



UNIVERSIDAD NACIONAL
AUTÓNOMA DE
MÉXICO

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO.

POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS.

**Equivalencia entre las bases de Estados
Resonantes y del Continuo.**

TESIS

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE:
MAESTRO EN CIENCIAS (FÍSICA).

PRESENTA:

Alejandro Máttar Flores.

DIRECTOR DE TESIS: Dr. Gastón García Calderón.

MIEMBROS DEL COMITÉ TUTORAL:

Dr. Mauricio Fortes Besprosvany.

Dra. Karen Volke Sepúlveda.



posgrado en ciencias físicas
u n a m

2011



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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

Agradecimientos

A mis papás Jorge y Atenea y a mis hermanos Jorge y Omar por la educación y el apoyo que me han dado.

A mi tutor Gastón García-Calderón, quién me ayudó y asesoró en todo momento para darle vida a este proyecto desde hace dos años, empezando con su gran curso de Teoría de Estados Resonantes en Mecánica Cuántica.

A mis amigos, quienes me alentaron y con quienes disfruté numerosas pláticas al rededor de las peripecias que encontré a lo largo de esta investigación.

A Sergio Cordero, quién me echó la mano con toda la parte numérica que este trabajo conlleva: desde el diseño gráfico de esta tesis, hasta la compilación de diversos programas que se necesitarón para realizar la mayoría de los cálculos.

Resumen

Esta investigación de carácter teórico, compara la expresión de la función de onda para el problema del decaimiento de un sistema cuántico abierto que se obtiene de manera usual utilizando la base de funciones de onda del Continuo con la expresión que se obtiene usando el formalismo de Estados Resonantes. Lo que resulta de este estudio, para un potencial de alcance finito, es una equivalencia entre las dos expresiones para la región interna del potencial, a partir de considerar las propiedades analíticas de la función de Green retardada dependiente del tiempo. Lo anterior se ejemplifica con el problema exactamente soluble del potencial delta. Esta comparación muestra que a pesar de no contar con las propiedades de hermiticidad y de unitariedad usuales, el formalismo de Estados Resonantes permite describir de manera exacta la función de onda del sistema que decae con la ventaja de permitirnos conocer el comportamiento analítico como función del tiempo.

Abstract

This work is a theoretical research that compares the expression of the wave function for the decay problem of an open quantum system obtained by using the Continuum wave functions basis with the expression that is derived following the formalism of Resonant States. Using the analytical properties of the retarded time dependent Green function, it follows that this two expressions are equivalent for the inner region of a finite range potential. This equivalence is then illustrated with the delta potential problem, which is a situation that can exactly be solved. This comparative study shows that in spite of not counting with the usual hermiticity and unitarity properties, the formalism of Resonant States perfectly describes the wave function of the decaying system with the advantage (over the Continuum wave functions) of giving us the analytical behavior of the system as a function of time.

Índice general

Agradecimientos	I
Resumen	II
Abstract	III
Índice general	IV
Introducción.	1
I. Desarrollo de la función de onda $\Psi(r, t)$ en la base de las funciones del Continuo $\{\psi^+(k, r)\}$	6
1. Las funciones de onda del Continuo y la función de Green asociada	7
2. Función regular y función de Jost	10
3. La función de onda en la base del Continuo	15
II. Teoría de Estados Resonantes y desarrollo en eigenfunciones de la función de onda	18
4. Estados Resonantes u_n , polos k_n y matriz S	19
5. Función de Green y Estados Resonantes - Desarrollo de la función de onda	23

ÍNDICE GENERAL

6. Equivalencia entre las diferentes Normalizaciones de los Estados Resonantes.	29
III. Equivalencia entre las bases $\{\psi^+(k, r), k \in \mathbb{R}\}$ y $\{u_n(r), n \in \mathbb{Z}\}$ Aplicación al potencial delta	34
7. Aplicación numérica al potencial delta	35
8. Descripción analítica del comportamiento de $A(t)$ a través del tiempo	39
9. Conclusiones	42
IV. Apéndices	44
A. Transformada de Laplace y función de Green.	45
B. Aplicación del método de Newton-Raphson para los polos del potencial delta.	48
C. Cálculo del residuo de la función de Green en el polo k_n.	51
Referencias.	54

Introducción.

Los Estados Resonantes son un conjunto de soluciones de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo con eigenvalores complejos y con condiciones a la frontera de onda saliente. Estos estados permiten describir procesos inestables, fenómenos de decaimiento y otra gran variedad de sistemas cuánticos abiertos. Gamow [1] a finales de la década de 1920 introdujo eigenvalores complejos a la ecuación de Schrödinger para describir el decaimiento de partículas α . Esto dio luz a una teoría de Estados Resonantes [2]. Hoy en día encontramos esta teoría presente en otros campos como el de cavidades ópticas abiertas como lo muestra el trabajo de Leung [3], [4] en los noventa. Cabe mencionar que en otras disciplinas a los Estados Resonantes se les conoce también como Estados de Gamow, Modos Cuasi-normales o bien Modos Cuasi-Estacionarios. A modo de introducción, presento a continuación una descripción fenomenológica que a pesar de estar más relacionada con la Teoría de Perturbaciones que con la Teoría de Estados Resonantes, justifica la introducción de eigenvalores complejos para estudiar sistemas abiertos. En este caso se trata de un átomo excitado. La descripción está basada en el complemento K_{III} del texto de Mecánica Cuántica de Claude Cohen-Tannoudji [5] :

Consideremos un sistema cuántico conservativo que al tiempo $t = 0$ se encuentra en uno de sus eigenestados $|\varphi_n\rangle$ de energía E_n . En teoría, el sistema debe prevalecer indefinidamente en ese estado (estado estacionario). Sin embargo, el experimento muestra que, por ejemplo, en el caso de un átomo de hidrógeno que se encuentra inicialmente en un eigenestado excitado $|\varphi_n\rangle$, después de un tiempo éste cae al estado base (de menor energía) emitiendo uno

Introducción.

o varios fotones. El eigenestado $|\varphi_n\rangle$ no es por lo tanto un estado estacionario en este caso. El problema viene de considerar el átomo de hidrógeno como un sistema cerrado o aislado, cuando en realidad está en constante interacción con el campo electromagnético que se utilizó para excitar al átomo. Esto último lo vuelve un sistema *abierto*, cuya energía se pierde irreversiblemente a través de la emisión de fotones.

Por oposición a sistema *cerrado* o *aislado*, un sistema es *abierto* cuando se encuentra en constante interacción energética con el exterior. En el marco de este trabajo, consideraremos por sistema abierto todo sistema cuántico que inicialmente se encuentra confinado pero que luego puede decaer al exterior por efecto tunel. El ejemplo más sencillo, que veremos más adelante, es el de una partícula inicialmente en un potencial infinito ($V(r = 0) = \infty$ y $V(r = a) = \infty$) que a partir del tiempo $t = 0$ puede decaer por la derecha con $V(r, t \geq 0) = \lambda\delta(r - a)$.

Siguiendo con este enfoque experimental, si el sistema queda preparado al tiempo $t = 0$ en el estado inestable $|\varphi_n\rangle$ uno observará entonces que la probabilidad $P(t)$ que el sistema siga en dicho estado excitado a un tiempo $t > 0$ está dada por:

$$P(t) = e^{-\frac{t}{\tau}}. \quad (0.1)$$

En donde τ es un parametro temporal llamado *vida media* que corresponde al tiempo promedio que el sistema se queda en el estado inestable $|\varphi_n\rangle$. Tratemos entonces de obtener esta probabilidad usando las leyes usuales de la Mecánica Cuántica. Puesto que el sistema se encuentra inicialmente en el estado $|\varphi_n\rangle$, usamos el propagador de la ecuación de Schrödinger (con unidades $\hbar = 2m = 1$) y obtenemos que el vector de estado al tiempo t es:

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t} |\varphi_n\rangle = e^{-iE_n t} |\varphi_n\rangle, \quad (0.2)$$

y la probabilidad de encontrar al sistema en el estado $|\varphi_n\rangle$ al tiempo t es $P(t) = |e^{-iE_n t}|^2$. Puesto que la energía E_n es real, esta probabilidad es constante e igual a 1; es decir, volvemos a encontrar que $|\varphi_n\rangle$ es un estado

Introducción.

estacionario. Sin embargo, si reemplazamos la energía real E_n por el complejo $E'_n = E_n - i\frac{\Gamma_n}{2}$ la probabilidad $P(t)$ se convierte en:

$$P(t) = e^{-\Gamma_n t}. \quad (0.3)$$

En este caso, la probabilidad de encontrar al sistema en el estado $|\varphi_n\rangle$ disminuye exponencialmente con el tiempo, como en la fórmula experimental (0.1). Por lo tanto, para tomar en cuenta fenomenológicamente la inestabilidad de un estado $|\varphi_n\rangle$ cuya vida media es τ_n basta con agregarle una parte imaginaria a su energía, imponiendo $\Gamma_n = \frac{1}{\tau_n}$. Esto justifica de manera física la introducción de eigenvalores complejos al Hamiltoniano y por lo tanto la existencia de los Estados Resonantes para describir sistemas abiertos.

Al presentar eigenvalores complejos a causa del tipo de sistema que describen (abierto) como lo vimos en el estudio anterior, los Estados Resonantes no entran en la Mecánica Cuántica convencional puesto que el Hamiltoniano correspondiente no es un operador hermitiano. En consecuencia, los Estados Resonantes no cuentan con las propiedades usuales de normalización o completez que se manejan tradicionalmente y que podemos encontrar en cualquier libro introductorio a la Mecánica Cuántica como por ejemplo en el capítulo II de la obra de Cohen-Tannoudji [5]. Pero la realidad es que, a pesar de no contar con estas propiedades usuales, los Estados Resonantes están a la base de un formalismo que no sólo describe con exactitud sistemas abiertos, sino que además deriva una expresión analítica de la función de onda que presenta un mayor contenido físico explícito comparado con lo que se obtiene con la base tradicional del continuo. Este último hecho se vuelve visible a tiempos largos y lo podemos encontrar en el trabajo de García-Calderón, Maldonado y Villavicencio [6].

Este trabajo de investigación se orientó entonces al estudio de dichas propiedades de esta teoría. Por una parte, se estudiaron entonces los diferentes procesos de normalización existentes para estos estados. Dado que diversos autores como Zel'dovich [7], García-Calderón y Peierls [2] o Combes [8], [9] han propuesto expresiones diferentes para la normalización de los Estados Resonantes, se hizo un estudio de estas diferentes expresiones con la intención de obtener

Introducción.

una normalización que fuese universal, común e intrínseca al formalismo independientemente del tipo de sistema cuántico abierto que se esté considerando (decaimiento, dispersión o cavidades ópticas abiertas). Por otra parte, se buscó establecer una equivalencia entre la expresión que se obtiene para la función de onda $\Psi(r, t)$ con el formalismo de los Estados Resonantes y la que se obtiene de manera convencional con la base de las funciones del Continuo $\psi^+(k, r)$.

Cabe mencionar que esta equivalencia se estudió exclusivamente en la *región interna*, es decir la parte del sistema que inicialmente está sometida a un potencial V , y que eventualmente decae hacia el exterior. En efecto, como lo veremos más adelante, para la región externa no es posible establecer una equivalencia entre ambas bases puesto que la función de Green no se puede desarrollar exclusivamente en la base de Estados Resonantes.

Finalmente, otro de los objetivos esenciales de este trabajo es el de ilustrar y mostrar que sin tener que cambiar o agregar ningún postulado a la Mecánica Cuántica, esta teoría de Estados Resonantes describe completa y exactamente sistemas abiertos. Es decir que no es necesario introducir un nuevo axioma al formalismo de la Mecánica Cuántica -contrariamente a lo que plantea A. Bohm [10] al postular que las funciones de onda de un estado (y de un observable) deben pertenecer a un espacio de Hardy- para justificar el uso de eigenvalores complejos y describir así estos fenómenos de decaimiento. Cabe mencionar que un espacio de Hardy es un conjunto de funciones holomorfas en el disco unitario cuyo valor cuadrático medio en un círculo de radio r permanece acotado cuando r tiende a 1.

Así mismo, este trabajo mostrará que tampoco es necesario realizar una extensión compleja y construir una nueva simetría física inherente a todos los hamiltonianos PT-simétricos, como lo propone Carl M. Bender [11] para estudiar y describir con exactitud sistemas cuánticos cuyo Hamiltoniano no es hermitiano.

Introducción.

Definamos ahora los límites de este trabajo: primero, consideramos que el sistema de estudio está descrito en un punto r a todo tiempo t por la función de onda $\Psi(r, t)$. Esto corresponde al primer postulado de la Mecánica Cuántica. Además, suponemos que el sistema es tridimensional y está sometido a un potencial $V(r)$ con simetría esférica, real y de alcance finito, lo que quiere decir que existe un valor r , que llamaremos a , tal que: $r \geq a \Rightarrow V(r) = 0$. Trabajaremos con las unidades físicas $\hbar = 2m = 1$. Por último, consideraremos que el momento angular del sistema es $l = 0$, lo que nos permite tener una equivalencia en tres dimensiones con el caso unidimensional si consideramos únicamente la mitad de la línea, esto es, $0 \leq x \leq \infty$. En efecto, la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para la parte radial $\psi'' + (k^2 - V - \frac{l(l+1)}{r^2})\psi = 0$ se escribe tomando $l = 0$ como: $\psi'' + (k^2 - V)\psi = 0$ en donde la prima ' representa el operador de derivación respecto a la variable espacial r .

Este trabajo de tesis está estructurado de la siguiente forma. En el primer capítulo definiremos, a la manera de la teoría de la dispersión, las funciones del Continuo $\psi^+(k, r)$ y obtendremos la expresión de la función de onda Ψ en términos de esta base. En el segundo capítulo desarrollaremos el formalismo de Estados Resonantes haciendo énfasis en los polos k_n , en la normalización y en la completez y obtendremos el desarrollo de Ψ para la región interna $0 < r < a$ en términos de resonancias. Finalmente, en el tercer capítulo ilustraremos numericamente la equivalencia que existe entre las dos expresiones de la función de onda tomando como caso particular el ejemplo del potencial delta.

Parte I.

**Desarrollo de la función de onda $\Psi(r, t)$
en la base de las funciones del
Continuo $\{\psi^+(k, r)\}$**

1. Las funciones de onda del Continuo y la función de Green asociada

Empezemos definiendo la base del Continuo. Se definen como el conjunto de funciones ψ^+ que verifican la ecuación de Schrödinger y las dos condiciones a la frontera:

$$\begin{cases} \psi^{+''}(k, r) + (k^2 - V)\psi^+(k, r) = 0, \\ \psi^+(k, r = 0) = 0, \\ \psi^+(k, r) = \frac{i}{\sqrt{2\pi}}[e^{-ikr} - S(k)e^{ikr}], \end{cases} \quad \begin{array}{l} \forall k, \\ r \geq a. \end{array} \quad (1.1)$$

La segunda igualdad, como lo comentamos en la introducción, viene de considerar que para $r < 0$ el potencial es infinito, o lo que es equivalente, considerar el sistema en la media línea $[0; +\infty[$. La tercera igualdad viene del hecho que para $r > a$ tenemos $V = 0$, lo que implica que la ecuación de Schrödinger para esta región es simplemente $y'' + k^2y = 0$. Cabe mencionar que el superíndice $+$ utilizado para estas funciones del continuo es para recordar (como lo veremos más adelante) que estas funciones están asociadas a la función de Green de onda saliente $G^+(r, r', k)$. Para más información sobre esto vale la pena consultar el apéndice A. Se definió también en la última igualdad el coeficiente $S(k) = -B/A$ considerando que la solución general es $Ae^{-ikr} + Be^{ikr}$ y por lo tanto se puede factorizar dicha solución de forma a que quede como en la tercera línea de (1.1) para esta región. Esta definición la podemos encontrar con más detalle en el capítulo 11 de la obra de Newton [12]. En el capítulo 12 de este mismo libro se muestra que el conjunto de las funciones físicas $\{\psi^+(k, r), k \in \mathbb{R}\}$ forma una base cuando r y r' se encuentran en la región interna $[0; a]$, excluyendo el punto $r = r' = a$. En particular, en ausencia de estados ligados, se verifica la relación de completitud:

1. Las funciones de onda del Continuo y la función de Green asociada

$$\int_0^{+\infty} \psi^+(k, r') \psi^{+*}(k, r) dk = \delta(r - r'), \quad \forall \{r, r'\} \lesssim a. \quad (1.2)$$

El símbolo \lesssim se utilizará de ahora en adelante justamente para indicar que r y r' se encuentran en la región interna $[0; a]$ pero que se excluye el caso en el que ambos r y r' son iguales a a . La ecuación (1.2) será fundamental para lograr nuestro objetivo, puesto que refleja la completez de las funciones ψ^+ . Es decir que cualquier función de la variable r en el intervalo $[0; a]$ se podrá desarrollar en esta base, en particular la función de onda $\Psi(r, t)$ que describirá el estado de la partícula de nuestro sistema cuántico.

Para expresar la función de onda en la base del Continuo que recién definimos utilizaremos la función de Green $G^+(r, r', k)$ y su transformada de Laplace $g(r, r', t)$ como intermediarios. Por definición, la función de Green del sistema (1.1) es la función $G^+(r, r', k)$ que verifica la ecuación y las dos condiciones a la frontera:

$$\begin{cases} G^{+''} + (k^2 - V)G^+ = \delta(r - r') \\ G^+(r = 0, r', k) = 0 \\ G^{+'}(r = a, r', k) = ikG^+(a, r', k). \end{cases} \quad (1.3)$$

Para concluir esta definición de G^+ hagamos un breve comentario sobre las condiciones en el punto $r = r'$ de G^+ y de su derivada. Adoptaremos (de ahora en adelante) la notación $r_+ = r + \epsilon$ y $r_- = r - \epsilon$ con $0 < \epsilon \ll 1$. La función de Green como función de la variable r es continua, en particular en el punto $r = r'$; por lo tanto tenemos en el límite $\epsilon \rightarrow 0$ que $G^+(r'_+, r') = G^+(r'_-, r')$. Para la condición sobre la derivada $G^{+'}$ integramos la primera igualdad de la ecuación (1.3) entre r'_- y r'_+ :

$$\int_{r'_-}^{r'_+} [G^{+''} + (k^2 - V)G^+] dr = \int_{r'_-}^{r'_+} \delta(r - r') dr, \quad (1.4)$$

lo que se simplifica después de calcular las integrales y de utilizar la continuidad de G^+ en el límite $\epsilon \rightarrow 0$ para finalmente, poder escribir estas condiciones como:

1. Las funciones de onda del Continuo y la función de Green asociada

$$\begin{cases} G^+(r'_+, r', k) - G^+(r'_-, r', k) = 0 \\ G^{+'}(r'_+, r', k) - G^{+'}(r'_-, r', k) = 1 \end{cases} \quad (1.5)$$

Por otra parte, la transformada inversa de Laplace de $G^+(r, r', k)$ en el plano complejo k genera la función de Green retardada $g(r, r', t)$. En el Apéndice A se define un contorno de integración apropiado, se utiliza el teorema de Cauchy para variable compleja y el teorema de los residuos y se muestra que $g(r, r', t)$ se expresa en función de los estados ligados $\psi_b(r)$ del potencial V del sistema y de G^+ . El desarrollo que se obtiene es el siguiente:

$$g(r, r', t) = \sum_b \psi_b(r)\psi_b(r')e^{-ik_b^2 t} + \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} G^+(r, r', k)e^{-ik^2 t} 2kdk. \quad (1.6)$$

En el caso en el que el potencial no tenga estados ligados, sólo se conserva el segundo termino del lado derecho. Esto sucederá por ejemplo cuando consideremos el ejemplo del potencial delta repulsivo. Por último, damos a continuación la relación entre $\Psi(r, t)$ y $g(r, r', t)$, considerando que el estado inicial $\Psi(r, 0)$ se encuentra confinado en la región interna:

$$\Psi(r, t) = \int_0^a \Psi(r', 0)g(r, r', t)dr', \quad \forall t \geq 0, \quad \forall 0 \leq r \leq a. \quad (1.7)$$

Esta expresión significa que la función g es el propagador en el tiempo de la función de onda. La demostración de este resultado conocido se puede encontrar en un buen libro sobre funciones de Green y sus aplicaciones a la Mecánica Cuántica, como por ejemplo lo es la segunda parte de la referencia [13]. Observemos de paso que al tomar $t = 0$ en la expresión (1.7) se verifica entonces la condición inicial $g(r, r', 0) = \delta(r - r')$. Hasta ahora hemos definido: i) la base del continuo, ii) la función de Green y su transformada de Laplace y iii) la correspondencia entre esta función retardada de Green y $\Psi(r, t)$. A continuación presentaremos las funciones regulares y la función de Jost, que nos permitirán hacer la conexión entre la base del Continuo y la función de Green.

2. Función regular y función de Jost

Las funciones regulares y de Jost nos permiten establecer una relación entre la función de Green y la base del Continuo. La función regular $\Phi(k, r)$ se define de manera similar a las funciones del Continuo de la sección anterior (ecuación (1.1)), salvo que en esta ocasión las condiciones a la frontera se definen en el mismo punto $r = 0$ y para todo k real:

$$\begin{cases} \Phi''(k, r) + (k^2 - V)\Phi(k, r) = 0 \\ \Phi(k, r = 0) = 0 \\ \Phi'(k, r = 0) = 1. \end{cases} \quad (2.1)$$

Por su parte las funciones de Jost f_- y f_+ se definen de tal forma que la función regular se exprese como $\Phi(k, r) = Af_+(k, r) + Bf_-(k, r)$, lo que impone la condición $f_{\pm}(k, r) \rightarrow e^{\pm ikr}$ cuando r tiende al infinito. Supongamos ahora que existen dos funciones auxiliares h_1 y h_2 , las cuales trataremos de determinar en términos de las funciones regulares y de Jost, tales que:

$$\begin{cases} G^+(r, r', k) \equiv \Phi(k, r)h_1(r'), & r < r' \\ G^+(r, r', k) \equiv f_+(k, r)h_2(r'), & r > r' \end{cases} \quad (2.2)$$

Apliquemos ahora estas funciones que hemos definido a las condiciones de G^+ y de su derivada en el punto $r = r'$ que vimos en la sección anterior (ecuaciones (1.5)). Estas ecuaciones se escriben ahora de la forma:

$$\begin{cases} f_+(k, r_+)h_2(r) - \Phi(k, r_-)h_1(r) = 0 & (a) \\ f'_+(k, r_+)h_2(r) - \Phi'(k, r_-)h_1(r) = 1, & (b) \end{cases} \quad (2.3)$$

en donde hemos cambiado r' por r . Este cambio se puede realizar al analizar primero un punto de referencia, i.e. $r = r'$ y luego evaluar en los valores r_{\pm} para usar (2.2). Tenemos entonces dos ecuaciones (a) y (b) cuyas incógnitas que queremos determinar son h_1 y h_2 . Para obtener h_1 se calcula la expresión $(a)f'_+(r_-) - (b)f_+(r_-)$. Para obtener h_2 se calcula la expresión $(b)\Phi(k, r_-) -$

2. Función regular y función de Jost

(a) $\Phi'(k, r_-)$. Uno puede hacer el cálculo explícito y comprobar que lo que se obtiene es

$$\begin{cases} h_1(r) = \frac{f_+(k, r)}{W(f_+(r), \Phi(k, r))}, \\ h_2(r) = \frac{-\Phi(k, r)}{W(f_+(r), \Phi(k, r))}. \end{cases} \quad (2.4)$$

En estas últimas igualdades W designa el operador Wronskiano, que se define para dos funciones f y g como $W(f, g) = fg' - f'g$. Además, en estos casos el Wronskiano no depende del punto r en el que se calcula [12], por lo que definimos $J_+(k) = W(f_+, \Phi)$ y $J_-(k) = W(f_-, \Phi)$. Con estas definiciones tenemos

$$h_1 = \frac{f_+}{J_+} \quad ; \quad h_2 = -\frac{\Phi}{J_+} \quad (2.5)$$

Con esto, las igualdades (2.2) que describen la función de Green se pueden escribir en una sola expresión:

$$G^+(r, r', k) = \pm \frac{\Phi(k, r_{<})f_+(k, r_{>})}{J_+(k)} \quad (2.6)$$

con $r_{<} = \min(r', r)$, $r_{>} = \max(r', r)$, el signo negativo para $r > r'$ y el signo positivo para $r < r'$. Con esto hemos logrado poner la función de Green en términos de la función regular y la función de Jost. Cabe señalar que esta expresión pone en evidencia que los valores k que anulan a J_+ son los polos de G^+ (en efecto, Φ y f_+ no poseen singularidades en k y esto lo podemos ver a través de sus respectivas definiciones). Lo que nos queda por hacer es poner la función regular en términos de la función ψ^+ . Para empezar, puesto que estas funciones verifican la misma ecuación de Schrödinger y sólo difieren por las condiciones iniciales que las caracterizan, estas dos funciones son proporcionales. Busquemos entonces este coeficiente de proporcionalidad. Por la definición de las funciones de Jost se tiene el sistema de ecuaciones

$$\begin{cases} \Phi(k, r) = A(k)f_+(k, r) + B(k)f_-(k, r) \\ \Phi'(k, r) = A(k)f'_+(k, r) + B(k)f'_-(k, r), \end{cases} \quad (2.7)$$

en donde tenemos que determinar A y B . El método que se usa es el mismo que se empleó en esta misma sección para determinar h_1 y h_2 . Obtenemos así

2. Función regular y función de Jost

$$A = \frac{W(\Phi, f_-)}{W(f_+, f_-)} \quad ; \quad B = \frac{W(\Phi, f_+)}{W(f_-, f_+)}. \quad (2.8)$$

Para $r \gg a$ tenemos $f_{\pm} = e^{\pm ikr}$. Usando ésto, obtenemos que $W(f_+, f_-) = -2ik$, y como esta última expresión no depende de r se generaliza para todo r , i.e., este resultado es válido en todo el espacio, en particular en la región interna del potencial. Remplazando este valor y usando la definición de las funciones J_{\pm} en las últimas igualdades podemos finalmente escribir:

$$A(k) = \frac{J_-(k)}{2ik} \quad ; \quad B(k) = -\frac{J_+(k)}{2ik} \quad (2.9)$$

y para $r > a$,

$$\Phi(k, r) = \frac{J_-(k)}{2ik} e^{ikr} - \frac{J_+(k)}{2ik} e^{-ikr} = \frac{J_+(k)}{k} \frac{i}{2} \left[e^{-ikr} - \frac{J_-(k)}{J_+(k)} e^{ikr} \right]. \quad (2.10)$$

En esta última ecuación podemos por fin identificar la función ψ^+ tal como la tenemos en la ecuación (1.1). Lo que ha quedado demostrado además es que $S(k) = J_-(k)/J_+(k)$. Sustituyendo lo correspondiente por ψ^+ , llegamos a

$$\Phi(k, r) = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{J_+(k)}{k} \psi^+(k, r). \quad (2.11)$$

Con esto hemos por una parte expresado la función de Green en términos de las funciones regulares y de Jost y por otra parte hemos puesto en relación estas últimas con las funciones de la base del Continuo ψ^+ .

Para cerrar esta sección haremos un breve estudio sobre las funciones regular y de Jost inspirado del capítulo 12 de la obra de Newton [12]. Lo que se pretende es estudiar las condiciones bajo las cuales estas funciones están definidas.

Empezemos con la función regular, que queda definida por la ecuación y las condiciones a la frontera (2.1). Uno puede verificar que la solución de (2.1) es equivalente a la ecuación integral

$$\Phi(k, r) = \frac{\sin(kr)}{k} + \frac{1}{k} \int_0^r dr' \sin[k(r - r')] V(r') \Phi(k, r') \quad (2.12)$$

2. Función regular y función de Jost

siempre y cuando la diferenciación bajo el signo de la integral quede justificada por convergencia uniforme. Para conocer las condiciones bajo las cuales la serie de aproximaciones sucesivas de (2.12) converge, resolvemos esta ecuación integral por iteración:

$$\left\{ \begin{array}{l} \Phi = \sum_{n=0}^{\infty} \Phi^{(n)}, \\ \Phi^{(0)} = \frac{\sin(kr)}{k}, \\ \Phi^{(n)} = \frac{1}{k} \int_0^r dr' \sin[k(r-r')] V(r') \Phi^{(n-1)}(r'). \end{array} \right. \quad (2.13)$$

Utilizando el hecho [12] que existe una constante C tal que para todo k y para todos $r \geq r' \geq 0$

$$|\sin[k(r-r')]| \leq C e^{|\nu|(r-r')} \frac{|k|r}{1+|k|r} \quad (2.14)$$

en donde $Im(k) = \nu$, obtenemos un supremo (una acotación) para cada $\Phi^{(n)}$ y finalmente un supremo (una acotación) para $|\Phi(k, r)|$:

$$|\Phi(k, r)| \leq C \exp(|\nu|r) \frac{r}{1+|k|r} \exp \left[|\nu| C \int_0^r dr' |V(r')| \frac{r'}{1+|k|r'} \right]. \quad (2.15)$$

Esto quiere decir que siempre y cuando

$$\int_0^{\infty} dr |V(r)| r < \infty \quad (2.16)$$

la serie de Φ (ecuación (2.13)) converge en valor absoluto para todo valor de k y de r . Además, en cada región cerrada del plano complejo y en cada intervalo cerrado del eje real esta convergencia es uniforme. Cuando esto se cumple, cada término de la serie es una función entera de k , lo que nos asegura que podemos prolongar analíticamente la función Φ en el plano complejo k . Este resultado será fundamental en el siguiente capítulo para poder desarrollar la función de Green en el plano complejo k .

A diferencia de las soluciones regulares que se definen por condiciones en el origen, las funciones de Jost se definen con las condiciones al infinito:

2. Función regular y función de Jost

$$\lim_{r \rightarrow \infty} e^{\mp ikr} f_{\pm}(k, r) = 1. \quad (2.17)$$

En este caso las ecuaciones integrales que equivalen a estas condiciones y a la ecuación de Schrödinger son:

$$f_{\pm}(k, r) = e^{\pm ikr} - \frac{1}{k} \int_r^{\infty} dr' \sin[k(r - r')] V(r') f_{\pm}(k, r'). \quad (2.18)$$

Uno puede verificar por diferenciación que esta última ecuación corresponde a la primera línea de (2.1) y a las condiciones (2.17), siempre y cuando (de nuevo) la integral converja absolutamente. Nuevamente resolvemos (2.18) por iteraciones:

$$\begin{cases} f_{\pm}(k, r) = \sum_{n=0}^{\infty} f_{\pm}^{(n)} \\ f_{\pm}^{(0)} = e^{\pm ikr} \\ f_{\pm}^{(n)} = -\frac{1}{k} \int_r^{\infty} dr' \sin[k(r - r')] V(r') f_{\pm}^{(n-1)}(r') \end{cases} \quad (2.19)$$

Utilizando nuevamente (2.14) obtenemos la mayoración para $|f_{\pm}(k, r)|$:

$$|f_{\pm}(k, r)| \leq \sum_{n=0}^{\infty} |f_{\pm}^{(n)}| \leq C e^{\mp \nu r} \exp \left[C \int_r^{\infty} \frac{dr' V(r')}{1 + |k|r'} e^{(|\nu| \mp \nu)(r' - r)} \right]. \quad (2.20)$$

Por lo tanto, las soluciones f_{\pm} existen para todo k y todo r siempre y cuando

$$\int_0^{\infty} dr |V(r)| r e^{(|\nu| \mp \nu)r} < \infty. \quad (2.21)$$

Claramente esta condición es mucho más restrictiva para el potencial V , y lo único que diremos para concluir es que esta condición se verifica en el caso particular en el que el potencial es de alcance finito y en este caso f_{\pm} son funciones analíticas de k y podremos desarrollarlas en todo el plano complejo.

3. La función de onda en la base del Continuo

No perdamos de vista que lo que queremos lograr en esta primera parte es escribir la función de onda $\Psi(r, t)$ en la base $\{\psi^+(k, r)\}$. Recapitulemos lo que tenemos hasta ahora. La ecuación (1.7) describe $\Psi(r, t)$ en función de $g(r, r', t)$. La ecuación (1.6) nos da $g(r, r', t)$ en función de $G^+(r, r', k)$. La ecuación (2.6) expresa $G^+(r, r', k)$ gracias a $\Phi(k, r)$ y $f_+(k, r)$, y por último de forma análoga la ecuación (2.11) nos permite tener $\psi^+(k, r)$ en términos de Φ y f_+ . Lo anterior se resume en el siguiente diagrama:

$$\Psi \longleftrightarrow g \longleftrightarrow G^+ \longleftrightarrow \Phi, f_+ \longleftrightarrow \psi^+ \quad (3.1)$$

por lo que matemáticamente el problema de expresar Ψ en términos de ψ^+ ha quedado resuelto, como lo veremos ahora. Para ver esto primero tenemos que considerar la paridad de la función G^+ con respecto a la variable k en el segundo término del lado derecho de (1.6). Este término se escribe entonces como

$$\int_{-\infty}^{+\infty} G^+(r, r', k) e^{-ik^2 t} 2k dk = \int_0^{+\infty} [G^+(r, r', k) - G^+(r, r', -k)] e^{-ik^2 t} 2k dk. \quad (3.2)$$

Suponiendo que $r > r'$ se tiene por (2.6) que

$G^+(r, r', k) = [-\Phi(k, r)f_+(k, r')]/J_+(k)$ por lo que se tiene entonces

$$G^+(r, r', k) - G^+(r, r', -k) = -\frac{\Phi(k, r)f_+(k, r')}{J_+(k)} + \frac{\Phi(-k, r)f_+(-k, r')}{J_+(-k)} \quad (3.3)$$

3. La función de onda en la base del Continuo

Sin embargo, uno puede verificar con bastante facilidad que se tiene $\Phi(-k, r) = \Phi(k, r)$, $f_+(-k, r') = f_-(k, r')$ y $J_+(-k) = J_-(k)$. Usando las igualdades anteriores y factorizando por $2ik$ la ecuación (3.3) se escribe

$$G^+(r, r', k) - G^+(r, r', -k) = -\frac{2ik\Phi(k, r)}{J_+(k)J_-(k)} \left[\frac{J_-(k)}{2ik} f_+(k, r') - \frac{J_+(k)}{2ik} f_-(k, r') \right]. \quad (3.4)$$

En esta expresión lo que está entre corchetes corresponde a $\Phi(k, r')$ como lo vimos en el capítulo 2. Por lo que finalmente, se tiene

$$G^+(r, r', k) - G^+(r, r', -k) = -\frac{2ik\Phi(k, r)\Phi(k, r')}{J_+(k)J_-(k)}. \quad (3.5)$$

En el apartado del libro de Newton [12] sobre las funciones de Jost y la función regular (capítulo 12) se muestra, entre otros resultados, que $\Phi^*(k, r) = \Phi(k, r)$ y que $J_+^*(k, r) = J_-(k, r)$. Considerando estas igualdades y el hecho de que k es real, podemos escribir (3.5) de la siguiente forma:

$$G^+(r, r', k) - G^+(r, r', -k) = -\frac{2i}{k} \frac{k^*\Phi^*(k, r')}{J_+^*(k)} \frac{k\Phi(k, r)}{J_+(k)}. \quad (3.6)$$

En esta última ecuación hemos hecho aparecer explícita la expresión de ψ^+ y de su complejo conjugado (ecuación (2.11)) evaluadas respectivamente en los puntos r' y r . i.e.,

$$G^+(r, r', k) - G^+(r, r', -k) = -\frac{\pi i}{k} \psi^+(k, r)\psi^{+*}(k, r'). \quad (3.7)$$

Regresamos ahora a (3.2) en donde sustituimos esta expresión para encontrar

$$\int_{-\infty}^{+\infty} G^+(r, r', k)e^{-ik^2t} 2kdk = \frac{2\pi}{i} \int_0^{+\infty} \psi^+(k, r)\psi^{+*}(k, r')e^{-ik^2t} dk \quad (3.8)$$

y haciendo de nuevo el mismo proceso de substitución en (1.6) obtenemos

$$g(r, r', t) = \int_0^{+\infty} \psi^+(k, r)\psi^{+*}(k, r')e^{-ik^2t} dk. \quad (3.9)$$

3. La función de onda en la base del Continuo

En esta expresión de g hemos supuesto que no hay estados ligados. En caso de que los hubiera, basta con agregar la contribución de éstos (el término sumatorio que aparece en la ecuación (1.6)). Recordemos que al tomar $t = 0$ y considerar que $g(r, r', 0) = \delta(r - r')$ encontramos la condición de completitud de las funciones físicas (ecuación (1.2)). También es importante señalar que si hubiéramos hecho este mismo desarrollo en el caso $r < r'$, es decir con la otra expresión de G^+ hubiéramos encontrado la misma expresión para g en términos de las funciones físicas. Para terminar, tenemos simplemente que sustituir la ecuación (3.9) en (1.7) para obtener la función Ψ . Esto nos da finalmente

$$\Psi(r, t) = \int_0^\infty \left[\int_0^a \Psi(r', 0) \psi^{+*}(k, r') dr' \right] \psi^+(k, r) e^{-ik^2 t} dk \quad (3.10)$$

en donde hemos intercambiado la integral sobre k con la integral sobre r' , lo cual se vale por el teorema de Fubini [14] pero no entraremos en la justificación de este detalle. Si definimos el coeficiente $c(k) = \int_0^a \Psi(r', 0) \psi^{+*}(k, r') dr'$ llegamos a

$$\Psi(r, t) = \int_0^\infty c(k) \psi^+(k, r) e^{-ik^2 t} dk. \quad (3.11)$$

La ecuación (3.11) corresponde al resultado deseado y objetivo de esta primera parte. Tenemos finalmente la expresión de la función de onda en la base del Continuo, con el coeficiente $c(k)$ que depende exclusivamente del estado inicial del sistema $\Psi(r, 0)$. Sin embargo, por mucho que este resultado sea exacto y de alguna manera bastante sencillo, el gran inconveniente de esta expresión es que no nos da ninguna idea del comportamiento de la función de onda a través del tiempo: en efecto, se tiene que calcular la integral entre cero y el infinito para cada valor de t para conocer dicho comportamiento. En la segunda y tercera partes de este trabajo veremos que con el formalismo de los Estados Resonantes por una simple descripción analítica podemos deducir el comportamiento del sistema a través del tiempo.

Parte II.

Teoría de Estados Resonantes y desarrollo en eigenfunciones de la función de onda

4. Estados Resonantes u_n , polos k_n y matriz S

El objetivo de esta segunda parte es obtener una expresión de la función de onda en términos de los Estados Resonantes. Para ello pasaremos nuevamente por la función de Green pero primero dejaremos claras varias nociones sobre estos estados. Retomando la descripción fenomenológica que vimos en la introducción, un Estado Resonante u_n se define como un eigenestado solución de la ecuación de Schrödinger pero con la particularidad de que se busca describir un sistema abierto. Esto implica que, a diferencia de las funciones del Continuo, no tengamos una onda entrante y consideremos únicamente una onda saliente. Es decir que en la región externa (para $r > a$) el n -ésimo Estado Resonante es proporcional a $e^{ik_n r}$. Por otra parte, también vimos que para tomar en cuenta el decaimiento del sistema hacia el exterior a través del tiempo tenemos que considerar que para todo n , k_n es un número complejo de la forma $k_n = \alpha_n - i\beta_n$ (estrictamente, vimos en la Introducción que la Energía E_n debía ser compleja. Luego, $E_n = k_n^2$ implica que k_n también es complejo). En definitiva, las siguientes ecuaciones definen al Estado Resonante n :

$$\begin{cases} u_n''(r) + (k_n^2 - V)u_n(r) = 0, \\ u_n(0) = 0, \\ u_n'(r) = ik_n u_n(r), \end{cases} \quad r \geq a. \quad (4.1)$$

De lo que se trata entonces es de determinar los niveles de energía, o en este caso, los valores de k_n . Para esto es conveniente poner en relación nuestro problema de Estados Resonantes con la teoría de la dispersión y más particularmente con el coeficiente $S(k)$ que vimos en la primera parte. En efecto, recordemos que las funciones del Continuo verifican

4. Estados Resonantes u_n , polos k_n y matriz S

$$\begin{cases} \psi^{+''}(k, r) + (k^2 - V)\psi^+(k, r) = 0, \\ \psi^+(k, r = 0) = 0, \\ \psi^+(k, r) = B(k)e^{-ikr} + A(k)e^{ikr}, \end{cases} \quad \forall k, \quad r \geq a, \quad (4.2)$$

y se había definido $S(k) = -A(k)/B(k)$. En el caso en el que en esta última ecuación tenemos $B(k) = 0$ no hay onda entrante y encontramos el caso de los Estados Resonantes. Es decir que los valores de k para los cuales se cumple $B(k) = 0$ corresponden a los eigenvalores k_n . En otras palabras, los polos de $S(k)$ corresponden a los eigenvalores del problema de Estados Resonantes. Determinar entonces los valores de k_n es equivalente a determinar los polos de S , y es por esta razón que a los eigenvalores k_n los llamamos también polos k_n . Para ejemplificar, a continuación presentaremos los polos del potencial delta y presentaremos así algunas propiedades generales sobre ellos.

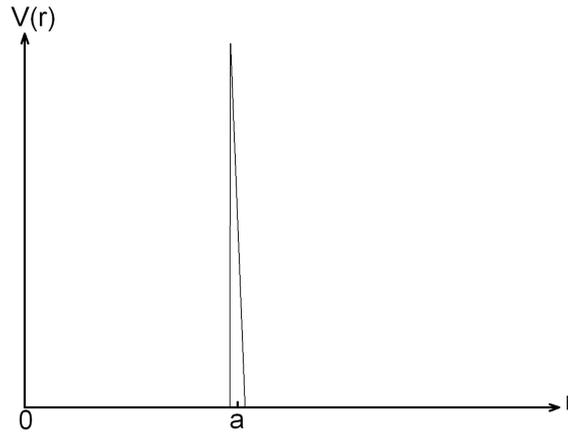


Fig. 4.1.: El potencial $V(r) = \lambda\delta(r - a)$ en la media línea $[0; +\infty[$

Consideremos entonces el potencial delta de la figura 4.1 y busquemos sus polos. Primero tenemos que obtener $S(k)$. Para esto tomamos las expresiones de la función de onda en la región interna y externa:

$$\begin{cases} \psi(k, r) = C(k) \sin(kr), & 0 \leq r < a, \\ \psi(k, r) = B(k)e^{-ikr} + A(k)e^{ikr}, & r > a, \end{cases} \quad (4.3)$$

y escribimos las condiciones a la frontera de la función de onda y de su derivada en el punto $r = a$. La función de onda es continua en a pero su derivada tiene

4. Estados Resonantes u_n , polos k_n y matriz S

una discontinuidad de magnitud $\lambda\psi(r, a)$ [5]:

$$\begin{cases} \psi(k, a_-) = \psi(k, a_+), \\ \psi'(k, a_+) - \psi'(k, a_-) = \lambda\psi(k, a), \end{cases} \quad (4.4)$$

Sustituyendo (4.3) en (4.4) nos permite eliminar el coeficiente C y obtener S ,

$$S(k) = -\frac{A(k)}{B(k)} = \frac{ik + \lambda + k \cot(ka)}{-ik + \lambda + k \cot(ka)} e^{-2ika}, \quad (4.5)$$

y los polos k_n quedan dados entonces por la ecuación $-ik_n + \lambda + k_n \cot(ka) = 0$, misma que se puede escribir como

$$2ik_n + \lambda(e^{2ik_n a} - 1) = 0. \quad (4.6)$$

Cabe mencionar aquí que si en vez de pasar por la matriz S consideramos la expresión del n -ésimo Estado Resonante para el potencial delta

$$\begin{cases} u_n(r) = D_n \sin(k_n r), & 0 \leq r < a \\ u_n(r) = B_n e^{ik_n r}, & r > a \end{cases} \quad (4.7)$$

y pedimos la continuidad de este estado en el punto $r = a$ y la discontinuidad de su derivada con un salto de λ , obtenemos de esta manera la ecuación (4.6). Esta ecuación no tiene solución analítica, pero usando el método numérico de Newton-Raphson se obtienen resultados con una precisión tan grande como uno quiera. En el Apéndice B se explica este método y se aplica a este ejemplo del potencial delta. La distribución que se obtiene de los polos k_n la podemos encontrar en la figura (4.2).

Mencionemos algunos comentarios sobre esta distribución de polos del potencial delta. Primero, vemos que todos los polos se encuentran en la parte inferior del plano complejo. Es decir que no hay estados ligados y que si $k_n = \alpha_n - i\beta_n$ entonces para todo n (ya sea positivo o negativo) tenemos $\beta_n > 0$. Esto era de esperar puesto que como lo vimos en la introducción, β_n es (inversamente) proporcional a la vida media del n -ésimo estado excitado, por lo que debe entonces tomar valores positivos. Segundo, vemos que la distribución de los polos es simétrica con respecto al eje imaginario. O sea

4. Estados Resonantes u_n , polos k_n y matriz S

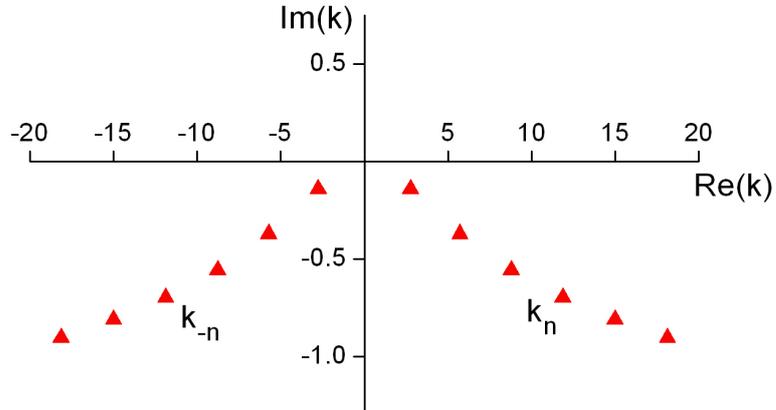


Fig. 4.2.: Distribución de los primeros polos k_n y k_{-n} con $n = 1, 2, \dots, 6$ en el plano complejo k . Esta distribución se obtuvo para el potencial delta con $a = 1$ y $\lambda = 6$ usando el método de Newton-Raphson.

que se cumple para todo n que $k_{-n} = -k_n^*$. Los polos del tercer cuadrante ($n < 0$) representan el mismo nivel de energía que sus respectivos simétricos del cuarto cuadrante, puesto que $E_n \sim k_n^2$. Además, si por una parte uno conjuga la ecuación de Schrödinger (primera línea de (4.1)) y por otra parte toma esta misma ecuación para $-n$ y reemplaza k_{-n} por k_n^* se infiere entonces que para todo n , $u_{-n} = u_n^*$. Esto muestra que los polos del tercer cuadrante representan simplemente los estados conjugados de sus respectivos simétricos del cuarto cuadrante. De manera general, basta entonces con conocer y estudiar los polos del cuarto cuadrante. Tercero: para $n > 0$, α_n y β_n aumentan conforme n lo hace. Conforme n aumenta se pasa a un estado más y más excitado, i.e. de mayor energía y de menor estabilidad (menor vida media), lo que explica respectivamente el crecimiento de α_n y β_n . Cuarto, tenemos para todos los polos de este potencial la siguiente regla: $|\alpha_n| > \beta_n$. Este hecho se puede ver con la ecuación (B.27) del Apéndice B. Cuando esto sucede se dice por definición que los polos son *propios*. Por último, dejemos en claro que conocer los polos determina (casi) por completo al n -ésimo Estado Resonante en la región interna: en efecto, en esta región tenemos $u_n(r) = D_n \sin(k_n r)$ por lo que conocer k_n determina automáticamente u_n . Lo que queda por conocer es el coeficiente D_n que será determinado por la normalización de los Estados Resonantes que veremos en el siguiente capítulo.

5. Función de Green y Estados Resonantes - Desarrollo de la función de onda

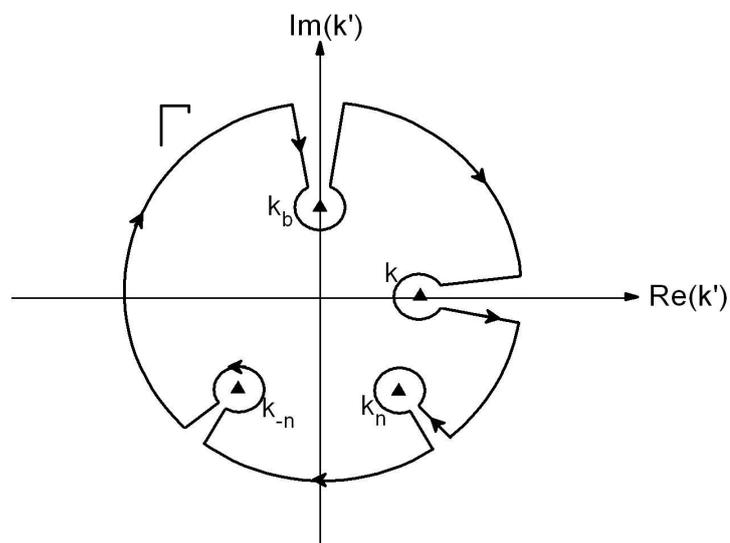


Fig. 5.1.: El contorno Γ en el plano complejo k' . Este contorno es cerrado y no contiene singularidades. Los polos pueden encontrarse sobre el eje imaginario (estados ligados) o en la parte inferior del plano (estados resonantes). k se encuentra sobre el eje real.

En este capítulo obtendremos el desarrollo de la función de onda dependiente del tiempo en términos de los Estados Resonantes. Para ello, calcularemos el residuo de la función de Green G^+ en el n -ésimo polo k_n para luego obtener una expresión de G^+ como un desarrollo en función de los Estados Resonantes. Este proceso pondrá en evidencia la normalización y completez de dichos estados. Una vez que hayamos obtenido esta expresión de la función de Green, bastará con sustituirla en la ecuación (1.6) y luego utilizar (1.7) para obtener

5. Función de Green y Estados Resonantes - Desarrollo de la función de onda

la expresión de $\Psi(r, t)$ deseada. Lo primero que tenemos que obtener es una expresión de G^+ en términos de los residuos de esta última en los polos k_n . Consideramos entonces la integral de la variable compleja k'

$$I = \frac{1}{2i\pi} \oint_{\Gamma} \frac{G^+(r, r', k')}{k' - k} dk', \quad (5.1)$$

en donde $k \in \mathbb{R}$ y el contorno Γ se muestra en la figura 5.1. Puesto que el contorno Γ es cerrado y no contiene singularidades (los polos quedan afuera del contorno) el teorema de Cauchy para variable compleja implica que $I = 0$ [15]. Por otra parte, en la referencia citada anteriormente también se muestra que integrar sobre el contorno cerrado Γ es equivalente a sumar las integrales cerradas sobre cada singularidad y un círculo de radio R que englobe todas las singularidades. Es decir que Γ es equivalente a la suma de los contornos de la figura 5.2.

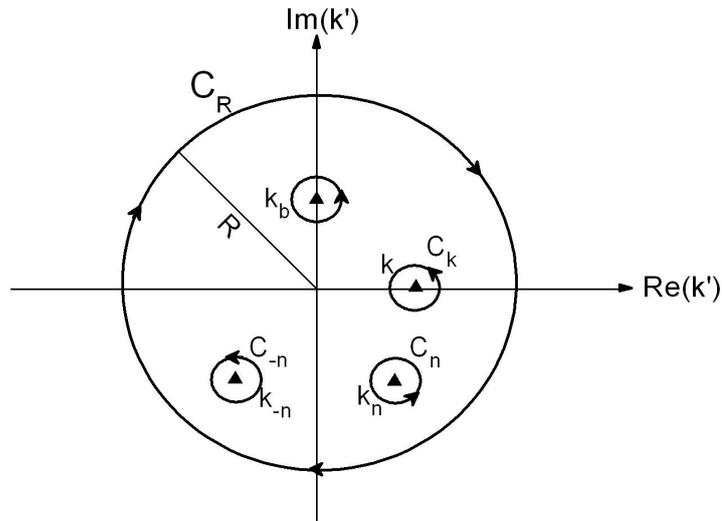


Fig. 5.2.: Los contornos C_R , C_n y C_k . Se tiene entonces que $\Gamma \equiv C_R + C_k + \sum C_n$. El número de polos que se consideran depende del radio R .

Utilizando esta equivalencia entre los contornos de integración, tenemos entonces que

5. Función de Green y Estados Resonantes - Desarrollo de la función de onda

$$\begin{cases} I = 0 = \frac{1}{2i\pi} [\oint_{C_k} \frac{G^+(r, r', k')}{k' - k} dk' - \oint_{C_R} \frac{G^+(r, r', k')}{k' - k} dk' \\ + \sum \oint_{C_n} \frac{G^+(r, r', k')}{k' - k} dk'] \end{cases} \quad (5.2)$$

Por el teorema de los residuos en k , el primer término de (5.2) es

$$\frac{1}{2i\pi} \oint_{C_k} \frac{G^+(r, r', k')}{k' - k} dk' = \lim_{k' \rightarrow k} [(k' - k) \frac{G^+(r, r', k')}{k' - k}] = G^+(r, r', k). \quad (5.3)$$

En esta última ecuación hemos supuesto que k es un polo simple. Además, G^+ no tiene polos en $k' = k$. Hacemos ahora tender R al infinito. Se puede mostrar que en este caso la contribución del segundo término a la ecuación (5.2) es nula, siempre y cuando nos encontremos en el caso $r, r' \lesssim a$. Por otra parte, el hacer tender R al infinito implica que consideremos entonces todos los polos de la parte inferior del plano complejo, es decir que debemos considerar la suma del tercer término de (5.2) de $-\infty$ a $+\infty$. Tomando en cuenta todo esto (5.2) se escribe como

$$G^+(r, r', k) = -\frac{1}{2i\pi} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \oint_{C_n} \frac{G^+(r, r', k')}{k' - k} dk' \quad \forall r, r' \lesssim a. \quad (5.4)$$

Tomando ahora el teorema de los residuos en el polo k_n , tenemos que para todo n

$$\oint_{C_n} \frac{G^+(r, r', k')}{k' - k} dk' = 2i\pi \frac{r_n(r, r')}{k_n - k}, \quad (5.5)$$

en donde $r_n(r, r')$ corresponde al residuo de la función G^+ en el polo k_n . Reemplazando (5.5) en (5.4) nos lleva a

$$G^+(r, r', k) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{r_n(r, r')}{k - k_n} \quad \forall r, r' \lesssim a. \quad (5.6)$$

En el Apéndice C se usa la formula de Green para calcular $r_n(r, r')$ y se obtiene que

5. Función de Green y Estados Resonantes - Desarrollo de la función de onda

$$r_n(r, r') = \frac{u_n(r)u_n(r')}{2k_n[\int_0^a u_n^2(r)dr + \frac{i u_n^2(a)}{2k_n}]}, \quad (5.7)$$

lo que implica la condición de normalización de los Estados Resonantes $\int_0^a u_n^2(r)dr + \frac{i u_n^2(a)}{2k_n} = 1$ y finalmente

$$r_n(r, r') = \frac{u_n(r)u_n(r')}{2k_n}. \quad (5.8)$$

En este mismo Apéndice C se discute sobre la normalización de los Estados Resonantes y se pone en evidencia que esta normalización obtenida a través del residuo en el polo k_n de la función de Green es equivalente a la que han obtenido otros autores usando procesos diferentes. Regresando a nuestra función de Green, reemplazamos entonces (5.8) en (5.6) y llegamos a la expresión de G^+ en términos de los Estados Resonantes para la región interna:

$$G^+(r, r', k) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{u_n(r)u_n(r')}{2k_n(k - k_n)} \quad \forall r, r' \lesssim a. \quad (5.9)$$

Si ahora inyectamos esta expresión de G^+ en la primera línea de (1.3), que es la ecuación que a final de cuentas define a la función de Green, uno puede verificar que se llega a

$$\frac{k}{2} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{u_n(r)u_n(r')}{k_n} + \frac{1}{2} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} u_n(r)u_n(r') = \delta(r - r') \quad (5.10)$$

pero esta ecuación debe verificarse para todo k real. Por lo tanto se satisface

$$\sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{u_n(r)u_n(r')}{k_n} = 0 \quad (5.11)$$

y

$$\frac{1}{2} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} u_n(r)u_n(r') = \delta(r - r') \quad (5.12)$$

Al igual que la expresión de G^+ que obtuvimos, estas reglas de suma son válidas únicamente para la región $r, r' \lesssim a$. Vale la pena recalcar que la

segunda regla es equivalente a la relación de completez que se tiene de manera convencional para los eigenvectores del Hamiltoniano:

$$\sum_{n=0}^{+\infty} \phi_n(r)\phi_n(r') = \delta(r - r'). \quad (5.13)$$

Al igual que esta última, (5.12) implica como lo veremos más adelante que cualquier función de la variable r se podrá desarrollar en términos de Estados Resonantes para la región interna $[0; a]$. Es decir que (5.12) pone en evidencia el caracter de *base* del conjunto de los Estados Resonantes para esta región interna.

Para terminar este capítulo obtendremos la expresión de la función de onda dependiente del tiempo para la región interna en la base de Estados Resonantes. Primero, inyectamos (5.9) en (1.6) lo cual nos da en ausencia de estados ligados e intercambiando el suma sobre n con la integral sobre k ,

$$g(r, r', t) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} u_n(r)u_n(r') \left[\frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{2ke^{-ik^2t}}{2k_n(k - k_n)} dk \right]. \quad (5.14)$$

Usando la identidad $\frac{1}{k_n(k-k_n)} = \frac{1}{k} \left[\frac{1}{k_n} + \frac{1}{k-k_n} \right]$ la ecuación (5.14) se escribe como

$$g(r, r', t) = \left\{ \begin{array}{l} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{u_n(r)u_n(r')}{k_n} \left[\frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ik^2t} dk \right] \\ + \sum_{n=-\infty}^{+\infty} u_n(r)u_n(r') \left[\frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-ik^2t}}{k-k_n} dk \right] \end{array} \right. \quad (5.15)$$

El término de arriba de (5.15) vale cero pues la integral no depende de n y la suma se identifica con (5.11). Por otra parte, se define la función M de Moshinsky [16] como

$$M(k_n, t) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-ik^2t}}{k - k_n} dk. \quad (5.16)$$

Esta definición así como sus principales propiedades las podemos encontrar en el artículo de Moshinsky sobre *difracción en el tiempo* [16]. Así, la expresión de g que se obtiene para la región $r, r' \lesssim a$ es simplemente

5. Función de Green y Estados Resonantes - Desarrollo de la función de onda

$$g(r, r', t) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} u_n(r)u_n(r')M(k_n, t). \quad (5.17)$$

Cabe mencionar que en caso de que el potencial soportara estados ligados, bastaría con agregar la contribución correspondiente, i.e.: $\sum u_b(r)u_b(r')e^{-ik_b^2 t}$.

Por último, inyectamos esta expresión obtenida para g en (1.7) con lo que obtenemos

$$\Psi(r, t) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} c_n u_n(r) M(k_n, t), \quad 0 \leq r \leq a \quad (5.18)$$

en donde hemos intercambiado la suma sobre n con la integral sobre r' y definido el coeficiente c_n como

$$c_n = \int_0^a \Psi(r', 0) u_n(r') dr'. \quad (5.19)$$

Con esto hemos logrado nuestro objetivo de expresar la función de onda en la región interna como un desarrollo en términos de Estados Resonantes. Aunque no entraremos en detalle, vale la pena mencionar que el formalismo de Estados Resonantes permite dar el desarrollo en resonancias de la función de onda en la región externa $r > a$:

$$\Psi(r, t) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} c_n u_n(a) M(y_n), \quad r \geq a, \quad (5.20)$$

con

$$y_n = e^{\frac{-i\pi}{4}} \frac{1}{\sqrt{t}} \left[(r - a) - \frac{k_n t}{2} \right]. \quad (5.21)$$

La derivación de esta expresión la podemos encontrar en [17].

En el siguiente capítulo estudiaremos las diferentes normalizaciones que se han propuesto por diversos autores y estableceremos una equivalencia entre ellas.

6. Equivalencia entre las diferentes Normalizaciones de los Estados Resonantes.

La normalización usual de funciones de onda en Mecánica Cuántica ($\int |\Psi|^2$) no aplica para los Estados Resonantes puesto que la función de onda de estos estados crece exponencialmente en valor absoluto a grandes distancias. En el Apéndice C se resuelve este problema calculando el residuo de la función de Green en el polo k_n . En efecto, este calculo implica la condición de normalización para Estados Resonantes introducida por García-Calderón y Peierls [2]:

$$N_0 = \int_0^a u_n^2(r) dr + i \frac{u_n^2(a)}{2k_n} = 1. \quad (6.1)$$

Sin embargo, otros autores han introducido otros métodos para normalizar los Estados Resonantes. En este capítulo presentaremos dos de estas normalizaciones alternativas y mostraremos que son equivalentes a la que obtuvimos con el residuo de la función de Green.

La primera normalización alternativa N_1 que presentaremos fue introducida por Zel'dovich en 1961 [7]. Se trata de un método de regularización que consiste en multiplicar el factor a integrar por $e^{-\alpha r^2}$, luego integrar sobre todo el espacio y finalmente hacer tender α a cero. Es decir:

$$N_1 = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \int_0^\infty e^{-\alpha r^2} u_n^2(r) dr \quad (6.2)$$

6. *Equivalencia entre las diferentes Normalizaciones de los Estados Resonantes.*

Vamos entonces a demostrar que N_1 es igual a N_0 . Separando N_1 en dos integrales, una de 0 a a y otra de a a $+\infty$, tenemos:

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} \int_0^{\infty} e^{-\alpha r^2} u_n^2(r) dr = \int_0^a u_n^2(r) dr + \lim_{\alpha \rightarrow 0} \int_a^{\infty} e^{-\alpha r^2} u_n^2(r) dr \quad (6.3)$$

Para $r \geq a$, tenemos por (4.7) que $u_n^2(r) = B_n^2 e^{2ik_n r} \equiv B_n^2 e^{zr}$ en donde $z = 2ik_n$. Por lo tanto,

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} \int_0^{\infty} e^{-\alpha r^2} u_n^2(r) dr = \int_0^a u_n^2(r) dr + B_n^2 \lim_{\alpha \rightarrow 0} \int_a^{\infty} e^{zr - \alpha r^2} dr \quad (6.4)$$

Usando ahora el hecho que $\int_a^{\infty} = \int_0^{\infty} - \int_0^a$ en el último término de esta ecuación y calculando explícitamente $B_n^2 \int_0^a e^{zr}$ obtenemos que

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} \int_0^{\infty} e^{-\alpha r^2} u_n^2(r) dr = \int_0^a u_n^2(r) dr + i \frac{u_n^2(a)}{2k_n} + B_n^2 \left[\frac{1}{z} + \lim_{\alpha \rightarrow 0} \int_0^{\infty} e^{zr - \alpha r^2} dr \right] \quad (6.5)$$

En esta ecuación hemos logrado hacer aparecer las dos normalizaciones N_1 y N_0 . Lo que queda por hacer es mostrar que el último término de esta ecuación es idéntico a cero. Factorizando por $e^{\frac{z^2}{4\alpha}}$, uno puede verificar que

$$\int_0^{\infty} e^{zr - \alpha r^2} dr = e^{\frac{z^2}{4\alpha}} \int_0^{\infty} e^{-(\sqrt{\alpha}r - \frac{z}{2\sqrt{\alpha}})^2} dr \quad (6.6)$$

El cambio de variable $t = \sqrt{\alpha}r - \frac{z}{2\sqrt{\alpha}}$ en la integral precedente con las consideraciones: (i) $dt = \sqrt{\alpha}dr$ (ii) cuando r va al infinito t va también al infinito y (iii) cuando r va a cero t va a $-\frac{z}{2\sqrt{\alpha}}$, nos lleva a

$$\int_0^{\infty} e^{zr - \alpha r^2} dr = \frac{e^{\frac{z^2}{4\alpha}}}{\sqrt{\alpha}} \int_{-\frac{z}{2\sqrt{\alpha}}}^{\infty} e^{-t^2} dt. \quad (6.7)$$

Podemos ahora identificar el lado derecho de esta ecuación con la función de error complementaria [18] definida por $\text{erfc}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_z^{\infty} e^{-t^2} dt$. En efecto, se tiene entonces

6. Equivalencia entre las diferentes Normalizaciones de los Estados Resonantes.

$$\int_0^{\infty} e^{zr-\alpha r^2} dr = \frac{e^{\frac{z^2}{4\alpha}} \sqrt{\pi}}{\sqrt{\alpha}} \operatorname{erfc} \left(-\frac{z}{2\sqrt{\alpha}} \right). \quad (6.8)$$

Es decir,

$$\int_0^{\infty} e^{zr-\alpha r^2} dr = -\frac{1}{z} \left[\sqrt{\pi} \frac{-z}{2\sqrt{\alpha}} e^{\frac{z^2}{4\alpha}} \operatorname{erfc} \left(-\frac{z}{2\sqrt{\alpha}} \right) \right]. \quad (6.9)$$

En la misma referencia de Abramovitz [18] encontramos la expansión para $w \rightarrow \infty$ de la función de error complementaria:

$$\sqrt{\pi} w e^{w^2} \operatorname{erfc}(w) \sim 1 - \frac{1}{2w^2} + O\left(\frac{1}{w^2}\right) \quad (6.10)$$

Si usamos esta expansión para $w = -\frac{z}{2\sqrt{\alpha}}$ obtenemos, cuando alpha tiende a cero:

$$\sqrt{\pi} \frac{-z}{2\sqrt{\alpha}} e^{\frac{z^2}{4\alpha}} \operatorname{erfc} \left(-\frac{z}{2\sqrt{\alpha}} \right) \sim 1 + \frac{2\alpha}{z^2} + O(\alpha^2). \quad (6.11)$$

Sustituyendo este desarrollo para $\alpha \ll 1$ en la ecuación (6.9) se obtiene:

$$\int_0^{\infty} e^{zr-\alpha r^2} dr = -\frac{1}{z} \left[1 + \frac{2\alpha}{z^2} + O(\alpha^2) \right]. \quad (6.12)$$

Y en el limite $\alpha \rightarrow 0$,

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} \int_0^{\infty} e^{zr-\alpha r^2} dr = -\frac{1}{z} \quad (6.13)$$

Remplazando finalmente este resultado en la ecuación (6.5) llegamos a la equivalencia entre N_0 y N_1 :

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} \int_0^{\infty} e^{-\alpha r^2} u_n^2(r) dr = \int_0^a u_n^2(r) dr + i \frac{u_n^2(a)}{2k_n}. \quad (6.14)$$

lo que muestra que la normalización de Zel'dovich es equivalente a la normalización que obtuvimos a través del residuo de la función G^+ .

6. Equivalencia entre las diferentes Normalizaciones de los Estados Resonantes.

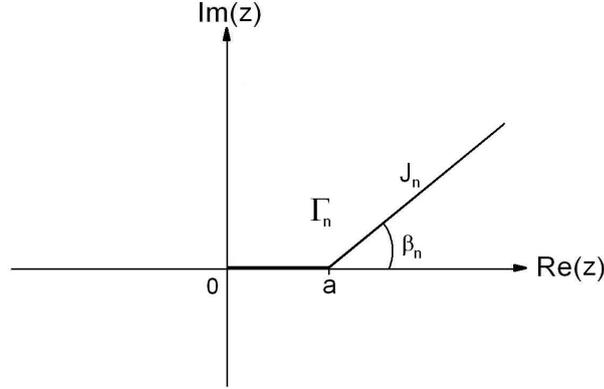


Fig. 6.1.: El contorno Γ_n consiste de dos partes: Una parte real que va de 0 a a y una parte compleja J_n que va de a a $+\infty$ con un ángulo β_n en donde $\beta_n = -\arg(k_n) + \epsilon$, $\epsilon \ll 1$

Por otra parte, se tiene la normalización N_2 utilizada por autores como Leung [3]. Esta normalización requiere la definición de un contorno Γ_n como el que se muestra en la figura 6.1. Se tiene entonces que

$$N_2 = \int_{\Gamma_n} u_n^2(z) dz \quad (6.15)$$

y lo que vamos a mostrar ahora es que $N_2 = N_0$. Empezamos separando N_2 en dos integrales (ver figura 6.1):

$$\int_{\Gamma_n} u_n^2(z) dz = \int_0^a u_n^2(r) dr + \int_{J_n} u_n^2(z) dz \quad (6.16)$$

pero para $r > a$, o en este caso $|r| > a$, tenemos $u_n(r) = B_n e^{ik_n r}$; i.e.:

$$\int_{\Gamma_n} u_n^2(z) dz = \int_0^a u_n^2(r) dr + B_n^2 \int_{J_n} e^{2ik_n z} dz. \quad (6.17)$$

Sobre el contorno J_n tenemos la parametrización $z = a + r e^{i\beta_n}$, con a y β_n constantes y r variando entre cero y el infinito. Es decir que

$$\int_{J_n} e^{2ik_n z} dz = e^{i\beta_n} \int_0^\infty e^{2ik_n(a + r e^{i\beta_n})} dr. \quad (6.18)$$

6. Equivalencia entre las diferentes Normalizaciones de los Estados Resonantes.

Y por lo tanto,

$$\int_{J_n} u_n^2(z) dz = u_n^2(a) e^{i\beta_n} \int_0^\infty e^{2ik_n e^{i\beta_n} r} dr \quad (6.19)$$

Calculemos ahora $\int_0^\infty e^{2ik_n e^{i\beta_n} r} dr$.

Definiendo $\alpha_n = \arg(k_n)$ se tiene $\beta_n = -\alpha_n + \epsilon$ y

$$e^{2ik_n e^{i\beta_n} r} = e^{2i|k_n| e^{i\beta_n + i\alpha_n} r} = e^{2i|k_n| r} e^{-2|k_n| r \epsilon} \quad (6.20)$$

por lo que

$$| e^{2ik_n e^{i\beta_n} r} | = e^{-2|k_n| r \epsilon} \longrightarrow 0 \quad (6.21)$$

cuando $r \rightarrow \infty$. i.e.

$$\int_0^\infty e^{2ik_n e^{i\beta_n} r} dr = \frac{1}{2ik_n e^{i\beta_n}} [0 - 1] = \frac{i}{2k_n e^{i\beta_n}}. \quad (6.22)$$

Por lo tanto,

$$\int_{J_n} u_n^2(z) dz = \frac{i u_n^2(a)}{2k_n} \quad (6.23)$$

y finalmente,

$$\int_{\Gamma_n} u_n^2(z) dz = \int_0^a u_n^2(r) dr + i \frac{u_n^2(a)}{2k_n} \quad (6.24)$$

es decir que $N_2 = N_1$.

Con esto hemos mostrado que las tres normalizaciones N_0 , N_1 y N_2 son equivalentes. Para concluir, vale la pena mencionar que la normalización más interesante y más cómoda es sin duda N_0 puesto que únicamente depende de la región interna $[0; a]$ y pone en evidencia el hecho que el comportamiento de los Estados Resonantes fuera del potencial no influye en la normalización de dichos estados.

Procederemos ahora en una tercera parte a comparar las dos expresiones que tenemos de la función de onda; la que obtuvimos en la primera parte en la base de las funciones del Continuo y la que obtuvimos en el capítulo anterior en la base de Estados Resonantes.

Parte III.

Equivalencia entre las bases
 $\{\psi^+(k, r), k \in \mathbb{R}\}$ y $\{u_n(r), n \in \mathbb{Z}\}$
Aplicación al potencial delta

7. Aplicación numérica al potencial delta

En este capítulo utilizaremos métodos numéricos para poner en evidencia la equivalencia entre las dos expresiones que tenemos para la función de onda. Nos restringiremos al potencial delta $V(r) = \lambda\delta(r - a)$, cuyos polos se calcularon en el capítulo 4. La función de onda $\Psi(r, t)$ es un número complejo que depende de dos variables (r y t). Queda claro que por estas razones sería complicado obtener una representación gráfica de la función de onda que nos permita ver el comportamiento físico del sistema. Podríamos entonces representar $|\Psi(r, t)|^2$ en función del tiempo en un punto r_0 o bien en función de r a un tiempo t_0 dado. Pero como la función de onda depende del estado inicial del sistema más interesante aún es representar el traslape de la función de onda con este estado inicial en función del tiempo. Como el estado inicial está confinado en la región interna, este traslape queda definido por:

$$A(t) = \int_0^a \Psi^*(r, 0)\Psi(r, t)dr. \quad (7.1)$$

$A(t)$ es un número complejo llamado Amplitud de Supervivencia. La probabilidad de supervivencia es entonces,

$$S(t) = |A(t)|^2. \quad (7.2)$$

$S(t)$ representa, como su nombre lo indica, la probabilidad de que el sistema continúe después de un tiempo t en el estado inicial $\Psi(r, 0)$. Determinemos entonces las expresiones respectivas de $A(t)$ tanto en la base del Continuo como en la base de Estados Resonantes. Para la base del continuo, usando la ecuación (3.11) y la definición de $c(k)$ en (7.1) uno obtiene de manera inmediata que

7. Aplicación numérica al potencial delta

$$A_c(t) = \int_0^{+\infty} |c(k)|^2 e^{-ik^2 t} dk \quad (7.3)$$

en donde el subíndice c hace referencia a la base del Continuo.

Por otra parte, utilizando las ecuaciones (5.18) y (5.19) en (7.1) obtenemos para la expresión de Ψ en la base de Estados Resonantes que

$$A_{ER}(t) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} c_n^2 M(k_n, t). \quad (7.4)$$

Suponemos que el estado inicial del sistema es el q -ésimo eigenestado de la caja de 0 a a , es decir que

$$\Psi(r, 0) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{q\pi}{a} r\right) \quad (7.5)$$

Para determinar A_c basta con conocer $c(k)$ y realizar la integral sobre k correspondiente. Recordemos que los estados del Continuo están dados por

$$\psi^+(k, r) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\sin(kr)}{J_+(k)} \quad (7.6)$$

y que, como lo vimos en el capítulo 4,

$$J_+(k) = 2ik + \lambda[e^{2ika} - 1]. \quad (7.7)$$

El cálculo explícito de $|c(k)|^2$ nos da entonces

$$|c(k)|^2 = \frac{a}{\pi} \frac{1}{|J_+(k)|^2} [\mathbf{sinc}(q\pi - ka) - \mathbf{sinc}(q\pi + ka)]^2. \quad (7.8)$$

Con esto, basta con multiplicar esta última expresión por $e^{-ik^2 t}$ y utilizar la regla de Simpson para métodos numéricos [19] aplicada a la ecuación (3.11). Este método consiste en dividir el intervalo de integración en m partes y aproximar la integral usando sobre cada segmento de tamaño $[a; b]$ según

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{b-a}{6} \left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right]. \quad (7.9)$$

7. Aplicación numérica al potencial delta

Para una descripción más completa de este método de Simpson se recomienda la referencia [19].

Por otra parte, para determinar $A_{ER}(t)$ utilizamos como primera herramienta el método de Newton-Raphson para determinar los polos k_n como lo hicimos en el capítulo 4. Si nos encontramos inicialmente en uno de los 10 primeros estados excitados, considerar los 50 o 100 primeros polos es una buena aproximación. A continuación se utiliza otra rutina que para cada polo k_n y para cada valor de t nos da el valor de la función $M(k_n, t)$. Por último tenemos que determinar el valor de c_n , el cual depende de $\Psi(r, 0)$ y de $u_n(r)$. $\Psi(r, 0)$ queda determinado por (7.5). Para $u_n(r)$ tenemos $u_n(r) = A_n \sin(k_n r)$ en donde la constante A_n se obtiene con la condición de normalización (5.7). Con esto tenemos finalmente que

$$u_n(r) = \left[\frac{2}{a} \frac{1}{1 + \frac{e^{-2ik_n a}}{\lambda a}} \right]^{\frac{1}{2}} \sin(k_n r), \quad (7.10)$$

y por lo tanto se puede calcular explícitamente c_n usando (6.2) con lo que se obtiene

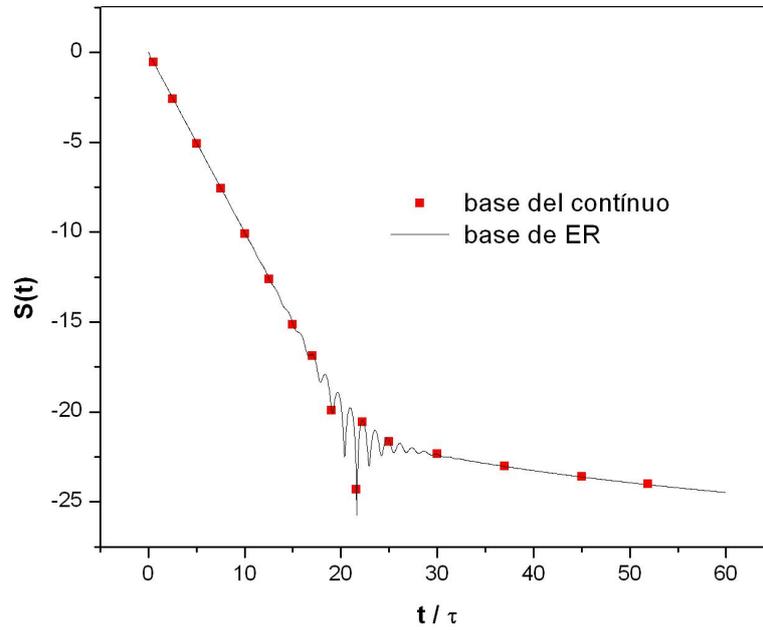
$$c_n^2 = \frac{2}{a} \left[1 + \frac{e^{-2ik_n a}}{\lambda a} \right] [\text{sinc}(q\pi - k_n a) - \text{sinc}(q\pi + k_n a)]^2 \quad (7.11)$$

Es impresionante la similaridad que existe entre la forma de c_n^2 y $|c(k)|^2$ (ecuaciones (7.8) y (7.11)). Tenemos ahora los elementos necesarios para graficar las dos amplitudes de supervivencia en función del tiempo. Lo que se obtiene, para los dos primeros estados de la caja como estados iniciales corresponde a las figuras 1 y 2 de la página 38.

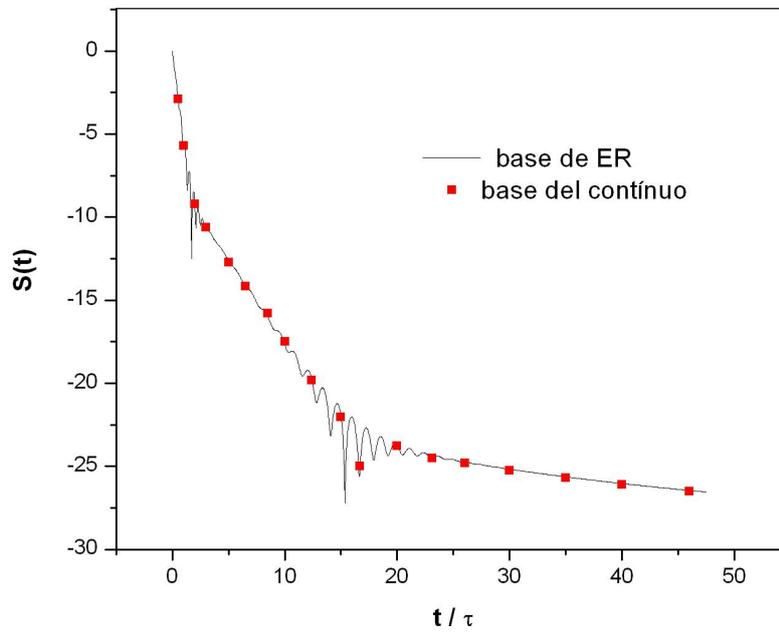
Con estas dos figuras queda clara la equivalencia entre las dos bases. En efecto, para ambas, los puntos discretos rojos que representan la amplitud de supervivencia en la base del Continuo se sobrepone con la línea continua que corresponde a la amplitud de supervivencia expresada en la base de Estados Resonantes. De esta manera, con el potencial delta y con los dos primeros estados de la caja hemos mostrado numericamente que ambas bases son equivalentes.

7. Aplicación numérica al potencial delta

Amplitud de supervivencia para el potencial delta, $a = 1$, $\lambda = 6$, $q = 1$



Amplitud de supervivencia para el potencial delta, $a = 1$, $\lambda = 6$, $q = 2$



8. Descripción analítica del comportamiento de $A(t)$ a través del tiempo

En el capítulo precedente se estableció numericamente la equivalencia entre dos expresiones de la función de onda para un potencial delta. Una en la base del Continuo, la otra en la base de Estados Resonantes. En este capítulo buscamos, a partir de la expresión obtenida para la función de onda en términos de los Estados Resonantes (ecuación (5.18)), obtener el comportamiento analítico de esta función a través del tiempo. Lo que hacemos es manipular la expresión de la función $M(k_n, t)$ para conocer el comportamiento que tendrá la amplitud de supervivencia en función del tiempo. En efecto, la expresión de la función de Green dependiente del tiempo en la base de Estados Resonantes para la región interna (5.17) se puede escribir fácilmente como

$$g(r, r', t) = \sum_{n=1}^{\infty} [u_n(r)u_n(r')M(k_n, t) + u_n^*(r)u_n^*(r')M(k_{-n}, t)], \quad (8.1)$$

en donde hemos utilizado $u_{-n} = u_n^*$. Como los polos son propios (es decir que se verifica para todo n que $\alpha_n > \beta_n$), podemos considerar la relación de simetría de la función M [18]

$$M(k_n, t) = e^{-ik_n^2 t} - M(-k_n, t), \quad (8.2)$$

y escribir por lo tanto (8.1) como

$$g(r, r', t) = \sum_{n=1}^{\infty} u_n(r)u_n(r')e^{-ik_n^2 t} - I(r, r', t), \quad (8.3)$$

con

8. Descripción analítica del comportamiento de $A(t)$ a través del tiempo

$$I(r, r', t) = \sum_{n=1}^{\infty} [u_n(r)u_n(r')M(-k_n, t) - u_n^*(r)u_n^*(r')M(k_{-n}, t)]. \quad (8.4)$$

Sin embargo, para tiempos largos ($t \rightarrow \infty$) y para polos propios la función M se puede desarrollar como [18]:

$$M(k_n, t) \longrightarrow \frac{1}{\sqrt{\pi}y_n} - \frac{1}{2\sqrt{\pi}y_n^2} + \dots \quad (8.5)$$

en donde recordamos que $y_n = -e^{-i\pi/4}k_n t^{1/2}$. Utilizando (8.5) en (8.4) y la expresión anterior de y_n tenemos que para tiempos largos en la región interna:

$$I(r, r', t) = \begin{cases} -\frac{i}{2(i\pi)^{1/2}} \sum_{n=1}^{\infty} \left[\frac{u_n(r)u_n(r')}{k_n} - \frac{u_n^*(r)u_n^*(r')}{k_n^*} \right] \frac{1}{t^{1/2}} \\ -\frac{1}{4(i\pi)^{1/2}} \sum_{n=1}^{\infty} \left[\frac{u_n(r)u_n(r')}{k_n^3} - \frac{u_n^*(r)u_n^*(r')}{k_n^{3*}} \right] \frac{1}{t^{3/2}} + \dots \end{cases} \quad (8.6)$$

El primer término de (8.6) es igual a cero pues se identifica con la regla de suma (5.11). En consecuencia prevalece únicamente el término proporcional a $1/t^{3/2}$ y, finalmente, la función de green retardada se puede escribir a tiempos largos como:

$$g(r, r', t) \approx \sum_{n=1}^{\infty} u_n(r)u_n(r')e^{-ik_n^2 t} - \frac{i}{2(i\pi)^{1/2}} \text{Im} \left[\sum_{n=1}^{\infty} \frac{u_n(r)u_n(r')}{k_n^3} \right] \frac{1}{t^{3/2}}. \quad (8.7)$$

Luego inyectamos esta aproximación de la función g en (1.7) para obtener:

$$\Psi(r, t) \approx \sum_{n=1}^{\infty} c_n u_n(r) e^{-ik_n^2 t} - \frac{i}{2(i\pi)^{1/2}} \text{Im} \left[\sum_{n=1}^{\infty} \frac{c_n u_n(r)}{k_n^3} \right] \frac{1}{t^{3/2}} \quad (8.8)$$

y por último sustituimos esta aproximación de Ψ en (7.1) para obtener la amplitud de supervivencia

8. Descripción analítica del comportamiento de $A(t)$ a través del tiempo

$$A(t) \approx \sum_{n=1}^{\infty} c_n \bar{c}_n e^{-i\varepsilon_n t} e^{-\frac{\Gamma_n t}{2}} - \frac{i}{2(i\pi)^{1/2}} \text{Im} \left[\sum_{n=1}^{\infty} \frac{c_n \bar{c}_n}{k_n^3} \right] \frac{1}{t^{3/2}} \quad (8.9)$$

en donde hemos utilizado $k_n^2 = \varepsilon_n - i\frac{\Gamma_n t}{2}$ y

$$\bar{c}_n = \int_0^a \Psi^*(r, 0) u_n(r) dr. \quad (8.10)$$

La ecuación (7.9) es el resultado que queríamos obtener pues describe el comportamiento del sistema a través del tiempo. En efecto, éste decae primero en forma exponencial según $e^{-\frac{\Gamma_n t}{2}}$ para luego decaer como $\frac{1}{t^{3/2}}$. En la primera gráfica de la página 38 el sistema se encuentra inicialmente en el primer estado excitado $q = 1$, por lo que el traslape del estado inicial con los Estados Resonantes más grande ocurre con el primer estado y por lo tanto la vida media más importante es Γ_1 y el sistema decae entonces primero como $e^{-\frac{\Gamma_1 t}{2}}$ y finalmente como $\frac{1}{t^{3/2}}$. Para la segunda gráfica, el sistema se encuentra inicialmente en el segundo estado excitado $q = 2$. En este caso, el c_n más significativo es c_2 y por lo tanto el sistema decae primero como $e^{-\frac{\Gamma_2 t}{2}}$, luego como $e^{-\frac{\Gamma_1 t}{2}}$ y finalmente como $\frac{1}{t^{3/2}}$. Este análisis del comportamiento del decaimiento -primero exponencial, luego como potencia inversa de $t^{3/2}$ - hubiese sido imposible de obtener con la expresión análoga de $A(t)$ en términos de las soluciones físicas (ecuación 7.3), puesto que para esta última es necesario calcular la integral para obtener el decaimiento del sistema en el tiempo.

9. Conclusiones

En el capítulo 6 se estudiaron tres normalizaciones distintas para los Estados Resonantes y se estableció que éstas eran equivalentes. Estas normalizaciones, que parecían ser distintas e independientes -tanto en forma como en contexto- resultan ahora ser una herramienta de un mismo formalismo. Si bien los Estados Resonantes son utilizados en distintas áreas de la Física -incluso bajo diferentes nombres- este resultado le da un carácter universal y alentador al estudio de este formalismo de Estados Resonantes.

Por otra parte, en el capítulo 7 obtuvimos (a través de las gráficas p.38) la equivalencia para la amplitud de supervivencia en la base de Estados Resonantes y en la base de las funciones del Continuo. Esto nos permite concluir primeramente que ambas descripciones son exactas y pueden ser usadas para problemas de decaimiento, lo cual era de esperarse puesto que ambos formalismos derivan del mismo origen que es la función de Green $g(r, r', t)$, es decir, el operador de evolución temporal del sistema. Por otra parte, concluimos también que el formalismo de Estados Resonantes permite describir sistemas abiertos (como el caso de nuestra partícula atrapada en un potencial delta) sin tener que modificar o cambiar algún postulado o axioma de la Mecánica Cuántica como lo sugieren algunos autores [11],[10].

Además, desde un punto de vista puramente numérico, los cálculos para obtener la amplitud de supervivencia, la función de onda y de manera general cualquier observable del sistema, son mucho más sencillos en la base de Estados Resonantes que en la base del Continuo. Este hecho lo podemos ilustrar con las gráficas de la página 38. En estas gráficas tenemos la amplitud de supervivencia en función del tiempo para las dos bases en cuestión. Lo que observamos es que para la base del Continuo tenemos al rededor de 20 puntos en cada una de las gráficas, mientras que con la base de Estados Resonan-

9. Conclusiones

tes tenemos una amplia gama de puntos (que forman un continuo) que nos dan por lo tanto más riqueza y precisión. Si hubiésemos querido tener tantos puntos con la base del Continuo habríamos tenido que invertir muchas horas de cálculo numérico, mientras que con los Estados Resonantes obtuvimos una cantidad de datos netamente superior en tan sólo segundos.

En el capítulo 8 el formalismo de Estados Resonantes nos permitió conocer el comportamiento analítico de la amplitud de supervivencia (primero decaimiento exponencial y luego decaimiento como función inversa de $t^{3/2}$ a través del tiempo (ecuación (8.9)). Este comportamiento hubiese sido muy difícil de obtener con la expresión análoga de $A(t)$ en términos de las funciones del Continuo, puesto que para esta expresión es necesario calcular la integral, que es como una caja negra, para conocer como decae el sistema en el tiempo. Esto nos permite concluir que el formalismo de Estados Resonantes tiene la enorme ventaja sobre el formalismo de las funciones del Continuo de permitirnos conocer el comportamiento del sistema como función del tiempo.

Finalmente, es importante mencionar que esta equivalencia que obtuvimos y que ejemplificamos no es exclusiva para el potencial delta. En efecto, al tratarse de un conjunto infinito de resonancias, el potencial delta tiene todos los ingredientes físicos que otros sistemas, lo cual nos permite generalizar la equivalencia para cualquier potencial de alcance finito.

En definitiva, el formalismo de Estados Resonantes resulta ser un formalismo exacto y completo que nos facilita los cálculos numéricos y nos permite conocer la evolución del sistema a través del tiempo. Como trabajo a futuro, sería interesante: i) poder establecer analíticamente -y no solo numéricamente- la equivalencia entre las dos bases. ii) utilizar el formalismo de Estados Resonantes para estudiar el comportamiento de sistemas cuánticos abiertos a tiempos cortos.

Parte IV.

Apéndices

A. Transformada de Laplace y función de Green.

La transformada de Laplace inversa de la función de Green retardada $G^+(r, r', k)$ nos permite obtener la función de Green dependiente del tiempo $g(r, r', t)$. De manera general, la transformada de Laplace inversa de una función $F(s)$ está dada por:

$$f(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} F(s)e^{st} ds. \quad (\text{A.1})$$

Aquí la integración se hace sobre el camino vertical $Re(s) = \gamma$ en donde γ debe ser más grande que la parte real de cualquier singularidad de F . Haciendo el cambio de variable $s = -iE$, se tiene entonces para la función de Green

$$g(r, r', t) = \frac{1}{2i\pi} \int_C G^+(r, r', E)e^{-iEt} dE \quad (\text{A.2})$$

en donde el contorno C queda en el plano complejo E según la figura (A.1).

Sin embargo, G^+ es una función univaluada en k con $E = k^2$. Esto implica que al realizar el cambio de variable del plano E al plano k los cuadrantes I y II de la hoja física quedan en el primer cuadrante del plano k . El contorno C se curva y prevalece entonces en este primer cuadrante como lo muestra la figura (A.2), y se tiene con el cambio de variable $dE = 2kdk$:

$$g(r, r', t) = \frac{1}{2i\pi} \int_{C'} G^+(r, r', k)e^{-ik^2t} 2kdk \quad (\text{A.3})$$

Por último, para obtener la expresión de g en función de los estados ligados del potencial y en términos de una integral de G^+ sobre el eje real cerramos

A. Transformada de Laplace y función de Green.

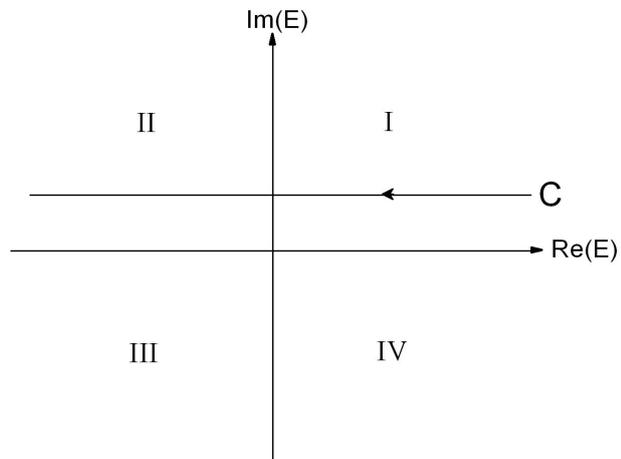


Fig. A.1.: El contorno C en la hoja física de Energía. Este contorno atraviesa los dos primeros cuadrantes de derecha a izquierda.

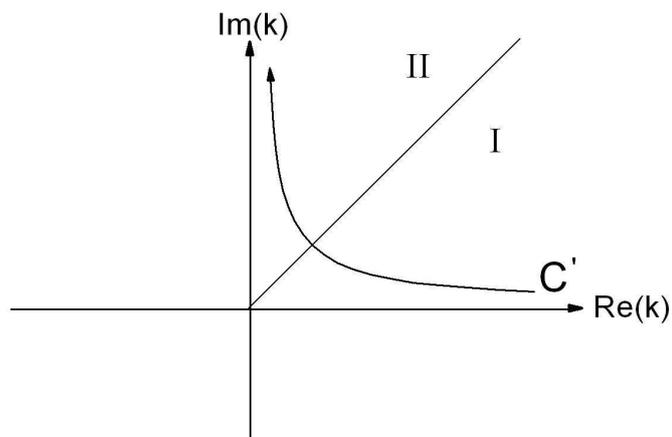


Fig. A.2.: El contorno C' en el plano k . Puesto que G^+ debe ser univaluada en k el contorno se curva y permanece en el primer cuadrante de este plano.

el contorno C' al infinito e incluimos únicamente los estados ligados como lo muestra la figura A.3.

El teorema de los residuos aplicado al contorno de la figura A.3 implica

A. Transformada de Laplace y función de Green.

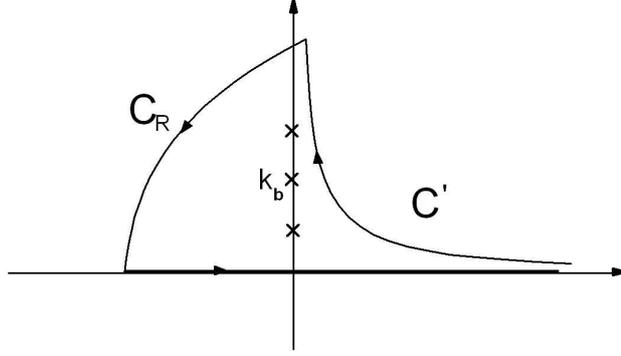


Fig. A.3.: Este contorno cerrado Γ está formado por el contorno C' , el contorno C_R y el eje real. Las singularidades que se tienen adentro son únicamente los estados ligados k_b .

$$\int_{\Gamma} G^+(r, r', k) e^{-ik^2 t} 2k dk = 2i\pi \sum_b \psi_b(r) \psi_b(r') e^{-ik_b^2 t} \quad (\text{A.4})$$

en donde la suma del lado derecho corresponde al residuo de la función $G^+(r, r', k) 2k e^{-ik^2 t}$ en el polo $k = k_b$. Por otra parte, se puede mostrar que la contribución del semi-círculo C_R en la integral tiende a cero cuando R , el radio del círculo, va al infinito. Por lo tanto,

$$\int_{\Gamma} G^+(r, r', k) e^{-ik^2 t} 2k dk = \begin{cases} \int_{C'} G^+(r, r', k) e^{-ik^2 t} 2k dk \\ + \int_{-\infty}^{+\infty} G^+(r, r', k) e^{-ik^2 t} 2k dk \end{cases} \quad (\text{A.5})$$

y sustituyendo esta expresión en (A.4) y utilizando (A.3) obtenemos finalmente

$$g(r, r', t) = \sum_b \psi_b(r) \psi_b(r') e^{-ik_b^2 t} + \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} G^+(r, r', k) e^{-ik^2 t} 2k dk. \quad (\text{A.6})$$

B. Aplicación del método de Newton-Raphson para los polos del potencial delta.

El método de Newton-Raphson es uno de los más famosos y efectivos para encontrar los zeros (polos) de funciones reales y complejas. En cualquier referencia de métodos numéricos aplicados a la física como [19] podemos encontrar una descripción detallada y justificada de este método así como de sus aplicaciones. En este apéndice nos enfocaremos en encontrar las soluciones de la ecuación de los polos del potencial delta. Para poder emplear el método de Newton-Raphson es necesario que la función f que consideremos sea derivable en la región en la que estamos buscando sus zeros. Además, es necesario conocer una aproximación z_0 del polo que queremos calcular. Si f' es la derivada de f y z_0 es una aproximación de la solución z que verifica $f(z) = 0$, entonces este método tiene como premisa que

$$z_1 = z_0 - \frac{f(z_0)}{f'(z_0)} \quad (\text{B.1})$$

es una mejor aproximación del polo que z_0 . Sucesivamente, repetimos este proceso hasta que obtengamos la precisión ϵ que deseamos, es decir hasta que $|f(z_m)| < \epsilon$, y

$$z_{m+1} = z_m - \frac{f(z_m)}{f'(z_m)} \quad (\text{B.2})$$

Apliquemos este método a la ecuación (4.6) de los polos del potencial $V(r) = \lambda\delta(r - a)$. La función f y su derivada f' son en este caso:

B. Aplicación del método de Newton-Raphson para los polos del potencial delta.

$$\begin{cases} f(z) = 2iz + \lambda(e^{2iza} - 1) \\ f'(z) = 2i(1 + \lambda ae^{2iza}) \end{cases} \quad (\text{B.3})$$

Teniendo f y f' lo que nos queda por determinar es una aproximación k_n^0 del n -ésimo polo k_n . Para esto conviene remplazar en la ecuación de los polos (4.6) k_n por $\alpha_n - i\beta_n$. Separando en una ecuación para la parte real y otra para la parte imaginaria nos queda el siguiente sistema de dos ecuaciones:

$$\begin{cases} 2\beta_n a + \lambda a \cos(2\alpha_n a) e^{2\beta_n a} = 0 \\ 2\alpha_n a + \lambda a \sin(2\alpha_n a) e^{2\beta_n a} = 0 \end{cases} \quad (\text{B.4})$$

Este sistema es equivalente a

$$\begin{cases} \beta_n = \frac{1}{4a} \ln \left[\left(\frac{2\alpha_n}{\lambda} \right)^2 + \left(1 - \frac{2\beta_n}{\lambda} \right)^2 \right] \\ \alpha_n = \frac{1}{2a} \arctan \left| \frac{2\alpha_n}{2\beta_n - \lambda} \right| \end{cases} \quad (\text{B.5})$$

Sabemos que cuando λ tiende a infinito el problema se reduce al caso de la caja (estado confinado en la región $[0; a]$). En este caso se tiene $\alpha_n \rightarrow n\pi/a$ y $\beta_n \rightarrow 0$. Suponemos entonces que nuestro polo aproximado se escribe

$$\begin{cases} \alpha_n^0 = \frac{n\pi}{a} + \epsilon_n, & \epsilon_n \ll \frac{n\pi}{a} \\ \beta_n^0 \approx 0, & \beta_n \ll \alpha_n \end{cases} \quad (\text{B.6})$$

Remplazando esta expresión de α_n^0 en la segunda línea de (B.5) se obtiene que

$$\tan(2n\pi + 2\epsilon_n a) = \frac{\frac{2n\pi}{a} + 2\epsilon_n}{2\beta_n - \lambda} \quad (\text{B.7})$$

y usando $\lambda \gg \beta_n$ y $\epsilon_n \ll n\pi/a$ esta última ecuación se escribe

$$\epsilon_n = -\frac{1}{2a} \arctan \left| \frac{2n\pi}{\lambda a} \right| \simeq -\frac{n\pi}{\lambda a^2}. \quad (\text{B.8})$$

Por lo tanto,

$$\alpha_n^0 = \frac{n\pi}{a} \left| 1 - \frac{1}{\lambda a} \right|. \quad (\text{B.9})$$

B. Aplicación del método de Newton-Raphson para los polos del potencial delta.

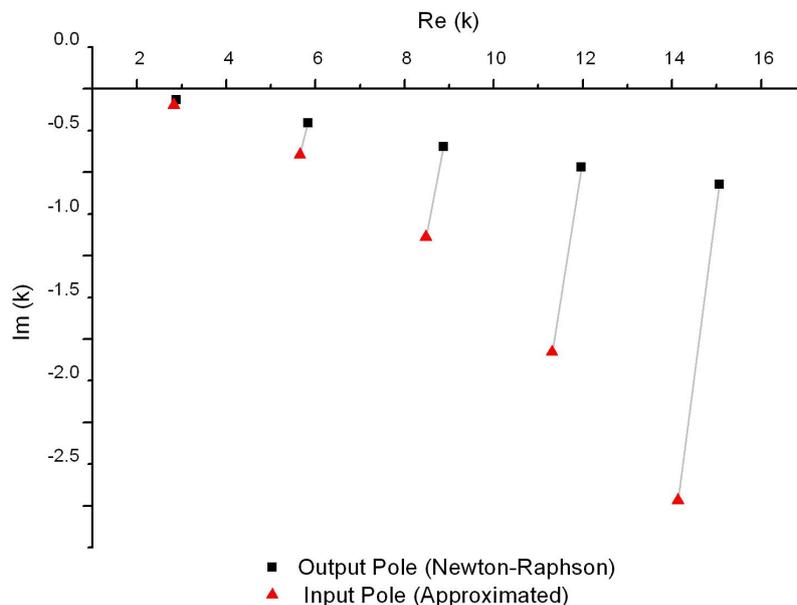


Fig. B.1.: Distribución de los primeros polos del potencial delta para $a = 1$ y $\lambda = 10$. En rojo aparecen los polos aproximados de entrada k_n^0 mientras que en negro tenemos los polos de salida obtenidos con el método Newton-Raphson. La precisión de éstos va a 10^{-8}

Por otra parte, usando $\beta_n \approx 0$ y $\lambda \gg \alpha_n$ la primera línea de (B.5) se simplifica como:

$$\beta_n^0 = \frac{1}{4a} \ln \left[1 + \left(\frac{2\alpha_n}{\lambda} \right)^2 \right] \simeq \frac{1}{4a} \left(\frac{2\alpha_n}{\lambda} \right)^2 \quad (\text{B.10})$$

y por lo tanto nuestro polo aproximado $k_n^0 = \alpha_n^0 + i\beta_n^0$ se escribe

$$k_n^0 = \frac{n\pi}{a} \left(1 - \frac{1}{\lambda a} \right) - i \frac{1}{a} \left(\frac{n\pi}{\lambda a} \right)^2. \quad (\text{B.11})$$

Habiendo conseguido una aproximación de las soluciones k_n lo único que nos queda por hacer es la parte numérica. Usando el software *Lahey ED Developer* creamos un programa cuya entrada sea k_n^0 y que a partir de las definiciones de f y f' (ecuación (B.3)) realice el método iterativo (B.2) m veces, es decir hasta que se cumpla $|f(k_n^m)| < \epsilon$. Para $a = 1$, $\lambda = 10$ y $\epsilon = 10^{-8}$ se obtiene la distribución de polos de la figura (B.1).

C. Cálculo del residuo de la función de Green en el polo k_n .

A través de un análisis en el plano complejo k obtuvimos en el capítulo 5 la ecuación (5.6):

$$G^+(r, r', k) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{r_n(r, r')}{k - k_n} \quad \forall r, r' \lesssim a. \quad (\text{C.1})$$

Esta ecuación corresponde al desarrollo de la función de Green G^+ en el plano complejo k . $r_n(r, r')$ corresponde al residuo de esta función de Green en el polo k_n , y en dicho capítulo asumimos que en la región interna

$$r_n(r, r') = \frac{u_n(r)u_n(r')}{2k_n[\int_0^a u_n^2(r)dr + \frac{iu_n^2(a)}{2k_n}]} \quad (\text{C.2})$$

En este Apéndice mostraremos esta igualdad, que proviene del trabajo de García-Calderón y Peierls [2]. Para ello, utilizaremos el teorema de Mittag-Leffler [20]. Este teorema nos dice que cerca del polo k_n la función G^+ se puede escribir como

$$G^+(r, r', k) = \frac{r_n(r, r')}{k - k_n} + E(r, r', k) \quad (\text{C.3})$$

en donde E es una función entera. Sustituimos entonces esta expresión de G^+ en la primera línea de la ecuación (1.3) y obtenemos:

$$\frac{1}{k - k_n} [r_n'' + (k^2 - V)r_n] + E'' + [k^2 - V]E - \delta(r - r') = 0, \quad (\text{C.4})$$

C. Cálculo del residuo de la función de Green en el polo k_n .

en donde por comodidad hemos omitido la dependencia en r y r' . Si ahora sumamos y restamos el término $(k_n^2 r_n)/(k - k_n)$ a esta última ecuación y tomamos el límite cuando k tiende a k_n esto implica que

$$\begin{cases} r_n'' + (k_n^2 - V)r_n = 0 \\ E''(r, r', k_n) + (k_n^2 - V)E(r, r', k_n) + 2k_n r_n(r, r') = \delta(r - r'). \end{cases} \quad (\text{C.5})$$

Si ahora por otra parte sustituimos (C.3) en la segunda línea de (1.3) obtenemos que

$$\frac{r_n(0, r')}{k - k_n} + E(0, r', k) = 0. \quad (\text{C.6})$$

Como la igualdad debe prevalecer para todo k , esto implica que

$$\begin{cases} r_n(0, r') = 0 \\ E(0, r', k) = 0. \end{cases} \quad (\text{C.7})$$

Estas son las condiciones en la frontera $r = 0$ de r_n y de E . Ahora sustituimos la misma expresión (C.3) en la tercera línea de (1.3) (es decir en la condición de G^+ en la frontera $r = a$). Un análisis similar al precedente (primero agrupamos los términos en $1/(k - k_n)$, luego sumamos y restamos $(ik_n r_n(a, r'))/(k - k_n)$ y finalmente tomamos el límite $k \rightarrow k_n$) deriva en el sistema:

$$\begin{cases} r_n'(a, r') = ik_n r_n(a, r') \\ E'(a, r', k) - ir_n(a, r') = ik_n E(a, r', k). \end{cases} \quad (\text{C.8})$$

Tenemos por lo tanto que r_n verifica la primera línea de cada una de las ecuaciones (C.5), (C.7) y (C.8), que son nada más y nada menos que la definición de los Estados Resonantes u_n (ecuación (4.1)). Por lo tanto

$$r_n(r, r') = u_n(r) \cdot P(r'). \quad (\text{C.9})$$

Si por último realizamos la fórmula de Green entre la segunda línea de (C.5) y la primera línea de (4.1) obtenemos que

C. Cálculo del residuo de la función de Green en el polo k_n .

$$P(r') = \frac{u_n(r')}{2k_n \left[\int_0^a u_n^2(r) dr + i \frac{u_n^2(a)}{2k_n} \right]} \quad (\text{C.10})$$

por lo que finalmente,

$$r_n(r, r') = \frac{u_n(r)u_n(r')}{2k_n \left[\int_0^a u_n^2(r) dr + i \frac{u_n^2(a)}{2k_n} \right]}. \quad (\text{C.11})$$

Esta expresión del residuo de la función de Green en el polo k_n implica la condición de Normalización para el n -ésimo estado resonante:

$$\int_0^a u_n^2(r) dr + i \frac{u_n^2(a)}{2k_n} = 1. \quad (\text{C.12})$$

Referencias.

- [1] **Gamow, V. G.**, *Zur Quantentheorie des Atomkernes*, Zeitschrift für Physik, Vol. 51, pp. 204–212, 1928.
- [2] **García-Calderón, G.** and **Peierls, R.**, *Resonant states and their uses*, Nuclear Physics A, Vol. 265, No. 3, pp. 443 – 460, 1976.
- [3] **Leung, P. T.**, **Liu, S. Y.** and **Young, K.**, *Completeness and orthogonality of quasinormal modes in leaky optical cavities*, Phys. Rev. A, Vol. 49, No. 4, pp. 3057–3067, Apr 1994.
- [4] **Leung, P. T.**, **Ching, E. S. C.**, **Young, K.**, **Suen, W.**, **Tong, S. S.** and **Maassen, A.**, *Quasinormal-mode expansion for waves in open systems*, Review of Modern Physics, Vol. 70, No. 4, pp. 1545–1554, Oct 1998.
- [5] **Cohen-Tannoudji, C.**, **Diu, B.** and **Laloe, F.**, Quantum Mechanics, Vol. 1, Wiley-VCH, 1977.
- [6] **García-Calderón, G.**, **Maldonado, I.** and **Villavicencio, J.**, *Resonant-State expansions and the long-time behavior of quantum decay*, Phys. Rev. A, Vol. 76, pp. 1–8, 2007.
- [7] **Zel'dovich, Y.**, *On the theory of Unstable States*, Sov. Phys. JETP, Vol. 12, pp. 542–545, 1961.
- [8] **Aguilar, J.** and **Combes, J.**, *A class of analytic perturbations for one-body Schrödinger Hamiltonians*, Comm. Math. Phys., , No. 22, pp. 269–279, 1971.
- [9] **Balslev, E.** and **Combes, J.**, *Spectral properties of many-body Schrödinger operators with dilatation-analytic interactions*, Comm. Math. Phys., , No. 22, pp. 280–294, 1971.
- [10] **Bohm, A.**, **Bryant, P.** and **Sato, Y.**, *Quantal time asymmetry: mathematical foundation and physical interpretation*, Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical, Vol. 41, No. 30, pp. 304019, 2008.
- [11] **Bender, C. M.**, *Making sense of non hermitian quantum mechanics*, Rep. Prog. Phys., Vol. 70, pp. 947–969, 2007.
- [12] **Newton, R.**, Scattering Theory of Waves and Particles, Springer-Verlag, 2002.
- [13] **Economou, E. N.**, Green's Functions in Quantum Mechanics, Springer, 2006.
- [14] **Appel, W.**, Mathematiques pour la physique et les physiciens, HK, 2005.
- [15] **Appel, W.**, Mathematiques pour la physique et les physiciens, HK, 2005.

REFERENCIAS.

- [16] **Moshinsky, M.**, *Diffraction in Time*, Phys. Rev., Vol. 88, No. 3, pp. 625–631, Nov 1952.
- [17] **García-Calderón, G.**, *Theory of Resonant States: An exact analytical approach for open quantum systems*, Adv. Quant. Chem., Vol. 60, pp. 407, 2010.
- [18] **Abramovitz** and **Stegun**, *Handbook of Mathematical Functions*, Dover, 1972.
- [19] **Hamming, R.**, *Numerical Methods for Scientists and Engineers*, Dover, 1973.
- [20] **Gamelin, T.**, *Complex Analysis*, Springer, 2001.