



**UNIVERSIDAD
AUTÓNOMA
METROPOLITANA**
Unidad Iztapalapa

División de Ciencias Básicas e Ingeniería
Licenciatura en Física

Proyecto Terminal II: Investigación teórica

**ANÁLISIS INFORMACIONAL DE UNA Y
DOS PARTÍCULAS INDISTINGUIBLES
CONFINADAS EN UN DOBLE POZO
INFINITO II**

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**

AGOSTO DE 2025

IZTAPALAPA, CIUDAD DE MÉXICO

Índice

1. Resumen	2
2. Introducción	3
2.1. Ecuación de Schrödinger	3
2.2. Función de Wigner	5
2.3. Teoría de la información	6
2.4. Tunelaje	8
3. Doble pozo infinito	10
3.1. Función de Wigner del sistema	17
4. Dependencia paramétrica de las magnitudes	20
5. Conclusiones	32
A. Constantes de normalización	34
B. Gráficas	36

1. Resumen

En este trabajo se estudia el comportamiento cuántico de una partícula confinada en un potencial de doble pozo con un escalón central, analizando cómo varían distintas magnitudes en función del ancho y la altura de dicho escalón. Se emplean tanto la función de onda como la función de Wigner para caracterizar los estados cuánticos, evaluando indicadores como la entropía de Shannon, la entropía asociada a la función de Wigner, la probabilidad de tunelaje y la negatividad de la función de Wigner. Se consideran dos niveles de energía y diferentes regímenes de potencial, lo que permite identificar patrones de correlación entre estas cantidades, así como cambios abruptos relacionados con el cruce de energía E con la altura del potencial V . El análisis revela diferencias sustanciales entre estados de baja y alta energía, así como limitaciones numéricas en estados más energéticos debido a su carácter más extendido y a la complejidad de las interferencias cuánticas.

Palabras clave: Mecánica cuántica, Espacio fase cuántico, Potencial de doble pozo, Función de Wigner, Entropía de Shannon, Negatividad, tunelaje.

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 microscópico, 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 Arthur 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 Erwin 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 de una partícula confinada en un doble pozo de potencial, con el objetivo de construir y analizar su función de Wigner [19]. Esta herramienta matemática establece un vínculo entre la descripción ondulatoria de la mecánica cuántica y la representación probabilística en el espacio de fases, ofreciendo una perspectiva que permite visualizar simultáneamente información de posición y momento sin abandonar la naturaleza cuántica del sistema. Este “puente” es valioso porque, aunque en mecánica clásica el estado de una partícula se describe de forma precisa por un punto en el espacio de fases, en el dominio cuántico las restricciones impuestas por el principio de incertidumbre [20] impiden una descripción idéntica, y la función de Wigner ofrece una forma de explorar esas diferencias de manera cuantitativa.

El doble pozo de potencial es especialmente interesante en este contexto porque combina fenómenos de confinamiento y de tunelaje, lo que genera patrones de interferencia y correlaciones no clásicas en el espacio de fases que la función de Wigner puede capturar de forma directa. Analizar este tipo de sistema no solo permite caracterizar la transición entre estados localizados y deslocalizados, sino también identificar manifestaciones claras de la no clasicidad, como la aparición de regiones negativas en la función de Wigner. De este modo, el estudio ofrece una ventana para comprender cómo la estructura del potencial y la energía del estado influyen en la naturaleza cuántica 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; este postulaba que la materia poseía propiedades ondulatorias y sentó las bases para que se reconsiderara

la naturaleza de la partícula. Inspirado por esas ideas, Erwin 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 ∇^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 $\Psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r})e^{\frac{-iEt}{\hbar}}$, 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, o un oscilador armónico, las soluciones del sistema son analíticas. Entre estos, el problema del doble pozo cuadrado de potencial infinito de igual forma 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.

La descripción cuántica de sistemas físicos, como la obtenida a partir de la ecuación de Schrödinger, fundamenta la comprensión de la función de onda como la herramienta esencial para conocer el comportamiento y las probabilidades asociadas a las partículas. Sin embargo, la interpretación y análisis de estos estados cuánticos pueden enriquecerse con representaciones alternativas que permitan una visión más cercana a la intuición clásica, sin perder la esencia cuántica. En este contexto, surge la función de Wigner, que ofrece una representación en el espacio fase y permite estudiar de manera más directa fenómenos como la interferencia cuántica y la no clasicidad inherente al comportamiento microscópico.

2.2. Función de Wigner

Esta función fue concebida en 1932 por Eugene Wigner [19] con el objetivo de estudiar las correcciones cuánticas a la mecánica estadística clásica. Fundamentalmente, se buscaba reemplazar la función de onda, por una distribución de probabilidad en el espacio fase. En la física clásica, el estado de un sistema se describe mediante un punto en un espacio de fases de $6N$ dimensiones (para N partículas), definido por sus posiciones y momentos. La función de Wigner representa una intento para conciliar la intuición clásica del espacio de fases con la no clasicidad de la mecánica cuántica. En una dimensión, esta función se construye de la siguiente manera:

$$W(x, p) = \frac{1}{\hbar\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x+y) \psi(x-y) e^{\frac{2ipy}{\hbar}} dy. \quad (2.4)$$

Esta es una función real, cuyas marginales son el cuadrado de la función de onda en espacios de posición $|\psi(x)|^2$ y en espacio de momentos $|\psi(p)|^2$, estas marginales son distribuciones de probabilidad que se obtienen al integrar toda la información sobre una de las variables del sistema que en este caso son las posiciones y momentos (x, p) . Asegurando así que pese a describir simultáneamente posición y momento, respeta los resultados habituales de la mecánica cuántica cuando nos fijamos solo en una de las variables. Como consecuencia, si se integra $W(x, p)$ sobre todo el espacio de fases, el resultado es igual a 1, lo que expresa que la función está normalizada y que la probabilidad total de encontrar la partícula en algún lugar del espacio, con algún momento, es siempre la unidad [21], i.e:

$$\int W(x, p) dp = |\psi(x)|^2, \quad (2.5)$$

$$\int W(x, p) dx = |\psi(p)|^2, \quad (2.6)$$

$$\int W(x, p) dx dp = 1. \quad (2.7)$$

Esta función es clasificada como una distribución de cuasi-probabilidad, y este término es crucial ya que a diferencia de una distribución de probabilidad clásica que siempre es no negativa, la función de Wigner puede tomar valores negativos. Esta es la característica fundamental de esta función, lo cual sirve como indicador de la no clasicidad de un estado. En 2004, Anatole Kenfack y Karol Życzkowski [22] definieron el volumen de las regiones negativas como un indicador de no clasicidad como:

$$N(W) = \int \int |W(x, p)| dx dp - 1, \quad (2.8)$$

que para estados coherentes puros vale cero. Los estados coherentes son estados cuya dinámica, se asemeja a la de un oscilador armónico clásico, cuyas soluciones son Gaussianas [23]. Entonces para estados Gaussianos, la negatividad es cero.

Estos valores negativos indican interferencia cuántica y no se observan en sistemas puramente clásicos. Por ejemplo, la función de Wigner de un estado de "gato" muestra dos picos Gaussianos con franjas de interferencia entre ellos que albergan regiones negativas.

La negatividad de la función de Wigner no solo es un indicador teórico de la no clasicidad, en el procesamiento cuántico se le considera un recurso [24]. A diferencia de los enfoques basados en "qubits", donde la información cuántica se codifica en sistemas de dos niveles, el cómputo cuántico de variables continuas utiliza modos bosónicos, como los del campo electromagnético, cuyas variables de posición y momento son continuas 25.

Incorporar medidas de teoría de la información como entropías de Shannon aporta una forma alterna de cuantificar la negatividad de la función de Wigner, separando las contribuciones de las zonas positivas y negativas, transformando la interferencia cuántica en un recurso capaz de calificarse, y consumirse en protocolos de cómputo.

2.3. Teoría de la información

La teoría de la información tuvo su origen en la primera mitad del siglo XX, cuando Claude Shannon estableció sus fundamentos [11]. Este marco teórico se centró en el estudio de los mecanismos mediante los cuales la información se transmite, procesa y almacena en diversos sistemas de comunicación. Un concepto fundamental dentro de esta teoría es la entropía, que se utiliza como medida cuantitativa de la incertidumbre asociada a un conjunto de datos o eventos. En su formulación discreta, la entropía de Shannon se expresa como:

$$S = - \sum_k p_k \log p_k, \quad (2.9)$$

donde p_k representa la probabilidad del suceso k .

Considerando que la función de onda en mecánica cuántica admite una interpretación probabilística, es posible establecer un vínculo directo entre la teoría de la información y la descripción cuántica de los sistemas [2]. En este contexto, la entropía de Shannon puede entenderse como una medida del grado de incertidumbre en la descripción del estado, esta interpretación fue dada por Iwo Białynicki-Birula y Jan Mycielski [31], quienes propusieron cuantificar la incertidumbre usando la entropía diferencial de Shannon (Ec. 2.11) tanto para las distribuciones de posición y momento, ya que estas miden la dispersión en cada variable, a mayor entropía mayor incertidumbre o deslocalización en alguna de las variables [1]. En su artículo el resultado central es una desigualdad análoga a la presentada por Werner Heisenberg [20]:

$$S_x + S_p \geq 1 + \log \pi. \quad (2.10)$$

Esta desigualdad implica que no se puede reducir arbitrariamente la suma de incertidumbres informacionales en posición y momento ya que si la entropía de posición disminuye

(distribución muy localizada), entonces la entropía de momento debe aumentar (distribución extendida), y viceversa. Así, si una distribución está muy localizada, la mayor parte de la probabilidad se concentra en una región pequeña; mientras que en una distribución más extendida o “deslocalizada”, la probabilidad se reparte sobre un dominio más amplio.

La naturaleza estadística de los resultados de medición en mecánica cuántica hace que la definición de entropía de Shannon se integre de forma natural, bastando con utilizar las probabilidades derivadas de la función de onda para su cálculo.

Dado que el módulo al cuadrado de la función de onda define una distribución de probabilidad continua, es necesario adoptar la versión continua de la entropía de Shannon [3]:

$$S = - \int_{-\infty}^{\infty} p(x) \log p(x) dx, \quad (2.11)$$

donde $p(x) = |\psi(x)|^2$ corresponde a la densidad de probabilidad en el espacio de posiciones.

En este sentido, extender el concepto de entropía a descripciones cuánticas en el espacio de fases conduce de manera natural al uso de la función de Wigner como herramienta. Esta función permite representar el estado cuántico en términos de una cuasi-distribución en el espacio (x, p) , proporcionando así un puente entre la descripción probabilística y la dinámica cuántica.

La función de Wigner, al ser una distribución de cuasi-probabilidad que puede dar valores negativos, presenta características que no se encuentran en distribuciones de probabilidad convencionales. Esta peculiaridad es fundamental para representar la interferencia cuántica y la no clasicidad del sistema, pero también genera ciertas complicaciones al momento de calcular magnitudes basadas en funciones logarítmicas, como es el caso de la entropía. En particular, la presencia de regiones negativas en $W(x, p)$ implica que el cálculo del logaritmo natural, requerido para la definición de la entropía, debe manejarse con cuidado. Para ello, se adopta la convención de trabajar en la rama principal del logaritmo complejo, lo que permite extender la definición de entropía a la función de Wigner a pesar de sus valores negativos. De esta forma, la entropía de la función Wigner, aunque puede tomar valores complejos, sigue siendo una herramienta útil para analizar y cuantificar la interferencia y las propiedades cuánticas del sistema. Para calcular la entropía de Shannon de la función de Wigner, lo hacemos con la Ec. 2.12.

$$s_w = - \int W(x, p) \log W(x, p) dx dp. \quad (2.12)$$

Calcular esta entropía resulta de gran importancia, ya que permite cuantificar el grado de no clasicidad del estado cuántico desde una perspectiva de teoría de la información. Mientras que la función de Wigner ofrece una representación completa del estado en el espacio de fases, su entropía proporciona una medida cuantitativa de la incertidumbre inherente a esa representación. Esto permite diferenciar entre estados más localizados y aquellos con mayor extensión o superposición en el espacio de fases, reflejando fenómenos cuánticos como la interferencia.

Desarrollando la Ec. 2.12 dividiendo la entropía en regiones donde la función de Wigner es positiva (W^+) y negativa (W^-):

$$s_w = - \int W^+(x, p) \log W^+(x, p) dx dp - \int W^-(x, p) \log W^-(x, p) dx dp - i\pi \int W^-(x, p) dx dp. \quad (2.13)$$

Las primeras dos integrales en la Ec. 2.13 representan respectivamente la entropía de Shannon para las regiones donde la función de Wigner es positiva y negativa. Esto no es una entropía de una distribución de probabilidad en el sentido clásico, ya que como se mencionó, la función de Wigner es una distribución de cuasi-probabilidad, pero al separar las regiones positivas y negativas, se puede aplicar la noción de entropía de Shannon por partes.

Así, la primera integral mide la información clásica asociada con la región positiva de $W(x, p)$, la segunda aplica la misma idea pero sobre la región negativa y el tercer término (parte imaginaria) es proporcional al volumen de las regiones negativas.

$$V_{W^-} \propto \int W^-(x, p) dx dp \quad (2.14)$$

La Ec. 2.13 permite descomponer el comportamiento real (entropía positiva), del comportamiento cuántico (negatividad e interferencia), siendo también una conexión con la teoría de recursos, donde como se mencionó, la negatividad se considera un recurso computacional.

2.4. Tunelaje

El fenómeno de *tunelaje* fue reconocido desde los primeros años del desarrollo de la mecánica cuántica. Friedrich Hund en 1927 [26] al aplicar la ecuación de Schrödinger a un potencial de doble pozo, identificó la posibilidad de que un estado cuántico oscilara entre pozos sin superar el máximo energético. Poco después, Nordheim y Fowler [27] exploraron el tunelaje en el contexto de la emisión electrónica desde metales, postulando que los electrones pueden atravesar una barrera superficial bajo energías próximas a la barrera. Una de las primeras aplicaciones de gran impacto fue la explicación teórica de la desintegración alfa por tunelaje, desarrollada por George Gamow [18].

El tunelaje se formaliza mediante la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para una partícula de masa m que incide sobre una barrera de potencial rectangular de altura V_0 y ancho b :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V_0\psi(x) = E\psi(x). \quad (2.15)$$

Si $E < V_0$, la solución dentro de la barrera se describe como:

$$\psi(x) = Ae^{-\kappa x} + Be^{\kappa x}, \quad \kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}. \quad (2.16)$$

Imponiendo condiciones de continuidad para ψ y su derivada en los límites de la barrera, se obtiene el coeficiente de transmisión T mediante:

$$T = |t|^2 \approx 16 \frac{E(V_0 - E)}{V_0^2} e^{-2\kappa b}, \quad (2.17)$$

en el régimen de barrera ancha y alta, revelando una dependencia exponencial de la probabilidad de transmisión con el ancho y la altura de la barrera.

El fenómeno de tunelaje cuántico ha sido esencial en la interpretación de desintegración nuclear, emisión electrónica y en tecnologías como los diodos, el tunelaje en superconductores y el microscopio de efecto túnel. Estos avances fueron reconocidos con Premios Nobel, otorgados a Esaki [28], Giaever [29] y Josephson [30] respectivamente.

En esta investigación, la probabilidad de tunelaje se calcula mediante la función de onda y su extensión a través de la barrera con la Ec. 2.18.

$$p(x, \lambda_n) = \int_{x_1}^{x_2} |\psi_n(x, \lambda_n)|^2 dx, \quad (2.18)$$

La ecuación de Schrödinger es fundamental para describir los estados cuánticos de una partícula y determinar sus funciones de onda, que contienen la información necesaria para conocer la distribución de probabilidad en el espacio. Para complementar esta descripción y capturar aspectos característicos de la naturaleza cuántica, como la interferencia y la coherencia, se utiliza la función de Wigner, una representación que, aunque derivada de la función de onda, permite identificar regiones donde se manifiestan efectos exclusivamente cuánticos a través de la presencia de valores negativos. La teoría de la información proporciona herramientas valiosas para cuantificar estas características, mediante medidas que evalúan la no clasicidad del sistema. En este contexto, el fenómeno de tunelaje puede ser analizado desde la función de onda y desde estas medidas de información, dando así una visión más completa de su naturaleza cuántica. Esta interrelación entre funciones de onda, representación de Wigner, teoría de la información y tunelaje motiva el desarrollo del presente trabajo.

3. Doble pozo infinito

Una vez dado el contexto y los fundamentos teóricos del trabajo, se procede a explicar el planteamiento del problema.

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

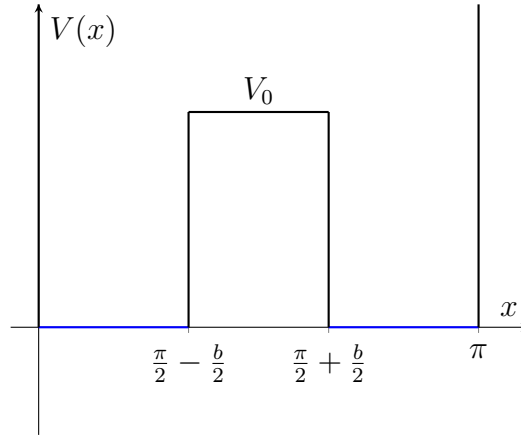


Figura 1: Doble pozo cuadrado de potencial de paredes infinitas y longitud π centrado en $\frac{\pi}{2}$ con una barrera de ancho b y alto V_0 .

Cuyas regiones son las siguientes:

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

Este potencial representa un doble pozo cuadrado infinito con una barrera rectangular centrada en $x = \frac{\pi}{2}$, cuya presencia permite el tunelaje entre las dos subregiones y cuya descripción está dada por la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo.

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

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 la ecuación de Schrödinger toma la siguiente forma en la Ec. 3.4:

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

Se define entonces λ_n

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

La solución de esta ecuación será en términos de senos y cosenos.

$$\psi_1(x) = A \sin \lambda_n x + B \cos \lambda_n x. \quad (3.5)$$

Para la segunda región la ecuación de Schrödinger será de la siguiente forma en la Ec. 3.6:

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2 \psi_2(x)}{dx^2} + V_0 \psi_2(x) = E_n \psi_2(x). \quad (3.6)$$

Se define κ en términos de λ 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.

$$\psi_2(x) = e^{\kappa_n x}. \quad (3.7)$$

Cuyas soluciones serán:

$$\psi_2(x) = C \sinh \kappa_n x + D \cosh \kappa_n x. \quad (3.8)$$

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

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2 \psi_3(x)}{dx^2} = E_n \psi_3(x). \quad (3.9)$$

$$\psi_1(x) = A \sin \lambda_n(\pi - x) + B \cos \lambda_n(\pi - x). \quad (3.10)$$

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

$$\psi(x) = \begin{cases} A \sin \lambda_n x + B \cos \lambda_n x, & 0 < x < \frac{\pi}{2} - \frac{b}{2}, \\ C \sinh \kappa_n x + D \cosh \kappa_n x, & \frac{\pi}{2} - \frac{b}{2} \leq x \leq \frac{\pi}{2} + \frac{b}{2}, \\ A \sin \lambda_n x + B \cos \lambda_n x, & \frac{\pi}{2} + \frac{b}{2} < x < \pi. \end{cases} \quad (3.11)$$

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 coseno 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

$$\psi_1(0) = 0. \quad (3.12)$$

Evaluando la función:

$$\psi_1(0) = A \sin \lambda_n 0 + B \cos \lambda_n 0 = 0. \quad (3.13)$$

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

Para la segunda región, la función de onda será:

$$\psi_2(x) = D \cosh \kappa_n x. \quad (3.14)$$

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 ψ_2 es:

$$\psi_2(x) = D \cosh \kappa_n \left(x - \frac{\pi}{2} \right). \quad (3.15)$$

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

$$\psi_3(\pi) = A \sin \lambda_n \pi + B \cos \lambda_n \pi. \quad (3.16)$$

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

$$\psi_3(x) = A \sin \lambda_n (\pi - x) + B \cos \lambda_n (\pi - x). \quad (3.17)$$

De esta forma, si evaluamos la función de onda en π

$$\psi_3(\pi) = A \sin \lambda_n 0 + B \cos \lambda_n 0. \quad (3.18)$$

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

$$\psi_3(x) = A_1 \sin \lambda_n (\pi - x). \quad (3.19)$$

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

$$\psi(x, \lambda_n) = \begin{cases} A_1 \sin \lambda_n x, & 0 < x < \frac{\pi}{2} - \frac{b}{2}, \\ D \cosh \kappa_n (x - \frac{\pi}{2}), & \frac{\pi}{2} - \frac{b}{2} \leq x \leq \frac{\pi}{2} + \frac{b}{2}, \\ A_1 \sin \lambda_n (\pi - x), & \frac{\pi}{2} + \frac{b}{2} < x < \pi. \end{cases} \quad (3.20)$$

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:

$$\psi_1 \left(\frac{\pi}{2} - \frac{b}{2} \right) = \psi_2 \left(\frac{\pi}{2} - \frac{b}{2} \right), \quad (3.21)$$

$$\psi_2 \left(\frac{\pi}{2} + \frac{b}{2} \right) = \psi_3 \left(\frac{\pi}{2} + \frac{b}{2} \right), \quad (3.22)$$

$$\psi_1' \left(\frac{\pi}{2} - \frac{b}{2} \right) = \psi_2' \left(\frac{\pi}{2} - \frac{b}{2} \right), \quad (3.23)$$

$$\psi_2' \left(\frac{\pi}{2} + \frac{b}{2} \right) = \psi_3' \left(\frac{\pi}{2} + \frac{b}{2} \right). \quad (3.24)$$

De la primera condición se obtiene:

$$A_1 \sin \lambda_n \left(\frac{\pi - b}{2} \right) = D \cosh \kappa_n \frac{b}{2}. \quad (3.25)$$

De la segunda condición se obtiene:

$$A_1 \sin \lambda_n \left(\frac{\pi - b}{2} \right) = D \cosh \kappa_n \frac{b}{2}. \quad (3.26)$$

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:

$$A_1 \lambda_n \cos \lambda_n \left(\frac{\pi - b}{2} \right) = -D \kappa_n \sinh \kappa_n \frac{b}{2}. \quad (3.27)$$

Para la última región:

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

Se obtiene la misma ecuación, por lo que haciendo el cociente entre las ecuaciones 3.26 y 3.28, obtenemos una ecuación trascendental para determinar λ_n .

$$\lambda_n \cot \lambda_n \left(\frac{\pi - b}{2} \right) = -\kappa_n \tanh \kappa_n \frac{b}{2}. \quad (3.29)$$

Cuya solución debe ser determinada de forma numérica. Estas soluciones para λ 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:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1. \quad (3.30)$$

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

$$\int_0^{\frac{\pi-b}{2}} (A_1 \sin \lambda_n x)^2 dx + \int_{\frac{\pi-b}{2}}^{\frac{\pi+b}{2}} (D \cosh \kappa_n (x - \frac{\pi}{2}))^2 dx + \int_{\frac{\pi+b}{2}}^{\pi} (A_1 \sin \lambda_n (\pi - x))^2 dx = 1. \quad (3.31)$$

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 λ , 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:

$$\psi_1\left(\frac{\pi}{2} - \frac{b}{2}\right) = \psi_2\left(\frac{\pi}{2} - \frac{b}{2}\right), \quad (3.32)$$

$$\psi_2\left(\frac{\pi}{2} + \frac{b}{2}\right) = \psi_3\left(\frac{\pi}{2} + \frac{b}{2}\right), \quad (3.33)$$

$$\psi_1'\left(\frac{\pi}{2} - \frac{b}{2}\right) = \psi_2'\left(\frac{\pi}{2} - \frac{b}{2}\right), \quad (3.34)$$

$$\psi_2'\left(\frac{\pi}{2} + \frac{b}{2}\right) = \psi_3'\left(\frac{\pi}{2} + \frac{b}{2}\right). \quad (3.35)$$

$$\int_0^{\frac{\pi-b}{2}} (A_2 \sin \lambda_n x)^2 dx + \int_{\frac{\pi-b}{2}}^{\frac{\pi+b}{2}} (C \sinh \kappa_n \left(\frac{\pi}{2} - x\right))^2 dx + \int_{\frac{\pi+b}{2}}^{\pi} (A_2 \sin \lambda_n (x - \pi))^2 dx = 1. \quad (3.36)$$

De las condiciones de continuidad obtendremos las siguientes ecuaciones:

$$A_2 \sin \lambda_n \left(\frac{\pi - b}{2}\right) = C \sinh \kappa_n \frac{b}{2}. \quad (3.37)$$

De la segunda condición se obtiene:

$$A_2 \sin \lambda_n \left(\frac{\pi - b}{2}\right) = C \sinh \kappa_n \frac{b}{2}. \quad (3.38)$$

De la tercera y cuarta condición se tiene:

$$A_2 \lambda_n \cos \lambda_n \left(\frac{\pi - b}{2}\right) = -C \kappa_n \cosh \kappa_n \frac{b}{2}. \quad (3.39)$$

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 λ_n , cuya expresión completa está expresada en el apéndice A. Ahora, si se dividen estas dos ecuaciones se obtiene la siguiente ecuación trascendental:

$$\lambda_n \cot \lambda_n \left(\frac{\pi - b}{2}\right) = -\kappa_n \coth \kappa_n \frac{b}{2}. \quad (3.40)$$

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:

$$\psi(x, \lambda_n) = \begin{cases} A_2 \sin \lambda_n x, & 0 < x < \frac{\pi}{2} - \frac{b}{2}, \\ -C \sinh \kappa_n \left(x - \frac{\pi}{2}\right), & \frac{\pi}{2} - \frac{b}{2} \leq x \leq \frac{\pi}{2} + \frac{b}{2}, \\ A_2 \sin \lambda_n (\pi - x), & \frac{\pi}{2} + \frac{b}{2} < x < \pi. \end{cases} \quad (3.41)$$

Una vez hecho este análisis es posible dar la función de onda, para este trabajo se consideraron dos números cuánticos, es decir, consideraremos que n va de 1 a 2, por lo tanto las funciones de onda para cada uno de estos valores están graficadas en la Fig. 2 y la

Fig. 3. 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 base ($n = 1$) 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).

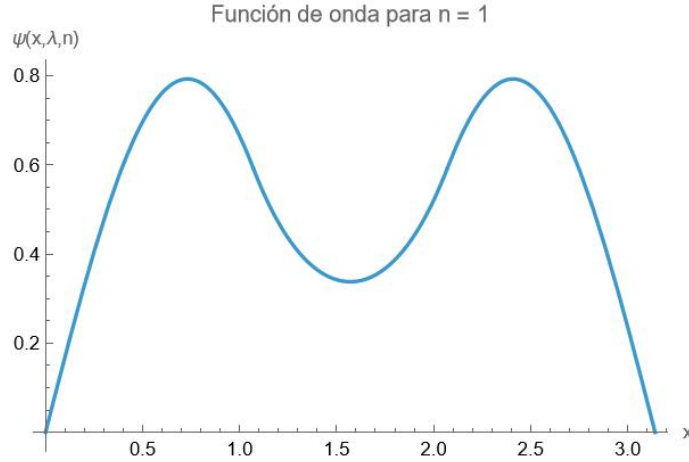


Figura 2: Función de onda para $n = 1$, $V_0 = 5$, $b = 1$.

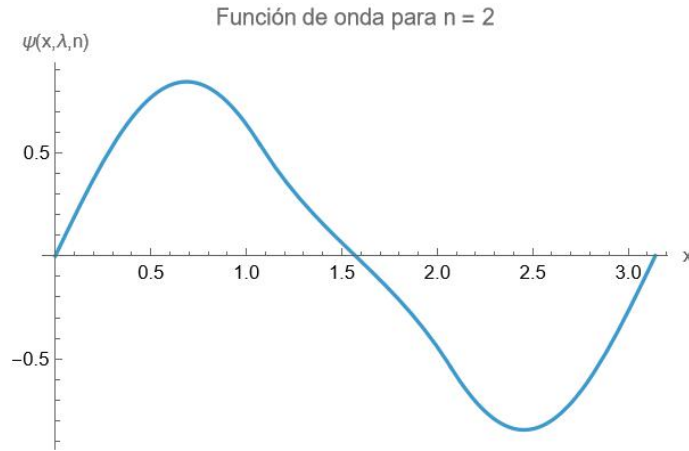


Figura 3: Función de onda para $n = 2$, $V_0 = 5$, $b = 1$.

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 que 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 tunelaje [17, 18], esta es una región en la que la probabilidad de encontrar la partícula en la región del escalón es diferente de cero, mientras que en el pozo cuadrado las funciones de onda están distribuidas en una región como podemos ver a continuación en la Fig. 4 y la Fig. 5.

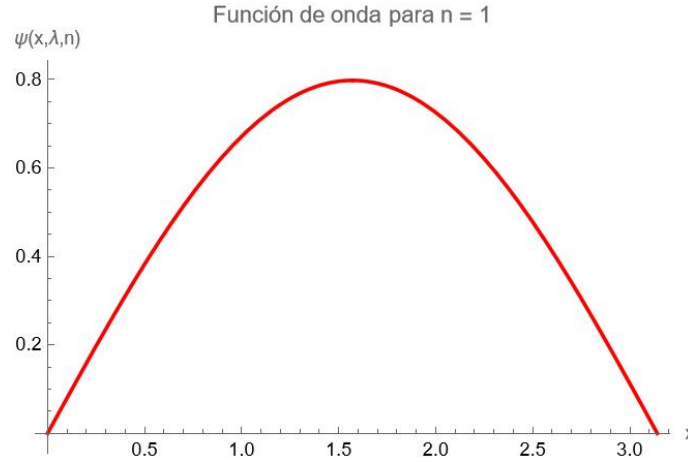


Figura 4: Función de onda en un pozo cuadrado para $n = 1$, $V_0 = 0$, $b = 0$.

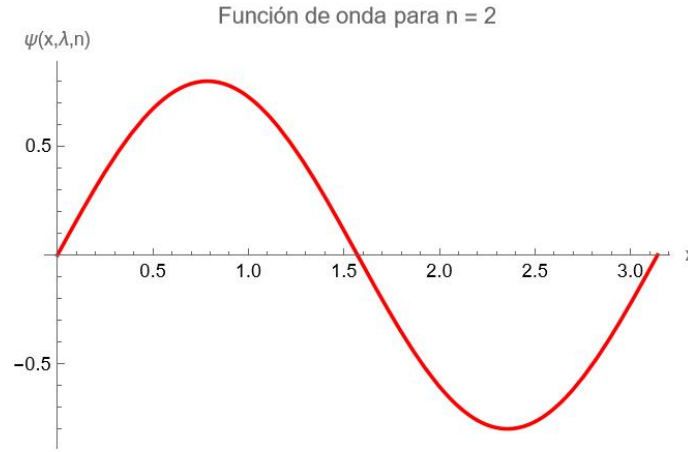


Figura 5: Función de onda en un pozo cuadrado para $n = 2$, $V_0 = 0$, $b = 0$.

Para $n = 1$ la función de onda presenta un solo lóbulo sin nodos internos (Fig. 4); para $n = 2$ aparece un nodo en el centro y dos lóbulos de signo opuesto (Fig. 5). 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.

La cuantificación del tunelaje se realiza directamente mediante la probabilidad de encontrar la partícula en la región del escalón, definida en la Ec. 3.42 como:

$$p(x, \lambda_n) = \int_{x_1}^{x_2} |\psi_n(x, \lambda_n)|^2 dx, \quad (3.42)$$

donde

$$x_1 = \frac{\pi}{2} - \frac{b}{2}, \quad x_2 = \frac{\pi}{2} + \frac{b}{2}.$$

Esta probabilidad refleja la penetración de la función de onda dentro de la barrera de potencial y representa directamente la capacidad que tiene la partícula para atravesar la barrera.

El valor de $p(x, \lambda_n)$ proporciona una medida cuantitativa del tunelaje, siendo sensible tanto a la altura V_0 como al ancho b de la barrera contenidos en λ_n . A medida que estas características del potencial varían, la probabilidad de encontrar la partícula en la barrera se modifica, reflejando la competencia entre la confinación impuesta por la barrera y la naturaleza ondulatoria de la partícula.

Dada la construcción de la función de onda del sistema, la entropía de Shannon para el estado n -ésimo de la función de onda se define como:

$$S_{\psi_n} = - \int_0^\pi |\psi_n(x, \lambda_n)|^2 \log |\psi_n(x, \lambda_n)|^2 dx, \quad (3.43)$$

donde el dominio de integración corresponde al intervalo $x \in [0, \pi]$. Esta expresión cuantifica la dispersión en la distribución espacial de probabilidad del estado cuántico n bajo las condiciones impuestas por el doble pozo cuadrado infinito. De este modo la Ec. 3.43 captura cómo la forma y extensión $\psi_n(x, \lambda_n)$, influenciada por el ancho b y la altura del escalón de potencial V_0 de la barrera, determinan la información contenida en la localización de la partícula¹.

3.1. Función de Wigner del sistema

Para construir la función de Wigner del problema lo hacemos mediante la siguiente definición:

$$W(x, p) = \frac{1}{\hbar\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x+y) \psi(x-y) e^{\frac{2ipy}{\hbar}} dy, \quad (3.44)$$

donde hay que redefinir los límites de integración para y en términos de x . Tendremos el siguiente conjunto de desigualdades que delimitan la integración para la función de Wigner:

No.	Desigualdad
(1)	$-x \leq y < \frac{\pi}{2} - \frac{b}{2} - x$
(2)	$\frac{\pi}{2} - \frac{b}{2} - x \leq y < \frac{\pi}{2} + \frac{b}{2} - x$
(3)	$\frac{\pi}{2} + \frac{b}{2} - x \leq y \leq \pi - x$
(4)	$x \geq y > -\left(\frac{\pi}{2} - \frac{b}{2} - x\right)$
(5)	$-\left(\frac{\pi}{2} - \frac{b}{2} - x\right) \geq y > x - \frac{\pi}{2} - \frac{b}{2}$
(6)	$-\left(x - \frac{\pi}{2} - \frac{b}{2}\right) \geq y \geq x - \pi$

Tabla 1: Desigualdades que delimitan la región de integración

Las desigualdades que aparecen en la Tabla. 1 generan el siguiente conjunto de rectas en la región en la que se encuentra definido el pozo de potencial y la función de onda.

¹Un estudio de la entropía de Shannon de la función de onda para el doble pozo puede encontrarse en la primera parte de este proyecto.

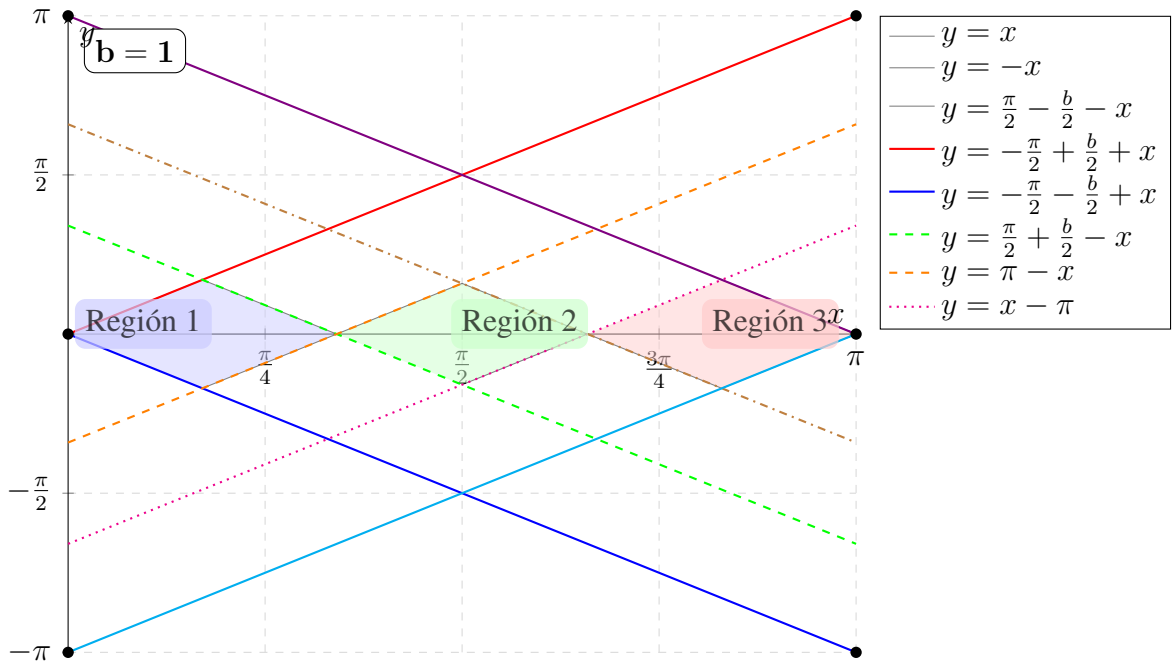


Figura 6: Rectas en el plano (x, y) que delimitan las regiones de integración para la función de Wigner asociada a un sistema con doble pozo cuadrado, donde las desigualdades indican los intervalos en los que la función de onda es distinta de cero.

La Fig. 6 muestra las 8 rectas que surgen de graficar las desigualdades en la Tabla. 1. Como podemos observar, estas rectas generan sobre el eje x tres regiones donde sabemos que la función de onda es distinta de cero. Como podemos ver las rectas $y = x$; $y = -x$ se intersectan con las rectas $y = \frac{\pi}{2} - \frac{b}{2} - x$; $y = -\frac{\pi}{2} + \frac{b}{2} + x$ en el punto $x = \frac{\pi-b}{4}$, lo cual define nuestra primera y segunda región de integración, es decir, entre $x = 0$ y $x = \frac{\pi-b}{4}$, $y \in [-x, x]$; entre $x = \frac{\pi-b}{4}$ y $x = \frac{\pi-b}{2}$, $y \in [-\frac{\pi}{2} + \frac{b}{2} + x, \frac{\pi}{2} - \frac{b}{2} - x]$. Por lo que las primeras dos integrales son de la siguiente forma ($\hbar = 1$):

$$W_1(x, p, \lambda_n) = \frac{1}{\pi} \int_{-x}^x \psi_1^*(x+y, \lambda_n) \psi_1(x-y, \lambda_n) e^{2ipy} dy, \quad (3.45)$$

$$W_2(x, p, \lambda_n) = \frac{1}{\pi} \int_{-\frac{\pi}{2} + \frac{b}{2} + x}^{\frac{\pi}{2} - \frac{b}{2} - x} \psi_1^*(x+y, \lambda_n) \psi_1(x-y, \lambda_n) e^{2ipy} dy, \quad (3.46)$$

Haciendo el análisis para las otras dos regiones delimitadas por las rectas en la Fig. 6 obtendremos las siguientes cuatro integrales:

$$W_3(x, p, \lambda_n) = \frac{1}{\pi} \int_{\frac{\pi}{2} - \frac{b}{2} - x}^{-\frac{\pi}{2} + \frac{b}{2} + x} \psi_2^*(x+y, \lambda_n) \psi_2(x-y, \lambda_n) e^{2ipy} dy, \quad (3.47)$$

$$W_4(x, p, \lambda_n) = \frac{1}{\pi} \int_{-\frac{\pi}{2} - \frac{b}{2} + x}^{\frac{\pi}{2} + \frac{b}{2} - x} \psi_2^*(x+y, \lambda_n) \psi_2(x-y, \lambda_n) e^{2ipy} dy, \quad (3.48)$$

$$W_5(x, p, \lambda_n) = \frac{1}{\pi} \int_{\frac{\pi}{2} + \frac{b}{2} - x}^{-\frac{\pi}{2} - \frac{b}{2} + x} \psi_3^*(x+y, \lambda_n) \psi_3(x-y, \lambda_n) e^{2ipy} dy, \quad (3.49)$$

$$W_6(x, p, \lambda_n) = \frac{1}{\pi} \int_{-(\pi-x)}^{\pi-x} \psi_3^*(x+y, \lambda_n) \psi_3(x-y, \lambda_n) e^{2ipy} dy, \quad (3.50)$$

Como se observa en estas integrales, la función de Wigner dependerá del número cuántico n , cada estado ligado en el doble pozo cuadrado tendrá una función de Wigner diferente.

Una vez obtenida la función de Wigner, se procede a construir la entropía de Shannon asociada a esta función que como ya se mencionó en la Secc. 2.3, está compuesta por tres términos en la Ec. 2.13

$$\begin{aligned} S_W = & - \int W_i^+(x, p) \log W_i^+(x, p) dx dp \\ & - \int W_i^-(x, p) \log W_i^-(x, p) dx dp - i\pi \int W_i^-(x, p) dx dp. \end{aligned} \quad (3.51)$$

Con esta construcción podemos pasar a analizar distintas cantidades como lo son la entropía de Shannon de la función de Wigner, la entropía de Shannon de la función de onda y la negatividad de la función de Wigner, en términos de los parámetros del sistema.

4. Dependencia paramétrica de las magnitudes

Comencemos por la entropía de Shannon de la función de onda para el primer estado $n = 1$, Fig. 2, y fijemos el valor del alto del potencial en $V = 5$ y $V = 20$. Al variar el ancho de la barrera b desde 0 a π . Cuando $b = 0$ tenemos un sistema de una partícula en una caja, de igual forma que cuando $b = \pi$, entonces es de esperar que los valores de entropía de Shannon de la función de onda coincidan en estos casos límite.

Con las Ecs. 3.43, y la Ec. 3.51 procedemos a calcular las entropías de Shannon de ambas funciones, la función de onda y la función de Wigner. Se observa que a medida que b aumenta desde cero, se observa inicialmente un crecimiento progresivo de la entropía, reflejando una mayor deslocalización espacial de la función de onda. Esta deslocalización espacial llega a un máximo alrededor de $b \approx 2.04$ tal como se muestra en la Fig. 7 coincidiendo con un máximo valor de interferencia en la función de onda generado por el alto del escalón central en el doble pozo, y posteriormente la función de onda empieza a localizarse a partir de este punto, ya que cuando la energía del sistema es igual al alto del escalón $E = V$ la función de onda empieza a localizarse progresivamente hasta alcanzar el valor inicial de entropía, esto está reflejado en la Fig. 7.

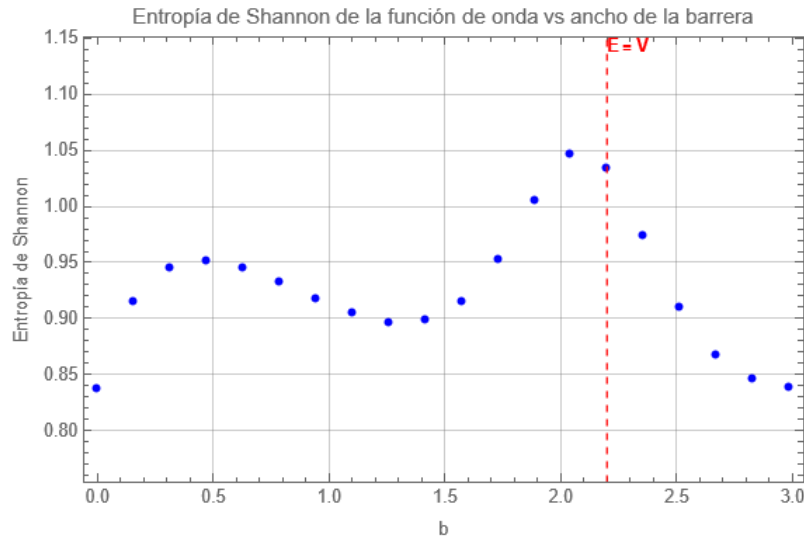


Figura 7: Entropía de Shannon para una partícula en el estado base en un doble pozo cuadrado de potencial con $V = 5$, en donde se observa el máximo valor de deslocalización alrededor de $b \approx 2.04$ donde la línea roja punteada indica el valor de b para el cual $E = V$.

Es de esperarse que en esta clase de sistemas se genere tunelaje [18,26], esta probabilidad se calcula mediante la Ec. 3.42. En este sistema el tunelaje aumenta conforme la energía y ancho del escalón de potencial aumenta. Esta probabilidad de tunelaje crece hasta un máximo que ocurre justo antes de que $E = V$, ya que en este punto la partícula se encontraría por encima de la barrera. En el punto máximo de tunelaje antes de que la energía sea igual al potencial la probabilidad de tunelaje es de alrededor de $p \approx 0.72$, reflejado en la Fig. 8.

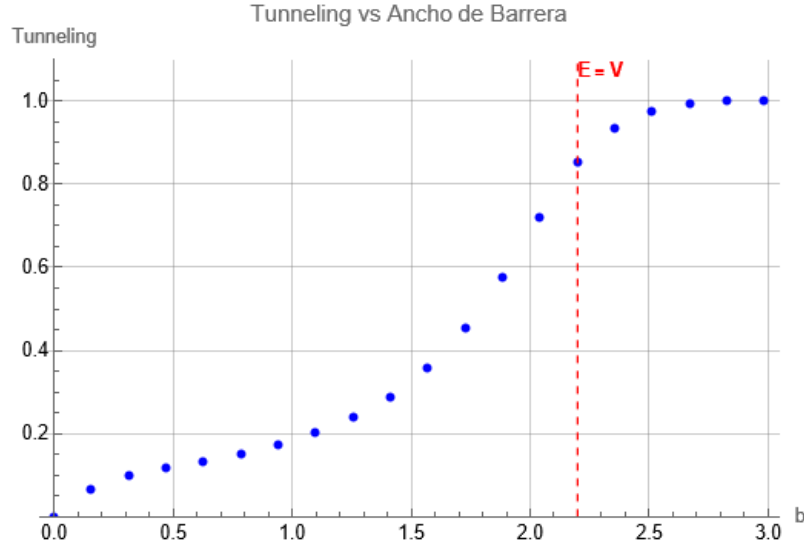


Figura 8: Tunelaje en función del ancho de la barrera de potencial, se observa que para el valor de b en el cual se tiene el máximo valor de probabilidad de tunelaje es $p \approx 0.72$ donde la línea roja punteada indica el valor de b para el cual $E = V$.

La parte real de la entropía de la función de Wigner en cambio, difiere de estos comportamientos observados en la función de onda, ya que la contribución de la entropía de Shannon aumenta hasta $b \approx 1.73$ y empieza a disminuir hasta un valor menor al inicial antes de empezar las variaciones de b . Para mostrar esto veamos el cambio en la entropía en función del ancho del escalón de potencial en la Fig. 9.

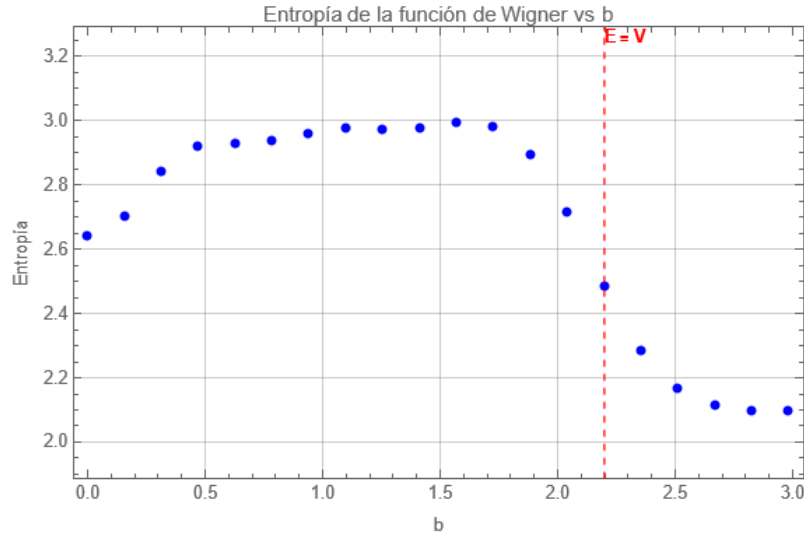


Figura 9: Entropía de la función de Wigner en función del ancho del escalón de potencial para el primer estado en el doble pozo cuadrado, con un valor del escalón de potencial de $V = 5$ donde la línea roja punteada indica el valor de b para el cual $E = V$.

Si bien la entropía de Shannon de la función de Wigner mostrada en la Fig. 9 no presenta un patrón que pueda ser identificable con las demás cantidades, la negatividad de la función de Wigner comparte máximos con la entropía de Shannon de la función de onda.

Cuando el ancho de la barrera genera una energía tal que $E = V$ esta función cubre ambos pozos al mismo tiempo, y la entropía mide esta distribución; en cambio la función de Wigner y su negatividad miden la interferencia generada entre estos pozos. En la Fig. 10 podemos observar esto.

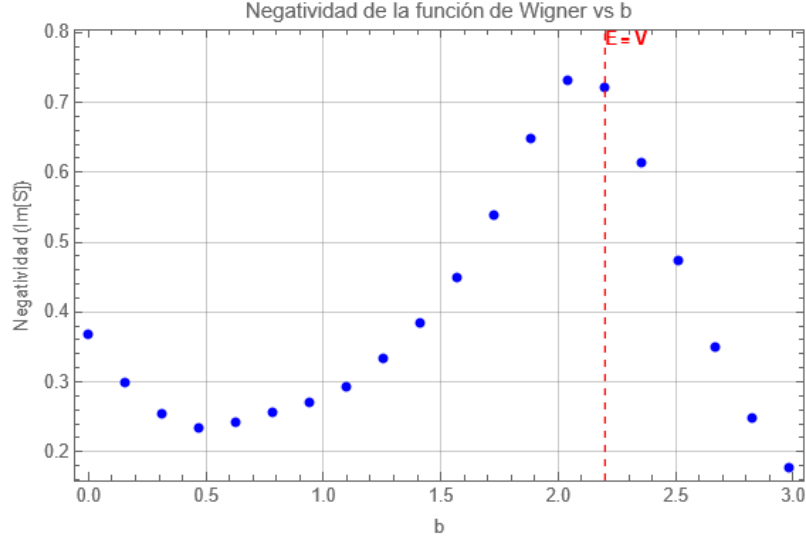


Figura 10: Negatividad de la función de Wigner del primer estado en función del ancho de la barrera de potencial, se observa un máximo compartido con la entropía de la función de onda alrededor de $b \approx 2.04$ para un alto del escalón de $V = 5$ donde la línea roja punteada indica el valor de b para el cual $E = V$.

Esto ocurre ya que la energía del estado base está por debajo de la barrera de potencial, esto implica que al variar el ancho de la barrera se genera interferencia al confinar la función de onda en los pozos generados en los extremos. Veamos como se comportan estas cantidades para $V = 20$.

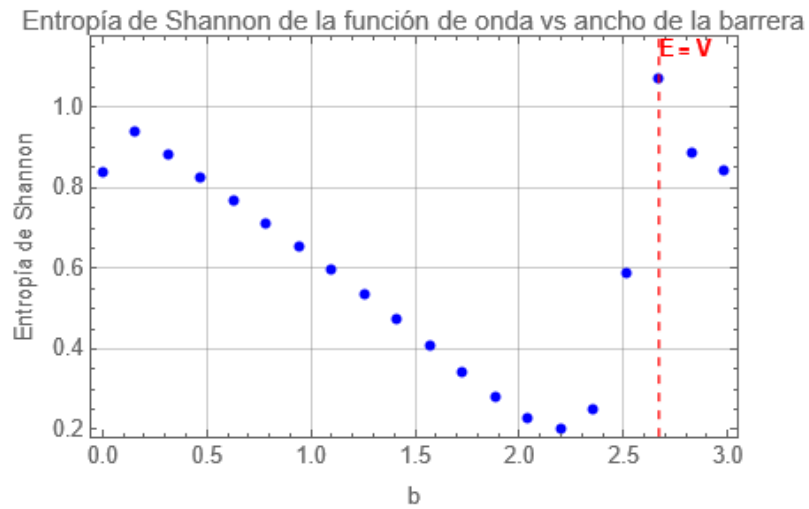


Figura 11: Entropía de Shannon de la función de onda del primer estado con variaciones del ancho del escalón de potencial b , para un valor del alto de potencial $V = 5$, en el cual se observa un máximo de entropía alrededor de $b \approx 2.67$ donde la línea roja punteada indica el valor de b para el cual $E = V$.

Vemos en la Fig. 11 que el máximo de entropía se recorre, conforme aumenta el valor de V , ahora el máximo de entropía ocurre en el mismo punto en el que coinciden E y V , posteriormente recuperamos el sistema de una partícula en una caja y el valor de entropía inicial es consistente con el valor final.

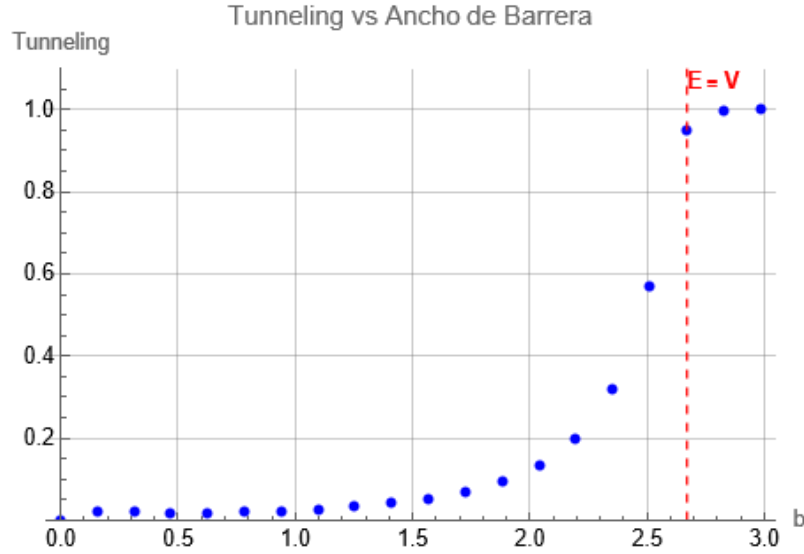


Figura 12: Tunelaje de la función de onda en función de b , donde la línea roja punteada indica el valor de b para el cual $E = V$, vemos que el valor máximo de tunelaje se da en $b \approx 2.51$ ya que en $E = V$ la partícula ya se encuentra por encima del escalón.

En este caso el máximo valor de tunelaje en la Fig. 12 ocurre alrededor de $b \approx 2.51$ lo cual es de esperarse dado el alto del escalón. De igual forma que para el valor anterior de V , la parte real de la entropía de Shannon no presenta un comportamiento que pueda ser identificado con alguna de las otras cantidades de interés del sistema, en la Fig. 13 se observa esta entropía.

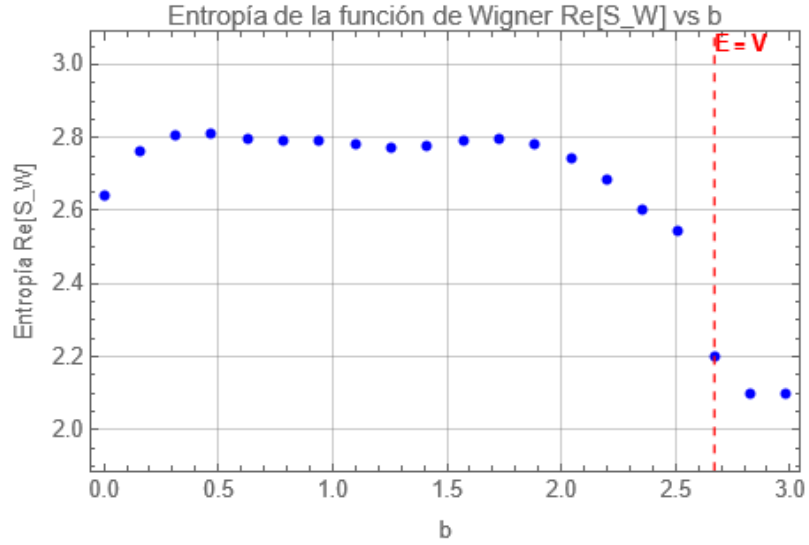


Figura 13: Entropía de Shannon de la función de Wigner para el estado base en función del ancho del escalón de potencial b , donde la línea roja punteada indica el valor de b para el cual $E = V$, para un valor del alto del escalón $V = 20$, no se observa ningún patrón que coincida con las otras cantidades.

En este caso la negatividad de la función de Wigner comparte el máximo valor en el mismo punto en que la probabilidad de tunelaje es máxima, lo cuál indica que la negatividad está siendo maximizada en los puntos de máxima probabilidad de tunelaje. Esto lo podemos observar en la Fig. 14.

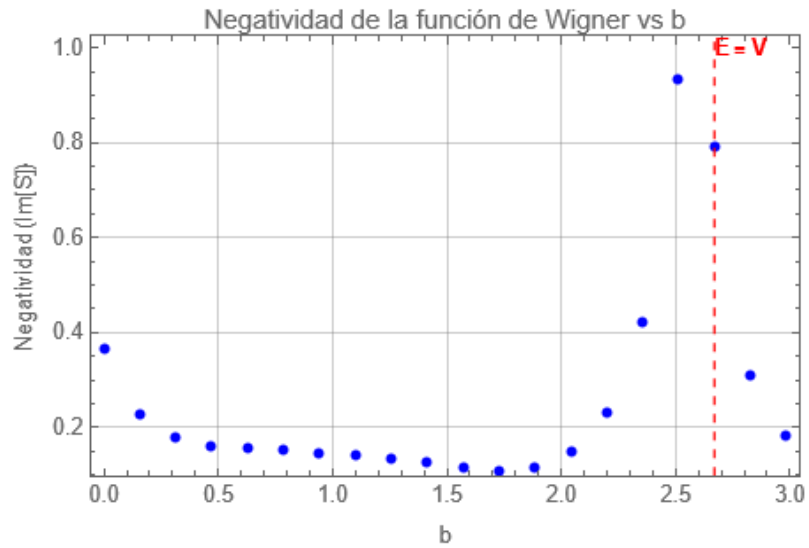


Figura 14: Negatividad de la función de Wigner del estado base en función del ancho del escalón de potencial b , donde la línea roja punteada indica el valor de b para el cual $E = V$, para un alto del escalón $V = 20$, el máximo valor de negatividad ocurre en $b \approx 2.51$.

Al comparar el comportamiento del sistema para $V = 5$ y $V = 20$, se observa que, aunque las tendencias generales se conservan, la posición de los máximos de las distintas

cantidades se desplaza de forma significativa. Para $V = 5$, la entropía de Shannon de la función de onda alcanza su valor máximo en $b \approx 2.04$, antes de que se cumpla la condición $E = V$, ya que esta se cumple en $b \approx 2.20$, Fig. 7 y 8. Esto indica que la máxima deslocalización espacial de la partícula ocurre aún cuando hay presencia de tunelaje, ya que este máximo en la entropía coincide con el máximo valor de probabilidad de tunelaje p antes de que la partícula haya sobrepasado la barrera. En cambio, para $V = 20$, este máximo de entropía se traslada hasta $b \approx 2.67$, coincidiendo con el punto en el que $E = V$, Fig. 11, sin embargo podemos observar que la probabilidad máxima de tunelaje se encuentra en $b \approx 2.51$ en la Fig. 12. Este desplazamiento sugiere que al aumentar la altura de la barrera, se requiere un mayor ancho de la barrera para alcanzar el estado de máxima deslocalización, y que en este caso la transición entre el tunelaje y la partícula libre por encima de la barrera está más estrechamente asociada al incremento de la entropía espacial.

La entropía real de la función de Wigner en la Fig. 9 y Fig. 13, por su parte, mantiene un comportamiento distinto en ambos escenarios, sin seguir de forma directa las variaciones de la entropía de la función de onda ni de la probabilidad de tunelaje. Esto se debe a que incorpora información de correlaciones posición-momento, capturando la complejidad de la estructura en el espacio de fases más allá de la mera extensión espacial de la densidad. Así, los máximos y mínimos en esta magnitud no coinciden necesariamente con los puntos de máxima deslocalización, sino con configuraciones particulares en las que las coherencias cuánticas se organizan de manera diferente.

En cambio, la negatividad de la función de Wigner en la Fig. 10 y Fig. 14 muestra una correlación más clara con el fenómeno de tunelaje. Para $V = 5$, sus máximos coinciden con los de la entropía de la función de onda, reflejando que la interferencia que produce la deslocalización también intensifica las regiones negativas en el espacio de fases. Para $V = 20$, la negatividad alcanza su valor máximo en $b \approx 2.51$, coincidiendo con el punto de máxima probabilidad de tunelaje. Esto indica que, cuando la transferencia coherente de probabilidad entre los pozos es más intensa, la no clasicidad del estado medida por la negatividad también es máxima.

Para el segundo estado cuántico en el doble pozo, se realizaron las mismas variaciones, es decir, se fijó un valor del alto de potencial de $V = 5$, 20 y se realizaron variaciones del ancho del escalón de potencial. mostrando que de igual forma el comportamiento de la entropía de Shannon tanto para la función de onda como para la función de Wigner difieren.

En este caso los máximos y mínimos de entropía de la función de onda y el valor $E = V$ no coinciden, ya que al ser el segundo estado más energético, este tiende a saltar por encima de la barrera de potencial para menores valores de b , en este caso esto ocurre alrededor de $b \approx 1.88$, este valor de b tampoco coincide con el máximo valor de entropía ni con el mínimo de la misma. Esto lo podemos ver reflejado en la Fig. 15.

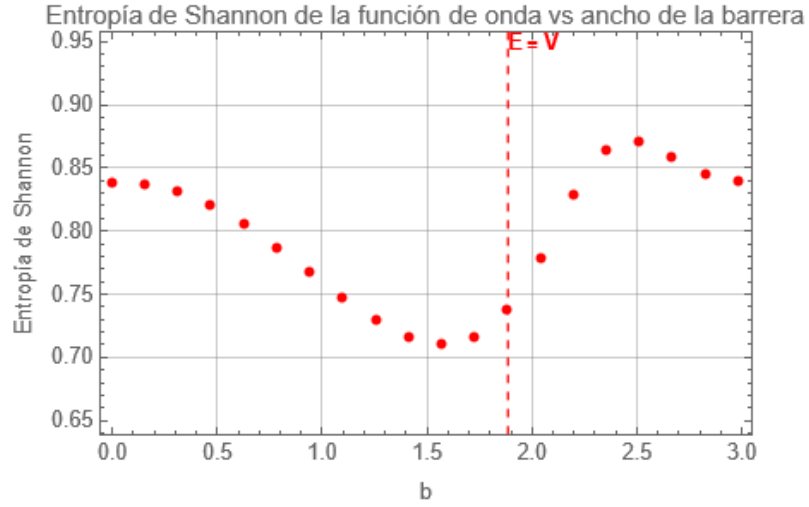


Figura 15: Entropía de la función de onda para el segundo estado, $n = 2$, en función del ancho del escalón de potencial b , donde la línea roja punteada indica el valor de b para el cual $E = V$, con un valor del alto del escalón de $V = 5$. Se tiene un máximo en $b \approx 2.51$.

Por otro lado, la entropía de la función de Wigner para este estado presenta un máximo en $b \approx 1.88$, que como ya se mencionó es el punto en el que E es muy cercano a V . Esto se puede observar en la Fig. 16, donde vemos un comportamiento creciente de la entropía desde $b = 0$ hasta $b = 1.88$ para posteriormente decrecer.

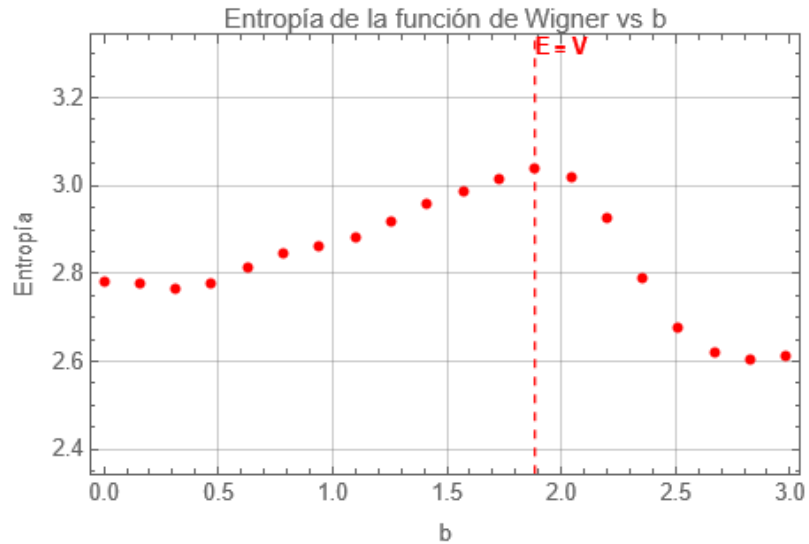


Figura 16: Entropía de la función de Wigner del segundo estado, $n = 2$, en función del ancho del escalón de potencial b donde la línea roja punteada indica el valor de b para el cual $E = V$, para un alto del escalón de potencial de $V = 5$.

En este caso el máximo valor de tunelaje se da en $b \approx 1.73$ y no presenta ningún patrón identificable con alguna otra cantidad, esto lo podemos ver en la Fig. 17.

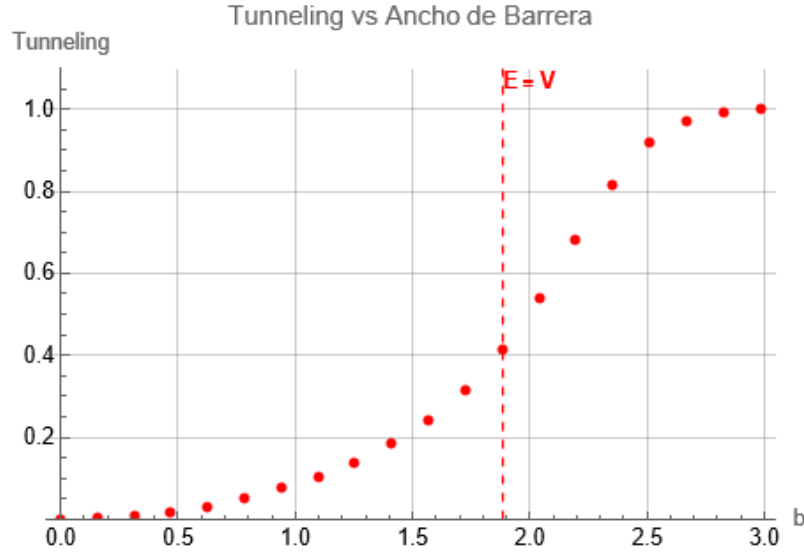


Figura 17: Tunelaje de la función de onda del segundo estado $n = 2$ en función del ancho del escalón b , donde la línea roja punteada indica el valor de b para el cual $E = V$. Vemos que el valor máximo de tunelaje se da en $b \approx 1.73$ ya que en $E = V$ la partícula ya se encuentra por encima del escalón.

La negatividad de la función de Wigner de este estado también comparte el máximo con la entropía de Shannon, es decir, se encuentra localizado en $b \approx 2.51$, y es un máximo que comparte con el primer estado para un valor de $V = 20$, ver Fig. 18.

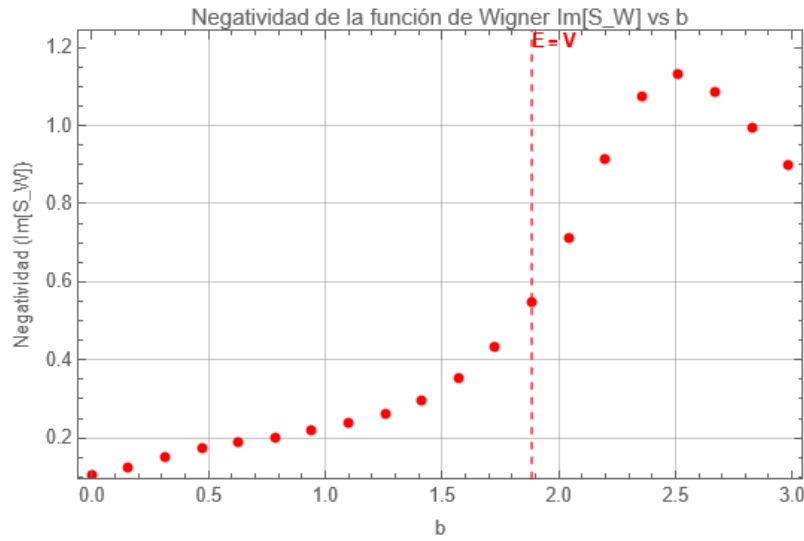


Figura 18: Negatividad de la función de Wigner del segundo estado, $n = 2$, en función del ancho del escalón de potencial b , donde la línea roja punteada indica el valor de b para el cual $E = V$, para un alto del escalón $V = 5$, el máximo valor de negatividad ocurre en $b \approx 2.51$.

Para este mismo estado pero con un alto del escalón de $V = 20$, se obtuvieron las gráficas en la Fig. 19 a la Fig. 22.

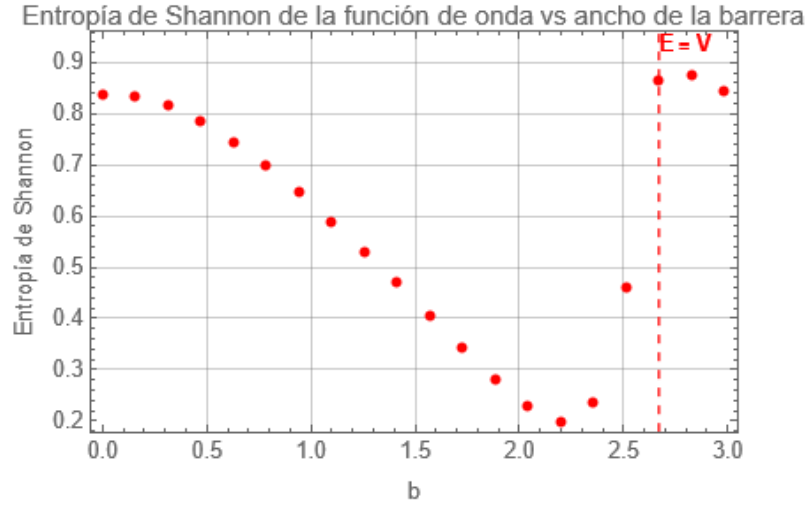


Figura 19: Entropía de la función de onda para el segundo estado, $n = 2$, en función del ancho del escalón de potencial b , donde la línea roja punteada indica el valor de b para el cual $E = V$, con un valor del alto del escalón de $V = 20$. Se tiene un máximo en $b \approx 2.83$.

Para este caso podemos ver que el máximo valor de entropía ocurre en $b \approx 2.83$, y se encuentra más allá de $E = V$, de modo que podemos decir que el máximo valor de deslocalización espacial ocurre cuando la partícula ha sobrepasado el alto del escalón de potencial. La entropía de la función de Wigner en función del ancho del escalón, presenta un comportamiento similar al del estado base, es decir, no tiene un comportamiento que pueda ser asociado a alguna otra cantidad, esto puede verse en la Fig. 20.

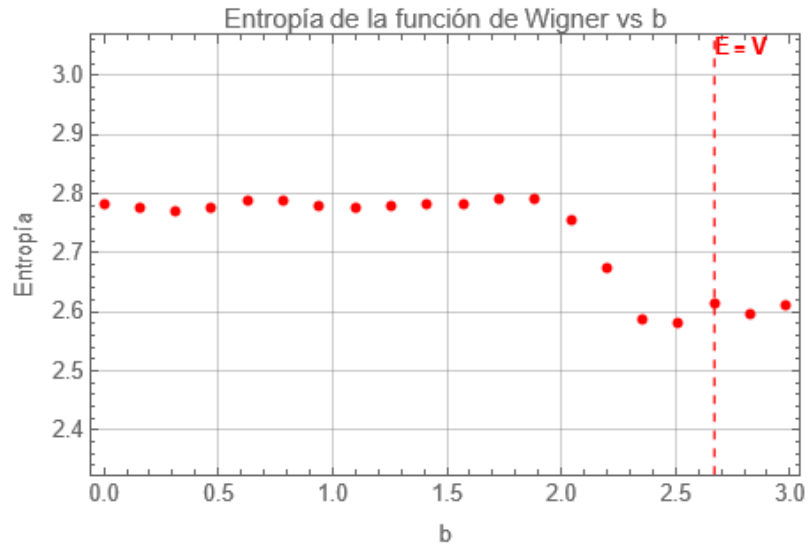


Figura 20: Entropía de la función de Wigner del segundo estado, $n2$, en función del ancho del escalón de potencial b , donde la línea roja punteada indica el valor de b para el cual $E = V$, con un valor del alto de potencial de $V = 20$ en el que se observa un máximo en $b \approx 1.89$.

Vemos que el máximo en la entropía ocurre en $b \approx 1.89$, y posteriormente decrece, pero no coincide con el valor máximo de la entropía de Shannon de la función de onda. ni

coincide tampoco con el valor máximo de tunelaje, ya que como podemos ver en la Fig. 21 la probabilidad de tunelaje se mantiene menor a 0.2 hasta $b \approx 2.20$ y alcanza su valor máximo en $b \approx 2.51$.

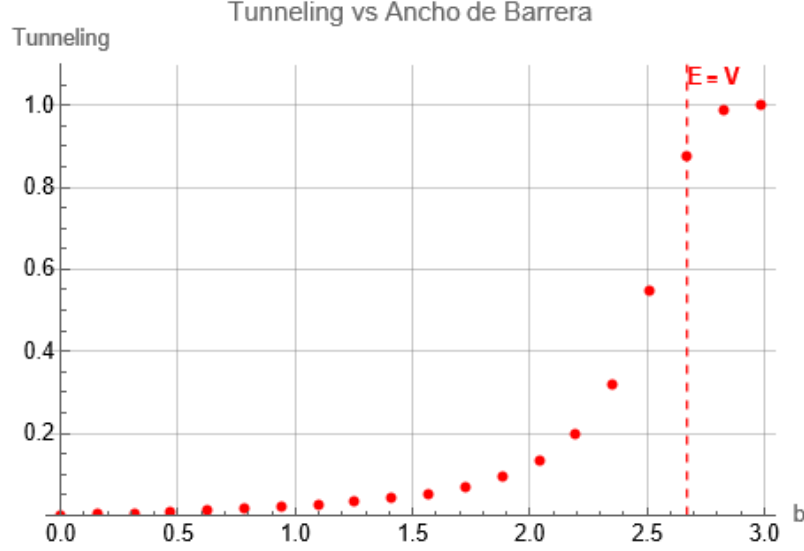


Figura 21: Tunelaje de la función de onda en función de b , donde la línea roja punteada indica el valor de b para el cual $E = V$. Vemos que el valor máximo de tunelaje se da en $b \approx 2.51$ ya que en $E = V$ la partícula ya se encuentra por encima del escalón.

En este caso la negatividad de la función de Wigner, es menor a 0.2 en casi todo el intervalo, es en $b \approx 2.04$ que empieza a aumentar hasta alcanzar su máximo en $b \approx 2.67$, esto lo podemos ver en la Fig. 22.

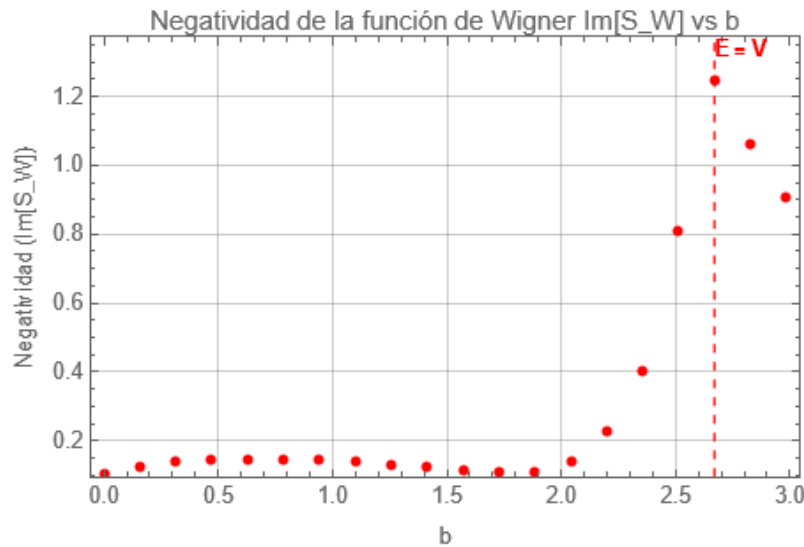


Figura 22: Negatividad de la función de Wigner del segundo estado en función del ancho del escalón de potencial, para un alto del escalón $V = 5$, el máximo valor de negatividad ocurre en $b \approx 2.67$.

En el caso del segundo estado cuántico, el incremento de energía modifica de forma notable la relación entre las distintas cantidades analizadas, en comparación con el estado base.

Para $V = 5$, el cruce $E = V$ ocurre en $b \approx 1.88$, un valor que se encuentra claramente separado de los máximos de entropía de Shannon de la función de onda y de la negatividad de la función de Wigner en la Fig. 15 y la Fig. 18 respectivamente. Esto implica que, a diferencia del estado base, la deslocalización espacial máxima de la función de onda no está directamente asociada ni con la condición de resonancia energética ($E \approx V$) ni con la máxima interferencia cuántica entre pozos. El hecho de que el segundo estado sea más energético provoca que la partícula pueda superar la barrera para valores más pequeños de b , lo que desplaza y desacopla los máximos de estas magnitudes. Además, la entropía de la función de Wigner muestra un máximo justamente en el punto $E = V$ en la Fig. 16, lo que sugiere que este formalismo es más sensible a la transición entre estados por debajo y por encima de la barrera que la entropía calculada a partir de la función de onda. El tunelaje, en cambio, alcanza su máximo en $b \approx 1.73$ en la Fig. 17, lo que indica que su crecimiento y disminución responden a un mecanismo diferente al de la deslocalización o la interferencia medida por la negatividad. Sin embargo, la negatividad para este caso de $V = 5$ coincide en su máximo con el de la entropía de Shannon de la función de onda, lo cual puede observarse en la Fig. 18 y Fig. 15 respectivamente, lo que apunta a que, aunque los mecanismos físicos que modulan estas cantidades sean distintos, existe una conexión entre la maximización de la interferencia cuántica y la deslocalización espacial en este régimen de baja altura de barrera.

Para $V = 20$, el panorama es aún más contrastante. El máximo de la entropía de Shannon de la función de onda se desplaza hasta $b \approx 2.83$, Fig. 19, un valor claramente superior al correspondiente a $E = V$ ($b \approx 2.67$), lo que confirma que la mayor deslocalización se produce cuando la partícula ha sobrepasado la barrera y puede distribuirse libremente por todo el sistema. Por otro lado, la entropía de Shannon de la función de Wigner en la Fig. 20 presenta un máximo en $b \approx 1.89$, evidenciando nuevamente su sensibilidad a la transición $E \approx V$. En este caso, el tunelaje en la Fig. 21 permanece bajo (menor a 0.2) hasta $b \approx 2.20$, alcanzando su máximo en $b \approx 2.51$, lo que sugiere que la probabilidad de encontrar a la partícula dentro de la barrera crece más lentamente en presencia de una barrera alta y ancha. Finalmente, la negatividad de la función de Wigner en la Fig. 22, que se mantiene reducida en gran parte del rango, empieza a incrementarse en $b \approx 2.04$ y alcanza su máximo en $b \approx 2.67$, sin coincidir con ninguno de los picos de las otras cantidades. Este comportamiento indica que, para un estado excitado en presencia de una barrera alta, la interferencia cuántica significativa surge principalmente cuando la partícula se encuentra bien por encima de la barrera, y no en el umbral de cruce energético.

En conjunto, el análisis del segundo estado muestra que la relación entre deslocalización (entropía de Shannon de la función de onda), interferencia cuántica (negatividad) y transición de régimen ($E \approx V$) es mucho menos directa que en el estado base. La energía más alta provoca que la partícula cruce la barrera antes de que se maximicen las demás propiedades, y la altura de la barrera modula de manera diferenciada los puntos de máximo para cada cantidad. Esto sugiere que, mientras en el estado base existe una correlación más clara entre estos indicadores, en estados excitados el desacoplamiento es la norma, y la función de Wigner revela de forma más precisa la sensibilidad del sistema a la transición $E \approx V$, mientras que la función de onda captura mejor la deslocalización global del estado.

Cuando se comparan los resultados para los tres primeros estados, se observa un cambio progresivo en la relación entre las cantidades estudiadas. En el estado base ($n = 1$), los máximos de entropía, probabilidad de tunelaje y negatividad de la función de Wigner se alinean de forma clara alrededor del punto $E \approx V$. Esto sugiere que, en este régimen, la deslocalización cuántica, la interferencia y el cruce energético están fuertemente acoplados, describiendo la transición de un estado localizado a uno deslocalizado.

En el segundo estado ($n = 2$), esta coincidencia comienza a romperse. Si bien la entropía de Shannon de la función de onda sigue mostrando un máximo cerca del cruce $E \approx V$, los picos de la negatividad y la probabilidad de tunelaje se desplazan a valores distintos de b . Esto indica que, para estados excitados, la interferencia cuántica no necesariamente se maximiza en el umbral de cruce energético, sino que responde a una estructura nodal más compleja de la función de onda, la cual interactúa de manera diferente con la barrera de potencial.

De nuestro estudio de estados superiores se obtuvo que en el tercer estado ($n = 3$), el patrón se degrada aún más. Aquí, las entropías y la negatividad presentan irregularidades numéricas y carecen de suavidad como funciones de los parámetros, llegando incluso a asignar valores diferentes para un mismo valor de b . Esto no solo refleja limitaciones numéricas, sino también una creciente sensibilidad del sistema: al aumentar n , la función de onda presenta más nodos y regiones de interferencia, lo que amplifica la dependencia de las cantidades cuánticas frente a pequeñas variaciones de parámetros y a la resolución numérica empleada. Estas cantidades se pueden visualizar en el Apéndice B.

En conjunto, estos resultados muestran que la relación clara entre las magnitudes estudiadas, presente en el estado base, se diluye conforme aumenta el número cuántico. En estados excitados, la física del doble pozo se vuelve más rica pero también más difícil de caracterizar con un único indicador, y la interpretación de la función de Wigner y sus medidas derivadas requiere considerar la estructura de la función de onda y la sensibilidad numérica inherente a estos sistemas.

5. Conclusiones

El presente trabajo tuvo como objetivo estudiar la relación entre la distribución espacial de los estados cuánticos en un potencial de doble pozo y medidas asociadas a su comportamiento cuántico. Para ello, se resolvió la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para obtener las funciones de onda correspondientes a los primeros estados del sistema, a partir de las cuales se calcularon: la función de onda, la función de Wigner, la entropía de Shannon de la función de onda, la entropía de Shannon de la función de Wigner, la probabilidad de tunelaje y la negatividad de la función de Wigner. Estas medidas permiten, respectivamente, evaluar el grado de localización o deslocalización espacial, la capacidad de la partícula de atravesar la barrera de potencial, y la presencia de interferencia cuántica.

El análisis se enfocó en determinar cómo varían estas magnitudes en función de los parámetros del sistema, particularmente la altura V y el ancho b de la barrera, y en identificar posibles correlaciones entre ellas. En el primer estado del doble pozo de potencial, el análisis mostró que el máximo de entropía de Shannon de la función de onda se desplaza con el aumento de V hasta coincidir con el punto donde $E \approx V$. En ese mismo régimen, la probabilidad de tunelaje y la negatividad de la función de Wigner presentan máximos coincidentes, lo que indica una clara correlación entre la capacidad de la partícula para atravesar la barrera y la presencia de interferencia cuántica no clásica (negatividad de Wigner). Sin embargo, la entropía de Shannon de la función de Wigner no mostró patrones claros que pudieran asociarse a las otras magnitudes.

En el segundo estado, los resultados mantienen la correlación entre máximos de negatividad y tunelaje, pero la posición de dichos máximos cambia respecto al primer estado, en parte porque la función de onda ya no está tan confinada y presenta un carácter más extendido. Esto implica que la relación entre el punto de máxima interferencia cuántica y las condiciones geométricas del potencial depende fuertemente del número cuántico.

En el tercer estado, las irregularidades numéricas en las entropías y la negatividad, así como su falta de comportamiento suave frente a los parámetros, sugieren que la naturaleza del estado es más compleja. La energía elevada favorece un estado más extendido, lo que reduce la localización espacial y hace que pequeñas variaciones numéricas o de parámetros tengan un efecto notable en las cantidades calculadas. Estas fluctuaciones pueden deberse tanto a la naturaleza del estado como a limitaciones en la resolución numérica o el método de integración.

Es importante remarcar que el objetivo de este estudio era poder hacer el análisis de un sistema de dos partículas indistinguibles en este sistema, ya fueran bosónicas o fermiónicas, pero dada la complejidad de este problema, no fue posible alcanzar este objetivo que resultó ser desafiante.

En conjunto, el estudio muestra que existe una correlación robusta entre la probabilidad de tunelaje y la negatividad de la función de Wigner para los estados analizados, especialmente en los regímenes donde la energía E se aproxima o supera a la altura del potencial V . Asimismo, la entropía de Shannon de la función de onda logra capturar transiciones geométricas claras en el sistema, mientras que la entropía asociada a la función de Wigner

no presenta patrones universales. Por otro lado, se observa que a mayor número cuántico los estados tienden a comportarse de manera más extendida, mostrando menor sensibilidad a la barrera en términos de localización, pero exhibiendo una mayor complejidad en los patrones de interferencia cuántica, lo que puede dar lugar a resultados numéricamente irregulares.

Cabe señalar que, inicialmente, se contempló extender el análisis hacia un sistema de dos partículas indistinguibles ya fueran bosónicas o fermiónicas confinadas en el doble pozo de potencial. Sin embargo, la complejidad matemática y computacional que implica este problema excedió el alcance del presente trabajo, convirtiéndose en un reto que deberá abordarse en investigaciones posteriores.

A. Constantes de normalización

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

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

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

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

B. Gráficas

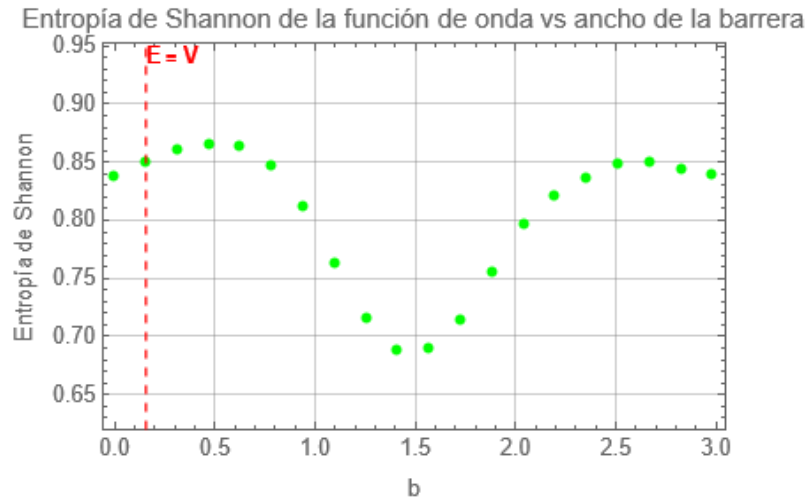


Figura 23: Entropía para una partícula del tercer estado, $n = 3$, en función del ancho de barrera b , y un alto del escalón de potencial de $V = 5$, si bien es una función bien comportada, no es posible establecer una correspondencia entre la entropía como una medida de deslocalización al variar el ancho del escalón y analizar al mismo tiempo el tunelaje ya que la partícula sube la barrera para valores muy pequeños de b .

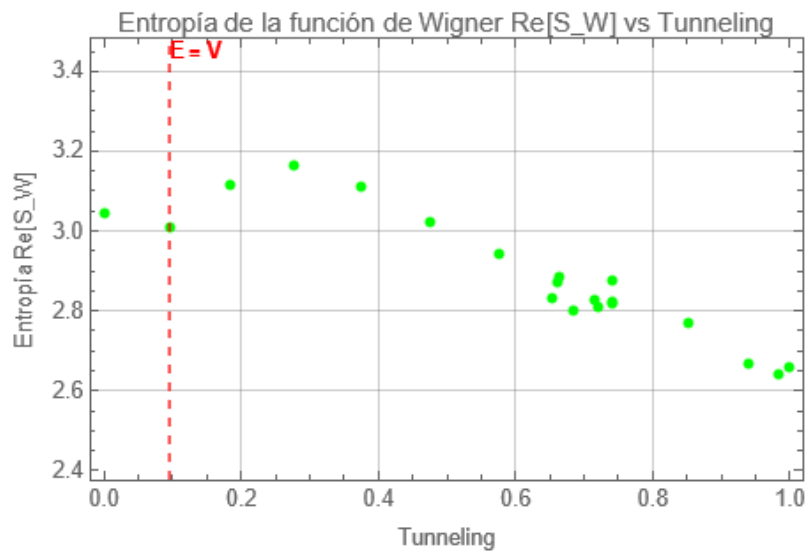


Figura 24: Entropía de la función de Wigner del tercer estado en función del tunelaje, en este caso se observa que existe una región en la que no es posible establecer un comportamiento claro, ya que la probabilidad de tunelaje no tiene sentido a partir de $E = V$, ya que la partícula experimenta interacción con el alto del escalón.

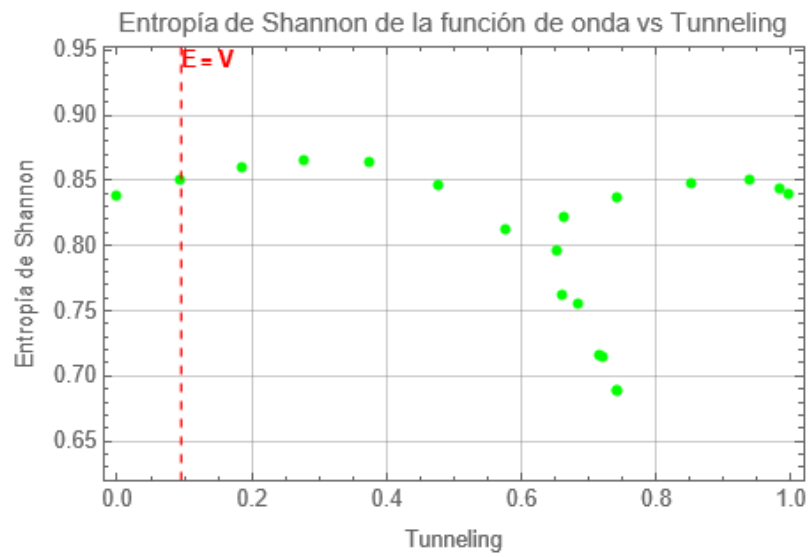


Figura 25: Entropía de Shannon de la función de onda en función del tunelaje, para el tercer estado $n = 3$ y $V = 5$, se hace énfasis en el hecho de que el tunelaje, no tiene sentido cuando $E = V$ ya que como se mencionó la partícula en ese punto deja de estar por debajo de la barrera.

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.
3. Zettili, 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.
7. Foot, C. J., Shotton, 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.
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.
19. Wigner, E. P. (1932). On the quantum correction for thermodynamic equilibrium. *Physical Review*, 40(5), 749.
20. Heisenberg, W. (1927). Über den anschaulichen Inhalt der quantentheoretischen Kinematik und Mechanik. *Zeitschrift für Physik*, 43(1-2), 172-198.
21. Laguna, H. G., & Sagar, R. P. (2010). Shannon Entropy of the Wigner Function and Position-Momentum Correlation in Model Systems. *International Journal of Quantum Information*, 8(7), 1089–1100.
22. Kenfack, A., & Życzkowski, K. (2004). Negativity of the Wigner function as an indicator of non-classicality. *Journal of Optics B: Quantum and Semiclassical Optics*, 6(10), 396–404.
23. Gerry, C.G. and Knight, P.L. (2005) *Introductory Quantum Optics*. Cambridge University Press, Cambridge.
24. Albarelli, F., Genoni, M. G., Paris, M. G. A., & Ferraro, A. (2018). Resource theory of quantum non-Gaussianity and Wigner negativity. *Physical Review A*, 98(5), 052350.
25. Veitch, V., Mousavian, S. A. H., Gottesman, D., & Emerson, J. (2014). The resource theory of stabilizer quantum computation. *New Journal of Physics*, 16(1), 013009.
26. F. Hund, *Z. Phys.* 40, 742 (1927). F. Hund, *Z. Phys.* 43, 805 (1927).
27. R. H. Fowler, L. Nordheim, (1928), *Proc. R. Soc. London, Ser. A* 119, 173.
28. L. Esaki, (1974). Long journey into tunneling, disintegration, *Proc. of the Nature* 123, IEEE, 62, 825.
29. I. Giaever, (1960). Energy Gap in Superconductors Measured by Electron Tunneling, *Phys. Rev. Letters*, 5, 147-148.
30. B. D. Josephson, *Phys. Lett.* 1, 251 (1962); B.D. Josephson, The discovery of tunneling supercurrent, *Science*, 184, 527 (1974).
31. I. Białynicki-Birula and J. Mycielski. (1975) Uncertainty relations for information entropy in wave mechanics, *Communications in Mathematical Physics*, vol. 44, no. 2, pp. 129–132.