. H, Laguna. 2011. Correlación en los modelos de una y dos partículas en una caja. Tesis para obtener el grado de Maestría en Ciencias (Química). Universidad Autónoma Metropolitana - Unidad Iztapalapa.
2. Sen, K.D. (Ed.). (2011). Statistical Complexity: Applications in Electronic Structure. Springer. <https://doi.org/10.1007/978-90-481-3890-6>
3. Zettilli, N. (2009). Quantum mechanics: Concepts and applications (2nd ed.). Wiley.
4. Cover, T. M., Thomas, J. A. (2006). Elements of Information Theory 2nd Edition (Wiley Series in Telecommunications and Signal Processing). Wiley-Interscience. ISBN: 0471241954
5. H. Laguna. 2014. Correlaciones estadísticas, interacciones y localización en sistemas cuánticos. Tesis para obtener el grado de Doctorado en Ciencias (Química). Universidad Autónoma Metropolitana - Unidad Iztapalapa.
6. Tserkis, S. T., Moustakidis, C. C., Massen, S. E., Panos, C. P. (2014). Quantum tunneling and information entropy in a double square well potential: The ammonia molecule. Physics Letters A, 378(6), 500–504. <https://doi.org/10.1016/j.physleta.2013.12.004>
7. Foot, C. J., Shotter, M. D. (2011). Double well potentials and quantum gates. American Journal of Physics, 79(7), 762–768.
8. Peacock-López, E. (2006). Exact solutions of the quantum double square well potential. The Chemical Educator, 11(4), 241–244.
9. Planck, M. (1901). Über das Gesetz der Energieverteilung im Normalspectrum. Annalen der Physik, 4(3), 553–563. DOI: 10.1002/andp.19013090310
10. Einstein, A. (1905). Über einen die Erzeugung und Verwandlung des Lichtes betreffenden heuristischen Gesichtspunkt. Annalen der Physik, 17, 132–148. DOI: 10.1002/andp.19053220607
11. Shannon, C.E. (1948). A Mathematical Theory of Communication. Bell System Technical Journal, 27(3), 379–423, 27(4), 623–656.
12. Pauli, W. (1925). Über den Zusammenhang des Abschlusses der Elektronengruppen im Atom mit der Komplexstruktur der Spektren. Zeitschrift für Physik, 31(1), 765–783.
13. Compton, A. H. (1923). A Quantum Theory of the Scattering of X-rays by Light Elements. Physical Review, 21(5), 483–502. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.21.483>
14. Schrödinger, E. (1926). Quantisierung als Eigenwertproblem. Annalen der Physik, 384(4), 361–376. <https://doi.org/10.1002/andp.19263840404>
15. Press, W. H., Teukolsky, S. A., Vetterling, W. T., Flannery, B. P. (2007). Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing (3rd ed.). Cambridge University Press.

16. Bohr, N. (1913). "On the Constitution of Atoms and Molecules, Part I". *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, Serie 6, Vol. 26, pp. 1–25.
17. Gurney, R. W., Condon, E. U. (1928). Quantum mechanics and radioactive disintegration. *Nature*, 122, 439–440.
18. Gamow, G. (1928). Zur Quantentheorie des Atomkernes. *Zeitschrift für Physik*, 51(3–4), 204–212.