



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

---

---

FACULTAD DE CIENCIAS

EFFECTO DE LOS ESTADOS LIGADOS SOBRE LOS  
TRANSITORIOS CUÁNTICOS EN UNA DIMENSIÓN

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE  
F Í S I C O

P R E S E N T A  
LUIS GUILLERMO MENDOZA LUNA

DIRECTOR DE TESIS:  
DR. GASTÓN DANIEL GARCÍA Y CALDERÓN



2009



Universidad Nacional  
Autónoma de México



**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.

## Hoja de datos del jurado

1. Datos del alumno Mendoza Luna Luis Guillermo Universidad Nacional Autónoma de México Facultad de Ciencias Física 302092398
2. Datos del tutor Dr Gastón Daniel García Calderón
3. Datos del sinodal 1 Dr Fernando Matías Moreno Yntriago
4. Datos del sinodal 2 Dra María de los Ángeles Ortiz Flores
5. Datos del sinodal 3 M en C Lorea Chaos Cador
6. Datos del sinodal 4 Dr José Francisco Récamier Angelini
7. Datos del trabajo escrito Efecto de los estados ligados sobre los transitorios cuánticos en una dimensión 93 p 2009

*Este trabajo está dedicado, en primer lugar, a mi familia, pues ella es la razón y el motivo de todos los esfuerzos que he realizado en la vida. Espero que el trabajo que se presenta en las páginas siguientes sea causa de orgullo para ellos.*

*La presente tesis también está dedicada muy en particular al plantel 9 “Pedro de Alba” de la Escuela Nacional Preparatoria y a todos los amigos y profesores que en ella conocí, quienes me enseñaron una forma de ser, y que aun hoy, a pesar del inexorable paso del tiempo, mantienen en sus recuerdos un espacio para mí al tiempo que conservo la misma emoción del día en que me convertí en preparatoriano. Fue durante esta etapa que aprendí una forma de ser y que entré de lleno a la vida universitaria; fue también cuando aprendí el valor de las ideas y de su potencial de cambiar el mundo.*

*Este trabajo también está dedicado a todas las personas que conocí en la Facultad de Ciencias pues todos ellos me ayudaron durante mi paso por ella convirtiendo mi estancia en una experiencia agradable al brindarme su amistad, sus consejos y su orientación académica, en particular la Dra. Patricia Goldstein.*

# Agradecimientos

Quiero agradecer, en primer lugar, al Dr. Gastón García Calderón por haberme iniciado en la investigación en Física, donde he aprendido, entre otras cosas, que la única regla inmutable es la de esperar lo menos pensado; también le agradezco el acercamiento que me brindó a sus temas de investigación y por haber aceptado dirigir mi tesis. Agradezco también a Sergio Cordero por varias discusiones útiles sobre la programación en FORTRAN y la Mecánica Cuántica además del programa para calcular los polos complejos de la amplitud de transmisión de su autoría.

Asimismo mi profundo agradecimiento a mis sinodales: el Dr. Gastón García Calderón, el Dr. Matías Moreno, la Dra. María de los Ángeles Ortiz, el Dr. José Récamier y la M. en C. Lorea Chaos pues sus comentarios, críticas y sugerencias enriquecieron y mejoraron este trabajo, al tiempo que corrigieron los errores del mismo.

Agradezco la formación académica que recibí en la Facultad de Ciencias y que me permitió iniciarme profesionalmente en la Física, así como a mis amigos y los profesores de la Facultad, quienes contribuyeron a mi formación académica y científica; de la misma manera, agradezco también al Instituto de Física la oportunidad que me brindó al aceptarme como uno de sus estudiantes asociados.

Finalmente, pero no por ello menos importante, todo mi reconocimiento y gratitud a las personas que a lo largo de mi vida y que olvido mencionar, dentro y fuera de la escuela, me han brindado su apoyo, pues ellas son los verdaderos autores de este trabajo.

...  
por si alguna vez soñamos;  
y sí haremos, pues estamos  
en mundo tan singular,  
que el vivir sólo es soñar;  
y la experiencia me enseña  
que el hombre que vive, sueña  
lo que es, hasta despertar.

Segismundo en *La vida es sueño*

# Índice general

<b>Introducción</b>	<b>I</b>
<b>1. Transitorios cuánticos</b>	<b>1</b>
1.1. Difracción en el tiempo . . . . .	1
1.2. La función $M$ . . . . .	5
1.3. Solución por Transformada de Fourier . . . . .	8
1.4. Solución por Transformada de Laplace . . . . .	9
1.5. La función $w$ . . . . .	13
1.6. Integrales expresables en términos de $w$ . . . . .	15
1.7. Desarrollos en serie de $M$ . . . . .	20
1.8. Comportamiento asintótico de $M$ . . . . .	21
1.9. Evaluación numérica de $w$ . . . . .	22
<b>2. Teoría de los estados resonantes.</b>	<b>26</b>
2.1. Origen y definición. . . . .	26
2.2. Significado de las energías complejas . . . . .	28
2.3. Dispersión y decaimiento . . . . .	31
2.4. Función de Green de onda saliente . . . . .	33
2.5. Normalización de los estados resonantes . . . . .	36
2.6. Matrices $S$ y $M$ unidimensionales . . . . .	38
2.7. Matriz $S$ y función de Green . . . . .	40
2.8. Desarrollos en serie de $t(k)$ . . . . .	41
2.9. Método de la matriz de transferencia . . . . .	44
<b>3. Escalas de tiempo</b>	<b>48</b>
3.1. Tiempo de retardo . . . . .	48
3.2. Efecto Hartman . . . . .	49
<b>4. El potencial <math>\delta</math></b>	<b>50</b>
4.1. Solución analítica . . . . .	50
4.2. Sobre la solución estacionaria . . . . .	57
4.3. Solución numérica del problema . . . . .	58
4.4. Transitorios cuánticos y densidad de probabilidad . . . . .	58
4.5. Tiempos de retardo y de transmisión . . . . .	63

4.6. Discusión de los resultados . . . . .	64
<b>5. Potenciales rectangulares</b>	<b>66</b>
5.1. Cálculo numérico de los polos . . . . .	66
5.2. Polología de los potenciales rectangulares . . . . .	67
5.2.1. Barrera de potencial . . . . .	67
5.2.2. Pozo de potencial . . . . .	68
5.3. Solución analítica . . . . .	70
5.4. Amplitud de transmisión . . . . .	76
5.5. Condición inicial de onda reflejada . . . . .	77
5.6. Resonancia en el dominio temporal . . . . .	77
5.7. Transitorios cuánticos . . . . .	77
5.8. Umbral de energía . . . . .	82
5.9. Dependencia de la energía de la onda inicial . . . . .	82
5.10. Tiempos de retardo y de transmisión . . . . .	85
<b>Conclusiones</b>	<b>89</b>

# Introducción

Los transitorios cuánticos son fenómenos temporales que existen hasta que un sistema cuántico alcanza el régimen estacionario. Un ejemplo destacado de transitorio cuántico fue estudiado por Marcos Moshinsky, quien planteó el problema siguiente: un haz monocromático de partículas se encuentra confinado a una región del espacio por un obturador perfectamente absorbente que se abre instantáneamente, lo cual permite que la onda evolucione libremente. Moshinsky encontró que la solución exhibe un comportamiento matemático análogo al fenómeno de la difracción de la luz por un borde recto, de ahí que Moshinsky llamara a este fenómeno difracción en el tiempo.

El problema de Moshinsky puede generalizarse colocando frente al obturador un potencial de alcance finito arbitrario. Gastón García Calderón y Alberto Rubio obtuvieron una solución analítica a este problema utilizando el formalismo de los estados resonantes.

El propósito principal de esta investigación es estudiar el efecto de los estados ligados de potenciales atractivos sobre los transitorios cuánticos de la función de onda transmitida por medio de la solución de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo con condición inicial de obturador cuántico. La mayoría de los estudios previos que utilizan este enfoque solamente han considerado potenciales repulsivos pues han estado orientados en investigar la dinámica del efecto túnel.

El primer potencial considerado es el potencial  $\delta$  de Dirac, repulsivo y atractivo, pues este problema tiene una solución analítica que observa la misma estructura que la solución para un potencial unidimensional de alcance finito arbitrario y cuyos casos límite son susceptibles de ser estudiados analíticamente y porque también permite abstraer las características más importantes de los fenómenos estudiados que presentan otros potenciales más realistas. Utilizando como preparación y antecedente el trabajo desarrollado con el potencial  $\delta$  de Dirac se estudian los transitorios asociados a la barrera y el pozo rectangulares a distancias fijas utilizando el tiempo como parámetro; se estudia, además, el comportamiento en el umbral de energía y la dependencia que observan los resultados obtenidos respecto a la energía de la onda inicial.

Un objetivo secundario de esta investigación es la evaluación de la función  $M(x, k, t)$ , la solución al problema de Moshinsky, para  $k$  tales que  $\text{Im}(k) > 0$ , pues hasta donde sabemos, en la literatura no existe indicación de cómo realizar

este cálculo.

La presente investigación también contempla el estudio de los tiempos de retardo fase y dinámico así como del tiempo de transmisión de Hartman en todos los potenciales considerados.

# Capítulo 1

## Transitorios cuánticos

Un transitorio es un fenómeno temporal de los sistemas que en la mecánica clásica asociamos con el movimiento de un oscilador lineal sujeto a una fuerza que actúa discontinuamente [1]. En contraparte, los transitorios cuánticos tienen lugar en respuesta a un cambio espontáneo en alguna condición del sistema, como la apertura instantánea de un obturador y son características temporales asociadas a las ondas de materia que desaparecen cuando el sistema alcanza un estado estacionario [2]. Uno de los ejemplos más importantes de los fenómenos transitorios es la difracción en el tiempo, que se presenta a continuación.

### 1.1. Difracción en el tiempo

En 1952, Marcos Moshinsky propuso [3, 4] un experimento mental que consiste en que una onda plana está confinada en el semiplano  $x < 0$  por un obturador perfectamente absorbente que se abre instantáneamente en  $t = 0$ , lo cual permite que la onda se propague a la región  $x > 0$ ; el problema es dar cuenta de la evolución temporal del paquete de ondas. Así, pues, se desea encontrar la solución de la ecuación de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t) \quad (1.1.1)$$

donde la función de onda  $\Psi$  está sujeta a la condición inicial

$$\Psi(x, 0) = e^{ikx} H(-x), \quad (1.1.2)$$

donde  $H$  es la función escalón de Heaviside

$$H(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ 1, & x > 0 \end{cases} \quad (1.1.3)$$

Utilizando el propagador de partícula libre [5] o función de Green del problema  $g(x, t; x', t')$  dado por

$$g(x, t; x', t') = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar (t - t')}} \exp\left(\frac{im(x - x')^2}{2\hbar(t - t')}\right), \quad (1.1.4)$$

donde convenimos que

$$\sqrt{i} = \exp\left(i\frac{\pi}{4}\right),$$

y la relación

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} g(x, t; x', 0) \Psi(x', 0) dx' \quad (1.1.5)$$

encontramos que la solución del problema es

$$\Psi(x, t) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar t}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(\frac{im}{2\hbar t} (x - x')^2\right) \Psi(x', 0) dx'. \quad (1.1.6)$$

Sustituyendo (1.1.2) en (1.1.6) y utilizando la relación de De Broglie  $p = \hbar k$  encontramos que

$$\Psi(x, t) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar t}} \int_{-\infty}^0 \exp\left[\frac{i}{\hbar} \left(px' + \frac{m}{2t}(x - x')^2\right)\right] dx'. \quad (1.1.7)$$

Es posible obtener al menos dos formas analíticas equivalentes para la solución del problema. Para obtener la primera de ellas se utiliza el cambio de variable

$$\begin{aligned} z &= (x' - x) \sqrt{\frac{m}{2\hbar t}} + p \sqrt{\frac{t}{2m\hbar}} \\ &\Rightarrow \frac{i}{\hbar} \left[ p(x' - x) + \frac{m}{2t}(x' - x)^2 \right] = iz^2 - i \frac{p^2 t}{2m\hbar}. \end{aligned} \quad (1.1.8)$$

Entonces, si definimos  $v = p/m$  y  $\xi = \sqrt{\frac{m}{2\hbar t}}(vt - x)$  encontramos que

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^0 \exp\left[\frac{i}{\hbar} \left(p(x' - x) + \frac{m}{2t}(x' - x)^2\right)\right] dx' &= \\ &= \sqrt{\frac{2\hbar t}{m}} \exp\left(-\frac{ip^2 t}{2m\hbar}\right) \int_{-\infty}^{\xi} e^{iz^2} dz. \end{aligned} \quad (1.1.9)$$

Además,

$$\int_{-\infty}^{\xi} e^{iz^2} dz = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \exp\left(\frac{i\pi}{4}\right) + \int_0^{\xi} e^{iz^2} dz. \quad (1.1.10)$$

lo cual implica que

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{\pi i}} \exp \left[ \frac{i}{\hbar} \left( px - \frac{p^2 t}{2m} \right) \right] \left( \frac{\sqrt{\pi}}{2} \exp \left( i \frac{\pi}{4} \right) + \int_0^\xi e^{iz^2} dz \right). \quad (1.1.11)$$

Separando la exponencial imaginaria en sus partes real e imaginaria,

$$\int_0^\xi e^{iz^2} dz = \int_0^\xi \cos(z^2) dz + i \int_0^\xi \sin(z^2) dz. \quad (1.1.12)$$

Se introducen las integrales de Fresnel  $C(\chi)$  y  $S(\chi)$ , definidas como [6]

$$C(\chi) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^{\sqrt{\frac{\pi}{2}} \chi} \cos(s^2) ds \quad (1.1.13)$$

$$S(\chi) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^{\sqrt{\frac{\pi}{2}} \chi} \sin(s^2) ds \quad (1.1.14)$$

$$\Rightarrow \int_0^\xi e^{iz^2} dz = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \left[ C \left( \sqrt{\frac{2}{\pi}} \xi \right) + i S \left( \sqrt{\frac{2}{\pi}} \xi \right) \right].$$

Entonces, la solución en términos de las integrales de Fresnel es

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2i}} \exp \left[ \frac{i}{\hbar} \left( px - \frac{p^2 t}{2m} \right) \right] \times \left[ \frac{e^{i\frac{\pi}{4}}}{\sqrt{2}} + C \left( \sqrt{\frac{2}{\pi}} \xi \right) + i S \left( \sqrt{\frac{2}{\pi}} \xi \right) \right]. \quad (1.1.15)$$

Introduciendo  $\varrho = \sqrt{2/\pi} \xi$ , la solución del problema es

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2i}} \exp \left[ \frac{i}{\hbar} \left( px - \frac{p^2 t}{2m} \right) \right] \left[ \left( \frac{1}{2} + C(\varrho) \right) + i \left( \frac{1}{2} + S(\varrho) \right) \right]. \quad (1.1.16)$$

La densidad de probabilidad se puede expresar, entonces, por

$$|\Psi(x, t)|^2 = \frac{1}{2} \left[ \left( \frac{1}{2} + C(\varrho) \right)^2 + \left( \frac{1}{2} + S(\varrho) \right)^2 \right]. \quad (1.1.17)$$

Ahora se puede apreciar la motivación para nombrar este fenómeno transitorio como difracción en el tiempo: en el problema óptico de la difracción de Fresnel por un borde recto [7] la irradiancia viene dada por una fórmula matemáticamente equivalente a (1.1.17). En la figura 1.1<sup>1</sup> se ilustra  $|\Psi(x_0, t)|^2$  para

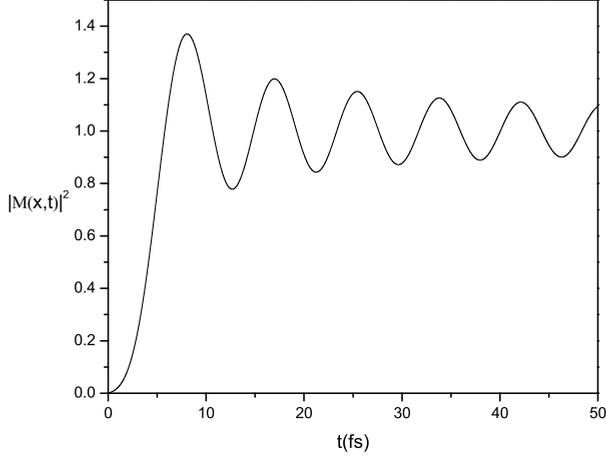


Figura 1.1: Solución del problema de Moshinsky para  $t$  variable (parámetros:  $m=0.067m_e$ ,  $E=0.5eV$ ,  $x_0=5nm$ ).

un valor  $x_0 > 0$  constante; la forma de la gráfica corresponde a la presentada por el perfil de intensidades del problema óptico mencionado.

La versión clásica de la figura 1.1 tiene la forma de un escalón pues la solución es 0 hasta un cierto tiempo de tránsito en que la onda llega al punto, después de lo cual la solución es 1. La solución cuántica evita la discontinuidad y exhibe oscilaciones amortiguadas como función del tiempo; en eso consiste la difracción en el tiempo. También se observa que la solución cuántica predice componentes de la onda que lleguen al detector instantáneamente, lo cual se explica porque (1.1.1) no es una ecuación diferencial relativista.

La espiral de Cornú es la representación en el plano complejo de los puntos de la forma  $C(\varsigma) + iS(\varsigma)$ , donde  $\varsigma$  toma todos los posibles valores reales. Su utilidad en óptica es el de una curva de vibración, es decir, el de un diagrama para analizar cualitativamente varios problemas de difracción.

Otra manifestación del comportamiento transitorio se obtiene al estudiar la densidad de probabilidad para  $t_0 > 0$  fijo y  $x$  variable, como se hace en la figura 1.3. Clásicamente esta curva indicaría la presencia de la onda que evoluciona hasta una cierta distancia después de la cual la solución se anularía; cuánticamente la curva presenta esas características pero lo hace suavemente, sin discontinuidades y exhibiendo un comportamiento transitorio a distancias cortas. También se observa que para tiempos finitos la onda se puede encontrar a distancias arbitrariamente lejanas, lo cual vuelve a exhibir el carácter no

---

<sup>1</sup>Los parámetros utilizados de  $m$ ,  $L$  y  $E$  utilizados a lo largo de este trabajo corresponden a valores típicos de estructuras cuánticas semiconductoras [8].

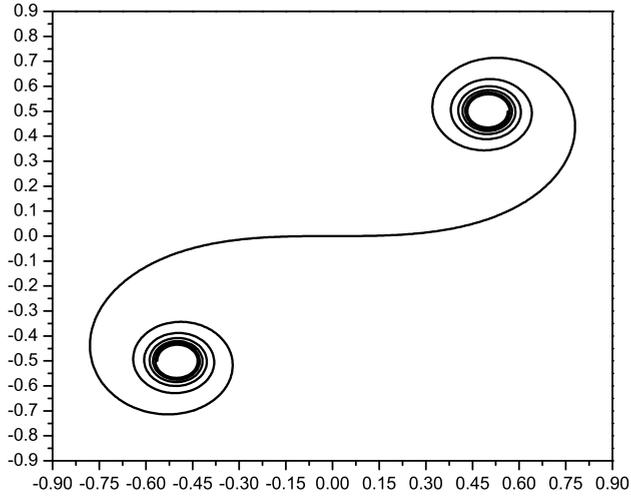


Figura 1.2: Espiral de Cornú

relativista de la solución.

Es posible obtener una idea completa de los transitorios cuánticos asociados a la difracción en el tiempo graficando la densidad de probabilidad para  $x$  y  $t$  variables, lo cual se hace en la figura 1.4.

## 1.2. La función M

Volviendo a (1.1.7) podemos obtener otra expresión analítica para la solución del problema haciendo el cambio de variable

$$z = x' + (vt - x)^2 \quad (1.2.1)$$

$$\Rightarrow \frac{i}{\hbar} \left( px' + \frac{m}{2t}(x - x')^2 \right) = \frac{imx^2}{2\hbar t} + \frac{im}{2\hbar t} z^2 - \frac{im}{2\hbar t} (vt - x)^2.$$

Con ello, (1.1.7) queda como

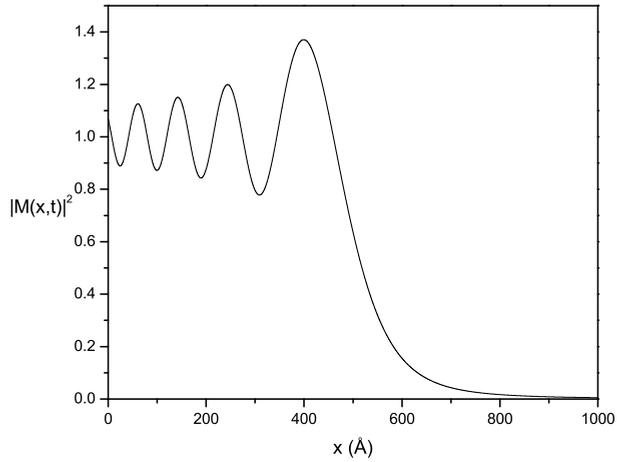


Figura 1.3: Solución del problema de Moshinsky para  $x$  variable (parámetros:  $m = 0.067m_e$ ,  $E = 0.5eV$ ,  $t_0 = 35fs$ )

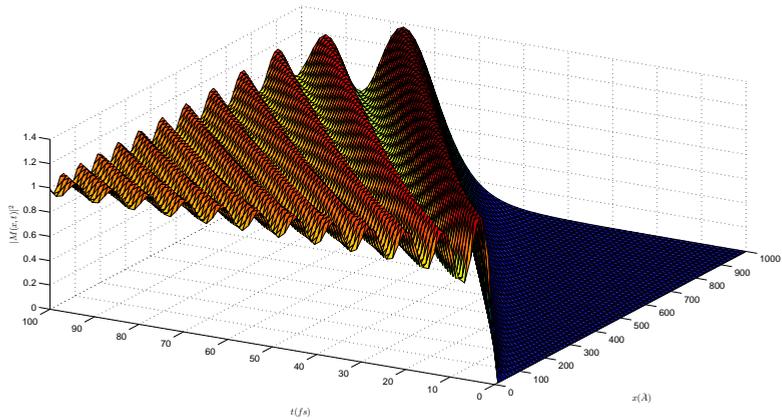


Figura 1.4: Solución del problema de Moshinsky para  $x$  y  $t$  variables (parámetros:  $m = 0.067m_e$ ,  $E = 0.5eV$ )

$$\Psi(x, t) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar t}} \exp\left(i \frac{mx^2}{2\hbar t}\right) \exp\left[-\frac{im}{2\hbar t} (vt - x)^2\right] \times \int_{-\infty}^{vt-x} e^{\frac{im}{2\hbar t} z^2} dz. \quad (1.2.2)$$

Con el fin de simplificar estas expresiones, se introduce la variable

$$y_k = \sqrt{\frac{m}{2\hbar i t}} \left(x - \frac{\hbar k t}{m}\right) \quad (1.2.3)$$

y se observa que

$$\int_{-\infty}^{vt-x} \exp\left(i \frac{mz^2}{2\hbar t}\right) dz = \int_{x-vt}^{\infty} \exp\left(i \frac{mz^2}{2\hbar t}\right) dz = \sqrt{\frac{2i\hbar t}{m}} \int_{y_k}^{\frac{1}{\sqrt{i}}\infty} e^{-s^2} ds. \quad (1.2.4)$$

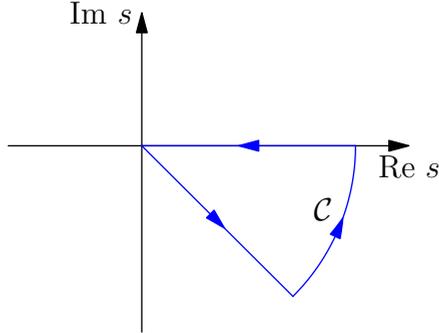


Figura 1.5: Contorno de integración para evaluar (1.2.4).

Tomando el contorno de integración compleja  $\mathcal{C}$  de la figura 1.5 es posible demostrar [9] que el límite superior de integración puede ser tomado como  $\infty$ , de modo que

$$\int_{-\infty}^{vt-x} \exp\left(i \frac{mz^2}{2\hbar t}\right) dz = \sqrt{\frac{2i\hbar t}{m}} \int_{y_k}^{\infty} e^{-s^2} ds. \quad (1.2.5)$$

La función de error complementaria  $\text{erfc}$  se define como [6]

$$\text{erfc}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_z^{\infty} e^{-t^2} dt = 1 - \text{erf}(z) \quad (1.2.6)$$

así que en términos de ellas la solución del problema se expresa como

$$\Psi(x, k, t) = \frac{1}{2} \exp\left(i \frac{mx^2}{2\hbar t}\right) \exp(y_k^2) \operatorname{erfc}(y_k). \quad (1.2.7)$$

Introduciendo la función  $w$ , a veces llamada función de dispersión de plasma, función de Faddeeva o función de error compleja [6], por la ecuación

$$w(z) = \exp(-z^2) \operatorname{erfc}(-iz) = e^{-z^2} \left(1 + \frac{2i}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{t^2} dt\right), \quad (1.2.8)$$

(1.2.7) puede escribirse sucintamente como

$$\Psi(x, k, t) = \frac{1}{2} \exp\left(i \frac{mx^2}{2\hbar t}\right) w(iy_k). \quad (1.2.9)$$

Se define la función de Moshinsky  $M(x, k, t)$  como la solución del problema libre (1.1.1) sujeto a la condición inicial (1.1.2). En general, esta función depende de sus argumentos  $x, k, t$ , pero cuando sea conveniente se escribirá como una función de la variable  $y_k$ .

### 1.3. Solución por Transformada de Fourier

Es posible hacer una continuación analítica de  $M$  al plano complejo  $k$ , para lo cual se considera la solución de (1.1.1) y (1.1.2) por el método de la Transformada de Fourier, definida como

$$\mathcal{F}\{f(x)\} = \bar{f}(j) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{ijx} dx. \quad (1.3.1)$$

Aplicando la Transformada de Fourier a (1.1.1)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \bar{\Psi}(j, t) = j^2 \frac{\hbar^2}{2m} \bar{\Psi}(j, t). \quad (1.3.2)$$

La solución a esta ecuación, para  $\bar{\Psi}(j, t)$  es

$$\bar{\Psi}(j, t) = \bar{\Psi}(j, 0) \exp\left(-i \frac{j^2 \hbar}{2m} t\right). \quad (1.3.3)$$

Ahora se transforma (1.1.2) considerando  $k$  tal que  $\operatorname{Im}(k) < 0$

$$\mathcal{F}\{\Psi(x, 0)\} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x, 0) e^{ijx} dx. \quad (1.3.4)$$

Como el estado inicial no es monocromático, la transformada anterior no corresponde a una función  $\delta$ , pero puede calcularse en el sentido de un valor principal de Cauchy como

$$\begin{aligned}\bar{\Psi}(j, 0) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x, 0) e^{ijx} dx = \\ \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^0 e^{i(k-i\epsilon)x} e^{ijx} dx &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{ij + ik + \epsilon} e^{i(k-i\epsilon)x} e^{ijx} \Big|_{-\infty}^0 = \\ \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{ij + ik + \epsilon} e^{i(k-i\epsilon)x} e^{ijx} \Big|_{-\infty}^0 &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{i(j+k)}. \quad (1.3.5)\end{aligned}$$

La integral anterior hubiera resultado divergente si  $\text{Im}(k) > 0$ ; de ahí la restricción a considerar  $\text{Im}(k) < 0$ .

Por lo tanto, la solución para  $\bar{\Psi}(j, t)$  es

$$\bar{\Psi}(j, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{i(j+k)} \exp\left(-i \frac{j^2 \hbar}{2m} t\right). \quad (1.3.6)$$

Por el teorema integral de Fourier, la solución al problema es

$$\begin{aligned}M(x, k, t) = \Psi(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \bar{\Psi}(j, t) e^{-ijx} dj = \\ &= -\frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{j+k} \exp\left(-i \frac{j^2 \hbar}{2m} t - ijx\right) dj = \\ &= \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{j-k} \exp\left(-i \frac{j^2 \hbar}{2m} t + ijx\right) dj. \quad (1.3.7)\end{aligned}$$

Esta es una representación alternativa de la función  $M$  y que será utilizada más adelante.

## 1.4. Solución por Transformada de Laplace

A través del método de la transformada de Laplace de una función, definida como

$$\mathcal{L}\{f(t)\} = \tilde{f}(s) = \int_0^{\infty} f(t) e^{-st} dt, \quad (1.4.1)$$

es posible calcular en forma analítica la solución al problema (1.1.1) así como a otros problemas relacionados, por lo que resulta útil conocer  $\mathcal{L}\{M(x, k, t)\}$ , para lo cual se transforma la ecuación (1.1.1)

$$i\hbar \left( s \tilde{M}(x, k, s) - \Psi(x, 0) \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \tilde{M}(x, k, s) \quad (1.4.2)$$

La ecuación anterior se simplifica a

$$\begin{cases} i\hbar \left( s \tilde{M}(x, k, s) - e^{ikx} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \tilde{M}(x, k, s), & x < 0 \\ i\hbar s \tilde{M}(x, k, s) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \tilde{M}(x, k, s), & x > 0 \end{cases} \quad (1.4.3)$$

La solución de estas ecuaciones es

$$\tilde{M}(x, k, s) = \begin{cases} C_1 \exp\left(-i\sqrt{\frac{2ims}{\hbar}}x\right) + C_2 \exp\left(i\sqrt{\frac{2ims}{\hbar}}x\right) + \frac{\exp(ikx)}{s + \frac{i\hbar k^2}{2m}}, & x < 0 \\ C_3 \exp\left(-i\sqrt{\frac{2ims}{\hbar}}x\right) + C_4 \exp\left(i\sqrt{\frac{2ims}{\hbar}}x\right), & x > 0 \end{cases} \quad (1.4.4)$$

Para que la solución no diverja en el límite  $|x| \rightarrow \infty$  se hace  $C_2 = C_3 = 0$  ya que

$$\exp\left(i(1+i)\sqrt{\frac{ms}{\hbar}}x\right) = \exp\left((i-1)\sqrt{\frac{ms}{\hbar}}x\right), \quad x < 0 \quad (1.4.5)$$

$$\exp\left(-i(1+i)\sqrt{\frac{ms}{\hbar}}x\right) = \exp\left((-i+1)\sqrt{\frac{ms}{\hbar}}x\right), \quad x > 0 \quad (1.4.6)$$

y estas expresiones divergen para  $|x| \rightarrow \infty$ .

Por conveniencia se introduce la variable

$$p = \sqrt{\frac{2ims}{\hbar}}, \quad (1.4.7)$$

con lo que la solución al problema se puede escribir como

$$\tilde{M}(x, k, p) = \begin{cases} B \exp(-ipx) + \frac{2im/\hbar}{p^2 - k^2} \exp(ikx), & x < 0 \\ A \exp(ipx), & x > 0 \end{cases} \quad (1.4.8)$$

Aplicando la condición de continuidad de  $\tilde{M}(x, k, p)$  y de  $\partial_x \tilde{M}(x, k, p)$  en  $x = 0$  se obtienen las relaciones

$$B = A - \frac{2mi/\hbar}{p^2 - k^2} \quad (1.4.9)$$

$$ipA = -Bip - \frac{2mk}{\hbar(p^2 - k^2)}. \quad (1.4.10)$$

Resolviendo para  $A$  y  $B$  resulta

$$A = \frac{mi}{\hbar p(p - k)} \quad (1.4.11)$$

$$B = -\frac{mi}{\hbar p(p + k)}. \quad (1.4.12)$$

La transformada de Laplace de la función de Moshinsky corresponde, entonces, a

$$\tilde{M}(x, k, p) = \left( -\frac{mie^{-ipx}}{\hbar p(p+k)} + \frac{2ime^{ikx}}{\hbar(p^2 - k^2)} \right) H(-x) + \frac{mie^{ipx}}{\hbar p(p-k)} H(x) \quad (1.4.13)$$

La función M está dada por la integral de Bromwich

$$M(x, k, t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} \tilde{M}(x, k, s) e^{st} ds, \quad (1.4.14)$$

donde  $\gamma$  en el plano  $s$  queda a la derecha de todas las posibles singularidades. En las figuras 1.6 y 1.7 se muestran los contornos de integración en los planos  $s$  y  $p^2$ .

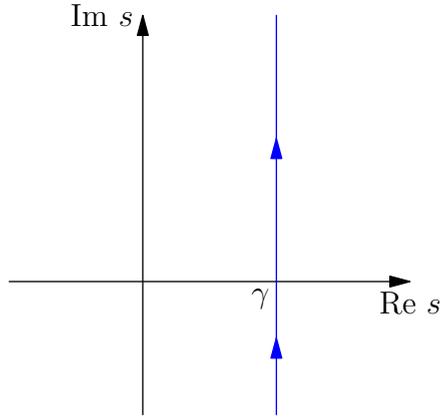


Figura 1.6: Contorno de integración en el plano  $s$ .

Si  $x > 0$ , la integral anterior queda como

$$M(x, k, t) = -\frac{i}{2\pi} \int_{\mathcal{C}} \frac{e^{ipx}}{p-k} \exp\left(-\frac{i\hbar p^2}{2m} t\right) dp \quad (1.4.15)$$

donde  $\mathcal{C}$  es una hipérbola en el plano  $p$  como se muestra en la figura 1.8.

La integral en (1.4.15) puede evaluarse completando la trayectoria  $\mathcal{C}$  con un arco circular  $\mathcal{C}_R$  y con la línea  $\mathcal{C}'$ , que evita la singularidad en  $k$  a través de una media circunferencia, como se ve en la figura 1.9.

Por el Teorema de Cauchy,

$$\int_{\mathcal{C}} \frac{e^{ipx}}{p-k} \exp\left(-\frac{i\hbar p^2}{2m} t\right) dp + \int_{\mathcal{C}_R} \frac{e^{ipx}}{p-k} \exp\left(-\frac{i\hbar p^2}{2m} t\right) dp + \int_{\mathcal{C}'} \frac{e^{ipx}}{p-k} \exp\left(-\frac{i\hbar p^2}{2m} t\right) dp = 0. \quad (1.4.16)$$

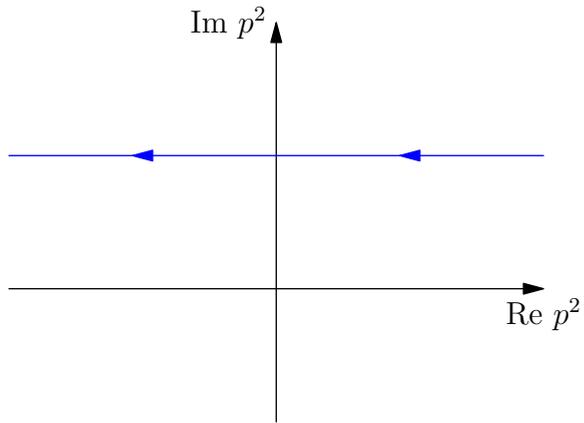


Figura 1.7: Contorno de integración en el plano  $p^2$ .

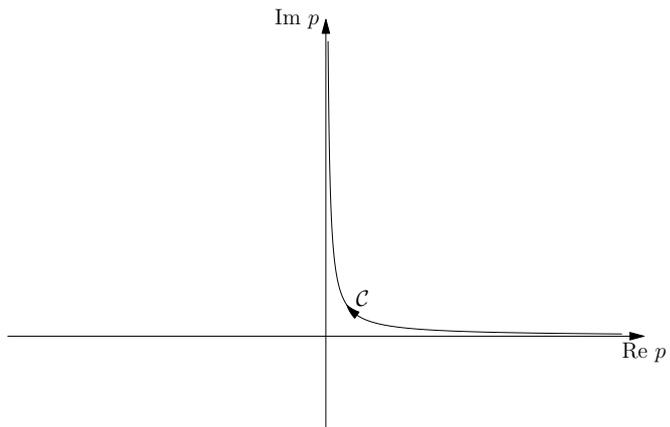


Figura 1.8: Contorno de integración en el plano  $p$ .

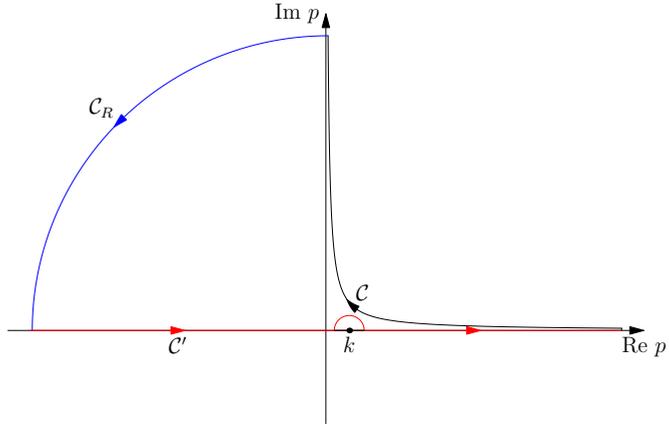


Figura 1.9: Evaluando la integral en (1.4.15).

Además, la integral sobre  $\mathcal{C}_R$  se anula a medida que el radio del arco crece puesto que en el segundo cuadrante,  $\exp\left(-\frac{i\hbar p^2}{2m}t\right) \rightarrow 0$  si  $|p| \rightarrow \infty^2$ . Por lo tanto,

$$M(x, k, t) = \frac{i}{2\pi} \int_{\mathcal{C}'} \frac{e^{ipx}}{p-k} \exp\left(-\frac{i\hbar p^2}{2m}t\right) dp. \quad (1.4.17)$$

Esta solución puede generalizarse al caso en que  $k$  es un número complejo tal que  $\text{Im}(k) < 0$ . En este caso, la integral queda como

$$M(x, k, t) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{ipx}}{p-k} \exp\left(-\frac{i\hbar p^2}{2m}t\right) dp. \quad (1.4.18)$$

## 1.5. La función $w$

La función  $w$  fue estudiada y tabulada por primera vez por Faddeeva y Terent'ev [10]. Desde el punto de vista matemático, (1.2.8) define una función entera, es decir, una función analítica sobre todo el plano complejo; además, si  $z$  se encuentra en el primer cuadrante, sus partes real e imaginaria están entre 0 y  $z$ .

Por (1.2.8) es posible argumentar que  $w$  satisface la propiedad de simetría

$$w(-z) = 2e^{-z^2} - w(z). \quad (1.5.1)$$

La integral

---

<sup>2</sup>La integral sobre  $\mathcal{C}_R$  diverge sobre el primer y el tercer cuadrantes y converge sobre el segundo y el cuarto cuadrantes.

$$f(z) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-t^2}}{z-t} dt \quad (1.5.2)$$

se encuentra relacionada con  $w$ , ya que si  $\text{Im}(z) > 0$ , la función  $w$  admite [10] la representación

$$w(z) = \frac{i}{\pi} f(z), \quad (1.5.3)$$

por lo que si  $\text{Im}(z) < 0$ ,  $w$  puede expresarse como

$$w(z) = 2e^{-z^2} + \frac{i}{\pi} f(z). \quad (1.5.4)$$

La función  $f(z)$  es analítica para cualquier número complejo que no se encuentre sobre el eje real y define, además, dos funciones analíticas en cada semiplano, ninguna de las cuales es continuación analítica de la otra [11].

En el caso de  $z$  real, la integral en (1.5.2) debe entenderse en el sentido de un valor principal de Cauchy y, además [12],

$$w(z) = 2e^{-z^2} + \frac{i}{\pi} \text{V.P.} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-t^2}}{z-t} dt, \quad \text{Im}(z) = 0. \quad (1.5.5)$$

Suponiendo  $|z| \gg 1$  y desarrollando  $(z-t)^{-1}$  en potencias de  $t/z$  se obtiene

$$\frac{1}{z-t} = \frac{1}{z} \left( 1 + \frac{t}{z} + \left(\frac{t}{z}\right)^2 + \left(\frac{t}{z}\right)^3 + \dots \right) = \frac{1}{z} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{t}{z}\right)^n \quad (1.5.6)$$

y por lo tanto

$$f(z) \approx \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\mu_n}{z^{n+1}}, \quad (1.5.7)$$

donde

$$\mu_n = \int_{-\infty}^{\infty} t^n e^{-t^2} dt \quad (1.5.8)$$

representa los momentos de  $e^{-t^2}$ , los cuales se anulan para  $n$  impar y que para  $n$  par se pueden expresar en términos de la función  $\Gamma$  como

$$\mu_n = \Gamma\left(\frac{n+1}{2}\right). \quad (1.5.9)$$

Además, para la evaluación numérica de  $w$  es de inmensa utilidad observar que la función  $e^{-z^2}$  tiene un desarrollo asintótico nulo en las regiones  $-\pi/4 < \arg(z) < \pi/4$  y  $3\pi/4 < \arg(z) < 5\pi/4$  del plano complejo, por lo que, en el límite  $|z| \gg 1$ ,

$$w(z) \approx \begin{cases} \frac{i}{\pi} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\Gamma(j+\frac{1}{2})}{z^{2j+1}}, & -\pi/4 < \arg(z) < 5\pi/4 \\ 2e^{-z^2} + \frac{i}{\pi} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\Gamma(j+\frac{1}{2})}{z^{2j+1}}, & 5\pi/4 < \arg(z) < 7\pi/4 \end{cases} \quad (1.5.10)$$

Para las aproximaciones a  $M$ , que es la función con sentido físico en este problema, no se considerará que  $e^{-z^2}$  tiene un desarrollo asintótico en las regiones señaladas del plano.

En el caso asintótico simétrico, a saber,  $|z| \ll 1$ ,  $w$  se puede expresar [10] como

$$w(z) \approx \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(iz)^n}{\Gamma(\frac{n}{2} + 1)}. \quad (1.5.11)$$

## 1.6. Integrales expresables en términos de $w$

Consideremos la integral

$$h(x, k, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{ipx}}{p-k} \exp\left(-\frac{i\hbar p^2}{2m}t\right) dp. \quad (1.6.1)$$

donde  $\text{Im}(k) < 0$ . Conviene notar que el integrando en (1.6.1) posee un polo en  $k$ . La forma analítica de la integral puede modificarse para que sea más útil en los cálculos. Para ello se hace el cambio de variable  $y = e^{-i\pi/4} \sqrt{\frac{m}{2\hbar t}} \left(x - \frac{\hbar p}{m}t\right)$ , de donde

$$h(x, k, t) = \exp\left(\frac{imx^2}{2\hbar t}\right) \int_{\Pi} \frac{e^{y^2}}{y - y_k} dy, \quad (1.6.2)$$

donde  $\Pi$  es el contorno en el plano  $y$  mostrado en la figura 1.10.

Haciendo el cambio de variable  $y = -iv$ ,  $h$  queda como

$$h(x, k, t) = \exp\left(\frac{imx^2}{2\hbar t}\right) \int_{\Omega} \frac{e^{-v^2}}{v - iy_k} dv, \quad (1.6.3)$$

donde la integración se realiza sobre el contorno  $\Omega$  en el plano  $v$  como se muestra en la figura 1.11.

En el plano  $v$ ,  $h$  tiene un polo en  $iy_k$ , el cual solamente puede encontrarse en la región  $\pi/4 < \arg(v) < 5\pi/4$ . Para calcular la integral en (1.6.3) completamos el contorno con los arcos de circunferencia  $\mathcal{C}_1$  y  $\mathcal{C}_2$ , como se ve en la figura 1.12.

Es posible mostrar que la contribución a la integral de los arcos  $\mathcal{C}_1$  y  $\mathcal{C}_2$  se anula conforme su radio aumenta. Además, dependiendo de la posición del polo en el plano  $v$ , se tienen dos casos, a saber: en el primero,  $\text{Im}(iy_k) > 0$ , en cuyo caso, por el teorema de Cauchy tenemos

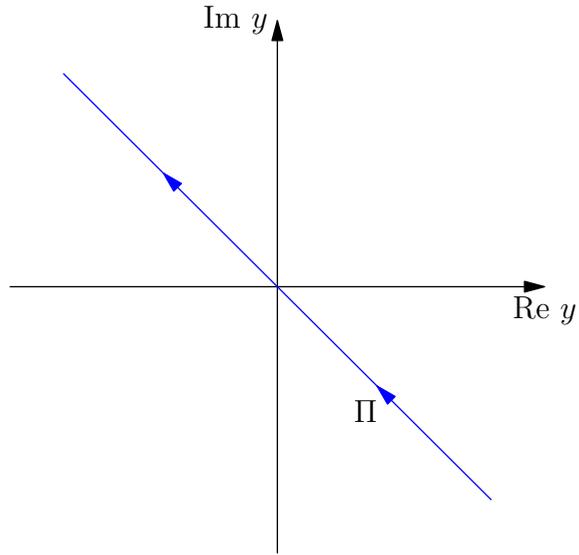


Figura 1.10: Contorno de integración de (1.6.2) y de (1.6.12).

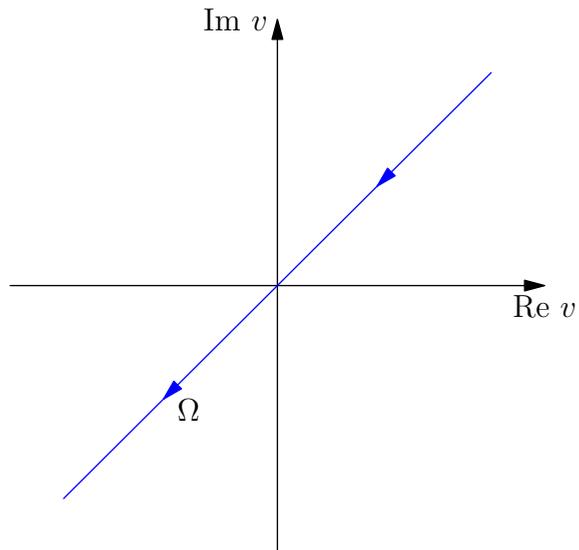


Figura 1.11: Contorno de integración de (1.6.3).

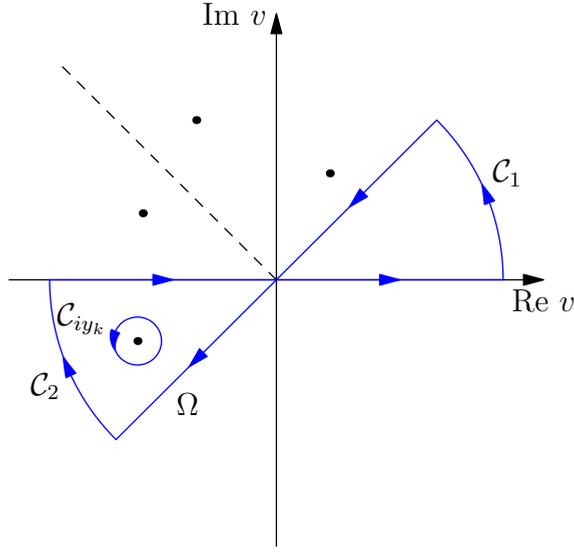


Figura 1.12: Evaluación de (1.6.3) y posibles ubicaciones del polo  $iy_k$ .

$$\int_{\Omega} \frac{e^{-v^2}}{v - iy_k} dv + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-v^2}}{v - iy_k} dv = 0, \quad (1.6.4)$$

de donde

$$\int_{\Omega} \frac{e^{-v^2}}{v - iy_k} dv = - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-v^2}}{v - iy_k} dv. \quad (1.6.5)$$

Por (1.5.3), esto implica que

$$h(x, k, t) = - \exp\left(\frac{imx^2}{2\hbar t}\right) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-v^2}}{v - iy_k} dv = \frac{\pi}{i} \exp\left(\frac{imx^2}{2\hbar t}\right) w(iy_k). \quad (1.6.6)$$

En el segundo caso, es decir, cuando  $\text{Im}(iy_k) < 0$ , de los teoremas de Cauchy y del residuo se deduce que

$$\int_{\Omega} \frac{e^{-v^2}}{v - iy_k} dv + 2\pi i e^{y_k^2} + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-v^2}}{v - iy_k} dv = 0, \quad (1.6.7)$$

de donde

$$\int_{\Omega} \frac{e^{-v^2}}{v - iy_k} dv = - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-v^2}}{v - iy_k} dv - 2\pi i e^{y_k^2}. \quad (1.6.8)$$

Entonces, de la ecuación (1.5.4),

$$h(x, k, t) = -\exp\left(\frac{imx^2}{2\hbar t}\right) \left( \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-v^2}}{v - iy_k} dv + 2\pi i e^{y_k^2} \right) = \frac{\pi}{i} \exp\left(\frac{imx^2}{2\hbar t}\right) w(iy_k). \quad (1.6.9)$$

Por lo tanto, en todos los casos,

$$h(x, k, t) = \frac{\pi}{i} \exp\left(\frac{imx^2}{2\hbar t}\right) w(iy_k) \quad \text{Im}(k) < 0. \quad (1.6.10)$$

De manera similar, ahora se considera la integral

$$h'(x, q, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{ipx}}{p - q} \exp\left(-\frac{i\hbar p^2}{2m}t\right) dp. \quad (1.6.11)$$

con  $\text{Im}(q) > 0$ , que aparecerá más adelante en los cálculos y que por lo tanto conviene conocer una manera de calcularla. Sobre esta integral se realiza el cambio de variable  $y = e^{-i\pi/4} \sqrt{\frac{m}{2\hbar t}} \left(x - \frac{\hbar p}{m}t\right)$ , de donde la integral queda como

$$h'(x, q, t) = \exp\left(\frac{imx^2}{2\hbar t}\right) \int_{\Pi} \frac{e^{y^2}}{y - y_q} dy, \quad (1.6.12)$$

donde el contorno de integración se muestra en la figura 1.10.

Haciendo el cambio de variable  $y = iv$ ,  $h'$  queda como

$$h'(x, q, t) = \exp\left(\frac{imx^2}{2\hbar t}\right) \int_{\Omega'} \frac{e^{-v^2}}{v + iy_q} dv, \quad (1.6.13)$$

donde la integración se realiza sobre  $\Omega'$  en el plano  $v$  como se muestra en la figura 1.11. En este caso, el polo se encuentra en  $-iy_q$ .

Para evaluar esta integral se completa el contorno de integración con dos arcos  $\mathcal{C}_1$  y  $\mathcal{C}_2$ , cuya contribución se anula en el límite en que el radio de los arcos crece, como se muestra en la figura 1.14. Nuevamente se tienen dos casos, dependiendo de la ubicación del polo.

Si  $\text{Im}(-iy_q) > 0$ , por el teorema de Cauchy tenemos que

$$\int_{\Omega'} \frac{e^{-v^2}}{v + iy_q} dv + \int_{\infty}^{-\infty} \frac{e^{-v^2}}{v + iy_q} dv = 0, \quad (1.6.14)$$

de donde

$$h'(x, q, t) = \exp\left(\frac{imx^2}{2\hbar t}\right) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-v^2}}{v + iy_q} dv = -\frac{\pi}{i} \exp\left(\frac{imx^2}{2\hbar t}\right) w(-iy_q). \quad (1.6.15)$$

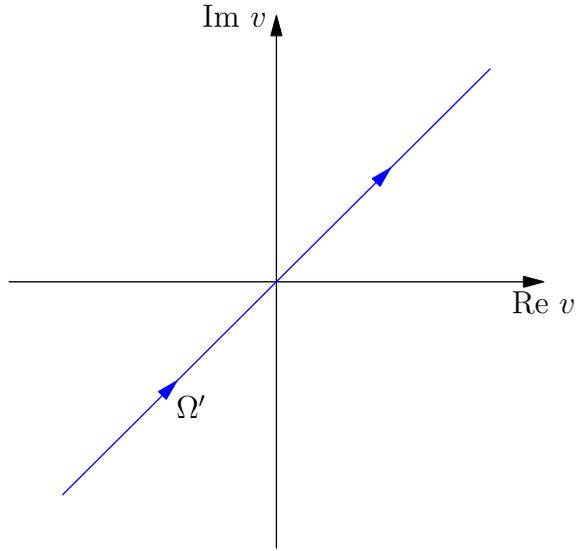


Figura 1.13: Contorno de integración de (1.6.13).

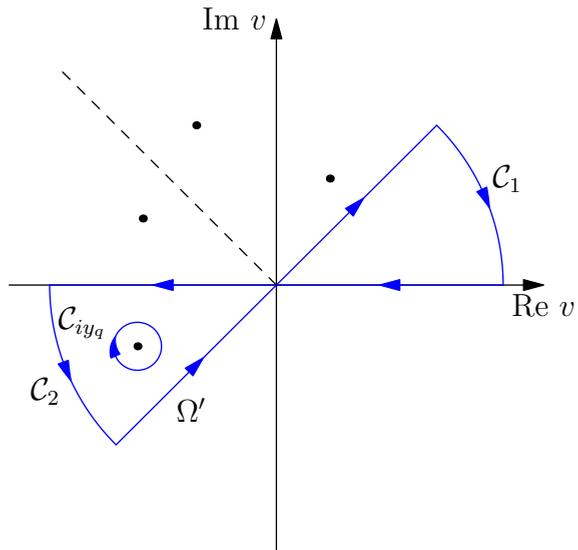


Figura 1.14: Evaluación de (1.6.13) y posibles ubicaciones del polo  $-iy_q$ .

Si  $\text{Im}(-iy_q) < 0$ , de los teoremas de Cauchy y del residuo tenemos que

$$\int_{\Omega'} \frac{e^{-v^2}}{v + iy_q} dv - 2\pi i e^{y_q^2} + \int_{\infty}^{-\infty} \frac{e^{-v^2}}{v + iy_q} dv = 0, \quad (1.6.16)$$

de donde

$$\begin{aligned} \int_{\Omega'} \frac{e^{-v^2}}{v + iy_q} dv &= 2\pi i e^{y_q^2} + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-v^2}}{v + iy_q} dv = \\ &= \pi i \left( 2e^{y_q^2} - \frac{i}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-v^2}}{v + iy_q} dv \right) = \\ &= \pi i \left( 2e^{y_q^2} + \frac{i}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-v^2}}{-iy_q - v} dv \right) = \pi i w(-iy_q). \end{aligned} \quad (1.6.17)$$

Por lo tanto, de (1.5.4) se concluye en todos los casos que

$$h'(x, q, t) = \pi i \exp\left(\frac{imx^2}{2\hbar t}\right) w(-iy_q) \quad \text{Im}(q) > 0. \quad (1.6.18)$$

## 1.7. Desarrollos en serie de M

De (1.2.9) y (1.5.10) se puede colegir que si  $|y_q| \gg 1$ , M admite los desarrollos asintóticos

$$M(y_q) \approx \frac{1}{2\pi} \exp\left(\frac{imx^2}{2\hbar t}\right) \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^j}{y_q^{2j+1}} \Gamma\left(j + \frac{1}{2}\right), \quad (1.7.1)$$

válida para  $0 < \arg(iy_q) < \pi$ , y

$$M(y_q) \approx \frac{1}{2} \exp\left(\frac{imx^2}{2\hbar t}\right) \left( 2e^{y_q^2} + \frac{1}{\pi} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^j}{y_q^{2j+1}} \Gamma\left(j + \frac{1}{2}\right) \right), \quad (1.7.2)$$

válida para  $\pi < \arg(iy_q) < 2\pi$ . Desarrollándolas hasta sus primeros términos hallamos

$$\begin{aligned} M(y_q) \approx \frac{1}{2} \exp\left(\frac{imx^2}{2\hbar t}\right) \left( \frac{1}{\sqrt{\pi}y_q} - \frac{1}{2\sqrt{\pi}y_q^3} + \dots \right), \\ -\frac{\pi}{2} < \arg(y_q) < \frac{\pi}{2}, \end{aligned} \quad (1.7.3)$$

aplicable, a tiempos grandes, para<sup>3</sup>  $q = \xi - \zeta i$  tal que  $\xi < \zeta$  y

<sup>3</sup>Estas resonancias se denominan impropias.

$$M(y_q) \approx \frac{1}{2} \exp\left(\frac{imx^2}{2\hbar t}\right) \left(2e^{y_q^2} + \frac{1}{\sqrt{\pi}y_q} - \frac{1}{2\sqrt{\pi}y_q^3} + \dots\right),$$

$$\frac{\pi}{2} < \arg(y_q) < \frac{3\pi}{2}, \quad (1.7.4)$$

que se utiliza cuando<sup>4</sup>  $\xi > \zeta$ .

Estos desarrollos se utilizarán para estudiar el comportamiento de  $|M(y_q)|^2$  a tiempos grandes.

## 1.8. Comportamiento asintótico de M.

En esta sección se demostrará que M cumple con la condición inicial (1.1.2) y que tiende a la solución estacionaria a tiempos largos.

Para verificar que se satisface (1.1.2) tomamos  $t \rightarrow 0^+$ . Hay dos posibilidades, dependiendo de si  $x < 0$  ó  $x > 0$ ; en el primer caso, al estar considerando  $k$  real (y, de hecho, positivo),  $\arg(y_k) = 3\pi/4$ , y por (1.7.4),

$$M(x, k, t) \approx \frac{1}{2} \exp\left(\frac{imx^2}{2\hbar t}\right) (2e^{y_k^2}), \quad (1.8.1)$$

y además, despreciando los términos cuadráticos en  $t$ :

$$y_k^2 = \frac{m}{2\hbar it} \left(x^2 - \frac{2x\hbar kt}{m} + \frac{\hbar^2 k^2 t^2}{m^2}\right) \approx \frac{m}{2\hbar it} \left(x^2 - \frac{2x\hbar kt}{m}\right). \quad (1.8.2)$$

Entonces,

$$M(y_k) \rightarrow \exp\left(\frac{imx^2}{2\hbar t}\right) \exp(y_k^2) = \exp\left(\frac{m}{2\hbar t} \frac{2x\hbar kt}{m} i\right) = e^{ikx}. \quad (1.8.3)$$

Por otro lado, si  $x > 0$ ,  $\arg(y_k) = -\pi/4$ , de donde

$$|M(y_k)|^2 \approx \frac{1}{4} \frac{1}{\pi |y_k|^2} = \frac{1}{4} \frac{2\hbar t}{\pi m} \frac{1}{\left(x - \frac{\hbar kt}{m}\right)^2} \rightarrow 0. \quad (1.8.4)$$

Otro caso de interés es el límite  $t \rightarrow \infty$ , en el que  $\arg(y_k) = 3\pi/4$  y

$$y_k^2 = \frac{m}{2\hbar it} \left(x^2 - 2\frac{x\hbar kt}{m} + \frac{\hbar^2 k^2 t^2}{m^2}\right), \quad (1.8.5)$$

de donde por (1.7.4),

---

<sup>4</sup>Estas resonancias son llamadas propias.

$$M(y_k) \rightarrow \frac{1}{2} \exp\left(\frac{imx^2}{2\hbar t}\right) 2 \exp(y_k^2) = \exp\left[\frac{m}{2\hbar it} \left(\frac{\hbar^2 k^2 t^2}{m^2} - \frac{2x\hbar kt}{m}\right)\right]. \quad (1.8.6)$$

Por lo tanto, para tiempos grandes, la función de Moshinsky converge a la forma esperada de la función de onda

$$M(x, k, t) \rightarrow \exp\left[i\left(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t\right)\right]. \quad (1.8.7)$$

## 1.9. Evaluación numérica de $w$

El estudio de las soluciones analíticas de los problemas planteados en esta tesis hace necesario calcular numéricamente la función  $w$  y el objetivo de esta sección es describir una forma de evaluarla. No se profundizará ya que el propósito del trabajo no es hacer un estudio riguroso del cálculo numérico de  $w$ ; para mayores detalles se refiere al lector a las referencias citadas. Para motivar el método numérico se sigue la exposición matemática de [11].

Es posible demostrar que la fracción continuada de Laplace [13]

$$\frac{\mu_0}{z-} \frac{1/2}{z-} \frac{1}{z-} \frac{3/2}{z-} \dots \frac{(n-1)/2}{z} = \frac{q_n(z)}{p_n(z)} \quad (1.9.1)$$

converge a  $f(z)$  para valores complejos de  $z$  no reales. También es posible mostrar que la suma

$$\frac{q_n(z)}{p_n(z)} = \sum_{k=1}^n \frac{\lambda_k^{(n)}}{z - t_k^{(n)}}, \quad (1.9.2)$$

conocida como regla de cuadratura de Gauss-Hermite, también converge a  $f(z)$  para todo número complejo  $z$  no real y que, además, aproxima  $-i\pi w(z)$  asintóticamente en el sector  $-\frac{\pi}{4} < \arg(z) < \frac{5\pi}{4}$  [11].

El procedimiento computacional tiene como propósito calcular  $w(z)$  con una precisión de hasta con  $d$  cifras decimales correctas después del punto decimal. Para simplificar el problema el método solamente contempla la evaluación en un número complejo  $z$  en el primer cuadrante  $Q_1$  del plano complejo, lo cual no implica una pérdida de generalidad debido a las propiedades de simetría

$$w(-z) = 2e^{-z^2} - w(z) \quad (1.9.3)$$

$$w(z^*) = w^*(-z) \quad (1.9.4)$$

Dado un valor de  $d$  es posible construir una región rectangular  $\mathcal{R}$  en el primer cuadrante fuera de la cual la evaluación de (1.9.2) con  $n = 9$  proporcione una precisión de  $d$  cifras después del punto decimal. Empíricamente Gautschi

encontró que un rectángulo de 5.33 de base y 4.29 de altura es la elección óptima de  $\mathcal{R}$  para  $d = 10$ .

Para evaluar  $w$  fuera de  $\mathcal{R}$  se aplica el algoritmo

$$r_\nu = 0, \quad r_{n-1} = \frac{1/2}{-iz + (n+1)r_n}, \quad n = \nu, \nu-1, \dots, 0, \quad (1.9.5)$$

$$v_{-1} = \frac{2}{\sqrt{\pi}}, \quad v_n = r_{n-1}v_{n-1}, \quad n = 0, 1, 2, \dots, N. \quad (1.9.6)$$

con  $\nu = 8$  y  $N = 0$ ; es posible mostrar que esto es equivalente a evaluar (1.9.2) con  $n = 9$ . Una manera eficiente de calcular  $w(z)$  para  $z \in \mathcal{R}$  consiste en utilizar el desarrollo de Taylor

$$w(z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{w^{(n)}(z+ih)}{n!} (-ih)^n \quad (1.9.7)$$

con  $h > 0$  elegido adecuadamente. Definiendo

$$w_{-1}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}}, \quad (1.9.8)$$

$$w_n(z) = \exp(-z^2) i^n \operatorname{erfc} -iz, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (1.9.9)$$

y calculando las derivadas de  $w$  es posible concluir que

$$w^{(n)}(z) = (2i)^n n! w_n(z). \quad (1.9.10)$$

Además, se observa que (1.9.7) puede escribirse como

$$w(z) = \sum_{n=0}^{\infty} (2h)^n w_n(z+ih). \quad (1.9.11)$$

Aproximando  $w_n$  por  $v_n$  y truncando la serie (1.9.11) se define

$$\sigma_N(z, h) = \sum_{n=0}^N (2h)^n v_n(z+ih). \quad (1.9.12)$$

Se puede aplicar el siguiente algoritmo para calcular  $\sigma_N(z, h)$ :

$$r_\nu = 0, \quad r_{n-1} = \frac{1/2}{h - iz + (n+1)r_n}, \quad n = \nu, \nu-1, \dots, 0, \quad (1.9.13)$$

$$t_0 = \sigma_0 = \frac{2}{\sqrt{\pi}} r_{-1}, \quad (1.9.14)$$

$$t_n = 2hr_{n-1}t_{n-1}, \quad \sigma_n = \sigma_{n-1} + t_n, \quad n = 1, 2, \dots, N. \quad (1.9.15)$$

Este algoritmo puede verse como una generalización del algoritmo (1.9.5) tomando  $h = 0$  y  $N = 0$ . Conforme un número  $z \in \mathcal{R}$  se acerca a la frontera de la región rectangular el algoritmo se reduce al dado primero; en otras palabras, (1.9.13) es un algoritmo que permite evaluar  $w(z)$  para  $z \in Q_1$ .

En suma, el método para calcular  $w(z)$  presentado en [11] consiste en evaluar una aproximación a un desarrollo de Taylor trunco. El incremento  $h$  y el número de términos  $N$  a evaluar se hacen depender del argumento  $z$  de la función. Al incrementarse  $|z|$ ,  $h$  y  $N$  disminuyen hasta anularse, y el algoritmo reduce a calcular la fracción continuada de Laplace de  $w$ .

El algoritmo de Gautschi fue mejorado por Poppe y Wijers [14] al incrementar a 14 las cifras decimales obtenidas numéricamente. Su enfoque consiste en dividir el plano complejo en tres regiones  $Q$ ,  $R$  y  $S$ , donde se define  $T = R + S$  y  $\Gamma$  como la curva que separa  $Q$  de  $T$ . En el método de Gautschi  $\Gamma$  es el borde de una región rectangular; la propuesta de Poppe y Wijers es tomar  $\Gamma$  como la elipse

$$\rho(z) = \sqrt{\left(\frac{x}{x_0}\right)^2 + \left(\frac{y}{y_0}\right)^2} = 1 \quad (1.9.16)$$

donde  $x_0 = 6.3$  y  $y_0 = 4.4$ .

En la región  $Q$ , que es la más externa, se aproxima  $w(z)$  por (1.9.2) a través del algoritmo (1.9.5) tomando

$$\nu(z) = \left\{ 3 + \frac{1442}{26\rho(z) + 77} \right\}, \quad (1.9.17)$$

donde  $\{\cdot\}$  significa redondeo. En la región intermedia  $R$  se utilizó la aproximación (1.9.7) evaluada por el algoritmo (1.9.13) tomando

$$N(z) = \{7 + 34s(z)\} \quad (1.9.18)$$

$$\nu(z) = \{16 + 26s(z)\} \quad (1.9.19)$$

$$s(z) = \left(1 - \frac{y}{y_0}\right) \sqrt{1 - \rho^2(z)} \quad (1.9.20)$$

En la región  $S$  alrededor del origen, el algoritmo de Gautschi se vuelve muy ineficiente, por lo cual se utiliza en esa región la serie

$$w(z) = e^{-z^2} \left(1 + \frac{2i}{\sqrt{\pi}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^{2n+1}}{(2n+1)n!}\right). \quad (1.9.21)$$

La región  $S$  de  $Q_1$  está determinada por  $0 \leq \rho(z) \leq 0.292$ . Es posible conseguir una precisión de 14 cifras decimales utilizando la aproximación

$$w(z) = e^{-z^2} \left(1 + \frac{2i}{\sqrt{\pi}} \sum_{n=0}^N \frac{z^{2n+1}}{(2n+1)n!}\right) \quad (1.9.22)$$

con  $\{N = 6 + 72s'(z)\}$  y

$$s'(z) = \left(1 - 0.85 \frac{y}{y_0}\right) \rho(z). \quad (1.9.23)$$

Se utilizó el programa en FORTRAN proporcionado como apéndice al algoritmo de Poppe y Wijers [15] para llevar a cabo los cálculos que conciernen a este trabajo.

En la literatura existen enfoques alternos a la fracción continuada de Laplace para aproximar  $w$  [12], entre los que se encuentran las aproximaciones racionales de Padé, métodos de integración numérica y las aproximaciones de Chebyshev.

## Capítulo 2

# Teoría de los estados resonantes.

### 2.1. Origen y definición.

Los estados resonantes tienen su origen en la solución presentada por Gamow del problema del decaimiento  $\alpha$  de los núcleos atómicos [16, 17]. Para caracterizar tales estados se impone sobre la ecuación de Schrödinger la condición de que la solución consista en ondas puramente salientes, es decir, que no posean componentes entrantes a grandes distancias del potencial nuclear.

En este trabajo se consideran únicamente potenciales unidimensionales de alcance finito, es decir, tales que  $V(x) = 0$  si  $x < 0$  ó  $x > L$ .

Para llegar a la noción de estados resonantes se considera la ecuación de eigenvalores de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} u(x) + V(x)u(x) = Eu(x) \quad (2.1.1)$$

cuya solución en las regiones fuera del alcance del potencial es

$$u(x) = \begin{cases} Ae^{-ikx} + Be^{ikx}, & x < 0 \\ Ce^{-ikx} + De^{ikx}, & x > L \end{cases} \quad (2.1.2)$$

Si se impone la condición de que  $k$  sea un número real entonces  $u$  puede tomarse como una función real [18], lo cual implica que  $A(k) = B^*(k)$  y  $C(k) = D^*(k)$ ; el que la solución no tenga componentes entrantes se traduce en la condición  $B = C = 0$  y, sin embargo, esto permite solamente la solución trivial  $u = 0$ . Para evitar esta situación se aceptan valores complejos del eigenvalor  $k$ , lo cual excluye como posibles estados resonantes a los estados estacionarios. Los eigenvalores complejos se usan comúnmente para describir un sistema que se mantiene en cierto estado por un tiempo y luego decae.

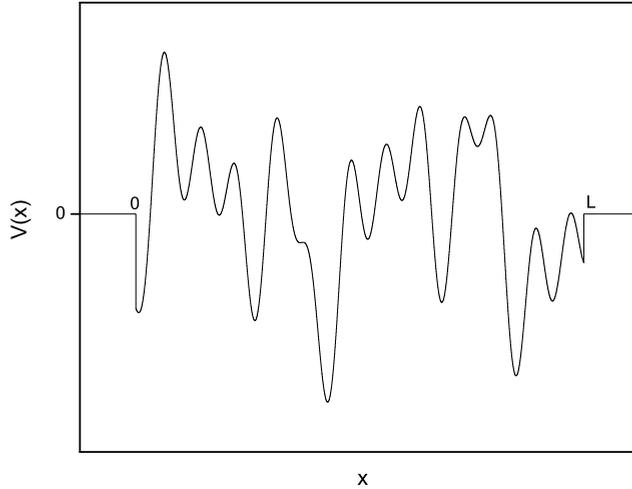


Figura 2.1: Potencial unidimensional de alcance finito arbitrario.

Los valores de  $k$  para los que  $u$  es una solución de la ecuación de Schrödinger que consta puramente de ondas salientes se denotarán por  $k_n$  (o  $E_n$  para la respectiva energía compleja) y sus respectivas eigenfunciones por  $u_n$ .

Suponiendo, entonces,  $k_n$  compleja la solución en la región exterior al potencial es

$$u_n(x) = \begin{cases} A_n e^{-ik_n x}, & x < 0 \\ D_n e^{ik_n x}, & x > L. \end{cases} \quad (2.1.3)$$

Es útil contar con una expresión matemática en forma de condiciones de frontera para las condiciones de onda saliente en problemas unidimensionales. Para ello se utiliza la solución del problema de eigenvalores en las regiones fuera del alcance del potencial (2.1.3). Se imponen, entonces, las condiciones de continuidad en 0 y en  $L$  sobre  $u_n$  y su derivada  $u'_n$ :

$$u_n(0^-) = u_n(0^+) \quad (2.1.4)$$

$$u'_n(0^-) = u'_n(0^+) \quad (2.1.5)$$

$$u_n(L^-) = u_n(L^+) \quad (2.1.6)$$

$$u'_n(L^-) = u'_n(L^+). \quad (2.1.7)$$

Tomando cocientes y por (2.1.3) se deduce que

$$\frac{u'_n(0^+)}{u_n(0^+)} = \frac{u'_n(0^-)}{u_n(0^-)} = -\frac{A_n i k_n}{A_n} = -i k_n \quad (2.1.8)$$

Esto proporciona la condición de frontera  $u'_n(0^+) = -i k_n u_n(0^+)$ . Análogamente, por las condiciones de continuidad y por (2.1.3),

$$\frac{u'_n(L^-)}{u_n(L^-)} = \frac{u'_n(L^+)}{u_n(L^+)} = \frac{D_n i k_n}{D_n} = i k_n, \quad (2.1.9)$$

de donde  $u'_n(L^-) = i k_n u_n(L^-)$ .

Por lo tanto, las condiciones de frontera de onda saliente en una dimensión se pueden escribir como

$$\left. \frac{d}{dx} u_n(x) \right|_{x=0^+} = -i k_n u_n(0^+) \quad (2.1.10)$$

$$\left. \frac{d}{dx} u_n(x) \right|_{x=L^-} = i k_n u_n(L^-) \quad (2.1.11)$$

## 2.2. Significado de las energías complejas

La primera propiedad destacada de los estados resonantes se obtiene escribiendo la ecuación de eigenvalores para  $u_n$  y multiplicándola por  $u_n^*$

$$u_n^*(x) \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} u_n(x) + V(x) u_n(x) \right] = E_n |u_n(x)|^2 \quad (2.2.1)$$

y, simétricamente, multiplicando la ecuación de eigenvalores que satisface  $u_n^*$  por  $u_n$

$$u_n(x) \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} u_n^*(x) + V(x) u_n^*(x) \right] = E_n^* |u_n(x)|^2. \quad (2.2.2)$$

Restando (2.2.2) de (2.2.1), integrando de 0 a  $L$  y usando las condiciones de frontera (2.1.10) y (2.1.11), procedimiento conocido como fórmula de Green, se deduce que

$$\text{Im}(E_n) \int_0^L |u_n(x)|^2 dx = -\frac{\hbar^2}{2m} \text{Re}(k_n) (|u_n(0)|^2 + |u_n(L)|^2). \quad (2.2.3)$$

Además,  $|u_n(0)|^2 + |u_n(L)|^2 \neq 0$  porque de lo contrario,  $u_n(0) = u_n(L) = 0$  y esto es incompatible con las condiciones de onda saliente (ello significaría que ninguna onda sale del sistema, contrario a la hipótesis); así, pues, el eigenvalor  $E_n$  es real si y sólo si  $\text{Re}(k_n) = 0$ . Más aún, de (2.2.3) se deduce que  $\text{Re}(k_n)$  e  $\text{Im}(E_n)$  tienen signos contrarios; como el número de onda  $k$  generalmente se supone positivo se elige  $\text{Re}(k_n) > 0$ . Por ello se escribe

$$k_n = a_n - ib_n \quad (2.2.4)$$

$$E_n = \epsilon_n - \frac{i}{2}\Gamma_n. \quad (2.2.5)$$

De  $E_n = \hbar^2 k_n^2 / 2m$  se deducen las relaciones

$$\epsilon_n = \frac{\hbar^2}{2m}(a_n^2 - b_n^2) \quad (2.2.6)$$

$$\Gamma_n = -\frac{\hbar^2}{2m}(4a_n b_n). \quad (2.2.7)$$

Una solución general de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo es

$$\Psi_n(x, t) = u_n(x)e^{-iE_n t/\hbar} = u_n(x)e^{-i\epsilon_n t/\hbar} e^{-\frac{1}{2}\Gamma_n t/\hbar} \quad (2.2.8)$$

según el método de separación de variables, de donde se ve que la densidad de probabilidad  $\rho$  del estado resonante decae exponencialmente con el tiempo:

$$\rho_n(r, t) = |\Psi_n(r, t)|^2 = |u_n(r)|^2 e^{-\Gamma_n t/\hbar}. \quad (2.2.9)$$

Entonces, los estados resonantes proveen una explicación de la ley del decaimiento exponencial. Además, el estado resonante es un estado metaestable que decae con una vida media

$$\tau_n = \frac{\hbar}{\Gamma_n}. \quad (2.2.10)$$

En un problema de decaimiento,  $\tau_n$  brinda una escala del tiempo en que la partícula se queda atrapada en el sistema.

Asintóticamente, la forma de la función de onda a grandes distancias del potencial ( $x > L$ ) es

$$\Psi_n(x, t) = u_n(x)e^{-iE_n t/\hbar} = D_n \exp \left[ i \left( a_n x - \frac{\epsilon_n}{\hbar} t \right) \right] e^{b_n x} e^{-\frac{1}{2}\Gamma_n t/\hbar}. \quad (2.2.11)$$

El primer factor en (2.2.11) representa una onda saliente asociada a un estado de energía positiva (cuando  $k_n$  es una resonancia propia). El hecho de que  $\text{Im}(k_n) < 0$  implica que, a grandes distancias, la amplitud del estado resonante aumenta exponencialmente lo cual se interpreta como que a mayores distancias están presentes partículas emitidas anteriormente por una fuente; por esta razón las reglas de normalización, ortogonalidad y completitud de las eigenfunciones comunes no aplican, lo que le valió a los estados resonantes que fueran descartados por mucho tiempo como herramientas de cálculo [19].

Por otro lado, en el caso de una resonancia aislada, es decir, tal que

$$\Gamma_n \ll |\epsilon_{n+1} - \epsilon_n|, \quad (2.2.12)$$

la amplitud de transmisión adopta aproximadamente la llamada forma lorentziana o de Breit-Wigner

$$t(E) \approx \frac{\Gamma_n/2}{E - \epsilon_n + i\Gamma_n/2} \quad (2.2.13)$$

de donde

$$|t(E)|^2 \approx \frac{(\Gamma_n/2)^2}{(E - \epsilon_n)^2 + (\Gamma_n/2)^2} \quad (2.2.14)$$

y, por ello, el estado resonante no corresponde a una energía definida sino a una distribución de energías centrada en  $\epsilon_n$  y de ancho  $\Gamma_n$  a la semialtura de la misma.

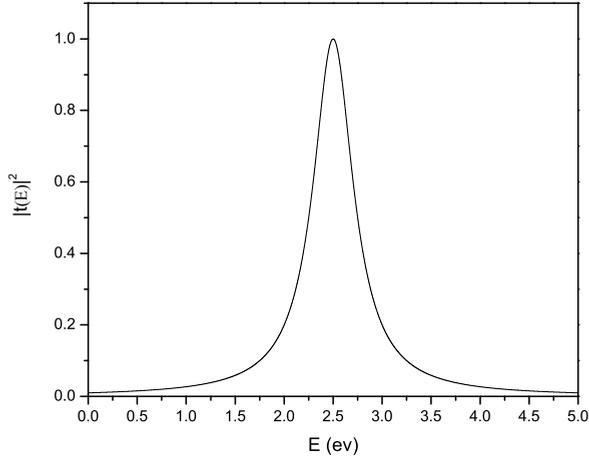


Figura 2.2: Resonancia de Breit Wigner con  $\epsilon = 2.5eV$  y  $\Gamma = 0.5eV$ .

En términos de los estados resonantes es posible hacer desarrollos en eigenfunciones de funciones de onda [20].

En conclusión, un estado resonante o cuasiestacionario se define a través de condiciones de onda puramente salientes sobre la ecuación de eigenvalores de Schrödinger, lo cual implica necesariamente que los eigenvalores permitidos de la energía sean complejos, lo cual no está en consonancia con el uso de eigenvalores reales que es común en la mecánica cuántica [21]. Los estados resonantes generalizan los estados estacionarios ya que en estos últimos las energías están

definidas claramente ( $\Gamma = 0$ ). La amplitud de un estado resonante se incrementa exponencialmente en el espacio y decae exponencialmente en el tiempo, por lo que no aplican las reglas usuales de normalización, ortogonalidad y completitud.

## 2.3. Dispersión y decaimiento

La dispersión y el decaimiento son dos problemas aparentemente inconexos. El primero se puede formular como resolver la ecuación

$$\left[ \frac{d^2}{dx^2} + [k^2 - U(x)] \right] \psi(x) = 0 \quad (2.3.1)$$

donde

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (2.3.2)$$

$$U(x) = \frac{2m}{\hbar^2} V(x). \quad (2.3.3)$$

La solución en las regiones donde se extingue el potencial es

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + r(k)e^{-ikx}, & x < 0 \\ t(k)e^{ikx}, & x > L \end{cases} \quad (2.3.4)$$

El problema de decaimiento se puede plantear como

$$u_n''(x) + [k_n^2 - U(x)]u_n(x) = 0 \quad (2.3.5)$$

$$u_n'(0) = -ik_n u_n(0) \quad (2.3.6)$$

$$u_n'(L) = ik_n u_n(L), \quad (2.3.7)$$

es decir, como encontrar el estado  $u_n$  que satisface condiciones de onda saliente.

Los problemas enunciados son similares en su forma matemática pues la ecuación diferencial por resolver es la misma, pero difieren en sus condiciones de frontera. En el problema de dispersión independiente del tiempo se supone un experimento mental en el que un flujo unitario de partículas incide por la izquierda sobre un potencial, y cierta fracción  $r$  es reflejada y otra parte  $t$  es transmitida; en el problema de decaimiento se considera que un estado inicial inestable se escapa de la acción de un potencial. La relación entre ambos problemas viene de considerar la función de Green de onda saliente  $G^+(x, x', k)$ , que será estudiada en la sección 2.4.

La amplitud de transmisión del problema independiente del tiempo es una función posiblemente compleja que depende de la variable real  $k$ . En general,  $t$  se puede expresar como

$$t(k) = \frac{A(k)}{B(k)}. \quad (2.3.8)$$

$B$  es una función que no posee singularidades en el dominio real. Sin embargo, al hacer una prolongación analítica a  $k$  compleja se encuentra que esta cantidad puede tener polos complejos definidos por la ecuación

$$B(k_n) = 0. \quad (2.3.9)$$

Por otro lado, se ha visto que las condiciones de onda saliente sobre  $u_n$  implican que los eigenvalores de la ecuación de Schrödinger (2.3.5) son complejos. Se puede demostrar que la condición de eigenvalores complejos coincide con (2.3.9). Esto permite asociar al polo  $k_n$  una eigenfunción  $u_n$ .

Como ilustración de estas afirmaciones pongamos el caso de la barrera de potencial  $V(x) = V_0$  para  $x \in [0, L]$ . En este caso, los estados resonantes  $u_n$  son de la forma

$$u_n(x) = \begin{cases} A_n e^{-ik_n x} & x < 0 \\ B_n e^{\kappa_n x} + C_n e^{-\kappa_n x} & 0 < x < L \\ D_n e^{ik_n x} & x > L, \end{cases} \quad (2.3.10)$$

donde  $k_n$  y  $\kappa_n$  se definen como

$$k_n = \frac{\sqrt{2mE_n}}{\hbar} \quad (2.3.11)$$

$$\kappa_n = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E_n)}}{\hbar}. \quad (2.3.12)$$

Se imponen las condiciones de continuidad sobre  $u_n$  y  $u'_n$ . Esto produce las ecuaciones

$$C_n = A_n + B_n \quad (2.3.13)$$

$$D e^{ik_n L} = A_n e^{\kappa_n L} + B_n e^{-\kappa_n L} \quad (2.3.14)$$

$$-ik_n C_n = \kappa_n (A_n - B_n) \quad (2.3.15)$$

$$ik_n D_n e^{ik_n L} = \kappa_n (A_n e^{\kappa_n L} - B_n e^{-\kappa_n L}) \quad (2.3.16)$$

que forman el sistema de ecuaciones lineales homogéneas

$$A_n + B_n - C_n = 0 \quad (2.3.17)$$

$$A_n e^{\kappa_n L} + B_n e^{-\kappa_n L} - D_n e^{ik_n L} = 0 \quad (2.3.18)$$

$$\kappa_n (A_n - B_n) + ik_n C_n = 0 \quad (2.3.19)$$

$$\kappa_n (A_n e^{\kappa_n L} - B_n e^{-\kappa_n L}) - ik_n D_n e^{ik_n L} = 0. \quad (2.3.20)$$

La condición para que el sistema tenga una solución única es que su determinante se anule exactamente. Esto se traduce en la condición

$$B(k_n) = 2ik_n\kappa_n \cosh(\kappa_n L) + (k_n^2 - \kappa_n^2) \sinh(\kappa_n L) = 0. \quad (2.3.21)$$

Por otro lado, la amplitud de transmisión  $t$  en el problema de dispersión tiene la forma

$$t(k) = \frac{2ik\kappa \exp(-ikL)}{2ik\kappa \cosh(\kappa L) + (k^2 - \kappa^2) \sinh(\kappa L)} \quad (2.3.22)$$

Por lo tanto, la condición para encontrar los polos de  $t(k)$  es (2.3.21).

Así, pues, los estados resonantes unifican el tratamiento de dos problemas de interés físico y provee un marco conceptual en el que ambos pueden estudiarse usando las mismas técnicas.

## 2.4. Función de Green de onda saliente

La función de Green de la ecuación de Schrödinger con condiciones de onda saliente  $G^+(x, x', k)$  es una manera conveniente de ligar los estados resonantes con procesos físicos de interés. Es la herramienta matemática fundamental para la discusión ulterior y posee propiedades analíticas que son de utilidad en el estudio de los problemas de dispersión. La función de Green de onda saliente es un propagador definido como la transformada de Laplace de la función de Green retardada  $g(x, t; x', 0)$

$$G^+(x, x', s) = \int_0^\infty e^{-st} g(x, t; x', 0) dt \quad (2.4.1)$$

donde

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^\infty g(x, t; x', 0) \Psi(x', 0) dx'. \quad (2.4.2)$$

Para potenciales de alcance finito  $G^+$  posee polos complejos que pueden identificarse como estados ligados, antiligados o resonancias del sistema y que se distribuyen siguiendo trayectorias definidas en el plano complejo  $k$  [22, 23]; además, existen una infinidad de ellos y por consideraciones de simetría ante la inversión temporal los polos se distribuyen simétricamente respecto al eje imaginario [24]. A los polos de  $G^+(x, x', k)$ , que coinciden con los de la amplitud de transmisión del problema independiente del tiempo  $t(k)$  (haciendo una prolongación analítica a  $k$  compleja) por (2.7.5), se les designará por  $k_n$  y son estos eigenvalores los que se utilizarán para calcular los estados  $u_n$ .

Restringiendo la atención a potenciales unidimensionales de alcance finito es posible obtener al menos dos representaciones de  $g(x, t; x', 0)$  [25]. Para obtener dichas representaciones escribimos la función de Green retardada como una Transformada inversa de Laplace

$$g(x, t; x', 0) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} e^{st} G^+(x, x', s) ds. \quad (2.4.3)$$

Mediante el cambio de variable

$$s = -i \frac{\hbar p^2}{2m} \quad (2.4.4)$$

la integración en (2.4.3) queda como

$$g(x, t; x', 0) = -\frac{i\hbar}{m} \frac{1}{2\pi i} \int_{\mathcal{C}} \exp\left(-i \frac{\hbar p^2 t}{2m}\right) G^+(x, x', p) p dp, \quad (2.4.5)$$

donde  $\mathcal{C}$  es el contorno mostrado en la figura 2.3.

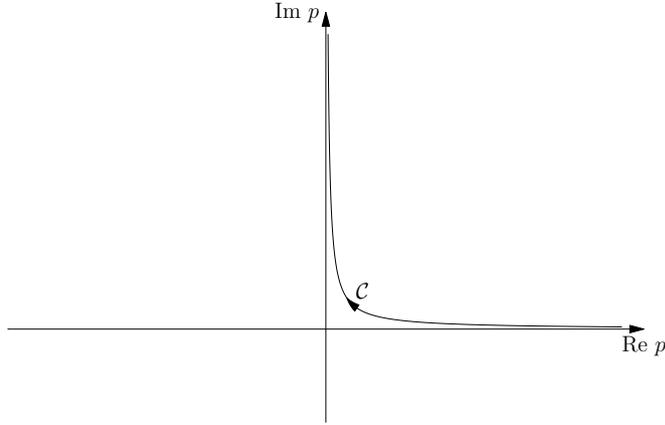


Figura 2.3: Contorno de integración en el plano  $p$ .

Esta integral puede evaluarse completando el contorno  $\mathcal{C}$  de dos maneras distintas. Completando  $\mathcal{C}$  como se muestra en la figura 2.4 y por los teoremas de Cauchy y del residuo, además de (2.5.15) e imponiendo la condición de que los estados  $u_n$  satisfagan (2.5.14) y repitiendo los argumentos de la sección 1.4 es posible obtener la expresión para el propagador retardado como una suma sobre estados ligados y estados del continuo

$$g(x, t; x', 0) = \frac{\hbar}{2\pi m} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-i \frac{\hbar p^2 t}{2m}\right) G^+(x, x', p) p dp - \frac{i\hbar}{2m} \sum_{\{k_b\}} \exp\left(-i \frac{\hbar k_b^2 t}{2m}\right) u_b(x) u_b(x'). \quad (2.4.6)$$

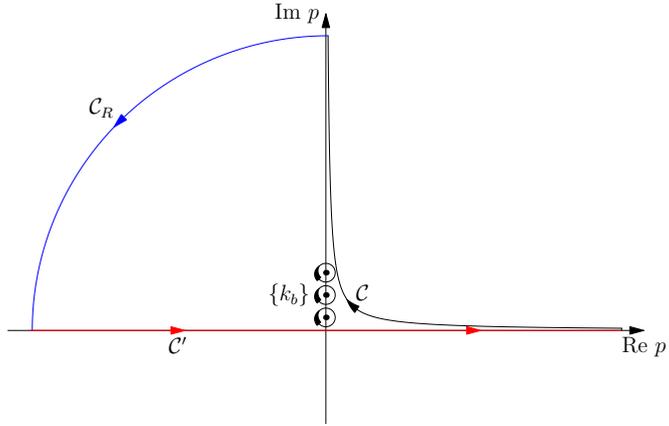


Figura 2.4: Una manera de completar el contorno de integración  $\mathcal{C}$ .

Este desarrollo del propagador  $g(x, t; x', 0)$  coincide con el desarrollo en términos de estados ligados y del continuo [26] dado por

$$g(x, t; x', 0) = \sum_n \phi_n^*(x') \phi_n(x) \exp\left(-i \frac{E_n}{\hbar} t\right) + \int dE \phi_E^*(x') \phi_E(x) \exp\left(-i \frac{E}{\hbar} t\right), \quad (2.4.7)$$

donde  $\phi_n$  son las soluciones de la ecuación estacionaria de Schrödinger.

Sin embargo, también es posible completar  $\mathcal{C}$  como se ilustra en la figura 2.5.

Entonces, (2.4.5) queda como

$$g(x, t; x', 0) = \frac{\hbar}{2\pi m} \int_{\mathcal{C}_I} \exp\left(-i \frac{\hbar p^2 t}{2m}\right) G^+(x, x', p) p dp - \frac{i\hbar}{2m} \sum_{\{k_b\}, \{k_p\}} \exp\left(-i \frac{\hbar k_n^2 t}{2m}\right) u_n(x) u_n(x'). \quad (2.4.8)$$

donde la suma sobre  $\{k_p\}$  se refiere a las resonancias propias indicadas en la figura 2.5.

Estos desarrollos demuestran que, al considerar potenciales de alcance finito, los estados resonantes  $u_n$  también pueden ser utilizados como una base en términos de la cual expresar la función de Green retardada  $g(x, t; x', 0)$ , lo que aumenta su utilidad como herramientas de cálculo.

Por otro lado, es posible mostrar que  $G^+(x, x', k)$  satisface la ecuación diferencial

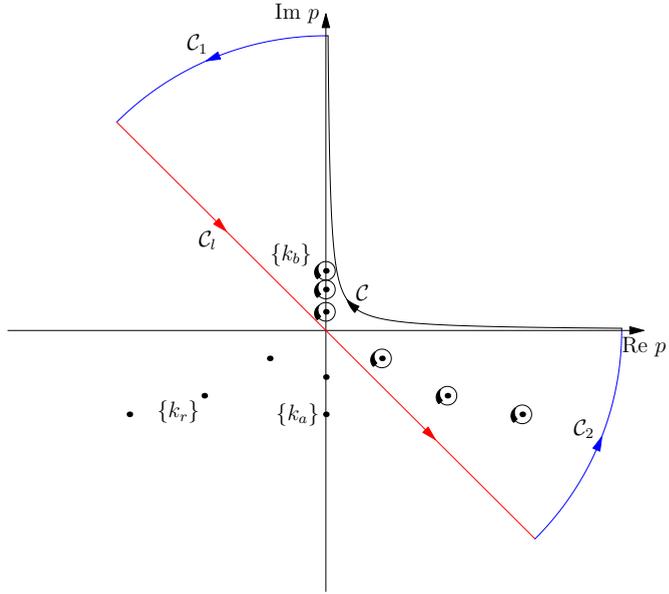


Figura 2.5: Una manera alternativa de completar el contorno de integración  $\mathcal{C}$ .

$$\left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + [k^2 - U(x)] \right) G^+(x, x', k) = \delta(x - x') \quad (2.4.9)$$

y las condiciones de onda saliente

$$\frac{\partial}{\partial x} G^+(x, x', k) \Big|_{x=0^+} = -ik G^+(0, x', k) \quad (2.4.10)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} G^+(x, x', k) \Big|_{x=L^-} = ik G^+(L, x', k). \quad (2.4.11)$$

## 2.5. Normalización de los estados resonantes

El objetivo de esta sección es estudiar el comportamiento de la función de Green cerca de sus polos complejos y deducir el valor del residuo de dicha función.

Un estado resonante  $u_n$  satisface (2.3.5) con condiciones de frontera (2.3.6) y (2.3.7) y la función de Green de onda saliente del problema satisface (2.4.9), (2.4.10) y (2.4.11). En una vecindad de sus polos  $k_n$ , la función de Green puede escribirse como

$$G^+(x, x', k) = \frac{C_n(x, x')}{k - k_n} + \chi(x, x', k), \quad (2.5.1)$$

donde  $\chi$  es regular en  $k_n$ . Esto permite reescribir (2.4.9) como

$$\frac{1}{k - k_n} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + [k^2 - U(x)] \right) C_n + \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + [k^2 - U(x)] \right) \chi = \delta(x - x'). \quad (2.5.2)$$

Multiplicando (2.5.2) por  $(k - k_n)$  y haciendo  $k \rightarrow k_n$  se deduce

$$\left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + [k^2 - U(x)] \right) C_n(x, x', k) = 0. \quad (2.5.3)$$

Ahora, a (2.5.2) se le suma y resta  $k_n^2 C_n(x, x', k)/(k - k_n)$ , lo cual implica que

$$\begin{aligned} \frac{1}{k - k_n} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + [k^2 - U(x)] + [k^2 - k_n^2] \right) C_n(x, x', k) + \\ \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + [k^2 - U(x)] \right) \chi(x, x', k) = \delta(x - x'). \end{aligned} \quad (2.5.4)$$

Por (2.5.3), (2.5.4) se simplifica a

$$\frac{k^2 - k_n^2}{k - k_n} C_n + \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + [k^2 - U(x)] \right) \chi = \delta(x - x'),$$

de donde

$$(k + k_n) C_n + \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + [k^2 - U(x)] \right) \chi = \delta(x - x'). \quad (2.5.5)$$

Haciendo  $k \rightarrow k_n$  se encuentra la condición

$$2k_n C_n(x, x') + \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + [k_n^2 - U(x)] \right) \chi(x, x', k_n) = \delta(x - x'). \quad (2.5.6)$$

Las condiciones de frontera (2.4.10) y (2.4.11) se pueden reescribir en términos de  $C_n(x, x', k)$  y  $\chi(x, x', k_n)$  como

$$\left. \frac{\partial}{\partial x} C_n(x, x') \right|_{x=0^+} = -ik C_n(0, x') \quad (2.5.7)$$

$$\left. \frac{\partial}{\partial x} C_n(x, x') \right|_{x=L^-} = ik C_n(L, x') \quad (2.5.8)$$

$$\left. \frac{\partial}{\partial x} \chi(x, x', k) \right|_{x=0^+} = -ik \chi(0, x', k) - i C_n(0, x') \quad (2.5.9)$$

$$\left. \frac{\partial}{\partial x} \chi(x, x', k) \right|_{x=L^-} = ik \chi(L, x', k) + i C_n(L, x'). \quad (2.5.10)$$

Así,  $u_n$  y  $C_n$  satisfacen la misma ecuación diferencial en  $x$  y las mismas condiciones de frontera, por lo que estas funciones deben diferir a lo más por

un factor que no depende de  $x$ , es decir, la dependencia en  $x'$  de  $C_n$  puede ser factorizada.

$$C_n(x, x') = u_n(x)P_n(x'). \quad (2.5.11)$$

Es posible obtener una expresión para  $P(x')$  en términos de  $u_n(x')$  usando (2.3.5), (2.5.6), (2.5.9) y (2.5.10). El resultado es

$$P_n(x') = \frac{1}{2k_n} \frac{u_n(x')}{\int_0^L u_n^2(t) dt + \frac{i}{2k_n}[u_n^2(0) + u_n^2(L)]}. \quad (2.5.12)$$

Finalmente,

$$C_n(x, x', k_n) = \frac{1}{2k_n} \frac{u_n(x)u_n(x')}{\int_0^L u_n^2(t) dt + \frac{i}{2k_n}[u_n^2(0) + u_n^2(L)]}. \quad (2.5.13)$$

Para simplificar la expresión del residuo de la función de Green la expresión anterior sugiere usar la convención de normalización

$$\frac{i}{2k_n}[u_n^2(0) + u_n^2(L)] + \int_0^L u_n^2(t) dt = 1, \quad (2.5.14)$$

con lo que el residuo  $C_n(x, x', k_n)$  de la función de Green se expresa simplemente como

$$C_n(x, x', k_n) = \frac{u_n(x)u_n(x')}{2k_n}. \quad (2.5.15)$$

## 2.6. Matrices $S$ y $M$ unidimensionales

La forma general de la solución de la ecuación de eigenvalores para un potencial como los considerados en este trabajo es

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & x < 0 \\ Cf(x) + Dg(x) & 0 < x < L \\ Fe^{ikx} + Ge^{-ikx} & x > L, \end{cases} \quad (2.6.1)$$

La solución en la región del potencial tiene la forma general enunciada por la teoría de las ecuaciones diferenciales ordinarias de segundo grado. Los coeficientes  $A$  y  $B$  pueden ser expresados en términos de  $F$  y  $G$  a través de las condiciones de frontera; además, estas relaciones admiten una representación matricial en la forma

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix}. \quad (2.6.2)$$

De manera equivalente se pueden relacionar  $B$  y  $F$ , los coeficientes de las ondas salientes, con aquellos de las ondas entrantes al sistema,  $A$  y  $G$ , en términos de la matriz  $S$

$$\begin{pmatrix} B \\ F \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ G \end{pmatrix}. \quad (2.6.3)$$

Las propiedades de simetría se formulan más cómodamente en términos de la matriz  $S$ . Las matrices  $S$  y  $M$  pueden relacionarse [24] a través de la conservación de la probabilidad por la ecuación

$$|B|^2 + |F|^2 = |A|^2 + |G|^2, \quad (2.6.4)$$

que expresado en notación matricial es

$$\begin{pmatrix} B^* & F^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B \\ F \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A^* & G^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ G \end{pmatrix}, \quad (2.6.5)$$

pero además, por la ecuación (2.6.3),

$$\begin{pmatrix} B^* & F^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B \\ F \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A^* & G^* \end{pmatrix} \tilde{S}^* S \begin{pmatrix} A \\ G \end{pmatrix}. \quad (2.6.6)$$

Esto implica que

$$\tilde{S}^* S = I, \quad (2.6.7)$$

es decir, que  $S$  es una matriz unitaria. Además, como los potenciales considerados son reales vale la simetría ante la inversión temporal, por lo que la ecuación de eigenvalores tiene también la solución

$$\psi^*(x) = \begin{cases} A^* e^{-ikx} + B^* e^{ikx} & x < 0 \\ C^* f^*(x) + D^* g^*(x) & 0 < x < L \\ F^* e^{-ikx} + G^* e^{ikx} & L < x, \end{cases} \quad (2.6.8)$$

Esto demuestra que la matriz  $S$  satisface

$$\begin{pmatrix} A^* \\ G^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B \\ F \end{pmatrix}. \quad (2.6.9)$$

De (2.6.3) y (2.6.9),

$$S^* S = I. \quad (2.6.10)$$

Entonces, de (2.6.10) y (2.6.7),  $S$  debe ser simétrica como resultado de la simetría ante inversión temporal, es decir,

$$\tilde{S} S = I. \quad (2.6.11)$$

Comparando (2.6.2) y (2.6.3) y utilizando las condiciones (2.6.7) y (2.6.11), la matriz  $M$  toma la forma

$$M = \begin{pmatrix} \frac{1}{S_{12}} & \frac{S_{11}^*}{S_{12}^*} \\ \frac{S_{11}}{S_{12}} & \frac{1}{S_{12}^*} \end{pmatrix} \quad (2.6.12)$$

sujeto a la condición

$$\det M = 1. \quad (2.6.13)$$

Como se verá en la sección 2.9, las amplitudes  $t$  y  $r$  en un problema con un potencial seccionalmente constante pueden expresarse en términos de  $M$  de acuerdo con (2.9.13) y (2.9.14). Combinando estas ecuaciones con (2.6.12) se concluye que

$$t = S_{12} \quad (2.6.14)$$

$$r = S_{11} \quad (2.6.15)$$

Si el potencial es simétrico ante reflexiones, es decir, si es una función par de  $x$ , los elementos de la matriz  $S$  satisfacen [24]

$$S_{11} = S_{22} \quad (2.6.16)$$

$$S_{12} = S_{21} \quad (2.6.17)$$

Por lo tanto, para un potencial seccionalmente constante y simétrico frente a reflexión, la matriz  $S$  tiene la forma general

$$S = \begin{pmatrix} r & t \\ t & r \end{pmatrix}. \quad (2.6.18)$$

Por lo tanto, en este caso, los polos de  $S$  corresponden a los polos de las amplitudes de transmisión y reflexión.

## 2.7. Matriz $S$ y función de Green

Se considera el problema de eigenvalores (2.3.1) con solución (2.3.4) en la región fuera del alcance del potencial. Al mismo tiempo, se plantea la ecuación que satisface la función de Green del problema (2.4.9) y las condiciones de onda saliente (2.4.10) y (2.4.11)

Para deducir la relación entre los elementos de la matriz  $S$  y la función de Green de onda saliente se aplica la fórmula de Green a  $\psi(x)$  y  $G^+(x, x', k)$ , lo cual resulta en

$$G^+(x, x', k)\psi'(x) - \psi(x)\frac{\partial}{\partial x}G^+(x, x', k)\Big|_0^L = -\psi(x'). \quad (2.7.1)$$

De (2.3.4), (2.4.10) y (2.4.11):

$$G^+(x, x', k)\psi'(x) - \psi(x)\frac{\partial}{\partial x}G^+(x, x', k)\Big|_0^L = -2ikG^+(0, x', k). \quad (2.7.2)$$

Por lo tanto, de (2.7.1) y (2.7.2) se deduce que

$$\psi(x') = 2ikG^+(0, x', k). \quad (2.7.3)$$

Finalmente, de (2.7.3) y (2.3.4) se deduce la relación entre los elementos de la matriz  $S$  y la función de Green de onda saliente del problema, a saber

$$r(k) = 2ikG^+(0, 0, k) - 1 \quad (2.7.4)$$

$$t(k) = 2ikG^+(0, L, k)e^{-ikL}. \quad (2.7.5)$$

## 2.8. Desarrollos en serie de $t(k)$

Un aspecto importante de la teoría de los estados resonantes es que la amplitud  $t(k)$  puede expresarse en términos de una serie de sus polos  $k_n$  de las dos formas siguientes:

$$t(k) = 2ike^{-ikL} \sum_n \frac{C_n(0, L, k_n)}{(k - k_n)} = 2ike^{-ikL} \sum_n \frac{u_n(0)u_n(L)}{2k_n(k - k_n)} \quad (2.8.1)$$

$$t(k) = 2ik \sum_n \frac{C_n(0, L, k_n)}{(k - k_n)} e^{-ik_n L} = 2ik \sum_n \frac{u_n(0)u_n(L)}{2k_n(k - k_n)} e^{-ik_n L}. \quad (2.8.2)$$

Las sumas se llevan a cabo sobre todos los polos del sistema, incluidos aquellos situados simétricamente respecto al eje imaginario.

Para deducir (2.8.1) se observa que sobre el plano  $k'$  los polos del integrando de

$$\oint_{\mathcal{C}} \frac{G^+(0, L, k')}{k' - k} dk' \quad (2.8.3)$$

son  $k$  y los polos  $k_n$  de  $G^+(0, L, k')$ . La curva  $\mathcal{C}$  se define como  $\mathcal{C} = \mathcal{C}_s + \mathcal{C}_k + \sum_n \mathcal{C}_n$ , donde las curvas  $\mathcal{C}_i$  se definen en la figura 2.6.

Por el teorema de Cauchy,

$$\oint_{\mathcal{C}} \frac{G^+(0, L, k')}{k' - k} dk' = 0. \quad (2.8.4)$$

De la aditividad de las integrales de línea,

$$\oint_{\mathcal{C}_s} \frac{G^+(0, L, k')}{k' - k} dk' + \oint_{\mathcal{C}_k} \frac{G^+(0, L, k')}{k' - k} dk' + \sum_n \oint_{\mathcal{C}_n} \frac{G^+(0, L, k')}{k' - k} dk' = 0, \quad (2.8.5)$$

donde la suma considera únicamente los polos rodeados por  $\mathcal{C}_s$ .

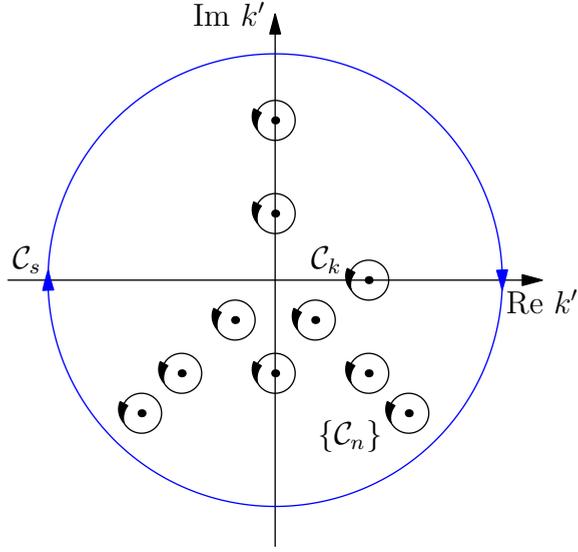


Figura 2.6: Contorno de integración.

A continuación se muestra que conforme  $R \rightarrow \infty$ ,

$$\oint_{C_s} \frac{G^+(0, L, k')}{k' - k} dk' \rightarrow 0 \quad (2.8.6)$$

en los problemas de la barrera y del pozo rectangulares. En potenciales de alcance finito más arbitrarios se hace la hipótesis de que (2.8.6) ocurre tomando como base la teoría de la dispersión en tres dimensiones, pero en el caso de los potenciales que se utilizarán en el capítulo 5 se puede dar una demostración rigurosa. Para ello se expresa la amplitud de transmisión  $t$  del problema de la barrera y el pozo rectangulares como [27, 28]

$$t(\lambda) = \frac{4\lambda\gamma e^{-i\lambda}}{J^+(\lambda)J^-(\lambda)} \quad (2.8.7)$$

donde

$$\lambda = kL \quad (2.8.8)$$

$$\lambda_0 = \frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar} L \quad (2.8.9)$$

$$\gamma = \kappa L = \frac{\sqrt{2m(E \mp V_0)}}{\hbar} L = \sqrt{\lambda^2 \mp \lambda_0^2} \quad (2.8.10)$$

$$J^\pm(\lambda) = e^{-i\gamma/2}(\lambda + \gamma) \mp e^{i\gamma/2}(\lambda - \gamma). \quad (2.8.11)$$

Entonces, de (2.7.5),

$$G^+(0, L; k) = -\frac{2i\gamma L}{J^+(\lambda)J^-(\lambda)}. \quad (2.8.12)$$

Truncando el desarrollo binomial de  $\gamma$  en términos de  $\lambda$  (asumiendo  $\lambda \gg 1$ ),

$$\gamma \approx \lambda \mp \frac{\lambda_0^2}{2\lambda}. \quad (2.8.13)$$

Tomando el caso del problema de la barrera (signo  $-$ ), si  $\lambda = Re^{i\theta}$  donde  $0 < \theta < \pi$  y  $R \gg 1$ ,

$$|G(0, L; \lambda)| \approx \frac{2L \left| \lambda - \frac{\lambda_0^2}{2\lambda} \right|}{\left| e^{-i\gamma/2} \left( 2\lambda - \frac{\lambda_0^2}{2\lambda} \right) \right|^2} \approx \frac{L}{2R} e^{-R \sin(\theta)}. \quad (2.8.14)$$

Por lo tanto, en el semiplano  $\text{Im}(\lambda) > 0$ ,  $|G(0, L; \lambda)|$  decrece con orden

$$\frac{1}{R} e^{-R \sin(\theta)},$$

lo cual de paso demuestra que la integral sobre  $\mathcal{C}_s$  se anula en dicha región del plano.

La situación es distinta en el semiplano inferior. Para verlo supongamos  $\pi < \theta < 2\pi$ ; entonces

$$|G(0, L; \lambda)| \approx \frac{2L \left| \lambda - \frac{\lambda_0^2}{2\lambda} \right|}{\left| e^{i\gamma/2} \frac{\lambda_0^2}{2\lambda} \right|^2} \approx \frac{8LR^3}{\lambda_0^4} e^{R \sin(\theta)}. \quad (2.8.15)$$

Nuevamente la integral sobre  $\mathcal{C}_s$  se anula asintóticamente pero lo hace con un orden de crecimiento distinto. Finalmente, si  $\lambda = \pm R$ ,

$$|G(0, L; \lambda)| \approx \frac{L}{2R}, \quad (2.8.16)$$

lo cual nuevamente demuestra que el integrando de  $\mathcal{C}_s$  se anula asintóticamente sobre el dominio real, mas no con una rapidez exponencial.

Entonces, tomando el caso límite en que el radio de  $\mathcal{C}_s$  crece indefinidamente y por lo tanto la suma en (2.8.5) considera todos los polos, se tiene

$$\oint_{\mathcal{C}_k} \frac{G^+(0, L, k')}{k' - k} dk' + \sum_n \oint_{\mathcal{C}_n} \frac{G^+(0, L, k')}{k' - k} dk' = 0, \quad (2.8.17)$$

Entonces, por (2.5.15) y por el teorema del residuo,

$$2\pi i G^+(0, L, k) + \sum_n 2\pi i \frac{C_n(0, L, k_n)}{k_n - k} dk' = 0, \quad (2.8.18)$$

que simplificado y por (2.7.5) resulta en (2.8.1). Es posible deducir (2.8.2) procediendo de manera similar sobre la integral

$$\oint_{\mathcal{C}} \frac{G^+(0, L, k')}{k' - k} e^{-ik'L} dk' \quad (2.8.19)$$

ya que el factor  $e^{-ik'L}$  no modifica el hecho de que la integral sobre  $\mathcal{C}_s$  se anule asintóticamente ni tampoco modifica sustancialmente el cálculo de los residuos. Para el pozo de potencial se obtienen los mismos resultados.

Como corolario de este análisis se obtiene la siguiente representación para la función de Green de onda saliente, que es válida para  $x$  y  $x'$  en  $[0, L]$ .

$$G^+(x, x', k') = \sum_n \frac{u_n(x)u_n(x')}{2k_n(k - k_n)} \quad (2.8.20)$$

La única restricción para este desarrollo es que  $x$  y  $x'$  no pueden ser simultáneamente iguales a 0 o a  $L$ , pues  $G^+(0, 0, k')$  y  $G^+(L, L, k')$  divergen.

## 2.9. Método de la matriz de transferencia

Para conocer los estados resonantes de potenciales seccionalmente constantes es necesario evaluar los coeficientes de las soluciones de la ecuación de eigenvalores de Schrödinger, lo cual puede hacerse de manera analítica en muy pocos casos, por lo que es necesario contar con un método numérico para evaluar esos coeficientes. Al brindar los valores para los coeficientes, el método también permite obtener el coeficiente de transmisión, definido como la razón del flujo de las partículas que penetran una barrera de potencial al flujo de las partículas incidentes.

Supongamos una barrera rectangular de altura  $V_0$  que se extiende de 0 a  $L$ . La solución de la ecuación de eigenvalores es

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, & x < 0 \\ Ce^{ikx} + De^{-ikx}, & 0 < x < L \\ Fe^{ikx} + Ge^{-ikx}, & L < x, \end{cases} \quad (2.9.1)$$

donde

$$\kappa = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar}. \quad (2.9.2)$$

Las condiciones de continuidad de  $\psi$  y  $\psi'$  en 0 y en  $L$  pueden escribirse en forma matricial como

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ k & -k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \kappa & -\kappa \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} \quad (2.9.3)$$

$$\begin{pmatrix} e^{i\kappa L} & e^{-i\kappa L} \\ \kappa e^{i\kappa L} & -\kappa e^{-i\kappa L} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{ikL} & e^{-ikL} \\ ke^{ikL} & -ke^{-ikL} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix}. \quad (2.9.4)$$

Definiendo las funciones matriciales

$$\sigma(q, x) = \begin{pmatrix} e^{iqx} & e^{-iqx} \\ qe^{iqx} & -qe^{-iqx} \end{pmatrix} \quad (2.9.5)$$

$$\tau(q, x) = \sigma^{-1}(q, x) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}e^{-iqx} & \frac{1}{2q}e^{-iqx} \\ \frac{1}{2}e^{iqx} & -\frac{1}{2q}e^{iqx} \end{pmatrix}, \quad (2.9.6)$$

despejando  $(CD)^T$  de (2.9.4), sustituyendo en (2.9.3) y despejando  $(AB)^T$  es posible encontrar la matriz  $M$  de este sistema en términos de  $\sigma$  y  $\tau$  como

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \tau(k, 0)\sigma(\kappa, 0)\tau(\kappa, L)\sigma(k, L) \begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} \quad (2.9.7)$$

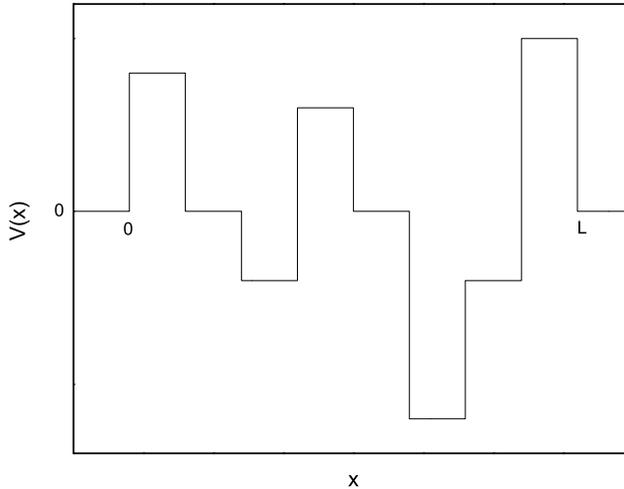


Figura 2.7: Ejemplo de potencial unidimensional de alcance finito seccionalmente constante.

En general, supongamos un potencial seccionalmente constante y denotemos por  $\phi$  los vectores columnas que representan las soluciones de la ecuación de eigenvalores en cada región. Si hay  $n + 1$  regiones en el problema se tendrán  $n$  puntos donde evaluar las condiciones de continuidad y, con ello,  $n$  ecuaciones del tipo

$$\sigma(k_i, x_i)\phi_i = \sigma(k_{i+1}, x_i)\phi_{i+1}. \quad (2.9.8)$$

Los coeficientes de la primera región pueden nuevamente encontrarse en términos de los de la última región, y con ello la matriz de transferencia del problema, como

$$\phi_1 = \tau(k_1, x_1)\sigma(k_2, x_1)\tau(k_2, x_2)\sigma(k_3, x_2)\dots\tau(k_n, x_n)\sigma(k_{n+1}, x_n)\phi_{n+1}. \quad (2.9.9)$$

Entonces, para un potencial seccionalmente constante la matriz  $M$  tiene la forma

$$M(\{k_i\}; \{x_i\}) = \tau(k_1, x_1)\sigma(k_2, x_1)\tau(k_2, x_2)\sigma(k_3, x_2)\dots\tau(k_n, x_n)\sigma(k_{n+1}, x_n). \quad (2.9.10)$$

También es posible usar el método de la matriz de transferencia en un problema de dispersión por la izquierda normalizando el flujo incidente a la unidad, es decir, poniendo

$$\phi_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ r \end{pmatrix} \quad \phi_{n+1} = \begin{pmatrix} t \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.9.11)$$

se obtiene

$$\begin{pmatrix} 1 \\ r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11}t \\ M_{21}t \end{pmatrix}. \quad (2.9.12)$$

En conclusión,

$$t = \frac{1}{M_{11}} \quad (2.9.13)$$

$$r = \frac{M_{21}}{M_{11}} \quad (2.9.14)$$

Este análisis revela que para un potencial seccionalmente constante la tarea de encontrar la amplitud de transmisión  $t$  se reduce a calcular  $M$ , lo cual puede hacerse numéricamente mediante el uso de las matrices  $\sigma$  y  $\tau$ .

La matriz  $M$  también puede usarse para calcular los estados resonantes  $u_n$  de cualquier problema. Para verlo es necesario recordar que en las regiones externas al potencial la eigenfunción satisface condiciones de onda saliente, por lo que en términos de la matriz de transferencia el problema toma la forma

$$\begin{pmatrix} 0 \\ B_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{n+1} \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11}A_{n+1} \\ M_{21}A_{n+1} \end{pmatrix}. \quad (2.9.15)$$

Entonces,

$$M_{11} = 0 \quad (2.9.16)$$

$$A_{n+1} = B_1/M_{21} \quad (2.9.17)$$

De la misma manera, mediante el uso de las matrices  $\sigma$  y  $\tau$  es posible poner los coeficientes de las regiones internas en términos de  $A_{n+1}$ , así que todos los coeficientes son proporcionales a esta cantidad. Para conocerla se utiliza la condición de normalización (2.5.14).

# Capítulo 3

## Escalas de tiempo

La teoría cuántica del tunelaje alberga el siguiente problema controversial y por lo tanto todavía abierto: ¿Cuánto tiempo tarda una partícula que tunelea en atravesar la región clásicamente prohibida? Este problema está íntimamente relacionado con el del retardo temporal causado por el tunelaje. Utilizando la idea clásicamente bien definida de retardo temporal de una partícula que se mueve a través de un potencial se puede calcular el correspondiente concepto cuántico así como el retardo temporal de un paquete de ondas [29].

### 3.1. Tiempo de retardo

Para motivar la fórmula para el tiempo de retardo se considera un paquete compuesto por dos ondas planas de frecuencias cercanas incidente por la izquierda sobre una barrera [18]. La forma matemática del paquete incidente es

$$\psi_{in} = \sqrt{\frac{m}{\hbar k}} \cos \left[ \frac{1}{2}(\Delta kx - \Delta\omega t) \right] \exp \left[ \frac{i}{2}(\Delta kx - \Delta\omega t) \right] e^{i(kx - \omega t)}. \quad (3.1.1)$$

Después de atravesar la barrera el paquete  $\psi_t$  adquiere una fase  $\theta(\omega)$ , y como el incremento  $\Delta\omega$  es pequeño, en una aproximación de primer orden la fase se puede escribir como

$$\theta(\omega + \Delta\omega) = \theta(\omega) + \frac{d\theta}{d\omega} \Delta\omega. \quad (3.1.2)$$

La forma del paquete transmitido es, entonces,

$$\psi_{tr} = \sqrt{\frac{m}{\hbar k}} \cos \left[ \frac{1}{2} \left( \Delta k x - \Delta \omega t + \Delta \omega \frac{d\theta}{d\omega} \right) \right] \times \exp \left[ \frac{i}{2} \left( \Delta k x - \Delta \omega t + \Delta \omega \frac{d\theta}{d\omega} \right) + i(kx - \omega t + \theta) \right] \quad (3.1.3)$$

La onda transmitida tiene un mínimo en  $x$  en el tiempo  $t'$  donde

$$t' = \frac{\Delta k}{\Delta \omega} x + \frac{d\theta}{d\omega}, \quad (3.1.4)$$

mientras que la onda incidente tiene ese mínimo en

$$t = \frac{\Delta k}{\Delta \omega} x. \quad (3.1.5)$$

De las últimas dos expresiones se encuentra la expresión para el retardo temporal

$$\tau_\theta = \hbar \frac{d\theta}{dE} \quad (3.1.6)$$

En el caso general de un paquete de ondas se considera un potencial de alcance finito arbitrario y que el paquete incidente tiene una energía mucho mayor a la máxima energía que alcanza el potencial repulsivo. Un paquete incidente de mucha energía se propaga casi sin distorsión y el único efecto del potencial es hacerla avanzar o retroceder respecto al paquete que no sufre dispersión siempre que el potencial varíe suavemente. A una distancia muy grande del potencial el paquete dispersado tiene una forma similar al del incidente pero con una diferencia de fase respecto al caso libre. El resultado del análisis de la relación entre  $\tau_\theta$  y la fase  $\theta$  coincide con (3.1.6).

## 3.2. Efecto Hartman

El tiempo de transmisión de Hartman  $\tau_H$  se define como

$$\tau_H = \tau_\theta + \tau_0, \quad (3.2.1)$$

donde

$$\tau_0 = \frac{mL}{\hbar k} \quad (3.2.2)$$

es el tiempo que clásicamente tardaría una partícula en atravesar libremente una distancia  $L$ .

El efecto Hartman en el efecto túnel consiste en que  $\tau_H$  para una barrera opaca se vuelve independiente del ancho  $L$  de la barrera.

# Capítulo 4

## El potencial $\delta$

El potencial  $\delta$  de Dirac proporciona el marco desde el cual puede comenzar la investigación sobre la influencia de los estados ligados sobre los transitorios cuánticos. Esto se debe a que el problema del obturador cuántico planteado con este potencial actuando en la posición del obturador tiene una solución analítica que guarda la misma estructura que el problema planteado con un potencial de alcance finito arbitrario, pero que a diferencia de éste, posee solamente dos términos; desde un punto de vista analítico esto tiene la ventaja de que se pueden hacer aproximaciones a la solución en distintos casos de interés, lo cual, además proporcionará un punto de referencia para entender los correspondientes fenómenos en el caso de potenciales rectangulares, para los cuales la solución analítica del problema del obturador cuántico es una serie infinita.

La simplicidad de la solución analítica del problema del obturador con este potencial está relacionada con que  $V(x) = \delta(x)$  solamente posee un polo complejo que, además, también se puede conocer analíticamente. En potenciales más generales existen infinitos polos complejos siguiendo trayectorias en el eje imaginario y en el tercer y cuarto cuadrantes del plano, mientras que en este caso hay solamente un polo en el eje imaginario, el cual está ubicado simétricamente respecto al origen dependiendo del signo del potencial; no obstante, la diferencia de signo y por lo tanto en la ubicación del polo, existe una diferencia muy importante en el comportamiento de los transitorios a cortas distancias entre los casos atractivo y repulsivo que se va a investigar a continuación.

### 4.1. Solución analítica

Como preparación para el estudio de los casos de barrera y pozo rectangulares se estudia el problema equivalente con un potencial  $V(x) = b\delta(x)$ . Enunciado formalmente, y siguiendo la notación de [30], el problema que se desea resolver es

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + b\delta(x) \right) \Psi(x, t) \quad (4.1.1)$$

con la condición inicial

$$\Psi(x, 0) = e^{ikx} H(-x) \quad (4.1.2)$$

La diferencia entre este problema y el planteado en [3] radica en la presencia del potencial en la posición del obturador. Para resolver este problema se opta por aplicar a (4.1.1) la Transformada de Laplace, lo que resulta en

$$i\hbar \left( s\tilde{\Psi}(x, s) - \Psi(x, 0) \right) = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + b\delta(x) \right) \tilde{\Psi}(x, s) \quad (4.1.3)$$

La ecuación anterior se simplifica a

$$\begin{cases} i\hbar \left( s\tilde{\Psi}(x, s) - e^{ikx} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \tilde{\Psi}(x, s), & x < 0 \\ i\hbar s\tilde{\Psi}(x, s) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \tilde{\Psi}(x, s), & x > 0 \end{cases} \quad (4.1.4)$$

La solución de estas ecuaciones es

$$\tilde{\Psi}(x, s) = \begin{cases} C_1 \exp\left(-i\sqrt{\frac{2ims}{\hbar}}x\right) + C_2 \exp\left(i\sqrt{\frac{2ims}{\hbar}}x\right) + \frac{e^{ikx}}{s + \frac{i\hbar k^2}{2m}}, & x < 0 \\ C_3 \exp\left(-i\sqrt{\frac{2ims}{\hbar}}x\right) + C_4 \exp\left(i\sqrt{\frac{2ims}{\hbar}}x\right), & x > 0 \end{cases} \quad (4.1.5)$$

Para que la solución no diverja en el límite  $|x| \rightarrow \infty$  se hace  $C_2 = C_3 = 0$  ya que

$$\exp\left(i(1+i)\sqrt{\frac{ms}{\hbar}}x\right) = \exp\left((i-1)\sqrt{\frac{ms}{\hbar}}x\right), \quad x < 0 \quad (4.1.6)$$

$$\exp\left(-i(1+i)\sqrt{\frac{ms}{\hbar}}x\right) = \exp\left((-i+1)\sqrt{\frac{ms}{\hbar}}x\right), \quad x > 0 \quad (4.1.7)$$

y estas expresiones divergen para  $|x| \rightarrow \infty$ .

Se introduce, como en la sección 1.4, la variable

$$p = \sqrt{\frac{2ims}{\hbar}}, \quad (4.1.8)$$

con lo que la solución al problema se puede escribir como

$$\tilde{\Psi}(x, p) = \begin{cases} B e^{-ipx} + \frac{2im/\hbar}{p^2 - k^2} e^{ikx}, & x < 0 \\ A e^{ipx}, & x > 0 \end{cases} \quad (4.1.9)$$

Integrando (4.1.3) sobre  $x$  de  $-\epsilon$  a  $\epsilon$  y haciendo  $\epsilon \rightarrow 0$  se obtiene

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial}{\partial x} \tilde{\Psi}(x, s) \Big|_{-\epsilon}^{\epsilon} + b\tilde{\Psi}(0, s) = 0, \quad (4.1.10)$$

que por (4.1.9) resulta en

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( ip(A + B) + \frac{2mk/\hbar}{p^2 - k^2} \right) = -bA. \quad (4.1.11)$$

Para eliminar  $B$  se apela a la continuidad de  $\tilde{\Psi}(x, p)$  en  $x = 0$ , de donde

$$B = A - \frac{2mi/\hbar}{p^2 - k^2}; \quad (4.1.12)$$

resolviendo para  $A$  en (4.1.11) y (4.1.12) se encuentra que

$$A = \frac{im/\hbar}{(p - k)(p + i\beta)}, \quad (4.1.13)$$

donde

$$\beta = \frac{mb}{\hbar^2}. \quad (4.1.14)$$

La solución para  $\tilde{\Psi}(x, p)$  en la región de transmisión es

$$\tilde{\Psi}(x, p) = \frac{im}{\hbar} \frac{e^{ipx}}{(p - k)(p + i\beta)}, \quad x > 0 \quad (4.1.15)$$

Descomponiendo  $\tilde{\Psi}(x, p)$  en fracciones parciales,

$$\tilde{\Psi}(x, p) = \frac{im}{\hbar} \left( \frac{k}{k + i\beta} \frac{e^{ipx}}{p(p - k)} + \frac{i\beta}{k + i\beta} \frac{e^{ipx}}{p(p + i\beta)} \right). \quad (4.1.16)$$

Es posible identificar los coeficientes de los términos entre paréntesis con las amplitudes de transmisión y reflexión del problema independiente del tiempo<sup>1</sup>

$$t(k) = \frac{k}{k + i\beta} \quad (4.1.17)$$

$$r(k) = \frac{i\beta}{k + i\beta}, \quad (4.1.18)$$

y por lo tanto

$$\tilde{\Psi}(x, p) = \frac{im}{\hbar} \left( t(k) \frac{e^{ipx}}{p(p - k)} + r(k) \frac{e^{ipx}}{p(p + i\beta)} \right). \quad (4.1.19)$$

---

<sup>1</sup>En este caso suponemos que la solución del problema independiente del tiempo en la región  $x < 0$  es  $e^{ikx} - r(k)e^{-ikx}$ .

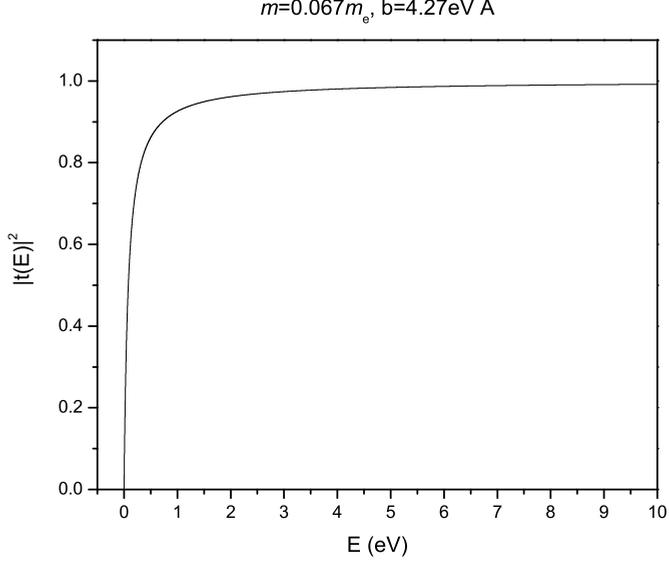


Figura 4.1: Coeficiente de transmisión de los potenciales  $\delta$  atractivo y repulsivo.

Para encontrar la solución al problema (4.1.1) se calcula la Transformada Inversa de Laplace de  $\tilde{\Psi}(x, p)$  como

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &= \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} \tilde{\Psi}(x, s) e^{st} ds = \\ &= -\frac{\hbar}{2\pi m} \int_{\mathcal{C}} p \tilde{\Psi}(x, p) \exp\left(-i\frac{\hbar p^2}{2m}t\right) dp = \\ &= -\frac{i}{2\pi} t(k) \int_{\mathcal{C}} \frac{e^{ipx}}{p-k} \exp\left(-i\frac{\hbar p^2}{2m}t\right) dp - \frac{i}{2\pi} r(k) \int_{\mathcal{C}} \frac{e^{ipx}}{p+i\beta} \exp\left(-i\frac{\hbar p^2}{2m}t\right) dp, \end{aligned} \quad (4.1.20)$$

donde  $\mathcal{C}$  es el contorno de integración indicado en la figura 4.2.

La primera integral de (4.1.20) apareció antes en (1.4.15), de donde es posible identificarla con  $M(x, k, t)$ , por lo que la solución puede escribirse como

$$\Psi(x, t) = t(k) M(x, k, t) - \frac{i}{2\pi} r(k) \int_{\mathcal{C}} \frac{e^{ipx}}{p+i\beta} \exp\left(-i\frac{\hbar p^2}{2m}t\right) dp. \quad (4.1.21)$$

La segunda integral en (4.1.20) posee un polo en  $-i\beta$  que, en el caso repulsivo ( $b > 0$ ), se encuentra en el semiplano inferior del espacio  $p$ , lo cual permite

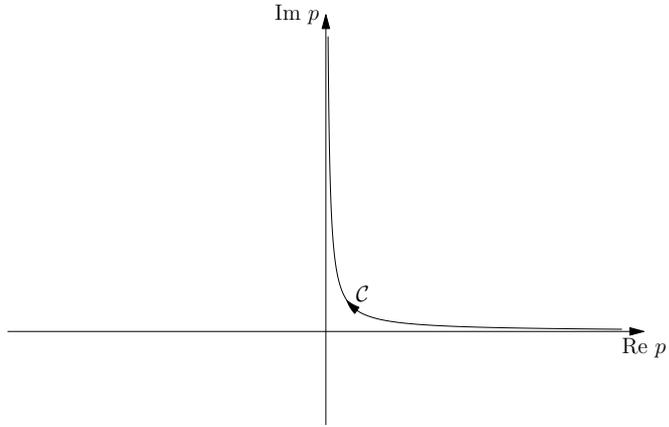


Figura 4.2: Contorno de integración para calcular  $\Psi(x, t)$ .

que el contorno en el que se realiza la integración pueda cambiarse por el eje real como se ve en la figura 4.3.

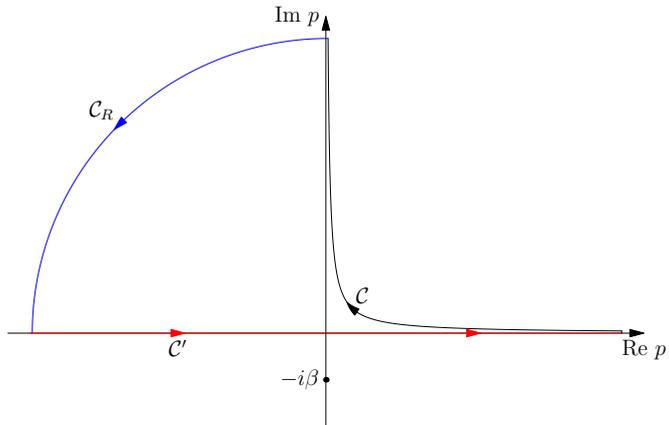


Figura 4.3: Trayectoria de integración para evaluar  $\int_C \frac{e^{ipx}}{p+i\beta} \exp\left(-i\frac{\hbar p^2}{2m}t\right) dp$ .

Además, por (1.4.18), la integral es susceptible de expresarse en términos de una función  $M$ , por lo que la solución al problema es

$$\Psi_\delta(x, t) = t(k) M(x, k, t) + r(k) M(x, -i\beta, t) \quad b > 0. \quad (4.1.22)$$

Como se ha visto en la sección 1.7,  $M(x, -i\beta, t)$  no posee, en el caso repulsivo ( $b > 0$ ) y en el límite de tiempos largos, una contribución exponencial.

Si  $b < 0$ , es decir, si el potencial es atractivo, para evaluar la segunda integral en (4.1.20) se considera la modificación del contorno  $C$  como se muestra en la

figura 4.4.

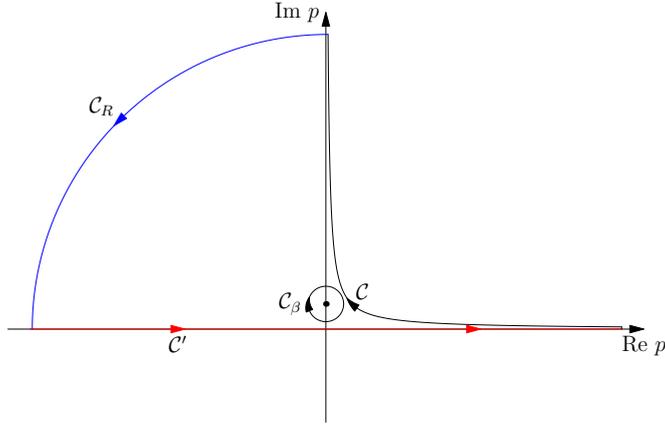


Figura 4.4: Trayectoria de integración en el problema con el potencial  $\delta$  atractivo.

Entonces, por el Teorema de Cauchy, la integral sobre  $\mathcal{C}$  puede escribirse como

$$\int_{\mathcal{C}} \frac{e^{ipx}}{p+i\beta} \exp\left(-i\frac{\hbar p^2}{2m}t\right) dp + \int_{\mathcal{C}_\beta} \frac{e^{ipx}}{p+i\beta} \exp\left(-i\frac{\hbar p^2}{2m}t\right) dp + \int_{\mathcal{C}_R} \frac{e^{ipx}}{p+i\beta} \exp\left(-i\frac{\hbar p^2}{2m}t\right) dp + \int_{\mathcal{C}'} \frac{e^{ipx}}{p+i\beta} \exp\left(-i\frac{\hbar p^2}{2m}t\right) dp = 0. \quad (4.1.23)$$

La integral sobre  $\mathcal{C}_\beta$  se puede calcular con el teorema del residuo como

$$\int_{\mathcal{C}_\beta} \frac{e^{ipx}}{p+i\beta} \exp\left(-i\frac{\hbar p^2}{2m}t\right) dp = -2\pi i e^{\beta x} \exp\left(i\frac{\hbar\beta^2}{2m}t\right) = -2\pi i e^{\beta x} \exp\left(-i\frac{E_b}{\hbar}t\right) \quad (4.1.24)$$

A medida que el arco circular en el segundo cuadrante aumenta su radio la contribución de la integral sobre  $\mathcal{C}_R$  se hace despreciable y por lo tanto

$$\int_{\mathcal{C}} \frac{e^{ipx}}{p+i\beta} \exp\left(-i\frac{\hbar p^2}{2m}t\right) dp = 2\pi i e^{\beta x} \exp\left(i\frac{\hbar\beta^2}{2m}t\right) - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{ipx}}{p+i\beta} \exp\left(-i\frac{\hbar p^2}{2m}t\right) dp \quad \beta < 0. \quad (4.1.25)$$

Por lo tanto, la solución al problema en el caso atractivo es

$$\Psi(x, t) = t(k) M(x, k, t) + r(k) e^{\beta x} \exp\left(i \frac{\hbar \beta^2}{2m} t\right) + \frac{i}{2\pi} r(k) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{ipx}}{p + i\beta} \exp\left(-i \frac{\hbar p^2}{2m} t\right) dp \quad \beta < 0. \quad (4.1.26)$$

Por (1.6.18), la solución en el caso atractivo puede escribirse como

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &= t(k) M(x, k, t) + r(k) e^{\beta x} \exp\left(i \frac{\hbar \beta^2}{2m} t\right) - \frac{1}{2} r(k) \times \\ &\quad \exp\left(\frac{imx^2}{2\hbar t}\right) w(-iy_{-i\beta}) = t(k) M(x, k, t) + r(k) \times \\ &\quad \left( e^{\beta x} \exp\left(i \frac{\hbar \beta^2}{2m} t\right) - \frac{1}{2} \exp\left(\frac{imx^2}{2\hbar t}\right) w(-iy_{-i\beta}) \right) \quad \beta < 0. \quad (4.1.27) \end{aligned}$$

En el límite de tiempos largos, el desarrollo de  $w(-iy_{-i\beta})$  no posee el término exponencial, sino solamente los de potencias inversas de su argumento.

Para que esta solución tenga la forma que se observa en el caso repulsivo podemos, por una mera cuestión de convención, definir una función  $M$  para este problema

$$\begin{aligned} M(x, -i\beta, t) &= e^{\beta x} \exp\left(i \frac{\hbar \beta^2}{2m} t\right) - \frac{1}{2} \exp\left(\frac{imx^2}{2\hbar t}\right) w(-iy_{-i\beta}) = \\ &\quad \frac{1}{2} \exp\left(\frac{imx^2}{2\hbar t}\right) w(iy_{-i\beta}) \quad \beta < 0. \quad (4.1.28) \end{aligned}$$

Por lo tanto, la solución del problema en los casos repulsivo y atractivo es

$$\Psi_{\delta}(x, t) = t(k) M(x, k, t) + r(k) M(x, -i\beta, t). \quad (4.1.29)$$

En (4.1.29) las componentes  $t(k) M(x, k, t)$  y  $r(k) M(x, -i\beta, t)$  de la solución del problema pueden llamarse cuasimonocromática y resonante, respectivamente.

Es sencillo observar que esta solución se reduce a la del caso libre cuando  $b = 0$ , ya que bajo esta hipótesis  $t = 1$  y  $r = 0$ , de modo que en este sentido tiene el comportamiento esperado. En el capítulo siguiente se obtendrá la solución de este problema para un potencial unidimensional de alcance finito arbitrario y se verá que ella es en cierto sentido una generalización del resultado recién obtenido.

La solución analítica (4.1.29) permite analizar las contribuciones a la densidad de probabilidad que realizan los términos cuasimonocromático y resonante

así como la interferencia entre ellos y compararlos con  $|\Psi_f(x, t)|^2$ , la densidad de probabilidad del caso libre, por lo cual desarrollamos  $|\Psi_\delta(x, t)|^2$  como

$$|\Psi_\delta(x, t)|^2 = |t(k) M(y_k)|^2 + |r(k) M(y_{-i\beta})|^2 + I(x, k, -i\beta, t), \quad (4.1.30)$$

donde

$$I(x, k, -i\beta, t) = 2 \operatorname{Re}[t(k)r^*(k) M(y_k) M^*(y_{-i\beta})]. \quad (4.1.31)$$

Este análisis revela cuáles son las contribuciones más destacadas a la densidad de probabilidad  $|\Psi_\delta(x, t)|^2$  además de que permite comparar esta última con la solución libre. En este estudio se retoman los parámetros del potencial repulsivo dados en [30] y, en el caso atractivo, con el correspondiente cambio de signo.

## 4.2. Sobre la solución estacionaria

En esta sección se enfatiza una de las propiedades más notables de la solución (4.1.29), que es el comportamiento a tiempos largos y distancias cercanas al potencial en el caso atractivo.

En el caso repulsivo se obtiene asintóticamente lo que se espera al resolver el problema independiente del tiempo y eso se puede comprobar desarrollando  $M(x, k, t)$  y  $M(x, -i\beta, t)$  a orden exponencial. En este caso, en la región de transmisión, se obtiene

$$\Psi_\delta(x, t) \rightarrow t(k)e^{ikx} \exp\left(-\frac{iE}{\hbar}t\right) \quad b > 0. \quad (4.2.1)$$

Sin embargo, en el caso atractivo, la  $M$  relacionada con el polo ligado del sistema también aporta una contribución exponencial, así que a tiempos largos

$$\Psi_\delta(x, t) \rightarrow t(k)e^{ikx} \exp\left(-\frac{iE}{\hbar}t\right) + r(k)e^{\beta x} \exp\left(i\frac{\hbar\beta^2}{2m}t\right) \quad \beta < 0. \quad (4.2.2)$$

A grandes distancias del potencial ( $x \gg \beta^{-1}$ ) y tiempos largos el segundo término desaparece y se recupera la solución estacionaria esperada. Sin embargo, cuando  $x \approx 0$ , la solución es

$$\Psi_\delta(x \approx 0, t) \rightarrow t(k)e^{ikx} \exp\left(-\frac{iE}{\hbar}t\right) + r(k) \exp\left(i\frac{\hbar\beta^2}{2m}t\right) \quad \beta < 0. \quad (4.2.3)$$

En esta solución hay una componente oscilatoria del término que tiene que ver con el polo ligado del potencial, la cual no se extingue a tiempos largos. Este es un resultado inesperado en tanto que no se puede deducir de un tratamiento

independiente del tiempo de este problema. Por lo tanto, solamente a distancias cercanas al potencial, la solución no tiende a la solución estacionaria; por otro lado, no hay razón para pensar que la solución del problema deba tender a la solución estacionaria, pues en los experimentos de dispersión no es posible observar lo que ocurre en las inmediaciones de la región de interacción, sino solamente aquello que se encuentra a grandes distancias del potencial. En la sección 4.4 se verá que este rasgo de la solución en las cercanías del potencial tiene consecuencias importantes en la densidad de probabilidad del problema.

### 4.3. Solución numérica del problema

La función  $M$  ha sido evaluada extensamente en la literatura para  $k$  real y  $k_n$  antigada o resonante, es decir,  $k_n$  tal que  $\text{Im}(k_n) < 0$ . Sin embargo, hasta donde sabemos, esta es la primera vez que  $M$  se evalúa vez para  $\text{Im}(k) > 0$ , por lo que conviene tener, además de la demostración analítica de la sección 1.6, la certeza de que un cálculo numérico coincide razonablemente bien con el resultado de (1.6.18).

Entonces, en esta sección se evalúa la solución en el caso atractivo como

$$\Psi(x, t) = t(k) M(x, k, t) + r(k) \times \left( e^{\beta x} \exp\left(i \frac{\hbar \beta^2}{2m} t\right) - \frac{1}{2} \exp\left(\frac{imx^2}{2\hbar t}\right) w(-iy - i\beta) \right) \quad \beta < 0. \quad (4.3.1)$$

y se compara con la solución calculada como

$$\Psi(x, t) = t(k) M(x, k, t) + r(k) e^{\beta x} \exp\left(i \frac{\hbar \beta^2}{2m} t\right) + \frac{i}{2\pi} r(k) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{ipx}}{p + i\beta} \exp\left(-i \frac{\hbar p^2}{2m} t\right) dp \quad \beta < 0, \quad (4.3.2)$$

donde la integral de la expresión anterior se evalúa numéricamente con el método de Simpson. Los parámetros utilizados para evaluar la solución son  $m = 0.067m_e$  y un intervalo de integración en  $p$  de  $-45\text{\AA}^{-1}$  hasta  $45\text{\AA}^{-1}$ .

De la figura 4.5 se observa una concordancia aceptable entre las soluciones analítica y numérica salvo a tiempos cortos. Esto se atribuye a que es necesario considerar un mayor intervalo en  $p$  para el régimen de tiempos cortos.

### 4.4. Transitorios cuánticos y densidad de probabilidad

En esta sección se estudia el comportamiento de  $|\Psi_\delta(x_0, t)|^2$  como función del tiempo para distintos valores de  $x_0$  en la región de transmisión con la

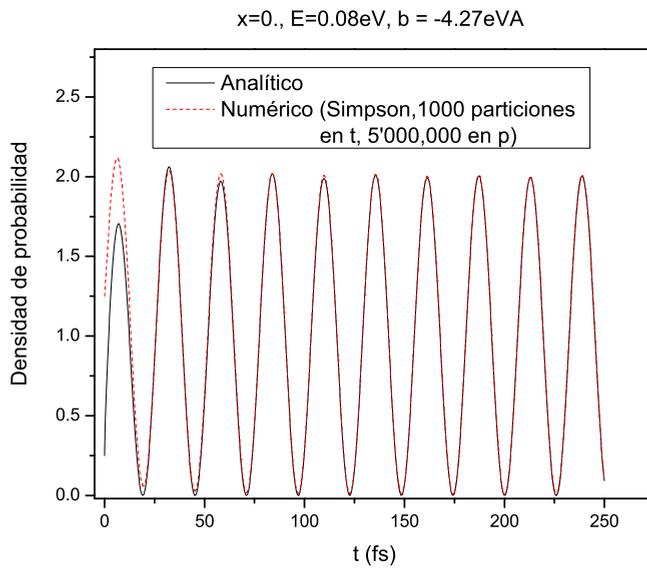


Figura 4.5: Evaluación numérica de la solución del problema en el caso atractivo.

intención de mostrar las diferencias entre los casos atractivo y repulsivo del potencial.

Las gráficas de la figura 4.6 poseen varios rasgos interesantes que podemos señalar como los siguientes y que se describen enseguida: comportamiento armónico de la onda a cortas distancias del potencial atractivo; atenuación de la amplitud de las oscilaciones a medida que aumenta la distancia al potencial en el caso atractivo; retraso y adelanto respecto a la onda que evoluciona libremente en los casos repulsivo y atractivo, respectivamente.

En la figura 4.6 a  $x = 0$  es posible observar que desde tiempos muy cortos  $|\Psi_\delta(0, t)|^2$  presenta un comportamiento oscilatorio definido por una amplitud  $A$  y periodo  $T$  que permite medir ambas cantidades de la gráfica. Esto puede probarse analíticamente en el caso del potencial atractivo ( $b < 0$ ) truncando la solución (4.1.27) en los términos exponenciales a tiempos largos usando el desarrollo (1.7.4) para  $M(x, k, t)$ , lo cual da

$$\Psi_\delta(0, t; b < 0) \rightarrow t(k)e^{ikx} \exp\left(-\frac{iE}{\hbar}t\right) + r(k) \exp\left(i\frac{\hbar\beta^2}{2m}t\right) \quad (4.4.1)$$

y calculando la densidad de probabilidad, que resulta en

$$|\Psi_\delta(0, t; b < 0)|^2 \rightarrow 1 - 2\frac{\beta k}{k^2 + \beta^2} \sin\left(\frac{\hbar}{2m}(k^2 + \beta^2)t\right). \quad (4.4.2)$$

Cuando (4.1.27) se desarrolla hasta los términos  $y^{-1}$  la aproximación resultante a la densidad de probabilidad coincide con (4.4.2).

La ecuación anterior significa que en el caso de un potencial atractivo y a distancias cortas del mismo, en la región de transmisión, la densidad de probabilidad se comporta como una onda armónica desplazada. Además, (4.4.2) proporciona expresiones para la amplitud y el periodo de la onda, que son

$$A = -2\frac{\beta k}{k^2 + \beta^2} \quad (4.4.3)$$

$$T = 4\pi\frac{m}{\hbar(k^2 + \beta^2)}. \quad (4.4.4)$$

En la tabla 4.1 se comparan  $A$  y  $T$  medidas directamente de la gráfica a  $x = 0$  de la figura 4.6 y  $A$  y  $T$  calculadas con (4.4.3) y (4.4.4) utilizando los parámetros de la figura mencionada.

	A	T(fs)
Medido	0.9846	25.9255
Calculado	0.9999	258234

Cuadro 4.1: Amplitud y periodo

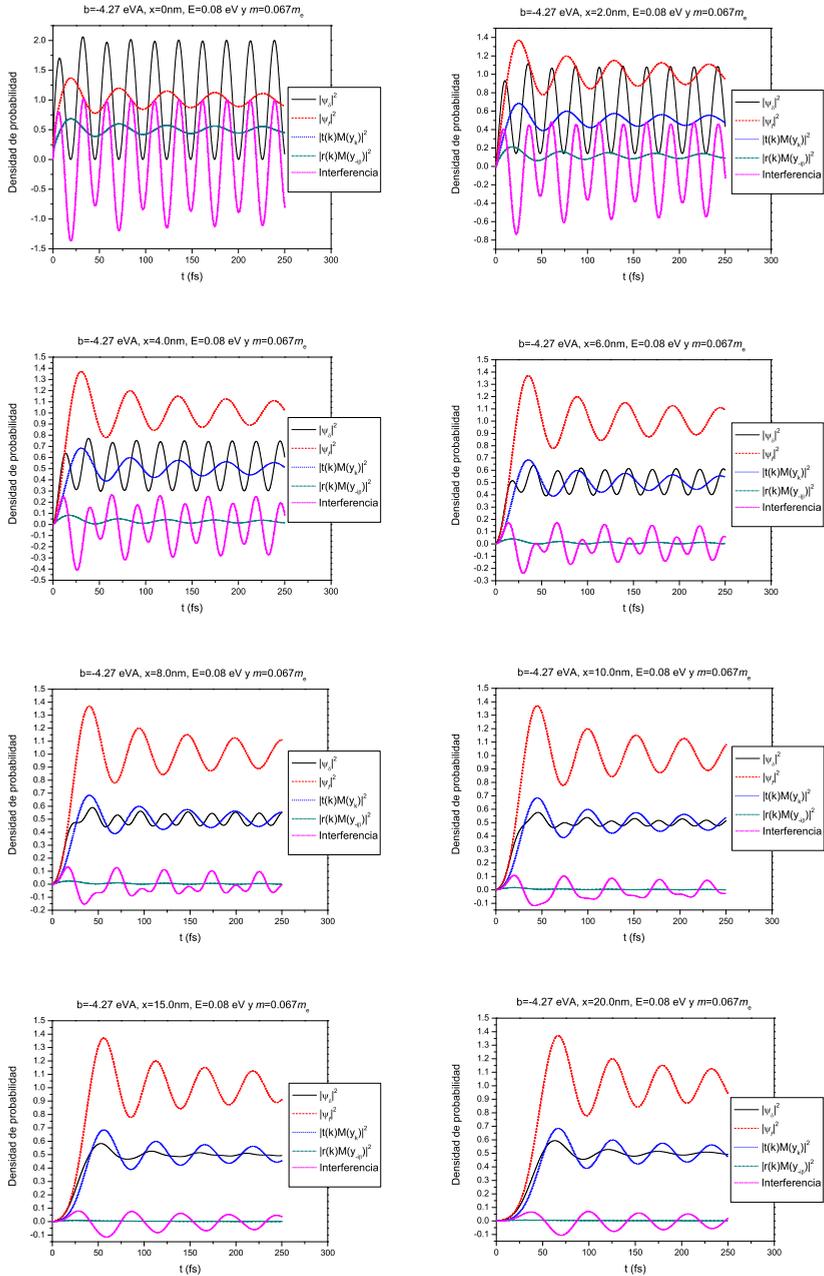


Figura 4.6: Contribuciones a la densidad de probabilidad en el potencial  $\delta$  atractivo.

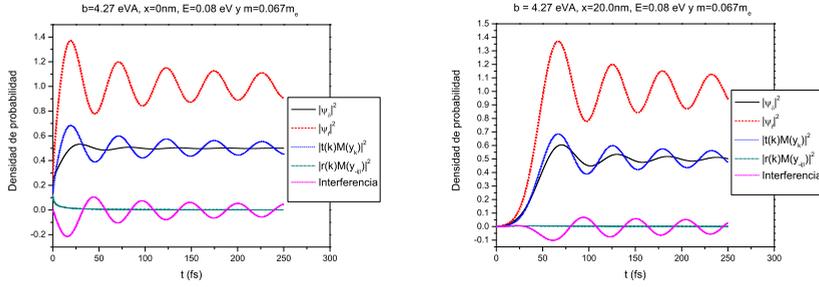


Figura 4.7: Contribuciones a la densidad de probabilidad en el potencial  $\delta$  repulsivo.

A cortas distancias del potencial el término de interferencia es el que le da a la densidad de probabilidad del caso atractivo su carácter oscilatorio pues en la aproximación a orden exponencial, (4.1.31) toma la forma

$$I(0, k, -i\beta, t) = -\frac{2\beta k}{k^2 + \beta^2} \sin\left(\frac{\hbar}{2m}(k^2 + \beta^2)t\right) = -\frac{2\beta k}{k^2 + \beta^2} \sin\left(\frac{E - E_b}{\hbar}t\right) \quad \beta < 0. \quad (4.4.5)$$

En las gráficas de la figura 4.6 se observa que conforme crece la distancia al potencial la amplitud de las oscilaciones disminuye como función del tiempo. Para demostrar esto se truncan los desarrollos (1.7.4) en los términos exponenciales para cualquier valor de  $x$ , obteniendo

$$\Psi_\delta(x, t; b < 0) \rightarrow t(k)e^{ikx} \exp\left(-\frac{iE}{\hbar}t\right) + r(k)e^{\beta x} \exp\left(i\frac{\hbar\beta^2}{2m}t\right), \quad (4.4.6)$$

cuya densidad de probabilidad es

$$|\Psi(x, t; b < 0)|^2 \rightarrow \frac{1}{k^2 + \beta^2} \left[ \beta^2 e^{2\beta x} + k^2 - 2\beta k e^{\beta x} \sin\left(\frac{\hbar(\beta^2 + k^2)t}{2m} - kx\right) \right]. \quad (4.4.7)$$

El comportamiento exhibido por los transitorios<sup>2</sup> del caso atractivo a distancias cercanas al potencial difiere radicalmente del que exhiben los transitorios

<sup>2</sup>Las oscilaciones armónicas de (4.4.2) no son, en sentido estricto, transitorios ya que éstos por definición deben desaparecer eventualmente y el comportamiento oscilatorio encontrado se mantiene en el tiempo; sin embargo, se les seguirá denominando transitorios en atención a que se extinguen cuando crece la distancia al potencial.

del caso repulsivo como se observa al comparar las figuras 4.6 y 4.7. Podemos demostrar matemáticamente este comportamiento en el caso repulsivo ( $b > 0$ ) aproximando a tiempos largos la solución (4.1.29) truncando los desarrollos (1.7.3) y (1.7.4) hasta los términos del orden  $y^{-1}$ , obteniendo

$$|\Psi_\delta(0, t; b > 0)|^2 \rightarrow \frac{k^2}{k^2 + \beta^2} = |t(k)|^2, \quad (4.4.8)$$

o hasta términos del orden  $y^{-3}$ , resultando la aproximación

$$|\Psi_\delta(0, t; b > 0)|^2 \rightarrow \frac{k^2}{k^2 + \beta^2} + \frac{m^3}{2\pi(k^2 + \beta^2)\hbar^3 t^3} \left( \frac{1}{k^2} + \frac{1}{\beta^2} \right)^2 - \left( \frac{m}{\hbar t} \right)^{3/2} \frac{k}{\sqrt{\pi}(k^2 + \beta^2)} \left( \frac{1}{k^2} + \frac{1}{\beta^2} \right) \left( \cos \left( \frac{\hbar k^2 t}{2m} \right) + \sin \left( \frac{\hbar k^2 t}{2m} \right) \right). \quad (4.4.9)$$

La contribución resonante a la densidad de probabilidad presenta comportamientos distintos en los casos atractivo y repulsivo; en el primero, cuando la distancia al potencial aumenta, la contribución resonante disminuye en magnitud hasta volverse despreciable, mientras que en el caso repulsivo dicha contribución siempre es despreciable.

En los desarrollos asintóticos presentados no aparece ningún término proporcional a  $t^{-1/2}$  ni a  $t^{-1}$ .

## 4.5. Tiempos de retardo y de transmisión

Para completar el análisis de  $|\Psi_\delta(x, t)|^2$  a grandes distancias se investiga, como en [30], la dependencia del valor del tiempo de retardo dinámico, definido como

$$\Delta t = t_{m\delta} - t_{mf}, \quad (4.5.1)$$

donde  $m$  se refiere a la posición del primer máximo en cada gráfica, a la distancia al potencial. En la figura 4.8 se presentan los resultados para los potenciales repulsivo y atractivo, y se presentan los valores del tiempo de retardo de fase que por (4.1.29) puede calcularse como

$$\tau_\theta = \frac{bm^2}{\hbar^3 k[k^2 + \beta^2]}. \quad (4.5.2)$$

Para  $E = 0.08eV$ ,  $m = 0.067m_e$  y  $b = 4.27eV\text{\AA}$ ,  $\tau_\theta = 2.05fs$ .

El caso atractivo tiene un  $\tau_\theta < 0$ , lo cual se interpreta como un avance temporal de la solución respecto al caso libre. En [30] se expone que el origen del tiempo de retardo es el término (4.1.31). La parte superior de la figura 4.8 corresponde a lo expuesto en la figura 2 de [30].

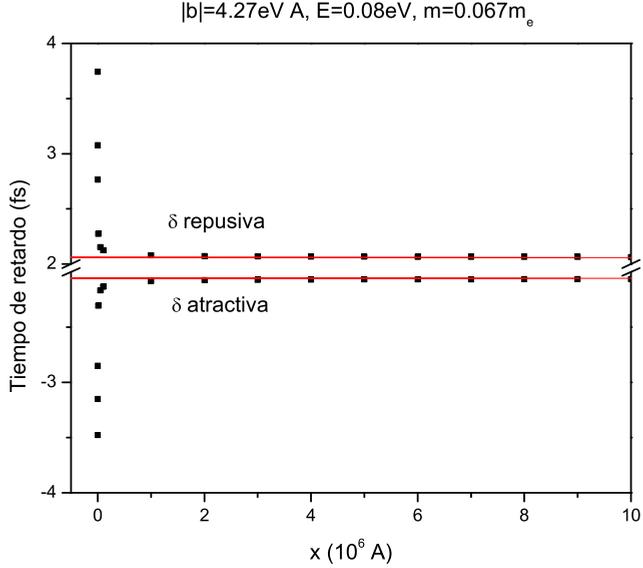


Figura 4.8: Tiempo de retardo para los casos repulsivo y atractivo.

En la figura 4.8 se observa que el tiempo de retardo para el caso atractivo se aproxima mucho a la reflexión respecto al eje  $x$  del tiempo de retardo dinámico para el potencial repulsivo.

También es posible estudiar (4.5.2) como función de  $b$ . En la figura 4.9 se observa el efecto Hartman en el potencial  $\delta$  repulsivo. De la figura 4.9 también es posible concluir que el caso atractivo también presenta el efecto Hartman, pues por (4.5.2) la única diferencia entre estos casos es el cambio de signo propio del potencial.

## 4.6. Discusión de los resultados

El propósito de esta sección es evaluar las diferencias entre  $b > 0$  y  $b < 0$ . El potencial  $\delta$  de Dirac tiene la ventaja analítica de que solamente posee un polo, que dependiendo del signo de  $b$  puede ser ligado o antiligado cuando la intensidad del potencial es positiva o negativa, respectivamente.

De las gráficas de las secciones anteriores se puede observar que a cortas distancias del potencial en el caso atractivo (4.1.31) le da a  $|\Psi_\delta(x, t; b < 0)|^2$  el carácter oscilatorio, lo cual fue exhibido en la aproximación (4.4.2) con términos exponenciales. En el caso repulsivo la situación es distinta ya que la contribución del término  $|r(k) M(y_{-i\beta})|^2$  es despreciable y el término de interferencia, aunque

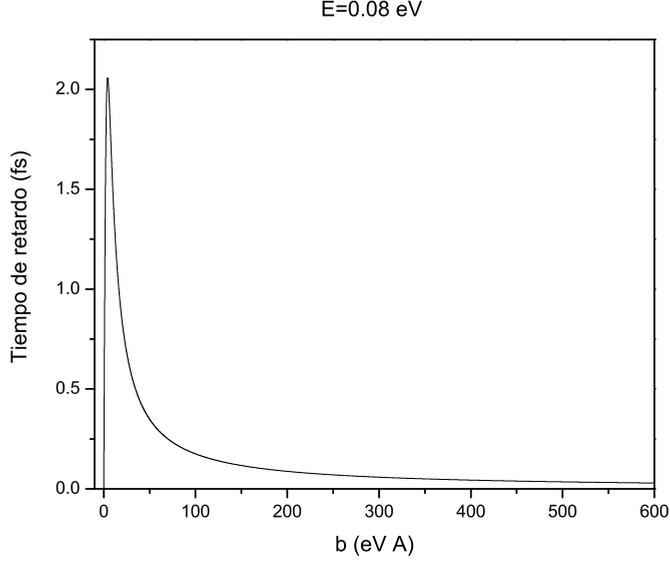


Figura 4.9:  $\tau_\theta$  como función de  $b$ .

ligeramente oscilatorio, solamente tiene el efecto de producir un retraso respecto al caso libre.

El comportamiento oscilatorio encontrado a distancias cercanas al potencial es la conclusión más importante de este capítulo. Físicamente se debe a la interacción entre la energía de la onda incidente sobre el obturador con el estado ligado. Este comportamiento indica que parte de la onda inicialmente confinada se queda atrapada en el potencial atractivo; las componentes de la onda inicialmente confinada que llegan más allá del potencial atractivo sufren también este atrapamiento, que decae exponencialmente con la distancia hasta que a distancias del orden  $x \gg 1/\beta$  el atrapamiento desaparece.

En el caso repulsivo, a tiempos largos y distancias grandes del potencial, se espera que  $|\Psi_\delta(x, t)|^2$  tienda a  $|t(k)|^2$ , lo cual se verifica; además, se observa en (4.4.8) y (4.4.9) que también en el límite de distancias cercanas al potencial,  $|\Psi_\delta(0, t)|^2$  tiende a  $|t(k)|^2$ .

En conclusión, aun cuando la diferencia formal entre los potenciales repulsivo y atractivo  $\delta$  reside en el signo de  $b$ , lo que modifica trivialmente el carácter del polo en el plano complejo (antiligado o ligado), ello tiene implicaciones profundas en el comportamiento de la densidad de probabilidad a distancias cortas del potencial y, a grandes distancias, en el signo del tiempo de retardo.

# Capítulo 5

## Potenciales rectangulares

Teniendo como antecedente lo hecho en el capítulo 4 se investiga la influencia de los estados ligados del potencial de pozo rectangular sobre los transitorios cuánticos de la función de onda transmitida resolviendo la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo con condición inicial de onda confinada a una región del espacio y con un potencial unidimensional de alcance finito frente al obturador; también se contrastan las diferencias en el comportamiento de la densidad de probabilidad para la barrera y el pozo rectangulares, así como se investiga cómo difiere la densidad de probabilidad para estados en el umbral de energía respecto a aquellos que se encuentran cerca del fondo del pozo.

La solución analítica del problema contiene una serie de los estados resonantes del potencial y de las funciones de Moshinsky evaluadas, entre otros parámetros, en los polos  $k_n$  de la amplitud de transmisión, lo cual hace que el estudio de la polología sea indispensable para conocer el efecto de los estados ligados sobre la propagación de las partículas.

Surgen complicaciones adicionales respecto al problema con  $V(x) = \delta(x)$  pues en este caso la polología era trivial ya que de la expresión analítica para  $t(k)$  el único polo es  $k_\beta = -i\beta$ . En cambio, en los potenciales de barrera y pozo rectangulares, aun cuando se cuenta con expresiones analíticas para la amplitud de transmisión, es necesario apelar a métodos numéricos para encontrar los polos de  $t(k)$  (de los cuales existe una cantidad infinita numerable).

### 5.1. Cálculo numérico de los polos

Para calcular las distribuciones de polos que se discutirán en la sección 5.2 se utilizó un programa escrito en FORTRAN y desarrollado por Sergio Cordero. Dado un potencial seccionalmente constante y los parámetros del problema, como la masa de la partícula y la energía de la onda incidente, el programa particiona el plano complejo en regiones rectangulares y calcula  $M_{11}$  según lo descrito en la sección 2.9. Posteriormente, en cada partición del plano complejo

busca las raíces de  $M_{11}$  utilizando el método de Newton-Raphson.

Por la simetría de los polos respecto al eje imaginario solamente es necesario aplicar el método en uno de los cuadrantes inferiores y en el eje imaginario.

## 5.2. Polología de los potenciales rectangulares

En esta sección se acomete el análisis de la ubicación de los polos y las “trayectorias” que éstos describen en el plano  $\lambda = kL$  al variar los parámetros del potencial ( $V_0$ ,  $L$ ,  $k$ ).

### 5.2.1. Barrera de potencial

Uno de los rasgos más relevantes de la polología de la barrera de potencial es que este potencial no admite ningún estado ligado, por lo cual los únicos polos posibles para esta configuración se encuentran en el eje imaginario negativo y en el tercer y cuarto cuadrantes, y que corresponden a los estados antiligados y las resonancias del sistema, respectivamente. Por la simetría ante la inversión temporal en la figura 5.1 solamente se muestra lo que ocurre en el cuarto cuadrante y en el eje imaginario del plano complejo, pues la distribución de polos es simétrica respecto al eje imaginario.

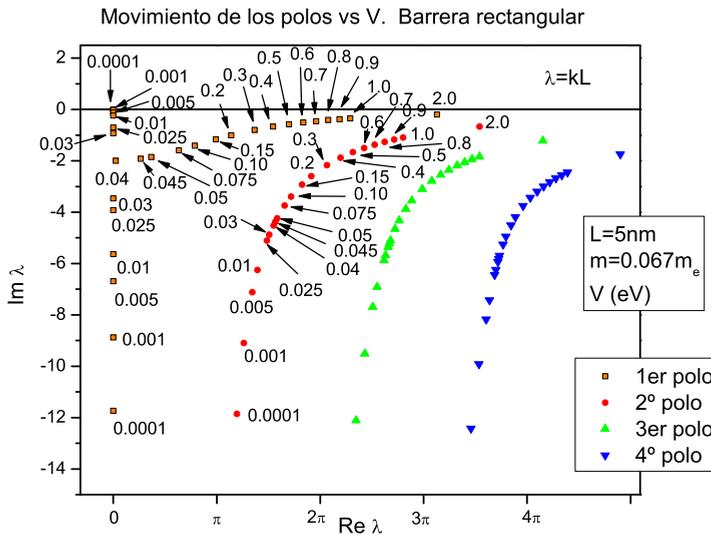


Figura 5.1: Movimiento de los polos de la barrera rectangular.

En el caso de la barrera de potencial se puede ver que el movimiento de los

polos depende del parámetro conocido como opacidad del sistema [27]

$$\alpha = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}}L, \quad (5.2.1)$$

que se interpreta como una medida de la oposición del sistema a que a través de él pase un paquete de ondas. De (5.2.1) se desprende que conforme aumentan la intensidad o el ancho del potencial es más difícil atravesar una barrera, lo cual es intuitivamente plausible. Para esta investigación se eligió tomar el ancho  $L$  del potencial como fijo y variar la intensidad  $V_0$ .

El primer polo de la distribución para valores grandes de  $V_0$  se pega asintóticamente al semieje  $\text{Re}(\lambda) > 0$ , y conforme  $V_0$  disminuye el primer polo se mueve hacia el eje imaginario hasta alcanzarlo para un cierto valor de  $V_0$ ; con base en la simetría respecto al eje vertical esto se puede interpretar como que los polos de los cuadrantes inferiores colisionaron en un punto crítico, después de lo cual, para valores aun menores de  $V_0$ , ambos polos continúan siendo antiligados pero uno de ellos se dirige al origen, convirtiéndolo en un punto de acumulación, y el otro a  $-\infty i$ .

En el caso del segundo polo y los subsecuentes, la trayectoria que siguen es la de una curva que para valores grandes de  $\alpha$  tiende a la parte positiva del eje real y que conforme disminuye la opacidad cambia suavemente su forma hasta tender a  $n\pi - \infty i$ , donde  $n$  es un entero.

Se observa, finalmente, que en el caso de la barrera se pueden tener dos polos antiligados (para  $\alpha \ll 1$ ), un solo polo antiligado (en realidad, un polo antiligado doble resultado de la colisión entre los polos de los cuadrantes inferiores) o ningún polo antiligado ( $\alpha \gg 1$ ).

### 5.2.2. Pozo de potencial

La característica más notable del pozo de potencial unidimensional  $V(x) = -V_0$  para  $x \in [0, L]$  (y de cualquier potencial atractivo unidimensional) es que siempre existe un estado ligado sin importar cuán superficial sea el potencial atractivo [31]; por lo tanto, la distribución de polos para este potencial es más rica y compleja que en el caso de la barrera de potencial puesto que se tendrán estados ligados, antiligados y resonancias distribuidos en el eje imaginario positivo, negativo y en los cuadrantes inferiores, respectivamente.

De manera similar a la barrera, la posición de los polos en el caso atractivo depende del parámetro [28]

$$S^2 = -\frac{2mV_0}{\hbar^2}L^2, \quad (5.2.2)$$

el cual es una medida adimensional (negativa) de la intensidad del potencial.

Las trayectorias de los polos difieren radicalmente de las que siguen los polos de la barrera. Nuevamente elegimos mantener constante  $L$  y variar  $V_0$ .

El primer polo del sistema, que siempre es ligado, sube por el eje imaginario positivo a medida que  $V_0$  aumenta; sobre el eje imaginario negativo a valores

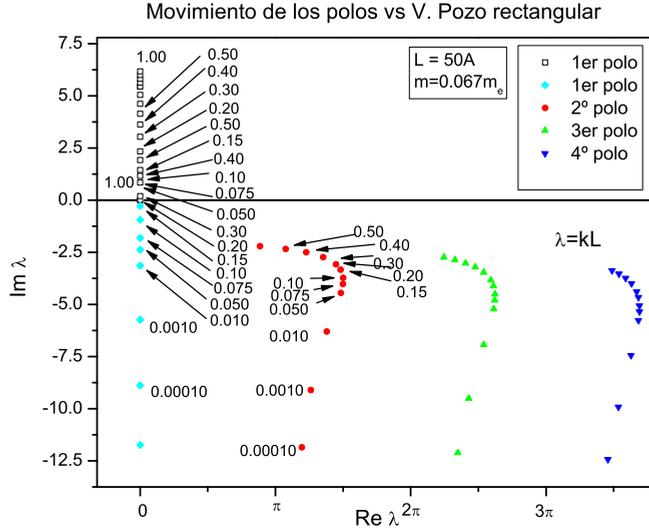


Figura 5.2: Movimiento de los polos del pozo rectangular.

pequeños de  $V_0$  es posible encontrar un primer polo antiligado, pero a medida que  $V_0$  crece este polo antiligado cruza el umbral de energía hasta convertirse en un polo ligado que siempre se mantiene por debajo del polo que desde el comienzo fue ligado.

Mientras tanto, para valores pequeños de  $V_0$ , el segundo polo y los subsiguientes tienden hacia  $n\pi - \infty i$  ( $n$  entero), pero al disminuir la profundidad del potencial, cada polo sigue una trayectoria suave hasta colisionar en  $\lambda = -2i$  con su reflexión respecto al eje imaginario; después de ello, al seguir incrementando  $V_0$ , un polo continúa su camino hacia arriba hasta convertirse en un polo ligado y el otro sigue hacia abajo y continúa siendo antiligado.

La dinámica de los polos en el caso del pozo de potencial es, entonces, más compleja que en el caso de la barrera ya que uno tiene que los polos antiligados pueden convertirse en polos ligados, así como que las resonancias terminan en el eje imaginario a medida que se incrementa la profundidad del potencial.

La distribución de los polos en el plano complejo es una propiedad del potencial y de sus parámetros. Otras configuraciones producirán distintas trayectorias de polos en el plano.

### 5.3. Solución analítica

Para un potencial unidimensional de alcance finito arbitrario se ha encontrado [32] la solución al problema de Moshinsky y el propósito de esta sección es deducir esa solución a través de la Transformada de Laplace, si bien es posible llegar a la solución por otros medios [33]. Se empieza considerando la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo

$$\mathcal{H}\Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) \quad (5.3.1)$$

sujeto a la condición inicial

$$\Psi(x, 0) = e^{ikx} H(-x) \quad (5.3.2)$$

donde

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \quad (5.3.3)$$

y  $V(x)$  es un potencial unidimensional de alcance finito arbitrario. Se hace nuevamente el cambio de variable

$$s = -\frac{ip^2}{\eta} \quad (5.3.4)$$

con  $\eta = 2m/\hbar$ . Las ecuaciones transformadas del problema en las regiones definidas por el potencial son

$$\begin{cases} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + p^2 \right) \tilde{\Psi}(x, p) = i\eta e^{ikx}, & x < 0 \\ \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + p^2 - V(x) \right) \tilde{\Psi}(x, p) = 0, & 0 < x < L \\ \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + p^2 \right) \tilde{\Psi}(x, p) = 0, & x > L \end{cases} \quad (5.3.5)$$

Para las regiones externas al potencial, omitiendo las soluciones que carecen de significado físico, la solución al problema es

$$\tilde{\Psi}(x, p) = \begin{cases} \frac{i\eta}{p^2 - k^2} e^{ikx} + C(p) e^{-ipx}, & x < 0 \\ D(p) e^{ipx}, & x > L \end{cases} \quad (5.3.6)$$

A lo largo de la región interna del potencial, la función de Green de onda saliente  $G^+(x, x', p)$  satisface la ecuación

$$\left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + p^2 - V(x) \right) G^+(x, x', p) = \delta(x - x'), \quad 0 < x < L \quad (5.3.7)$$

y las condiciones de onda saliente

$$\left. \frac{\partial}{\partial x} G^+(x, x', p) \right|_{x=0^-} = -ipG^+(0, x', p) \quad (5.3.8)$$

$$\left. \frac{\partial}{\partial x} G^+(x, x', p) \right|_{x=L^+} = ipG^+(L, x', p) \quad (5.3.9)$$

Aplicando la fórmula de Green a  $G^+(x, x', p)$  y  $\tilde{\Psi}(x, p)$  se puede escribir a este último como

$$\tilde{\Psi}(x, p) = \frac{\eta}{k-p} G^+(0, x, p), \quad 0 < x < L \quad (5.3.10)$$

de lo cual se observa que  $D(p)$  es susceptible de ser escrito como

$$D(p, k) = \frac{\eta}{k-p} G^+(0, L, p) e^{-ipL} \quad (5.3.11)$$

Para encontrar la solución en la región externa se considera la continuación analítica de  $\tilde{\Psi}(x, p)$  sobre la variable  $p$  al plano complejo  $z$ . Se considera la integral de línea

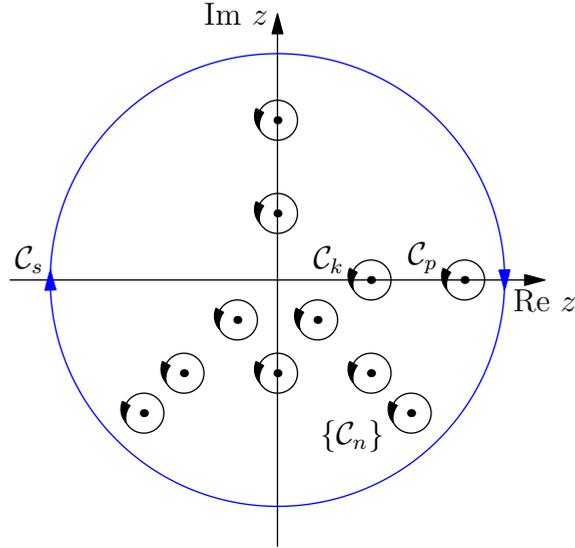


Figura 5.3: Contorno de integración en el plano  $z$ .

$$\oint_{\mathcal{C}} z \frac{D(z, k)}{z-p} dz, \quad (5.3.12)$$

que se anula en virtud del Teorema de Cauchy, donde  $\mathcal{C} = \mathcal{C}_s + \mathcal{C}_k + \mathcal{C}_p + \sum_n \mathcal{C}_n$  como se ve en la figura 5.3. Como en la sección 2.8 es posible mostrar que a

medida que  $R \rightarrow \infty$ , la contribución a la integral de  $\mathcal{C}_s$  se hace arbitrariamente pequeña, por lo que la integral en (5.3.12) puede escribirse como

$$\oint_{\mathcal{C}_p} z \frac{D(z, k)}{z - p} dz + \oint_{\mathcal{C}_k} z \frac{D(z, k)}{z - p} dz + \sum_n \oint_{\mathcal{C}_n} z \frac{D(z, k)}{z - p} dz = 0. \quad (5.3.13)$$

Las últimas dos integrales se expresan en términos del propagador y gracias a ello pueden evaluarse mediante el teorema del residuo y (2.5.15) como

$$\oint_{\mathcal{C}_p} z \frac{D(z, k)}{z - p} dz = 2\pi i p D(p, k) \quad (5.3.14)$$

$$\oint_{\mathcal{C}_k} z \eta \frac{G^+(0, L, z) e^{-izL}}{(z-p)(k-z)} dz = -2\pi i k \eta \frac{G^+(0, L, k) e^{-ikL}}{k-p} \quad (5.3.15)$$

$$\oint_{\mathcal{C}_n} z \eta \frac{G^+(0, L, z) e^{-izL}}{(z-p)(k-z)} dz = 2\pi i k_n \eta \frac{u_n(0) u_n(L) e^{-ik_n L}}{2k_n (k_n - p) (k - k_n)} \quad (5.3.16)$$

Entonces,

$$pD(p, k) = k\eta \frac{G^+(0, L, k) e^{-ikL}}{k-p} + \eta \sum_n \frac{u_n(0) u_n(L) e^{-ik_n L}}{2(p - k_n) (k - k_n)}. \quad (5.3.17)$$

Por lo tanto, la transformada de Laplace de la solución del problema en la región transmitida es

$$\tilde{\Psi}(x, p) = k\eta \frac{G^+(0, L, k) e^{-ikL+ipx}}{p(k-p)} + \eta \sum_n \frac{u_n(0) u_n(L) e^{-ik_n L+ipx}}{2p(p - k_n) (k - k_n)}. \quad (5.3.18)$$

Tomando la transformada inversa de Laplace de (5.3.18) resulta

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &= \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} \tilde{\Psi}(x, s) e^{st} ds = \\ &= -\frac{1}{\pi\eta} \int_{\mathcal{C}} p \tilde{\Psi}(x, p) \exp\left(-i \frac{\hbar p^2}{2m} t\right) dp, \end{aligned} \quad (5.3.19)$$

donde  $\mathcal{C}$  es el contorno de integración indicado en la figura 5.4.

El primer término de  $\tilde{\Psi}(x, p)$  puede evaluarse utilizando (1.4.15) como

$$\begin{aligned} -\frac{k}{\pi} G^+(0, L, k) e^{-ikL} \int_{\mathcal{C}} \frac{e^{ipx}}{k-p} \exp\left(-i \frac{\hbar p^2}{2m} t\right) dp = \\ 2ik G^+(0, L, k) e^{-ikL} M(x, k, t); \end{aligned} \quad (5.3.20)$$

las integrales que corresponden a polos resonantes y antiligados se evalúan separadamente cambiando el contorno  $\mathcal{C}$  por el eje real como en la figura 5.5.

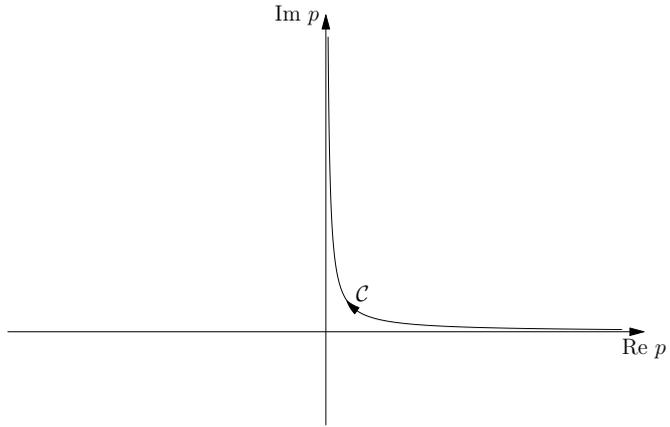


Figura 5.4: Contorno de integración para calcular  $\Psi(x, t)$ .

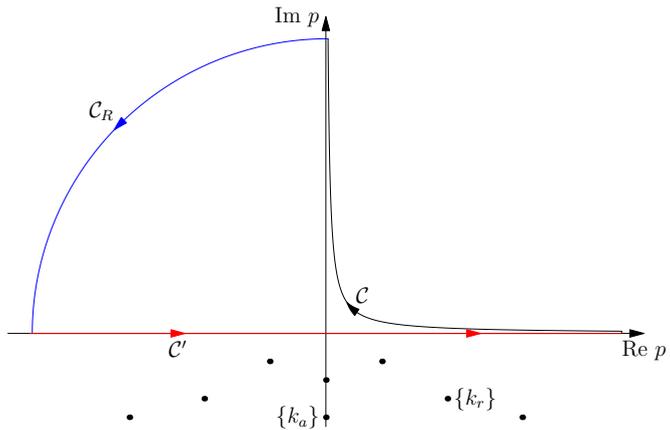


Figura 5.5: Evaluación de la contribución de un polo antiligado o resonante a  $\Psi(x, t)$ .

Entonces, como la contribución de la integral sobre  $C_R$  se anula en el límite en que el radio aumenta indefinidamente,

$$\begin{aligned}
& -\frac{1}{2\pi} \frac{u_n(0)u_n(L)}{k-k_n} e^{-ik_n L} \int_C \frac{e^{ipx}}{p-k_n} \exp\left(-i\frac{\hbar p^2}{2m}t\right) dp = \\
& \frac{1}{2\pi} \frac{u_n(0)u_n(L)}{k-k_n} e^{-ik_n L} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{ipx}}{p-k_n} \exp\left(-i\frac{\hbar p^2}{2m}t\right) dp, \quad (5.3.21)
\end{aligned}$$

que por la ecuación (1.6.10) implica que

$$\begin{aligned}
& -\frac{1}{2\pi} \frac{u_n(0)u_n(L)}{k-k_n} e^{-ik_n L} \int_C \frac{e^{ipx}}{p-k_n} \exp\left(-i\frac{\hbar p^2}{2m}t\right) dp = \\
& \frac{1}{2i} \frac{u_n(0)u_n(L)}{k-k_n} e^{-ik_n L} \exp\left(i\frac{mx^2}{2\hbar t}\right) w(iy_{k_n}) = \\
& -i \frac{u_n(0)u_n(L)}{k-k_n} e^{-ik_n L} M(x, k_n, t) \quad \text{Im}(k_n) < 0. \quad (5.3.22)
\end{aligned}$$

Las contribuciones de los estados ligados se evalúan utilizando el contorno de la figura 5.6.

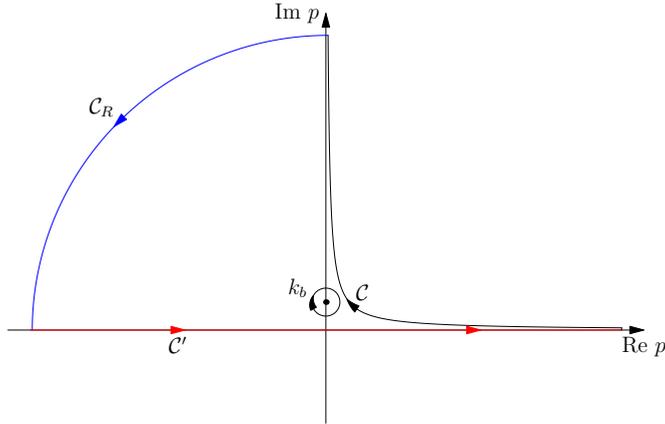


Figura 5.6: Contribución de los estados ligados a  $\Psi(x, t)$ .

Por los teoremas de Cauchy y del residuo,

$$\begin{aligned}
& \int_C \frac{e^{ipx}}{p-k_b} \exp\left(-i\frac{\hbar p^2}{2m}t\right) dp = \\
& 2\pi i \exp\left(ik_b x - i\frac{\hbar k_b^2}{2m}t\right) - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{ipx}}{p-k_b} \exp\left(-i\frac{\hbar p^2}{2m}t\right) dp \quad \text{Im}(k_b) > 0, \quad (5.3.23)
\end{aligned}$$

y por (1.6.18),

$$\int_{\mathcal{C}} \frac{e^{ipx}}{p - k_b} \exp\left(-i \frac{\hbar p^2}{2m} t\right) dp = 2\pi i \exp\left(ik_b x - i \frac{\hbar k_b^2}{2m} t\right) - \pi i \exp\left(i \frac{mx^2}{2\hbar t}\right) w(-iy_{k_b}) \quad \text{Im}(k_b) > 0, \quad (5.3.24)$$

de donde

$$\begin{aligned} -\frac{1}{2\pi} \frac{u_b(0)u_b(L)}{k - k_b} e^{-ik_b L} \int_{\mathcal{C}} \frac{e^{ipx}}{p - k_b} \exp\left(-i \frac{\hbar p^2}{2m} t\right) dp = \\ \frac{i}{2} \frac{u_b(0)u_b(L)}{k - k_b} e^{-ik_b L} \exp\left(i \frac{mx^2}{2\hbar t}\right) w(-iy_{k_b}) - i \frac{u_b(0)u_b(L)}{k - k_b} \times \\ e^{-ik_b L} \exp\left(ik_b x - i \frac{\hbar k_b^2}{2m} t\right) \quad \text{Im}(k_b) > 0. \end{aligned} \quad (5.3.25)$$

Como en el capítulo 4, se adopta la convención de definir una función  $M(x, k_b, t)$  como

$$\begin{aligned} M(x, k_b, t) = -\frac{1}{2} \exp\left(i \frac{mx^2}{2\hbar t}\right) w(-iy_{k_b}) + \exp\left(ik_b x - i \frac{\hbar k_b^2}{2m} t\right) = \\ \frac{1}{2} \exp\left(i \frac{mx^2}{2\hbar t}\right) w(iy_{k_b}), \end{aligned} \quad (5.3.26)$$

que coincide con (4.1.28). Entonces,

$$\begin{aligned} -\frac{1}{2\pi} \frac{u_b(0)u_b(L)}{k - k_b} e^{-ik_b L} \int_{\mathcal{C}} \frac{e^{ipx}}{p - k_b} \exp\left(-i \frac{\hbar p^2}{2m} t\right) dp = \\ -i \frac{u_b(0)u_b(L)}{k - k_b} e^{-ik_b L} M(x, k_b, t) \quad \text{Im}(k_b) > 0. \end{aligned} \quad (5.3.27)$$

Por lo tanto, la solución analítica del problema puede escribirse como

$$\Psi(x, t) = 2ikG^+(0, L, k)e^{-ikL} M(x, k, t) - i \sum_n \frac{u_n(0)u_n(L)e^{-ik_n L}}{k - k_n} M(x, k_n, t). \quad (5.3.28)$$

donde  $\sum_n$  indica suma sobre todas las resonancias del sistema, evaluadas con la función  $M$  que les corresponda.

Finalmente, por (2.7.5), la solución en la región externa es

$$\Psi(x, k, t) = t(k) M(x, k, t) - i \sum_n \frac{u_n(0)u_n(L)}{k - k_n} e^{-ik_n L} M(x, k_n, t). \quad x \geq L \quad (5.3.29)$$

Procediendo de manera similar es posible hallar la solución en la región del potencial:

$$\Psi(x, k, t) = \phi(x, k) M(0, k, t) - i \sum_n \frac{u_n(0)u_n(x)}{k - k_n} M(0, k_n, t), \quad 0 \leq x \leq L \quad (5.3.30)$$

donde el índice  $n$  se refiere a todos los polos del sistema y  $\phi(x, k)$  a la solución estacionaria de la ecuación de Schrödinger.

Es significativo notar que las soluciones enunciadas son desarrollos en términos de estados resonantes y funciones de Moshinsky así como la semejanza formal entre (4.1.29) y (5.3.29), ya que en ambas se aprecia una contribución cuasimonocromática y una contribución resonante.

## 5.4. Amplitud de transmisión

La amplitud de transmisión de los potenciales de barrera y pozo rectangulares puede expresarse en forma cerrada por (2.8.7), que simplificado resulta en

$$t(k) = -\frac{4k\kappa \exp(-ikL)}{-4k\kappa \cos(\kappa L) + 2ik^2 \sin(\kappa L) + 2i\kappa^2 \sin(\kappa L)}, \quad (5.4.1)$$

donde  $\kappa$  se define como en (2.8.10). Ocurre una transmisión igual a la unidad en valores de  $\kappa$  tales que  $\kappa_i L = i\pi$ , esto es:

$$E_j = \pm V_0 + \frac{j^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2}. \quad (5.4.2)$$

Esto ocurre para valores reales de  $\kappa$ , para los cuales  $E$  es positivo. Éstos no son los polos complejos  $E_n$  de la amplitud de transmisión definidos en (2.2.5); sin embargo, los dos fenómenos están relacionados pues usualmente existe un polo complejo cerca de la energía en que tiene lugar la resonancia, mientras que  $\Gamma_n$  da información sobre el ancho de la misma.

El coeficiente de transmisión en términos de  $E$  y  $V_0$  es

$$|t(E)|^2 = \frac{4E(E \mp V_0)}{4E(E \mp V_0) + V_0^2 \sin^2 \left( \sqrt{2m(E \mp V_0)} \frac{L}{\hbar} \right)}, \quad (5.4.3)$$

donde el signo superior vale para la barrera y el inferior para el pozo.

## 5.5. Condición inicial de onda reflejada

Es posible modificar ligeramente la condición inicial (5.3.2) imponiendo condiciones iniciales de onda reflejada, es decir,

$$\Psi(x, 0) = (e^{ikx} - e^{-ikx})H(-x). \quad (5.5.1)$$

Esto tiene la ventaja de que  $\Psi(x, 0)$  se anula en el origen, lo cual evita una discontinuidad de salto en la solución (5.5.2) a  $t = 0$ . Además, acelera la convergencia del término resonante de la solución.

La solución del problema en la región de transmisión, con la condición inicial (5.5.1) es

$$\Psi(x, k, t) = t(k) M(y_k) - t(-k) M(y_{-k}) - \sum_n 2ik \frac{u_n(0)u_n(L)}{k^2 - k_n^2} e^{-ik_n L} M(y_{k_n}). \quad (5.5.2)$$

## 5.6. Resonancia en el dominio temporal

Se ha estudiado con el presente formalismo el problema de la evolución dinámica en presencia de un potencial de barrera rectangular de altura  $V_0$  con condición inicial de onda reflejada (5.5.1) [34, 35] encontrando que bajo ciertas condiciones existe, en la región externa al potencial, un pico en la densidad de probabilidad llamado resonancia en el dominio temporal, que es la evidencia más temprana de tunelaje en el régimen transitorio.

La resonancia en el dominio temporal es un comportamiento transitorio que consiste en un pico en la densidad de probabilidad en la región de transmisión; puede caracterizarse por el valor del tiempo  $t_p$  en el que ocurre el pico así como por su ancho  $\Delta t$ . En la figura 5.7 se reproduce la figura 1 de [34] (sin la normalización al flujo incidente) para ilustrar el concepto de la resonancia en el dominio temporal.

La componente resonante de la solución analítica es la contribución más importante a la resonancia en el dominio temporal, lo cual ocurre para una condición inicial de obturador absorbente o reflejante. También se sabe que la resonancia en el dominio temporal no existe para  $\alpha < 1$  y que la primera resonancia  $k_1 = a_1 - ib_1$  juega un papel de la mayor importancia en la descripción de este comportamiento transitorio.

## 5.7. Transitorios cuánticos

Esta sección tiene como objetivo estudiar los transitorios cuánticos de la onda transmitida para el pozo rectangular. Las contribuciones a la densidad de probabilidad se analizan en términos de las contribuciones monocromática, resonante y la interferencia entre ellas.

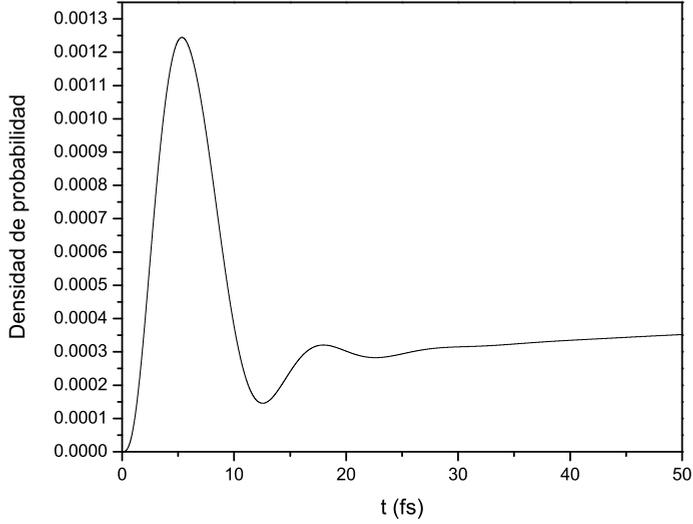


Figura 5.7:  $V_0 = 0.3eV$ ,  $x = L = 50\text{\AA}$ ,  $m = 0.067m_e$ ,  $E = 0.01eV$ .

Se toma la configuración  $V = -0.15eV$ ,  $L = 50\text{\AA}$ ,  $E = 0.05eV$  y  $m = 0.067m_e$ , que posee un polo ligado  $k_b = 0.038541454\text{\AA}^{-1}i$ , un polo antiligado  $k_a = -0.018903890\text{\AA}^{-1}i$  y el resto de sus polos son resonancias.

Las figuras 5.8 indican que en las cercanías del potencial la función de onda exhibe un comportamiento oscilatorio, que recuerda lo que ocurre en la figura 4.6 a  $x = 0$ , donde la contribución más importante a la densidad de probabilidad viene del término de interferencia. Conforme crece la distancia del punto de observación al potencial la contribución del término de interferencia reduce su amplitud, mientras que la contribución resonante es despreciable salvo a tiempos cortos, lo cual también se observó en los transitorios del potencial  $\delta$ .

Para investigar la influencia de los estados ligados sobre los transitorios cuánticos se aproxima la densidad de probabilidad con  $k_b$ ,  $k_a$  y ambos polos imaginarios y se comparan con la solución calculada con 636 polos.

El análisis de las figuras 5.9 revela que  $k_b$  es el polo que tiene la mayor influencia sobre la densidad de probabilidad, pues la aproximación a la solución con ese solo polo reproduce muy bien la posición de las oscilaciones del resultado exacto, mas no su amplitud; la aproximación con  $k_a$  es una contribución del tipo difracción en el tiempo y no reproduce el comportamiento oscilatorio de amplitud casi constante de la solución exacta y, sin embargo, la aproximación con los polos imaginarios reproduce muy bien la estructura de la solución exacta al punto de que no pueden discernirse de la gráfica, excepto a tiempos cortos,

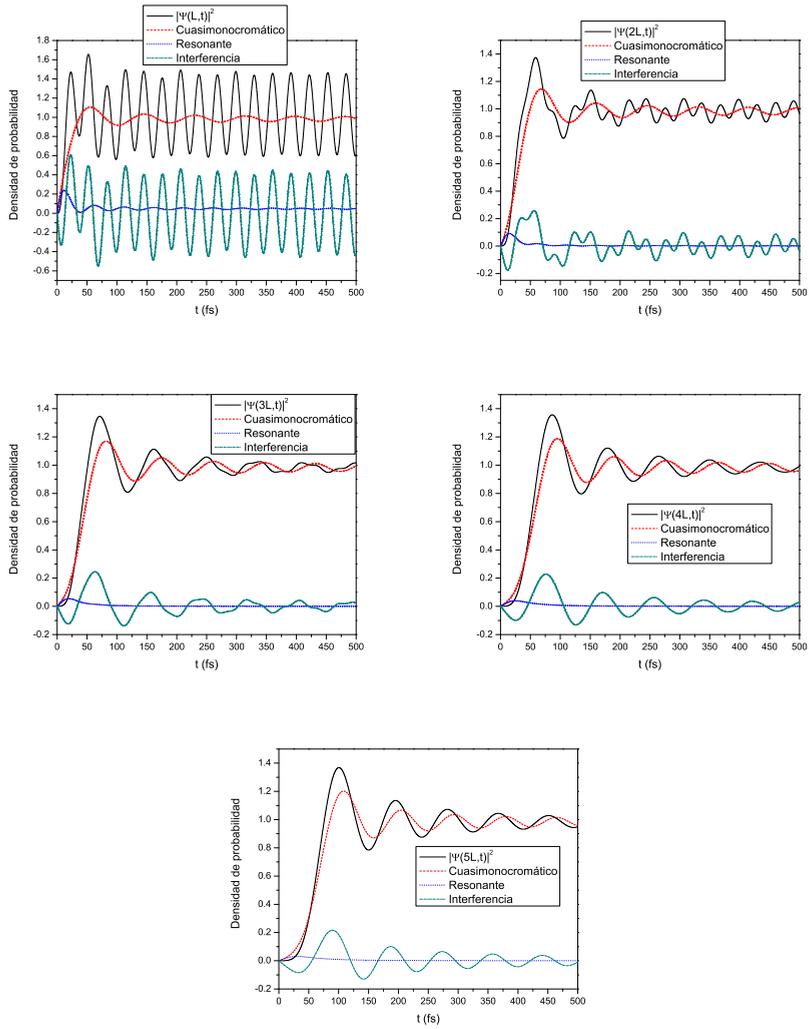


Figura 5.8:  $|\Psi(x_0, t)|^2$  para el pozo de potencial ( $V = -0.15eV$ ,  $L = 50\text{\AA}$ ,  $E = 0.05eV$ ,  $m = 0.067m_e$ , 636 polos) para  $x_0 = L, 2L, 3L, 4L$  y  $5L$ .

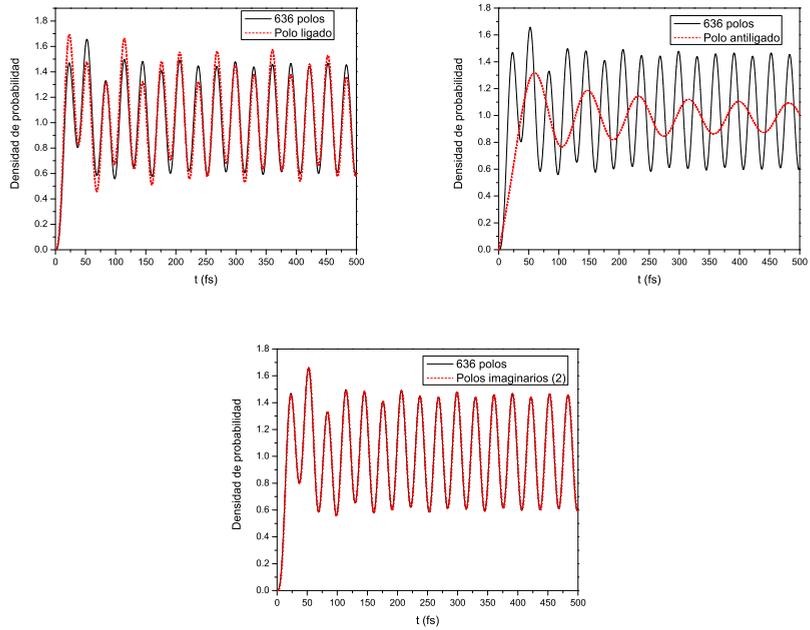


Figura 5.9: Influencia de  $k_b$ ,  $k_a$  y de los polos imaginarios sobre los transitorios de  $|\Psi(L, t)|^2$  ( $V = -0.15eV$ ,  $L = 50\text{\AA}$ ,  $x = L$ ,  $E = 0.05eV$ ,  $m = 0.067m_e$ ).

en los que los polos que no fueron considerados juegan un papel más importante que a tiempos largos.

Este comportamiento puede explicarse por el siguiente argumento: en (5.5.2) la contribución de los polos del sistema está modulada por el factor  $e^{-ik_n L}$ , por lo que los polos con  $\text{Im}(k_n) < 0$  contribuyen cada vez menos conforme el polo descendiende en el plano complejo y así dominan los polos ligados.

Para completar este estudio se procede a comparar la amplitud de transmisión del problema calculada analíticamente (método de la matriz de transferencia) con la expresada en (2.8.2), que también contiene el término  $e^{-ik_n L}$ , utilizando los polos imaginarios.

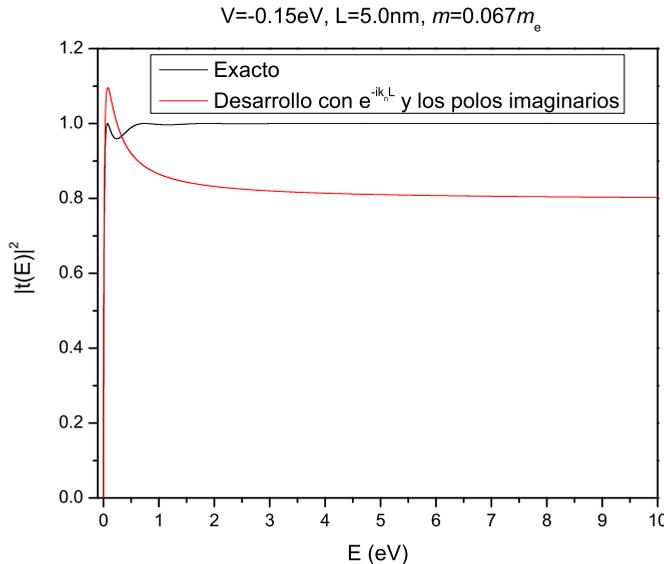


Figura 5.10: Coeficiente de transmisión del pozo rectangular.

El cálculo analítico de  $|t|^2$  revela que el coeficiente de transmisión cuenta con muy poca estructura pues solamente tiene un máximo claramente definido, mientras que el resto de las resonancias presentan un alto grado de traslape. La aproximación (2.8.2) con los polos imaginarios resulta buena a valores pequeños de la energía, alcanza a reproducir la resonancia aislada que se presenta pero comienza a presentar discrepancias importantes a partir del máximo.

Como se observa en la figura 5.11, en el caso repulsivo el comportamiento de la densidad de probabilidad es totalmente distinto al del caso del pozo de potencial.

El trabajo hecho con el potencial  $\delta$  sugiere que estas diferencias en los transitorios de la densidad de probabilidad pueden explicarse por la presencia

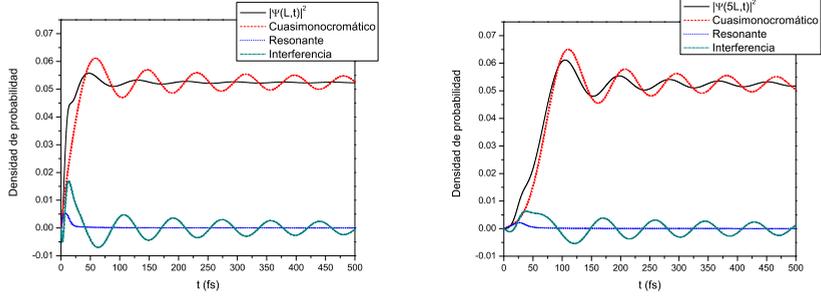


Figura 5.11:  $|\Psi(x_0, t)|^2$  para la barrera de potencial ( $V = 0.15eV$ ,  $L = 50\text{\AA}$ ,  $E = 0.05eV$ ,  $m = 0.067m_e$ , 636 polos) para  $x_0 = L$  y  $5L$ .

del polo ligado en el caso del pozo de potencial.

## 5.8. Umbral de energía

Ahora se estudia el comportamiento del pozo de potencial del mismo ancho y de profundidad  $V_0 = 0.3eV$ . Este sistema posee dos estados ligados en  $k_1 = 0.014891836\text{\AA}^{-1}i$  y  $k_2 = 0.060824399\text{\AA}^{-1}i$  y resonancias, y se elige este sistema porque uno de sus estados ligados está cerca del umbral, lo cual reviste especial importancia para esta investigación.

En la figura 5.12 se observa que la contribución del término de interferencia a la densidad de probabilidad es la que aporta las oscilaciones de mayor amplitud, mientras que la contribución resonante consta de oscilaciones pequeñas que se ven poco reflejadas en la densidad de probabilidad.

En primer lugar se observa que el estado ligado reproduce las posiciones de las oscilaciones así como su ancho promedio, pero la estructura fina de las mismas solamente se obtiene considerando el polo antiligado, que reproduce las oscilaciones de menor amplitud y que le confieren estructura a  $|\Psi(L, t)|^2$ .

La aproximación con los dos polos reproduce muy bien el perfil de la densidad de probabilidad, lo cual nos dice que las resonancias en este caso pueden despreciarse.

## 5.9. Dependencia de la energía de la onda inicial

A medida que la energía de la onda confinada inicialmente en el problema del obturador cuántico se incrementa, el comportamiento oscilatorio y periódico de la onda en la vecindad del potencial se hace más evidente. Esto se demuestra mediante el caso estudiado con  $V_0 = 0.15eV$ .

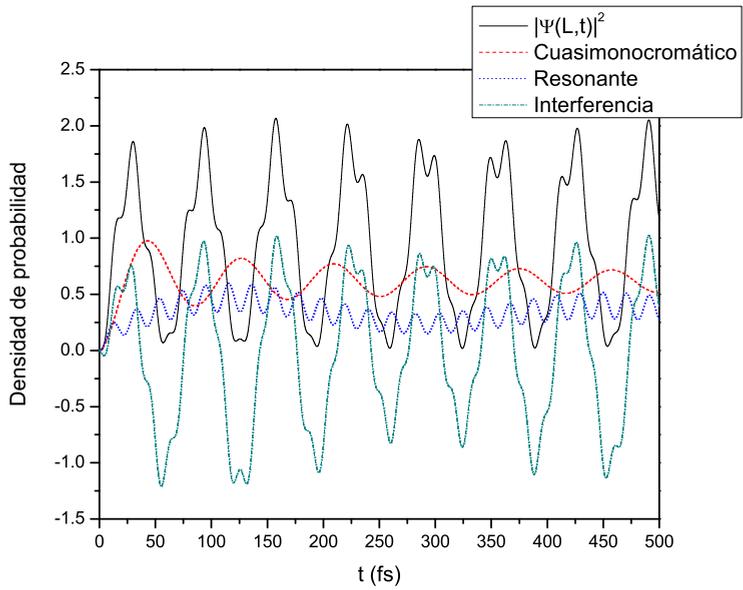


Figura 5.12:  $|\Psi(L,t)|^2$  para el estudio del comportamiento en el umbral ( $V = 0.30eV$ ,  $L = 50\text{\AA}$ ,  $x = L$ ,  $E = 0.05eV$ ,  $m = 0.067m_e$ , 636 polos).

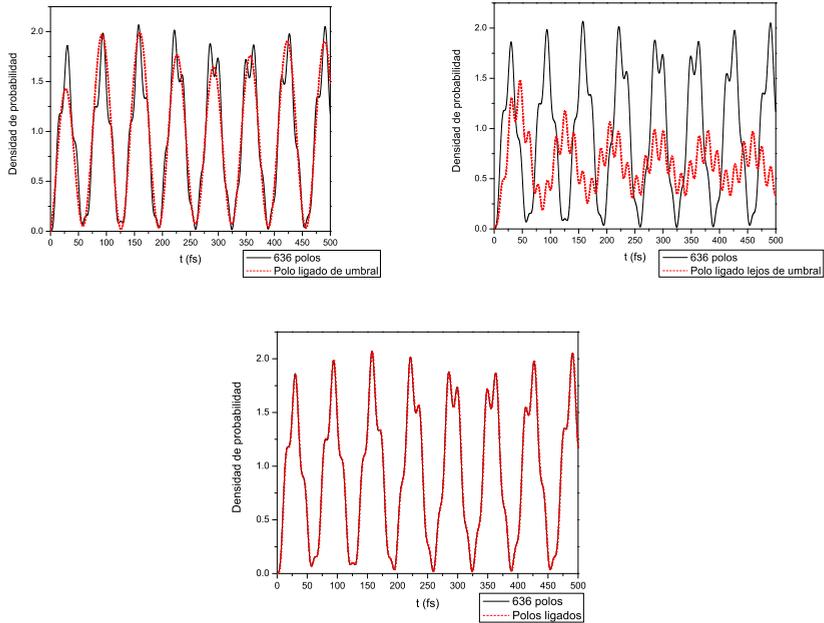


Figura 5.13:  $|\Psi(L, t)|^2$  exacta comparada con la solución calculada con el estado ligado cercano al umbral, con el estado ligado lejano al umbral y con ambos ( $V = 0.30eV$ ,  $L = 50\text{\AA}$ ,  $x = L$ ,  $E = 0.05eV$ ,  $m = 0.067m_e$ , 636 polos).

Las figuras 5.14 muestran que el comportamiento oscilatorio periódico se presenta siempre, independientemente de la energía de la onda inicial, la cual, sin embargo, modifica la frecuencia y amplitud de las oscilaciones.

## 5.10. Tiempos de retardo y de transmisión

Para terminar de contrastar las diferencias entre el pozo y la barrera de  $V_0 = 0.15eV$  se estudia el tiempo de retardo dinámico para estos dos potenciales, encontrando que el tiempo de retardo para potenciales de la forma  $V(x) = \pm V_0$  no es necesariamente simétrico respecto al eje  $x$  como lo predice (4.5.2) con el potencial  $\delta$ .

De (3.1.6) y (5.4.1) es posible calcular el tiempo de retardo en la barrera y el pozo de potenciales [36] como

$$\tau_\theta = \frac{m}{\hbar k \kappa} \left( \frac{k_0^4 \sinh(2\kappa L) - 2\kappa L k^2 (k^2 - \kappa^2)}{4k^2 \kappa^2 + k_0^4 \sinh^2(\kappa L)} \right) - \frac{mL}{\hbar k} \quad (5.10.1)$$

donde  $\kappa$  se redefine como

$$\kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 \mp E)}}{\hbar} \quad (5.10.2)$$

(- para la barrera y + para el pozo) y

$$k_0 = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}}. \quad (5.10.3)$$

También es posible calcular el tiempo de transmisión de Hartman  $\tau_H$  por (3.2.1). Como se apunta en [35], el efecto Hartman se presenta en la barrera rectangular de potencial; en la figura 5.16 se investiga si el fenómeno se presenta en un pozo de potencial, encontrando que no se da el efecto Hartman sino una serie de oscilaciones ascendentes.

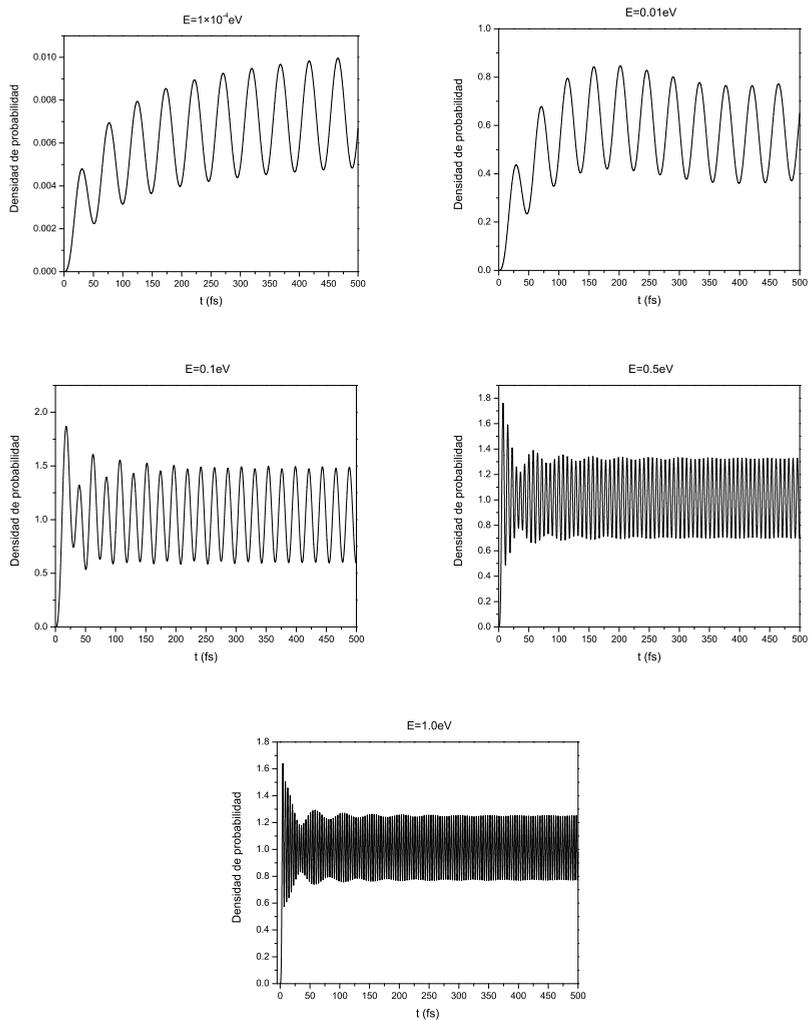


Figura 5.14: Dependencia de la energía inicial de los transitorios de  $|\Psi(L, t)|^2$  para la configuración  $V = -0.15 \text{ eV}$ ,  $L = 50 \text{ \AA}$ ,  $m = 0.067 m_e$ ,  $x = L$  (636 polos)

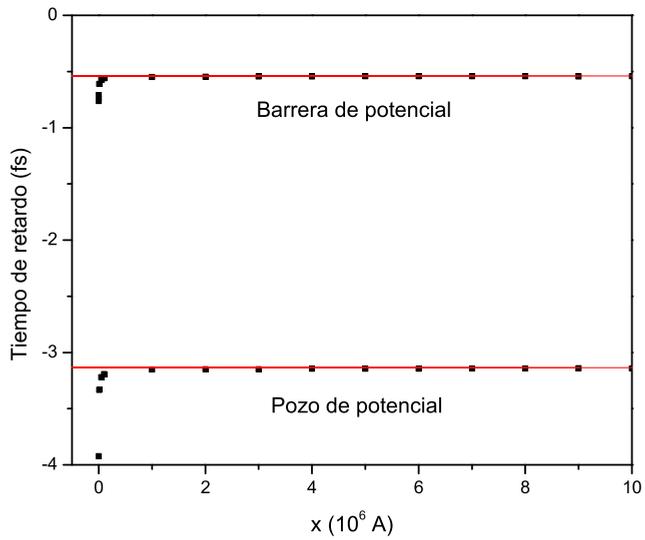


Figura 5.15: Tiempo de retardo dinámico para los potenciales  $V = \pm 0.15eV$ ,  $L = 50\text{\AA}$ ,  $E = 0.05eV$ ,  $m = 0.067m_e$ , (636 polos).

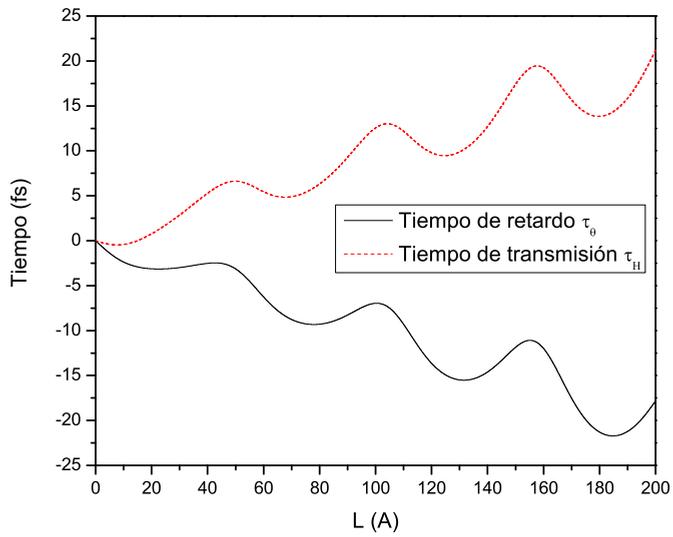


Figura 5.16: Tiempos de retardo  $\tau_\theta$  y de transmisión  $\tau_H$  del potencial  $V = -0.15eV$ ,  $E = 0.05eV$ ,  $m = 0.067m_e$ .

# Conclusiones

En la presente tesis se ha expuesto el papel que desempeñan los estados ligados en la propagación de las ondas de materia en una dimensión considerando una condición inicial de obturador cuántico.

Se ha estudiado el comportamiento de la densidad de probabilidad en los casos atractivo y repulsivo de un potencial  $\delta$  de Dirac. La aportación principal de esta investigación consiste en señalar que el polo ligado de un potencial atractivo tiene el efecto, a cortas distancias del potencial, de inducir una oscilación periódica en la densidad de probabilidad, misma que no se amortigua en el tiempo sino con la distancia al potencial. Este efecto se debe a la interacción entre el estado ligado del potencial y la energía de la onda inicialmente confinada ya que se ha visto que el término de interferencia entre las contribuciones cuasimonocromática y resonante a la densidad de probabilidad es el responsable del comportamiento oscilatorio; el fenómeno encontrado se interpreta como un atrapamiento de una parte de la onda, mismo que se atenúa a medida que el punto de observación se aleja del potencial.

Los transitorios del potencial  $\delta$  repulsivo se comportan, a cortas distancias del potencial, en forma muy diferente a los de su contraparte atractiva, pues presentan oscilaciones amortiguadas que convergen a  $t(k)$ ; es a grandes distancias del potencial cuando los transitorios de los potenciales atractivo y repulsivo se asemejan, ya que ambos presentan una forma tipo difracción en el tiempo y el rasgo que los distingue es un adelanto o retraso, respectivamente, respecto a los transitorios del caso libre.

El trabajo con el potencial  $\delta$  sirvió como motivación para abordar el caso físicamente más rico de los potenciales rectangulares. Nuevamente se observó el fenómeno de atrapamiento en los potenciales atractivos, que se debe a la interferencia entre las contribuciones monocromática y resonante de la solución, y que disminuye conforme crece la distancia del punto de observación al potencial; también se confirmó que el fenómeno no existe en los potenciales repulsivos. Se ha encontrado también que la posición de los transitorios depende de los polos ubicados cerca del umbral de energía, y que los detalles finos de la estructura de los transitorios dependen de los estados ligados que se encuentran más alejados del umbral. Además, en el caso atractivo, el comportamiento oscilatorio no amortiguado en las cercanías del potencial se presenta para un intervalo muy amplio de energías de la onda inicial; el efecto de variar el valor de esa

energía es modificar la amplitud y la frecuencia de la onda atrapada. También se encontró que en el pozo de potencial no se observa el efecto Hartman.

El trabajo con el potencial  $\delta$  atractivo implicó proponer una definición de  $M(x, q, t)$  para  $\text{Im}(q) > 0$ , lo cual representa una aportación ya que en la literatura solamente se ha considerado la evaluación de esta función para  $\text{Im}(q) < 0$ .

Finalmente, y de lo visto en los capítulos 4 y 5, los comportamientos observados son independientes del modelo utilizado para realizar los cálculos y del tipo de condición inicial utilizada.

# Bibliografía

- [1] S. T. THORNTON and J. B. MARION, *Classical Dynamics of particles and systems*, Thomson, fifth edition, 2004.
- [2] A. DEL CAMPO, G. GARCÍA-CALDERÓN, and J. G. MUGA, *Physics Reports* **476**, 1 (2009).
- [3] M. MOSHINSKY, *Phys. Rev.* **88**, 625 (1952).
- [4] G. GARCÍA-CALDERÓN and R. PÉREZ PASCUAL, editors, *Apuntes del curso de Mecánica Cuántica de Marcos Moshinsky*, Las prensas de Ciencias, 2008.
- [5] L. DE LA PEÑA, *Introducción a la Mecánica Cuántica*, Fondo de Cultura Económica, Tercera edition, 2006.
- [6] M. ABRAMOWITZ and I. A. STEGUN, *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*, Dover, New York, ninth dover printing, tenth gpo printing edition, 1964.
- [7] F. A. JENKINS and H. E. WHITE, *Fundamentals of Optics*, McGraw-Hill, fourth edition, 1976.
- [8] E. H. HAUGE and J. A. STØVNENG, *Rev. Mod. Phys.* **61**, 917 (1989).
- [9] M. R. SPIEGEL, *Variable Compleja*, pp. 185–186, Mc-Graw-Hill, 1991.
- [10] V. N. FADDEYEVA and N. M. TERENT'EV, *Tables of values of the function  $w(z) = e^{-z^2} [1 + (2i/\sqrt{\pi}) \int_0^z e^{t^2} dt]$  for complex argument*, Pergamon Press, London, translated from the Russian by D. G. Fry and B. A. Hons. edition, 1961.
- [11] W. GAUTSCHI, *SIAM Journal on Numerical Analysis* **7**, 187 (1970).
- [12] J. A. C. WEIDEMAN, *SIAM Journal on Numerical Analysis* **31**, 1497 (1994).
- [13] A. CUYT, V. B. PETERSEN, B. VERDONK, H. WAADELAND, and W. B. JONES, *Handbook of Continued Fractions for Special Functions*, Springer, 2008.

- [14] G. P. M. POPPE and C. M. J. WIJERS, *ACM Trans. Math. Softw.* **16**, 38 (1990).
- [15] G. P. M. POPPE and C. M. J. WIJERS, *ACM Trans. Math. Softw.* **16**, 47 (1990).
- [16] G. GAMOW, *Z. Phys.* **51**, 204 (1928).
- [17] G. GAMOW and C. L. CRITCHFIELD, *Theory of Atomic Nucleus and Nuclear Energy Sources*, pp. 156–169, Oxford University Press, 1949.
- [18] M. RAZAVY, *Quantum Theory of Tunneling*, World Scientific, 2003.
- [19] G. GARCÍA-CALDERÓN and R. PEIERLS, *Nuclear Physics A* **265**, 443 (1976).
- [20] G. GARCÍA-CALDERÓN, *Nuclear Physics A* **261**, 130 (1976).
- [21] P. A. M. DIRAC, *The principles of Quantum Mechanics*, Oxford University Press, fourth edition, 1957.
- [22] J. R. TAYLOR, *Scattering theory: The Quantum Theory on Nonrelativistic Collisions*, John Wiley & Sons, 1972.
- [23] R. G. NEWTON, *The Scattering Theory of Waves and Particles*, Dover Publications, Inc, second edition, 1982.
- [24] E. MERZBACHER, *Quantum Mechanics*, John Wiley & Sons, Inc., Third edition, 1998.
- [25] R. DE LA MADRID, G. GARCIA-CALDERON, and J. G. MUGA, *Czech. J. Phys.* **55**, 1141 (2005).
- [26] *Quantum Physics*, John Wiley & Sons, third edition, 2003.
- [27] G. GARCÍA-CALDERÓN and J. VILLAVICENCIO, *Physical Review A (Atomic, Molecular, and Optical Physics)* **71**, 024103 (2005).
- [28] D. W. L. SPRUNG, H. WU, and J. MARTORELL, *American Journal of Physics* **64**, 136 (1996).
- [29] D. BOHM, *Quantum Theory*, Prentice Hall, 1951.
- [30] A. HERNÁNDEZ and G. GARCÍA-CALDERÓN, *Phys. Rev. A* **68**, 014104 (2003).
- [31] M. DE LLANO, *Mecánica cuántica*, Las prensas de ciencias, Segunda edición, 2002.
- [32] G. GARCÍA-CALDERÓN and A. RUBIO, *Phys. Rev. A* **55**, 3361 (1997).

- [33] N. YAMADA, G. GARCÍA-CALDERÓN, and J. VILLAVICENCIO, *Phys. Rev. A* **72**, 012106 (2005).
- [34] G. GARCÍA-CALDERÓN and J. VILLAVICENCIO, *Phys. Rev. A* **64**, 012107 (2001).
- [35] G. GARCÍA-CALDERÓN and J. VILLAVICENCIO, *Phys. Rev. A* **66**, 032104 (2002).
- [36] M. BÜTTIKER, *Phys. Rev. B* **27**, 6178 (1983).