

00323

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA
DE MÉXICO

14



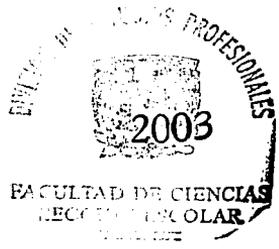
FACULTAD DE CIENCIAS

DECAIMIENTO CUANTICO DE ESTADOS DE MINIMA
INCERTIDUMBRE.

T E S I S
QUE PARA OBTENER EL TITULO DE
F I S I C O
P R E S E N T A :
SERGIO ARTURO CORDERO REYES



DIRECTOR DE TESIS: DR. GASTON GARCIA CALDERON



TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

I



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.



UNIVERSIDAD NACIONAL
AUTÓNOMA DE
MÉXICO

**TESIS CON
FALLA DE ORIGEN**

DRA. MARÍA DE LOURDES ESTEVA PERALTA
Jefa de la División de Estudios Profesionales de la
Facultad de Ciencias
Presente

Comunicamos a usted que hemos revisado el trabajo escrito:
"Decaimiento Cuántico de Estados de Mínima Incertidumbre"

realizado por Cordero Reyes Sergio Arturo
con número de cuenta 97568278 , quién cubrió los créditos de la carrera de Física.
Dicho trabajo cuenta con nuestro voto aprobatorio.

Atentamente

Director de Tesis
Propietario

Dr. Gastón García Calderón

Propietario

Dr. José Francisco Récamier Angelini

Propietario

Dr. Salvador Godoy Salas

Suplente

Dr. Jaime Besprosvany Fridzon

Suplente

M. en C. Mirna Villavicencio Torres

Recomienda a Tesis
Dr. José Francisco Récamier Angelini

Mirna Villavicencio Torres

Consejo Departamental de Física

DRA. PATRICIA GOLDSTEIN MENACHE
Coordinadora de Licenciatura

**Decaimiento Cuántico
de Estados de
Mínima Incertidumbre**

Sergio Arturo Cordero Reyes

Agradecimientos

Quiero agradecer principalmente a mis padres José Cordero y Rosa Ma. Reyes por el apoyo incondicional que me han dado, lo cual me ha permitido llegar a esta etapa.

Especialmente agradezco por la motivación y cariño durante este tiempo que me han dado mi esposa Silvia A. e hijo J. Arturo y mis hermanos Claudia y Luis.

A los profesores: Dr. Gastón García Calderón, Dr. Salvador Godoy Salas, Dr. Francisco Medina Nicolau, Dr. Matías Moreno Yntriago, Dr. Jefferson King Dávalos entre otros, quienes directa o indirectamente me han motivado a forjar mis metas con su ejemplo y dedicación, sobre todo al Dr. Gastón al cual le agradezco sus valiosas discusiones para llegar a concluir este trabajo.

Sergio A. Cordero

*A: José Arturo, Gabriela
y Luis Enrique,
por ser los pilares de mi vida.*

Índice general

1. Introducción	1
2. Formalismo	3
2.1. Solución de la ecuación de Schrödinger	3
2.2. Decaimiento	5
2.3. Determinación de los residuos de los polos de la función de Green	7
2.4. Desarrollo discreto de la función de Green dependiente del tiempo	10
2.5. Función de onda, probabilidades de supervivencia y no escape	12
2.6. Desarrollo asintótico de $ \Psi(r, t) ^2$, $P(t)$ y $S(t)$	14
3. Modelo	17
3.1. Cálculo de los estados resonantes	17
3.2. Cálculo numérico de los polos complejos de la función de Green	19
4. Decaimiento de estados iniciales de la caja infinita	24
4.1. Cálculo del coeficiente C_n	25
4.2. Decaimiento del estado base	27
4.3. Decaimiento de un estado excitado	32
5. Decaimiento de estados iniciales de mínima incertidumbre	40
5.1. Estado de mínima incertidumbre	41
5.2. Decaimiento de un estado de mínima incertidumbre (Onda saliente)	43
5.2.1. Cálculo de los coeficientes Λ , C_n y \bar{C}_n	44
5.2.2. Comprobación del método numérico	45
5.2.3. Probabilidad de supervivencia $S(t)$	50
5.2.4. Probabilidad de no escape $P(t)$	58
5.3. Decaimiento de un estado de mínima incertidumbre (Gato de Schrödinger)	62
5.3.1. Cálculo de los coeficientes Λ y C_n	62

5.3.2. Comprobación del método numérico	63
5.3.3. Probabilidad de supervivencia $S(t)$	65
5.3.4. Probabilidad de no escape $P(t)$	74
5.4. Discusión de la evolución temporal de estados de mínima incertidumbre	79
6. Conclusiones	82
A. Función $M(x, t, k)$	86
B. Estados Resonantes	88
B.1. Relaciones de suma de los coeficientes	89
C. Desarrollo discreto de la función de Green de onda saliente	93

Capítulo 1

Introducción

Una partícula que se encuentra inicialmente atrapada en la región de interacción de un potencial, puede escapar de esta región por efecto túnel, si la energía de la partícula es menor al máximo del potencial. Este proceso se conoce como decaimiento cuántico. Este trabajo está elaborado con base en un formalismo desarrollado en años recientes por Gastón García Calderón [1] para el estudio del decaimiento, en el cual se considera que el potencial tiene simetría esférica y es de alcance finito. Este formalismo nos da una solución exacta al problema del decaimiento cuántico, obteniéndose la solución analítica en la región interna del potencial $\Psi(r, t)$ a partir del estado inicial $\Psi(r, 0)$ como un desarrollo en los estados resonantes del sistema. Esto nos permite estudiar el comportamiento cualitativo de las cantidades relevantes en el decaimiento, las cuales son: La probabilidad de supervivencia $S(t)$ que mide la probabilidad de que la partícula se encuentre en el estado cuántico inicial después de un tiempo t y la probabilidad de no escape $P(t)$ que mide la probabilidad de que la partícula se encuentre dentro de la región de interacción del potencial después de un tiempo t . Estas dos cantidades nos permiten estudiar las contribuciones exponenciales y no-exponenciales al decaimiento cuántico como función del tiempo.

El propósito de este trabajo es investigar el efecto de estados iniciales de mínima incertidumbre en la evolución temporal del decaimiento. Para ello consideramos un modelo simple (potencial delta repulsivo), que nos permite calcular en forma analítica la base de estados resonantes $\{u_n(r)\}$ y el conjunto de eigenvalores complejos $\{E_n\}$ del sistema. Un caso límite de este modelo es el problema de la caja de potencial infinito, lo cual sugiere estudiar la evolución temporal de estados iniciales correspondientes a los eigenestados de la caja. Este problema ha sido ya considerado en la literatura [2] y un primer objetivo de este trabajo es reproducir los cálculos correspondientes para $S(t)$ y $P(t)$, así como estudiar la densidad de probabilidad en la región interna del potencial.

La motivación para estudiar estados iniciales de mínima incertidumbre, es la posibilidad de investigar la evolución temporal de estados localizados inicialmente en distintos lugares de la región interna, para energías cerca y fuera de resonancia. Otra motivación para este estudio es un trabajo realizado por Leneef y Rand [3] en 1994, en el cual encuentran usando estados de mínima incertidumbre, que éstos tienen un tiempo de vida media mayor que estados que no lo son, dependiendo ésto de la posición inicial y la energía del paquete. Es por lo anterior que en particular nos interesa averiguar el efecto de la posición del estado inicial (cerca y lejos de la frontera del potencial) y considerar distintos valores de la energía inicial.

El estudio que se presenta no pretende realizar una comparación con el enfoque de Leneef y Rand el cual privilegia el método WKB y trata el continuo de forma aproximada, sino más bien utilizar directamente el formalismo exacto propuesto por García Calderón [1], para examinar este problema.

La tesis está organizada de la siguiente manera:

En el capítulo 2 se desarrolla la solución al problema del decaimiento empleando el formalismo de estados resonantes, así como las definiciones de las probabilidades de supervivencia y no escape, analizando las contribuciones exponenciales y no-exponenciales al decaimiento cuántico.

En el capítulo 3 se propone como modelo el potencial delta repulsivo, encontrando el conjunto de estados resonantes del sistema, y se muestra el método de Newton-Raphson para el cálculo de los polos de la función de Green que corresponden a los eigenvalores complejos de los estados resonantes.

En el capítulo 4 se estudia la evolución temporal del decaimiento, tomando como estado inicial un eigenestado de la caja de potencial, mostrando dos casos: el estado base y el cuarto estado excitado.

El capítulo 5 contiene el estudio de la evolución temporal de estados localizados que son de mínima incertidumbre, analizando dos casos: onda saliente y el estado gato de Schrödinger.

En el capítulo 6 se discuten los resultados obtenidos en los ejemplos y las conclusiones.

En el apéndice A se da la definición de la función $M(y)$, su relación de simetría en el plano complejo y expansión asintótica para $y \ll 1$ y $y \gg 1$.

En el apéndice B se muestran las propiedades de los estados resonantes y relaciones de suma de los coeficientes involucrados en el cálculo de las probabilidades.

En el apéndice C se muestra el desarrollo discreto de la función de Green de onda saliente para la región interna del potencial.

Capítulo 2

Formalismo

2.1. Solución de la ecuación de Schrödinger como un problema de valores iniciales

Consideremos la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo

$$\left\{ i \frac{\partial}{\partial t} - \widehat{H} \right\} \chi(\mathbf{r}, t) = 0, \quad (2.1)$$

donde el hamiltoniano está dado por $\widehat{H} = -\nabla^2 + V(\mathbf{r})$ en unidades $\hbar = 2m = 1$. Para un potencial con simetría radial, es decir $V(\mathbf{r}) = V(r)$, la solución de la ecuación (2.1) se puede desarrollar en ondas parciales

$$\chi(\mathbf{r}, t) = \sum_{l,m} \frac{\Psi_l(\mathbf{r}, t)}{r} Y_{lm}(\Omega), \quad (2.2)$$

donde Ω denota el ángulo sólido.

Dada la condición inicial $\chi(\mathbf{r}, 0)$, la solución de la ecuación (2.1) para $t > 0$ es [4]

$$\chi(\mathbf{r}, t) = \int \mathcal{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t) \chi(\mathbf{r}', 0) d\mathbf{r}' \quad t > 0, \quad (2.3)$$

donde $\mathcal{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t)$ es la función retardada de Green o propagador. Para el problema con simetría radial se tiene que $d\mathbf{r}' = r'^2 dr' d\Omega'$ y el propagador en desarrollo de ondas parciales es [4]

$$\mathcal{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t) = \sum_{lm} \frac{g_l(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t)}{r r'} Y_{lm}(\Omega) Y_{lm}^*(\Omega'). \quad (2.4)$$

Sustituyendo (2.4) y el desarrollo de ondas parciales de $\chi(r', 0)$ en (2.3) se tiene que

$$\chi(r, t) = \sum_{lm} \sum_{l'm'} \int \frac{g_l(r, r'; t)}{r} \Psi_{l'}(r', 0) Y_{lm}(\Omega) Y_{lm}^*(\Omega') Y_{l'm'}(\Omega') dr' d\Omega' \quad t > 0. \quad (2.5)$$

Usando la propiedad de ortogonalidad de los armónicos esféricos se llega a

$$\chi(r, t) = \sum_{lm} \int \frac{g_l(r, r'; t)}{r} \Psi_l(r', 0) Y_{lm}(\Omega) dr' \quad t > 0. \quad (2.6)$$

Comparando las ecuaciones (2.2) y (2.6), se tiene que

$$\Psi_l(r, t) = \int g_l(r, r'; t) \Psi_l(r', 0) dr' \quad t > 0. \quad (2.7)$$

Ésta satisface la ecuación de Schrödinger radial

$$\left\{ i \frac{\partial}{\partial t} - H \right\} \Psi_l(r, t) = 0, \quad (2.8)$$

donde H es el operador

$$H = -\frac{\partial^2}{\partial r^2} + V(r) + \frac{l(l+1)}{r^2}. \quad (2.9)$$

Por simplicidad, consideraremos $l = 0$ y escribiremos las funciones sin índices.

La ecuación diferencial que satisface el propagador para $t > 0$ es

$$\left\{ i \frac{\partial}{\partial t} - H \right\} g(r, r'; t) = 0, \quad (2.10)$$

con la condición inicial

$$g(r, r'; 0) = \delta(r - r'). \quad (2.11)$$

Aplicando la transformada de Laplace a la variable t de la ecuación (2.10) y denotando por $\bar{g}(r, r'; s)$ la transformada de $g(r, r'; t)$ se tiene

$$\left\{ is - H \right\} \bar{g}(r, r'; s) = i\delta(r - r'). \quad (2.12)$$

Identificando la variable $s = -ik^2$ en la ecuación (2.12), se obtiene la función de Green de onda saliente conocida en la literatura como

$$G^+(r, r'; k) = -i\bar{g}(r, r'; -ik^2). \quad (2.13)$$

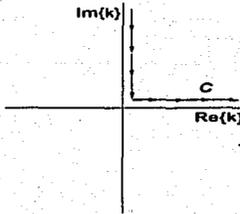


Figura 2.1: Trayectoria de integración C para el cálculo de el propagador $g(r, r'; t)$.

La cual satisface la ecuación

$$\{k^2 - H\}G^+(r, r'; k) = \delta(r - r'), \quad (2.14)$$

que corresponde a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo. Esto es, se simplifica la ecuación parcial (2.10) de dos variables a una ecuación ordinaria en la variable r únicamente. La solución de (2.10) se obtiene de aplicar la transformada inversa de Laplace, la cual se expresa en términos de la función de Green de onda saliente como

$$g(r, r'; t) = \frac{i}{2\pi} \int_C e^{-ik^2 t} G^+(r, r'; k) 2k dk, \quad (2.15)$$

donde la curva de integración se muestra en la figura 2.1. Así se tiene la solución a la ecuación (2.8) como

$$\Psi(r, t) = \int \left\{ \int_C e^{-ik^2 t} G^+(r, r'; k) 2k dk \right\} \Psi(r', 0) dr' \quad t > 0. \quad (2.16)$$

2.2. Decaimiento

Una partícula que se encuentra inicialmente dentro del alcance de un potencial puede escapar de esta región, si la energía de la partícula es menor al máximo de la altura del potencial por efecto túnel. Este proceso se conoce como decaimiento cuántico y se puede modelar con un potencial de alcance finito (Fig. 2.2). El estudio que se presenta sobre el decaimiento, es con base en el formalismo de estados resonantes del sistema, los cuales se

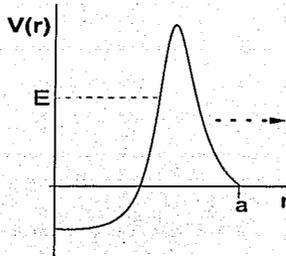


Figura 2.2: Representación esquemática del proceso de decaimiento, para un potencial radial de alcance finito.

obtienen de forma natural al pedir la condición física de decaimiento.

Para mostrar la obtención de dichos estados consideremos un potencial con simetría radial y de interacción finita, es decir $V(r > a) = 0$ como el mostrado en la figura 2.2. Así una partícula confinada dentro del rango de interacción $(0, a)$ podrá escapar de ésta por *efecto túnel*, suponiendo que la energía inicial de la partícula $E = k^2$ es menor al máximo del potencial. La ecuación que satisface la función de onda es

$$\frac{d^2}{dr^2} \Psi(r) + [k^2 - V(r)] \Psi(r) = 0. \quad (2.17)$$

Fuera del intervalo de interacción, es decir $r > a$, la ecuación corresponde a la de la partícula libre, con solución

$$\Psi(r) = A(k)e^{ikr} + B(k)e^{-ikr} \quad r > a. \quad (2.18)$$

El primer y segundo término de la ecuación (2.18) representan ondas divergentes y convergentes respectivamente hacia el origen. Sin embargo, sabemos que el proceso de decaimiento se describe en términos de ondas divergentes. Por lo que se tiene como condición física

$$A(k) \neq 0 \quad B(k) = 0, \quad (2.19)$$

que nos lleva a una contradicción. Ya que si $\Psi(r)$ es solución de (2.17) entonces $\Psi^*(r)$ también lo es, siempre que se considere k real. Esto es conocido en la literatura como

Time Reversal Invariance, es decir, $\Psi(r)$ y $\Psi^*(r)$ describen la misma situación física del sistema, debido a que el operador (*Time-reversal*) conmuta con el operador Hamiltoniano. Así el hecho de que $B(k) \rightarrow 0$ implica que $A(k) \rightarrow 0$, lo que contradice la condición física del decaimiento (2.19) si k es real.

El análisis anterior llevó a *George Gamow* [5] a considerar valores complejos de k , con lo cual se satisface (2.19) para un conjunto de valores complejos $\{k_n\}$ y por ende para valores complejos de la energía $\{E_n\}$ con $E_n = \epsilon_n - i\Gamma_n/2$. De lo anterior se sigue que $|\Psi_n(r, t)|^2 = |\Psi_n(r)|^2 e^{-\Gamma_n t}$ la cual exhibe la ley de decaimiento exponencial obtenida experimentalmente en el decaimiento de núcleos radiactivos.

Esto nos permite introducir la noción de estados resonantes del sistema $\{u_n(r)\}$, los cuales cumplen la ecuación

$$\frac{d^2 u_n(r)}{dr^2} + [k_n^2 - V(r)]u_n(r) = 0, \quad (2.20)$$

con condiciones a la frontera

$$u_n(0) = 0 \quad u_n(r > a) = A_n e^{ik_n r}. \quad (2.21)$$

La primer condición es debida al hecho que la ecuación (2.20) se establece para valores $r \geq 0$, por tratarse de una ecuación radial, y la segunda establece la condición de onda saliente. Otra forma más útil de escribir ésta es calcular la derivada logarítmica del estado resonante fuera del rango de interacción, por lo que la condición de onda saliente se escribe como

$$\left. \frac{du_n(r)}{dr} \right|_{r=a} = ik_n u_n(a). \quad (2.22)$$

Este formalismo que se usa para el estudio del decaimiento. Lo que nos permite encontrar de forma exacta la solución, usando la idea particular de que los residuos de polos complejos de la función saliente de Green están relacionados con los estados resonantes.

2.3. Determinación de los residuos de los polos de la función de Green

Mostraremos cómo calcular los residuos de los polos de la función de Green de onda saliente $G^+(r, r'; k)$ para el problema del potencial con simetría radial de interacción finita (Fig. 2.2). La función de Green asociada al Hamiltoniano H con momento angular $l = 0$ satisface la ecuación

$$\frac{\partial^2}{\partial r^2} G^+(r, r'; k) + [k^2 - V(r)] G^+(r, r'; k) = \delta(r - r'), \quad (2.23)$$

con las condiciones de frontera

$$G^+(0, r'; k) = 0, \quad (2.24)$$

$$\left. \frac{\partial}{\partial r} G^+(r, r'; k) \right|_{r=a} = ik G^+(r, r'; k). \quad (2.25)$$

La igualdad (2.25) es sólo la condición de onda saliente para valores $r > a$, lo que expresa físicamente que el sistema decae.

Bajo el supuesto de que la función de Green tiene polos simples, podemos escribir ésta cerca del polo k_n como

$$G^+(r, r'; k) = \frac{C_n(r, r')}{k - k_n} + \chi(r, r'; k), \quad (2.26)$$

que es sólo el desarrollo en serie de Laurent de la función de Green de onda saliente en una vecindad del polo k_n y el factor $C_n(r, r')$ es el residuo del n -ésimo polo. Sustituyendo la expresión (2.26) en la ecuación (2.23) tenemos

$$\{k^2 - H\} \frac{C_n(r, r')}{k - k_n} + \{k^2 - H\} \chi(r, r'; k) = \delta(r - r'), \quad (2.27)$$

en donde hemos simplificado la notación del operador de (2.23). Sumando y restando el término $k_n^2 C_n(r, r') / (k - k_n)$ en la ecuación anterior se obtiene

$$\{k_n^2 - H\} \frac{C_n(r, r')}{k - k_n} + \{k^2 - H\} \chi(r, r'; k) + (k + k_n) C_n(r, r') = \delta(r - r'). \quad (2.28)$$

En el límite $k \rightarrow k_n$ la ecuación no debe presentar singularidades por lo que se tienen dos expresiones

$$\{k_n^2 - H\} C_n(r, r') = 0, \quad (2.29)$$

$$\{k_n^2 - H\} \chi(r, r'; k_n) + 2k_n C_n(r, r') = \delta(r - r'). \quad (2.30)$$

Las condiciones de frontera en términos de $C_n(r, r')$ y $\chi(r, r'; k)$ toman la forma

$$\frac{C_n(0, r')}{k - k_n} + \chi(0, r'; k) = 0, \quad (2.31)$$

$$\frac{\partial}{\partial r} \left[\frac{C_n(r, r')}{k - k_n} + \chi(r, r'; k) \right] \Big|_{r=a} = ik \left[\frac{C_n(r, r')}{k - k_n} + \chi(r, r'; k) \right]. \quad (2.32)$$

Es claro que la ecuación (2.31) es válida en el límite $k \rightarrow k_n$, por lo tanto tenemos

$$C_n(0, r') = 0, \quad (2.33)$$

$$\chi(0, r'; k_n) = 0. \quad (2.34)$$

Para la igualdad (2.32) sumamos y restamos el término $ik_n C_n(a, r')/(k - k_n)$, obteniendo en el límite $k \rightarrow k_n$ las condiciones

$$\frac{\partial}{\partial r} C_n(r, r') \Big|_{r=a} = ik_n C_n(a, r'), \quad (2.35)$$

$$\frac{\partial}{\partial r} \chi(r, r'; k_n) \Big|_{r=a} = ik_n \chi(a, r'; k_n) + iC_n(a, r'). \quad (2.36)$$

Observamos que la ecuación (2.29) y las condiciones de frontera para $C_n(r, r')$ ecuaciones (2.33, 2.35) son las mismas que las de los estados resonantes del sistema, por lo que concluimos que $C_n(r, r') \sim u_n(r)$ ¹. Los estados resonantes del sistema satisfacen

$$\{k_n^2 - H\} u_n(r) = 0, \quad (2.37)$$

con condiciones a la frontera

$$u_n(0) = 0, \quad (2.38)$$

$$\frac{d}{dr} u_n(r) \Big|_{r=a} = ik_n u_n(a). \quad (2.39)$$

Dado que el operador Hamiltoniano no depende de la variable r' y el coeficiente $C_n(r, r')$ es proporcional al n -ésimo estado resonante escribimos $C_n(r, r') = u_n(r)R(r')$.

Para encontrar la expresión explícita de la función $R(r')$, multiplicamos la ecuación (2.37) por $\chi(r, r'; k_n)$ y la ecuación (2.30) por $u_n(r)$. Restando las expresiones encontramos

¹Esta conclusión muestra que los residuos de la función de Green de onda saliente están relacionados con los estados resonantes del sistema

$$u_n \frac{\partial^2}{\partial r^2} \chi - \chi \frac{\partial^2}{\partial r^2} u_n + 2k_n C_n u_n = u_n \delta(r - r'), \quad (2.40)$$

en donde sólo se ha denotado por $u_n = u_n(r)$, $\chi = \chi(r, r'; k_n)$ y $C_n = C_n(r, r')$. Integrando con respecto a r en el intervalo de interacción del potencial ($r, r' < a$) y usando la identidad

$$u_n \frac{\partial^2}{\partial r^2} \chi - \chi \frac{\partial^2}{\partial r^2} u_n = \frac{\partial}{\partial r} \left[u_n \frac{\partial}{\partial r} \chi - \chi \frac{\partial}{\partial r} u_n \right].$$

Encontramos la expresión para $R(r')$ dada por

$$R(r') = \frac{u_n(r')}{2k_n \{ \int_0^a u_n^2(r) dr + i u_n^2(a) / 2k_n \}}. \quad (2.41)$$

Identificando la condición de normalización de los estados resonantes (B.7)

$$\int_0^a u_n^2(r) dr + i \frac{u_n^2(a)}{2k_n} = 1. \quad (2.42)$$

Escribamos el residuo del n -ésimo polo de la función de Green de onda saliente como

$$C_n(r, r') = \frac{u_n(r) u_n(r')}{2k_n}. \quad (2.43)$$

2.4. Desarrollo discreto de la función de Green dependiente del tiempo

Dedicaremos esta sección al cálculo del propagador [1], el cual se determina mediante la función de Green de onda saliente por medio de

$$g(r, r'; t) = \frac{i}{2\pi} \int_C e^{-ik^2 t} G^+(r, r'; k) 2k dk. \quad (2.44)$$

En virtud de que la función de Green de onda saliente $G^+(r, r'; k)$ es una función de la variable compleja k y cumple la condición

$$G^+(r, r'; k) \rightarrow 0 \quad \text{cuando} \quad |k| \rightarrow \infty \quad r, r' < a, \quad (2.45)$$

podemos desarrollarla en forma discreta [6] (vea §C)

$$G^+(r, r'; k) = \sum_n \frac{u_n(r) u_n(r')}{2k_n (k - k_n)}, \quad (2.46)$$

en donde la suma se hace sobre todos los polos². Sustituyendo esta expresión en la ecuación (2.23), sumando y restando el término $k_n u_n(r) u_n(r')/2$ obtenemos una relación para los estados resonantes del sistema, dada por

$$\sum_n \frac{k+k_n}{2k_n} u_n(r) u_n(r') = \delta(r-r') \quad r, r' < a, \quad (2.47)$$

que se convierte en dos condiciones, debido a que la función delta no depende de k , obtenemos

$$\sum_n \frac{u_n(r) u_n(r')}{k_n} = 0, \quad (2.48)$$

$$\frac{1}{2} \sum_n u_n(r) u_n(r') = \delta(r-r'). \quad (2.49)$$

Usando estas ecuaciones y la identidad

$$\frac{1}{2k_n(k-k_n)} \equiv \frac{1}{2k} \left[\frac{1}{k-k_n} + \frac{1}{k_n} \right], \quad (2.50)$$

podemos escribir la ecuación (2.40) como

$$G^+(r, r'; k) = \frac{1}{2k} \sum_n \frac{u_n(r) u_n(r')}{k-k_n}, \quad (2.51)$$

que al sustituirla en (2.44) nos da

$$g(r, r'; t) = \sum_n u_n(r) u_n(r') \left\{ \frac{i}{2\pi} \int_C \frac{e^{-ik^2 t}}{k-k_n} dk \right\}. \quad (2.52)$$

La integral que se encuentra entre corchetes es una función conocida. Para mostrar esto se hace el cambio de variable

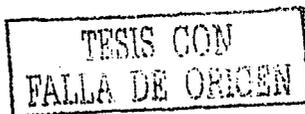
$$u = -e^{i\frac{\pi}{2}} t^{\frac{1}{2}} k,$$

y se define la variable y_n como

$$y_n = -e^{-i\frac{\pi}{2}} t^{\frac{1}{2}} k_n,$$

para escribir la igualdad

²Los polos de la función de Green de onda saliente incluyen estados ligados, antiligados y resonantes.



$$\frac{i}{2\pi} \int_C \frac{e^{-ik^2 t}}{k - k_n} dk = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-u^2}}{iy_n - u} du. \quad (2.53)$$

Esta función es conocida en la literatura como la función $M(x, t; k)$ evaluada en $x = 0$, la cual se define mediante

$$M(0, t; k_n) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-u^2}}{iy_n - u} du \quad \Im\{iy_n\} > 0. \quad (2.54)$$

Sustituyendo este resultado en la ecuación (2.52) obtenemos el desarrollo discreto del propagador como

$$g(r, r'; t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} u_n(r) u_n(r') M(0, t; k_n). \quad (2.55)$$

Para el caso en que $\Im\{iy_n\} < 0$ se utilizan las relaciones de simetría (Apéndice A).

2.5. Función de onda, probabilidades de supervivencia y no escape

El desarrollo expuesto anteriormente para el cálculo del propagador nos permite encontrar inmediatamente la expresión de la función de onda $\Psi(r, t)$. La cual se obtiene sustituyendo la ecuación (2.55) en (2.7). Así la solución exacta al problema de decaimiento está dada por

$$\Psi(r, t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} C_n u_n(r) M(0, t; k_n) \quad r < a, \quad (2.56)$$

en donde se ha definido el coeficiente C_n como

$$C_n \equiv \int_0^a \Psi(r, 0) u_n(r) dr. \quad (2.57)$$

Esta solución tiene toda la información de la evolución temporal del sistema dentro del rango de interacción y para el estudio de ésta, es necesario definir las cantidades: Amplitud de supervivencia $A(t)$, probabilidades de supervivencia $S(t)$ y no escape $P(t)$. La amplitud de supervivencia se define mediante

$$A(t) \equiv \int_0^a \Psi^*(r, 0) \Psi(r, t) dr, \quad (2.58)$$

que al sustituir la expresión de la función de onda toma la forma

$$A(t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} C_n \bar{C}_n M(0, t; k_n), \quad (2.59)$$

donde se ha usado una notación análoga a (2.57) definiendo \bar{C}_n como

$$\bar{C}_n = \int_0^a \Psi^*(r, 0) u_n(r) dr. \quad (2.60)$$

La amplitud de supervivencia en general es una función compleja. Sin embargo, por definición cumple que $A(0) = 1$, que proporciona una relación de suma consistente con la propiedad (2.49) de los estados resonantes (vea §B.1).

La probabilidad de supervivencia, se define mediante la amplitud de supervivencia como $S(t) \equiv |A(t)|^2$, es decir

$$S(t) = \left| \int_0^a \Psi^*(r, 0) \Psi(r, t) dr \right|^2, \quad (2.61)$$

que en términos de (2.59) obtenemos la expresión

$$S(t) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sum_{n=-\infty}^{\infty} C_m^* \bar{C}_m^* C_n \bar{C}_n M^*(0, t; k_m) M(0, t; k_n). \quad (2.62)$$

Por definición de la probabilidad de supervivencia, ésta mide la probabilidad de que la partícula permanezca en el estado inicial $\Psi(r, 0)$ después de un tiempo t .

Otra cantidad importante en la evolución temporal del sistema es la probabilidad de no escape $P(t)$, la cual se define mediante la función de onda $\Psi(r, t)$ como

$$P(t) \equiv \int_0^a \Psi^*(r, t) \Psi(r, t) dr, \quad (2.63)$$

que al sustituir la expresión de la función de onda (2.56) se obtiene

$$P(t) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sum_{n=-\infty}^{\infty} C_m^* C_n I_{mn} M^*(0, t; k_m) M(0, t; k_n), \quad (2.64)$$

en donde se define el coeficiente I_{mn} como

$$I_{mn} = \int_0^a u_m^*(r) u_n(r) dr. \quad (2.65)$$

Esta cantidad por definición mide la probabilidad de que la partícula permanezca dentro del rango de interacción del potencial después de un tiempo t , por lo que lleva el nombre de probabilidad de no escape. Así la probabilidad de escape será $1 - P(t)$.

2.6. Desarrollo asintótico de $|\Psi(r, t)|^2$, $P(t)$ y $S(t)$

La evolución temporal y comportamiento asintótico de la densidad de probabilidad $|\Psi(r, t)|^2$, probabilidades de no escape $P(t)$ y supervivencia $S(t)$, están dadas únicamente por el comportamiento de la función $M(y_n)$, donde $y_n = -\sqrt{-ik_n}$. Esta función definida mediante (2.54) para valores y_n que cumplen $\Im\{iy_n\} > 0$, tiene la relación de simetría para el caso en que no se cumpla la desigualdad (vea §A)

$$M(y_n) = e^{y_n^2} - M(-y_n) \quad \text{si} \quad \Im\{iy_n\} < 0. \quad (2.66)$$

Haciendo el análisis de la parte imaginaria del coeficiente iy_n , encontramos que la relación de simetría se usará si $n > 0$, lo que simplifica los cálculos. Sin embargo las cantidades que estudiamos se derivan de la evolución de la función de onda, por lo que es conveniente estudiar primero el comportamiento asintótico de ésta.

La relación (2.66) nos permite escribir la función de onda como

$$\Psi(r, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ C_n u_n(r) e^{-ik_n^2 t} + D_n(r, t) \right\} \quad r < a, \quad (2.67)$$

donde definimos

$$D_n(r, t) = C_{-n} u_n^*(r) M(y_{-n}) - C_n u_n(r) M(-y_n), \quad (2.68)$$

que es la contribución no exponencial al decaimiento y es despreciable para tiempos del orden del tiempo de vida media³. Así para valores del tiempo del orden de vida media la función de onda tiene un comportamiento

$$\Psi(r, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ C_n u_n(r) e^{-ik_n^2 t} \right\} \quad r < a, \quad (2.69)$$

que corresponde a una contribución puramente exponencial a la evolución del sistema. Para el comportamiento asintótico de la función de onda a tiempos largos, el término exponencial es despreciable y sólo queda la contribución no exponencial. Para lo cual es necesario escribir el comportamiento asintótico de la función $M(y_n)$ en el límite $y_n \rightarrow \infty$, el cual es

$$M(y_n) \approx \frac{1}{2\pi^{1/2}} \left[\frac{1}{y_n} - \frac{1}{2y_n^3} + \dots \right] \quad y_n \gg 1. \quad (2.70)$$

³Un análisis más detallado de este término no exponencial revela que para tiempos muy cortos domina sobre el término exponencial del decaimiento.

Al sustituir ésta en la ecuación (2.68) y usando la relación de suma (B.21), se tiene que el comportamiento de la función de onda a tiempos largos es

$$\Psi(r, t) \approx - \left\{ \frac{(-i)^{\frac{1}{2}}}{4\pi^{\frac{1}{2}}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{C_n u_n(r)}{k_n^3} \right\} \frac{1}{t^{\frac{1}{2}}} + \mathcal{O}(t^{-\frac{3}{2}}) \quad r < a. \quad (2.71)$$

Las cantidades $|\Psi(r, t)|^2$, $P(t)$ y $S(t)$ heredan el comportamiento asintótico de la función de onda. Tenemos que la densidad de probabilidad toma la forma

$$|\Psi(r, t)|^2 = \left| \sum_{n=1}^{\infty} C_n u_n(r) e^{-ik_n^2 t} \right|^2. \quad (2.72)$$

Esto es, la densidad de probabilidad disminuye exponencialmente para tiempos del orden de la vida media. Para tiempos largos se tiene

$$|\Psi(r, t)|^2 \approx \frac{1}{16\pi} \left| \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{C_n u_n(r)}{k_n^3} \right|^2 \frac{1}{t^3}, \quad (2.73)$$

la cual expresa una ley de decaimiento de potencia inversa. De forma inmediata tenemos el comportamiento de la probabilidad de no escape, ya que por definición es la integral de la densidad de probabilidad. Ésta tiene el siguiente comportamiento asintótico

$$P(t) \approx \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} C_m^* C_n I_{mn} e^{-i(k_n^2 - k_m^2)t}, \quad (2.74)$$

que corresponde al decaimiento exponencial del sistema, y para tiempos largos

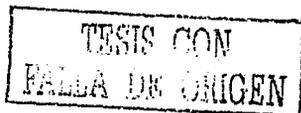
$$P(t) \approx \left\{ \frac{1}{16\pi} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{C_m^* C_n I_{mn}}{k_m^3 k_n^3} \right\} t^{-3}, \quad (2.75)$$

que expresa la ley de potencia inversa que presenta la probabilidad de no escape.

Para el estudio asintótico de la probabilidad de supervivencia es más conveniente estudiar el comportamiento asintótico de la amplitud de supervivencia $A(t)$. Ésta tiene el siguiente comportamiento

$$A(t) \approx \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ C_n \bar{C}_n e^{-ik_n^2 t} \right\}, \quad (2.76)$$

$$A(t) \approx - \left\{ \frac{(-i)^{\frac{1}{2}}}{4\pi^{\frac{1}{2}}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{C_n \bar{C}_n}{k_n^3} \right\} \frac{1}{t^{\frac{1}{2}}}. \quad (2.77)$$



Estas exhiben para la probabilidad de supervivencia, la ley de decaimiento exponencial para tiempos del orden de vida media, y la ley de potencia inversa $S(t) \sim t^{-3}$ a tiempos largos respectivamente.

Además de estas dos regiones del decaimiento debe existir una región de interferencia entre el decaimiento exponencial - no-exponencial que se presentará para valores del tiempo en que ambas contribuciones al decaimiento sean del mismo orden.

Capítulo 3

Modelo

Consideraremos como modelo el potencial delta repulsivo $\lambda\delta(r-a)$, con parámetros $\lambda > 0$ altura, y $a > 0$ alcance del potencial.

Este potencial tiene la virtud de que los estados resonantes se pueden calcular analíticamente mostrando este cálculo en §3.1. Esto permite simplificar los cálculos numéricos de la densidad de probabilidad y probabilidades de no escape y supervivencia. Además en el límite $\lambda \rightarrow \infty$ se reduce al problema de la caja de potencial infinito. Lo que nos permite encontrar aproximadamente el valor de los polos complejos de la función de onda saliente de Green, que son necesarios para tener una mejor aproximación de éstos, utilizando el método de Newton-Raphson el cual exponemos en §3.2.

3.1. Cálculo de los estados resonantes

Para el modelo del potencial delta y estados iniciales con momento angular $l = 0$. Los estados resonantes del sistema cumplen

$$\frac{d^2}{dr^2}u_n(r) + [k_n^2 - \lambda\delta(r-a)]u_n(r) = 0, \quad (3.1)$$

las condiciones de frontera son

$$u_n(0) = 0 \quad \left. \frac{du_n(r)}{dr} \right|_{r=a} = ik_n u_n(a). \quad (3.2)$$

La ecuación (3.1) se convierte en dos ecuaciones. Para la región interna $r < a$, en donde se denotará la solución como $u_n^<(r)$, y para la región externa $r > a$, denotaremos la solución como $u_n^>(r)$. En ambas regiones el potencial es idénticamente cero ya que $r \neq a$, por lo que

tenemos en ambas regiones como solución de la ecuación (3.1) ondas planas. Sin embargo, las condiciones físicas del proceso de decaimiento (3.2) piden que la solución en el exterior del potencial sea una onda plana saliente y la condición en el origen para la función en el interior exige que la solución sea cero, forzando a las soluciones tomar la forma

$$u_n^<(r) = B_n \sin(k_n r) \quad r < a, \quad (3.3)$$

$$u_n^>(r) = D_n e^{ik_n r} \quad r \geq a. \quad (3.4)$$

Usando las condiciones de frontera se tiene

$$B_n \sin(k_n a) = D_n e^{ik_n a}, \quad (3.5)$$

$$\left. \frac{d}{dr} u_n^>(r) \right|_{r=a} - \left. \frac{d}{dr} u_n^<(r) \right|_{r=a} = \lambda u_n(a). \quad (3.6)$$

Empleando (3.2) escribimos la condición (3.6) como

$$ik_n D_n e^{ik_n a} - k_n B_n \cos(k_n a) - \lambda B_n \sin(k_n a) = 0. \quad (3.7)$$

La ecuación (3.5) nos proporciona el valor de D_n como

$$D_n = B_n \sin(k_n a) e^{-ik_n a}. \quad (3.8)$$

Sustituyendo este valor en (3.7) y bajo la hipótesis $D_n \neq 0$ ¹ se llega a la ecuación trascendental para los valores de k_n

$$k_n \cot(k_n a) - ik_n + \lambda = 0. \quad (3.9)$$

Expresando la función cotangente en términos de exponenciales complejas se llega a una ecuación más simple

$$2ik_n + \lambda(e^{2ik_n a} - 1) = 0, \quad (3.10)$$

que proporciona los polos de la función saliente de Green.

Proseguimos a calcular los coeficientes B_n . Es claro que si se conoce B_n , tenemos el valor también de D_n mediante (3.8). Para el cálculo de B_n utilizamos la condición de normalización para los estados resonantes (B.7), obteniendo

¹Esta es la condición física de onda saliente.

$$B_n^2 = \frac{2k_n}{2k_n \int_0^a \sin^2(k_n r) dr + i \sin^2(k_n a)}. \quad (3.11)$$

La integral que aparece en el denominador, se puede calcular exactamente, el resultado es

$$\int_0^a \sin^2(k_n r) dr = \frac{k_n a}{2} - \frac{\sin^2(k_n a)}{4k_n}, \quad (3.12)$$

que nos permite reducir la expresión de B_n^2 a

$$B_n^2 = \frac{4k_n}{2k_n a + 2i \sin^2(k_n a) - \sin^2(k_n a)}. \quad (3.13)$$

La función seno que aparece en el denominador, se expresa en términos de exponenciales complejas, obteniendo la relación

$$2i \sin^2(k_n a) - \sin^2(k_n a) = i(1 - e^{-2ik_n a}) = \frac{2k_n}{\lambda - 2ik_n}, \quad (3.14)$$

en donde se usó la igualdad (3.10) para encontrar la tercera expresión. Simplificando se encuentra

$$B_n = \sqrt{\frac{2(\lambda - 2ik_n)}{\lambda a + 1 - 2ik_n a}}. \quad (3.15)$$

La condición $u_{-n} = u_n^*$ implica la condición para sus coeficientes $B_{-n} = -B_n^*$ obteniendo así el conjunto completo de estados resonantes $\{u_n(r)\}$.

3.2. Cálculo numérico de los polos complejos de la función de Green

Mostraremos un método numérico, conocido en la literatura como el método de Newton-Raphson. Para el cálculo de los polos k_n llamaremos $F(k_n)$ a la ecuación trascendental (3.10), de modo que si k_n es una raíz sucede que $F(k_n) = 0$. Supondremos que tenemos una raíz aproximada, la cual denotaremos por k_n^r y sin pérdida de generalidad supongamos que k_n^{r+1} es una raíz de $F(k_n)$. Llamemos a $h = k_n^{r+1} - k_n^r$ y desarrollando en serie de Taylor la función $F(k_n)$. A primer orden se tiene que

$$F(k_n^r + h) \approx F(k_n^r) + F'(k_n^r)h \approx 0. \quad (3.16)$$

Sustituyendo el valor de h se tendrá una mejor aproximación de la raíz, mediante

$$k_n^{r+1} = k_n^r - \frac{F(k_n^r)}{F'(k_n^r)}. \quad (3.17)$$

Este método es iterativo, y cuando $r \rightarrow \infty$ asegura tener la mejor aproximación de la raíz k_n . Pero una de las condiciones es tener una raíz aproximada.

La raíz aproximada la encontraremos sustituyendo $k_n = \alpha_n - i\beta_n$ en la ecuación (3.10). Se llega a un par de ecuaciones parte real y parte imaginaria

$$\alpha_n^2 + \left(\beta_n - \frac{\lambda}{2}\right)^2 = \frac{\lambda^2}{4} e^{4\beta_n a}, \quad (3.18)$$

$$\frac{\alpha_n}{\beta_n - \frac{\lambda}{2}} = \tan(2\alpha_n a). \quad (3.19)$$

En el límite $\lambda \rightarrow \infty$, se tiene de la ecuación (3.19) que $\tan(2\alpha_n a) \rightarrow 0^-$, por lo que $\alpha_n \rightarrow n\pi/a$ y $\beta_n \rightarrow 0$, recuperando los eigenvalores de la caja de potencial infinito. Podemos suponer que si $\lambda \gg 1$ pero finito, α_n tomará un valor aproximado a

$$\alpha_n \approx \frac{n\pi}{a} - \epsilon_n \quad |\epsilon_n| \ll 1. \quad (3.20)$$

Sustituyendo (3.20) en (3.19) se tiene una aproximación para el valor ϵ_n dada por

$$\epsilon_n \approx \frac{1}{2a} \tan^{-1} \left(\frac{2n\pi}{a\lambda} \right). \quad (3.21)$$

De forma análoga se supone que bajo estas condiciones $\beta_n \approx 0$ por lo que podemos despejar este valor de la ecuación (3.18) obteniendo un valor aproximado de éste como

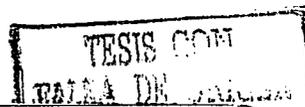
$$\beta_n \approx \frac{1}{4a} \ln \left[1 + \frac{4}{\lambda^2} \left(\frac{n\pi}{a} \right)^2 \right]. \quad (3.22)$$

Así el valor aproximado $k_n^0 = \alpha_n - i\beta_n$ será el primer valor que se utilizará para el cálculo de las raíces. En las tablas (3.1,3.2) se muestran los primeros treinta polos k_n para este problema, dejando el parámetro $a = 1$ y cambiando la altura del potencial, esto con finalidad de mostrar que tan pequeña puede ser la altura del potencial.

En la figura 3.1 se muestran los primeros 500 polos, con los parámetros del potencial $\lambda = 200$ y $a = 1$, la cual exhibe que estos se alejan del eje real monotonamente decreciente.

k_n^0	k	$ F(k) $
3.12589-0.000247i	3.125968-0.000243i	1.447166×10 ⁻²⁸
6.251811-0.000985i	6.251966-0.00097i	9.219299×10 ⁻²⁶
9.377793-0.002211i	9.378024-0.002178i	1.824123×10 ⁻²⁴
12.503866-0.003917i	12.50417-0.00386i	1.48766×10 ⁻²³
15.63006-0.006094i	15.630434-0.006005i	8.138676×10 ⁻²³
18.756401-0.008728i	18.756841-0.008603i	2.956361×10 ⁻²²
21.882916-0.011807i	21.883417-0.011639i	1.022685×10 ⁻²¹
25.009627-0.015313i	25.010186-0.015097i	2.794276×10 ⁻²¹
28.136558-0.019227i	28.137169-0.01896i	6.54221×10 ⁻²¹
31.263729-0.023531i	31.264386-0.023209i	1.421933×10 ⁻²⁰
34.391155-0.028203i	34.391853-0.027824i	2.74799×10 ⁻²⁰
37.518854-0.033222i	37.519587-0.032783i	5.038398×10 ⁻²⁰
40.646838-0.038565i	40.6476-0.038065i	8.721561×10 ⁻²⁰
43.775118-0.044211i	43.775903-0.043648i	1.413509×10 ⁻¹⁹
46.903702-0.050136i	46.904505-0.04951i	2.212317×10 ⁻¹⁹
50.032598-0.056318i	50.033414-0.05563i	5.498361×10 ⁻²⁸
53.161809-0.062735i	53.162633-0.061986i	3.192722×10 ⁻²⁶
56.29134-0.069365i	56.292166-0.068556i	1.946861×10 ⁻²⁴
59.421191-0.076189i	59.422016-0.075321i	1.510347×10 ⁻²⁴
62.551362-0.083185i	62.552181-0.08226i	3.252828×10 ⁻²⁵
65.681852-0.090335i	65.682661-0.089355i	1.094939×10 ⁻²³
68.812657-0.09762i	68.813454-0.096587i	4.4334×10 ⁻²⁴
71.943775-0.105023i	71.944556-0.10394i	3.504832×10 ⁻²⁴
75.075201-0.112528i	75.075963-0.111398i	2.29587×10 ⁻²⁶
78.206929-0.12012i	78.207669-0.118945i	1.746578×10 ⁻²⁴
81.338954-0.127784i	81.339671-0.126566i	7.413515×10 ⁻²⁴
84.471269-0.135508i	84.47196-0.13425i	1.007678×10 ⁻²³
87.603867-0.143278i	87.604531-0.141984i	1.102142×10 ⁻²³
90.73674-0.151084i	90.737377-0.149755i	9.94481×10 ⁻²⁴
93.869883-0.158915i	93.87049-0.157554i	1.358117×10 ⁻²⁴

Cuadro 3.1: Cálculo de los primeros treinta polos k_n , tomando la altura del potencial $\lambda = 200$.



k_n^0	k	$ F(k) $
2.989395-0.023531i	2.995775-0.020543i	1.28585×10^{-15}
6.002694-0.083185i	6.010923-0.074376i	5.374056×10^{-15}
9.046881-0.158915i	9.053251-0.145651i	3.765641×10^{-14}
12.117052-0.235864i	12.120404-0.221482i	3.369102×10^{-14}
15.206021-0.310851i	15.206587-0.294992i	8.849111×10^{-15}
18.308039-0.37895i	18.30643-0.363481i	1.476703×10^{-13}
21.41914-0.441016i	21.415943-0.426322i	5.971153×10^{-14}
24.530685-0.497535i	24.532362-0.483747i	9.247305×10^{-14}
27.658909-0.54915i	27.6538-0.536277i	9.380721×10^{-14}
30.784613-0.596493i	30.778962-0.584487i	1.961257×10^{-13}
33.91296-0.640124i	33.906944-0.628919i	4.762395×10^{-13}
37.043357-0.680525i	37.037101-0.670049i	3.902355×10^{-13}
40.175371-0.718103i	40.168965-0.708286i	3.108624×10^{-15}
43.308681-0.753202i	43.302191-0.743979i	1.669612×10^{-13}
46.443044-0.786109i	46.436519-0.777422i	3.716245×10^{-13}
49.578274-0.817071i	49.571749-0.808868i	5.62501×10^{-13}
52.714226-0.846294i	52.707725-0.83853i	5.147055×10^{-13}
55.850784-0.873957i	55.844328-0.866591i	3.924003×10^{-13}
58.987857-0.900212i	58.981458-0.893209i	9.784889×10^{-14}
62.125371-0.925192i	62.119038-0.918521i	4.692618×10^{-13}
65.263263-0.949012i	65.257005-0.942644i	1.586236×10^{-12}
68.401485-0.971773i	68.395305-0.965684i	1.147391×10^{-12}
71.539994-0.993563i	71.533896-0.98773i	2.366362×10^{-13}
74.678755-1.014459i	74.672741-1.008863i	4.474042×10^{-13}
77.817739-1.034531i	77.811809-1.029155i	2.102961×10^{-12}
80.956921-1.05384i	80.951076-1.048668i	2.096477×10^{-12}
84.096279-1.072442i	84.090518-1.06746i	1.937185×10^{-12}
87.235794-1.090385i	87.230117-1.08558i	6.91124×10^{-13}
90.375451-1.107714i	90.369856-1.103074i	4.426097×10^{-13}
93.515235-1.12447i	93.509721-1.119985i	8.611907×10^{-13}

Cuadro 3.2: Cálculo de los primeros treinta polos k_n , tomando la altura del potencial $\lambda = 20$.

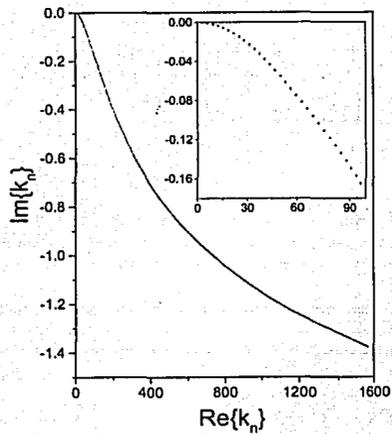


Figura 3.1: Muestra los primeros 500 polos, con los parámetros $a = 1$ y $\lambda = 200$, también se muestra un zoom del comportamiento cerca del origen.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

Capítulo 4

Decaimiento de estados iniciales de la caja infinita

El modelo que se ha propuesto para el estudio de la evolución temporal del decaimiento, tiene como límite el sistema de la caja infinita, para $\lambda \rightarrow \infty$. Lo que sugiere que se estudie el decaimiento de dichos estados, esto es, tomar como estado inicial un eigenestado de la caja de potencial infinito. Consideramos dos casos particulares, el estado base y el cuarto estado excitado.

Notamos que los coeficientes que intervienen en los cálculos tienen la misma naturaleza, es decir, se puede encontrar una expresión de estos, que nos permiten estudiar cualquier eigenestado de la caja de potencial. Además, la función de onda inicial es real, por lo que sólo basta calcular un coeficiente ya que para este caso particular se tiene que $C_n = \bar{C}_n$. Mostrando el cálculo de éste en la sección 4.1. Posteriormente estudiamos la evolución temporal del decaimiento del estado base en §4.2 y el cuarto estado excitado en §4.3. Mostrando el comportamiento de las probabilidades de supervivencia, no escape, y la densidad de probabilidad en las regiones del decaimiento exponencial, no-exponencial e interferencia. Las curvas de la probabilidad de supervivencia y no escape son resultados ya conocidos [2]. Por lo que este ejercicio nos sirve para comprobar el método numérico que empleamos para el cálculo de las mismas y a su vez completamos el estudio de la evolución temporal del decaimiento con el estudio de la densidad de probabilidad, la cual ayuda entender el comportamiento cualitativo de la probabilidad de no escape.

4.1. Cálculo del coeficiente C_n

Tomamos como estado inicial un eigenestado arbitrario del problema de la caja de potencial infinito, es decir

$$\Psi(r, 0) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin(j\pi r/a) & r < a \\ 0 & r \geq a \end{cases}, \quad (4.1)$$

en donde j es un entero. El estudio del decaimiento expuesto aquí, sólo es dentro del rango de interacción por lo que el conjunto de estados resonantes que se usarán para los cálculos son

$$u_n(r) = B_n \sin(k_n r). \quad (4.2)$$

El coeficiente B_n está dado en (3.15), de modo que resta conocer los coeficientes C_n y \bar{C}_n , definidos en (2.57, 2.60) que son idénticos en este caso particular, ya que la condición inicial es una función real. De la definición C_n se tiene la siguiente igualdad

$$C_n = B_n \sqrt{\frac{2}{a}} \int_0^a \sin(p_j r) \sin(k_n r) dr, \quad (4.3)$$

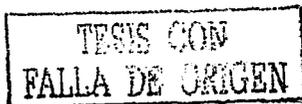
donde se ha simplificado $p_j \equiv j\pi/a$. La integral se puede resolver analíticamente dando como resultado

$$C_n = (-1)^j \sqrt{\frac{2}{a}} B_n \frac{p_j \sin(k_n a)}{k_n^2 - p_j^2}. \quad (4.4)$$

Conociendo este valor, encontramos por sustitución el coeficiente $C_n \bar{C}_n = C_n^2$ que toma el valor

$$C_n^2 = \frac{2}{a} \frac{2(\lambda - 2ik_n)}{\lambda a + 1 - 2ik_n a} \frac{p_j^2 \sin^2(k_n a)}{(k_n^2 - p_j^2)^2}. \quad (4.5)$$

En las tablas 4.1, 4.2, se muestran los primeros quince valores de el coeficiente C_n^2 , tomando como estado inicial $j = 1$ y $j = 5$ respectivamente. Observe que la contribución más grande se tiene para el coeficiente correspondiente al estado inicial. Esto es debido a que el estado inicial es muy parecido al estado resonante. En la gráfica 4.1 se muestra la convergencia de la suma de las partes reales correspondientes a la tabla 4.1 del coeficiente C_n^2 en donde se ha hecho la suma finita $\sum_{n=1}^N C_n^2$ para los primeros veinte valores. Notamos que para este caso en particular se tiene una buena aproximación de la unidad tomando sólo el primer término de la serie con un error del orden de 10^{-4} .



n	$\text{Re}C_n^2$	$\text{Im}C_n^2$
1	0.999916	$-8.036548 \times 10^{-05}$
2	4.479135×10^{-05}	2.809825×10^{-06}
3	1.404502×10^{-05}	1.318867×10^{-06}
4	7.046375×10^{-06}	8.817539×10^{-07}
5	4.261843×10^{-06}	6.665068×10^{-07}
6	2.855057×10^{-06}	5.357669×10^{-07}
7	2.040865×10^{-06}	4.468106×10^{-07}
8	1.525951×10^{-06}	3.818213×10^{-07}
9	1.179226×10^{-06}	3.3197×10^{-07}
10	9.345615×10^{-07}	2.923521×10^{-07}
11	7.555371×10^{-07}	2.600116×10^{-07}
12	6.206984×10^{-07}	2.330547×10^{-07}
13	5.167191×10^{-07}	2.102088×10^{-07}
14	4.349561×10^{-07}	1.905847×10^{-07}
15	3.695989×10^{-07}	1.73541×10^{-07}

Cuadro 4.1: Cálculo de los primeros quince coeficientes C_n^2 , con los parámetros $\lambda = 200$, $a = 1$ y el estado $j = 1$.

n	$\text{Re}C_n^2$	$\text{Im}C_n^2$
1	4.268203×10^{-06}	1.320403×10^{-07}
2	2.217015×10^{-05}	1.369677×10^{-06}
3	8.490207×10^{-05}	7.838849×10^{-06}
4	0.000463	5.630061×10^{-05}
5	0.998082	-0.000685
6	0.000755	0.000145
7	0.000208	4.605677×10^{-05}
8	0.000101	2.537215×10^{-05}
9	6.065781×10^{-05}	1.715379×10^{-05}
10	4.095394×10^{-05}	1.285506×10^{-05}
11	2.964893×10^{-05}	1.023081×10^{-05}
12	2.248925×10^{-05}	8.46251×10^{-06}
13	1.763452×10^{-05}	7.187031×10^{-06}
14	1.417466×10^{-05}	6.220522×10^{-06}
15	1.161405×10^{-05}	5.460538×10^{-06}

Cuadro 4.2: Cálculo de los primeros quince coeficientes C_n^2 , con los parámetros $\lambda = 200$, $a = 1$ y el estado $j = 5$.

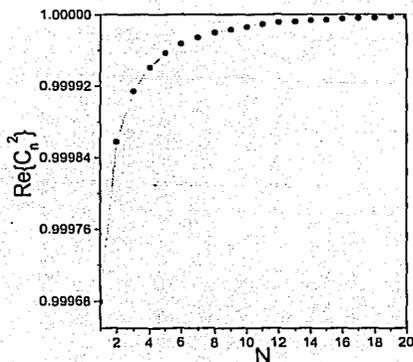


Figura 4.1: Se muestra la convergencia de la serie $\text{Re}(\sum_{n=1}^N C_n^2)$ para los primeros veinte valores de N correspondientes a la tabla 4.1.

4.2. Decaimiento del estado base

Consideramos para este ejemplo al estado base de la caja de potencial infinito, es decir, $j = 1$ con los parámetros $\lambda = 200$, $a = 1$. En todos los cálculos se tomará como unidad de tiempo la vida media del primer estado resonante $\tau_1 = (4\alpha_1\beta_1)^{-1}$, que corresponde a la vida media del estado base de la caja de potencial infinito. Esto es porque se estudiará la evolución temporal de estados diferentes a éste, y se compararán.

Comenzaremos el estudio de este estado con la probabilidad de supervivencia, para mostrar su comportamiento en vez de estudiar $S(t)$ estudiaremos $\ln\{S(t)\}$ ¹. La gráfica de esta probabilidad se muestra en la figura 4.2, que exhibe tres regiones diferentes de la evolución temporal; (a) Región exponencial para un intervalo de tiempo de cero vidas medias hasta 47 vidas medias aproximadamente;² (b) Región de interferencia que se presenta aproximadamente de 47 vidas medias hasta 67 vidas medias y (c) Región no exponencial

¹Se estudia $\ln\{S(t)\}$ porque la función logaritmo amplifica el comportamiento de $S(t)$.

²Un análisis detallado mostrará que en una vecindad del origen no se presenta el decaimiento exponencial.

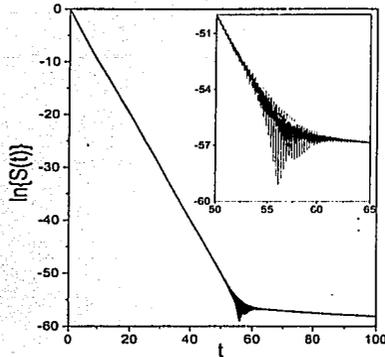


Figura 4.2: Gráfica de $\ln\{S(t)\}$ para el estado inicial $j = 1$ con los parámetros $\lambda = 200$ y $a = 1$, en la misma gráfica se muestra un zoom de la región de interferencia.

a partir de 67 vidas medias. Estas tres regiones son las discutidas en §2.6, para la cual sólo se encontraron las expresiones asintóticas para tiempos del orden de la vida media y tiempos largos. Aunque cabe mencionar, la expresión de la probabilidad para tiempos del orden de vida media no es válida en una vecindad del origen, ya que se puede mostrar que se hace una corrección al término exponencial para tiempos muy cortos $t \ll \tau_1$.

La gráfica de $\ln\{S(t)\}$ para el estado base, divide el cuadrante en dos. Lo que nos proporciona un criterio para decidir cuando un estado decae más rápidamente que éste ó más lentamente.

La región de interferencia es la que llama un poco más la atención, por presentar fuertes oscilaciones que no son de sorprenderse, ya que la expresión de la parte de interferencia de la probabilidad de supervivencia tiene esta estructura. Pero la interpretación física no es muy clara, porque el sistema decae y no hay una onda incidente desde el exterior para producir tal efecto, es decir, aumentar la probabilidad.

En la figura 4.3 se muestra la gráfica de $\ln\{P(t)\}$ que corresponde a la probabilidad de no escape. Al igual que la probabilidad de supervivencia, presenta las tres regiones exponencial, interferencia y no exponencial. Notamos que al igual que la probabilidad de

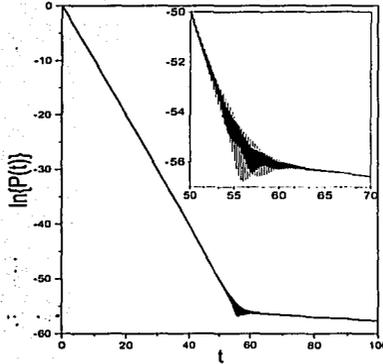


Figura 4.3: Gráfica de $\ln(P(t))$ para el estado inicial $j = 1$ con los parámetros $\lambda = 200$ y $a = 1$, en la misma gráfica se muestra un zoom de la región de interferencia.

supervivencia ésta presenta también oscilaciones en la región de interferencia. Esto nos hace pensar que el sistema presenta un fenómeno que llamamos de "respiración", es decir, en esta región la función de onda crece y decrece rápidamente, como si el sistema se opusiera a decaer, tratando de regresar a un estado anterior.

Notemos que las gráficas son muy parecidas, por lo que es conveniente compararlas. La comparación de éstas se muestra en la figura 4.4. Notamos que son prácticamente iguales en la región exponencial, presentan una diferencia casi no visible en la región puramente no exponencial y en la región de interferencia presentan una diferencia notoria en la amplitud de las oscilaciones.

La diferencia entre las oscilaciones de estas probabilidades, claramente nos dan la diferencia conceptual entre una y otra probabilidad. Recordemos que miden cantidades físicas diferentes. El estudio de la densidad de probabilidad $|\Psi(r, t)|^2$, dentro de la región de interacción, se muestra en la figura 4.5 y nos permite entender el comportamiento oscilatorio de la probabilidad de no escape

La figura 4.5a presenta el comportamiento de la densidad de probabilidad en la región exponencial, observamos que ésta decae de una forma muy uniforme, además no se pierde

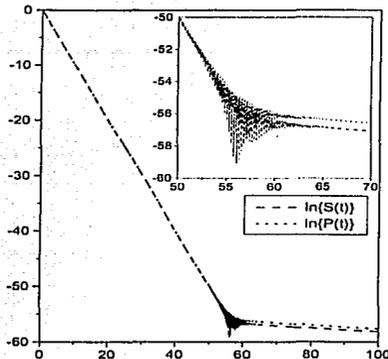


Figura 4.4: Comparación de las gráficas de $\ln(S(t))$ y $\ln(P(t))$.

por completo la distribución de ésta, es decir, la probabilidad de encontrar a la partícula en un punto dentro de la región de interacción decae a la misma razón que en cualquier otro punto dentro de la misma. La figura 4.5b presenta la gráfica de la densidad de probabilidad para tiempos que caen dentro de la región de interferencia. Observamos inmediatamente que la distribución de probabilidad cambió totalmente de la distribución inicial, además no siempre está decayendo, para el tiempo $t = 56.1\tau_1$ la distribución es considerablemente menor que para el tiempo $t = 58\tau_1$. Esto es el efecto de que el sistema “respira”. La figura 4.5c muestra la densidad de probabilidad para tiempos largos, es decir, en la región no exponencial, para estos tiempos la distribución se a deformado por completo, sin embargo, muestra que es muy semejante para cualquier tiempo y decae al parecer a la misma razón en todos sus puntos de forma análoga a la región exponencial.

Este comportamiento de la densidad de probabilidad exhibe el comportamiento oscilatorio de la probabilidad de no escape en la región de interferencia. Además, se observa que la distribución de probabilidad es mayor cerca del alcance del potencial. Esto nos permite entender porque la curva de la probabilidad de supervivencia va por debajo de la curva de la probabilidad de no escape, debido a que la función inicial tiende a cero en este límite. El hecho de que las probabilidades de supervivencia y no escape sean muy parecidas, nos

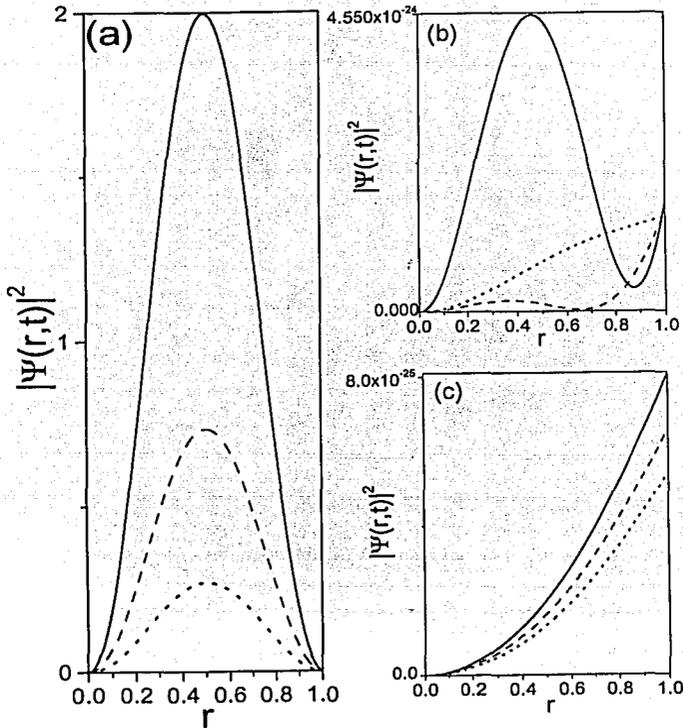


Figura 4.5: Se muestra la densidad de probabilidad dentro de la región de interacción; (a) En la región de decaimiento exponencial para tiempos $t = 0$ línea continua, $t = 1$ línea cortada, $t = 2$ línea punteada; (b) En la región de interferencia para los tiempos $t = 54$ línea continua, $t = 56.1$ línea cortada, $t = 58$ línea punteada; (c) En la región no exponencial para los tiempos $t = 70$ línea continua, $t = 75$ línea cortada, $t = 80$ línea punteada; Las unidades de tiempo son en vidas medias del estado base τ_1 .

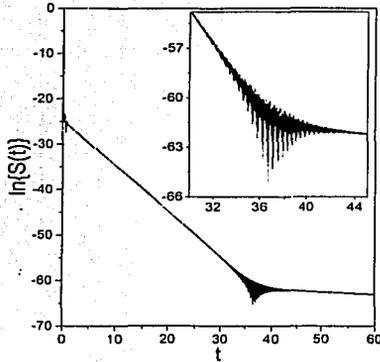


Figura 4.6: Gráfica de $\ln\{S(t)\}$ para el estado inicial $j = 5$ con los parámetros $\lambda = 200$ y $\alpha = 1$, en la misma gráfica se muestra un zoom de la región de interferencia; El tiempo se mide en unidades τ_1 correspondiente al estado base.

da una de las razones para tomar el estado base de la caja de potencial infinito como referencia en el decaimiento, ya que cualquier curva $\ln\{S(t)\}$ o $\ln\{P(t)\}$ de un estado arbitrario se puede comparar con la probabilidad de supervivencia de este estado.

4.3. Decaimiento de un estado excitado

En este ejemplo tomaremos como estado inicial un estado excitado de la caja de potencial infinito. En particular tomaremos el estado $j = 5$ del cual ya se tienen todos los coeficientes calculados en §4.1, por lo que el trabajo es principalmente numérico. Los coeficientes C_n^j se muestran en la tabla 4.2, observamos que la distribución de los coeficientes es más ancha que la distribución del estado base de la caja de potencial infinito (tab. 4.1). La distribución tiene como centro el coeficiente C_5^j lo que indica que el término dominante en las series de las probabilidades será el correspondiente al quinto estado resonante, con vida media τ_5 .

La gráfica de $\ln\{S(t)\}$ se muestra en la figura 4.6, en la cual observamos que existen dos

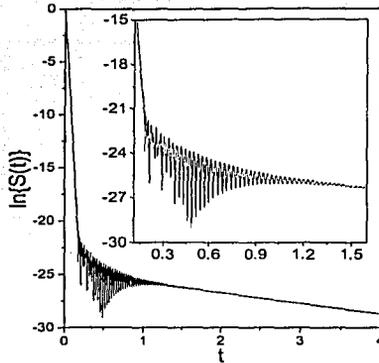


Figura 4.7: Gráfica de $\ln\{s(t)\}$ para el estado inicial $j = 5$ con los parámetros $\lambda = 200$ y $\alpha = 1$, en la misma gráfica se muestra un zoom de la región de interferencia; El tiempo se mide en unidades de vida media τ_1 correspondiente al primer estado resonante.

regiones de decaimiento exponencial. La primera corresponde al quinto estado resonante y la segunda al decaimiento del primer estado resonante, la gráfica también muestra un zoom de la región de interferencia entre el decaimiento exponencial y el decaimiento no exponencial. Sin embargo también se tiene una región de interferencia entre las contribuciones exponenciales, que corresponde al cambio de vida media. Esta región se muestra en la figura 4.7 en la cual observamos que rápidamente hace el cambio. Se lee de la gráfica que solamente el estado inicial decae con vida media τ_5 durante los primeros $0.2\tau_1$ aproximadamente, que corresponde aproximadamente a $24.7\tau_5$, ya que el tiempo de vida media del primer estado resonante es mucho mayor que el del quinto estado resonante. Toman un valor aproximado de $\tau_1 \approx 329.2$ y $\tau_5 \approx 2.7$.

Además observamos que el decaimiento es más rápido que el del estado base. Esto es porque al decaer el sistema sufre una desviación debida al quinto estado resonante, el cual decae más rápido que el primer estado resonante.

Se puede calcular aproximadamente el tiempo para el cual inicie el cambio entre las regiones exponenciales, es decir, que el sistema pase de vida media τ_5 a τ_1 . Suponiendo

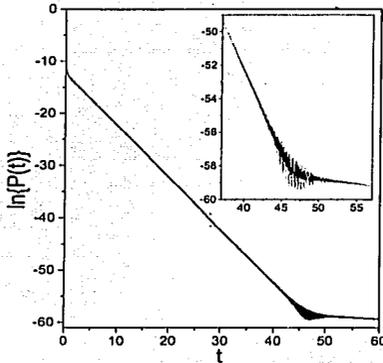


Figura 4.8: Gráfica de $\ln\{P(t)\}$ para el estado inicial $j = 5$ con los parámetros $\lambda = 200$ y $a = 1$, en la misma gráfica se muestra un zoom de la región de interferencia; El tiempo se mide en unidades τ_1 correspondiente al estado base.

que la amplitud de supervivencia es aproximadamente la contribución de la suma de dos términos únicamente, correspondientes al primer y quinto estados resonantes, es decir

$$A(t) \approx C_1^2 e^{-ik_1^2 t} + C_5^2 e^{-ik_5^2 t}, \quad (4.6)$$

esto es porque sabemos que el término correspondiente al primer estado resonante será el dominante después de un tiempo finito. Para medir el tiempo en unidades de vida media τ_1 , sólo hay que sustituir t por t/τ_1 en la expresión de la amplitud de supervivencia. Ahora la pregunta es, ¿para qué valor del tiempo ambos términos contribuyen igual a la amplitud de supervivencia?. Esto lo responderemos igualando el cuadrado de las normas de cada término

$$|C_1^2|^2 e^{-t/\tau_1} = |C_5^2|^2 e^{-t/\tau_5}, \quad (4.7)$$

que al despejar el tiempo en unidades de vida media τ_1 se obtiene

$$\tau_S = \left(\frac{\tau_1}{\tau_5} - 1 \right)^{-1} \ln \left(\frac{|C_5^2|^2}{|C_1^2|^2} \right). \quad (4.8)$$

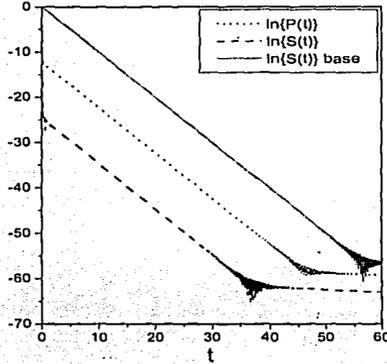


Figura 4.9: Comparación de las Gráficas $\ln\{S(t)\}$, $\ln\{P(t)\}$ correspondientes a las figuras 4.6,4.8 al mismo tiempo se compara con la gráfica de $\ln\{S(t)\}$ del estado base.

Es una expresión sencilla en términos de los coeficientes y la vidas medias τ_1 y τ_5 . De la tabla 4.2 se puede leer el valor de los coeficientes, para lo que encontramos que el valor $\tau_5 \approx 0.2017\tau_1$ que aproxima muy bien el valor medido en la gráfica que es $\tau_5 \approx 0.188\tau_1$. De esto podemos decir que la expresión (4.8) que si no tiene precisión cuantitativa si la tiene cualitativa, para el valor del tiempo en que inicia la interferencia de los términos exponenciales. Claramente se necesitan tomar otras consideraciones para tener una expresión más exacta.

La probabilidad de no escape se muestra en la gráfica 4.8 y al igual que en el comportamiento de la probabilidad de supervivencia tenemos dos regiones exponenciales, además de las regiones de interferencia y no exponencial. Sin embargo, las gráficas son diferentes cualitativamente, por lo que las comparamos. En la figura 4.9 se muestran las gráficas correspondientes a $\ln\{S(t)\}$ (línea cortada), $\ln\{P(t)\}$ (línea punteada) y la gráfica de $\ln\{S(t)\}$ del estado base de la caja de potencial infinito (línea continua), en esta gráfica se ve claramente que ambas probabilidades del estado excitado decaen más rápidamente que el estado base. Sin embargo la probabilidad de no escape decae más lentamente que la probabilidad de supervivencia, es decir, el estado inicial cambia el comportamiento

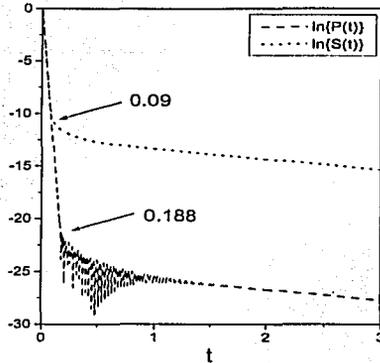


Figura 4.10: Comparación de las Gráficas $\ln\{S(t)\}$, $\ln\{P(t)\}$ para las primeras tres vidas medias.

cuantitativo de las probabilidades. Se observa que inicialmente decaen con la misma vida media τ_5 pero el cambio al decaimiento con la vida media τ_1 es más corto para la probabilidad de no escape y no presenta oscilaciones en la región de interferencia entre las contribuciones exponenciales ($\tau_5 - \tau_1$). Se puede hacer el análisis del valor en que se espera esta desviación de la curva, semejante al análisis que se hizo para la probabilidad de supervivencia. Sólo hay que notar la diferencia que hay en ambas, ya que $P(t)$ está dado para la región exponencial como una suma doble. Haciendo la misma suposición que se hizo anteriormente se tiene una expresión para el valor del tiempo en unidades de vida media τ_1 , para la desviación de $P(t)$ dando como resultado

$$\tau_P = \left(\frac{\tau_1}{\tau_5} - 1\right)^{-1} \ln \left(\frac{\mathfrak{Re}\{[C_5]^2 I_{55}\}}{\mathfrak{Re}\{[C_1]^2 I_{11}\}} \right), \quad (4.9)$$

que al ser calculada se tiene un valor para $\tau_P \approx 0.10085\tau_1$ que coincide muy bien con el valor medido en la gráfica que es de $\tau_P = 0.09\tau_1$. Al igual que en el caso de la probabilidad de supervivencia, esta ecuación (4.9) nos da el valor para el cual se espera la desviación. Los puntos de ambas desviaciones están marcados en la figura 4.10, que son prácticamente

los calculados de forma analítica.

Para completar el estudio de la evolución temporal de este estado inicial, calcularemos $|\Psi(r, t)|^2$. La cual se muestra en la figura 4.11, en donde se han graficado seis regiones.

(a) El decaimiento exponencial con vida media τ_5 . Muestra que la función de onda inicial decae exponencialmente, de forma análoga al caso del estado base (§4.2). Sin embargo observamos que para el valor $t = 0.01$ se tiene una deformación de la distribución, dando mayor probabilidad al quinto máximo de la distribución y una menor probabilidad al primer máximo.

(b) En la región de interferencia ($\tau_3 - \tau_1$) del decaimiento exponencial, para el cual la distribución se ve totalmente destruida comparada con la distribución inicial. Observamos que el máximo de la distribución cambia de posición, lo que nos llevaría a pensar que las oscilaciones de la probabilidad de supervivencia se pueden presentar por este cambio de la distribución, mientras que ésta sigue disminuyendo. Es de interés notar que la probabilidad de no escape no presenta estas oscilaciones, debido que para estos tiempos el sistema no presenta el fenómeno de "respiración".

(c) En la región de decaimiento exponencial con vida media τ_1 . Se observa en la gráfica que la distribución se ha deformado hasta tener una distribución igual a la del primer estado resonante, es decir, el sistema no sólo decae con vida media τ_1 , sino que en realidad la distribución inicial se deforma hasta convertirse en la distribución del primer estado resonante, la cual se confunde con la del estado base (§4.2).

(d) En la región de interferencia exponencial - no-exponencial de la probabilidad de supervivencia. Se observa que el centro de la distribución oscila muy poco respecto al centro $a/2$, lo que nos hace notar que la probabilidad de supervivencia tiene una estructura más compleja que la probabilidad de no escape. Ya que ésta presenta la región de interferencia antes que la probabilidad de no escape.

(e) En la región de interferencia exponencial - no exponencial de la probabilidad de no escape. Se tiene el efecto de "respiración" del sistema, dando como resultado las oscilaciones de la probabilidad de no escape de forma análoga al estado base (§4.2).

(f) En la región de decaimiento no exponencial para ambas probabilidades, se tiene que la distribución es idéntica a la distribución del estado base (§4.2) en la misma región. Lo que nos lleva a concluir que la evolución temporal todos los estados de la caja de

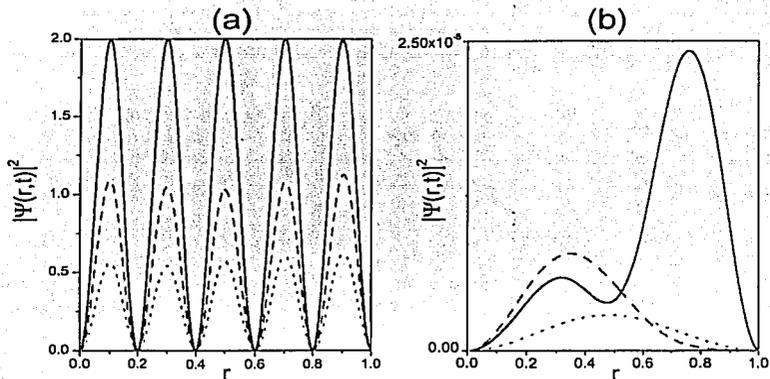
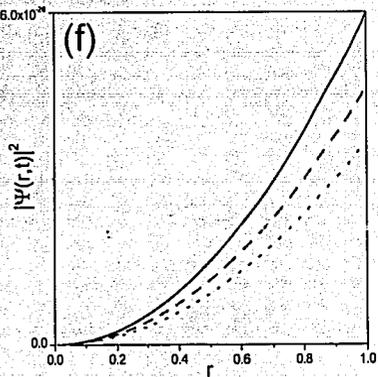
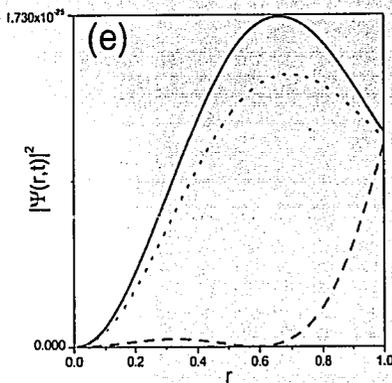
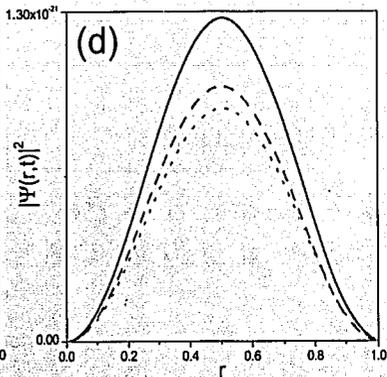
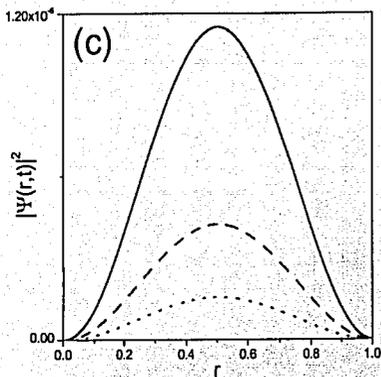


Figura 4.11: Se muestra la Gráfica de la densidad de probabilidad $|\Psi(r,t)|^2$; En la región exponencial para los tiempos (a) $t = 0$ línea continua, $t = 0.005$ línea cortada, $t = 0.01$ línea punteada (b) $t = 0.2$ línea continua, $t = 0.488$ línea cortada, $t = 1.1$ línea punteada (c) $t = 2$ línea continua, $t = 3$ línea cortada, $t = 4$ línea punteada; En la región no exponencial para los tiempos (d) $t = 36.45$ línea continua, $t = 36.66$ línea cortada, $t = 36.78$ línea punteada (e) $t = 46.59$ línea continua, $t = 46.80$ línea cortada, $t = 46.92$ línea punteada (f) $t = 57$ línea continua, $t = 62$ línea cortada, $t = 67$ línea punteada; El tiempo es medido en unidades de vida media del estado base τ_1 .

potencial infinito convergen a la evolución temporal del primer estado resonante después de un tiempo τ , es decir, tienen un fenómeno de pérdida de memoria.



TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

Capítulo 5

Decaimiento de estados iniciales de mínima incertidumbre

Un estado más general que los estudiados en el capítulo 4 son los estados localizados dentro de la región de interacción del potencial. Esto es debido a que al calcular el estado inicial en desarrollo, se tendrá un conjunto mayor de estados resonantes para aproximar el estado inicial, caso contrario al estudiado en §4 para el cual sólo bastaba con los primeros diez estados resonantes para obtener una buena aproximación.

Tomaremos como ejemplo de estos estados, el caso en que también cumplan ser de mínima incertidumbre. Esto es con la motivación de estudios realizados en 1994 por Lene y Rand [3] sobre la evolución temporal del decaimiento cuántico de estados de mínima incertidumbre. Para lo cual encontraron que dichos estados tienen un tiempo de vida mayor que un estado que no cumpla ser de mínima incertidumbre. Sin embargo, la solución exacta al problema [1] expuesta en §2, nos lleva a pensar que si existe una diferencia cualitativa del comportamiento de dichos estados, es debido al hecho de que el estado sea localizado y no de mínima incertidumbre.

Definimos el estado de mínima incertidumbre, mediante el principio de Heisenberg en una dimensión. Calculando el estado de mínima incertidumbre en §5.1 que corresponde a una solución tipo gaussiana, la cual generalizamos a la correspondiente en el espacio. Se hace el estudio de la evolución temporal de dos casos particulares, *onda saliente* en §5.2 y *estado gato de Schrödinger* en §5.3, de los cuales se propone localizar el estado en diferentes puntos, cerca del origen, en el centro y cerca del alcance del potencial.

5.1. Estado de mínima incertidumbre

El principio de incertidumbre de Heisenberg, establece

$$\sqrt{(\Delta A)^2} \sqrt{(\Delta B)^2} \geq \frac{1}{2} |C|, \quad (5.1)$$

donde A y B son operadores hermitianos y cuyo conmutador es $[A, B] = iC$. Así la desigualdad (5.1) impide que sean medidos dos operadores al mismo tiempo con incertidumbre cero, si su conmutador es diferente de cero. Sin embargo se pueden medir con mínima incertidumbre, esto es, que se satisfaga la igualdad en (5.1). Esta igualdad es equivalente a la ecuación diferencial [7, 8]

$$\left(\delta A + iC \frac{\delta B}{2\delta B^2} \right) \chi = 0. \quad (5.2)$$

Dado que las variables conjugadas p_x y x cumplen $[p_x, x] = -i$, identificamos $\delta A = \delta p_x$, $\delta B = \delta x$ y $\delta B^2 = \sigma_x^2$, se tiene que $C = -1$ y la solución de la ecuación (5.2) está dada mediante

$$\chi(x) = \Lambda_x \exp \left(-\frac{(x - x_0)^2}{4\sigma_x^2} \right) e^{ik_x x}, \quad (5.3)$$

donde Λ_x es el coeficiente de normalización.

Además la relación

$$[p_x, x_k] = -i\delta_{lk} \quad k, l = 1, 2, 3, \quad (5.4)$$

nos permite extender este resultado a tres dimensiones, para el cual el estado correspondiente es

$$\chi(x, y, z) = \Lambda \exp \left[-\left(\frac{(x - x_0)^2}{4\sigma_x^2} + \frac{(y - y_0)^2}{4\sigma_y^2} + \frac{(z - z_0)^2}{4\sigma_z^2} \right) \right] e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{x}}, \quad (5.5)$$

que en general es una expresión complicada de trabajar. Pero se puede reducir considerablemente si se pide que tenga la misma desviación, es decir, $\sigma_x = \sigma_y = \sigma_z = \sigma$. Escribiéndola en coordenadas esféricas nos da

$$\chi(r) = \Lambda \exp \left(-\frac{(r - r_0)^2}{4\sigma^2} \right) e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}}, \quad (5.6)$$

que corresponde al estado de mínima incertidumbre en el espacio. Sin embargo este estado lo queremos desarrollar en armónicos esféricos, es decir, consideraremos únicamente estados simétricamente esféricos, los cuales tienen el desarrollo

$$\chi(r) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \frac{\Psi_l(r)}{r} Y_l^m(\Omega). \quad (5.7)$$

Evidentemente es equivalente a desarrollar la función de onda $\Psi(r) = r\chi(r)$ ¹. Para encontrar los estados de mínima incertidumbre que cumplan el desarrollo (5.7). Utilizamos el desarrollo de la exponencial compleja

$$e^{iz \cos(\theta)} = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l a_{lm} j_l(z) Y_l^m(\Omega), \quad (5.8)$$

donde Ω denota el ángulo sólido, y z en general es una cantidad compleja. El estado (5.6) lo podemos escribir

$$\Psi(r) = \Lambda r e^{-\frac{r^2}{4\sigma^2}} e^{ik_0 r \cos(\theta) + k'_0 r \cos(\theta')} \quad \text{con} \quad k'_0 = \frac{r_0}{2\sigma^2}. \quad (5.9)$$

Ésta exhibe claramente la relación del estado de mínima incertidumbre con la ecuación (5.8). Dando los siguientes casos para la componente angular cero del estado de mínima incertidumbre con simetría radial:

1. La distribución y el vector de propagación tienen simetría radial ($\theta' = \theta = 0$), que corresponderá a una onda esférica y cuyo estado es

$$\Psi(r) = \Lambda_1 r e^{-\frac{(r-r_0)^2}{4\sigma^2}} e^{ik_0 r}. \quad (5.10)$$

2. La distribución tiene simetría radial ($\theta' = 0$) pero su propagación no conserva la misma simetría. En este caso la componente $l = 0$ del estado es

$$\Psi(r) = \Lambda_2 r e^{-\frac{(r-r_0)^2}{4\sigma^2}} j_0(k'_0 r). \quad (5.11)$$

3. La distribución no tiene simetría radial, sin embargo el vector de propagación sí la tiene, dando la componente angular $l = 0$ del estado

$$\Psi(r) = \Lambda_3 r e^{-\frac{r^2}{4\sigma^2}} e^{ik_0 r} j_0(-ik'_0 r) \quad \text{con} \quad k'_0 = \frac{r_0}{2\sigma^2}. \quad (5.12)$$

¹ Este desarrollo es empleado cuando se pide que la función de onda tenga simetría esférica y además sea solución de la ecuación de Schrödinger radial

4. La distribución y el vector de propagación tienen la misma simetría esférica ($\theta = \theta'$), lo que nos proporciona en este caso la componente $l = 0$ del estado

$$\Psi(r) = \Lambda_1 r e^{-\frac{r^2}{4\sigma^2}} j_0(zr) \quad \text{con} \quad z = k_0 - i \frac{r_0}{2\sigma^2}. \quad (5.13)$$

Que son todos los casos posibles para la función (5.6) con simetría esférica.

5.2. Decaimiento de un estado de mínima incertidumbre (Onda saliente)

Consideraremos como primer ejemplo, para el estudio de la evolución temporal del decaimiento de estados de mínima incertidumbre. El correspondiente a la onda esférica saliente dado por

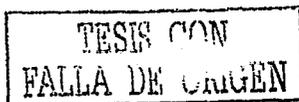
$$\Psi(r) = \Lambda^{-1} r e^{-\frac{(r-r_0)^2}{4\sigma^2}} e^{ik_0 r}, \quad (5.14)$$

que corresponde a una forma Gaussiana modulada por r , de ancho σ que es un parámetro arbitrario positivo, coeficiente de normalización Λ , los parámetros r_0 y k_0 corresponden a las condiciones iniciales, centro de la distribución y momento inicial respectivamente. Este estado nos da un mayor entendimiento de las expresiones encontradas para el estudio del decaimiento, ya que al ser calculado en términos de la base $u_n(r)$ se tiene un mayor traslape² de la función con cada estado resonante, caso contrario a los ejemplos anteriormente estudiados. Para esto hay que hacer el cálculo de los coeficientes Λ , C_n y \bar{C}_n , el cual será expuesto en §5.2.1 tomando el mismo modelo del potencial $\lambda\delta(r-a)$, del que ya tenemos el conjunto completo de estados resonantes $\{u_n(r)\}$ §3.1. Sin embargo, las expresiones que se encuentran para los coeficientes Λ , C_n y \bar{C}_n no son expresiones cerradas³ y se tiene que utilizar un método numérico para aproximarlos. Por experiencia sabemos que al aproximar un valor, se tienen errores numéricos por lo que nos vemos en la necesidad de comprobar el método⁴ que utilizamos. Verificamos éste, comprobando que se cumplen ciertas relaciones de suma para dichos coeficientes §5.2.2. Teniendo la seguridad en el método empleado para el cálculo de los coeficientes, podemos estudiar las probabilidades de supervivencia $S(t)$ §5.2.3 y no escape $P(t)$ §5.2.4.

²Se necesita un número mayor de estados resonantes para aproximar la función de onda inicial.

³Nos referimos a que las integrales que se involucran en el cálculo de los coeficientes no se pueden resolver analíticamente.

⁴Esto es debido a la variedad de parámetros que tiene el estado inicial k_0 , r_0 y σ .



5.2.1. Cálculo de los coeficientes Λ , C_n y \bar{C}_n

La condición de normalización se hace dentro de el rango de interacción, por lo que el valor de Λ es

$$|\Lambda|^2 = \int_0^a r^2 e^{-\frac{(r-r_0)^2}{2\sigma^2}} dr. \quad (5.15)$$

Resolvemos la integral por partes dando como resultado

$$|\Lambda|^2 = (\sigma^3 + \sigma r_0^2) \int_{z_1}^{z_2} e^{-\frac{z^2}{2}} dz + \sigma^2 r_0 \left(e^{-\frac{z_1^2}{2}} - e^{-\frac{(a-r_0)^2}{2\sigma^2}} \right) - \sigma^2 a e^{-\frac{(a-r_0)^2}{2\sigma^2}}, \quad (5.16)$$

en donde $z_1 = -\frac{r_0}{\sigma}$ y $z_2 = \frac{a-r_0}{\sigma}$. La integral que aparece en esta ecuación es una función conocida $P(z)$ definida mediante

$$P(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^z e^{-\frac{t^2}{2}} dt. \quad (5.17)$$

Sin embargo ésta no es la relación más apropiada para expresar la integral, ya que sólo hay que sustituir en la expresión (5.17) la integral por el valor $\sqrt{2\pi}(P(z_2) - P(z_1))$. Es más apropiado expresar la función $P(z)$ en términos de una función conocida $\omega(z)$ [9] la cual está relacionada con la función de error complementario. La identidad de la función normal $P(z)$ con la función de error complementario está dada mediante $\omega(z)$ por

$$P(z) = 1 - \frac{1}{2} e^{-\frac{z^2}{2}} \omega\left(\frac{iz}{\sqrt{2}}\right). \quad (5.18)$$

Así la integral que se tiene que calcular toma la forma

$$\int_{z_1}^{z_2} e^{-\frac{z^2}{2}} dz = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \left[e^{-\frac{z_2^2}{2}} \omega\left(\frac{-iz_2}{\sqrt{2}\sigma}\right) - e^{-\frac{(a-r_0)^2}{2\sigma^2}} \omega\left(\frac{i(a-r_0)}{\sqrt{2}\sigma}\right) \right], \quad (5.19)$$

que al parecer complica la expresión de $|\Lambda|^2$. Pero es más fácil estudiar el comportamiento asintótico de esta función, que el de la integral (5.17) y tiene una mayor ventaja para hacer aproximaciones numéricas. Lo que será utilizado para el cálculo del coeficiente de normalización $|\Lambda|^2$ y como se podrá anticipar también para el cálculo de los coeficientes C_n y \bar{C}_n . Los cuales calcularemos escribiendo el estado resonante $u_n(r) = B_n \sin(k_n r)$ en términos de exponenciales complejas, quedando una expresión para el coeficiente C_n como

$$C_n = \frac{\Lambda^{-1} B_n}{2i} (S_n^+ - S_n^-), \quad (5.20)$$

en donde se ha definido el coeficiente S_n^\pm como

$$S_n^\pm = \int_0^a r e^{-\frac{(r-r_0)^2}{2s^2}} e^{iK_n^\pm r} dr, \quad (5.21)$$

y las constantes $s = \sqrt{2}\sigma$ y $K_n^\pm = k_0 \pm k_n$. Reduciendo el cálculo del coeficiente a hacer la integral (5.21), donde sólo hay que sustituir el coeficiente correspondiente para cada integral. También notamos que el coeficiente \bar{C}_n tiene la misma forma, ya que el término complejo de la función de onda es dado por la exponencial $\exp(ik_0 r)$. Proporcionando la siguiente relación con respecto al parámetro k_0 , $\bar{C}_n(k_0) = C_n(-k_0)$, la cual simplifica considerablemente los cálculos. Así sólo calculando el coeficiente S_n^+ se tienen los otros coeficientes de forma inmediata. Completando cuadrados para los términos exponenciales de la integral (5.21) se puede escribir el coeficiente S_n como

$$S_n = e^\gamma \int_0^a r e^{-\frac{(r-R_0)^2}{2s^2}} dr, \quad (5.22)$$

en donde γ y R_0 son constantes complejas dadas por $\gamma = -\frac{s^2 K_n^2}{2} + iK_n r_0$ y $R_0 = r_0 + is^2 K_n$. Quedando una integral en la cual el cambio de variable es evidente $z = \frac{r-R_0}{s}$ así:

$$S_n = e^\gamma \left[s^2 \left(e^{-\frac{R_0^2}{2s^2}} - e^{-\frac{(a-R_0)^2}{2s^2}} \right) + s R_0 \int_{z_1}^{z_2} e^{-\frac{z^2}{2}} dz \right], \quad (5.23)$$

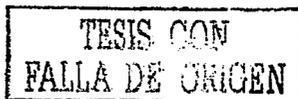
para la cual, la integral que aparece en la expresión (5.23) se calcula mediante (5.19). Encontramos así el conjunto completo de coeficientes C_n y \bar{C}_n .

5.2.2. Comprobación del método numérico

Las expresiones encontradas para los coeficientes Λ , C_n y \bar{C}_n son exactas. Sin embargo, para hacer el cálculo numérico de éstas, se tendrán errores al aproximar la función $\omega(z)$, lo cual arrastra errores en la aproximación de las probabilidades al hacer la suma. En contraparte con los ejemplos estudiados en §4.2 y §4.3, se tenía un coeficiente dominante en la serie y los demás eran despreciables⁶. Por lo que en este ejemplo se tienen que hacer pruebas al método numérico empleando para el cálculo de los coeficientes, esto es con la finalidad de tener confianza a los resultados. Las pruebas consisten esencialmente en las relaciones de suma de los coeficientes. Tomando los valores de los parámetros $\sigma = 10^{-2}$, $a = 1$ y $\lambda = 200$ fijos, calcularemos las relaciones de suma de los coeficientes para distintos valores de r_0 y k_0 . La primer relación es la regla de suma

⁵ Sin pérdida de generalidad sólo escribiremos S_n en vez de S_n^\pm .

⁶ Compare el orden de magnitud de los coeficientes de las tablas 4.1,4.2



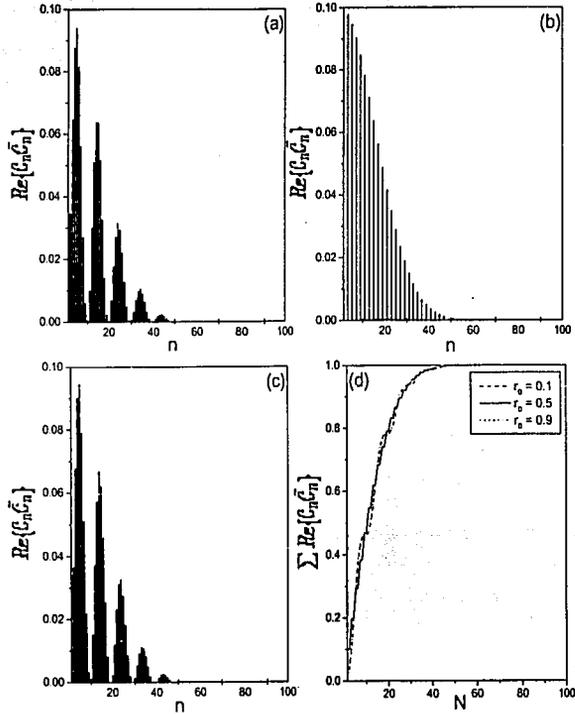


Figura 5.1: Se muestra la distribución de los coeficientes $\text{Re}\{C_n \bar{c}_n\}$ para los parámetros fijos $\sigma = 10^{-2}$, $\alpha = 1$, $\lambda = 200$ y $k_0 = 0$, y la convergencia de la serie correspondiente a la ecuación (5.24) para tres distintos valores de r_0 (a) La distribución con $r_0 = 0.1$ (b) La distribución para el valor $r_0 = 0.5$; (c) La distribución para el valor $r_0 = 0.9$; (d) La convergencia de la serie (5.24) correspondiente a las distribuciones; en todos los casos se tomó el valor de $n = 100$.

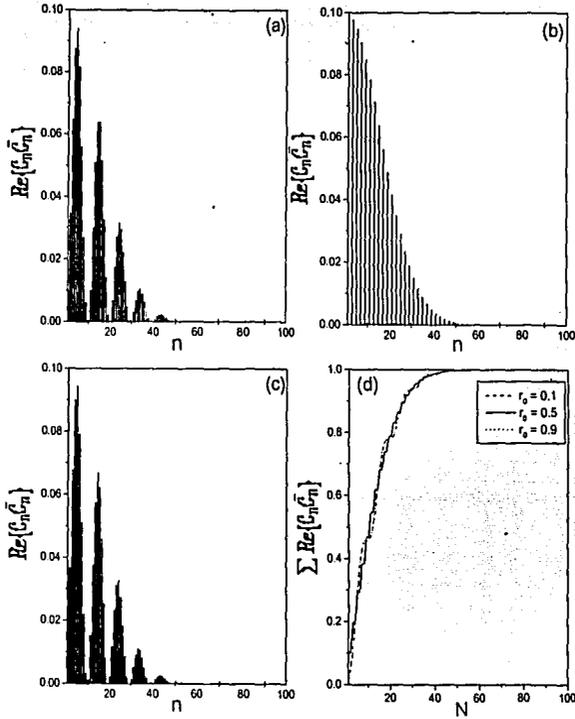


Figura 5.2: Se muestra la distribución de los coeficientes $\Re\{C_n \bar{C}_n\}$ para los parámetros fijos $\sigma = 10^{-2}$, $a = 1$, $\lambda = 200$ y $k_0 = \pi/2$, y la convergencia de la serie correspondiente a la ecuación (5.24) para tres distintos valores de r_0 (a) La distribución con $r_0 = 0.1$ (b) La distribución para el valor $r_0 = 0.5$; (c) La distribución para el valor $r_0 = 0.9$; (d) La convergencia de la serie (5.24) correspondiente a las distribuciones: en todos los casos se toma el valor de $n = 100$.

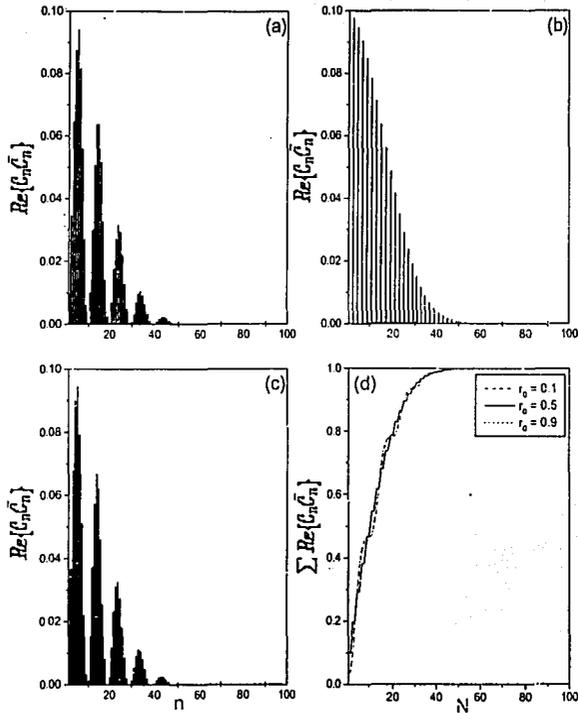


Figura 5.3: Se muestra la distribución de los coeficientes $Re\{C_n \bar{C}_n\}$ para los parámetros fijos $\sigma = 10^{-2}$, $\alpha = 1$, $\lambda = 200$ y $k_0 = \pi$, y la convergencia de la serie correspondiente a la ecuación (5.24) para tres distintos valores de r_0 (a) La distribución con $r_0 = 0.1$ (b) La distribución para el valor $r_0 = 0.5$; (c) La distribución para el valor $r_0 = 0.9$; (d) La convergencia de la serie (5.24) correspondiente a las distribuciones; en todos los casos se tomó el valor de $n = 100$.

$$\sum_{n=1}^{\infty} \Re\{C_n \bar{C}_n\} = 1. \quad (5.24)$$

Esta relación de suma se verifica para varios valores de los parámetros. En la figura 5.1 se tienen las gráficas de las distribuciones para los valores de $r_0 = 0.1$, $r_0 = 0.5$ y $r_0 = 0.9$ dejando el parámetro $k_0 = 0$. Notamos que las distribuciones para $r_0 = 0.1$ y $r_0 = 0.9$ son semejantes, mientras que la distribución para el valor $r_0 = 0.5$ es totalmente diferente. Además ésta tiene valores máximos para n impares y practicamente cero para valores de n pares. Ahora para mostrar la diferencia cualitativa, tomamos el valor de $k_0 = \pi/2$ que corresponde aproximadamente a un medio de la energía del primer estado resonante. Esta gráfica se muestra en la figura 5.2 para los mismos valores de r_0 . Por último mostramos la gráfica de estos coeficientes para un valor de $k_0 = \pi$ que corresponde aproximadamente a una energía de resonancia. La gráfica de estos coeficientes se muestra en la figura 5.3. Sin embargo, no se observa una diferencia cualitativa de las distribuciones, es decir, la forma de la distribución no se ve alterada al cambio de energía inicial del estado con mínima incertidumbre. Aunque, cuantitativamente sean diferentes, por ejemplo el primer coeficiente que se lee de la gráfica 5.1b tiene un valor de $\Re\{C_1 \bar{C}_1\} = 0.099528$ y el correspondiente a la gráfica 5.3b es $\Re\{C_1 \bar{C}_1\} = 0.09935$. Note que la diferencia es muy pequeña, sin embargo también la diferencia de energías lo es.

Otra relación que deben cumplir estos coeficientes es obtenida de la relación elemental

$$\frac{1}{2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} u_n(r) u_n(r') = \delta(r - r'). \quad (5.25)$$

Esta expresión la manipularemos para encontrar una relación que proporcione un criterio que indique si los coeficientes están bien calculados numéricamente. Primero multiplicamos por el estado inicial e integramos en el intervalo de interacción dando como resultado

$$\frac{1}{2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} C_n u_n(r) = \chi(r). \quad (5.26)$$

Observe que esta expresión no es más que la representación del estado inicial en términos de los estados resonantes, y cada valor C_n es la proyección de la función inicial con el estado n -ésimo correspondiente. Por último multiplicaremos la expresión (5.26) por el conjugado del estado resonante m -ésimo e integramos en el intervalo de interacción. Lo que nos proporciona otra relación de suma para los coeficientes

$$\frac{1}{2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} C_n I_{mn} = \bar{C}_m^*. \quad (5.27)$$

Esta expresión indica que el coeficiente I_{mn} juega un papel semejante a la función $2\delta_{-mn}$, ya que sabemos la relación general $C_{-m} = \tilde{C}_m^*$. Además nos proporciona un criterio para saber si los coeficientes que se están calculando numéricamente son correctos. Debido a que $I_{mn} \neq 2\delta_{-mn}$, porque la base de estados resonantes $u_n(r)$ no es ortogonal. Una de las características de esta relación de suma que hemos encontrado, es que se puede mostrar analíticamente la relación de doble suma para la probabilidad de no escape en $t = 0$. Por lo que es autoconsistente la relación, ya que si es válida la relación de doble suma para $P(0)$ es válida la relación (5.27) y viceversa.

Para mostrar la convergencia de esta serie (5.27), definimos la función $\Theta_m(N)$ como

$$\Theta_m(N) \equiv \frac{1}{2} \sum_{n=-N}^N C_n I_{mn} - \tilde{C}_m^* \quad (5.28)$$

Así la función $\Theta_m(N) \rightarrow 0$ cuando $N \rightarrow \infty$ para todo valor de m . Se muestra en la figura 5.4 los primeros 100 valores de $\Theta_m(N)$, su parte real y su parte imaginaria por separado con los parámetros $a = 1$, $\lambda = 200$, $k_0 = 0$, $r_0 = 0.1$ y $\sigma = 10^{-2}$ para los valores de $m = 1$ (Fig. 5.4a,a'); $m = 10$ (Fig. 5.4b,b') y $m = 40$ (Fig. 5.4c,c'). De forma análoga en las figuras 5.5 y 5.6 para el parámetro $r_0 = 0.5$ y $r_0 = 0.9$ respectivamente. Todas éstas tienen ya una convergencia a cero desde el valor $N = 60$. Observe que también la contribución más grande para la convergencia son los coeficientes $C_m I_{mm}$ y $C_{-m} I_{m(-m)}$ ya que se observa en las gráficas que la función hace un salto cuando N toma el valor de m . Con lo anterior se muestra numéricamente que la relación es válida empleando el método numérico, de tal forma que se tiene confianza al mismo, para el cálculo de las probabilidades de supervivencia $S(t)$ y de no escape $P(t)$.

5.2.3. Probabilidad de supervivencia $S(t)$

Las gráficas de la probabilidad de supervivencia se muestran en las figuras 5.7, 5.8, 5.9 correspondientes a los distintos valores de energía inicial $k_0 = 0, \pi/2, \pi$ respectivamente. El tiempo lo medimos en unidades de vida media del estado base de la caja de potencial infinito τ_1 .

Observamos que la probabilidad de supervivencia siempre decae más rápidamente para este estado, que para el estado de la caja de potencial infinito §4.2. Además el parámetro r_0 cambia el comportamiento cualitativo del decaimiento, teniendo al estado con parámetro $r_0 = 0.5$ como el estado que decae más lentamente en la región exponencial, y en la región no exponencial el estado que decae más lentamente es el que tiene parámetro $r_0 = 0.9$; El estado con parámetro $r_0 = 0.1$ decae más rápidamente que los otros dos, prácticamente en

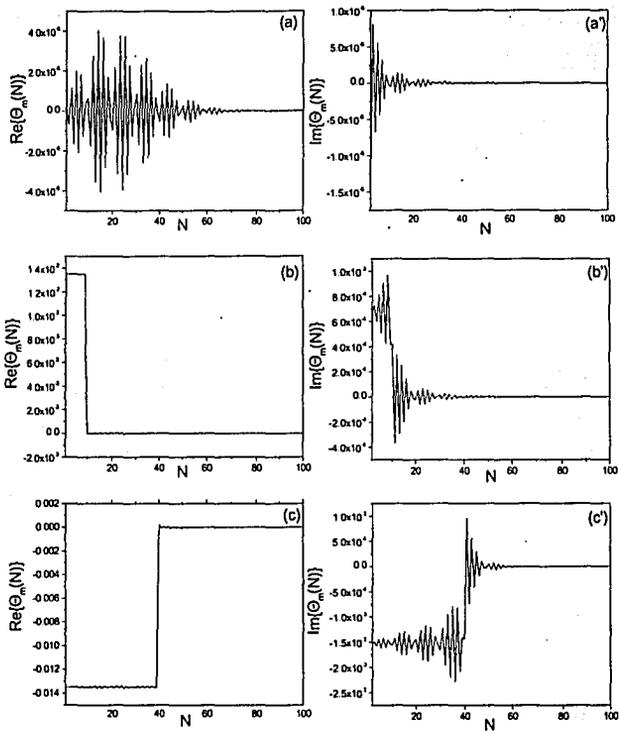


Figura 5.4: Se muestra numéricamente la convergencia de la serie (5.28) con los parámetros $\lambda = 200$, $\alpha = 1$, $k_0 = 0$, $r_0 = 0.1$ y $\sigma = 10^{-2}$ (a) $\Re\{\Theta_1(N)\}$, (a') $\Im\{\Theta_1(N)\}$; (b) $\Re\{\Theta_{10}(N)\}$; (b') $\Im\{\Theta_{10}(N)\}$; (c) $\Re\{\Theta_{40}(N)\}$, (c') $\Im\{\Theta_{40}(N)\}$.

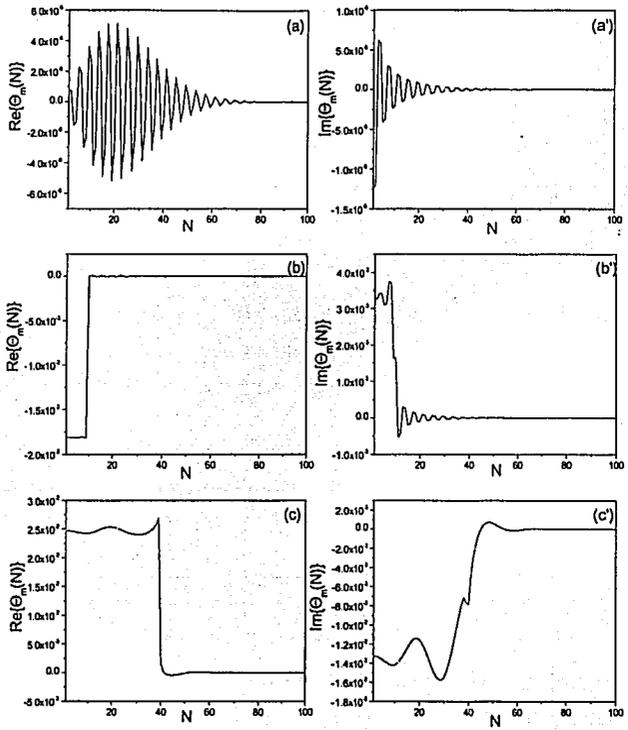


Figura 5.5: Se muestra numéricamente la convergencia de la serie (5.28) con los parámetros $\lambda = 200$, $a = 1$, $k_0 = 0$, $r_0 = 0.5$ y $\sigma = 10^{-2}$ (a) $\Re\{\Theta_1(N)\}$, (a') $\Im\{\Theta_1(N)\}$; (b) $\Re\{\Theta_{10}(N)\}$; (b') $\Im\{\Theta_{10}(N)\}$; (c) $\Re\{\Theta_{40}(N)\}$, (c') $\Im\{\Theta_{40}(N)\}$.

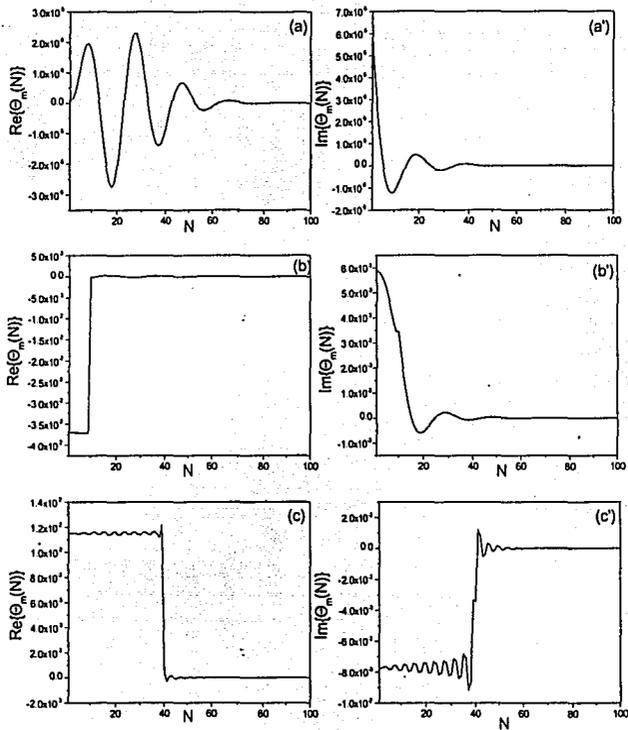


Figura 5.6: Se muestra numéricamente la convergencia de la serie (5.28) con los parámetros $\lambda = 200$, $a = 1$, $k_0 = 0$, $\tau_0 = 0.9$ y $\sigma = 10^{-2}$ (a) $\Re\{\Theta_1(N)\}$, (a') $\Im\{\Theta_1(N)\}$; (b) $\Re\{\Theta_{10}(N)\}$; (b') $\Im\{\Theta_{10}(N)\}$; (c) $\Re\{\Theta_{40}(N)\}$, (c') $\Im\{\Theta_{40}(N)\}$.

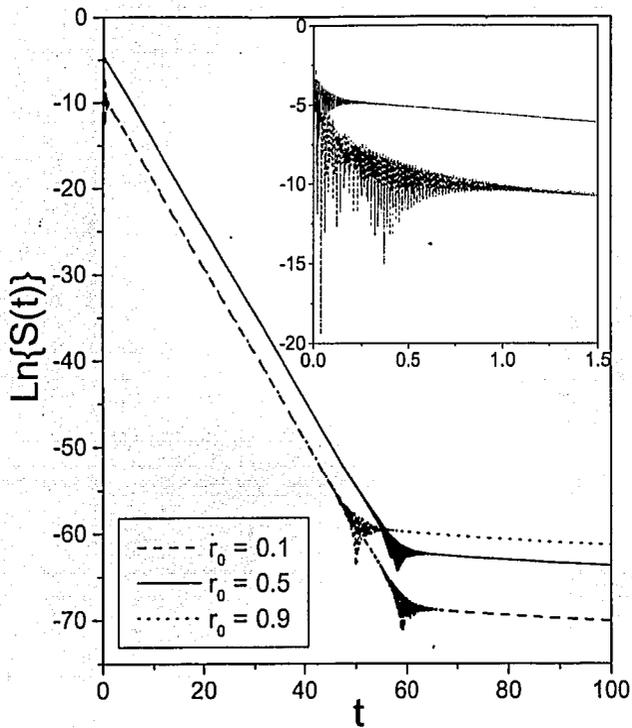


Figura 5.7: Probabilidad de supervivencia $S(t)$ con los parámetros $\lambda = 200$, $a = 1$, $\sigma = 10^{-2}$, $k_0 = 0$ para $r_0 = 0.1$ línea cortada; para $r_0 = 0.5$ línea continua; para $r_0 = 0.9$ línea punteada. En la misma se muestra un zoom para tiempos cortos. El tiempo se mide en unidades de vida media τ_1 .

todo el proceso de decaimiento, sin embargo no es apreciable para tiempos cortos, debido a que la probabilidad presenta fuertes oscilaciones en un intervalo de tiempo aproximado $(0, \tau_1)$ para los estados con parámetros $r_0 = 0.1, 0.9$, y en el intervalo $(0, 0.25\tau_1)$ para el estado con parámetro $r_0 = 0.5$. Estos intervalos corresponden al término de las interferencias entre las contribuciones exponenciales, al que denominaremos interferencia exponencial. Dado que el tiempo de interferencia exponencial es menor para el estado con parámetro $r_0 = 0.5$ sabemos que converge más rápidamente al primer estado resonante, como se vió en §4.3.

Las tres gráficas tienen el mismo comportamiento cualitativo, es decir, el cambio de energía inicial no afecta el comportamiento del decaimiento, y presentan esencialmente cuatro regiones, en éste proceso

(a) Región de interferencia exponencial. Que se presenta al iniciar el decaimiento del sistema con una duración que depende del parámetro r_0 .

(b) Región de decaimiento exponencial con vida media τ_1 . La cual se presenta antes para el estado con parámetro $r_0 = 0.5$ y después para los otros dos estados. Se puede decir que la duración del decaimiento con vida media τ_1 depende únicamente del parámetro r_0 .

(c) Región de interferencia exponencial - no-exponencial. Que se presenta en un intervalo corto de tiempo, llamando la atención el estado con parámetro $r_0 = 0.9$ que presenta esta interferencia aproximadamente 10 vidas medias antes que los otros dos estados. Lo que provoca que éste presente la contribución no exponencial antes que los otros dos estados. La duración de esta interferencia es aproximadamente de 10 vidas medias para cada estado.

(d) Región de decaimiento no exponencial. Que se presenta aproximadamente para el mismo tiempo en los estados con parámetros $r_0 = 0.1, 0.9$ y diez vidas medias antes para el estado con parámetro $r_0 = 0.1$.

‘Todas las gráficas son cualitativamente iguales, además observamos que se tiene prácticamente la misma gráfica sin importar el valor inicial de la energía del paquete. De lo que concluimos que el parámetro más importante de este tipo de estados es el centro de la distribución r_0 y no el valor de la energía inicial k_0^2 .

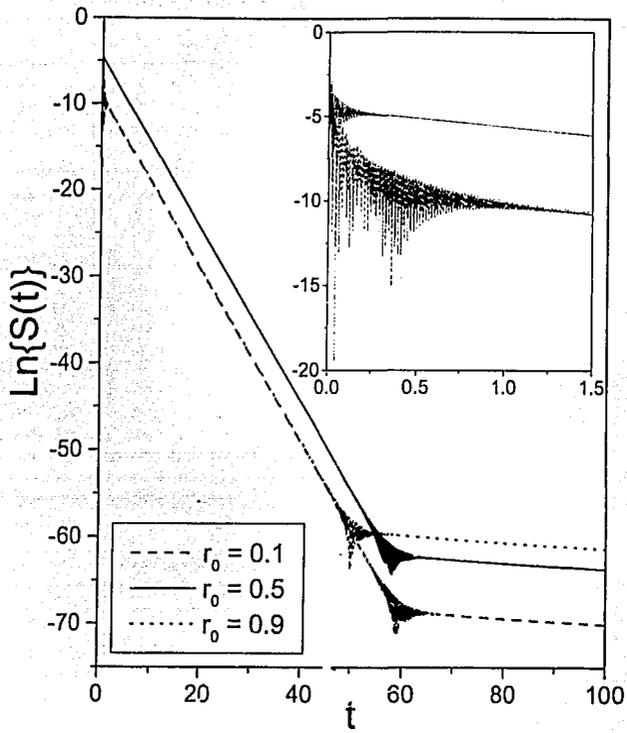


Figura 5.8: Probabilidad de supervivencia $S(t)$ con los parámetros $\lambda = 200$, $\alpha = 1$, $\sigma = 10^{-2}$, $k_0 = \pi/2$ para $r_0 = 0.1$ línea cortada; para $r_0 = 0.5$ línea continua; para $r_0 = 0.9$ línea punteada. En la misma se muestra un zoom para tiempos cortos. El tiempo se mide en unidades de vida media τ_1 .

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

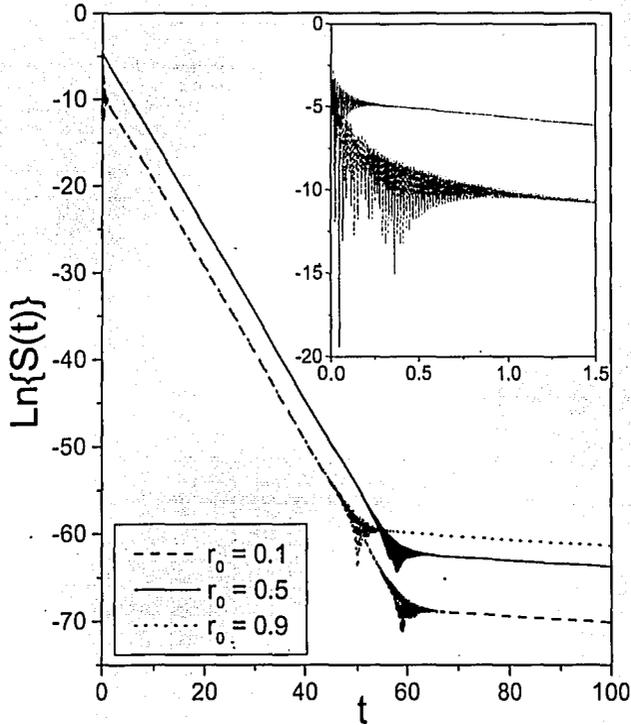


Figura 5.9: Probabilidad de supervivencia $S(t)$ con los parámetros $\lambda = 200$, $a = 1$, $\sigma = 10^{-2}$, $k_0 = \pi$ para $r_0 = 0.1$ línea cortada; para $r_0 = 0.5$ línea continua; para $r_0 = 0.9$ línea punteada. En la misma se muestra un zoom para tiempos cortos. El tiempo se mide en unidades de vida media τ_1 .

5.2.4. Probabilidad de no escape $P(t)$

Pasamos ahora al estudio de la probabilidad de no escape $P(t)$. La cual mostramos sus gráficas en las figuras 5.10, 5.11, 5.12 correspondientes al parámetro $k_0 = 0, \pi/2$ y π respectivamente. Notamos que el comportamiento cualitativo de la probabilidad es el mismo sin importar el valor del parámetro k_0 y el cambio cualitativo es debido al cambio del parámetro r_0 .

Observamos que la probabilidad de no escape, no presenta las fuertes oscilaciones que presenta la probabilidad de supervivencia para tiempos cortos. Esto es discutido en §4.3 en donde se estudio un eigenestado excitado de la caja de potencial infinito, y nos dimos cuenta que la probabilidad de no escape presenta oscilaciones cuando el sistema "respira", mientras que la probabilidad de supervivencia puede presentar oscilaciones sólo por el hecho de que el sistema evolucione.

Así para tiempos cortos tenemos una curva suave y observamos que la probabilidad del estado con parámetro $r_0 = 0.9$ decae más lentamente que el estado con el parámetro $r_0 = 0.1$. Esto es más claro en la figura 5.12 que corresponde al parámetro $k_0 = \pi$. Observamos en el zoom que la separación de las curvas para el parámetro $r_0 = 0.1$ (línea cortada) y $r_0 = 0.9$ (línea punteada) tienen una mayor separación que para los otros casos de momento inicial k_0 , mostrando el efecto que se hace al cambiar el parámetro k_0 . Al igual que la probabilidad de supervivencia, la probabilidad de no escape presenta esencialmente cuatro regiones las cuales son:

(a) Región de interferencia exponencial. Se presenta durante los primeros $0.7\tau_1$ para los estados con el parámetro $r_0 = 0.1, 0.9$. Para el estado con parámetro $r_0 = 0.5$ se presenta durante los primeros $0.3\tau_1$.

(b) Región de decaimiento exponencial con vida media τ_1 . El cual se presenta durante unas 50 vidas medias después de la interferencia exponencial para el estado con parámetro $r_0 = 0.9$ y 55 vidas medias después de la región de interferencia para los estados con parámetros $r_0 = 0.5$ y 0.1 .

(c) Región de interferencia exponencial - no-exponencial. Tiene una duración aproximada de 10 vidas medias para cada estado. Observamos que esta región se presenta antes para el estado con parámetro $r_0 = 0.9$ que para los otros dos, los cuales presentan esta región casi en el mismo intervalo de tiempo.

(d) Región de decaimiento no exponencial. Se presenta a partir de 60 vidas medias para el estado con parámetro $r_0 = 0.9$ y 65 vidas medias para los otros estados. En esta región

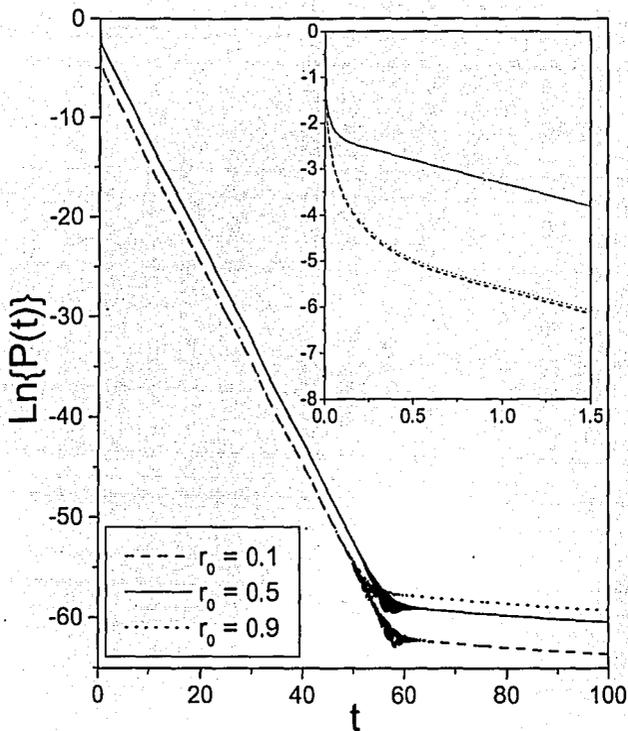


Figura 5.10: Probabilidad de no escape $P(t)$ con los parámetros $\lambda = 200$, $\alpha = 1$, $\sigma = 10^{-2}$, $k_0 = 0$ para $r_0 = 0.1$ línea cortada; para $r_0 = 0.5$ línea continua; para $r_0 = 0.9$ línea punteada. En la misma se muestra un zoom de las primeras tres vidas medias τ_1 . El tiempo se mide en unidades de vida media τ_1 .

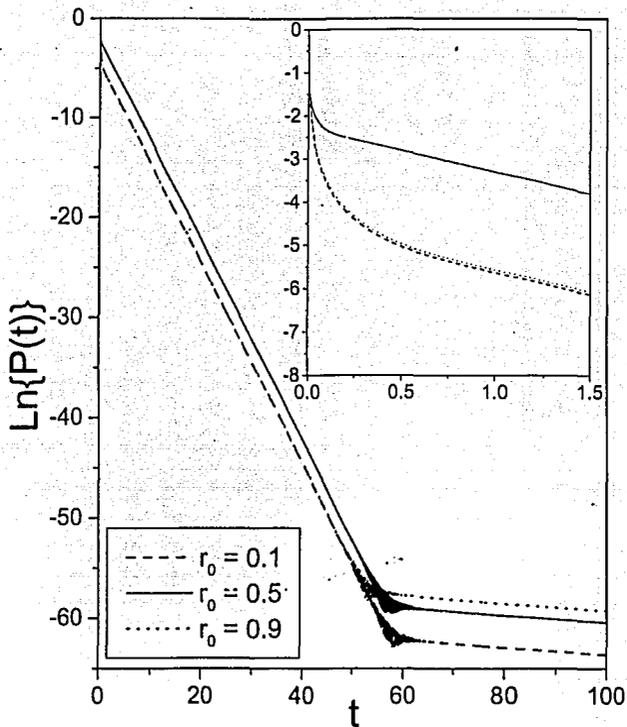


Figura 5.11: Probabilidad de no escape $P(t)$ con los parámetros $\lambda = 200$, $a = 1$, $\sigma = 10^{-2}$, $k_0 = \pi/2$ para $r_0 = 0.1$ línea cortada; para $r_0 = 0.5$ línea continua; para $r_0 = 0.9$ línea puntada. En la misma se muestra un zoom de las primeras tres vidas medias τ_1 . El tiempo se mide en unidades de vida media τ_1 .

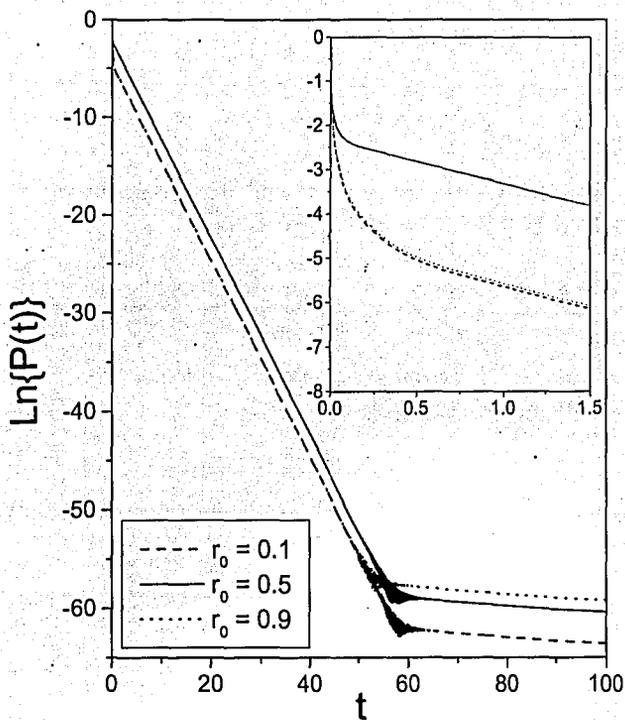


Figura 5.12: Probabilidad de no escape $P(t)$ con los parámetros $\lambda = 200$, $a = 1$, $\sigma = 10^{-2}$, $k_0 = \pi$ para $r_0 = 0.1$ línea cortada; para $r_0 = 0.5$ línea continua; para $r_0 = 0.9$ línea punteada. En la misma se muestra un zoom de las primeras tres vidas medias τ_1 . El tiempo se mide en unidades de vida media τ_1 .

el estado que decae más lentamente es el estado con parámetro $r_0 = 0.9$.

Todas las curvas de las probabilidades se trazan bajo la curva correspondiente al estado base de la caja de potencial infinito, por lo que tenemos que este estado inicial decae siempre más rápidamente que el estado base de la caja de potencial infinito.

5.3. Decaimiento de un estado de mínima incertidumbre (Gato de Schrödinger)

En esta sección estudiaremos un estado de mínima incertidumbre más general que el estudiado en §5.2. Consideramos un estado con simetría radial pero en esta ocasión sólo estudiaremos la componente angular $l = 0$. A diferencia del estado propuesto en §5.2, esta componente angular puede o no, ser todo el estado inicial

$$\Psi(r, 0) = \frac{\Lambda}{2i} e^{-\frac{(r-r_0)^2}{4a^2}} [e^{ik_0 r} - e^{-ik_0 r}]. \quad (5.29)$$

Este tipo particular de estados se les conoce en la literatura con el nombre de *estado gato de Schrödinger*. Debido a que es la combinación lineal de dos estados con fases opuestas (k_0 y $-k_0$) las cuales corresponderán al estado "vivo" y "muerto" del problema de del gato en la caja. Evidentemente tiene una naturaleza diferente al estado estudiado anteriormente §5.2, por lo que tenemos que hacer el mismo procedimiento que se hizo en §5.2. Encontrando primero los coeficientes Λ , C_n y \bar{C}_n , para el estudio de las probabilidades de supervivencia $S(t)$ y no escape $P(t)$. Debido a que el estado inicial que se propone es una función real, sabemos que sólo basta el cálculo de un coeficiente C_n ya que se cumple la relación $C_n = \bar{C}_n$.

Dedicamos a la subsección 5.3.1 a el cálculo de los coeficientes Λ y C_n . Posteriormente comprobamos el método numérico en §5.3.2, que se emplea para el cálculo de los coeficientes. Por último hacemos el estudio de las probabilidades de supervivencia en §5.3.3 y no escape en §5.3.4, completando así el estudio de la evolución temporal del decaimiento de una partícula con estado inicial $\Psi(r, 0)$.

5.3.1. Cálculo de los coeficientes Λ y C_n

El coeficiente de normalización toma la forma

$$|\Lambda|^{-2} = \int_0^a e^{-\frac{(r-r_0)^2}{2a^2}} \sin^2(k_0 r) dr. \quad (5.30)$$

Escribiendo la función seno en término de exponenciales complejas (5.29), se tiene que el coeficiente de normalización se calcula mediante tres integrales, y toma la forma

$$|\Lambda|^{-2} = \frac{\sigma}{2} \int_{u_1}^{u_2} e^{-\frac{\gamma}{2} z} dz - \frac{\sigma e^{\gamma}}{4} \int_{z_1}^{z_2} e^{-\frac{\gamma}{2} z} dz - \frac{\sigma e^{\gamma}}{4} \int_{z_1'}^{z_2'} e^{-\frac{\gamma}{2} z} dz, \quad (5.31)$$

en donde se han definido las constantes complejas $\gamma = -2\sigma^2 k_0^2 + 2ik_0 r_0$ y $R_0 = r_0 + 2i\sigma^2 k_0$ y los límites de integración son $u_1 = -\frac{r_0}{\sigma}$, $u_2 = \frac{a-r_0}{\sigma}$, $z_1 = -\frac{R_0}{\sigma}$ y $z_2 = \frac{a-R_0}{\sigma}$. Cada una de las integrales se puede calcular mediante la función $\omega(z)$, obteniendo así el coeficiente de normalización.

El coeficiente C_n por definición es

$$C_n = \int_0^a e^{-\frac{(r-r_0)^2}{2s^2}} \sin(k_0 r) \sin(k_n r) dr, \quad (5.32)$$

donde escribimos $s^2 = 2\sigma^2$. Expresando la función seno en término de exponenciales obtenemos el coeficiente C_n como la contribución de cuatro integrales. Sin embargo, todas tienen la misma estructura matemática, por lo que es conveniente definir la función $S_n^\pm(K)$ como

$$S_n^\pm(K) \equiv \int_0^a e^{-\frac{(r-r_0)^2}{2s^2}} e^{\pm iK(n)r} dr, \quad (5.33)$$

en donde se ha escrito explícitamente que el factor K es una función de n . En términos de esta función escribimos el coeficiente como

$$C_n = \frac{1}{4} \{S_n^+(k_0 - k_n) + S_n^-(k_0 - k_n) - S_n^+(k_0 + k_n) - S_n^-(k_0 + k_n)\}. \quad (5.34)$$

Así sólo hay que calcular la integral (5.33) para obtener el coeficiente C_n . La integral se ha calculado anteriormente, el resultado es

$$S_n^\pm(K) = e^{\gamma} \int_{z_1}^{z_2} e^{-\frac{\gamma}{2} z} dz, \quad (5.35)$$

para la cual se han definido dos constantes complejas de forma análoga a (5.31). Dadas por $\gamma = -2s^2 K(n)^2 + 2iK(n)r_0$ y $R_0 = r_0 + 2is^2 K(n)$, los límites de integración son $z_1 = -\frac{R_0}{\sigma}$ y $z_2 = \frac{a-R_0}{\sigma}$. La integral es calculada mediante la función $\omega(z)$, obteniéndose así el conjunto de coeficientes $\{C_n\}$

5.3.2. Comprobación del método numérico

Como podemos observar, los coeficientes encontrados en §5.3.1, no son expresiones cerradas. Por lo que tenemos que comprobar el método numérico empleado para el cálculo

de estos. De forma análoga al ejemplo anterior, sólo se mostraran dos relaciones de suma, las cuales proporcionan confianza al método empleado para el cálculo de los coeficientes. Las relaciones de suma son:

$$\sum_{n=1}^{\infty} \Re\{C_n^2\} = 1, \quad (5.36)$$

$$\frac{1}{2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} C_n I_{mn} = \bar{C}_m^*. \quad (5.37)$$

Las gráficas de las distribuciones de los coeficientes $\Re\{C_n^2\}$ se muestran en las figuras 5.13, 5.14 y 5.15. En donde se han tomado los valores $\lambda = 200$, $\alpha = 1$ y $\sigma = 10^{-2}$, dejando variar los parámetros $r_0 = 0.1, 0.5, 0.9$ correspondientes a el centro de la distribución (cerca del origen - centrada - cerca del potencial) y $k_0 = 0.1, \pi/2, \pi$ correspondientes a la energía inicial de la onda, bajas energías - energía aproximada a un medio de la energía de resonancia - energía aproximada a el primer estado resonante respectivamente.

Observamos que la convergencia de la serie (5.36) ya se tiene sumando los primeros 60 términos de la distribución. Además la gráfica de ésta (Figs. 5.13d, 5.14d, 5.15d) parece tener el mismo comportamiento para los valores de $r_0 = 0.1$ y $r_0 = 0.9$, de hecho no se aprecia una diferencia notoria en la gráfica.

Las distribuciones para estos valores de la energía son prácticamente las mismas. Teniendo una diferencia cualitativa notoria, al cambio del centro de la distribución y no al cambio de energía, figuras 5.13a, 5.14a, 5.15a para el valor de $r_0 = 0.1$; figuras 5.13b, 5.14b, 5.15b para el valor de $r_0 = 0.5$ y figuras 5.13c, 5.14c, 5.15c para el valor de $r_0 = 0.9$. Para las cuales observamos que la distribuciones son prácticamente las mismas, además se puede ver que las distribuciones para $r_0 = 0.1$ y $r_0 = 0.9$ también son semejantes y la que presenta una mayor diferencia cualitativa es la correspondiente a $r_0 = 0.5$.

Para mostrar la convergencia de la serie (5.37) definimos la función $\Theta_m(N)$ como

$$\Theta_m(N) = \frac{1}{2} \sum_{n=-N}^N C_n I_{mn} - \bar{C}_m^*. \quad (5.38)$$

Por lo que $\Theta_m(N) \rightarrow 0$ para $N \rightarrow \infty$. Esta función tiene varios parámetros, sin embargo, se ha visto que las distribuciones al cambio de energía no se ven muy alteradas. Por lo que sólo tomaremos el parámetro $k_0 = 0.1$ y variaremos el parámetro en r_0 para diferentes valores de $m = 1, 10$ y 40 . La gráfica de la ecuación (5.38) se muestra en las figuras 5.16, 5.17, 5.18 para los valores de $r_0 = 0.1, 0.5$ y 0.9 respectivamente.

Observamos que todas presentan la convergencia a cero para un valor aproximado de

$N = 60$. Lo que muestra que la relación de suma (5.37) es válida utilizando nuestro método numérico para el cálculo de los coeficientes.

Estos dos resultados muestran que el método empleado para el cálculo de los coeficientes es bueno, por lo que se tiene confianza a los resultados que se obtendrán para las probabilidades de supervivencia y no escape.

5.3.3. Probabilidad de supervivencia $S(t)$

Tomando los parámetros fijos $\alpha = 1$, $\lambda = 200$ y $\sigma = 10^{-2}$ para el cálculo de la probabilidad de supervivencia. Mostramos la gráfica de ésta para el parámetro $k_0 = 0.1$ en la figura 5.19. Observamos que para los tres valores de r_0 , la probabilidad de supervivencia de este estado inicial siempre decae más rápido que la probabilidad de supervivencia del estado base de la caja de potencial infinito (§4.2). Sin embargo el parámetro r_0 afecta considerablemente el decaimiento del estado, haciendo que éste tenga un decaimiento más lento para el valor $r_0 = 0.5$ y más rápido para los valores extremos, en la región exponencial. Se observa que la probabilidad del estado con parámetro $r_0 = 0.9$ decae más lentamente que la probabilidad del estado con parámetro $r_0 = 0.1$, pero la diferencia de estas es prácticamente cero, por lo que no se tendrá una diferencia cuantitativa apreciable. En la región no exponencial del decaimiento, invierten papeles las probabilidades del estado con parámetro $r_0 = 0.5$ y $r_0 = 0.9$, decayendo más lentamente el último.

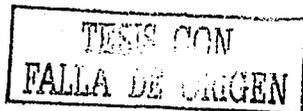
Tomamos el valor $k_0 = \pi/2$, correspondiente a la mitad energía del primer estado resonante. Se muestra la gráfica de $\ln\{S(t)\}$ en la figura 5.20, la cual exhibe un comportamiento cualitativamente igual a la gráfica de la figura 5.19.

Por último tomaremos el valor de $k_0 = \pi$ correspondiente a la energía de resonancia. La gráfica de la probabilidad de supervivencia se muestra en la figura 5.21 que también presenta el mismo comportamiento cualitativo a las gráficas presentadas anteriormente.

El hecho de que todas las gráficas sean cualitativamente iguales, es el reflejo de que las distribuciones $\Re\{C_n^2\}$ también lo son. Llamando la atención las distribuciones para los parámetros $r_0 = 0.1$ y $r_0 = 0.9$ que son semejantes, pero las pequeñas diferencias entre ellas producen grandes variaciones en el comportamiento cuantitativo de la probabilidad para tiempos largos. Para tiempos cortos el decaimiento de los estados con parámetros $r_0 = 0.1$ y $r_0 = 0.9$ tienen mismo comportamiento, mostrando una pequeña separación cuando se exhibe el decaimiento exponencial con vida media τ_1 . La cual es más notoria para el estado con energía inicial aproximada a la energía de resonancia.

En general podemos decir que el comportamiento de la probabilidad de supervivencia para este estado, presenta cuatro regiones principalmente:

(n) Región de decaimiento con interferencia exponencial. Se presenta en el intervalo de



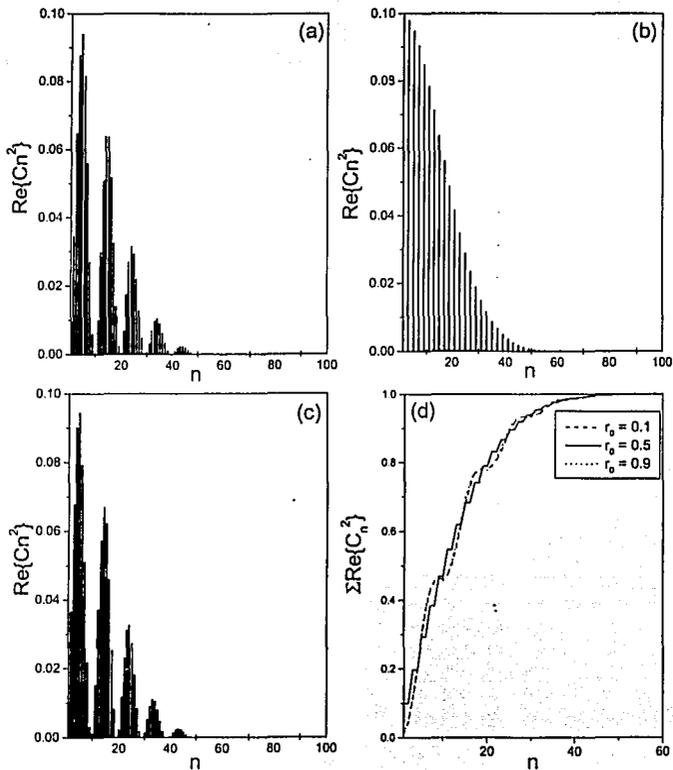


Figura 5.13: Se muestra la distribución de coeficientes $\Re(C_n^2)$, con los parámetros $\lambda = 200$, $\alpha = 1$, $\sigma = 10^{-2}$ y $k_0 = 0,1$ para (a) $r_0 = 0.1$; (b) $r_0 = 0.5$; (c) $r_0 = 0.9$; (d) muestra la convergencia de (5.36) correspondiente a cada valor de r_0 de las distribuciones anteriores.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

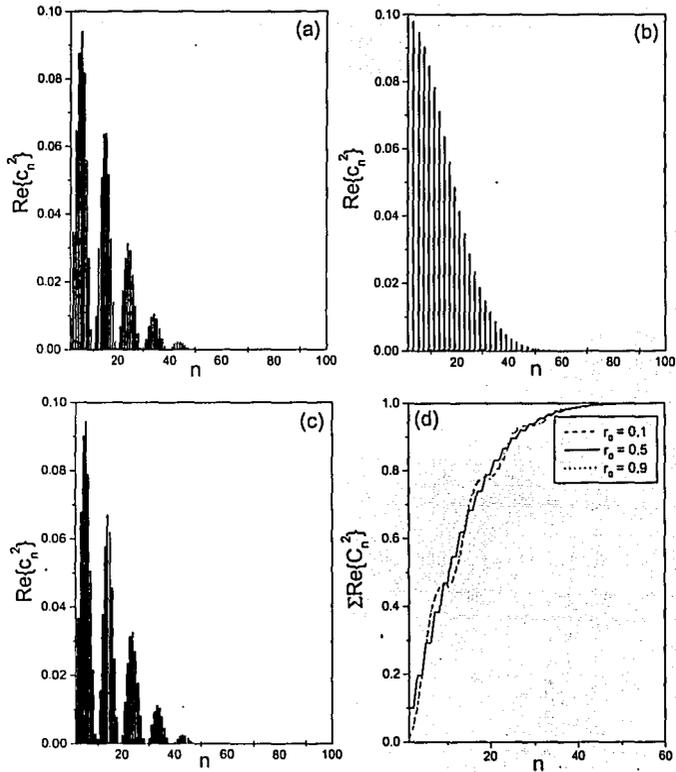


Figura 5.14: Se muestra la distribución de coeficientes $\text{Re}(C_n^2)$, con los parámetros $\lambda = 200$, $\alpha = 1$, $\sigma = 10^{-2}$ y $k_0 = \pi/2$ para (a) $r_0 = 0.1$; (b) $r_0 = 0.5$; (c) $r_0 = 0.9$; (d) muestra la convergencia de (5.36) correspondiente a cada valor de r_0 de las distribuciones anteriores.

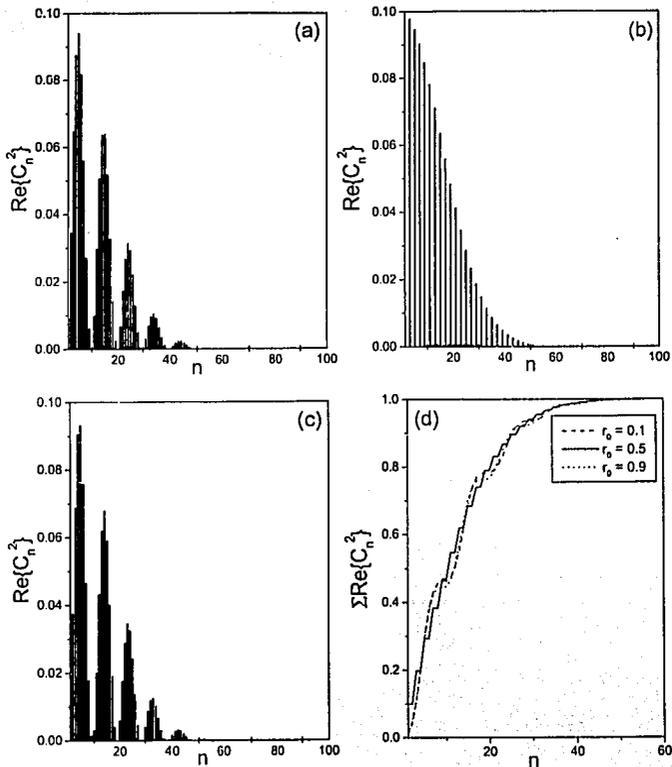


Figura 5.15: Se muestra la distribución de coeficientes $\Re(C_n^3)$, con los parámetros $\lambda = 200$, $\alpha = 1$, $\sigma = 10^{-2}$ y $k_0 = \pi$ para (a) $r_0 = 0.1$; (b) $r_0 = 0.5$; (c) $r_0 = 0.9$; (d) muestra la convergencia de (5.36) correspondiente a cada valor de r_0 de las distribuciones anteriores.

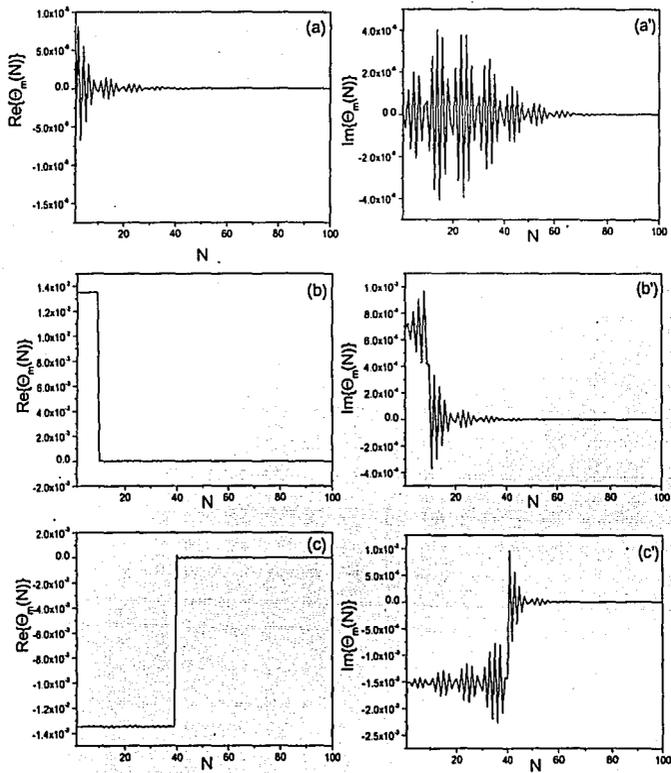


Figura 5.16: Se muestra la convergencia de la función $\Theta_m(N)$, con los parámetros $\lambda = 200$, $a = 1$, $\sigma = 10^{-2}$, $k_0 = 0.1$ y $r_0 = 0.1$ para $m = 1$ (a) parte real (a') parte imaginaria; para $m = 10$ (b) parte real (b') parte imaginaria; para $m = 40$ (c) parte real (c') parte imaginaria.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

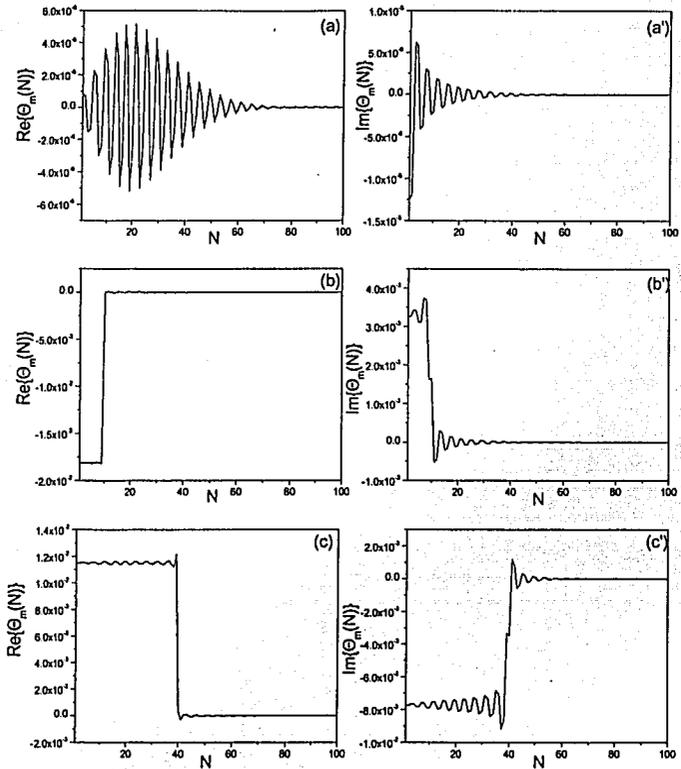


Figura 5.17: Se muestra la convergencia de la función $\Theta_m(N)$, con los parámetros $\lambda = 200$, $c = 1$, $\sigma = 10^{-2}$, $k_0 = 0.1$ y $r_0 = 0.5$ para $m = 1$ (a) parte real (a') parte imaginaria; para $m = 10$ (b) parte real (b') parte imaginaria; para $m = 40$ (c) parte real (c') parte imaginaria.

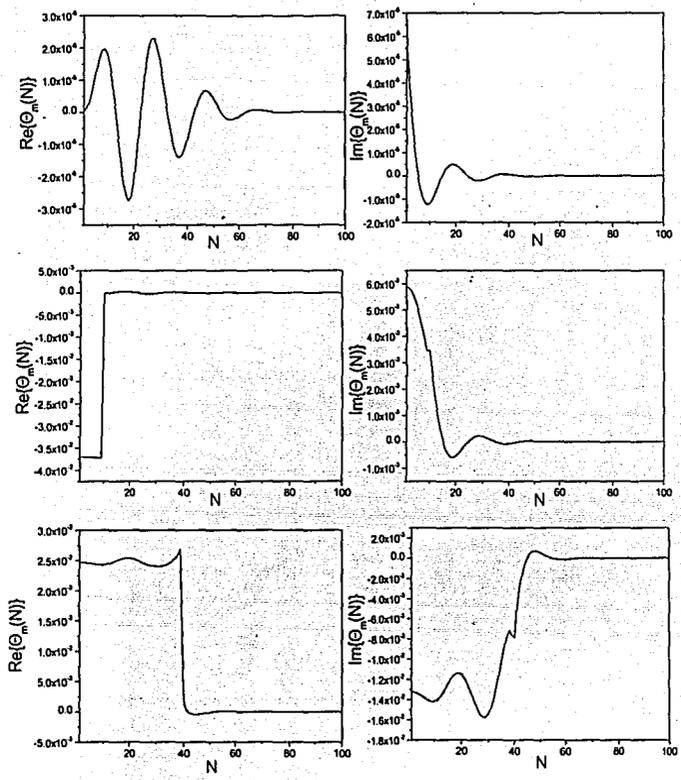


Figura 5.18: Se muestra la convergencia de la función $\Theta_m(N)$, con los parámetros $\lambda = 200$, $a = 1$, $\sigma = 10^{-2}$, $k_0 = 0.1$ y $r_0 = 0.9$ para $m = 1$ (a) parte real (a') parte imaginaria; para $m = 10$ (b) parte real (b') parte imaginaria; para $m = 40$ (c) parte real (c') parte imaginaria.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

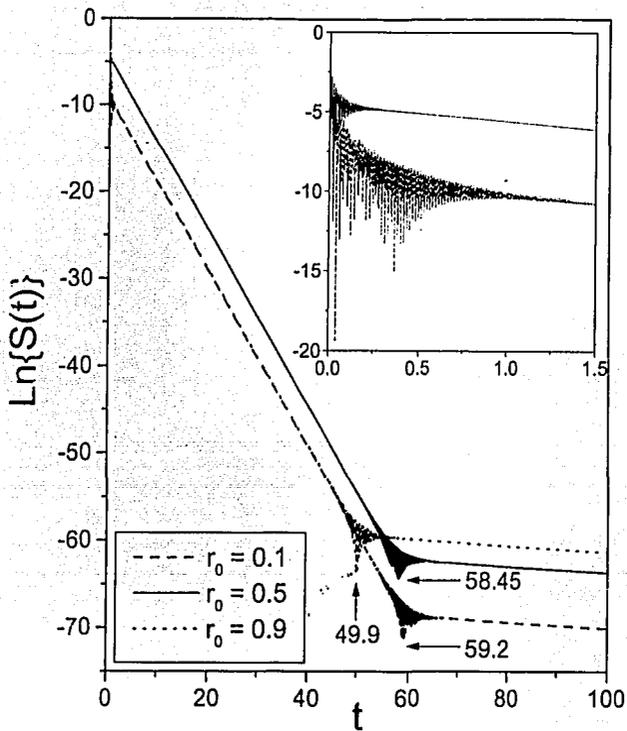


Figura 5.19: Probabilidad de supervivencia $S(t)$ con los parámetros $\lambda = 200$, $a = 1$, $\sigma = 10^{-2}$, $k_0 = 0.1$ para $r_0 = 0.1$ línea cortada; para $r_0 = 0.5$ línea continua; para $r_0 = 0.9$ línea puntada. En la misma se muestra un zoom para tiempos cortos. El tiempo se mide en unidades de vida media τ_1 .

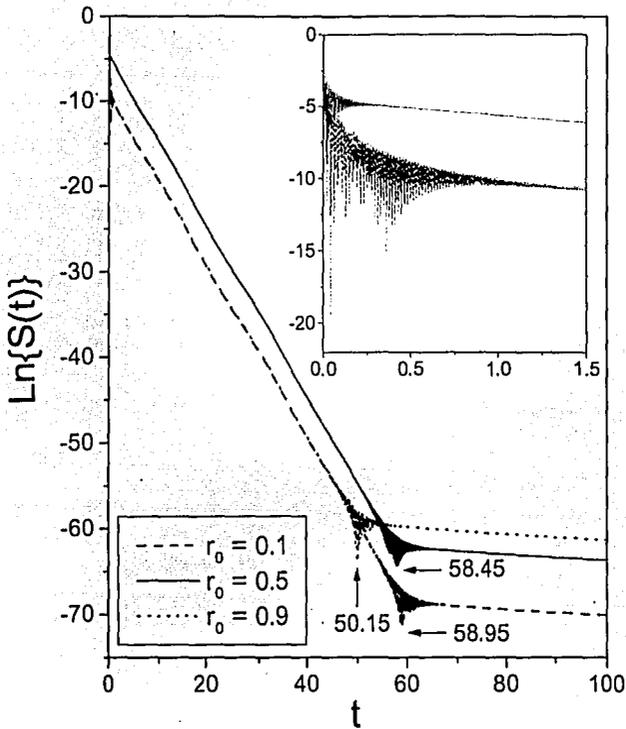


Figura 5.20: Probabilidad de supervivencia $S(t)$ con los parámetros $\lambda = 200$, $\alpha = 1$, $\sigma = 10^{-2}$, $k_0 = \pi/2$ para $r_0 = 0.1$ línea-cortada; para $r_0 = 0.5$ línea continua; para $r_0 = 0.9$ línea punteada. En la misma se muestra un zoom para tiempos cortos. El tiempo se mide en unidades de vida media τ_1 .

tiempo $(0, 0.35\tau_1)$ para el estado con parámetro $r_0 = 0.5$ y en el intervalo $(0, 1.55\tau_1)$ para los estados con parámetros $r_0 = 0.1$ y 0.9 .

(b) Región de decaimiento exponencial con vida media τ_1 . Que se presenta en un intervalo de tiempo $(1.55\tau_1, 53.9\tau_1)$ para el estado con parámetro $r_0 = 0.1$, $(0.35\tau_1, 52.2\tau_1)$ para el estado con parámetro $r_0 = 0.5$ y $(1.55\tau_1, 46.3\tau_1)$ para el estado con parámetro $r_0 = 0.9$.

(c) Región de decaimiento con interferencia exponencial - no-exponencial. Se presenta en el intervalo de tiempo $(53.9\tau_1, 68\tau_1)$ para el estado con parámetro $r_0 = 0.1$, $(52.2\tau_1, 64.7\tau_1)$ para el estado con parámetro $r_0 = 0.5$ y $(46.3\tau_1, 56.8\tau_1)$ para el estado con parámetro $r_0 = 0.9$.

(d) Región de decaimiento no exponencial. Se presenta para tiempos mayores a $68\tau_1$ del estado con parámetro $r_0 = 0.1$, $64.7\tau_1$ para el estado con parámetro $r_0 = 0.5$ y $56.8\tau_1$ para el estado con parámetro $r_0 = 0.9$.

En general tenemos los mismos intervalos mencionados en §5.2 para cada gráfica mostrada en este ejemplo.

5.3.4. Probabilidad de no escape $P(t)$

Tomando los mismos valores de los parámetros que en §5.3.3, graficamos la probabilidad de no escape $P(t)$. La cual mostramos en las figuras 5.22, 5.23, 5.24 correspondientes a los parámetros $k_0 = 0.1$, $k_0 = \pi/2$ y $k_0 = \pi$ respectivamente. Al igual que la probabilidad de supervivencia se presentan esencialmente cuatro regiones en la gráfica de $P(t)$. Sin embargo en la región de decaimiento con interferencia exponencial no presenta las fuertes oscilaciones que presenta la probabilidad de supervivencia, debido a que en este intervalo de tiempo no se presenta el fenómeno de "respiración" del sistema el cual produce las oscilaciones en la probabilidad de no escape. Note que en las tres gráficas se tiene el decaimiento exponencial con vida media τ_1 para el mismo valor del tiempo. Las regiones que presenta la probabilidad de no escape son los intervalos

(a) Región de decaimiento con interferencia exponencial. Se presenta para el intervalo de tiempo $(0, 0.22\tau_1)$ para el estado con el parámetro $r_0 = 0.5$ y $(0, 0.62\tau_1)$ para los estados con parámetro $r_0 = 0.1$ y 0.9 .

(b) Región de decaimiento exponencial con vida media τ_1 . Se presenta en el intervalo

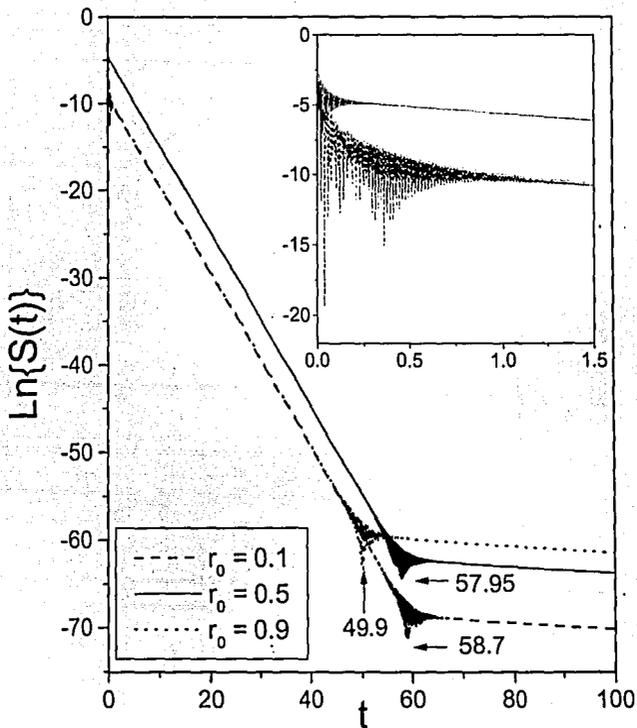


Figura 5.21: Probabilidad de supervivencia $S(t)$ con los parámetros $\lambda = 200$, $a = 1$, $\sigma = 10^{-2}$, $k_0 = \pi$ para $r_0 = 0.1$ línea cortada; para $r_0 = 0.5$ línea continua; para $r_0 = 0.9$ línea punteada. En la misma se muestra un zoom para tiempos cortos. El tiempo se mide en unidades de vida media τ_1 .

TIEMPO CON
FALLA DE ORIGEN

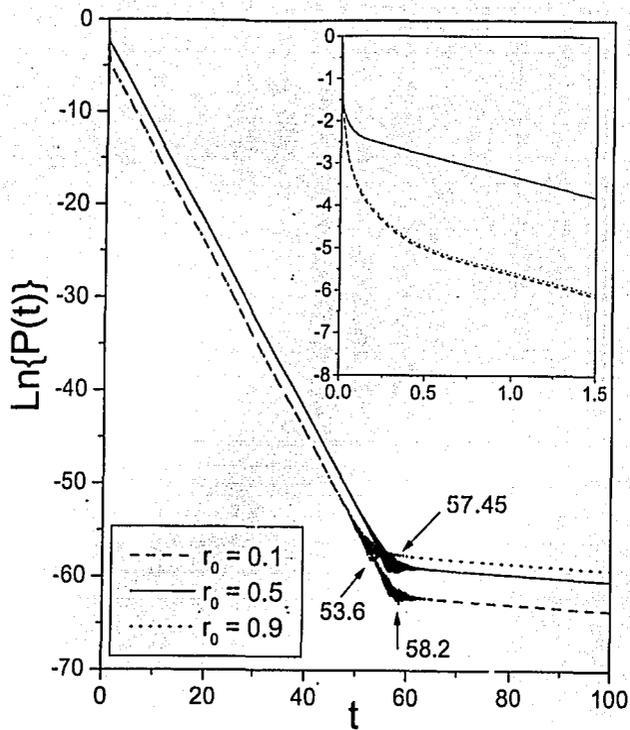


Figura 5.22: Probabilidad de no escape $P(t)$ con los parámetros $\lambda = 200$, $a = 1$, $\sigma = 10^{-2}$, $k_0 = 0.1$ para $r_0 = 0.1$ línea cortada; para $r_0 = 0.5$ línea continua; para $r_0 = 0.9$ línea puntada. En la misma se muestra un zoom para tiempos cortos. El tiempo se mide en unidades de vida media τ_1 .

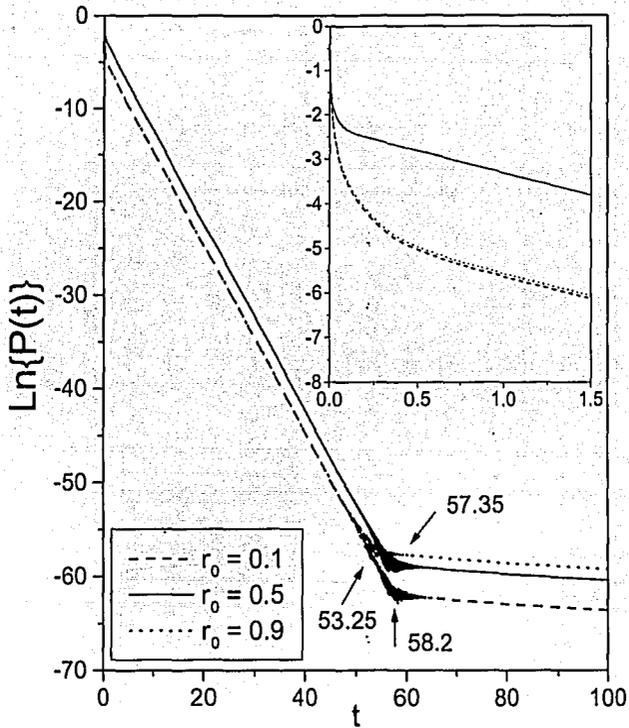


Figura 5.23: Probabilidad de no escape $P(t)$ con los parámetros $\lambda = 200$, $a = 1$, $\sigma = 10^{-2}$, $k_0 = \pi/2$ para $r_0 = 0.1$ línea cortada; para $r_0 = 0.5$ línea continua; para $r_0 = 0.9$ línea punteada. En la misma se muestra un zoom para tiempos cortos. El tiempo se mide en unidades de vida media τ_1 .

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

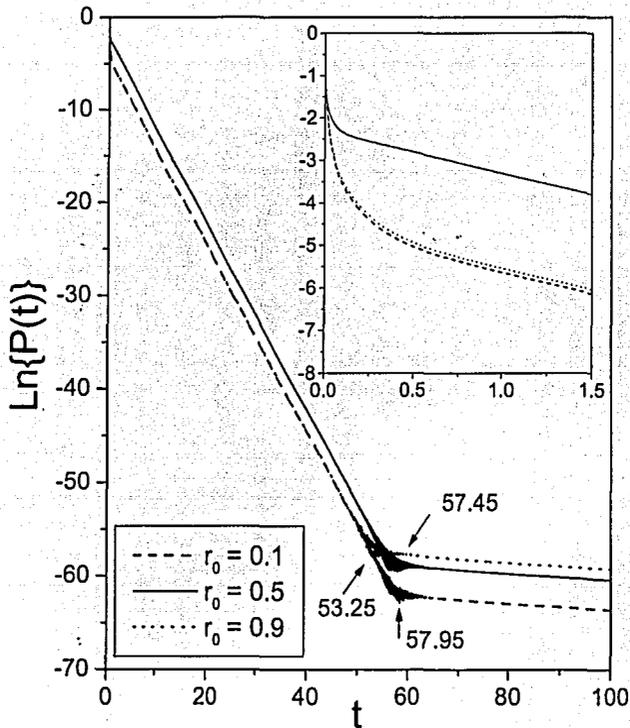


Figura 5.24: Probabilidad de no escape $P(t)$ con los parámetros $\lambda = 200$, $\bar{u} = 1$, $\sigma = 10^{-2}$, $k_0 = \pi$ para $r_0 = 0.1$ línea cortada; para $r_0 = 0.5$ línea continua; para $r_0 = 0.9$ línea punteada. En la misma se muestra un zoom para tiempos cortos. El tiempo se mide en unidades de vida media τ_1 .

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

($0.62\tau_1, 54.1\tau_1$) para el estado con parámetro $r_0 = 0.1$, ($0.22\tau_1, 53.15\tau_1$) para el estado con parámetro $r_0 = 0.5$ y ($0.62\tau_1, 49.6\tau_1$) para el estado con parámetro $r_0 = 0.9$.

(c) Región de interferencia exponencial - no-exponencial. En el intervalo de tiempo ($54.1\tau_1, 64.55\tau_1$) para el estado con el parámetro $r_0 = 0.1$, ($53.15\tau_1, 61.5\tau_1$) para el estado con el parámetro $r_0 = 0.5$ y ($49.6\tau_1, 57.6\tau_1$) para el estado con el parámetro $r_0 = 0.9$.

(d) Región de decaimiento no exponencial. Después del tiempo $64.55\tau_1$ para el estado con el parámetro $r_0 = 0.1$, $61.5\tau_1$ para el estado con parámetro $r_0 = 0.5$ y $57.6\tau_1$ para el estado con el parámetro $r_0 = 0.9$.

Que engloban todos los casos vistos en este ejemplo. Sin embargo, también se observa que todas las probabilidades decaen más rápidamente que el estado base de la caja de potencial infinito §4.2.

Los ejemplos estudiados §5.2 (Onda saliente), §5.3 (Estado gato de Schorödinger) en este capítulo, muestran un contra ejemplo al resultado obtenido por Lenef y Rand, sobre la evolución temporal del decaimiento de estados de mínima incertidumbre ya que hemos exhibido un modelo en el cual dichos estados decaen más rápidamente que el estado base de la caja de potencial infinito, el cual no cumple ser de mínima incertidumbre. Además encontramos que el comportamiento cualitativo de las probabilidades es debido a la posición del estado inicial, sin importar la energía de éste, salvo que la energía sea muy grande (mayor a la altura del potencial).

5.4. Discusión de la evolución temporal de estados de mínima incertidumbre

Los estados de mínima incertidumbre que se han considerado en este capítulo, onda saliente §5.2 y estado gato de Schrödinger §5.3, no tienen un comportamiento cualitativo diferente. Esto se entiende porque el estado gato de Schrödinger es una superposición de ondas planas (entrante y saliente) las cuales tienen una evolución temporal semejante al estado estudiado en §5.2. Observamos un cambio cualitativo de la evolución temporal de dichos estados únicamente por el cambio de la posición inicial.

En la región exponencial se observa que todos los estados decaen inicialmente con la misma vida media τ_c , haciendo una transición al decaimiento con vida media τ_1 correspondiente al primer estado resonante y ésta depende únicamente de la posición inicial del

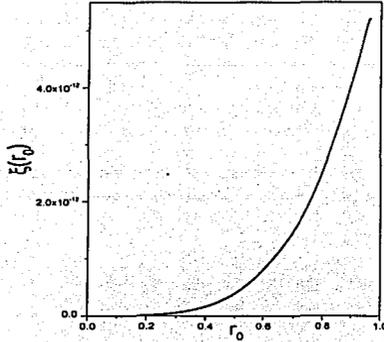


Figura 5.25: Comportamiento del coeficiente de la probabilidad de supervivencia en la región no-exponencial.

estado. Observamos que dicha transición es más rápida para el estado que se encuentra inicialmente centrado ($r_0 = 0.5$) y más lenta para los otros dos estados, lo que hace que esencialmente decaiga más lentamente que los otros estados considerados. Esto se puede entender de la distribución de los coeficientes, por ejemplo la figura 5.15 (pág. 68) muestra que el estado que se encuentra inicialmente en $r_0 = 0.5$ tiene una mayor contribución del primer estado resonante. Esto explica porque hace la transición más rápido que los otros estados considerados.

En la región no-exponencial se observa que el estado que decae más lentamente es el que se localiza inicialmente cerca de la frontera del potencial ($r_0 \approx 1$) y el que decae más rápidamente es el que se localiza cerca del origen. Para entender esto consideramos sólo la expresión de la probabilidad de supervivencia en la región no-exponencial

$$S(t) \approx \frac{1}{16\pi} \xi(r_0) \frac{1}{t^3}, \quad (5.39)$$

donde

$$\xi(r_0) = \left| \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{C_n \bar{C}_n}{k_n^3} \right|^2. \quad (5.40)$$

Esta es sólo función del punto donde se localiza el estado. Al graficar este coeficiente se tiene una función creciente (fig. 5.25) lo que muestra que el decaimiento en la región no-exponencial es más lento si se localiza inicialmente el estado cerca de la frontera del potencial.

Capítulo 6

Conclusiones

Las conclusiones de este trabajo son las siguientes:

1. En el capítulo §4 se estudia la evolución temporal de estados iniciales que corresponden a eigenestados de la caja de potencial infinito. En particular los correspondientes al estado base §4.2 (pág. 27) y al cuarto estado excitado §4.3 (pág. 32). Estos nos permitieron comparar el método numérico empleado para el cálculo de las probabilidades, ya que este tipo de estados han sido estudiados con anterioridad [2]. Obtenemos lo siguiente:
 - a) *Estado base.* Se observa que la evolución temporal de este estado, está prácticamente dominado por el primer estado resonante $u_1(r)$ al cual le corresponde un tiempo de vida media $\tau_1 = \Gamma_1^{-1}$ que es el tiempo de vida media más grande proporcionado por el sistema (potencial delta repulsivo). En el ejemplo que hemos estudiado, las probabilidades de supervivencia y no escape tienen el mismo comportamiento en la región exponencial que es la que domina durante las primeras 50 vidas medias. Se observa la diferencia en el comportamiento cualitativo de las probabilidades únicamente en la región de interferencia y no exponencial, en la cual las curvas de las probabilidades se separan y tienen un comportamiento como función inversa del tiempo. La densidad de probabilidad, nos proporciona información del estado durante la evolución temporal del sistema. Mostrando en la región de interferencia que la densidad de probabilidad oscila como función del tiempo, fenómeno al que hemos llamado de "respiración", que se debe a la interferencia de las amplitudes del comportamiento exponencial y no exponencial de la probabilidad.
 - b) *Estado excitado.* Consideramos como estado inicial el cuarto estado excitado de la caja de potencial infinito. Observamos que la evolución temporal de este

estado, es prácticamente la contribución de dos estados resonantes, el primero, $u_1(\tau)$, y el quinto, $u_5(\tau)$, durante las primeras 30 vidas medias (τ_1). Observando una diferencia cualitativa de las probabilidades desde tiempos del orden de $0.09\tau_1$, que corresponde al valor del tiempo en que la curva de la probabilidad de no escape se separa de la curva de la probabilidad de supervivencia. Para este tiempo la probabilidad de no escape tiene ya un comportamiento exponencial con vida media τ_1 , mientras que la probabilidad de supervivencia presenta el comportamiento exponencial con vida media τ_5 hasta tiempos del orden de $0.188\tau_1$. Después del tiempo en el que las probabilidades tienen un comportamiento exponencial con vida media τ_3 , el sistema evoluciona como si se tratara del primer estado resonante, con vida media τ_1 . El tiempo para el cual las probabilidades tienen el comportamiento exponencial con vida media τ_5 se puede encontrar de las expresiones de las probabilidades, dando la ecuación (4.8) (pág. 34) para la probabilidad de supervivencia, y la ecuación (4.9) (pág. 36) para la probabilidad de no escape. Estas expresiones nos permiten mostrar que la duración (en unidades de vida media τ_1) del comportamiento exponencial de las probabilidades con vida media τ_5 depende únicamente de los parámetros del potencial, alcance a y altura λ . Además el hecho de que las cantidades $I_{in} \approx 1$ nos permite mostrar que $\tau_5 \approx 2\tau_P$ que coincide con los valores medidos en las gráficas de las probabilidades de supervivencia y no escape figura 4.10 (pág. 36). La densidad de probabilidad del estado excitado evoluciona rápidamente hasta confundirse con la densidad de probabilidad del primer estado resonante. Esto muestra que la contribución del quinto estado resonante decae más rápidamente que la contribución del primer estado resonante, haciendo que el sistema presente un fenómeno de pérdida de memoria, es decir, después de un tiempo finito el estado de la partícula ya no recuerda el estado inicial en el que se encontraba y decae como el primer estado resonante en la región exponencial.

Sin embargo se observa que el estado excitado decae más rápidamente que el estado base de la caja de potencial infinito, esto es debido a que $\tau_3 < \tau_1$, y en general se puede decir que cualquier estado excitado de la caja de potencial infinito decaerá más rápidamente que el estado base, debido a que se tiene que $\tau_n < \tau_1$ para $n > 1$. Esto es claro en las expresiones encontradas para el cálculo de los polos de la función de Green de onda saliente §3.2 (pág. 19) los cuales proporcionan el tiempo de vida media correspondiente a cada estado resonante.

2. En el capítulo §5 se hace el estudio de la evolución temporal de estados de mínima

incertidumbre. Además se han considerado que estos estados iniciales sean localizados, tomando dos casos particulares: onda saliente §5.2 (pág. 43) y el estado gato de Schrödinger §5.3 (pág. 62) para los cuales se muestra que existe un conjunto finito de estados resonantes que dominan la evolución temporal del sistema. Se realizó un estudio exhaustivo de los coeficientes involucrados en el cálculo de las probabilidades de supervivencia y no escape. Sin embargo no se obtuvo una diferencia cualitativa de la evolución temporal entre estos dos tipos de estados.

Hemos encontrando que el decaimiento del sistema con un estado inicial de mínima incertidumbre es siempre más rápido (comparado con el decaimiento del estado base de la caja de potencial infinito §4.2). Además, la condición de que sean de mínima incertidumbre nos dan un contraejemplo al resultado obtenido por Lenef y Rand. Mostramos que en realidad el comportamiento cualitativo de la evolución temporal del decaimiento de estados de mínima incertidumbre es más bien por el hecho de que el estado sea localizado y no de mínima incertidumbre. Esto se entiende al desarrollar el estado inicial en la base de estados resonantes, se tendrá la contribución de más de un estado resonante y cada uno de ellos decae más rápidamente que el primer estado resonante $u_1(r)$. Explicando porque decaen con un tiempo de vida menor al primer estado resonante. Además después de un tiempo finito el sistema presenta el mismo fenómeno de pérdida de memoria, esto es, en la región exponencial hay un intervalo en el cual el sistema decae con la vida media del primer estado resonante.

Se observa que la posición inicial del estado localizado afecta el comportamiento cualitativo de la evolución temporal del sistema. Obteniéndose que la evolución temporal del sistema para el estado localizado en $r_0 = a/2$, decae más lentamente en la región exponencial que cualquier otro estado localizado en otro punto dentro del alcance del potencial. Esto se entiende porque el coeficiente $C_1(r_0)$ correspondiente al primer estado resonante cumple $\Re\{C_1(a/2)\} > \Re\{C_1(r_0 \neq a/2)\}$, es decir, el estado centrado en $a/2$ tiene una mayor contribución del primer estado resonante, por lo que éste domina más rápidamente en el proceso de decaimiento.

Por otro lado en la región no-exponencial, el estado localizado en $r_0 \approx a$, decae más lentamente que cualquier otro estado localizado fuera de la frontera del potencial. Esto se puede entender de la expresión (5.40) que corresponde al coeficiente de la probabilidad de supervivencia en la región no-exponencial y al graficarla en función de r_0 se tiene una curva creciente figura 5.25 (pág. 80), la cual muestra que para valores de $r_0 > a/2$ el coeficiente de la probabilidad de supervivencia es más grande que para valores que no lo son. Así en la región no-exponencial, el estado inicial localizado en $r_0 > a/2$, decaerá más lentamente que el estado localizado en $r_0 \leq a/2$.

Los resultados obtenidos en los ejemplos, en donde se ha considerado el modelo potencial delta repulsivo, se pueden generalizar a otros modelos más complicados, con la condición de que el potencial sea de alcance finito, ya que el comportamiento cualitativo de los polos (fig. 3.1, pág 23) de la función de Green de onda saliente para potenciales de alcance finito es el mismo [4]. Esto es, los tiempos de vida media proporcionados por los polos cumplen $\tau_1 > \tau_2 > \dots > \tau_n > \dots$ que corresponden al tiempo de vida media de cada estado resonante, es decir, el primer estado resonante tiene el tiempo de vida media más grande proporcionado por el sistema, lo que nos permite enunciar

El tiempo de vida media máximo, está dado por el ancho parcial correspondiente al primer estado resonante y éste no depende del estado inicial que se considere.

Esto prohíbe la existencia de un estado inicial "especial" que tenga un tiempo de vida media mayor al proporcionado por el sistema. Además se tiene que *cualquier estado inicial arbitrario, después de un tiempo finito τ hará una transición al primer estado resonante $u_1(r)$ ¹ en la región exponencial.* Para explicarlo consideremos la función de onda en la región exponencial (2.69) (pág. 14) así, el hecho de que τ_1 es máximo implica que existe un tiempo τ para el cual la contribución más importante en la serie (2.69) sea la del primer estado resonante, dando la densidad de probabilidad como

$$|\Psi(r, t)|^2 \approx |C_1|^2 |u_1(r)|^2 e^{-t/\tau_1} \quad t > \tau,$$

lo que muestra la afirmación. Además de la expresión anterior se tiene que la evolución temporal de un estado arbitrario está dominada después de un tiempo τ , únicamente por la evolución temporal del primer estado resonante en la región exponencial. Esto aclara el fenómeno de pérdida de memoria del sistema, dejando únicamente al factor constante con la información del estado inicial.

¹Esto sucede en general porque la base de estados resonantes $\{u_n(r)\}$ no es ortogonal.

Apéndice A

Función $M(x, t, k)$

La función $M(x, t, k_n)$ se define mediante

$$M(x, t, k_n) \equiv \frac{i}{2\pi} e^{i\frac{x^2}{4t}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-u^2}}{iy_n - u} du \quad \text{con} \quad \Im\{iy_n\} > 0, \quad (\text{A.1})$$

en donde la variable y_n es

$$y_n = \frac{1}{2} e^{-i\frac{\pi}{4}} t^{-\frac{1}{2}} (x - 2k_n t). \quad (\text{A.2})$$

La integral que aparece en la definición de la función $M(x, t, k_n)$, es una función conocida que está relacionada con la función de error complementario mediante $\omega(z)$ [9, 10]. Identificando ésta escribimos

$$M(x, t, k_n) = \frac{1}{2} e^{i\frac{x^2}{4t}} \omega(iy_n). \quad (\text{A.3})$$

Es importante que al usar la definición (A.1), se tenga presente tomar valores de iy_n que satisfacen la condición $\Im\{iy_n\} > 0$. En caso contrario $\Im\{iy_n\} < 0$ utilizamos la relación de simetría

$$M(x, t, k_n) = e^{i(k_n x - k_n^2 t)} - \frac{1}{2} e^{i\frac{x^2}{4t}} \omega(-iy_n) \quad \text{si} \quad \Im\{iy_n\} < 0, \quad (\text{A.4})$$

que es heredada de las propiedades de simetría de la función $\omega(z)$, podemos escribir el segundo término de esta expresión como $M(-x, t, -k_n)$. Dando la relación de simetría de la función $M(x, t, k_n)$

$$M(x, t, k_n) = e^{i(k_n x - k_n^2 t)} - M(-x, t, -k_n) \quad \text{si} \quad \Im\{iy_n\} < 0. \quad (\text{A.5})$$

La función $\omega(z)$ tiene su desarrollo en serie [9, 10], por lo que el desarrollo en serie de la función $M(x, t, k_n)$ es

$$M(x, t; k_n) = \frac{1}{2} e^{i\frac{x^2}{4t}} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m y_n^m}{\Gamma(\frac{m}{2} + 1)}, \quad (\text{A.6})$$

que es válida para todo valor de y_n . Sin embargo, es sólo utilizada para el comportamiento de la función cuando $y_n \approx 0$, es decir, como aproximación asintótica de la función.

También se tiene una expresión en serie para valores grandes ($y_n \rightarrow \infty$), que es usada normalmente para el estudio de este comportamiento asintótico. La expresión es

$$M(x, t; k_n) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} e^{i\frac{x^2}{4t}} \left\{ \frac{1}{y_n} + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^m \prod_{j=1}^m (2j-1)}{2^m y_n^{2m+1}} \right\}. \quad (\text{A.7})$$

La virtud de esta expresión es que si $y_n \gg 1$ se pueden despreciar casi todos los términos de la serie, y en el mejor de los casos podemos solamente quedarnos con los dos primeros términos.

Apéndice B

Estados resonantes $u_n(r)$

Para el problema de decaimiento con un potencial con simetría radial de interacción finita, es decir $V(r \geq a) = 0$, utilizamos el concepto de estado resonante del sistema $u_n(r)$ que corresponde a una energía compleja. Suponiendo que el momento angular de la partícula es cero. El estado resonante satisface la ecuación, en unidades $2m = \hbar = 1$

$$u_n''(r) + [k_n^2 - V(r)]u_n(r) = 0, \quad (\text{B.1})$$

con las condiciones de frontera

$$u_n(0) = 0 \quad \left. \frac{du_n(r)}{dr} \right|_{r=a} = ik_n u_n(a), \quad (\text{B.2})$$

identificamos $k_n^2 = \epsilon_n - i\Gamma_n/2$, con, $\epsilon_n, \Gamma_n > 0$. La ecuación (B.1) también es válida para el complejo conjugado. Dado que $V(r)$ es real, la ecuación (B.1) no pierde su estructura, así reenumerando el orden de los índices podemos igualar $k_n^{*2} = k_{-n}^2$, lo que a su vez implica que $k_{-n} = -k_n^*$. Para los estados resonantes se tiene la igualdad $u_{-n}(r) = u_n^*(r)$, que se encuentra al calcular el conjugado de (B.2).

Partiendo de la ecuación (B.1), que es válida para los estados $u_n(r)$ y $u_m(r)$, y multiplicando por $u_m(r)$ y $u_n(r)$ respectivamente, tenemos las siguientes ecuaciones

$$u_m(r) \{ u_n''(r) + [k_n^2 - V(r)]u_n(r) \} = 0, \quad (\text{B.3})$$

$$u_n(r) \{ u_m''(r) + [k_m^2 - V(r)]u_m(r) \} = 0. \quad (\text{B.4})$$

Restando estas e integrando en el intervalo $[0, a]$ obtenemos

$$u_m(a)u_n'(a) - u_n'(a)u_m(a) + (k_n^2 - k_m^2) \int_0^a u_n(r)u_m(r)dr = 0. \quad (\text{B.5})$$

Usando (B.2) tenemos

$$\frac{k_n - k_m}{k_n + k_m} \left\{ \int_0^a u_n(r)u_m(r)dr + i \frac{u_n(a)u_m(a)}{k_n + k_m} \right\} = 0. \quad (\text{B.6})$$

En general $k_n \neq k_m$, por lo que se puede identificar al término entre corchetes, como una condición de ortogonalidad ¹ para los estados resonantes [1], es decir

$$\int_0^a u_n(r)u_m(r)dr + i \frac{u_n(a)u_m(a)}{k_n + k_m} = \delta_{nm}, \quad (\text{B.7})$$

si $m = -n$ se tiene la igualdad

$$\text{Im}(k_n) = -\frac{1}{2} \frac{|u_n(a)|^2}{\int_0^a |u_n(r)|^2 dr}. \quad (\text{B.8})$$

Es decir, la parte imaginaria de k_n siempre es negativa. Así podemos escribir $k_n = \alpha_n - i\beta_n$ con $\alpha_n, \beta_n > 0$ y la ecuación (B.8) se escribe como

$$\beta_n = \frac{1}{2} \frac{|u_n(a)|^2}{\int_0^a |u_n(r)|^2 dr}. \quad (\text{B.9})$$

Por otro lado se tiene que el ancho $\Gamma_n = 4\alpha_n\beta_n$. Multiplicando por el factor $4\alpha_n$ la igualdad (B.9), encontramos el ancho Γ_n en términos del estado resonante es

$$\Gamma_n = 2\alpha_n \frac{|u_n(a)|^2}{\int_0^a |u_n(r)|^2 dr}, \quad (\text{B.10})$$

y la vida media τ_n del estado $u_n(r)$ es

$$\tau_n = \frac{1}{\Gamma_n}. \quad (\text{B.11})$$

B.1. Relaciones de suma de los coeficientes

El conjunto de estados resonantes $\{u_n(r)\}$, dentro del alcance de un potencial de interacción finita obedecen las siguientes relaciones de suma

¹En realidad no es estrictamente la condición de ortogonalidad entre funciones, ya que no debería aparecer el segundo término.

$$\frac{1}{2} \sum_n u_n(r) u_n(r') = \delta(r - r') \quad r, r' < a, \quad (\text{B.12})$$

$$\sum_n \frac{u_n(r) u_n(r')}{k_n} = 0 \quad r, r' < a. \quad (\text{B.13})$$

Estas relaciones obtenidas en §2.4 son válidas debido a que la función saliente de Green, se desarrolla de forma discreta en la región interna del potencial.

Dentro del estudio de la evolución temporal del decaimiento, se definen las cantidades: Amplitud de supervivencia y las probabilidades de supervivencia y no escape. La definición de estas cantidades, permiten definir los coeficientes, C_n , \bar{C}_n e I_{mn} como

$$C_n \equiv \int_0^a \Psi(r, 0) u_n(r) dr, \quad (\text{B.14})$$

$$\bar{C}_n = \int_0^a \Psi^*(r, 0) u_n(r) dr, \quad (\text{B.15})$$

$$I_{mn} = \int_0^a u_m^*(r) u_n(r) dr. \quad (\text{B.16})$$

Las relaciones de suma de los estados resonantes (B.12, B.13), permiten encontrar relaciones de suma para los coeficientes. Estas son utilizadas para el estudio asintótico de las cantidades $\Psi(r, t)$, $A(t)$, $S(t)$ y $P(t)$. Para lo cual hay que notar las relaciones de simetría estos coeficientes respecto a los índices, que son heredadas de las relaciones de simetría de los estados resonantes a saber $u_{-n}(r) = u_n^*(r)$. Por lo anterior, los coeficientes C_n y \bar{C}_n heredan la relación $C_{-n} = \bar{C}_n^*$ y el coeficiente I_{mn} hereda las relaciones $I_{-m, -n} = I_{mn}$ y $I_{-mn} = I_{m, -n}^*$ que nos son útiles para simplificar las expresiones que involucran estas cantidades.

La forma de encontrar las relaciones de suma entre coeficientes es mediante la manipulación de las relaciones (B.12, B.13). Comenzamos con la relación (B.12), multiplicando por $\Psi(r', 0)$ e integrando, se obtiene

$$\Psi(r, 0) = \frac{1}{2} \sum_n C_n u_n(r), \quad (\text{B.17})$$

que no es más que el desarrollo en estados resonantes del estado inicial. Posteriormente multiplicando por el conjugado de la función de onda inicial $\Psi^*(r, 0)$ e integrando nuevamente se obtiene la relación

$$\frac{1}{2N} \sum_n C_n \bar{C}_n = 1, \quad (\text{B.18})$$

en donde se ha definido N como

$$N = \int_0^a \Psi^*(r, 0) \Psi(r, 0) dr. \quad (\text{B.19})$$

En general se puede pedir que $N = 1$, salvo casos especiales, como el caso en que el estado inicial sea un estado resonante, el cual no cumple esta condición. Otra de las relaciones útiles que se encuentra es multiplicando la ecuación (B.17) por $u_m^*(r)$ e integrando tenemos

$$\frac{1}{2} \sum_n C_n I_{mn} = \bar{C}_m. \quad (\text{B.20})$$

Esta relación, nos permite mostrar que $P(0) = 1$ permitiendo desacoplar la suma doble que aparece en la expresión para $P(0)$. Convirtiéndola en una suma simple que es idéntica a la relación (B.18).

Con una manipulación semejante, encontramos relaciones de suma para los coeficientes mediante la relación (B.13), multiplicando por la función de onda inicial $\Psi(r', 0)$ la ecuación (B.13) e integrando obtenemos

$$\sum_n \frac{C_n u_n(r)}{k_n} = 0. \quad (\text{B.21})$$

Esta relación nos permite encontrar más relaciones de suma de los coeficientes, ya que la igualdad es cero. Por ejemplo si multiplicamos por $\Psi(r, 0)$ la ecuación (B.21) e integramos se tiene que

$$\sum_n \frac{C_n^2}{k_n} = 0. \quad (\text{B.22})$$

O bien si multiplicamos por $\Psi^*(r, 0)$ la ecuación (B.21) e integramos obtenemos

$$\sum_n \frac{\bar{C}_n C_n}{k_n} = 0. \quad (\text{B.23})$$

También podemos multiplicar la ecuación (B.21) por el conjugado de un estado resonante arbitrario $u_m^*(r)$ e integrar obteniendo

$$\sum_n \frac{C_n I_{mn}}{k_n} = 0. \quad (\text{B.24})$$

Sin duda se pueden encontrar muchas más relaciones de suma de esta naturaleza. Una relación de suma más importante se obtiene ahora de forma inmediata, la ecuación (B.21)

es válida así como su conjugado, por lo que el producto de ambas también lo será. Este es

$$\sum_m \sum_n \frac{C_m^* C_n u_m^*(\tau) u_n(\tau)}{k_m^* k_n} = 0, \quad (\text{B.25})$$

al hacer la integral de esta relación se tiene

$$\sum_m \sum_n \frac{C_m^* C_n f_{mn}}{k_m^* k_n} = 0. \quad (\text{B.26})$$

La cual nos permite mostrar que el comportamiento cualitativo de la probabilidad de no escape y la probabilidad de supervivencia, es el mismo para tiempos largos.

Las relaciones de suma de los coeficientes que se encuentran, son importantes para el análisis teórico y numérico de la evolución temporal, ya que éstas nos permiten eliminar términos de las series de las probabilidades.

Apéndice C

Desarrollo discreto de la función de Green de onda saliente

La función de Green de onda saliente $G^+(r, r', k_n)$, que se utiliza en el formalismo de estados resonantes, cumple dentro del alcance del potencial ($r, r' < a$), ser cero en el límite $|k_n| \rightarrow \infty$, lo que nos permite escribirla de forma discreta [1]. Dado que ésta tiene n polos de primer orden en el plano complejo. Demostraremos que una función de variable compleja siempre se puede escribir de forma discreta si cumple las mismas condiciones que en nuestro caso tiene la función de Green de onda saliente. Esto se puede enunciar como un teorema:

Si $f(z)$ es una función de variable compleja que tiene n polos de primer orden y además satisface la condición a la frontera $f(z) \rightarrow 0$ para $|z| \rightarrow \infty$ entonces

$$f(z) = \sum_s^n \frac{R_s}{z - z_s}. \quad (\text{C.1})$$

Demostración:

Tomemos una trayectoria cerrada $C = \Sigma\{-C_s\} + \{-C_z\} + C_c$ que excluye a todos los polos de la función $f(z)$ y también a un punto z arbitrario diferente a cualquier polo z_s , como se muestra en la figura C.1. Dado que C es una trayectoria que se selecciona en dirección opuesta a las manecillas del reloj, se tiene que las trayectorias al rededor de z y el conjunto de polos $\{z_s\}$ tienen que ir en dirección de las manecillas del reloj, lo cual se ha tomado en cuenta con el signo negativo que aparece en las trayectorias C_z y C_s . Así cada trayectoria C_k es en dirección contraria de las manecillas del reloj.

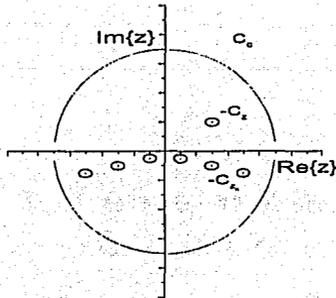


Figura C.1: Muestra la trayectoria de integración C_s y cada una de sus componentes.

Así la integral

$$\frac{1}{2\pi i} \int_C \frac{f(z')}{(z' - z)} dz' = 0. \quad (C.2)$$

Expresando esta integral en cada una de sus componentes se obtiene la siguiente expresión

$$\frac{1}{2\pi i} \left\{ \int_{C_1} \frac{f(z')}{(z' - z)} dz' + \int_{C_2} \frac{f(z')}{(z' - z)} dz' + \int_{C_3} \frac{f(z')}{(z' - z)} dz' + \int_{C_4} \frac{f(z')}{(z' - z)} dz' \right\} = 0. \quad (C.3)$$

Haciendo la trayectoria cada vez más grande de modo que rodee el plano complejo. Se observa que la tercera integral de la expresión anterior se hace cero, en virtud de que $f(z)$ es cero en la trayectoria C_3 . Así la contribución de la integral total es sólo por las dos primeras integrales. Además, se identifica la segunda integral como la integral de Cauchy, por lo que se tiene la igualdad

$$f(z) = -\frac{1}{2\pi i} \sum_s \int_{C_s} \frac{f(z')}{(z' - z)} dz'. \quad (C.4)$$

La integral sobre cada trayectoria C_s , es el residuo de la función a integrar, ya que el término $1/(z' - z)$ es analítico cerca de cada z_s dando la igualdad (C.1) con R_s el residuo de la función $f(z)$ en el polo z_s , lo cual muestra el teorema.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

Bibliografía

- [1] G. García Calderón, *Resonant States and the Decay Process*, en el libro: Symmetries in Physics, ediatdo por A. Frank y K. B. Wolf (Springer-Verlag, Berlín, 1992) pág. 252.
- [2] G. García Calderón, J. L. Mateos and M. Moshinsky, *Survival and Nonescape Probabilities for Resonant and Nonresonant Decay*, Annals of Physics 249, No. 2, 430, (Aug. 1996)
- [3] A. Lenef and S. C. Rand, *Tunneling dynamics of squeezed states in a potential well*, Phy. Rev. A 49, No. 1, 32, (Jan. 1994)
- [4] Roger G. Newton, *Scattering Theory of Waves and Particles*, Ed. Springer-Verlag, 2ra. Edición (1982)
- [5] G. Gamow and C. L. Critchfield, *Theory of Atomic Nucleus and Nuclear Energy-Sources*, Oxford at the Clarendon Press, pág. 163-169 (1949)
- [6] Gastón García-Calderón Alberto Rubio, *An expansion of continuum wave functions in terms of resonant states (II). Solvable models*, Nucl. Phys. A 458, 560, (1986)
- [7] Manuel de Llano, *Mecánica Cuántica* Ed. Icaria, 1ra. Edición, (Feb. 1996)
- [8] Michael Martin Nieto and D. Rodney Truax, *Squeezed States for General Systems*, Phys. Rev. Lett. 71, No. 18, 2843, (Nov. 1993)
- [9] V. N. Faddeyeva and N. M. Terentev, *Tables of values of the function*

$$\omega(z) = e^{-z^2} \left(1 + \frac{2i}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{t^2} dt \right)$$

for complex argument, Edited by Academician V. A. Fok, Printed in Great Britain by Pergamon Printing & Art Services LTD. London (1991)

- [10] Abramowitz, M. and I. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions*, Dover, N.Y. (1968)
- [11] J. Humblet and L. Rosenfeld, *Theory of Nuclear Reactions*, Nuclear Physics 26, 529, (Sep. 1961)
- [12] Gastón García Calderón and Rudolf Peierls, *Resonant states and their uses*, Nucl. Phys. A256, 443, (1976)
- [13] Gastón García Calderón and Alberto Rubio: *Transient effects and delay time in the dynamics of resonant tunneling*, Phys. Rev. A 55, No. 5, 3361, (May 1997)
- [14] Gastón García Calderón and Jorge Villavicencio, *Time dependence of the probability density in the transient regime for tunneling*, Phys. Rev. A 64, 012107-1, (Jun. 2001)
- [15] Gastón García Calderón, Verónica Riquer and Roberto Romo, *Survival probability of a single resonance*, J. Phys. A: Math. Gen. 34, 4155, (2001)
- [16] G. García Calderón, *An expansion of continuum wave functions in terms of resonant states*, Nucl. Phys. A 216, 130-140, (1976)