

EVOLUCION TEMPORAL DEL DECAIMIENTO
EN MECANICA CUANTICA

Felisa Vázquez Abad



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.

INDICE

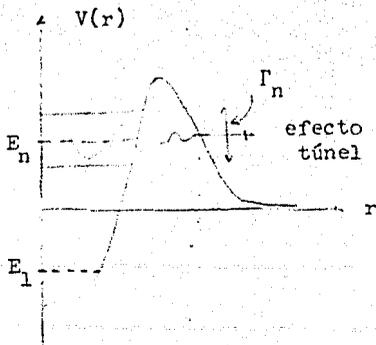
CAPITULO I. INTRODUCCION	7
CAPITULO II. AMPLITUD DE DECAIMIENTO	16
§ 1. La Amplitud de Decaimiento para un Potencial Central.	19
§ 2. La Partícula Libre.	
A) Evolución Temporal en Tres Dimensiones.	24
B) Evolución Temporal para Mo- mento Angular $\ell = 0$.	29
CAPITULO III. TEORIA DE ESTADOS RESONANTES	37
§ 1. Propiedades Analíticas de $G^+(r,r';k)$ en el Plano k .	40
§ 2. Eigenfunciones Naturales.	
A) Definición.	43
B) Normalización de las Eigenfunciones Naturales.	46
C) Polos Complejos y Dependencia Temporal de los Estados Resonantes.	48

§ 3. Desarrollos Espectrales de la Función de Green.	
A) Desarrollo Espectral de $g(r,r';t)$.	56
B) Desarrollo Espectral de $G^+(r,r';k)$.	62
C) Sobrecompletitud y Dependencia Lineal de las Eigenfunciones Naturales.	65
CAPITULO IV. DESARROLLO ESPECTRAL DISCRETO DE LA AMPLITUD DE DECAIMIENTO	68
§ 1. Evaluación de $A(t)$ para todo Tiempo.	72
§ 2. Comportamientos Asintóticos de $A(t)$.	
A) Límite cuando $t \rightarrow 0$.	79
B) Límite cuando $t \rightarrow \infty$	84
CAPITULO V. EJEMPLO. POTENCIAL DELTA REPULSIVO	87
§ 1. Polos de la Función de Green y Eigenfunciones Naturales.	
A) Función de Green Independiente del del Tiempo.	87 90
B) Evaluación de los Polos de la Función de Green.	93
C) Cálculo de los Coeficientes de los Estados Resonantes.	100

52. Evaluación de la Probabilidad $P(t)$.	
A) Cálculo de los Coeficientes $c_n \bar{c}_n$.	103
B) Cálculo de la Amplitud de Decaimiento $A(t)$.	111
C) Análisis y Discusión de Resultados.	119
CAPITULO VI. CONCLUSIONES	129
APENDICE A. Separación de Variables Radiales y Angulares para $G^+(r, r'; k)$.	136
APENDICE B. Relación entre las Funciones de Green Dependiente e Independiente del Tiempo.	141
APENDICE C. Funciones Hipergeométricas Confluentes.	148
APENDICE D. Método del Punto Silla de Montar.	157
APENDICE E. Programas de Cómputo y Tablas.	165
BIBLIOGRAFIA.	177

I. INTRODUCCION

El estudio de sistemas inestables en mecánica cuántica comprende diversos fenómenos, entre los cuales se encuentra el del decaimiento. Cuando se estudia un sistema con un potencial como el que



se muestra en la figura, pueden presentarse estados ligados con energías negativas, y un continuo de energías positivas permitidas. Por efecto túnel, el sistema puede traspasar la barrera de potencial estando en la región de energías positivas. Es éste el

fenómeno cuántico conocido como decaimiento.

El efecto túnel proporciona una descripción cuántica de sistemas inestables, que no coincide con ninguna predicción clásica sobre este fenómeno. La cantidad física que se utiliza para estudiar la evolución del decaimiento es la probabilidad $P(t)$ de que el sistema continúe en un estado inicial arbitrario al cabo de un tiempo t .

Los primeros estudios sobre el decaimiento propusieron un comportamiento exponencial^{1,2}. Experimentalmente se sabía que la probabilidad de que se traspase la barrera de potencial es mayor para ciertos intervalos de energía que pueden caracterizarse por la posición $E_n > 0$ y un ancho Γ_n . Gamow (1928) propuso el estudio de este fenómeno por medio de energías complejas $E_n = E_n - i\Gamma_n/2$ a las que asoció los llamados estados resonantes, algunas veces denominados *estados de Gamow*.

Sin embargo, estudios posteriores sobre el decaimiento revelaron la existencia de una desviación a la ley exponencial. Entre esos trabajos se cuentan algunas demostraciones de esta desviación con base en la descripción matemática del decaimiento³⁻⁶, así como otros enfoques que plantean dicha desviación como una consecuencia de la naturaleza física del fenómeno⁷⁻⁹ visualizando la posibilidad de regeneración del sistema inestable⁸.

Recientemente el interés por el estudio de la evolución del decaimiento con énfasis en las desviaciones a la ley exponencial para diferentes intervalos temporales se ha incrementado¹⁰, como lo demuestra una gran cantidad de trabajos recientes sobre el tema que incluyen diferentes enfoques.

El comportamiento no exponencial de $P(t)$ para tiempos cortos ha sido demostrado bajo suposiciones sobre el estado inicial¹¹ y calculado según distintas hipótesis físicas¹².

Para tiempos muy largos se ha demostrado que esta desviación debe ser mayor que cualquier comportamiento exponencial⁴, y que debe tener un comportamiento como potencia inversa del tiempo^{4,5} que algunos autores⁶ reportan como t^{-1} y otros^{4,5,7,8} como t^{-3} .

Entre los diferentes enfoques para caracterizar un sistema cuántico inestable, uno de los más importantes es el que incorpora estos sistemas en el marco de la teoría de estados resonantes, que proporcionan naturalmente una descripción del efecto túnel, como se ha mencionado. La representación de estados resonantes, sin embargo, presentaba dificultades en el tratamiento matemático¹⁴, por lo cual esta teoría fue desarrollándose paralelamente y no se aplicó directamente al problema del decaimiento.

La teoría de estados resonantes se basa en considerar eigenfunciones de la ecuación de Schrödinger cuya amplitud aumenta de manera exponencial en el espacio de configuración. Los eigen-

valores de la energía asociados a estas funciones corresponden a las energías de resonancia E_n . Una manera equivalente de definir las funciones de estados resonantes¹⁵⁻¹⁷ es a través de los residuos en los polos de la función de Green, para lo cual se ha requerido del estudio de dicha función como función de una variable compleja¹⁶⁻²⁰

Ultimamente,²² una serie de trabajos sobre las propiedades de los estados resonantes ha contribuido al desarrollo de esta teoría. Las propiedades analíticas de la función de Green y la situación de sus polos sobre las hojas de Riemann en el plano de energías han sido ya establecidos¹⁹⁻²¹, así como los criterios de normalización que cumplen las funciones de estados resonantes^{15,17,23,27}. Se sabe que para potenciales reales de alcance finito (donde puede distinguirse una región interna y otra externa), la función de Green es una función analítica en todo el plano complejo, excepto en los polos, y puede expresarse en términos de los mismos. -- Cuando se considera todo el espacio, el conjunto de estados ligados, estados resonantes *proprios* y un conjunto continuo de soluciones a lo largo de una trayectoria en el plano complejo, cumple

asociados a aquellos polos del IV cuadrante en el plano de número de onda cuya parte real es mayor que la imaginaria.

la propiedad de completez. La representación anterior puede ser utilizada²⁵ para evaluar la contribución no exponencial del decaimiento para tiempos largos, que proviene precisamente, del término continuo.

Recientemente^{2b} se ha establecido que, en la región interna, es posible obtener un desarrollo discreto de la función de Green en términos del conjunto completo de estados ligados, antiligados y resonantes del problema.

El propósito principal de este trabajo es utilizar estos resultados para evaluar, en el caso en que el estado inicial está localizado en la región interna, una representación discreta del término continuo mencionado arriba. De esta manera es posible obtener una representación de la amplitud de probabilidad completamente discretizada, a partir de la cual podrá darse una descripción completa de la evolución temporal del decaimiento que permita el análisis de la desviación a la ley exponencial tanto para tiempos cortos, como para tiempos muy largos.

En el CAPITULO II se expone el planteamiento del problema, en lo que concierne tanto a la cantidad que se pretende evaluar, que es la amplitud de probabilidad asociada a $P(t)$, como al tipo de sistemas cuánticos que serán estudiados, caracterizados por un potencial.

El CAPITULO III constituye una revisión global sobre los resultados más relevantes de la teoría de estados resonantes. Los resultados de estos capítulos son integrados en el CAPITULO IV, donde se evalúa la amplitud de probabilidad, así como sus comportamientos asintóticos.

Estos resultados se ilustran en el CAPITULO V por medio de un ejemplo soluble: el potencial delta repulsivo. Por último, se mencionarán las conclusiones generales del trabajo así como posibles investigaciones motivadas a partir de este estudio.

NOTAS Y REFERENCIAS AL CAPITULO I.

- ¹ G. Gamow (1928) estudió el decaimiento de partículas alfa.
- ² V.F. Weisskopf, E.P. Wigner (1930).
- ³ E.J. Hellund (1953).
- ⁴ L.A. Khalfin (1958).
- ⁵ Goldberger, Watson (1964).
- ⁶ C.A. Nicolaidis, D.R. Beck (1977).
- ⁷ L.Fonda, G.C. Ghirardi (1972).
- ⁸ L.Fonda, G.C. Ghirardi, A. Rimini (1978).
- ⁹ Más referencias pueden encontrarse en el artículo de Fonda *et al.*(1978).
- ¹⁰ En el artículo de Fonda *et al.*(1978) se expone una revisión sobre el trabajo realizado referente al tema, reuniendo diversas aportaciones hechas hasta ese momento.
- ¹¹ Fonda *et al.*(1978), M.N. Hack (1972) demuestran este resultado basándose en que $\bar{P}(0) = 0$.
- ¹² C.B. Chiu, E.C.G. Sudarshan (1976) demuestran el resultado bajo consideraciones generales. E.C.G. Sudarshan, C.B. Chiu, -- V. Gorini (1977) proponen diferentes comportamientos, asumiendo distintos comportamientos asintóticos del espectro de energías.
- ¹³ Alzetta (1966).
- ¹⁴ G. García Calderón y R. Peierls (1976). Estas funciones no se encuentran en el espacio de Hilbert y por ello no pueden aplicarse los criterios usuales de ortogonalidad, normalización y completéz.
- ¹⁵ G. García Calderón, R.E. Peierls (1976).
- ¹⁶ G. García Calderón (1976).
- ¹⁷ T. Berggren (1968).
- ¹⁸ Nussensveig (1962).

¹⁹ R.G. Newton (1966).

²⁰ M. Berrondo, G. García Calderón (1977).

²¹ Nussensveig (1974).

²² Más referencias pueden encontrarse en el artículo de G.García Calderón (1982).

²³ B. Zel'dovich (1961).

²⁴ N. Hokkyo (1965).

²⁵ R.E. Peierls (1975).

²⁶ G.García Calderón (1982).

II. AMPLITUD DE DECAIMIENTO

La probabilidad $P(t)$ de que el sistema continúe en un estado inicial $\Psi(\bar{r}, 0)$ arbitrario, al cabo de un tiempo t está dada por¹:

$$P(t) = || A(t) ||^2 \quad (\text{II.1})$$

donde $A(t)$ es la amplitud de probabilidad, que se define con la ecuación:

$$A(t) = \int_V \Psi^*(\bar{r}, 0) \Psi(\bar{r}, t) d^3r \quad (\text{II.2})$$

Como hemos mencionado, la cantidad $P(t)$ es la que se utiliza en el estudio del fenómeno de decaimiento. Por esta razón, a la amplitud $A(t)$ le llamaremos *amplitud de decaimiento*, aunque físicamente se relaciona con la probabilidad de que el sistema continúe en su estado inicial.

Ahora bien, la función de onda $\Psi(\bar{r}, t)$ cumple con la ecuación de Schödinger

dependiente del tiempo:

$$\left\{ i\frac{\partial}{\partial t} - \hat{H} \right\} \Psi(\vec{r}, t) = 0 \quad (\text{II.3})$$

donde se toma al tiempo como una variable positiva $t > 0$. La función de Green asociada con (II.3) cumple:

$$\left\{ i\frac{\partial}{\partial t} - \hat{H} \right\} g(\vec{r}, \vec{r}'; t) = i\delta(\vec{r} - \vec{r}')\delta(t), \quad t \geq 0 \quad (\text{II.4})$$

y las condiciones a la frontera que describen el decaimiento son las condiciones de onda saliente², de manera que:

$$g(\vec{r}, \vec{r}'; t) = 0 \quad \text{para } t < 0$$

A partir de las ecuaciones (II.3) y (II.4) se sigue que la solución de (II.3) es:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \int_{V'} g(\vec{r}, \vec{r}'; t) \Psi(\vec{r}', 0) d^3r' \quad , \quad t > 0$$

De esta forma, puede obtenerse la expresión para la amplitud de decaimiento como:

$$A(t) = \int_V \int_{V'} \Psi^*(\vec{r}, 0) g(\vec{r}, \vec{r}'; t) \Psi(\vec{r}', 0) d^3r' d^3r \quad (\text{II.5})$$

De esta última expresión se puede ver que la función de Green dependiente del tiempo contiene toda la información sobre la dependencia temporal de la amplitud de decaimiento $A(t)$.

§1. LA AMPLITUD DE DECAIMIENTO PARA UN POTENCIAL CENTRAL.

Cuando se estudia un sistema descrito por un potencial central $V(r)$, puede utilizarse la separación de variables angulares (θ, ϕ) y radiales (r) en coordenadas esféricas, ya que el hamiltoniano \hat{H} puede escribirse como³:

$$\hat{H} = -\frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \hat{L}^2 + V(r)$$

y por ende, la función $\Psi(\vec{r}, 0) = \Psi(\vec{r})$ independiente del tiempo, cumple:

$$\hat{H} \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r})$$

$$\hat{L}^2 \Psi(\vec{r}) = \alpha \Psi(\vec{r})$$

$$\text{y } \hat{L}_z \Psi(\vec{r}) = \beta \Psi(\vec{r})$$

donde \hat{L} es el operador de momento angular con componentes \hat{L}_x , \hat{L}_y y \hat{L}_z .

La solución para la función $\Psi(\vec{r})$ por separación de variables es:

$$\Psi_{\ell}(\vec{r}) = \frac{\psi_{\ell}(r)}{r} Y_{\ell}^m(\theta, \phi) \quad \begin{array}{l} \ell = 0, 1, 2, 3, \dots \\ m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \ell \end{array}$$

donde $\psi(r)$ es una función de la variable radial y $Y_{\ell}^m(\theta, \phi)$ es la función en las variables angulares. Estas funciones son llamadas *armónicos esféricos*, forman una base ortonormal en la esfera unitaria, y son eigenfunciones de los operadores \hat{L}^2 y \hat{L}_z con eigenvalores $\ell(\ell+1) = \alpha$ y $m = \beta$ respectivamente. Del método de separación de variables puede obtenerse la ecuación radial que cumple $\Psi_{\ell}(r)$:

$$\left\{ -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + V(r) - E_{\ell} \right\} \psi_{\ell}(r) = 0 \quad (\text{II.6})$$

$$\text{y } \psi_{\ell}(0) = 0.$$

La ecuación (II.6) es una ecuación de eigenvalores para cada valor del momento angular ℓ , que puede escribirse como :

$$H_{\ell} \psi_{\ell}(r) = E_{\ell} \psi_{\ell}(r)$$

donde:

$$H_{\ell} \equiv - \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + V(r) \quad \text{para cada } \ell.$$

De esta forma, la función independiente del tiempo $\Psi(\vec{r}, 0)$ puede expresarse como:

$$\Psi(\vec{r}, 0) = \sum_{\ell} \sum_{m=-\ell}^{+\ell} \frac{\psi_{\ell}(r)}{r} Y_{\ell}^m(\theta, \phi) \quad (\text{II.7})$$

Así como puede hallarse la expresión (II.7) para $\Psi(\vec{r})$ en términos de una función radial que depende del potencial $V(r)$, y de los armónicos esféricos en la parte angular, que es independiente del potencial cuando éste es central, puede también hallarse una expresión similar para la función de Green independiente del tiempo y dependiente del número de onda k , relacionado con la energía por medio de la equivalencia:

$$E = k^2$$

(en unidades de $\hbar^2 = 2m = 1$).

A partir de la ecuación diferencial que cumple $G^+(\vec{r}, \vec{r}'; k)$:

$$(\hat{H} - E) G^+(\vec{r}, \vec{r}'; k) = \delta(\vec{r} - \vec{r}')$$

puede obtenerse la expresión: *

$$G^+(\vec{r}, \vec{r}'; k) = \sum_{\ell} \sum_{m=-\ell}^{+\ell} \frac{j_{\ell}(r, r'; k)}{r r'} Y_{\ell}^m(\theta, \phi) Y_{\ell}^{m*}(\theta', \phi') \quad (\text{II.8})$$

(* ver APENDICE A.

Las funciones de Green de onda saliente dependiente e independiente del tiempo están relacionadas entre sí (ver APENDICE B) por medio de:

$$g(\vec{r}, \vec{r}'; t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} G^+(\vec{r}, \vec{r}'; k) e^{-ik^2 t} 2k dk$$

de manera que (II.5) junto con los desarrollos (II.7) y (II.8) de $\Psi(\vec{r}, 0)$ y $G^+(\vec{r}, \vec{r}'; k)$ en términos de $Y_{\ell}^m(\theta, \phi)$ dan una expresión para $A(t)$:

$$A(t) = \iiint_V \sum_{\ell, m} \frac{\psi^*(r)}{r} Y_{\ell}^{m*}(\theta, \phi) \left\{ \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} \sum_{\ell', m'} \frac{G_{\ell'}(r, r'; k)}{r r'} Y_{\ell'}^{m'}(\theta, \phi) Y_{\ell'}^{m'}(\theta', \phi') \times \right. \\ \left. \times 2k e^{-ik^2 t} dk \right\} \sum_{\ell'', m''} \frac{\psi_{\ell''}(r')}{r'} Y_{\ell''}^{m''}(\theta', \phi') d^3 r d^3 r'$$

Recordando que $d^3 r = r^2 dr d\Omega$ y efectuando las integrales sobre $d\Omega$ y $d\Omega'$, debido a la ortonormalización de los armónicos esféricos:

$$\int_{\Omega} Y_{\ell}^{m*}(\theta, \phi) Y_{\ell'}^{m'}(\theta, \phi) d\Omega = \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'}$$

se obtiene que:

$$A(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} 2k e^{-ik^2 t} \left(\int_0^{\infty} \sum_{\ell} \sum_{m=-\ell}^{+\ell} \psi_{\ell}^*(r) G_{\ell}(r, r'; k) \psi_{\ell}(r') dr dr' \right) dk = \\ = \sum_{\ell} (2\ell+1) \left(\int_0^{\infty} \psi_{\ell}^*(r) \left\{ \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} G_{\ell}(r, r'; k) 2k e^{-ik^2 t} dk \right\} \psi_{\ell}(r') dr dr' \right)$$

o bien, reconociendo la función de Green dependiente del tiempo asociada con la función $g_{\ell}(r, r'; k)$ para cada ℓ , obtenemos que:

$$A(t) = \sum_{\ell} A_{\ell}(t) \quad (\text{II.9})$$

donde:

$$A_{\ell}(t) = (2\ell + 1) \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} \psi_{\ell}(r, 0) g_{\ell}(r, r'; t) \psi_{\ell}^*(r', 0) dr dr' \quad (\text{II.10})$$

donde $\psi_{\ell}(r, t)$ y $g_{\ell}(r, r'; t)$ cumplen las ecuaciones correspondientes dependientes del tiempo asociadas al hamiltoniano H_{ℓ} definido anteriormente.

Como puede verse de la ecuación (II.9), el hecho de que el potencial $V(r)$ - tenga simetría esférica permite expresar la amplitud de decaimiento como una suma de términos $A_{\ell}(t)$ para cada valor del momento angular del sistema, donde aparecen sólo funciones radiales y el momento angular ℓ como parámetro.

A lo largo del presente trabajo, se estudiará el caso particular $\ell = 0$, que posee la virtud de ser matemáticamente simple aunque conceptualmente es completamente general. En el último capítulo se harán unas consideraciones para el caso de momento angular arbitrario.

Al hamiltoniano H_0 se le denotará simplemente por H y a la amplitud $A_0(t)$, - $A(t)$, suprimiendo también para las demás funciones el subíndice $\ell = 0$. De esta manera, tendremos que :

$$A(t) = \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} \psi(r, 0) g(r, r'; t) \psi^*(r', 0) dr dr' \quad (\text{II.11})$$

donde:

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

$$\psi(0, t) = 0 \quad (\text{II.12})$$

y:

$$\begin{aligned} \left(i \frac{\partial}{\partial t} - H \right) g(r, r'; t) &= i \delta(r - r') \delta(t) \quad , \quad t > 0 \\ g(r, r'; t) &= 0 \quad , \quad t < 0 \\ g(0, r'; t) &= 0 \quad , \quad \text{para } r < r' \end{aligned} \quad (\text{II.13})$$

y el hamiltoniano H es simplemente:

$$H = - \frac{d^2}{dr^2} + V(r) \quad (\text{II.14})$$

52. LA PARTICULA LIBRE.

En esta sección será considerado el caso de la partícula libre; es decir, el sistema caracterizado por un potencial $V(\vec{r}) \equiv 0$ en todo el espacio.

Se considerarán por separado la evolución en el tiempo de este sistema en tres dimensiones y la evolución temporal en la variable radial.

A lo largo de las discusiones que se presentan a continuación, se incluirán explícitamente las unidades de \hbar y m en los casos que ello proporcione mayor claridad a los argumentos físicos expuestos.

A). Evolución Temporal en Tres Dimensiones.

Es bien conocido que para este problema⁵, las soluciones de la ecuación de Schrödinger son de la forma:

$$\Psi(\vec{r}, t) = A \exp\{ i(\vec{k} \cdot \vec{r} - k^2 t) \}$$

de manera que $\| \Psi(\vec{r}, t) \|^2 = \| A \|^2$ es una constante, lo cual corresponde a un sistema que tiene la misma probabilidad de encontrarse en cualquier punto del espacio para todo tiempo. Debido a que estas funciones no son de cuadrado integrable, generalmente se describe el movimiento de la partícula por medio de *paquetes de onda*, que se construyen como una superposición de dichas funciones sobre los posibles valores del número de onda \vec{k} (donde \vec{k} es una variable continua en tres dimensiones).

Por medio de paquetes de onda puede estudiarse el comportamiento de las funciones de onda tanto en el espacio de configuración, $\Psi(\vec{r}, t)$ como en el de -

momentos, $\Phi(\vec{p}, t)$, cuyos valores absolutos al cuadrado se interpretan como densidades de probabilidad, y puede demostrarse que se cumple el principio de incertidumbre de Heisenberg.

Esta representación permite también asignar una velocidad de grupo al paquete de ondas, analizando el movimiento del centro del mismo como una partícula clásica que tiene una velocidad constante (en dirección de \vec{k}) en todo el espacio. La forma del paquete de ondas evoluciona con el tiempo, ensanchándose y acortándose, lo cual nos dice que la mayor probabilidad de encontrar a la partícula está centrada en un punto espacial que se va alejando del punto donde se encontraba inicialmente con velocidad constante, y que el valor de esta probabilidad va disminuyendo. Esta interpretación refleja el hecho de que en este sistema, donde el potencial es siempre nulo, se pierde cada vez más información sobre la función de distribución a medida que pasa el tiempo (ya que $\Delta\vec{r}$ aumenta), dado que la partícula es libre de moverse en todo el espacio.

A continuación se expondrá brevemente un argumento físico que nos permite encontrar qué tipo de comportamiento debe esperarse para la probabilidad $P(t)$ a tiempos largos, por medio del estudio del ensanchamiento del paquete de ondas.

El argumento es completamente general, incluyendo únicamente la suposición de que el paquete de ondas inicial (tanto en el espacio de configuración como en el de momentos) son tales que $\|\Psi(\vec{r}, 0)\|^2$ y $\|\Phi(\vec{p}, 0)\|^2$ son densidades de probabilidad con máximos en \vec{r}_m y \vec{p}_m respectivamente, y rangos $\Delta\vec{r}$ y $\Delta\vec{p}$ donde estas funciones no son despreciables. En la FIGURA (II.1) se muestra la -

forma de las densidades de probabilidad iniciales en dos dimensiones.

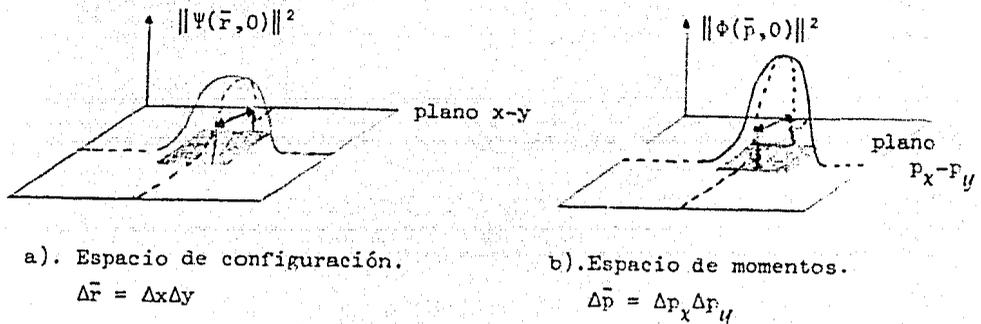


FIGURA (II.1)

La evolución del ensanchamiento del paquete, $\Delta \vec{r}$, puede hallarse para cada una de las direcciones. Así, tendremos para Δx que, como:

$$(\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$$

(donde $\langle \rangle$ indica el valor esperado), por la ecuación dinámica :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} (\Delta x)^2 &= -i \langle [(\Delta x)^2, H] \rangle \\ &= \frac{1}{m} \{ \langle x p_x + p_x x \rangle - 2 \langle x \rangle \langle p_x \rangle \} \end{aligned}$$

donde se ha utilizado el hamiltoniano de la partícula libre. Para la partícula libre el valor esperado del momento lineal es constante e igual al valor en $t = 0$, por lo cual $\langle p_x \rangle = \langle p_x \rangle_0$ y el valor esperado de la posición es $\langle x \rangle = \frac{1}{m} \langle p_x \rangle_0 t + \langle x \rangle_0$.

La expresión para el anticonmutador $\{x, p_x\} \equiv x p_x + p_x x$ se obtiene utilizando nuevamente la ecuación dinámica, obteniendo que:

$$\langle x p_x + p_x x \rangle = \frac{2}{m} \langle p_x \rangle_0 t + \langle x p_x + p_x x \rangle_0$$

Incluyendo estas expresiones en la ecuación para $\frac{d}{dt} (\Delta x)^2$; se obtiene

$$(\Delta x)^2 = \frac{(\Delta p_x)^2}{m^2} t^2 \left\{ 1 + \frac{m^2 C_x}{(\Delta p_x)_0^2} \frac{1}{t} + m \frac{(\Delta x)_0^2}{(\Delta p_x)_0^2} \frac{1}{t^2} \right\}$$

donde $C_x = \frac{1}{m} \left[\langle x, p_x \rangle_0 - 2 \langle p_x \rangle_0 \langle x \rangle_0 \right]$

Para tiempos largos, cuando $t^2 \frac{(\Delta p_x)_0^2}{m^2} \gg C_x t + (\Delta x)_0^2$, el ensanchamiento va como

$$\Delta x = \frac{1}{m} (\Delta p_x)_0 t$$

Como las expresiones se obtienen de manera análoga para Δy y Δz , el ancho $\Delta \vec{r}$ evoluciona como: $\Delta \vec{r} = \Delta x \Delta y \Delta z = \frac{1}{m^3} (\Delta p_x)_0 (\Delta p_y)_0 (\Delta p_z)_0 t^3$, para $t > t_\Delta$, siendo éste un parámetro temporal a partir del cual los tres ensanchamientos son lineales en el tiempo.

Ahora bien, si el ensanchamiento de la densidad de probabilidad va como t^3 , por conservación de probabilidad (la partícula no desaparece ni se crea mayor probabilidad de encontrarla en todo el espacio), debemos esperar que la densidad de probabilidad vaya disminuyendo inversamente a t^3 ; esto es, que:

$$\|\Psi(\vec{r}, t)\|^2 \sim \frac{1}{t^3} \quad \text{para } t > t_\Delta$$

De esta forma, se predice que para la partícula libre:

$$\Psi(\vec{r}, t) \sim \frac{1}{t^{3/2}} \quad \text{para } t > t_\Delta \quad (\text{II.15})$$

El problema de la partícula libre en tres dimensiones ha sido ya estudiado y es bien conocido⁶. El análisis de la función de Green libre en tres dimensiones da como resultado que:

$$g_0(\vec{r}, \vec{r}'; t) = \left[-\frac{im}{2\pi\hbar} \right]^{3/2} \frac{1}{\sqrt{t^3}} e^{im|\vec{r}-\vec{r}'|^2/2\hbar t} \quad \text{para } t > 0.$$

En las expresiones de la función de Green para este caso, el subíndice 0 indica que se refiere a la partícula libre.

Utilizando la relación:

$$\Psi(\bar{r}, t) = \int_{v'} g_0(\bar{r}, \bar{r}'; t) \Psi(\bar{r}', 0) d^3 r'$$

puede obtenerse la expresión para la función de onda en tres dimensiones.

Dado que, cuando $t \gg t_d$, $\frac{m\bar{r}^2}{2\hbar t}$ y $\frac{m\bar{r}'^2}{2\hbar t} \approx \frac{m(\Delta\bar{r})^2}{2\hbar t} \ll 1$, entonces la contribución de la exponencial será principalmente:

$$\exp\left\{\frac{im|\bar{r}-\bar{r}'|^2}{2\hbar t}\right\} = \exp\left\{\frac{im(r^2+r'^2-2\bar{r}\cdot\bar{r}')}{2\hbar t}\right\} \approx e^{-im(\bar{r}\cdot\bar{r}')/\hbar t}$$

cuando $t \rightarrow \infty$, y el comportamiento de la función de onda $\Psi(\bar{r}, t)$ para tiempos largos es:

$$\Psi(\bar{r}, t) \underset{t \rightarrow \infty}{\approx} \left(\frac{m}{i}\right)^{3/2} \frac{1}{\sqrt{t}^3} \Phi(\bar{p}, 0)$$

por lo cual

$$\|\Psi(\bar{r}, t)\|^2 \approx \frac{1}{t^3} \|\Phi(\bar{p}, 0)\|^2$$

donde $\Phi(\bar{p}, 0)$ se relaciona con $\Psi(\bar{r}, 0)$ de la manera usual, con el momento clásico $\bar{p} = m\bar{r}/t$:

$$\Phi(\bar{p}, 0) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{v'} \Psi(\bar{r}', 0) e^{-i\bar{p}\cdot\bar{r}'/\hbar} d^3 r'$$

que no depende del tiempo. Análogamente puede obtenerse que la probabilidad se comporta como la densidad $\|\Psi(\bar{r}, 0)\|^2$ para tiempos largos; - es decir:

$$P(t) \propto \frac{1}{t^3}$$

B). Evolución Temporal para Momento Angular $\ell = 0$.

En esta sección se hallará la expresión de la amplitud de decaimiento correspondiente a momento angular nulo, trabajando con las variables angulares, para lo cual se analizará la función de Green libre dependiente del tiempo usando las condiciones de onda saliente.

Dada la relación que existe entre las funciones de Green dependiente e independiente del tiempo, puede efectuarse primero el cálculo de la función de Green libre independiente del tiempo, $G_0^+(r, r'; k)$ para obtener luego la función $g_0(r, r'; t)$, $t > 0$.

De acuerdo con el planteamiento del problema radial cuando el potencial es central, tendremos en este caso:

$$V(r) \equiv 0 \quad , \quad r > 0$$

y las ecuaciones que cumplen la función $G_0^+(r, r'; k)$ son :

$$\frac{d^2}{dr^2} G_0^+(r, r'; k) + k^2 G_0^+(r, r'; k) = \delta(r - r')$$

$$G_0^+(0, r'; k) = 0 \quad \text{para } r < r'$$

$$\lim_{r \rightarrow \infty} G_0^+(r, r'; k) = g(r') \exp\{ikr\} \quad , \quad r' < r$$

donde la última ecuación plantea las condiciones de onda saliente.

A partir de estas ecuaciones es inmediato que :

$$G_0^+(r, r'; k) = f(r') \operatorname{sen} kr \quad \text{para } r < r'$$

$$G_0^+(r, r'; k) = g(r') \exp\{ikr\} \quad \text{para } r > r'$$

Por continuidad de la función de Green en el punto $r = r'$, puede -

obtenerse que:

$$g(r') = f(r') \exp\{-ikr'\} \operatorname{sen} kr'$$

y utilizando la propiedad de la discontinuidad en la derivada de la función de Green en el punto $r = r'$ (obtenida a partir de la integración de la ecuación diferencial), se tiene que:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left(\frac{dG_0^+}{dr}(r, r'; k) \Big|_{r'+\epsilon} - \frac{dG_0^+}{dr}(r, r'; k) \Big|_{r'-\epsilon} \right) = 1$$

de donde:

$$f(r') = - \frac{\exp\{ikr'\}}{k}$$

De esta manera,

$$G_0^+(r, r'; k) = - \frac{\exp\{ikr'\} \operatorname{sen} kr}{k} \quad \text{para } r < r'$$

donde la condición de simetría $G_0^+(r', r; k) = G_0^+(r, r'; k)$ nos da la expresión de esta función cuando $r > r'$. Puede reescribirse la función de Green libre como:

$$G_0^+(r, r'; k) = - \frac{1}{2ik} \left[\exp\{ik(r + r')\} - \exp\{-ik(r - r')\} \right] \quad \text{para } r < r' \quad (\text{II.17})$$

A partir de (II.17) se puede encontrar ya la función de Green libre dependiente del tiempo, que contiene la información sobre la dependencia temporal tanto de $\Lambda(t)$ como de $\psi(r, t)$ (por las relaciones (II.11), (II.12) y (II.13)).

La obtención de $g_0(r, r'; t)$ a partir de $G_0^+(r, r'; k)$ está dada por:

$$g_0(r, r'; t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} G_0^+(r, r'; k) 2k \exp\{-ik^2 t\} dk$$

donde el contorno Γ debe tomarse como se muestra en la FIGURA -- (II.2).

Dado que el integrando no contiene ningún polo, podemos efectuar la integración cerrando el contorno como se muestra en la FIGURA (II.3).

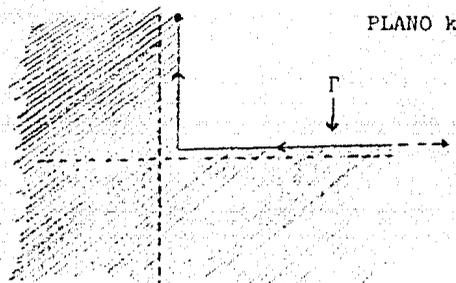


FIGURA (II.2). El contorno de integración Γ debe ser elegido de manera que los polos de la función integrando que den en la región sombreada.

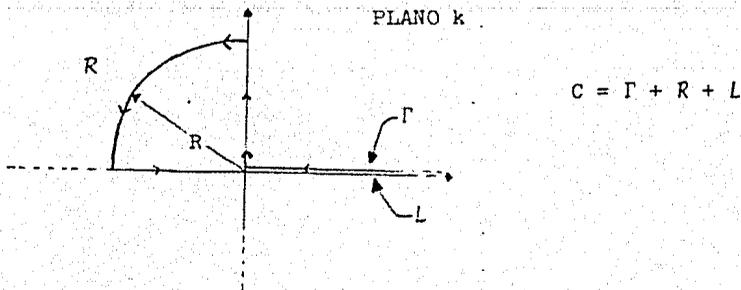


FIGURA (II.3). Se cierra el contorno de forma que $C = \Gamma + L + R$, donde se hace tender $R \rightarrow \infty$. El contorno L coincide con el eje real de $-\infty$ a $+\infty$ y sobre el segmento de círculo R el integrando se anula exponencialmente.

La integral sobre el contorno cerrado C se anula debido a que en su interior el integrando es una función analítica de la variable k.

Cuando k se encuentra en el II cuadrante, puede escribirse de la forma $k = \alpha + i\beta$, donde $\alpha, \beta > 0$. Si tomamos el límite cuando $k \rightarrow \infty$ ($\alpha, \beta \rightarrow \infty$) del integrando, tendremos que:

$$\begin{aligned} & \lim_{k \rightarrow \infty} \left\{ \exp\{-i(k^2 t - k(r+r'))\} - \exp\{-i(k^2 t + k(r-r'))\} \right\} = \\ = & \lim_{\alpha, \beta \rightarrow \infty} \left\{ \exp\{-i((\alpha^2 - \beta^2)t + \alpha(r+r'))\} \exp\{-2\alpha\beta t - \beta(r+r')\} \right\} - \\ - & \lim_{\alpha, \beta \rightarrow \infty} \left\{ \exp\{-i((\alpha^2 - \beta^2)t - \alpha(r-r'))\} \exp\{-2\alpha\beta t + \beta(r-r')\} \right\} \equiv 0. \end{aligned}$$

ya que $t > 0$ y en la expresión utilizada en (II.17), $r < r'$; por lo cual los términos que no oscilan tienden exponencialmente a cero cuando $(\alpha, \beta) \rightarrow \infty$.

De esta manera, las integrales que no se anulan son la integral sobre Γ (cuyo valor es $g_0(r, r'; t)$) y la integral sobre el eje real, hecho que permite reconocer a $g_0(r, r'; t)$ como una transformada de Fourier:

$$\begin{aligned} g_0(r, r'; t) = & \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\{-i(k^2 t + k(r-r'))\} dk - \\ & - \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\{-i(k^2 t - k(r+r'))\} dk \end{aligned}$$

Las integrales pueden evaluarse completando cuadrados en los exponentes para utilizar:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp\{-iu^2\} du = \sqrt{\pi/i}$$

obteniendo finalmente que:

$$g(r, r'; t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi i}} \frac{1}{\sqrt{t}} \left[\exp\{i(r-r')^2/4t\} - \exp\{i(r+r')^2/4t\} \right] \quad (\text{II.18})$$

donde $0 < r < r' < \infty$ y $t > 0$.

Utilizando esta expresión en (II.11), se obtiene que:

$$A(t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi i}} (t)^{-1/2} \left[\int_0^{\infty} \int_0^{\infty} \psi^*(r,0) \psi(r',0) e^{i(r-r')^2/4t} dr dr' - \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} \psi^*(r,0) \psi(r',0) e^{i(r+r')^2/4t} dr dr' \right]$$

que puede reescribirse utilizando la expresión para la exponencial:

$$\exp\{iz^2/4t\} = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{j!} (iz^2/4t)^j$$

obteniendo:

$$A(t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi i}} (t)^{-1/2} \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} \psi^*(r,0) \psi(r',0) \left\{ -i \frac{rr'}{t} + \sum_{j=2}^{\infty} \frac{1}{j!} \left(\frac{i}{4t} \right)^j \left[(r-r')^{2j} - (r+r')^{2j} \right] \right\} dr dr'$$

donde el término $j=0$ se anula y el término $j=1$ se ha desarrollado fuera de la sumatoria. Utilizando la igualdad:

$$(a+b)^j = \sum_{q=0}^j \binom{j}{q} a^{j-q} b^q, \text{ donde } \binom{j}{q} \equiv \frac{j!}{(j-q)! q!}$$

para expresar la diferencia $(r-r')^{2j} - (r+r')^{2j}$, puede obtenerse que:

$$\begin{aligned} (r-r')^{2j} - (r+r')^{2j} &= \sum_{q=0}^j \binom{2j}{q} r^{2j-q} r'^q \{(-1)^q - 1\} = \\ &= -2 \sum_{q=1}^j \binom{2j}{2q-1} r^{2j-2q+1} r'^{2q-1} \end{aligned}$$

ya que los términos de potencias pares en q se anulan. De esta manera:

$$\begin{aligned} A(t) &= -\frac{\sqrt{i}}{2\sqrt{\pi}} t^{-3/2} \int_0^\infty \int_0^\infty r \psi^*(r,0) r' \psi(r',0) dr dr' - \\ &- \sum_{j=2}^\infty \frac{(i)^{j-1/2}}{\sqrt{\pi}} (t)^{-j-1/2} \sum_{q=1}^j \frac{1}{j!} \binom{2j}{2q-1} \int_0^\infty \int_0^\infty \psi^*(r,0) r^{2j-2q+1} \psi(r',0) r'^{2q-1} dr dr' \end{aligned}$$

o bien, definiendo las constantes:

$$c_n \equiv \int_0^\infty r^n \psi(r,0) dr,$$

$$A(t) = -\frac{\sqrt{i}}{2\sqrt{\pi}} \|c_1\|^2 t^{3/2} \sum_{j=2}^\infty \left\{ \frac{(i)^{j-1/2}}{\sqrt{\pi}} (2j)_j \sum_{q=1}^j \frac{c_{2j-2q+1}^* c_{2q-1}}{(2(j-q)+1)!(2q-1)!} \right\} t^{-j-1/2} \tag{II.19}$$

donde $(a)_n = a \cdot (a-1) \cdots (a-n+1)$.

La expresión (II.19) es válida para tiempos $t > 0$ y como puede verse, aparecen potencias inversas semienteras del tiempo. Para tiempos largos el término dominante en la expresión para $A(t)$ es el de $t^{-3/2}$, de manera que recuperamos el resultado:

$$P(t) \approx \frac{\|c_1\|^4}{4\pi} \frac{1}{t}, \quad \text{cuando } t \rightarrow \infty.$$

Cabe mencionar que para evaluar esta probabilidad en $t = 0$, se toma la

expresión de la función de Green libre para $t = 0$, es decir:

$$g_0(r, r'; 0) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} (e^{ik(r-r')} - e^{ik(r+r')}) dk = \delta(r-r') - \delta(r+r')$$

De esta forma,

$$A(0) = \iint_0^{\infty} \psi^*(r, 0) \psi(r', 0) \delta(r-r') dr dr' = \int_0^{\infty} \|\psi(r, 0)\|^2 dr = 1$$

ya que para $r \neq r'$ (la integral se hace sobre $r > 0$ y $r' > 0$), $\delta(r+r') \equiv 0$.

Este resultado concuerda con el hecho de que, por la definición de $P(t)$,

$$P(0) = \|A(0)\|^2 \equiv 1.$$

NOTAS Y REFERENCIAS AL CAPITULO II.

- ¹ M. Goldberger, K. Watson (1964).
- ² R. Newton (1966).
- ³ La descripción general del tratamiento aparece en los libros introductorios de Mecánica Cuántica, c.g. C. Cohen *et al.*, capítulo VII; D.S. Saxon, capítulo IX.
- ⁴ Nussensveig (1974).
- ⁵ D.S. Saxon, capítulo IV. Puede encontrarse también una discusión en Feynman (1977), vol. III, donde se da la función de Green libre. En ambos casos, a diferencia de la presente exposición, se trata la partícula libre en una dimensión.
- ⁶ Nussensveig (1974) plantea un desarrollo completo de la derivación de la función de Green libre en tres dimensiones.

III. TEORIA DE ESTADOS RESONANTES

Como se ha mencionado en el capítulo anterior, la información sobre la dependencia temporal en la expresión (II.5) está totalmente contenida en la función de Green dependiente del tiempo.

La relación entre las funciones de Green dependiente e independiente del tiempo está dada por una transformación integral (ver APENDICE B):

$$g(r, r'; t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} G^+(r, r'; k) 2k e^{-ik^2 t} dk \quad (\text{III.1})$$

donde el contorno de integración debe ser tal que las singularidades del integrando queden en la parte sombreada del plano k que se

El. PROPIEDADES ANALITICAS DE $G^+(r, r'; k)$ EN EL PLANO k .

Las propiedades analíticas de la función de Green independiente del tiempo como función del número de onda k dependen en general del potencial $V(r)$ que se analiza, ya que aparece en la ecuación diferencial que cumple $G^+(r, r'; k)$. Puede demostrarse¹ que si el potencial $V(r)$ es un potencial real y de alcance finito; es decir, si:

$$V(r) \equiv 0 \quad \text{para } r > a \quad (\text{III.2})$$

entonces la prolongación analítica de la función de Green $G^+(r, r'; k)$ como función de la variable compleja k es analítica en todo el plano k excepto en un número infinito de polos k_n .^(*)

La distribución de los polos en el plano complejo k puede ser utilizada para describir a los estados del sistema, como se muestra en la FIGURA III.2. Los polos en el eje imaginario corresponden a energías negativas (donde $E = k^2$) relacionadas con estados ligados ($k_\ell = i\gamma_\ell$, $\gamma_\ell > 0$) o antiligados ($k_a = -i\gamma_a$, $\gamma_a > 0$), habiendo un número finito de dichos polos. Los polos en el tercer y cuarto cuadrante, a los que nos referiremos como los polos complejos, son simétricos respecto al eje imaginario y a diferencia de los anteriores, hay un número infinito de ellos.

(*) En general se pueden considerar como polos simples, pues para aquellos sistemas en que se presentan polos dobles siempre se pueden tratar como casos límites.

Como notación, llamaremos a los polos del IV cuadrante $k_n = \alpha_n - i\beta_n$ ($\alpha_n, \beta_n > 0$) y a los de III cuadrante $k_{-n} = -\alpha_n - i\beta_n$ (dada la simetría que presentan con los anteriores), o bien, $k_{-n} = -k_n^*$. De esta manera, los polos de la función de Green pueden separarse como:

$$\{k_n\} = \{k_\ell\}, \{k_\alpha\}, \{k_n\}, \{k_{-n}\} \text{ donde:}$$

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

$$\ell = 1, 2, \dots, N$$

$$\alpha = 1, 2, \dots, M$$

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

que representan a N estados ligados, M estados antiligados y un número infinito de polos complejos que son simétricos respecto al eje imaginario.

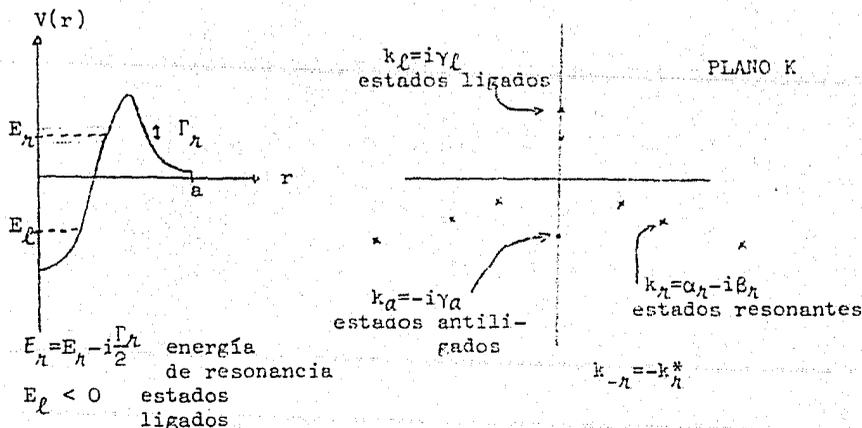


FIGURA III.2. Situación de los polos en el plano k y su relación con las energías asociadas a los estados del sistema.

Las ecuaciones que cumple la función de Green de onda saliente, considerando la condición (III.2) sobre el potencial, son:

$$\frac{d^2}{dr^2}G^+(r,r';k) + \{k^2 - V(r)\}G^+(r,r';k) = \delta(r-r') \quad (\text{III.3.A})$$

$$G^+(0,r';k) = 0 \quad \text{para } r < r' \quad (\text{III.3.B})$$

$$\left. \frac{d}{dr}G^+(r,r';k) \right|_a = ikG^+(a,r';k) \quad \text{para } r > r' \quad (\text{III.3.C})$$

$$G^+(r,r';k) = G^+(r',r;k) \quad (\text{III.3.D})$$

donde las condiciones (III.3.B) y (III.3.C) son las condiciones a la frontera correspondientes a la función de onda saliente y (III.3.D) es la propiedad de simetría que cumple la función de Green.

§2. EIGENFUNCIONES NATURALES.

Se ha mencionado que a cada polo k_n de la función de Green en el plano k se le asocia una energía y un estado del sistema. Analizaremos a continuación las propiedades que cumplen las funciones de estos estados, a las que denominaremos como *eigenfunciones naturales*. Nos referiremos a los polos y a las eigenfunciones naturales asociadas a ellos de la misma manera que se indicó en la sección anterior, ya sea diferenciándolos según su clasificación o en general con el subíndice adecuado en cada caso.

A). Definición.

Las eigenfunciones naturales $u_n(r)$ se definen en términos de los residuos en los polos de la función de Green $G^+(r, r'; k)$. En general, estos residuos son funciones de r y r' .

Para estudiar los residuos $\rho_n(r, r')$ en los polos k_n se hace uso de la expresión de la función de Green como función de k cerca del polo k_n ; es decir:

$$G^+(r, r'; k) = \chi(r, r'; k) + \frac{\rho_n(r, r')}{k - k_n} \quad (\text{III.4})$$

donde $\chi(r, r'; k)$ es una función entera de k .

A partir de la ecuación diferencial (III.3.A) se pueden obtener las ecuaciones diferenciales que cumplen $\rho_n(r, r')$ y $\chi_n(r, r') \equiv \chi(r, r'; k_n)$ cuando se toma el límite $k \rightarrow k_n$ junto con (III.4), que son²:

$$\frac{\partial^2}{\partial r^2} \rho_n(r, r') + \{k_n^2 - V(r)\} \rho_n(r, r') = 0 \quad (\text{III.5.A})$$

$$\frac{\partial^2}{\partial r^2} \chi_n(r, r') + \{k_n^2 - V(r)\} \chi_n(r, r') - 2k_n \rho_n(r, r') = \delta(r-r') \quad (\text{III.6.A})$$

De la ecuación (III.3.B) pueden hallarse las condiciones a la frontera en $r = 0$ y de (III.3.C) en $r = a$; obteniendo:

$$\rho_n(0, r') = 0 \quad \text{para } r < r' \quad (\text{III.5.B})$$

$$\chi_n(0, r') = 0 \quad \text{para } r < r' \quad (\text{III.6.B})$$

$$\left. \frac{\partial}{\partial r} \rho_n(r, r') \right|_a = ik_n \rho_n(a, r') \quad r > r' \quad (\text{III.5.C})$$

$$\left. \frac{\partial}{\partial r} \chi_n(r, r') \right|_a = ik_n \chi_n(a, r') + i \rho_n(a, r') \quad r > r' \quad (\text{III.6.C})$$

Las ecuaciones (III.5) que cumplen los residuos en los polos permiten utilizar separación de variables en r y r' . Las eigenfunciones naturales $u_n(r)$ que se asocian con los polos k_n se definen a partir de la relación:

$$\rho_n(r, r') = f(r') u_n(r) \quad (\text{III.7})$$

De manera que las ecuaciones que cumplen las eigenfunciones naturales $u_n(r)$, derivadas de las ecuaciones (III.5) y (III.7) son:

$$\frac{d^2}{dr^2} u_n(r) + \{k_n^2 - V(r)\} u_n(r) = 0 \quad (\text{III.8.A})$$

$$u_n(0) = 0 \quad (\text{III.8.B})$$

$$\left. \frac{d}{dr} u_n(r) \right|_a = ik_n u_n(a) \quad (\text{III.8.C})$$

La determinación de la función $f(r')$ que aparece en (III.7) se puede hacer por medio de las ecuaciones diferenciales (III.8.A) y -- (III.6.A) y la aplicación de la fórmula de Green para integrar, ob-
teniendo:

$$\left[\chi_n'(r, r') u_n(r) - u_n'(r) \chi_n(r, r') \right]_0^a + 2k_n f(r') \int_0^a u_n^2(r) dr = u_n(r')$$

Y para calcular el término entre paréntesis se utilizan las condiciones a la frontera (III.6.B), (III.6.C), (III.8.B), (III.8.C), de donde:

$$f(r') = \frac{u_n(r')}{2k_n \int_0^a u_n^2(r) dr + i u_n^2(a)}$$

de manera que para los residuos en los polos de la función de Green independiente del tiempo $G^+(r, r'; k)$ obtenemos por sustitución en (III.7) la expresión :

$$\rho_n(r, r') = \frac{u_n(r)u_n(r')}{2k_n \left[\int_0^R u_n^2(r) dr + \frac{i}{2k_n} u_n^2(a) \right]} \quad (\text{III.9})$$

B). Normalización de las Eigenfunciones Naturales.

Como puede verse de las ecuaciones (III.8) que satisfacen las funciones de estado, las eigenfunciones naturales son en general complejas (como sucede cuando k_n es un polo complejo k_n o k_{-n}) y además, dadas las características del potencial, es inmediato verificar que:

$$u_n(r) = D_n e^{ik_n r} \quad \text{para } r > a$$

(con D_n un número complejo) satisface las ecuaciones (III.8). En el caso de estados ligados, donde $k_\ell = iy_\ell$, $u_\ell(r)$ son funciones reales

de cuadrado integrable. Sin embargo, para los otros tipos de polos dichas funciones no pertenecen a un espacio de Hilbert. No obstante, puede introducirse un criterio de normalización que satisfacen estas funciones, a partir de las ecuaciones que cumplen.

Partiendo de las ecuaciones (III.8) para funciones $u_n(r)$ y $u_m(r)$ - asociadas a polos k_n y k_m cualesquiera y utilizando la fórmula de Green para integrar, se llega a la relación:

$$\left[u_n'(r)u_m(r) - u_m'(r)u_n(r) \right]_c^a + (k_n^2 - k_m^2) \int_0^a u_n(r)u_m(r)dr = 0$$

y utilizando las condiciones a la frontera para dichas funciones:

$$(k_n^2 - k_m^2) \left(\int_0^a u_n(r)u_m(r)dr + \frac{i}{k_n + k_m} u_n(a)u_m(a) \right) = 0$$

Si $n \neq m$, $k_n \neq k_m$ y por ende la expresión entre corchetes se anula. El criterio de normalización que se propone es:

$$\int_0^a u_n(r)u_m(r)dr + \frac{i}{k_n + k_m} u_n(a)u_m(a) = \delta_{nm} \quad (\text{III.10})$$

y puede demostrarse que cuando k_m y k_n corresponden a polos relacionados con estados ligados, k_ρ y k_ρ , (III.10) se reduce al criterio usual de ortonormalización:

$$\int_0^{\infty} u_{\ell}(r) u_{\ell'}(r) dr = \delta_{\ell\ell'}$$

donde, como se recordará, $u_{\ell}(r)$ y $u_{\ell'}(r)$ son funciones reales.

De esta manera, tomando $n = m$ en la expresión (III.10) y sustituyendo en (III.9), la expresión para el residuo $\rho_n(r, r')$ de la función de Green $G^+(r, r'; k)$ en el polo k_n se reduce a :

$$\rho_n(r, r') = \frac{u_n(r) u_n(r')}{2k_n} \quad (\text{III.11})$$

C). Polos Complejos y Dependencia Temporal de los Estados Resonantes.

El tipo de simetría que presentan los polos complejos permite escribir:

$$k_n = \alpha_n - i\beta_n$$

$$k_{-n} = -\alpha_n - i\beta_n$$

(donde $\alpha_{\lambda}, \beta_{\lambda} > 0$), o bien, $k_{-\lambda} = -k_{\lambda}^*$. Las energías asociadas a los po los complejos son también cantidades complejas:

$$E_{\lambda} = k_{\lambda}^2 \quad \text{y} \quad E_{-\lambda} = k_{\lambda}^{*2}.$$

La relación entre una función $u_{\lambda}(r)$ asociada al polo k_{λ} en el IV cuadrante y la función $u_{-\lambda}(r)$ asociada al polo simétrico en el III cuadrante puede obtenerse mediante las ecuaciones (III.8). Conjugando - las ecuaciones que satisface $u_{\lambda}(r)$ y recordando que el potencial $V(r)$ es real, se obtiene:

$$\frac{d^2}{dr^2} u_{\lambda}^*(r) + \{k_{\lambda}^{*2} - V(r)\} u_{\lambda}^*(r) = 0 \quad (\text{III.12.A})$$

$$u_{\lambda}^*(0) = 0 \quad (\text{III.12.B})$$

$$\left. \frac{d}{dr} u_{\lambda}^*(r) \right|_a = -ik_{\lambda}^* u_{\lambda}^*(a) \quad (\text{III.12.C})$$

mientras que las ecuaciones que cumple $u_{-\lambda}(r)$ son:

$$\frac{d^2}{dr^2} u_{-\lambda}(r) + \{k_{\lambda}^2 - V(r)\} u_{-\lambda}(r) = 0 \quad (\text{III.13.A})$$

$$u_{-\lambda}(0) = 0 \quad (\text{III.13.B})$$

$$\left. \frac{d}{dr} u_{-\lambda}(r) \right|_a = -ik_{\lambda} u_{-\lambda}(a) \quad (\text{III.13.C})$$

Comparando las ecuaciones (III.12) y (III.13) puede identificarse inmediatamente:

$$u_{-k}(r) = u_k^*(r)$$

Es decir, que las funciones $u_{-k}(r)$ asociadas con los polos k_{-k} del III cuadrante son las complejas conjugadas de las funciones $u_k(r)$ asociadas con los polos k_k simétricos a k_{-k} , en el IV cuadrante. Veremos ahora cómo las funciones $\psi_{-k}(r,t)$ dependientes del tiempo corresponden a funciones de onda obtenidas por reversibilidad temporal de las funciones $\psi_k(r,t)$ relacionadas con las energías $E_k = k_k^2$. Es conocido³ que el operador de reversibilidad temporal en el caso de hamiltonianos hermitianos es el operador de conjugación, es decir:

$$\psi^*(r,t) = \psi(r,-t) \quad (\text{III.14})$$

En el caso del hamiltoniano correspondiente a las ecuaciones radiales con momento angular $\ell = 0$ (c.f. ecuación (II.14)), el operador H efectivamente es un operador hermitiano, por lo cual es válida la ecuación (III.14).

A un polo k_k corresponde una función de estado $\psi_k(r,t)$ dada por:

$$\psi_k(r,t) = u_k(r)e^{-ik_k^2 t}, \quad t > 0$$

de manera que, aplicando el operador de reversibilidad temporal:

$$\psi_{\lambda}(r, -t) = u_{\lambda}^*(r) e^{ik_{\lambda}^*{}^2 t}, \quad t > 0$$

o bien, para tiempos negativos:

$$\begin{aligned} \psi_{\lambda}(r, t) &= u_{\lambda}^*(r) e^{-ik_{\lambda}^*{}^2 t}, \quad t > 0 \\ &\equiv \psi_{-\lambda}(r, t) \end{aligned}$$

Ahora bien, para el caso de un polo k_{λ} , se tiene que:

$$\psi_{\lambda}(r, t) = u_{\lambda}(r) e^{-iE_{\lambda} t} \quad (\text{III.15})$$

donde E_{λ} representa una energía compleja, dada por:

$$E_{\lambda} = (\alpha_{\lambda}^2 - \beta_{\lambda}^2) - 2i\alpha_{\lambda}\beta_{\lambda}, \quad \alpha_{\lambda}, \beta_{\lambda} > 0$$

ya que k_{λ} se encuentra en el IV cuadrante. De esta forma, la corriente de probabilidad para las funciones de onda $\psi_{\lambda}(r, t)$ evaluada en la frontera,

$$j_{\lambda}(a, t) = -i \left\{ \psi_{\lambda}^*(a, t) \frac{d}{dr} \psi_{\lambda}(a, t) - \psi_{\lambda}(a, t) \frac{d}{dr} \psi_{\lambda}^*(a, t) \right\}$$

es, utilizando (III.15) y la condición (III.8.C) para evaluar $\frac{d}{dr} u_{\lambda}(a)$

la siguiente:

$$j_n(a,t) = \|u_n(a)\|^2 e^{-4\alpha_n \beta_n t} (2\alpha_n) \quad (\text{III.16.A})$$

Por otro lado, integrando espacialmente la ecuación de continuidad para la corriente de probabilidad desde $r = 0$ hasta $r = a$,

$$\int_0^a \frac{d}{dr} j_n(r,t) dr + \int_0^a \frac{d}{dt} \rho_n(r,t) dr = 0$$

donde $\rho_n(r,t)$ es la densidad de probabilidad $\|\psi_n(r,t)\|^2$, se obtiene que:

$$\begin{aligned} j_n(a,t) &= -\frac{d}{dt} \int_0^a \|u_n(r)\|^2 e^{-4\alpha_n \beta_n t} dr \\ &= 4\alpha_n \beta_n e^{-4\alpha_n \beta_n t} \int_0^a \|u_n(r)\|^2 dr \end{aligned} \quad (\text{III.16.B})$$

A partir de las ecuaciones (III.16) puede hallarse una expresión para la parte imaginaria del polo k_n , que coincide con la parte imaginaria del polo simétrico k_{-n} , como:

$$\beta_n = \frac{\|u_n(a)\|^2}{2 \int_0^a \|u_n(r)\|^2 dr}$$

Cuando la condición a la frontera no se anula, esta relación nos -

da el valor de la parte imaginaria de los polos complejos en términos de la condición a la frontera (III.8.C) y la integral de la densidad de probabilidad de las funciones de estado $u_{k_{\hbar}}(r)$ en la región interna, de manera que $\beta_{k_{\hbar}} \neq 0$.

En las expresiones (III.16) de la corriente de probabilidad puede verse que $j_{k_{\hbar}}(a,t) > 0$ y decae exponencialmente con el tiempo. La interpretación física de este resultado se relaciona con el fenómeno del decaimiento (ver FIGURA (III.3)). Si en lugar de tomar la corriente de probabilidad en la frontera asociada con las funciones $\psi_{k_{\hbar}}(r,t)$ se escoge una función $\psi_{-k_{\hbar}}(r,t)$ relacionada con un polo complejo del III cuadrante, se llega a que, debido a las consideraciones hechas anteriormente sobre la reversibilidad temporal,

$$j_{-k_{\hbar}}(a,t) = \|u_{k_{\hbar}}(a)\|^2 4\alpha_{k_{\hbar}}\beta_{k_{\hbar}}t(2\alpha_{k_{\hbar}}).$$

para $t < 0$.

Nuevamente, esta función evaluada en la frontera es siempre positiva. Puede demostrarse que si no se toma la condición $t < 0$ cuando se estudia un polo $k_{-k_{\hbar}}$, la corriente de probabilidad en la frontera resulta una cantidad negativa. De esta manera, cuando se trabaja una descripción temporal del fenómeno, para tiempos positivos deben tomarse las funciones $\psi_{k_{\hbar}}(r,t)$ asociadas con los polos complejos del IV cuadrante.

En términos del efecto túnel, en el cual básicamente se sabe que exis

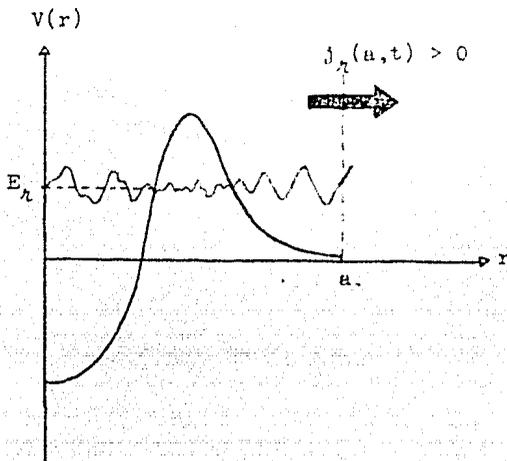


FIGURA (III.3). Cuando el sistema se encuentra en un estado correspondiente a un polo complejo k_n , la corriente de probabilidad es no negativa, lo cual indica que existe un flujo de probabilidad del interior del sistema hacia el exterior ($r > a$).

ten intervalos de energía para los cuales el sistema puede atravesar la barrera de potencial, la representación compleja de las energías determina los dos parámetros importantes, la posición E_n y el ancho Γ_n , como:

$$E_n = E_n - i \frac{\Gamma_n}{2}$$

de manera que si se interpretan de esta manera las energías asociadas

das con los polos complejos, tendremos las equivalencias:

$$E_n = \alpha_n^2 - \beta_n^2 \quad (\text{III.17.A})$$

$$\Gamma_n = 4\alpha_n\beta_n \quad (\text{III.17.B})$$

Estos niveles de energía se encuentran dentro del continuo de energías, $E_n > 0$, como se muestra en la FIGURA (III.4). Aquellas bandas de energía que no se traslapan son conocidas como *niveles de resonancia* y corresponden a esas energías donde se manifiesta el efecto túnel. Por esta razón, aquellos polos complejos que satisfacen $\alpha_n^2 > \beta_n^2$ y tales que $|E_n - E_{n\pm 1}| > \Gamma_n$, se denominan polos de resonancia.

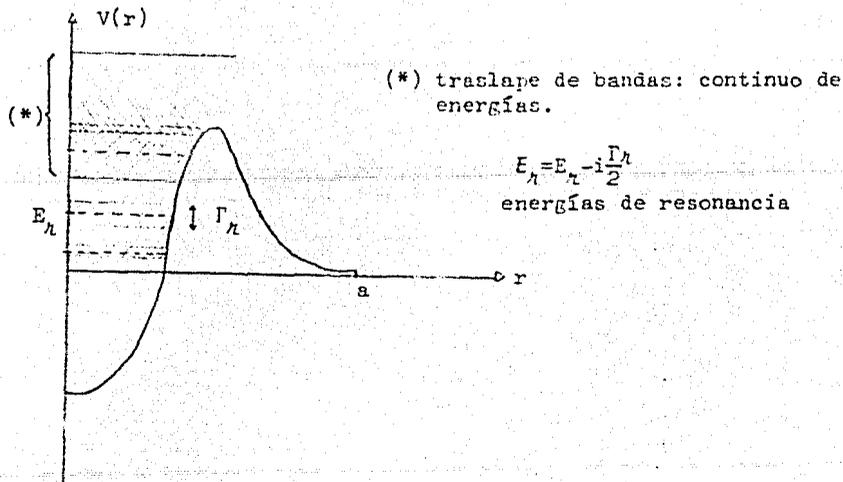


FIGURA (III.4). Polos complejos k_n en el cuarto cuadrante que satisfacen que: $E_n = E_n - i\Gamma_n/2$, con $E_n, \Gamma_n > 0$ se asocian con los estados resonantes.

53. DESARROLLOS ESPECTRALES DE LA FUNCION DE GREEN.

La función de Green del sistema puede expresarse en términos de sus polos k_n en el plano k y de las eigenfunciones naturales $u_n(r)$ correspondientes a ellos, obteniendo una expresión donde aparece en forma discreta la contribución de éstos. De esta forma se obtiene el desarrollo espectral de dicha función.

En esta sección se hallarán las expresiones correspondientes al desarrollo espectral de la función de Green dependiente del tiempo e independiente del tiempo, con base en las ideas contenidas en trabajos realizados anteriormente^{4,5,6}.

A). Desarrollo Espectral de $g(r,r';t)$.

En el APENDICE B se da la expresión para la función de Green dependiente del tiempo como:

$$g(r,r';t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} G^+(r,r';k) 2ke^{-ik^2 t} dk \quad (III.1)$$

donde Γ es el contorno señalado en la FIGURA III.1.

La integración puede efectuarse cerrando el contorno de manera que en su interior el integrando no contenga polos y ahí el valor de la integral se anule. Dado que las singularidades del integran-

do son conocidas, puede llevarse a cabo la integración. Ahora bien, dado que la función de Green independiente del tiempo no es función de k^2 , la manera en que se cierre el contorno depende de la definición del corte ramal que determina las hojas de Riemman en el plano de energías, como se expone en el APENDICE B. Usualmente, cuando el corte ramal coincide con el eje real positivo, se cierra el contorno como se muestra en la FIGURA III.5a. En este caso, sólo los polos ligados se encuentran en la primera hoja de Riemman u "hoja física". Sobre el segmento de círculo el integrando se anula exponencialmente al hacer $R \rightarrow \infty$, la integral sobre Γ es precisamente la función de Green dependiente del tiempo y las integrales sobre los N círculos C_ℓ alrededor de cada polo ligado se calculan por medio del teorema de los residuos. El residuo b_n del integrando en cualquier polo k_n está dado por:

$$b_n = \lim_{k \rightarrow k_n} (k - k_n) \{ G(r, r'; k) 2k e^{-ik^2 t} \}$$

que, utilizando (III.4) y (III.11) es

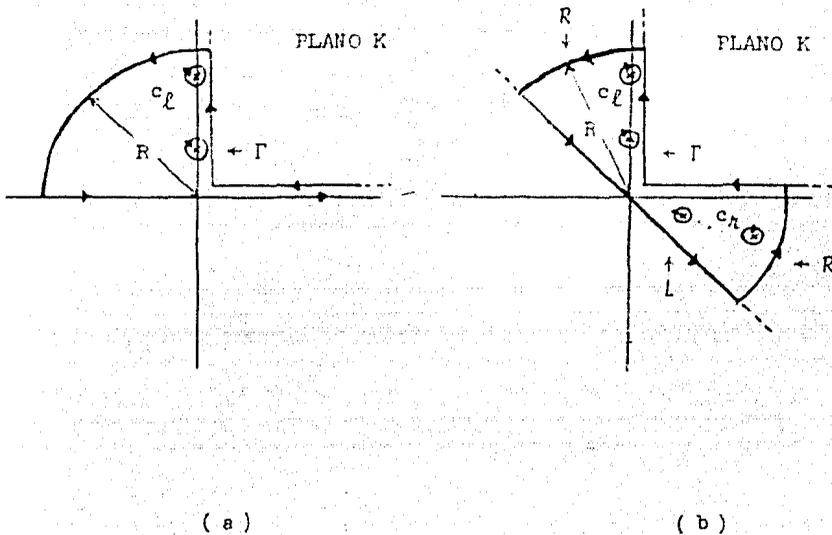
$$b_n = u_n(r) u_n(r, t) e^{-ik_n^2 t} \quad (\text{III.18})$$

y coincide con el valor de la integral sobre el círculo C_n . De esta manera, se obtiene:

$$g(r, r'; t) = \sum_{\ell=1}^N u_{\ell}(r) u_{\ell}(r') e^{-ik_{\ell}^2 t} - \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} G^+(r, r'; k) 2k e^{-ik^2 t} dk$$

Esta expresión es la que generalmente se asocia con el desarrollo espectral de la función de Green $g(r, r'; t)$. En ella, aparece explícitamente la contribución de los polos ligados en un término discreto y una integral sobre el eje real que constituye la contribución del continuo de energías.

Si se toma el eje imaginario negativo como el corte ramal en el plano de energías, dado que ahora tanto los polos ligados como los polos del IV cuadrante corresponden a la I hoja de Riemman, puede obtenerse una expresión donde se discretiza también la contribución de los estados resonantes. En la FIGURA III.5b se muestra cómo se cierra ahora el contorno de integración. Es importante observar que en el plano k el integrando diverge en el III cuadrante cuando se toma el límite $R \rightarrow \infty$, mientras que para las otras regiones se anula exponencialmente, por lo cual no pueden incluirse los polos del III cuadrante al efectuar la integración. Este resultado sugiere que efectivamente la definición de las hojas de Riemman en el plano de energías que resulta de tomar el corte ramal en el eje imaginario negativo es más conveniente para hallar la expresión del desarrollo espectral, extrayendo mayor información al discretizar estas contribuciones, que la información que contiene la contribución continua.



- FIGURA III.5 a). El contorno de integración cerrado se obtiene haciendo $R \rightarrow \infty$, de manera que queda compuesto por Γ , un segmento de círculo de radio $R \rightarrow \infty$ y el eje real - completo.
- b). En esta caso, el contorno de integración cerrado, C está compuesto por la trayectoria Γ , los segmentos de círculo R de radio R , la línea a 45° y un número infinito de círculos c_n que encierran a cada polo.
- $$C = \Gamma + L + \sum c_\ell + \sum c_n + R, \quad \ell=1,2,\dots,N \text{ y } n=1,2,\dots$$

Además, puede verse que si se cambia la variable t por $-t$, la región donde el integrando se anula cuando $R \rightarrow \infty$ es en la región - que incluye los polos antiligados y los del III cuadrante; esto es, que cuando se toma la ecuación (III.1) para $t > 0$ sólo los polos en el eje imaginario positivo y en el IV cuadrante deben incluirse al cerrar el contorno.

De esta manera, dado que en el interior del contorno cerrado C el integrando es analítico (sus singularidades coinciden con las de la función de Green independiente del tiempo), el valor de la integral, como se ha mencionado, se anula sobre C . Asimismo, el valor sobre los segmentos de círculo de radio R se anula cuando $R \rightarrow \infty$. Las contribuciones que no se anulan en la integración sobre el contorno cerrado son la integral sobre Γ (cuyo valor es $g(r, r'; t)$), las integrales alrededor de cada uno de los polos ligados y complejos del IV cuadrante y la integral sobre L , de manera que:

$$\begin{aligned}
 g(r, r'; t) = & -\frac{1}{2\pi i} \sum_{\ell=1}^N \oint_{c_{\ell}} G^+(r, r'; k) 2k e^{-ik^2 t} dk - \\
 & -\frac{1}{2\pi i} \sum_{n=1}^{\infty} \oint_{c_n} G^+(r, r'; k) 2k e^{-ik^2 t} dk - \\
 & -\frac{1}{2\pi i} \int_L G^+(r, r'; k) 2k e^{-ik^2 t} dk
 \end{aligned}$$

La expresión (III.18) para los residuos en los polos del integrando da el valor de las integrales alrededor de los polos, de manera que la expresión de la función de Green $g(r, r'; t)$ es

$$\begin{aligned}
 g(r, r'; t) = & \sum_{\ell=1}^N u_{\ell}(r) u_{\ell}(r') e^{-ik_{\ell}^2 t} + \sum_{n=1}^{\infty} u_n(r) u_n(r') e^{-ik_n^2 t} - \\
 & -\frac{1}{2\pi i} \int_L G^+(r, r'; k) 2k e^{-ik^2 t} dk \quad (\text{III.19})
 \end{aligned}$$

donde, como se recordará,

$$k_{\ell}^2 = -E_{\ell} \quad , \quad E_{\ell} > 0 \quad (\text{III.20.A})$$

para los estados ligados, y

$$k_{\ell}^2 = E_{\ell} = E_{\ell} - i\frac{\Gamma_{\ell}}{2} \quad , \quad E_{\ell} > 0 \quad \text{y} \quad \Gamma_{\ell} > 0 \quad (\text{III.20.B})$$

para los polos de resonancia.

La expresión (III.19) es el desarrollo espectral de la función de Green dependiente del tiempo y de onda saliente, donde la trayectoria L que se muestra en la FIGURA III.1b se obtiene a partir del método de punto silla de montar, como se expone en el APENDICE B. Esta expresión es válida para $0 < r, r' < \infty$ dando que los resultados utilizados no imponen ninguna condición sobre estas variables, y para tiempos positivos, $t > 0$.

B). Desarrollo Espectral de $G^+(r, r'; k)$.

Además de la propiedad de analiticidad de la función de Green independiente del tiempo (excepto en un número infinito de polos k_n), puede demostrarse^{5,6} que cuando el potencial es real y de alcance finito, $V(r) \equiv 0$ para $r > a$, se cumple que:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} G^+(r, r'; k) = 0 \quad \text{para } 0 < r < r' \leq a \quad (\text{III.21})$$

Esto permite obtener su desarrollo espectral, válido para la región interna, de manera análoga al desarrollo anteriormente descrito.

Utilizando la fórmula integral de Cauchy:

$$G^+(k') = \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{G^+(k)}{k - k'} dk$$

(donde se ha suprimido en la notación la dependencia explícita en r y r'). El contorno de integración C se construye como se muestra en la FIGURA III.6, de manera que en su interior $G^+(k)$ es analítica y k' se toma de forma que no coincida con ninguno de los polos de la función de Green, $k' \neq k_n$ para toda n . De esta manera,

$$G^+(k') = \frac{1}{2\pi i} \int_R \frac{G^+(k)}{k - k'} dk - \frac{1}{2\pi i} \sum_{n=1}^{\infty} \oint_{c_n} \frac{G^+(k)}{k - k'} dk$$

La integral sobre R se anula, ya que al tomar el límite $R \rightarrow \infty$, el

integrando se anula en virtud de (III.21) y el segundo término puede identificarse con la suma de los residuos en los polos de la función integrando en cada polo k_n .

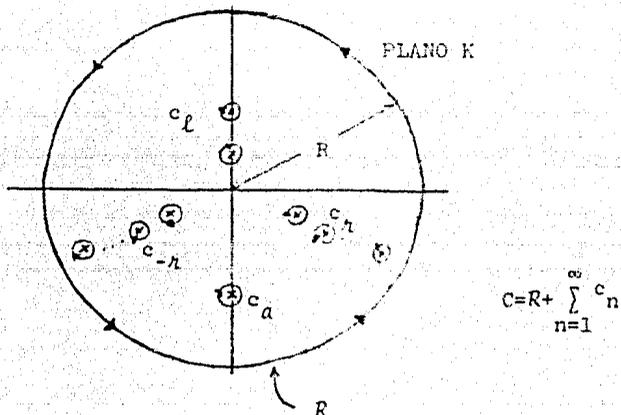


FIGURA III.6. Contorno de integración C en la fórmula integral de Cauchy. Hay un número finito de polos dentro del círculo R cuando R es finito. Al hacer $R \rightarrow \infty$, quedan contenidos N polos ligados, k_l ; M polos antiligados, k_a , y un número infinito de polos complejos k_n y k_{-n} . Los radios de los contornos c_n alrededor de cada polo se toman tan pequeños como se quiera, de manera que cualquier valor del número de onda $k' \neq k_n$ se encuentre en el interior de C .

Llamando θ_n al residuo en el polo k_n cualquiera del integrando, el valor de $G^+(k')$ es:

$$G^+(k') = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{2\pi i} \oint_{c_n} \frac{G^+(k)}{k - k'} dk = - \sum_{n=1}^{\infty} \Theta_n$$

Para evaluar Θ_n , se utiliza la definición:

$$\begin{aligned} \Theta_n &= \lim_{k \rightarrow k_n} (k - k_n) \left\{ \frac{\chi(k) + \rho_n / (k - k_n)}{k - k'} \right\} \\ &= \frac{\rho_n}{k_n - k'} \end{aligned}$$

Incluyendo nuevamente la dependencia en r y r' y utilizando la expresión (III.11) para los residuos en los polos de la función de Green, $\rho_n(r, r')$, la función $G^+(r, r'; k)$ es:

$$G^+(r, r'; k) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{u_n(r)u_n(r')}{2k_n(k - k_n)} \quad (\text{III.22})$$

Si recordamos ahora la clasificación de los polos hecha anteriormente, el desarrollo espectral de la función de Green es el siguiente:

$$\begin{aligned} G^+(r, r'; k) &= \sum_{\ell=1}^N \frac{u_{\ell}(r)u_{\ell}(r')}{2k_{\ell}(k - k_{\ell})} + \sum_{a=1}^M \frac{u_a(r)u_a(r')}{2k_a(k - k_a)} \\ &+ \sum_{\lambda=1}^{\infty} \left(\frac{u_{\lambda}(r)u_{\lambda}(r')}{2k_{\lambda}(k - k_{\lambda})} - \frac{u_{\lambda}^*(r)u_{\lambda}^*(r')}{2k_{\lambda}^*(k - k_{\lambda}^*)} \right) \quad (\text{III.23}) \end{aligned}$$

donde se han usado los resultados $k_{-\lambda} = k_{\lambda}^*$ y $u_{-\lambda}(r) = u_{\lambda}^*(r)$.

C). Sobrecompletez y Dependencia Lineal de las
Eigenfunciones Naturales.

La expresión (III.22) puede sustituirse ahora en la ecuación diferencial que cumple la función de Green independiente del tiempo (III.3.A):

$$\frac{d^2}{dr^2} \left\{ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{u_n(r)u_n(r')}{2k_n(k-k_n)} \right\} + (k^2 - V(r)) \sum_{n=1}^{\infty} \frac{u_n(r)u_n(r')}{2k_n(k-k_n)} = \delta(r-r')$$

para $r < r' < a$

por lo cual:

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

En virtud de la ecuación diferencial (III.8.A) que cumplen las eigen funciones naturales:

$$u_n''(r) = -(k_n^2 - V(r))u_n(r)$$

se tiene que:

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

o bien:

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

como $\frac{k^2 - k_n^2}{k - k_n} = k + k_n$, se obtiene:

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

Dado que k es una variable continua y la expresión anterior es válida para cualquier valor que tome k , se llega a que:

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{u_n(r) u_n(r')}{k_n} = 0 \quad (\text{III.24})$$

$$\frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} u_n(r) u_n(r') = \delta(r - r') \quad (\text{III.25})$$

La ecuación (III.24) indica que el conjunto de las funciones $u_n(r)$ es un conjunto linealmente dependiente y (III.25) expresa una condición de cerradura modificada; esto es, que el conjunto de las eigenfunciones naturales es un conjunto sobrecompleto.

NOTAS Y REFERENCIAS AL CAPITULO III.

- ¹R.G. Newton (1966).
- ²G. García Calderón (1976).
- ³A.S.Davydov, capítulo 11(1969).
- ⁴G. García Calderón, R.E. Peierls (1976).
- ⁵G. García Calderón, M. Berrondo (1979).
- ⁶G. García Calderón (1982).

IV. DESARROLLO ESPECTRAL
DISCRETO DE LA
AMPLITUD DE DECAIMIENTO

La ecuación (II.11) da una expresión para la amplitud de decaimiento en términos de la función de Green de onda saliente. Como se estudió en el capítulo anterior, tanto la función de Green de onda saliente $g(r,r';t)$ (ecuación (III.19)) como la función $G^+(r,r';k)$ (ecuación (III.23)) pueden expresarse en función de los polos y las eigenfunciones naturales asociadas a ellos, por medio de sus desarrollos espectrales. La diferencia entre ambos es que el desarrollo dado por (III.19) es válido en todo el intervalo $0 < r < r' < \infty$, en tanto que la expresión (III.23) sólo puede aplicarse en la región interna $0 < r < r' \leq a$, ya que sólo ahí puede asegurarse la convergencia de (III.21) cuando se efectúa la integración de acuerdo -

con la fórmula integral de Cauchy.

En este capítulo se desarrollará la expresión para $A(t)$ en términos de los polos y eigenfunciones naturales, basándonos en los resultados previos y tomando en cuenta a la función de onda inicial.

Como se recordará:

$$A(t) = \iint_0^{\infty} \psi^*(r,0)g(r,r';t)\psi(r',0)drdr'$$

Y por (III.18):

$$\begin{aligned} A(t) = & \sum_{\ell=1}^N e^{-ik_{\ell}^2 t} \iint_0^{\infty} \psi^*(r,0)u_{\ell}(r)u_{\ell}(r')\psi(r',0)drdr' + \\ & + \sum_{\lambda=1}^{\infty} e^{-ik_{\lambda}^2 t} \iint_0^{\infty} \psi^*(r,0)u_{\lambda}(r)u_{\lambda}(r')\psi(r',0)drdr' - \\ & - \frac{1}{2\pi i} \int_L 2ke^{-ik^2 t} \iint_0^{\infty} \psi^*(r,0)G^+(r,r';k)\psi(r',0)drdr' dk \end{aligned} \quad (IV.1)$$

Para los dos primeros términos que aparecen en (IV.1) pueden efectuarse las integrales por separado sobre r y r' . Si se definen las constantes:

$$c_n \equiv \int_0^{\infty} \psi(r,0)u_n(r)dr$$

$$\bar{c}_n \equiv \int_0^{\infty} \psi^*(r,0)u_n(r)dr$$

para una eigenfunción natural cualquiera $u_n(r)$, podemos reescribir

(IV.1) como:

$$A(t) = \sum_{\ell=1}^N c_{\ell} \bar{c}_{\ell} e^{-ik_{\ell}^2 t} + \sum_{\lambda=1}^{\infty} c_{\lambda} \bar{c}_{\lambda} e^{-ik_{\lambda}^2 t} + I(t) \quad (\text{IV.2})$$

donde la integral $I(t)$ es

$$I(t) = -\frac{1}{2\pi i} \int_L 2k e^{-ik^2 t} \iint_{00}^{\infty \infty} \psi^*(r,0) G^+(r,r';k) \psi(r',0) dr dr' dk$$

Para conocer el comportamiento de la amplitud de probabilidad en el tiempo basta con evaluar la integral $I(t)$, ya que conocemos la dependencia temporal de los dos primeros términos de (IV.2).

Ahora bien, en la expresión para $I(t)$ aparece la función $\psi(r,0)$ que representa al estado inicial del sistema. Consideraremos una situación inicial para $\psi(r,t)$ en la región interna del potencial; es decir, $\|\psi(r,0)\| = 0, r > a$. Esto permitirá evaluar en términos de las eigenfunciones naturales el término $I(t)$, como se verá a continuación.

51. EVALUACION DE A(t) PARA TODO TIEMPO.

Com se mencionó anteriormente, el potencial de alcance finito permite distinguir entre el interior y el exterior del sistema. La condición matemática para la función de onda del estado inicial, $\|\psi(r,0)\| = 0$ para $r < a$, representa físicamente la preparación del sistema, al que inicialmente se le localiza en la región interna, $r < a$. En este caso, las contribuciones de las integrales en (IV.1) se encuentran en los intervalos $r, r' < a$. De esta manera:

$$c_n \equiv \int_0^a \psi(r,0) u_n(r) dr \quad (\text{IV.3.A})$$

$$\bar{c}_n \equiv \int_0^a \psi^*(r,0) u_n(r) dr \quad (\text{IV.3.B})$$

$$y: I(t) = -\frac{1}{2\pi i} \int_L 2k e^{-ik^2 t} \int_0^a \int_0^a \psi^*(r,0) G^+(r,r';k) \psi(r',0) dr dr' dk$$

Tanto r como r' están evaluadas en la región interna, por lo cual puede utilizarse el desarrollo espectral de la función de Green - independiente del tiempo, (III.22), válido en dicha región; es decir:

$$G^+(r,r';k) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{u_n(r) u_n(r')}{2k_n(k - k_n)} \quad r < r' < a$$

donde $u_n(r)$ son las eigenfunciones naturales correspondientes tan

to a estados ligados como a antiligados y resonantes. Evaluando las integrales sobre r y r' , tomando en cuenta las definiciones (IV.3) se obtiene:

$$I(t) = -\frac{1}{2\pi i} \int_L 2ke^{-ik^2 t} \left\{ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{c_n \bar{c}_n}{2k_n (k - k_n)} \right\} dk \quad (\text{IV.4})$$

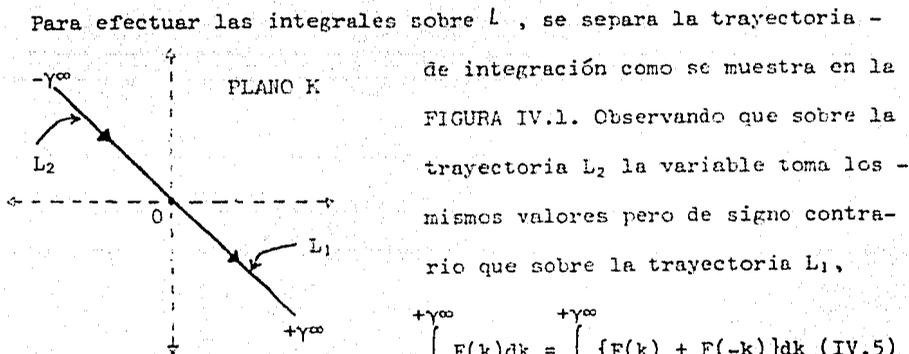


FIGURA IV.1. Separación de la trayectoria L con $\gamma = \exp\{-i\pi/4\}$.

$$\int_{-\gamma^{\infty}}^{+\gamma^{\infty}} F(k) dk = \int_0^{+\gamma^{\infty}} \{F(k) + F(-k)\} dk \quad (\text{IV.5})$$

vectoria L_1 es:

$$F(k) = ke^{-ik^2 t} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{c_n \bar{c}_n}{k_n (k - k_n)}$$

De esta forma,

$$I(t) = -\frac{1}{2\pi i} \sum_{n=1_0}^{\infty} \int_{-\gamma^{\infty}}^{+\gamma^{\infty}} ke^{-ik^2 t} \left(\frac{c_n \bar{c}_n}{k_n} \right) \left(\frac{1}{k^2 - k_n^2} \right) (2k dk)$$

Dado que $\gamma = \exp\{-i\pi/4\}$, pasando al plano de energías por medio de la transformación $E = k^2$, tendremos que:

$$I(t) = -\frac{1}{2\pi i} \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{c_n \bar{c}_n}{k_n} \right) \int_0^{-i\infty} e^{-iEt} \frac{\sqrt{E}}{E - \tilde{E}_n} dE$$

donde $E_n = k_n^2$ corresponde a las energías asociadas a un polo cualquiera k_n . Como puede verse, la integración se lleva a cabo sobre el eje imaginario negativo en el plano de energías que corresponde (ver APENDICE B) al corte ramal. Efectuando la rotación $z = iE$, es inmediato que:

$$I(t) = \frac{\sqrt{i}}{2\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{c_n \bar{c}_n}{k_n} \right) \int_0^{\infty} e^{-zt} \frac{\sqrt{z}}{z - i\tilde{E}_n} dz$$

La evaluación de estas integrales puede hacerse analíticamente utilizando los resultados de las tablas (ver APENDICE C), donde se encuentra que:

$$\int_0^{\infty} e^{-\mu x} \frac{(x)^{\nu-1}}{x + \kappa} dx = \mu^{1-\nu} \Gamma(\nu) U(1, 2-\nu; \kappa\mu) \quad (\text{IV.6.A})$$

$$\text{con: } |\arg\kappa| < \pi, \text{Re}\mu > 0, \text{Re}\nu > 0.$$

donde $U(a, b; z)$ es la función hipergeométrica confluyente de segundo orden. Identificando los parámetros:

$$\nu = 3/2, \operatorname{Re} \nu > 0$$

$$\mu = t, \operatorname{Re} \mu > 0 \text{ ya que } t > 0$$

$$\text{y } \kappa = -iE_n$$

la condición $|\arg \kappa| < \pi$ implica condiciones sobre la situación de los polos, como se muestra en la FIGURA IV.2. La condición:

$$-\pi < \arg \kappa < \pi$$

implica que los valores E_n deben tomarse en la I hoja de Riemann (c.f. APENDICE B), ya que $-iE_n = e^{-i\pi/2} E_n$ y entonces

$$-\frac{\pi}{2} < \arg E_n < \frac{3\pi}{2}$$

por lo cual pueden tomarse sólo los valores $E_n = k_n^2$ que aparecen en el integrando, que se sitúan en la I hoja de Riemann; esto es, aquéllos valores que corresponden en el plano k a polos del integrando en (IV.5) que cumplan:

$$-\frac{\pi}{4} < \arg \sqrt{k_n^2} < \frac{3\pi}{4}$$

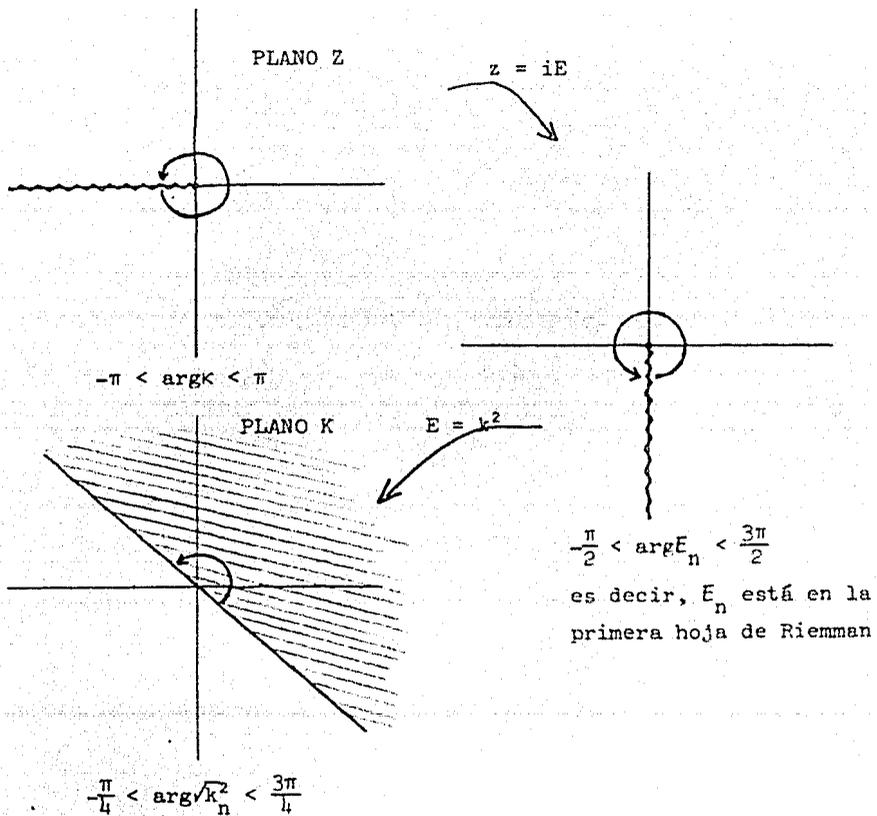


FIGURA IV.2. La condición sobre el parámetro complejo k se traduce a tomar aquellos valores para las singularidades del integrando $\{F(k) = F(-k)\}$ en el plano complejo k que quedan dentro de la zona sombreada. Debido a la trayectoria tomada, estas singularidades, que pueden denotarse como $\sqrt{E_n}$ corresponden tanto al conjunto de todos los polos k_n de la función de Green como a sus negativos $-k_n$. Dado que $k_n^2 = (-k_n)^2$, todos los valores de E_n cumplen con las condiciones necesarias para la integración, y aparecen una sola vez (que equivale a tomar solamente aquéllos en la primera hoja de Riemman.

De esta forma, como $\Gamma(3/2) = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$,

$$I(t) = \frac{\sqrt{i}}{4\sqrt{\pi}} t^{-1/2} \left\{ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{c_n \bar{c}_n}{k_n} U(1, 1/2; -ik_n^2 t) \right\} \quad (\text{IV.6.B})$$

La expresión para la amplitud de decaimiento (IV.2) queda entonces expresada como:

$$A(t) = \sum_{\ell=1}^N c_{\ell} \bar{c}_{\ell} e^{-ik_{\ell}^2 t} + \sum_{\lambda=1}^{\infty} c_{\lambda} \bar{c}_{\lambda} e^{-ik_{\lambda}^2 t} + \frac{\sqrt{i}}{4\sqrt{\pi}} t^{-1/2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{c_n \bar{c}_n}{k_n} U(1, 1/2; -ik_n^2 t) \quad (\text{IV.7.A})$$

o bien:

$$A(t) = \sum_{\ell=1}^N c_{\ell} \bar{c}_{\ell} e^{-ik_{\ell}^2 t} + \sum_{\lambda=1}^{\infty} c_{\lambda} \bar{c}_{\lambda} e^{-ik_{\lambda}^2 t} + \frac{\sqrt{i}}{4\sqrt{\pi}} t^{-1/2} \left[\sum_{\ell=1}^N \frac{c_{\ell} \bar{c}_{\ell}}{k_{\ell}} U(1, 1/2; -ik_{\ell}^2 t) + \sum_{a=1}^M \frac{c_a \bar{c}_a}{k_a} U(1, 1/2; -ik_a^2 t) + \sum_{\lambda=1}^{\infty} \left\{ \frac{c_{\lambda} \bar{c}_{\lambda}}{k_{\lambda}} U(1, 1/2; -ik_{\lambda}^2 t) - \left(\frac{c_{\lambda} \bar{c}_{\lambda}}{k_{\lambda}} \right)^* U(1, 1/2; -ik_{\lambda}^{*2} t) \right\} \right] \quad (\text{IV.7.B})$$

Las expresiones (IV.7) corresponden al desarrollo espectral discreto de la amplitud de decaimiento para todo tiempo, expresada en términos de los parámetros dependientes del potencial y de la función del estado inicial; es decir, de los polos k_n de la función de Green y de las constantes $c_n \bar{c}_n$, donde se encuentra contenida la información de las eigenfunciones naturales $u_n(r)$ y de la función arbitraria

$\psi(r,0)$ que describe inicialmente al sistema.

En la expresión (IV.7.A) para $A(t)$ los términos exponenciales reflejan la presencia de estados ligados y resonantes. Los primeros dan una contribución oscilatoria (dado que $k_\ell^2 = -E_\ell$) y los últimos dan origen al decaimiento exponencial, ya que

$$e^{-ik_\ell^2 t} = e^{-iE_\ell t} e^{-\Gamma_\ell t/2}, \text{ con } \Gamma_\ell > 0.$$

La desviación al decaimiento exponencial viene dada por los términos donde aparece la función hipergeométrica, a la que contribuyen tanto los estados asociados a los polos complejos (incluidos III y IV cuadrantes) como los estados ligados y antiligados.

El comportamiento de la probabilidad $P(t) = \|A(t)\|^2$ cuando el sistema se prepara de manera que inicialmente se encuentre en la región interna, depende del potencial $V(r)$ y la función inicial $\psi(r,0)$ ya que éstos determinan la situación de los polos que aparecen como argumento de las funciones hipergeométricas confluentes, así como las constantes $c_n \bar{c}_n$. La evaluación de la probabilidad $P(t)$ para todo tiempo puede llevarse a cabo numéricamente, como se expone más adelante en el ejemplo del potencial delta repulsivo.

§2. COMPORTAMIENTOS ASINTÓTICOS DE $A(t)$.

Sin embargo, puede conocerse analíticamente el comportamiento de la amplitud de probabilidad $A(t)$ para valores muy cortos o muy largos del tiempo, utilizando las expresiones adecuadas para cada caso de la función hipergeométrica confluyente, como se expone a continuación.

A). Límite cuando $t \rightarrow 0$.

Por la definición de la probabilidad $P(t)$, sabemos que si $t = 0$, la probabilidad de que el sistema se encuentre en el estado inicial es la unidad; es decir,

$$P(0) = \|A(0)\|^2 = 1.$$

Para analizar el valor de la expresión (IV.7) cuando $t \rightarrow 0$, se usan las definiciones en términos de series de las funciones hipergeométricas confluentes (ver APÉNDICE C). Apartir de ellas, puede obtenerse después de un poco de álgebra:

$$t^{-1/2} U(1, 1/2; -ik_n^2 t) = 2 \left(\frac{1}{\sqrt{t}} + \sum_{q=1}^{\infty} \frac{1}{(1/2)_q} (-ik_n^2 t)^q t^{q-1/2} \sqrt{\pi} (-ik_n^2 t) e^{-ik_n^2 t} \right)$$

(IV.8)

De manera que obtenemos para (IV.7.A):

$$\begin{aligned}
 A(t) = & \sum_{\ell=1}^N c_{\ell} \bar{c}_{\ell} e^{-ik_{\ell}^2 t} + \sum_{\lambda=1}^{\infty} c_{\lambda} \bar{c}_{\lambda} e^{-ik_{\lambda}^2 t} - \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{c_n \bar{c}_n}{k_n} \sqrt{k_n^2} e^{-ik_n^2 t} + \\
 & + \frac{\sqrt{i}}{2\sqrt{\pi}} t^{-1/2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{c_n \bar{c}_n}{k_n} + \\
 & + \sum_{q=1}^{\infty} \frac{\sqrt{i}}{2\sqrt{\pi}} \frac{(-2i)^q}{(2q-1)!!} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{c_n \bar{c}_n}{k_n} (k_n)^{2q} t^{q-1/2}
 \end{aligned}$$

(donde $(a)!! = (a)(a-2)(a-4)\dots 1$).

Para simplificar la expresión anterior debe notarse que aparecen los factores de la forma $\sqrt{k_n^2}$. Como se vio en la sección anterior, los parámetros k_n deben estar en la Hoja de Riemann. Los polos de la función integrando de (IV.5) se muestran en la FIGURA IV.3, donde se han incluido tanto los polos de la función de Green como los negativos $-k_n$. De esta manera, las raíces deben tomarse como:

$$\sqrt{k_{\ell}^2} = k_{\ell}, \quad \sqrt{k_a^2} = -k_a, \quad \sqrt{k_{\lambda}^2} = k_{\lambda} \quad \text{y} \quad \sqrt{(-k_{\lambda}^*)^2} = k_{\lambda}^*, \quad \text{de donde:}$$

$$A(t) = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} c_n \bar{c}_n e^{-ik_n^2 t} + \frac{\sqrt{i}}{2\sqrt{\pi}} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{c_n \bar{c}_n}{k_n} t^{-1/2} + \sum_{q=1}^{\infty} Q(q) \sum_{n=1}^{\infty} \frac{c_n \bar{c}_n}{k_n} (k_n)^{2q} t^{q-1/2}$$

(IV.9)

$$\text{donde } Q(q) = \frac{(i)^{1/2-q} 2^q}{2\sqrt{\pi}(2q-1)!!}$$

Para tiempos cortos, el único término que no está acotado es el de $t^{-1/2}$.

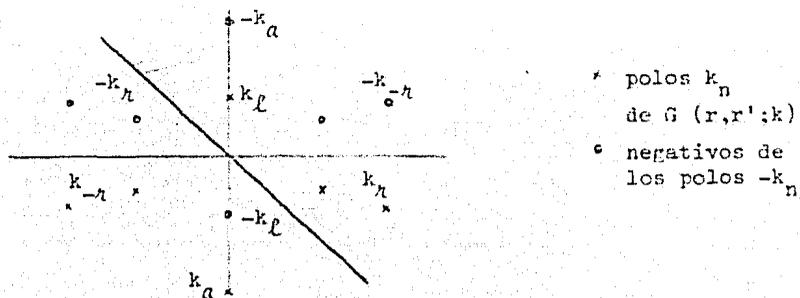


FIGURA IV.3. Polos de $\{F(k) + F(-k)\}$ que corresponden a la I hoja de Riemann bajo la transformación $E = k^2$.

El término que multiplica a $1/\sqrt{t}$ es:

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{c_n \bar{c}_n}{k_n} &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{k_n} \iint_0^{an} \psi^*(r, 0) u_n(r) u_n(r') \psi(r', 0) dr dr' \\ &= \iint_0^{ar} \psi^*(r, 0) \sum_{n=1}^{\infty} \frac{u_n(r) u_n(r')}{k_n} \psi(r', 0) dr dr' \end{aligned}$$

Debido a los resultados acerca de la dependencia lineal de las eigenfunciones naturales $u_n(r)$, ecuación (III.24), obtenemos que:

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{c_n \bar{c}_n}{k_n} \equiv 0, \quad (\text{IV.10})$$

de manera que el coeficiente de la potencia inversa en el tiempo que

puede provocar divergencias en $A(t)$ cuando $t \rightarrow 0$ se anula siempre.

Para tiempos cortos, $e^{izt} \approx 1 + izt$. Asimismo, el término dominante de las potencias semienteras es el correspondiente a $q = 1$, obteniendo con esta aproximación que:

$$A(t) \approx \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} c_n \bar{c}_n + \frac{\sqrt{i}}{\sqrt{\pi}} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{c_n \bar{c}_n}{k_n} k_n^2 t^{1/2} - \frac{\sqrt{i}}{2} \sum_{n=1}^{\infty} c_n \bar{c}_n k_n^2 t + O(t^{3/2}) \quad (\text{IV.11})$$

Utilizando la condición de la sobrecompletez, ecuación (III.25), puede evaluarse:

$$\frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} c_n \bar{c}_n = \int_0^{aa} \int_0^{aa} \psi^*(r, 0) \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{2} u_n(r) u_n(r') \psi(r', 0) dr dr'$$

$$\frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} c_n \bar{c}_n = \int_0^{aa} \int_0^{aa} \psi^*(r, 0) \delta(r-r') \psi(r', 0) dr dr' = \int_0^a \|\psi(r, 0)\|^2 dr$$

Cuando la función de estado inicial tiene un valor despreciable para $r < a$ y corresponde a una densidad de probabilidad normalizada, la integral

$$\int_0^a \|\psi(r, 0)\|^2 dr = 1$$

por lo cual

$$A(t) \underset{t \rightarrow 0}{\approx} 1 + \frac{\sqrt{i}}{\sqrt{\pi}} \sum_{n=1}^{\infty} c_n \bar{c}_n k_n t^{1/2} - \frac{\sqrt{i}}{2} \sum_{n=1}^{\infty} c_n \bar{c}_n k_n^2 t + \dots + O(t^{m/2}) \quad (\text{IV.12})$$

donde $m \in \mathbb{N}$.

De esta manera, para tiempos muy cortos se tiene una desviación al decaimiento exponencial, ya que aparecen potencias enteras y semienteras del tiempo. Como puede verse al tomar el límite $t \rightarrow 0$ en la expresión (IV.12), se obtiene que $A(0) \equiv 1$ y por lo tanto

$$P(0) = 1 \quad (\text{IV.13})$$

también, como era de esperarse.

B). Límite cuando $t \rightarrow \infty$.

El comportamiento de la amplitud de probabilidad para tiempos largos fue obtenido anteriormente utilizando el método del punto silla de montar (ver APENDICE B). En esta exposición desarrollaremos de dos maneras este comportamiento límite.

La preparación del sistema de manera que inicialmente se encuentra en la región interna del potencial implica que podemos utilizar el desarrollo (III.22) en la expresión de $A(t)$. Retomando la expresión:

$$A(t) = \sum_{\ell=1}^N c_{\ell} \bar{c}_{\ell} e^{-ik^2 t} + \sum_{\lambda=1}^{\infty} c_{\lambda} \bar{c}_{\lambda} e^{-ik^2 t} + I(t)$$

la integral puede escribirse como:

$$I(t) = -\frac{1}{2\pi i} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{c_n \bar{c}_n}{k_n} \int_{-\gamma^{\infty}}^{+\gamma^{\infty}} \frac{k}{k - k_n} e^{-ik^2 t} dk$$

y puede evaluarse para tiempos largos utilizando el método mencionado.

La trayectoria de integración \dagger corresponde a la trayectoria para la cual la contribución principal para tiempos grandes se encuentra alrededor de $k = 0$, como se expone en el APENDICE X, de manera que pueden aplicarse los resultados para la evaluación de $I(t)$ cuando $t \rightarrow \infty$ por medio de una sustitución sencilla:

\dagger Ver el artículo de G. García Calderón, R.E. Peierls (1976).

$$I(t) \approx \frac{1}{4\sqrt{\pi i}} \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{c_n \bar{c}_n}{k_n} \right) \frac{1}{k_n^2} t^{-3/2} + O(t^{-5/2}) + \dots \quad (\text{IV.14})$$

De esta manera,

$$A(t) \approx \sum_{\ell=1}^N c_{\ell} \bar{c}_{\ell} e^{-ik_{\ell}^2 t} + \sum_{n=1}^{\infty} c_n \bar{c}_n e^{-ik_n^2 t} - \frac{t^{-3/2}}{4\sqrt{\pi i}} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{c_n \bar{c}_n}{k_n^3} + O(t^{-5/2}) + \dots \quad (\text{IV.15})$$

Cuando $t \rightarrow \infty$, el término dominante de la expresión anterior, dado que los términos exponenciales decaen más rápidamente que los términos en las potencias inversas del tiempo, es precisamente el término que va como $t^{-3/2}$.

Ahora bien, directamente de la expresión (IV.7.A) y utilizando la expresión de la función hipergeométrica confluyente de segundo orden que reproduce su comportamiento asintótico cuando $t \rightarrow \infty$ (c.f. APENDICE C), se obtiene que:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} U(1, 1/2, -ik_n^2 t) \approx -\frac{1}{ik_n^2 t} \left\{ \sum_{m=0}^M \frac{(-1)^m (3/2)_m}{m!} (-ik_n^2 t)^{-m} + O(t^{-M-1}) \right\}$$

con lo cual, en (IV.7.A), se recupera la expresión:

$$A(t) \approx \sum_{\ell=1}^N c_{\ell} \bar{c}_{\ell} e^{-ik_{\ell}^2 t} + \sum_{n=1}^{\infty} c_n \bar{c}_n e^{-ik_n^2 t} - \frac{t^{-3/2}}{4\sqrt{\pi i}} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{c_n \bar{c}_n}{k_n} \cdot \frac{1}{k_n^2} + O(t^{-5/2}) + \dots$$

que es exactamente la ecuación (IV.15) obtenida por el método del punto silla de montar.

Si se hace la separación explícita de los polos k_n se obtiene:

$$A(t) = \sum_{\ell=1}^N c_{\ell} \bar{c}_{\ell} e^{-ik_{\ell}^2 t} + \sum_{n=1}^{\infty} c_n \bar{c}_n e^{-ik_n^2 t} - \frac{\sqrt{i}}{4\sqrt{\pi}} t^{-3/2} \left(\sum_{\ell=1}^N \frac{c_{\ell} \bar{c}_{\ell}}{\gamma_{\ell}} - \sum_{a=1}^M \frac{c_a \bar{c}_a}{\gamma_a} + 2 \sum_n^{\infty} \frac{R_n \Gamma_n / 2 + I_n E_n}{E_n^2 + \Gamma_n^2 / 4} \right) \quad (\text{IV.16})$$

(donde $k_{\ell} = i\gamma_{\ell}$, $k_a = -i\gamma_a$, como antes). R_n e I_n se definen como la parte real e imaginaria del cociente $\frac{c_n \bar{c}_n}{k_n}$, respectivamente:

$$\frac{c_n \bar{c}_n}{k_n} = R_n + iI_n$$

$$y \quad k_n^2 = E_n - \frac{i\Gamma_n}{2}$$

La expresión (IV.16) describe el comportamiento de la amplitud de decaimiento para tiempos largos. El término dominante para $t \rightarrow \infty$ es precisamente el que va como $t^{-3/2}$ que constituye básicamente la contribución a la desviación del decaimiento exponencial para tiempos largos.

V. EJEMPLO. POTENCIAL DELTA REPULSIVO

Los resultados obtenidos a lo largo del presente trabajo serán ilustrados por medio de un ejemplo numérico que tiene solución exacta para las eigenfunciones naturales.

El potencial delta repulsivo se define como:

$$V(\vec{r}) = V(r) = \lambda \delta(r - a)$$

Está determinado por dos parámetros: el *radio* $a > 0$ que se relaciona con la frontera del sistema, y la *magnitud* λ que determina qué tan fuerte o débilmente es repulsivo, $\lambda > 0$.

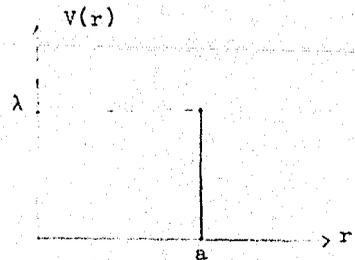


FIGURA V.1. Potencial delta repulsivo.

Los resultados obtenidos a lo largo del presente trabajo serán ilustrados por medio de un ejemplo numérico que tiene solución exacta para las eigenfunciones naturales.

El potencial delta repulsivo se define como:

$$V(\vec{r}) = V(r) = \lambda \delta(r - a)$$

Está determinado por dos parámetros:

el *radio* $a > 0$ que se relaciona con la frontera del sistema, y la *magnitud* λ que determina qué tan fuerte o débilmente es repulsivo, $\lambda > 0$.

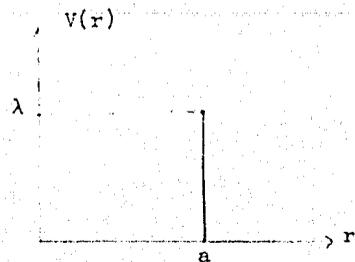


FIGURA V.1. Potencial delta repulsivo.

La solución numérica de este problema se abordará hallando primero, a partir de la función de Green de onda saliente independiente del tiempo, los polos k_n y las eigenfunciones naturales $u_n(r)$, que contienen la información sobre el potencial.

Posteriormente se incorporará una función de estado inicial contenida en la región interna para evaluar los coeficientes $c_n \bar{c}_n$ y por último, hallar la probabilidad $P(t)$.

En cada caso se dará una breve discusión sobre los resultados.

51. POLOS DE LA FUNCION DE GREEN Y EIGENFUNCIONES NATURALES.

A). Función de Green Independiente del Tiempo.

La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo es:

$$\frac{d^2}{dr^2}\psi(r) + \{k^2 - V(r-a)\} \psi(r) = 0 \quad (V.1)$$

Si se definen las funciones regular $\psi(k,r)$ e irregular de honda saliente $f^+(k,r)$ como dos soluciones de la ecuación de Schrödinger con las siguientes condiciones a la frontera:

$$\psi(k,0) = 0$$

$$\left. \frac{d}{dr}\psi(k,r) \right|_{r=0} = 1$$

$$\lim_{r \rightarrow \infty} f^+(k,r) = e^{ikr}$$

entonces la función de Green es [†] :

$$G^+(r,r';k) = \begin{cases} -\frac{\psi(k,r)f^+(k,r')}{J(k)} & r < r' \\ -\frac{\psi(k,r')f^+(k,r)}{J(k)} & r > r' \end{cases} \quad (V.2)$$

[†] Newton (1966).

y cumple con las ecuaciones (III.3) asociadas al problema, donde $J(k)$ denota el wronskiano de las dos soluciones independientes entre sí, $J(k) \equiv W(r^+, \psi)$ que ya no depende de la variable radial. Las expresiones integrales para la función regular e irregular en términos del potencial están dadas por :

$$\psi(k,r) = \frac{1}{k} \operatorname{sen} kr + \frac{1}{k} \int_0^r \operatorname{sen} k(r-z)V(z)\psi(k,z)dz$$

$$r^+(k,r) = e^{ikr} - \frac{1}{k} \int_r^\infty \operatorname{sen} k(r-z)V(z)r^+(k,z)dz$$

y debido a la simplicidad del potencial para integrar, en este caso puede hallarse inmediatamente que:

$$\psi(k,r) = \begin{cases} \frac{1}{k} \operatorname{sen} kr & r < a \\ \frac{1}{k} \operatorname{sen} kr + \frac{\lambda}{k} \operatorname{sen} k(r-a)e^{ika} & r \geq a \end{cases} \quad (V.3)$$

$$r^+(k,r) = \begin{cases} e^{ikr} - \frac{\lambda}{k} \operatorname{sen} k(r-a)e^{ika} & r \leq a \\ e^{ikr} & r > a \end{cases} \quad (V.4)$$

A partir de (V.3) y (V.4) se obtiene que

$$J(k) = 1 + \frac{\lambda}{k} \operatorname{sen} kae^{ika} \quad (V.5)$$

Insertando los resultados en la expresión (V.2) para la función de Green pueden hallarse las expresiones correspondientes a los

casos : $r < r' < a$, $r < a < r'$, $a < r < r'$ y análogamente para $r < r'$. Todas las expresiones quedan en función de los parámetros del potencial a y λ , de manera que pueden analizarse los casos límites del potencial:

cuando $\lambda \rightarrow \infty$ el potencial corresponde a la barrera infinita y la función de Green debe reducirse a la expresión correspondiente a dicho sistema, a saber :

$$G(r, r'; k) = \frac{1}{k \operatorname{sen} ka} \operatorname{sen} kr \operatorname{sen} k(r' - a) \quad r < r' < a$$

Manipulando la expresión correspondiente a la región $r < r' < a$ se obtiene que:

$$\begin{aligned} \lim_{\lambda \rightarrow \infty} G^+(r, r'; k) &= \lim_{\lambda \rightarrow \infty} \left(\frac{\lambda \operatorname{sen} kr \operatorname{sen} k(r' - a) \operatorname{sen} ka - k \operatorname{sen} kr'}{k(k + \lambda \operatorname{sen} ka \exp\{ika\})} \right) \\ &= \frac{\operatorname{sen} kr \operatorname{sen} k(r' - a)}{k \operatorname{sen} ka} \end{aligned}$$

que es exactamente la función de Green para la barrera infinita.

Cuando $\lambda \rightarrow 0$, el potencial se reduce al de la partícula libre y la función de Green debe corresponder a (II.17):

$$G_0^+(r, r'; k) = \frac{1}{2ik} \{ e^{ik(r'-r)} - e^{ik(r'+r)} \}, \quad r < r'$$

Tomando ahora el límite en las funciones $\psi(k,r)$, $f^+(k,r)$ y $J(k)$ se obtiene para la ecuación (V.2) que :

para $r < r'$:

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} G^+(r, r'; k) = \frac{\{\lim_{\lambda \rightarrow 0} \psi(k, r)\} \{\lim_{\lambda \rightarrow 0} f^+(k, r)\}}{\lim_{\lambda \rightarrow 0} J(k)} = \frac{e^{ikr'} \operatorname{sen} kr}{k}$$

que es efectivamente la función de Green libre de onda saliente.

B). Evaluación de los Polos de la Función de Green.

Dado que las funciones regular e irregular no tienen polos como funciones de la variable compleja k (ver expresiones (V.3) y (V.4)), basta con evaluar los ceros de la función $J(k)$, dada por (V.6), de donde la ecuación por resolver es

$$k + \lambda \operatorname{sen} k a e^{ika} = 0$$

Para resolverla, puede dividirse en tres casos:

- i). $k \in \mathbb{R}$ que correspondería a tener estados estacionarios en el sistema,
- ii). $k = i\gamma$ imaginaria, que correspondería a estados ligados, y
- iii). $k = \alpha - i\beta$, que se asocia con la presencia de estados resonantes (con $\alpha \in \mathbb{R}, \beta > 0$.)

i). Si $k \in \mathbb{R}$, a partir de (V.6) se obtienen las ecuaciones correspondientes a la parte real y la imaginaria, que deben cumplirse si multáneamente en caso de que haya una solución real de (V.6).

Manipulando ambas ecuaciones, se obtiene el sistema :

$$\operatorname{sen}2ka = -\frac{2k}{\lambda}$$

$$\text{y} \quad \lambda \operatorname{sen}^2ka = 0$$

para una sola incógnita. La segunda sólo se cumple cuando $k = \frac{n\pi}{a}$ con $n \in \mathbb{N}$ (tomando $\lambda > 0$). La primera tiene solución en las intersecciones de las curvas $\operatorname{sen}2ka$ y $-2k/\lambda$, como se muestra en la FIGURA V.2. Para $0 < \lambda < \infty$, las raíces no coinciden con $n\pi/a$; por lo tanto, los polos de la función de Green no son reales.

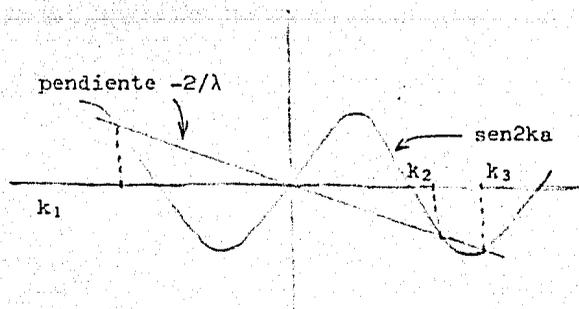


FIGURA V.2. Las raíces de la ecuación $\operatorname{sen}2ka = -2k/\lambda$ dependen del valor de λ y no son de la forma $n\pi/a$.

ii). Si $k = i\gamma$, se obtiene la ecuación:

$$e^{-2\gamma a} = \frac{2\gamma}{\lambda} + 1$$

cuyas raíces se encuentran en la intersección de una curva exponencial decreciente y una recta de pendiente $2/\lambda$ con ordenada al origen unitaria, como se muestra en la FIGURA V.3.

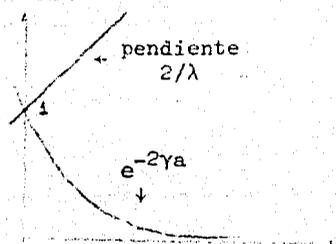


FIGURA V.3.

El único punto donde intersecan es $\gamma = 0$, que corresponde a $k = 0$ pero éste no es un polo de la función de Green ya que

$$J(0) = 1 + \lambda a \neq 0 \text{ ya que } \lambda \text{ y } a > 0,$$

por lo tanto, en el potencial delta repulsivo no hay estados ligados ni antiligados.

iii). Tomando ahora la expresión para los polos como $\alpha - i\beta$ (donde se sabe que $\beta > 0$), se obtienen dos ecuaciones con incógnitas α y β que no pueden desacoplarse:

$$\frac{2\alpha}{2\beta - \lambda} = \tan 2\alpha a \quad (\text{V.7.A})$$

$$e^{4\beta a} = \left(\frac{2\beta - \lambda}{\lambda} \right)^2 + \left(\frac{2\alpha}{\lambda} \right)^2 \quad (\text{V.7.B})$$

A partir de las ecuaciones (V.7) puede comprobarse que si α es una solución, también lo es $-\alpha$, lo cual corresponde al hecho de que para cada polo en el IV cuadrante ($\alpha > 0$) existe un polo si métrico en el III cuadrante. Sabemos que existe un número infinito numerable de estos polos, por lo cual sólo se hallarán las soluciones para los polos del IV cuadrante, que denotaremos por $k_n = \alpha_n - i\beta_n$ con $\alpha_n > 0$ y $\beta_n > 0$.

Para calcular los polos a partir de las ecuaciones (V.7) se encuentran primero valores aproximados utilizando el caso límite $\lambda \rightarrow \infty$ (para el cual $\alpha_n = \frac{n\pi}{a}$ y $\beta_n = 0$) y se utilizan para hallar numéricamente los valores que son solución de (V.6) .

Si $\lambda \gg 1$, entonces $\alpha_n \approx \frac{n\pi}{a}$ y $\beta_n \ll \alpha_n$. Utilizando esta aproximación en (V.7) se obtiene:

$$\alpha_n = \frac{n\pi}{a} + \epsilon_n$$

donde ϵ_n es el factor de corrección . En (V.7.A) esta expresión da un valor para ϵ_n :

$$\tan 2\alpha_n a = \tan(2n\pi + 2\epsilon_n a) = \tan 2\epsilon_n a$$

por lo cual
$$\tan 2\epsilon_n a = \frac{2(\frac{n\pi}{a} + \epsilon_n)}{2\beta_n - \lambda}$$

y como $\lambda \gg \beta_n$, $\lambda \gg \epsilon_n$, se llega a que $\tan 2\epsilon_n a \approx -\frac{2n\pi}{a}$.

La aproximación al valor de α_n es:

$$\alpha_n \approx \frac{n\pi}{a} - \frac{1}{2a} \arctan\left(\frac{2n\pi}{\lambda a}\right) \quad \text{cuando } \lambda \gg 1, \beta_n \ll \alpha_n$$

De la ecuación (V.7.B) y tomando que $\beta_n \ll \lambda$, $\epsilon_n \ll \lambda$, se obtiene la aproximación para β_n :

$$\beta_n \approx \frac{1}{4a} \ln\left(1 + \left(\frac{2n\pi}{\lambda a}\right)^2\right) \quad \text{cuando } \lambda \gg 1, \beta_n \ll \alpha_n$$

Ahora bien, para el cálculo de los primeros polos, cuando $\lambda < n\pi$, aproximando $\ln(1+z) \approx z$ y $\tan z \approx z$, se obtiene un valor aproximado y de cálculo numérico simple, a saber:

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

Esta aproximación se usa para calcular iterativamente nuevos valores k_n^1, k_n^2, \dots por medio de métodos numéricos para calcular con una precisión arbitraria la raíz de una función $J(k)$. En este caso, se utilizó el método conocido como "Newton-Raphson" que da el valor de k_n^m (que denotaremos simplemente por k_n^1) en función del valor anterior k_n^{m-1} (que llamaremos k_n) de la manera siguiente:

$$k_n^1 = k_n - J(k_n) \left(\frac{d}{dk} J(k) \Big|_{k=k_n} \right)^{-1}$$

que, a partir de (V.5) es, para este problema:

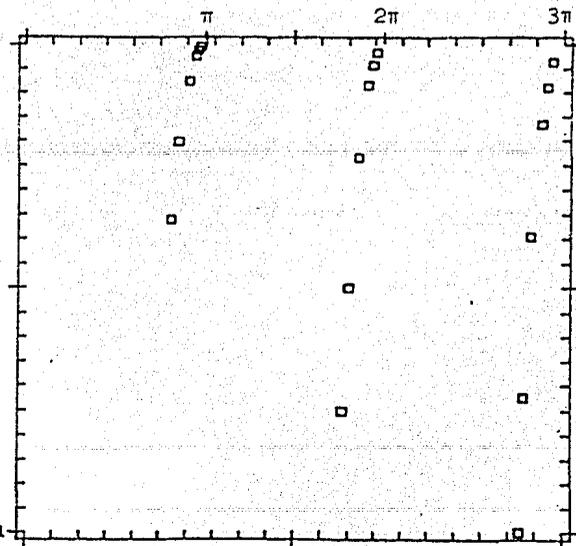
$$k'_n = k_n - \frac{k_n}{\lambda} \frac{k_n e^{-ik_n a} + \lambda \operatorname{sen} k_n a}{ak_n \exp\{ik_n a\} - \operatorname{sen} k_n a}$$

hasta que $\|k'_n - k_n\| < \epsilon$

Para valores grandes de λ , los polos se encuentran cercanos al eje real y tienden a $n\pi/a$. A medida que λ decrece, la parte imaginaria β de los polos crece de manera cuadrática, en tanto que la parte real decrece ligeramente.

FIGURA V.4.

Situación de los polos en el IV cuadrante. $a = 1$ y $\lambda = 50, 30, 20, 10,5$ y 3 . Los polos se encuentran más cercanos al eje real para $\lambda=50$ y se van alejando a medida que λ disminuye.



0.

0.00E+00

Por otro lado, a medida que crece el radio a , la parte real de los polos decrece y la parte imaginaria disminuye en varios órdenes de magnitud. Estos resultados fueron obtenidos variando el valor de λ para tres valores de a ($a = 1$, $a = 5$ y $a = 10$).

Para ilustrar la situación de los polos en el potencial bajo estudio, se muestran en la FIGURA V.4 los tres primeros polos, obtenidos de la manera expuesta anteriormente con una precisión $\epsilon = 10^{-6}$, para los casos $a = 1$ y seis valores distintos de λ : (50, 30, 20, 10, 5 y 3).

La gráfica corresponde al IV cuadrante del plano k y la parte real está dada en unidades de π .

Recordando que las energías de resonancia (c.f. CAP. III, sección 2.C) están asociadas a k_n^2 , la condición de que las bandas de energía no se traslapen se cumple para los casos en que $\lambda > a$. A medida que λ decrece va aumentando el número de niveles que presentan traslape. Para los casos presentados de ahora en adelante se tomaron parámetros del potencial que presentan al menos uno o dos niveles de resonancia, y fueron calculados los 20 primeros polos k_n correspondientes.

C). Cálculo de los Coeficientes de los Estados Resonantes.

Dado que el potencial delta repulsivo sólo presenta polos complejos k_n , el sistema no tiene estados ligados ni antiligados. Para hallar las eigenfunciones naturales $u_n(r)$, se obtendrán las expresiones para los estados resonantes $u_n(r)$ asociados a los polos k_n del IV cuadrante, ya que los polos simétricos $-k_n^*$ están asociados a funciones $u_n^*(r)$.

Las ecuaciones que cumple $u_n(r)$ son:

$$\frac{d^2}{dr^2} u_n(r) + \{k_n^2 - \lambda \delta(r-a)\} u_n(r) = 0 \quad (\text{V.8.A})$$

$$u_n(0) = 0 \quad (\text{V.8.B})$$

$$\left. \frac{d}{dr} u_n(r) \right|_{r=a^+} = ik_n u_n(r) \quad (\text{V.8.C})$$

y las ecuaciones de continuidad en la frontera y discontinuidad para la derivada que se obtiene a partir de (V.8.A):

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left(\left. \frac{d}{dr} u_n(r) \right|_{a+\epsilon} - \left. \frac{d}{dr} u_n(r) \right|_{a-\epsilon} \right) = \lambda u_n(a) \quad (\text{V.8.D})$$

La solución de la ecuación diferencial (V.8.A) está dada por:

$$u_n(r) = \begin{cases} A_n \operatorname{sen} k_n r & r < a \\ D_n e^{ik_n r} & r > a \end{cases}$$

Usando la condición
(V.8.B)

Usando la condición
(V.8.C)

Por medio de la condición de continuidad en $r = a$ y la igualdad

$$k_n = -\lambda \operatorname{sen} k_n a e^{ik_n a} \quad (\text{de la ecuación (V.6)}):$$

$$D_n = -\frac{A_n k_n}{\lambda} e^{-2ik_n a} \quad (\text{V.9.A})$$

Puede demostrarse que la ecuación (V.8.D) se cumple para estas funciones, dado que k_n cumple (V.6), de manera que para hallar A_n (y con ello determinar también D_n), se utiliza el criterio de normalización (III.10):

$$\int_a^\infty u_n^2(r) dr + \frac{i}{2k_n} u_n^2(a) = 1$$

de donde se obtiene el valor para A_n :

$$A_n^2 = \frac{2k_n}{k_n a - \operatorname{sen} k_n a \exp(-ik_n a)} \quad (\text{V.9.B})$$

Las ecuaciones (V.9) dan los coeficientes de los estados resonantes en términos tanto de los parámetros del potencial como de los polos correspondientes.

Para el caso límite $\lambda \rightarrow \infty$, $k_n \rightarrow n\pi/a$, $A_n \rightarrow \sqrt{2/a}$ y $D_n \rightarrow 0$, recuperando el caso de la barrera infinita, para la cual los estados estacionarios tienen funciones normalizadas $\sqrt{2/a} \sin \frac{n\pi}{a} r$. Para los casos donde pueden definirse niveles de resonancia (sin traslape); es decir, potenciales con $\lambda > a$, es de esperarse (en virtud del movimiento de los polos a medida que aumenta n) que los coeficientes A_n estén cercanos al valor $\sqrt{2/a}$ para los primeros polos, disminuyendo posteriormente su parte real, que en todos los casos es mucho mayor que la parte imaginaria. Para estos potenciales se encontró también que $\|D_n\| \ll \|A_n\|$.

52. EVALUACION DE LA PROBABILIDAD $P(t)$

Una vez que, dado un potencial, se determinan los polos y las funciones $u_n(r)$, el cálculo de la probabilidad requiere la utilización de la función de estado inicial. Como se ha mencionado en el capítulo anterior, se preparará dicho estado de manera que inicialmente se encuentre en la región interna.

A). Cálculo de los Coeficientes $c_n \bar{c}_n$.

Para representar el estado inicial del sistema, se trabajó con la expresión que corresponde a una gaussiana normalizada:

$$\psi_0(r) \equiv \psi(r,0) = (\sigma_0^2 \pi)^{-1/4} \exp\left[-\frac{(r-r_0)^2}{2\sigma_0^2}\right] e^{ik_0 r}$$

Donde se ajustaron los parámetros σ_0 y $r_0 < a$ de manera que

$$\|\psi_0(0)\| = \|\psi(a)\| = 0 \quad (V.10)$$

En la expresión (V.10) los parámetros que determinan al estado inicial son el valor esperado de r , el del momento lineal p_r y el ancho o incertidumbre en la posición:

$$\langle r \rangle = r_0$$

$$\Delta r = \frac{1}{\sqrt{2}} \sigma_0$$

$$\langle p_r \rangle = k_0, \text{ en uni-}$$

dades de $\hbar = 1$.

Los coeficientes c_n y \bar{c}_n están dados por la expresión (IV.3)

cuando se prepara el estado inicial en la región interna, que en este caso se calculan como:

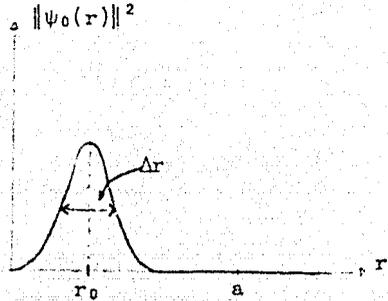


FIGURA V.5. Densidad de probabilidad inicial $\|\psi_0(r)\|^2$

$$c_n = \int_0^a \psi_0(r) A_n \text{sen} k_n r dr$$

$$\bar{c}_n = \int_0^a \psi_0^*(r) A_n \text{sen} k_n r dr$$

y utilizando la equivalencia $\text{sen} z = \frac{1}{2i} \{ e^{iz} - e^{-iz} \}$:

$$c_n = \frac{iA_n}{2\sqrt{\sigma_0}\sqrt{\pi}} \{ I_1 - I_2 \} \quad (\text{V.11.A})$$

$$\bar{c}_n = \frac{iA_n}{2\sqrt{\sigma_0}\sqrt{\pi}} \{ I_3 - I_4 \} \quad (\text{V.11.B})$$

donde se definen las integrales:

$$I_1 \equiv \int_0^a e^{-(r-r_0)^2/2\sigma_0} e^{i(k_0-k_n)r} dr$$

$$I_2 \equiv \int_0^a e^{-(r-r_0)^2/2\sigma_0} e^{+i(k_0+k_n)r} dr$$

$$I_3 \equiv \int_0^a e^{-(r-r_0)^2/2\sigma_0} e^{-i(k_0+k_n)r} dr$$

$$I_4 \equiv \int_0^a e^{-(r-r_0)^2/2\sigma_0} e^{-i(k_0-k_n)r} dr$$

Como se puede ver, $I_3 = I_4^*$ e $I_2 = I_1^*$, de manera que:

$$c_n \bar{c}_n = \frac{A_n^2}{4\sigma_0\sqrt{\pi}} |I_1 - I_2|^2 \quad (\text{V.11.C})$$

donde, como se recordará, A_n^2 es un número complejo en general.

Para evaluar las expresiones (V.11) se utilizaron métodos numéricos de integración donde si N es el número de puntos que se toman para la aproximación numérica y $\Delta x = a/N$ el intervalo entre los puntos es constante,

$$\int_0^a f(x) dx \approx \frac{\Delta x}{2} \sum_{j=1}^N \{f(j\Delta x) + f((j-1)\Delta x)\}$$

Una vez que el potencial es fijo (valores de a y λ dados), se obtuvieron valores para los coeficientes $c_n \bar{c}_n$ variando los parámetros de la gaussiana σ_0 , r_0 y k_0 .

Como se recordará, a partir de la condición de sobrecompletitud

que cumplen las eigenfunciones naturales, ecuación (III.25), en este caso se tiene que:

$$\frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \{ c_n \bar{c}_n + c_n^* \bar{c}_n^* \} = 1$$

dado que en este sistema sólo hay polos complejos. De esta relación se obtiene la condición que deben cumplir estos coeficientes:

$$\operatorname{Re} \sum_{n=1}^{\infty} c_n \bar{c}_n = 1 \quad (\text{V.12.A})$$

Asimismo, en virtud de la dependencia lineal de las mismas funciones, ecuación (III.24):

$$\operatorname{Im} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{c_n \bar{c}_n}{k_n} = 0 \quad (\text{V.12.B})$$

Como se ha mencionado en la sección anterior, fueron calculados los primeros 20 polos de la función de Green para diferentes potenciales. Variando la preparación del estado inicial, se obtuvieron los coeficientes correspondientes, calculando las sumas (V.12). En todos los casos, bastaron los primeros 20 términos para asegurar la convergencia de las series.

La distribución de la parte real de los coeficientes $c_n \bar{c}_n$ se es-

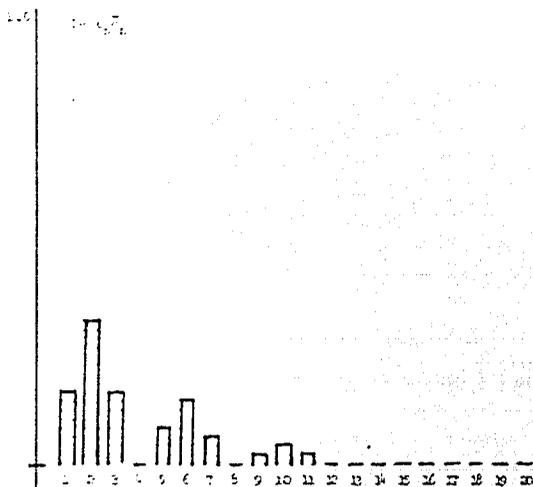
tudió variando los parámetros k_0 , r_0 y Q_0 con valores fijos de a y λ , como se muestra en la FIGURA V.6, con parámetros $a = 1$ y $\lambda = 50$.

Cuando k_0 se fija como la parte real del primer polo, $k_0 = \text{Re } k_1$ (FIGURA V.6.A), el peso de $\text{Re } (c_1 \bar{c}_1)$ crece a medida que aumenta $\Delta r_0 = \sigma_0 / \sqrt{2}$. En estos casos, el valor de r_0 depende del valor de Δr ya que se requiere que se cumpla la condición (V.10), por lo cual no pueden tomarse valores de σ_0 muy grandes.

En el caso de la gaussiana más delgada (FIGURA V.6.B) la distribución de la parte real de los coeficientes tiende a presentar una moda definida a medida que aumenta k_0 (tomando valores $k = \text{Re } k_n$ para diferentes valores de n) que coincide con el coeficiente $c_n \bar{c}_n$ correspondiente al polo donde se centró el valor de k_0 . Para k_0 pequeña, sin embargo, son varios los coeficientes que pesan en esta distribución.

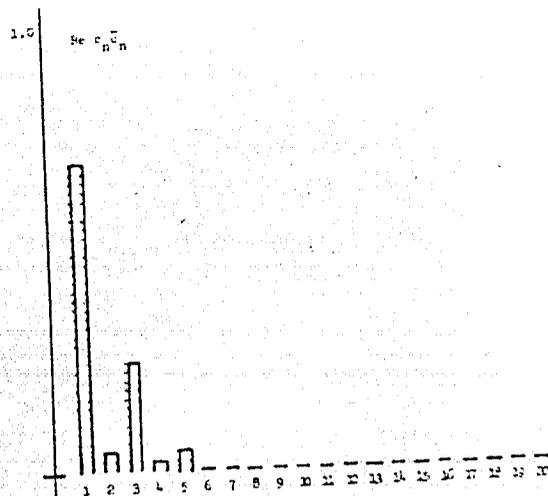
Para la gaussiana ancha (FIGURA V.6.C) la moda de la distribución coincide con el coeficiente asociado al polo k_n en el cual se centra k_0 . A medida que k_0 aumenta, va disminuyendo el peso que tiene dicho coeficiente.

En todos los casos se da el valor de las sumas (V.12) calculadas con los primeros 20 polos. Como puede observarse, a medida que disminuye Δr o aumenta k_0 la convergencia de estas sumas empeora; es decir, que se necesitan más polos para estudiar el decaimiento del sistema numéricamente.



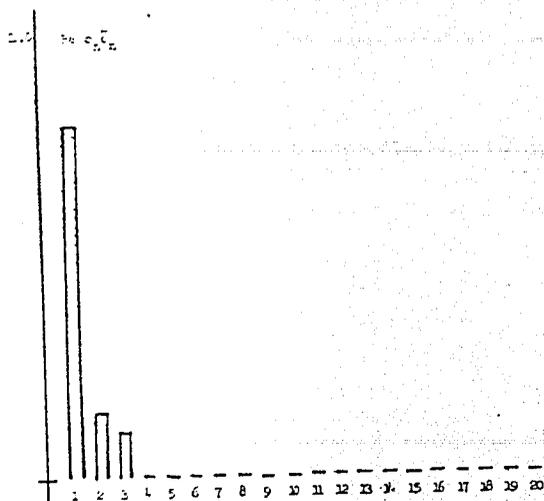
$$(A) = 0.99995$$

$$(B) = 0.00064$$



$$(A) = 0.99998$$

$$(B) = 0.00074$$



$$(A) = 0.99956$$

$$(B) = 0.00074$$

FIGURA V.6.A Distribución de $\text{Re } c_n \bar{c}_n$.

Arriba a la izquierda, para una gaussiana delgada $\sigma_0 = a/20$. Arriba a la derecha, para una gaussiana con $\sigma_0 = a/8$. Abajo, para la gaussiana ancha, $\sigma_0 = a/5$. Las tres funciones de estado inicial están centradas en $k_0 = \text{Re} k_1$.

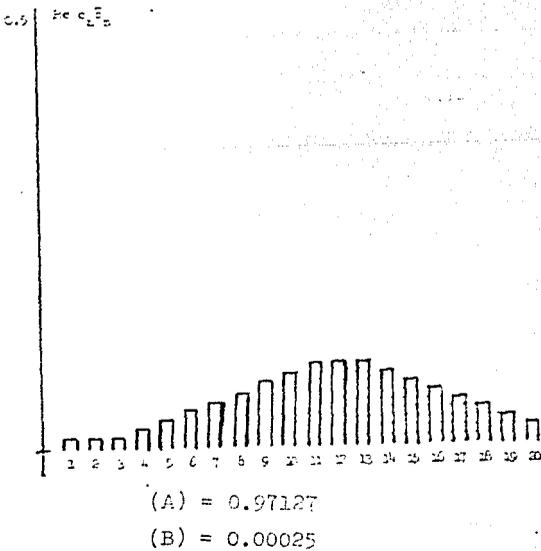
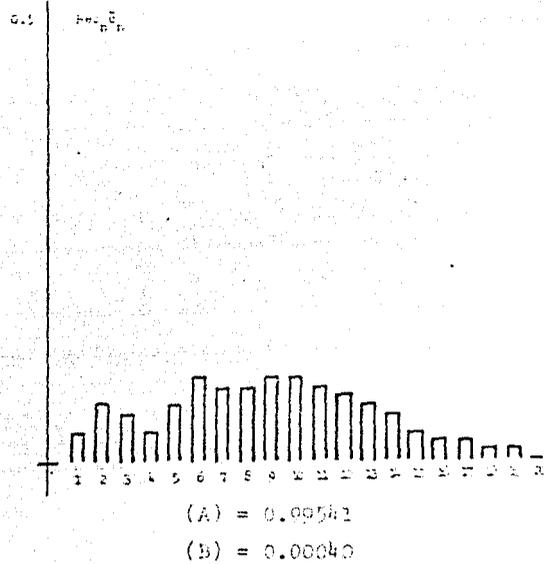
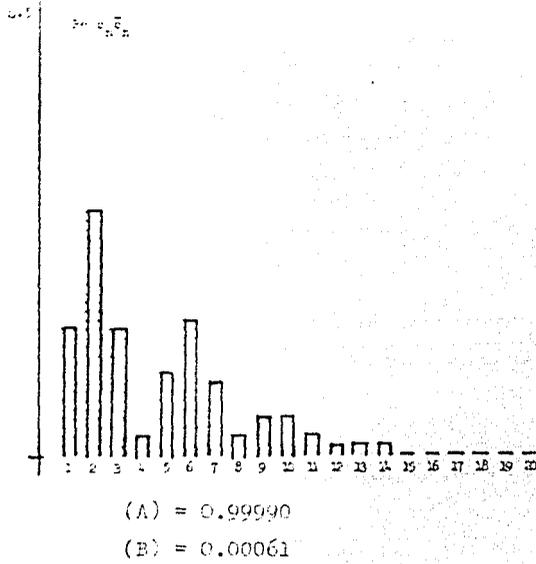
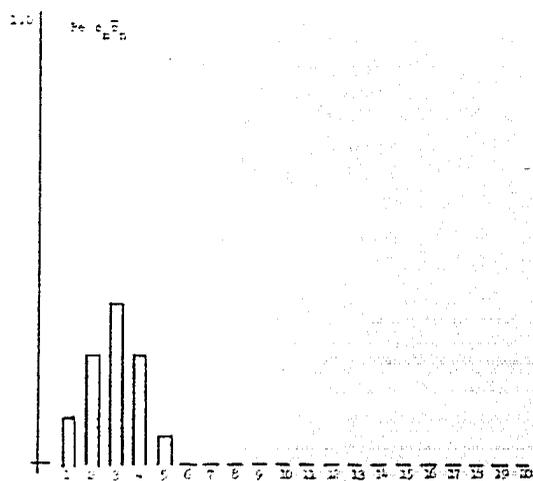
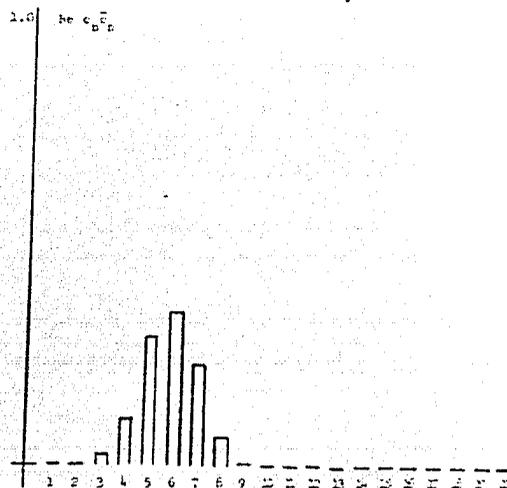


FIGURA V.6.B Distribución de $Re c_n \bar{c}_n$
para una gaussiana delgada, $\sigma_0 = a/20$.
Arriba a la izquierda, centrada en
 $k_0 = Re k_3$. Arriba a la derecha, centra-
da en $k_0 = Re k_9$. Abajo, centrada en
 $k_0 = Re k_{12}$
En esta figura, la escala es a 0.5.



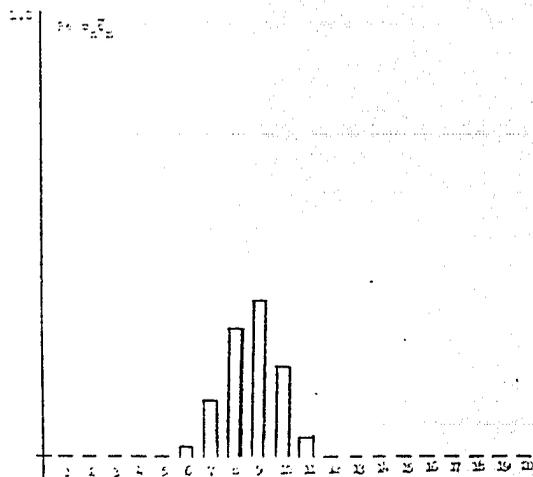
$$(A) = 0.99952$$

$$(B) = 0.00069$$



$$(A) = 0.99948$$

$$(B) = 0.00052$$



$$(A) = 0.99949$$

$$(B) = 0.00037$$

FIGURA V.6.C Distribución de $\text{Rec } \bar{c}_n^c$ para una gaussiana ancha, $\sigma_0 = a/5$. Arriba a la izquierda, centrada en $k_0 = \text{Re}k_3$. Arriba a la derecha, centrada en $k_0 = \text{Re}k_6$. Abajo, centrada en $k_0 = \text{Re}k_9$.

B). Cálculo de la Amplitud de Decaimiento $A(t)$.

Una vez que se han calculado los polos k_n , que contienen la información sobre el potencial, y los coeficientes $c_n \bar{c}_n$, que contienen además la información sobre la función de estado inicial, puede calcularse numéricamente la amplitud $A(t)$ partiendo de la expresión integral:

$$A(t) = \sum_n \left\{ c_n \bar{c}_n e^{-ik_n^2 t} + \frac{\sqrt{i}}{2\pi} \left(\frac{c_n \bar{c}_n}{k_n} \int_0^\infty e^{-zt} \frac{\sqrt{z}}{z - ik_n^2} dz - \frac{(c_n \bar{c}_n)^*}{k_n^*} \int_0^\infty e^{-zt} \frac{\sqrt{z}}{z - ik_n^{2*}} dz \right) \right\} \quad (V.13)$$

Las integrales:

$$I(t, \kappa) \equiv \int_0^\infty e^{-zt} \frac{\sqrt{z}}{z + \kappa} dz, \quad \text{con } \kappa \in \mathbf{C}$$

pueden calcularse utilizando las aproximaciones a la integral de Laguerre, definiendo la variable $x = zt$ para obtener:

$$I(t, \kappa) = \frac{1}{\sqrt{t}} \int_0^\infty e^{-x} f(x, \kappa) dx \approx \frac{1}{\sqrt{t}} \sum_{i=1}^L w_i f(x_i, \kappa)$$

con $f(x, \kappa) = \sqrt{x}/(x + \kappa)$. L es el número de puntos que se utilizan en la evaluación numérica, x_i son los puntos de Laguerre donde se evalúa la función $f(x, \kappa)$ y w_i los pesos de Laguerre.

Tanto x_i como w_i se encuentran en tablas de métodos numéricos para diferentes valores de L . En este caso, se utilizaron los correspondientes a $L = 12$.

Ahora bien, antes de iniciar el cálculo de la amplitud, se halló un criterio para definir tanto las unidades temporales convenientes como el intervalo en dichas unidades adecuado para observar tiempos largos; es decir, la región donde $A(t)$ se comporta como $t^{-3/2}$.

Como se ha mencionado, se variaron los valores de los parámetros del potencial, observando que a medida que aumenta λ se incrementa el número de niveles de resonancia. Para los casos discutidos, siempre el primer polo corresponde a una de estos niveles resonantes con energía E_1 y ancho Γ_1 , cantidades bien definidas. La *vida media* o unidad temporal que fue tomada es característica de cada sistema y se define como:

$$\tau \equiv \frac{1}{\Gamma_1}$$

en virtud de que está asociada con la unidad temporal más grande intrínseca del sistema debido a que $\Gamma_1 < \Gamma_2 < \dots < \Gamma_n$.

Se desea encontrar una cota inferior del tiempo para el cual la probabilidad ya se comporta como potencia inversa del tiempo, parámetro que denominamos T , ya que con ello puede discernirse el intervalo para el cual se evaluará $A(t)$ dada por (V.13)

Para estimar T se tomó la expresión (IV.16) para tiempos lar-

gos:

$$A(t) = \sum_n \left(c_n \bar{c}_n e^{-ik_n^2 t} - \frac{\sqrt{i}}{2\sqrt{\pi}} \left(\frac{R_n \Gamma_n / 2 + I_n E_n}{E_n^2 + \Gamma_n^2 / 4} \right) t^{-3/2} \right)$$

El parámetro T debe cumplir que para todo tiempo $t > T$, el término que domina en la probabilidad $P(t) = \|A(t)\|^2$ sea el de la potencia inversa del tiempo. Por ello, basta con encontrar T tal que si $t > T$ entonces:

$$\left\| \sum_n c_n \bar{c}_n e^{-ik_n^2 t} \right\| \leq \frac{1}{4\pi} \left\| \sum_n T_n \right\| t^{-3/2}$$

$$\text{donde } T_n \equiv \frac{R_n \Gamma_n / 2 + I_n E_n}{E_n^2 + \Gamma_n^2 / 4} = \text{Im} \left(\frac{c_n \bar{c}_n}{k_n^3} \right).$$

Ahora bien, por la desigualdad de Schwarz, el valor absoluto de la suma en el miembro izquierdo es menor que la suma de los valores absolutos, de manera que basta con estimar T como el tiempo para el cual se da la igualdad:

$$\sum_n \|c_n \bar{c}_n\| e^{-\Gamma_n T / 2} = \frac{1}{4\pi} \left\| \sum_n T_n \right\| T^{-3/2}$$

para asegurar que la contribución no exponencial a la probabilidad será ya del orden o mayor que el decaimiento exponencial para los tiempos más grandes que T .

La solución de la ecuación para T se encuentra numéricamente, por el método de Newton-Raphson, y en este caso se usó una con-

vergenca de 10^{-10} .

En todos los casos analizados para los cuales la vida media está bien definida, se encontró que el término $c_1 \bar{c}_1 \exp\{-\frac{\Gamma_1 t}{2}\}$ es el único término que contribuye para la parte exponencial en los intervalos de tiempo del orden del parámetro T.

La variación de los parámetros T se muestra en las gráficas (V.7), donde se ha graficado T en unidades de vidas medias, T redondeado a números enteros. En cada gráfica el valor del radio a es fijo y se varió el valor de la magnitud λ , calculando T tanto para una función inicial dada por una gaussiana ancha (G.A.) como para una delgada (G.D.) con las siguientes características:

$\psi_0(r)$	σ_0	r_0	k_0	$\ \psi_0(0)\ $	$\ \psi_0(a)\ $
G.A.	a/8	a/2	$\text{Re}k_2$	$\sim 10^{-2}$	$\sim 10^{-2}$
G.D.	a/20	a/4	$\text{Re}k_2$	$\sim 10^{-6}$	$\sim 10^{-7}$

Como se puede observar, a medida que disminuye la magnitud de la barrera de potencial, disminuye el tiempo T que determina lo que para cada sistema significa "tiempos suficientemente largos". Es

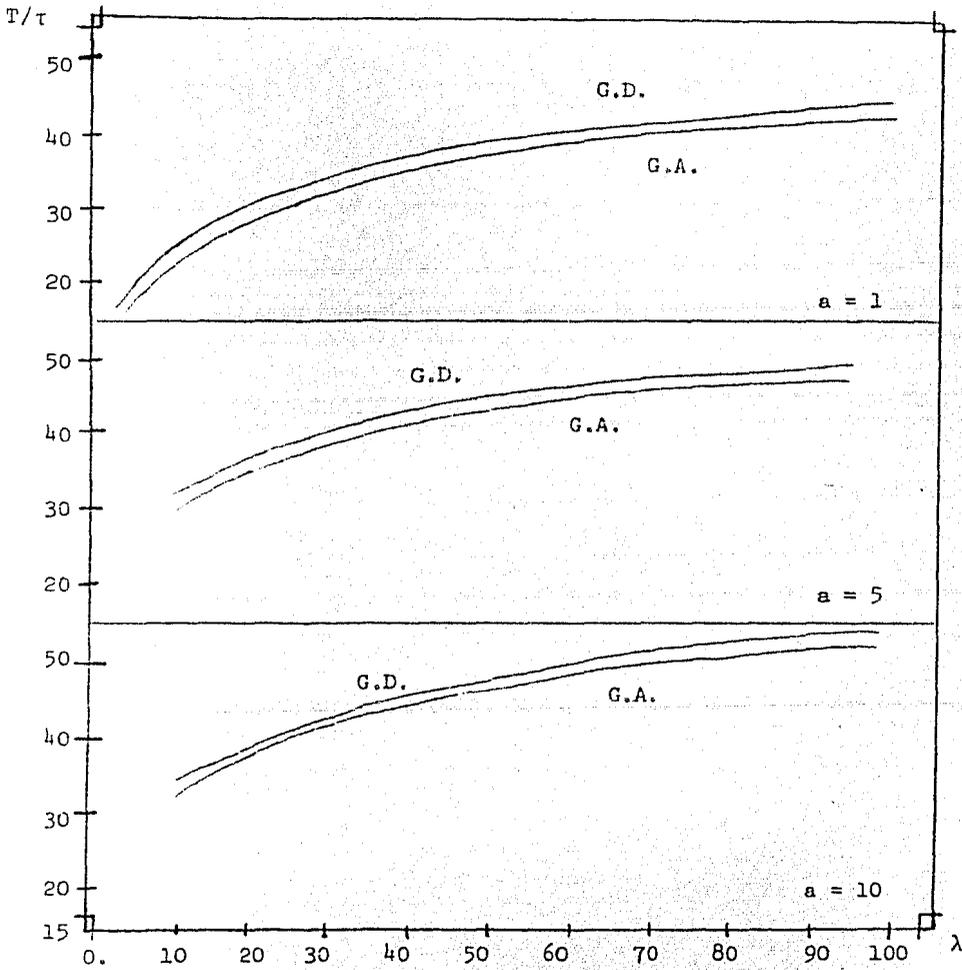


FIGURA V.7. Se muestra la variación de T en vidas medias para diferentes valores de λ , en la misma escala, con los valores indicados del radio a ; tanto para una gaussiana delgada (G.D.) como para una ancha (G.A.)

te efecto también sucede cuando el radio a disminuye. En todos los casos, T resulta ser menor para la gaussiana más ancha que corresponde a un estado inicial contenido en la región interna pero no muy localizado (Δr grande).

Al variar k_0 se obtuvo que cuando no se le localiza en $\text{Re}k_n$ el parámetro T/τ decrece ligeramente, siendo más perceptible su variación cuando se aumenta el ancho Δr , dado un potencial.

En términos de las discusiones hechas anteriormente, se tomó el potencial con parámetros $a = 1$ y $\lambda = 50$ de manera que hubiera varios niveles de resonancia sin que T sea muy grande, y se calculó $P(t)$ para dos funciones de estado inicial diferentes:

1: Gaussiana Delgada Centrada en el tercer polo:

$$\sigma_0 = a/20, \quad r_0 = a/4, \quad k_0 = \text{Re}k_3$$

2: Gaussiana Ancha Centrada en el primer polo:

$$\sigma_0 = a/5, \quad r_0 = a/2, \quad k_0 = \text{Re}k_1$$

En el APENDICE E se muestran los valores de los polos k_n , de los coeficientes $c_n \bar{c}_n$ así como los programas de cómputo para evaluarlos y evaluar $P(t) = \|A(t)\|^2$.

Las gráficas (v.8) muestran los resultados para ambos casos, donde se ha amplificado la región para tiempos cortos donde hay oscilaciones. En la siguiente sección se da una breve discusión sobre los resultados.

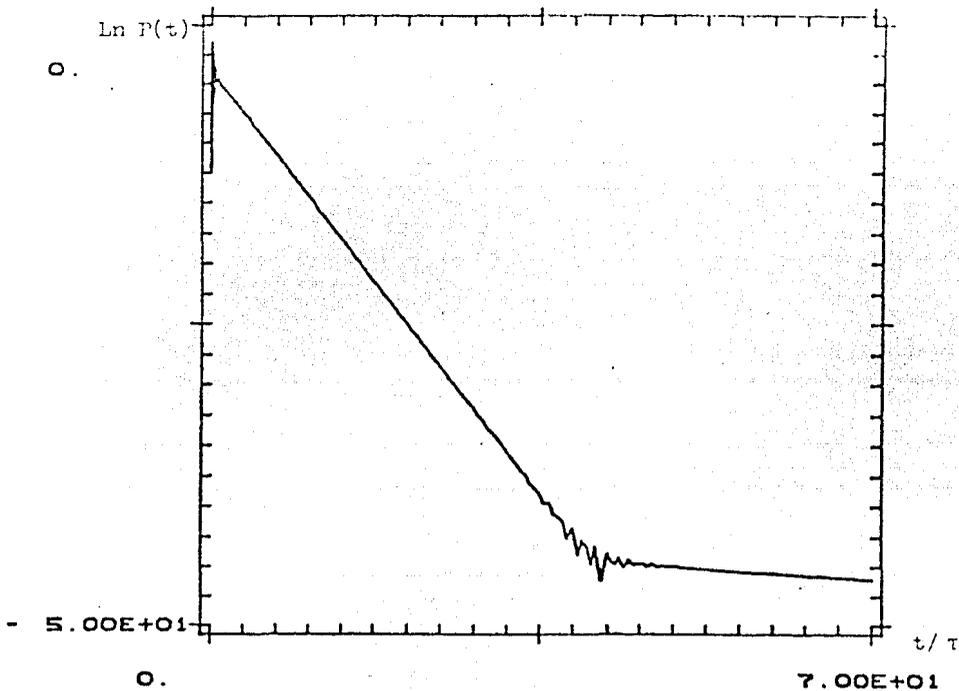
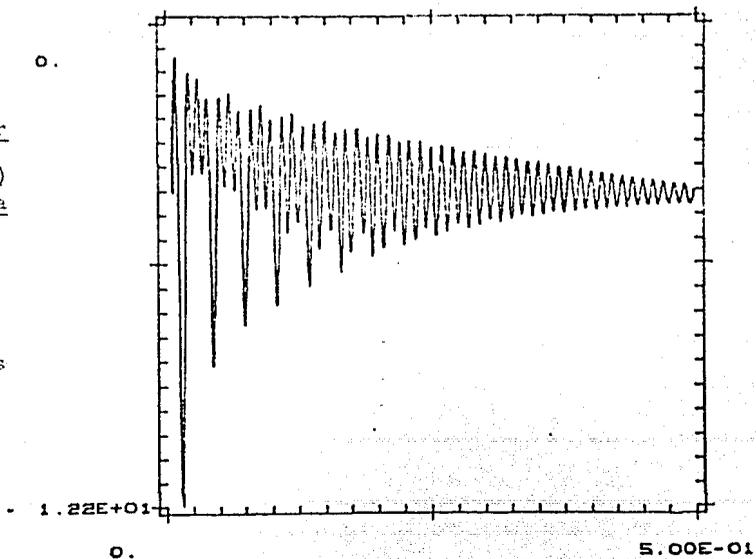


FIGURA V.8.A. Se muestra en una gráfica semilogarítmica el comportamiento de la probabilidad $P(t)$ para el primer caso, amplificando la región para tiempos cortos.

Ambas gráficas se encuentran en unidades de vidas medias para el tiempo.



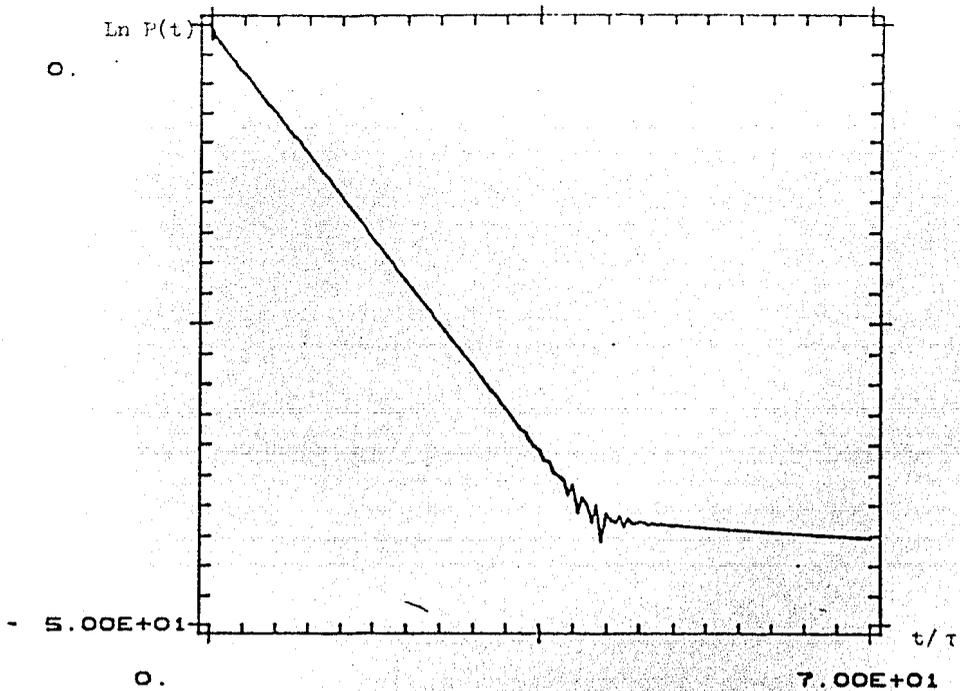
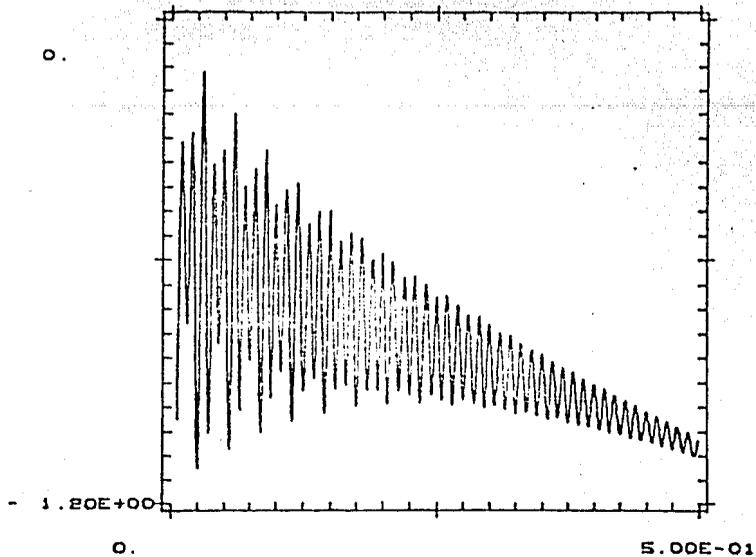


FIGURA V.8.B. Se muestra en una gráfica semilogarítmica el comportamiento de la probabilidad $P(t)$ para el segundo caso, amplificando la región para tiempos cortos.

Ambas gráficas se encuentran en unidades de vidas medias para el tiempo.



C). Análisis y Discusión de Resultados.

Para analizar el comportamiento de la probabilidad $P(t)$ se dividió el intervalo temporal en cinco regiones diferentes, que se discutirán por separado. Las tablas correspondientes se muestran en el APENDICE E.

Región I. Tiempos cortos : $0 \leq t < T_1$

En esta región, la amplitud de probabilidad debe comportarse como :

$$A(t) \approx 1 + \frac{2}{\sqrt{\pi i}} \operatorname{Im} \sum_n c_n \bar{c}_n k_n t^{1/2}$$

de donde:

$$\operatorname{Re} A(t) = 1 - \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \operatorname{Im} \sum_n c_n \bar{c}_n k_n t^{1/2} \quad (\text{V.14.A})$$

y

$$\operatorname{Im} A(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \operatorname{Im} \sum_n c_n \bar{c}_n k_n t^{1/2} \quad (\text{V.14.B})$$

Para analizar esta región se hizo una regresión lineal ajustando a una recta los puntos:

$$\operatorname{Ln}\{\operatorname{Im} A(t)\} = \operatorname{Ln}\left\{\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\pi}} \operatorname{Im} \sum_n c_n \bar{c}_n k_n\right\} + \frac{1}{2} \operatorname{Ln} t$$

obteniendo:

```

* * * * *
*  CALCULO TEORICO DE LOS PARAMETROS PARA TIEMPOS CORTOS
*  SIN TERMINO EXPONENCIAL
* * * * *
*  COEFICIENTE A = -.453964E+01
*  POTENCIA B = 0.5
* * * * *
*  AJUSTE DE LOS PUNTOS
*  A = -.464017E+01
*  B = 0.50
*  COEFICIENTE DE CORRELACION = .9999959
* * * * *

```

donde $T_1 \approx 10^{-1} \tau$. La aproximación a un polo nunca es válida en esta región, debido a que es necesaria la convergencia de $\sum \{c_n \bar{c}_n / k_n\} = 0$ para anular el término $t^{-1/2}$ (c.f. CAPITULO IV. sección 2.A).

Región II. Interferencia exponencial: $T_1 < t < T_2$

Esta región se caracteriza por las oscilaciones (amplificadas en las FIGURAS V.8) que son más pronunciadas cuando el estado inicial se encuentra más localizado.

Se calculan las cantidades:

$$A_1(t) = \sum_n c_n \bar{c}_n e^{-ik_n^2 t}$$

y
$$A_2(t) = c_1 c_1 e^{-ik_1^2 t}$$

obteniendo que $A(t) \equiv A_1(t) \neq A_2(t)$. El término del decaimiento no exponencial es despreciable para esta región que se debe exclusivamente a una interferencia de exponenciales, para la cual nunca es válida la aproximación a un polo.

Se obtuvo que $T_2 \approx 0.35\tau$

Región III. Decaimiento exponencial: $T_2 < t < T_3$

En esta región, la probabilidad decae exponencialmente, como puede observarse de inmediato en las FIGURAS (V.8):

$$P(t) = \|c_1 \bar{c}_1\|^2 e^{-\Gamma_1 t}$$

Para analizarla, se hizo una regresión para ajustar la recta teórica:

$$\ln P(t) = 2 \ln \|c_1 \bar{c}_1\| - \Gamma_1 t$$

donde conviene tomar el tiempo en unidades de vida medias, obteniendo:

```

* * * * *
*  CALCULO TEORICO DE LOS PARAMETROS EN LA REGION EXPONENCIAL
*  APROXIMADO AL PRIMER POLO
*
*  COEFICIENTE A = -.399441E+01
*  EXPONENTE B = -1.0
* * * * *
*  AJUSTE DE LOS PUNTOS
*
*  A = -.400455E+01
*  B = -1.00
*  COEFICIENTE DE CORELACION = 0.999995
* * * * *

```

```

* * * * *
*  CALCULO TEORICO DE LOS PARAMETROS EN LA REGION EXPONENCIAL  *
*                APROXIMADO AL PRIMER POLO                    *
* * * * *
*  COEFICIENTE A = -.557295E+00                               *
*  EXPONENTE B = -1.0                                         *
* * * * *
*                AJUSTE DE LOS PUNTOS                          *
* * * * *
*  A = -.557956E+00                                           *
*  B = -1.00                                                  *
*  COEFICIENTE DE CORELACION = 1.000000                      *
* * * * *

```

Es decir, que el decaimiento exponencial está gobernado solamente por la contribución del primer polo, estimando $T_3 \approx 35\tau$

Región IV. Interferencia: $T_3 < t < T_4$

Es la única región donde compite el decaimiento exponencial y el no exponencial.

Para analizar la contribución dominante del término no exponencial se obtuvo la cantidad $A_3(t)$ aproximada al primer polo, que reproduce la amplitud $A(t)$ solamente para el caso de la gaussiana ancha. Cuando el estado inicial está muy localizado, sin embargo, deben tomarse todos los polos para el término no exponencial.

Para analizar esta región se hicieron diagramas complejos de la amplitud $A(t)$ aproximando a un polo para el caso de la gaussiana ancha. Los diagramas muestran la amplitud, el decaimiento exponencial $E(t)$ y los términos del no exponencial debidos al polo en el IV cuadrante, $NE_1(t)$ y al simétrico, $NE_2(t)$:

$$A(t) = E(t) + NE_1(t) + NE_2(t) \equiv$$

$$\cong c_1 c_1 e^{-ik_1^2 t} + \frac{\sqrt{i}}{4\sqrt{\pi}} \left\{ \left(\frac{c_1 c_1}{k_1} \right) U(1, 1/2; -ik_1^2 t) - \left(\frac{c_1 c_1}{k_1} \right)^* U(1, 1/2; -ik_1^2 * t) \right\}$$

Los puntos consecutivos corresponden a tiempos consecutivos igualmente espaciados que se interpolan para dar una imagen sobre la trayectoria que sigue la amplitud a través del tiempo. Esta trayectoria describe una espiral cuyo radio disminuye exponencialmente alrededor de un punto en el III cuadrante sobre la línea a 45° (FIGURA V.9). La contribución del término no exponencial resulta de la combinación $NE_1(t) + NE_2(t)$. Aunque estos términos son del orden de 10^{-6} (FIGURAS V.10.C y V.10.D), la suma corresponde a puntos en el III cuadrante del orden de 10^{-10} que se acercan asintóticamente a 0 como $t^{-3/2}$. Cuando el término exponencial es de este orden la trayectoria de la amplitud ya está totalmente contenida en el III cuadrante (FIGURAS V.10.A y V.10.B) y el centro de las espirales tiende al origen por la línea a 45° , hasta que domina el término no exponencial, cuando el radio de dichas espirales es despreciable.

Esta región es relativamente pequeña, dado que $T_4 = 45\pi$ es muy cercano a T_3 .

Los diagramas complejos para $A(t)$ y $E(t)$ se presentan primero con la interpolación entre los puntos consecutivos y a continuación sin la interpolación, de manera que pueda verse con mayor claridad el cambio en la trayectoria de $A(t)$ al pasar de la región IV a la V.

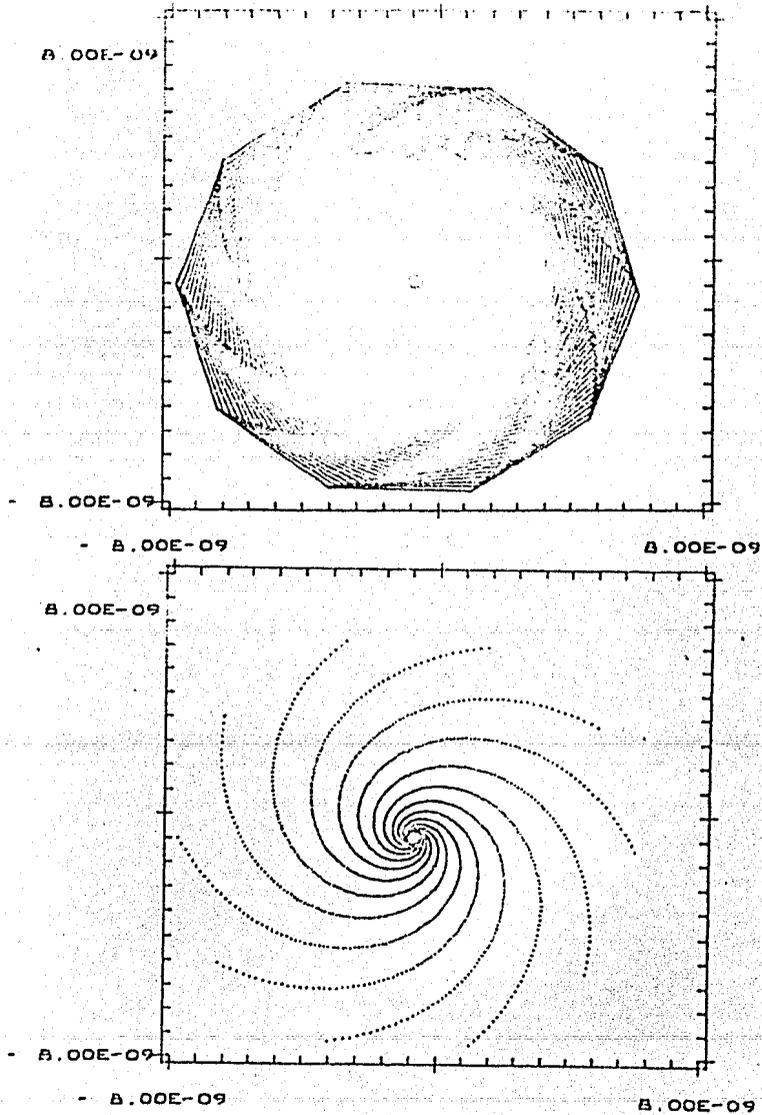


FIGURA V.9. Se muestra la trayectoria de la amplitud $A(t)$, en el sentido de las manecillas del reloj, para $38\pi < t < 42\pi$, donde el centro se encuentra en el III cuadrante.

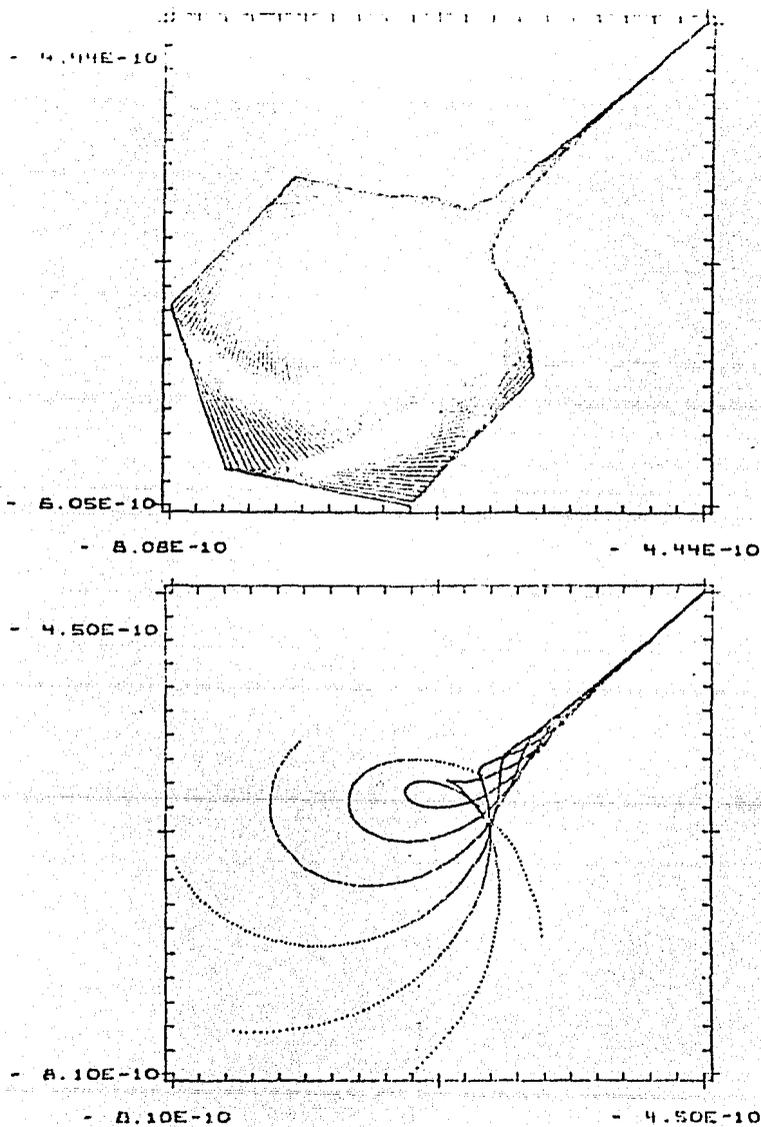
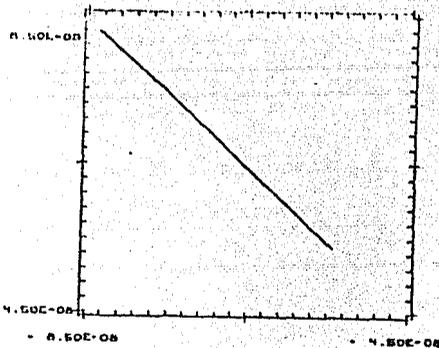
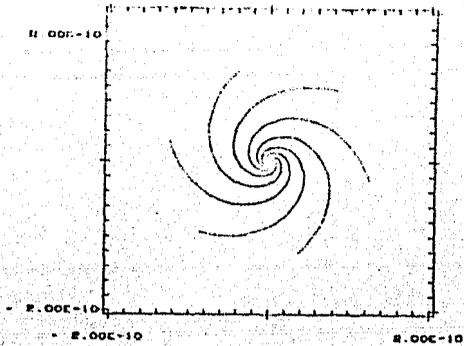
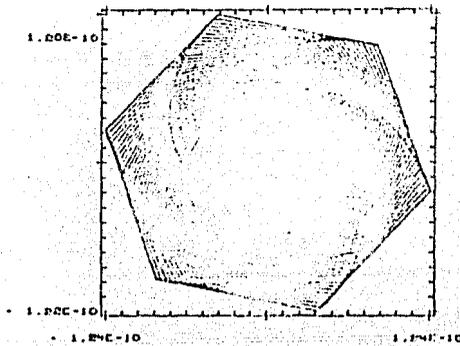


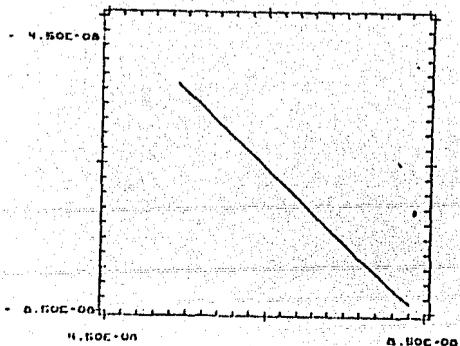
FIGURA V.10. Diagramas complejos en el intervalo $42\tau < t < 58\tau$.
 (A) Trayectoria de la amplitud, en el sentido de las manecillas del reloj, al pasar de la región IV a la V.



Arriba (B) se muestra la trayectoria (izquierda) y los puntos consecutivos en el tiempo (derecha) del término exponencial, $E(t)$, en el sentido de las manecillas del reloj.

En medio (C) el diagrama para el término debido al polo k_1 , $NE_1(t)$ y abajo (D) el debido al polo simétrico,

$-k_2^*$, $NE_2(t)$. Ambos términos se mueven hacia el origen a una velocidad proporcional a $t^{-3/2}$, la suma de ambos términos se encuentra en el tercer cuadrante, causa el desplazamiento del centro de las espirales en $A(t)$ y domina su comportamiento al entrar en la región V.



Región V. Tiempos Largos: $T_4 < t$

En esta zona la relación (IV.16) debe ser válida, de manera que:

$$P(t) \approx \frac{1}{4\pi} \left\| \sum_n \operatorname{Im} \left\{ \frac{c_n \bar{c}_n}{k_n^3} \right\} \right\|^2 t^{-3}$$

La aproximación al primer polo sólo reprodujo el valor de la probabilidad para la gaussiana ancha.

Se ajustaron los puntos en ambos casos a la relación teórica:

$$\ln P(t) = \ln \left\{ \frac{1}{4\pi} \left\| \sum_n c_n \bar{c}_n / k_n^3 \right\|^2 \right\} - 3 \ln t$$

obteniendo:

```

* * * * *
*   CALCULO TEORICO DE LOS PARAMETROS PARA TIEMPOS LARGOS   *
*   COEFICIENTE A = -.240343E+02                             *
*   POTENCIA B = -3.0                                         *
* * * * *
*   AJUSTE DE LOS PUNTOS                                     *
*   A = -.240310E+02                                         *
*   B = -3.00                                                *
*   COEFICIENTE DE CORELACION = 1.000000                   *
* * * * *

```

```

* * * * *
*   CALCULO TEORICO DE LOS PARAMETROS PARA TIEMPOS LARGOS   *
*   COEFICIENTE A = -.206668E+02                             *
*   POTENCIA B = -3.0                                         *
* * * * *
*   AJUSTE DE LOS PUNTOS                                     *
*   A = -.206666E+02                                         *
*   B = -3.00                                                *
*   COEFICIENTE DE CORELACION = 1.000000                   *
* * * * *

```

$$y \quad \ln P(t) = \ln \left\{ \frac{1}{4\pi} \left\| c_1 c_1 / k_1^3 \right\|^2 \right\} - 3 \ln t$$

para la gaussiana ancha, que resultó:

```

* * * * *
*   CALCULO TEORICO DE LOS PARAMETROS PARA TIEMPOS LARGOS   *
*   APROXIMADO AL PRIMER POLO                               *
* * * * *
*   COEFICIENTE A = -.208306E+02                             *
*   POTENCIA B = -3.0                                         *
* * * * *
*   AJUSTE DE LOS PUNTOS                                     *
*   A = -.208293E+02                                         *
*   B = -3.00                                                *
*   COEFICIENTE DE CORELACION = 1.000000                   *
* * * * *

```

En los dos casos estudiados, como puede verse en las gráficas (V.8), los parámetros T_i son mayores cuando el estado inicial se encuentra muy localizado.

Del análisis anterior, se deduce que las regiones I y II nunca pueden ser reproducidas en la aproximación a un polo, mientras que el decaimiento exponencial siempre se debe a la contribución del polo asociado con P_1 (el polo más cercano al eje real).

La aproximación a un polo es válida para las regiones de tiempos largos IV y V sólo cuando se prepara al estado inicial de manera que el coeficiente $c_n \bar{c}_n$ correspondiente se aproxima a la unidad de manera que el peso de los demás coeficientes es despreciable. Por esta razón (c.f. FIGURAS V.6) esta aproximación no es válida cuando el estado inicial está muy localizado (gaussiana delgada).

VI. CONCLUSIONES

El resultado más importante del CAPITULO IV es la posibilidad de expresar la amplitud $A(t)$ completamente discretizada, dada por (IV.7).

La representación de estados resonantes no sólo proporciona una explicación a fenómenos como el efecto túnel, que surge naturalmente con la utilización de energías complejas; además, es la que permite obtener mayor información sobre la contribución del continuo de energías, como se expone en el CAPITULO III, al escoger un corte ramal más conveniente en el plano de energías, que permite dar la expresión para la amplitud $A(t)$ donde aparece la contribución de cada término:

$$A(t) = \sum_n^{\infty} A_n(t)$$

$$\text{donde } A_n(t) = c_n \bar{c}_n \left\{ \delta_{n\ell} \delta_{n\ell} e^{-ik_n^2 t} + \frac{\sqrt{i}}{4\sqrt{\pi}} \frac{t^{-1/2}}{k_n} U(1, i/2; -ik_n^2 t) \right\}$$

Este resultado es posible de acuerdo con las restricciones del modelo; es decir, cuando el potencial es de alcance finito (CAPITULO III) y cuando se prepara al estado inicial en la región interna de dicho potencial (CAPITULO IV).

Esta expresión puede además reproducir el decaimiento del sistema para tiempos muy cortos o tiempos muy largos, como se expuso en el CAPITULO IV, además de reproducir el decaimiento exponencial para intervalos temporales intermedios, comportamiento que ha sido ya estudiado. Las desviaciones a este decaimiento quedan determinadas por el comportamiento de la función hipergeométrica confluyente $U(1, 1/2; z)$ y contribuyen a éste todos los polos de la función de Green, mientras que sólo los polos ligados y resonantes aparecen en el término exponencial, provocando éstos el decaimiento exponencial.

A partir del comportamiento de $A(t)$ para tiempos cortos, es inmediato verificar que:

$$\lim_{t \rightarrow 0} \frac{d}{dt} P(t) = +\infty.$$

Esta condición depende fuertemente de la preparación del estado

inicial. Cuando el estado inicial es una solución de la ecuación de Schrödinger, la derivada de la probabilidad en $t=0$ se anula. En el modelo, sin embargo, el estado inicial no es solución de la ecuación de Schrödinger dado que se encuentra totalmente contenido en la región interna.

En situaciones reales puede prepararse experimentalmente el estado inicial y generalmente no es una solución de dicha ecuación. La generalización a funciones de estado inicial que no se anulen en la frontera requiere de modificación en el tratamiento planteado en el CAPITULO IV, debido a que la función de Green no cumple con la condición (III.21).

A lo largo de la investigación realizada se trabajó siempre con la amplitud de decaimiento para momento angular $\ell = 0$, como se expuso en el CAPITULO II. Para cualquier otro valor del momento angular, puede demostrarse a partir de la ecuación diferencial que cumple la función de Green, que en (V.2) aparece el factor $k^{2\ell}$. La integral (IV.6) es entonces proporcional a $t^{-\ell-1/2}$ y para tiempos largos, dado que la función hipergeométrica es inversamente proporcional al tiempo, la contribución principal al decaimiento en la expresión (II.9) para $A(t)$ es precisamente $t^{-3/2}$, que corresponde a momento angular $\ell = 0$. La comparación entre las expresiones (II.19) y (IV.15) para tiempos largos sugiere

una evaluación de los coeficientes de la potencia inversa, que provoca el mismo tipo de comportamiento para el caso de la partícula libre que para un potencial $V(r)$. La comparación entre estos términos, sin embargo, no puede llevarse a cabo analíticamente dado que (IV.15) es una expresión discretizada sobre los diferentes polos de la función de Green, que no existen para la partícula libre. Por esta razón sería interesante evaluar numéricamente ambos comportamientos para una misma función de estado inicial que permitiera comparar ambas situaciones.

Los resultados más importantes del ejemplo expuesto se discutirán a continuación.

La aproximación de la amplitud $A(t)$ a un sólo término, a menudo utilizada para estudiar el decaimiento, sólo es válida a partir del comportamiento exponencial dependiendo del estado inicial $\psi_0(r)$ y nunca puede hacerse para tiempos cortos. Sólo en los casos en que el coeficiente $c_n \bar{c}_n \approx 1$ (coeficiente que contiene la información sobre el potencial) se reproduce el comportamiento de $A(t)$ para las regiones III, IV y V por la función $A_n(t) + A_{-n}(t)$, donde deben ser incluidos también los polos simétricos para poder reproducir la desviación al decaimiento exponencial.

Asímismo, los parámetros T_j que dividen las regiones varían dependiendo de la distribución de los coeficientes $\bar{c}_n \bar{c}_n$; es decir, de la preparación del estado inicial.

La distribución de $\text{Re } c_n \bar{c}_n$ sugiere que esta cantidad puede ser una medida del traslape entre la función inicial $\psi_0(r)$ y la correspondiente función de estado resonante $u_n(r)$. En todos los casos analizados, la parte imaginaria de estos coeficientes resultó casi despreciable, por lo que puede resultar interesante llevar a cabo un estudio para explicar la interpretación física de estos coeficientes.

En el tratamiento y resultados del ejemplo, aparecen los términos debidos a los polos resonantes en combinación con los simétricos. Este hecho sugiere que se explore un tipo de potencial donde se rompa esta simetría para estudiar el efecto de estos términos por separado, como lo son los potenciales con términos absorbivos, de la forma $V(r)=U(r)-iW(r)$, para los cuales $k_{-n} \neq -k_n^*$ pero los resultados generales (CAPITULO III) en el marco de la teoría de estados resonantes siguen teniendo validez.

A pesar de que la ecuación (IV.7) es válida estrictamente en el marco del modelo presentado, el tratamiento computacional desarrollado para el ejemplo (ver APENDICE E) presenta la ventaja de evaluar la probabilidad a partir de dos conjuntos de datos solamente (polos k_n y coeficientes $c_n \bar{c}_n$). Esta simplicidad permite introdu-

cir valores experimentales de Γ y E para utilizar la aproximación a un polo (suponiendo el coeficiente $c_1\bar{c}_1 \approx 1$) y evaluar la probabilidad, obteniendo una estimación de los parámetros T_3 y T_4 . Con ello, pueden hallarse condiciones experimentales concretas bajo las cuales este modelo prediga que la desviación al decaimiento exponencial es observable, de manera que pueda ser contrastado con el experimento.

APENDICE A.

Separación de Variables Radiales
y Angulares para $G^+(\bar{r}, \bar{r}'; k)$.

La ecuación diferencial que cumple $G^+(\bar{r}, \bar{r}'; k)$ es:

$$\{\hat{H} - E\} G^+(\bar{r}, \bar{r}'; k) = \delta(\bar{r} - \bar{r}') \quad (\text{A.1})$$

donde el hamiltoniano, en el caso de un potencial central $V(r)$ es:

$$\hat{H} = -\frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \hat{L}^2 + V(r)$$

Cuando $\bar{r} \neq \bar{r}'$, dado que el segundo miembro de (A.1) se anula, tendremos que, respecto a la variable \bar{r} , la función $G^+(\bar{r}, \bar{r}'; k)$ debe ser ei genfunción también de los operadores de momento angular \hat{L}^2 y \hat{L}_z . Como los armónicos esféricos $Y_{\ell}^m(\theta, \phi)$, $\ell = 0, 1, 2, \dots$ y $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \ell$ son una base ortonormal en las variables angulares, podemos escribir:

$$G_{\ell}^{+}(\bar{r}, \bar{r}'; k) = \frac{g_{\ell}(r, r'; k)}{r} Y_{\ell}^m(\theta, \phi) f(\bar{r}') \quad (\text{A.2})$$

donde la dependencia angular de $\bar{r} = (r, \theta, \phi)$ está contenida en $Y_{\ell}^m(\theta, \phi)$ y la función $f(\bar{r}')$ aún debe determinarse. Como se cumple:

$$\begin{aligned} \{\hat{H} - k\} G_{\ell}^{+}(\bar{r}, \bar{r}'; k) &= 0 \quad \text{para } \bar{r} \neq \bar{r}' \\ \{\hat{L}^2 - \ell(\ell+1)\} G_{\ell}^{+}(\bar{r}, \bar{r}'; k) &= 0 \quad \text{para } \bar{r} \neq \bar{r}' \end{aligned}$$

junto con (A.1), tendremos que, para cada valor fijo de ℓ , dado que \hat{H} es un potencial separable:

$$\left\{ \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + V(r) - k_{\ell}^2 \right\} g_{\ell}(r, r'; k) = \delta(r - r')$$

$$g_{\ell}(r, r'; k) = 0 \quad \text{para } r < r'$$

Y además, $G_{\ell}^{+}(\bar{r}, \bar{r}'; k) = G_{\ell}^{+}(\bar{r}', \bar{r}; k)$ por lo cual la propiedad de simetría también es satisfecha por la función $G_{\ell}(r, r'; k)$.

Es decir, que la función $G_{\ell}(r, r'; k)$ es la función de Green en una di mensión asociada a la función radial $\psi_{\ell}(r)$ y al hamiltoniano H_{ℓ} , don de;

$$H_{\ell} \equiv -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\ell(\ell+1)}{r} + V(r)$$

$$\{H_{\ell} - E_{\ell}\} \psi_{\ell}(r) = 0$$

$$\psi_{\ell}(0) = 0$$

y, en unidades de $\hbar^2 = 2m = 1$, $E_{\ell} = k_{\ell}^2$.

En virtud de (A.2) y las propiedades de $Y_{\ell}^m(\theta, \phi)$, podemos escribir:

$$G(\bar{r}, \bar{r}'; k) = \sum_{\ell} \sum_{m=-\ell}^{+\ell} \frac{g_{\ell}(r, r'; k)}{r} Y_{\ell}^m(\theta, \phi) f(\bar{r}')$$

donde $f(\bar{r}')$ es función sólo de (r', θ', ϕ') . Utilizando la simetría que cumple la función de Green tendremos que:

$$\sum_{\ell} \sum_{m=-\ell}^{+\ell} f(\bar{r}') \frac{G_{\ell}(r, r'; k)}{r} Y_{\ell}^m(\theta, \phi) = \sum_{\ell'} \sum_{m'=-\ell'}^{+\ell'} f(\bar{r}') \frac{G_{\ell'}(r, r'; k)}{r'} Y_{\ell'}^{m'}(\theta', \phi')$$

En virtud de que $f(\bar{r})$ es sólo función de \bar{r} y no de \bar{r}' , comparando - las ecuaciones anteriores se tendrá que:

$$\begin{aligned} \sum_{\ell} \sum_{m=-\ell}^{+\ell} G_{\ell}(r, r'; k) \frac{Y_{\ell}^m(\theta, \phi)}{r} f(\bar{r}') &= \\ &= \sum_{\ell} \sum_{m'=-\ell}^{+\ell} G_{\ell}(r, r'; k) \frac{Y_{\ell}^{m'}(\theta', \phi')}{r'} f(\bar{r}) \end{aligned}$$

donde se ha identificado $\ell = \ell'$. Como en la sumatoria m debe tomar todos los valores entre $-\ell$ y $+\ell$, es fácil identificar que, para cada ℓ :

$$f(\bar{r}') = \sum_{m'=-\ell}^{+\ell} \frac{1}{r'} Y_{\ell}^{m'}(\theta', \phi')$$

Para hallar el valor de m' que aparece en cada término, recordamos - que la función de Green es una función que depende de la posición relativa que tienen \bar{r} y \bar{r}' y por lo tanto debe ser función tanto de las magnitudes r y r' como del ángulo que forman ambos vectores; es decir, debe ser función del producto $(\bar{r} \cdot \bar{r}')$. El teorema de adición de los - armónicos esféricos relaciona los polinomios de Légendre con la base $Y_{\ell}^m(\theta, \phi)$ por medio de la expresión:

$$\left(\frac{2\ell+1}{4\pi}\right) P_\ell(\bar{r}\cdot\bar{r}') = \sum_{m=-\ell}^{+\ell} Y_\ell^m(\theta,\phi) Y_\ell^{m*}(\theta',\phi')$$

o bien, recordando que $Y_\ell^{m*}(\theta,\phi) = Y_\ell^{-m}(\theta,\phi)$:

$$\left(\frac{2\ell+1}{4\pi}\right) P_\ell(\bar{r}\cdot\bar{r}') = \sum_{m=-\ell}^{+\ell} Y_\ell^m(\theta,\phi) Y_\ell^{-m}(\theta',\phi')$$

La expresión obtenida para $f(\bar{r}')$ es compatible con la dependencia de la función de Green en r, r' y $(\bar{r}\cdot\bar{r}')$ cuando se establece $m' = -m$. De esta manera, se obtiene la relación deseada entre la función de Green en tres dimensiones y la función de Green radial:

$$G^+(\bar{r}, \bar{r}'; k) = \sum_{\ell} \sum_{m=-\ell}^{+\ell} \frac{G_\ell(r, r'; k)}{rr'} Y_\ell^m(\theta, \phi) Y_\ell^{m*}(\theta', \phi')$$

que puede expresarse alternativamente en términos de los polinomios de Légendre $P_\ell(\bar{r}\cdot\bar{r}')$.

APENDICE B.

Relación entre las Funciones
de Green Dependiente e
Independiente del Tiempo.

La relación entre las funciones de Green dependiente e independiente del tiempo se puede obtener a través del uso de transformaciones de Laplace.

Recordemos que las expresiones para la transformada de Laplace de una función, $L\{F(t)\} = f(s)$ y su inversa, $F(t) = L^{-1}\{f(s)\}$ están dadas por:

$$L\{F(t)\} = \int_0^{\infty} F(t)e^{-st} dt = f(s) \quad (\text{B.1})$$

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

donde el número $\gamma > 0$ debe ser tal que todas las singularidades del integrando de (B.2) en el plano complejo S deben quedar hacia la izquierda del contorno de integración.

Sin importar cuáles sean los argumentos espaciales de la función de Green (vectores \vec{r} , \vec{r}' o magnitudes r, r' para el caso radial), que denotaremos por ζ y ζ' , las ecuaciones diferenciales que cumplen las funciones de Green son:

$$\left\{ i \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H} \right\} g(\zeta, \zeta'; t) = i \delta(\zeta - \zeta') \delta(t), \quad t > 0 \quad (\text{B.3})$$

$$\text{y} \quad \{ \hat{H} - E \} G(\zeta, \zeta'; E) = \delta(\zeta - \zeta') \quad (\text{B.4})$$

donde \hat{H} es de la forma $\hat{H} = -\nabla_{\zeta}^2 + V(\|\zeta\|)$ en el caso de un potencial central. Tomando la transformada de Laplace de la ecuación (B.3) obtenemos, llamando:

$$\tilde{g}(\zeta, \zeta'; s) \equiv L\{g(\zeta, \zeta'; t)\} \quad \text{que:}$$

$$\tilde{H}g(\zeta, \zeta'; s) + i\{s\tilde{g}(\zeta, \zeta'; s) - g(\zeta, \zeta'; 0)\} = 0$$

donde se han utilizado los resultados:

$$L\{\delta(t)\} = 0$$

$$\text{y} \quad L\left\{ \frac{\partial}{\partial t} F(t) \right\} = sF(s) - F(0).$$

Ahora bien, cuando $t = 0$, en general, $g(\zeta, \zeta'; 0) = \delta(\zeta - \zeta')$, por lo cual la ecuación diferencial que cumple $\tilde{g}(\zeta, \zeta'; s)$ es:

$$-\hat{H} \tilde{g}(\zeta, \zeta'; s) + is\tilde{g}(\zeta, \zeta'; s) = i\delta(\zeta - \zeta')$$

o bien:

$$\{\hat{H} - is\}(i\tilde{g}(\zeta, \zeta'; s)) = \delta(\zeta - \zeta') \quad (B.5)$$

Definiendo ahora la variable $E = is$ por medio de una rotación, así como la función $\chi(\zeta, \zeta'; E) \equiv i\tilde{g}(\zeta, \zeta'; -iE)$ obtenemos la ecuación diferencial:

$$\{\hat{H} - E\}\chi(\zeta, \zeta'; E) = \delta(\zeta - \zeta')$$

Comparando esta ecuación con la ecuación (B.4) se obtiene:

$$\begin{aligned} g(\zeta, \zeta'; t) &= L^{-1}\{\tilde{g}(\zeta, \zeta'; s)\} = \\ &= \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma - i\infty}^{\gamma + i\infty} \tilde{g}(\zeta, \zeta'; s) e^{st} ds = \\ &= \frac{1}{2\pi i} \int_{\infty + i\gamma}^{\infty - i\gamma} G(\zeta, \zeta'; E) e^{-iEt} dE \end{aligned}$$

donde ahora el contorno de integración debe quedar por arriba de los polos del integrando (ver FIGURA A.1)

Recordando ahora que $E = k^2$, la función de Green como función del número de onda k cumple la ecuación diferencial:

$$\{\hat{H} - k^2\}G(\zeta, \zeta'; k) = \delta(\zeta - \zeta')$$

y por medio de esta transformación se obtiene finalmente la relación entre las funciones de Green como:

$$g(\zeta, \zeta'; t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} G(\zeta, \zeta'; k) e^{-ik^2 t} 2k dk \quad (\text{B.6})$$

donde el contorno de integración se obtiene a partir de la transformación $E = k^2$, como lo muestra la FIGURA B.1

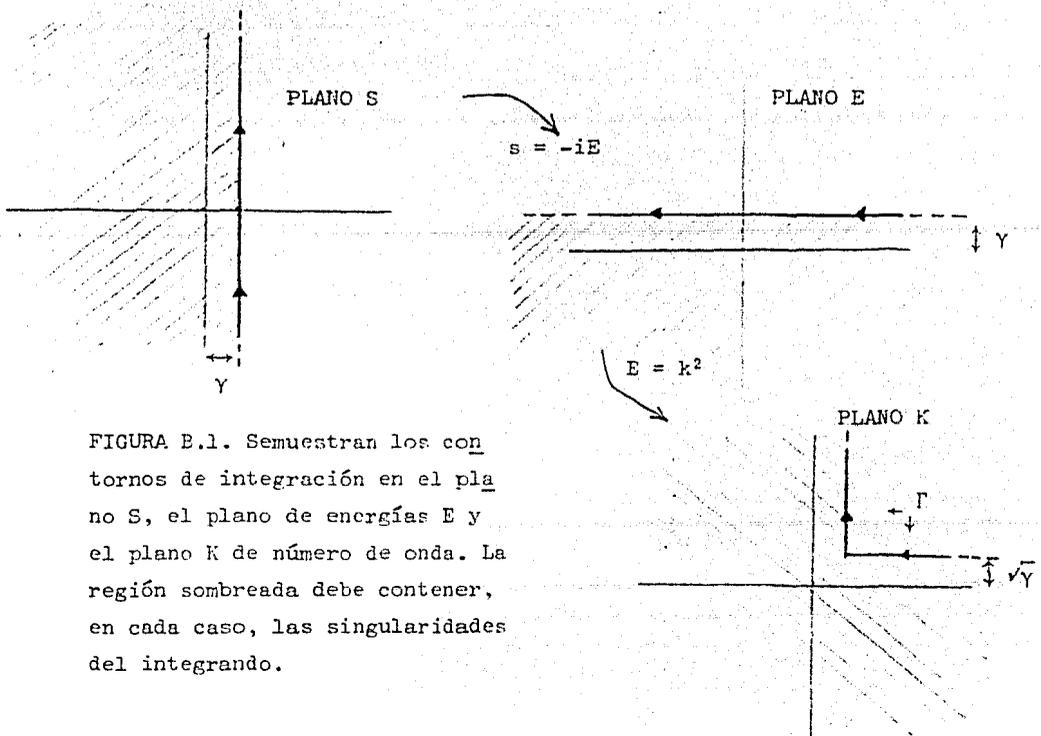


FIGURA B.1. Semuestran los con-
tornos de integración en el pla-
no S, el plano de energías E y
el plano K de número de onda. La
región sombreada debe contener,
en cada caso, las singularidades
del integrando.

Debido a la transformación $E = k^2$, un semiplano en la variable compleja k se mapea en todo el plano E y el otro semiplano vuelve a abarcar el plano de energías. La función de Green independiente del tiempo $G(\zeta, \zeta'; k)$ no es en general función de k^2 , es decir, de la energía, en vista de lo cual debe introducirse una manera de trabajar en el plano de energías. El concepto de las *hojas de Riemman* permite distinguir cuál semiplano en k se mapea en la *primera* hoja de Riemman y cuál en la *segunda*. Generalmente (ver FIGURA B.2) se toma como corte ramal el eje real positivo del plano de energías, definiendo así la I y la II hojas de Riemman, que han sido denominadas como la "*hoja física*" y la "*hoja no física*" respectivamente.

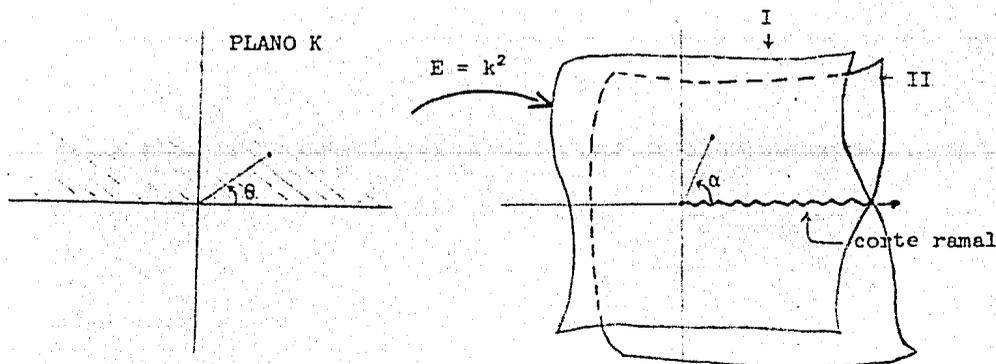


FIGURA B.2. Al dividir el plano k en mitad superior e inferior, los puntos cuyo argumento $0 \leq \theta < \pi$ (sombreados en la figura) abarcan bajo la transformación cuadrática, $0 < \alpha < 2\pi$ en el plano de energías. El corte ramal en el plano E que separa la hoja física de la no física es entonces el eje real positivo. Los puntos cuyo argumento $\alpha \in [2\pi, 4\pi)$ yacen sobre la II hoja de Riemman u hoja no física.

Según la distribución de los polos en el plano k (c.f. CAPITULO III, FIGURA III.2), al escoger este corte ramal sólo los polos correspondientes a los estados ligados se encuentran en la hoja física del plano de energías.

Otra manera de tomar la primera y la segunda hojas de Riemman ha sido desarrollada por G. García Calderón y R. E. Peierls, donde el corte ramal está en el eje imaginario negativo, como se muestra en la FIGURA B.3.

Cuando el corte ramal se encuentra en esta semieje los polos correspondientes a los estados resonantes (en el III cuadrante del plano k) son incluidos en la primera hoja de Riemman. Esta descripción es entonces más adecuada en el marco de la teoría de estados resonantes.

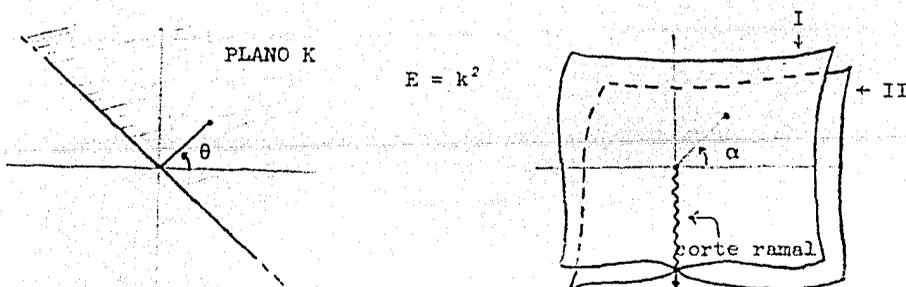


FIGURA B.3. El semiplano sombreado en k que abarca $-\pi/4 \leq \theta < 3\pi/4$ se mapea ahora en la primera hoja de Riemman del plano de energías, que comprende $-\pi/2 \leq \alpha < 3\pi/2$ bajo la transformación $E = k^2$. Los puntos cuyo argumento $\alpha \in [3\pi/2, \pi/2)$ caen en la segunda hoja de Riemman. El corte ramal está entonces en el semieje imaginario negativo.

APENDICE C.
Funciones Hipergeométricas Confluentes.

El nombre de función hipergeométrica fue acuñado por Wallis en 1655, refiriéndose a las series cuyo n -ésimo término es de la forma:

$$a(a + b)(a + 2b); \dots (a + (n - 1)b).$$

Kummer utiliza el término por primera vez en 1836 dándole su sentido moderno, que es adoptado también por Euler (Whittaker y Watson, 1952).

Las funciones hipergeométricas $F(a, c; b; z)$ cumplen la ecuación diferencial de Riemman. Cuando se efectúa el límite

$$\lim_{c \rightarrow \infty} F(a, c; b; z/c)$$

se obtiene la función hipergeométrica confluyente, denominada también degenerada (Gradshteyn y Ryzhik, 1965). El término

"confluente" se deriva de que la ecuación diferencial que cumplen estas funciones se obtiene a partir de la ecuación de -- Riemman por medio de la confluencia de dos de sus singularidades, obteniendo la ecuación diferencial:

$$\frac{d^2}{dz^2} u + \frac{d}{dz} u + \left\{ \frac{k}{z} + \frac{1/4 - m^2}{z^2} \right\} = 0 \quad (C.1)$$

Las soluciones de (C.1) son expresables en términos de la función hipergeométrica confluyente con parámetros $a = 1/2 \pm m - k$, $b = \pm 2m + 1$, que cumple con la ecuación diferencial

$$z \frac{d^2}{dz^2} F - (z-b) \frac{dF}{dz} - aF = 0 \quad (C.2)$$

que puede obtenerse a partir de (C.1), identificando $u = z^{1/2 \pm \mu} e^{-z} F$. Esta ecuación, conocida como la ecuación de Kummer, tiene una singularidad regular en $z = 0$ y una irregular en $z = \infty$.

La función hipergeométrica confluyente es una de las soluciones de (C.2). La otra solución independiente de la ecuación diferencial se expresa en términos de la anterior y es llamada función hipergeométrica confluyente de segunda clase.

Notación

Existen varias notaciones alternativas para las funciones hipergeométricas confluentes. Algunos autores utilizan la notación de Kummer

modificada por Barnes (Whittaker y Watson, 1952):

$${}_1F_1(a,b;z) \quad , \quad z^{-a} {}_2F_0(a,1+a-b;z)$$

La mayoría de los autores, sin embargo, convienen en utilizar la notación (Whittaker y Watson, 1952; Gradshteyn y Rizhik, 1965; Lebedev, 1972; Erdélyi *et.al.*, 1954):

$$\Phi(a,b;z) \quad , \quad \Psi(a,b;z)$$

En el presente trabajo se ha adoptado la notación más sencilla (Abramowitz, 1972):

$$M(a,b;z) \quad , \quad U(a,b;z)$$

para evitar confusión con otras funciones utilizadas en el texto.

Definiciones

La función $M(a,b;z)$ puede expresarse como una serie de la forma

$$M(a,b;z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(a)_k}{(b)_k} \frac{z^k}{k!} \quad (C.3)$$

$$\text{donde } (a)_k = a(a+1)\dots(a+k-1) = \frac{\Gamma(a+k)}{\Gamma(a)}$$

$M(a,b;z)$ es una de las soluciones de la ecuación (C.2). Otra solución de la ecuación diferencial está dada por $F = z^{1-b} M(1+a-b, 2-b; z)$, de manera que, para expresar la solución general de la ecuación (C.2) de la forma $F = AM + BU$, donde A y B

son dos constantes cualesquiera, se introduce la función:

$$U(a,b;z) = \frac{\pi}{\operatorname{sen} \pi b} \left\{ \frac{M(a,b;z)}{\Gamma(b)\Gamma(1+a-b)} - z^{1-b} \frac{M(a-b+1,2-b;z)}{\Gamma(a)\Gamma(2-b)} \right\} \quad (C.4)$$

Representaciones integrales

Además de las representaciones (C.3) y (C.4) para las funciones hipergeométricas confluentes, pueden darse diferentes representaciones integrales, ya sea integrando sobre una variable real (Gradshteyn y Ryzhik, 1956; Abramowitz y Stegun, 1972; Lebedev, 1977) o bien por medio de los contornos de integración de Barnes, integrando en el plano complejo S (Abramowitz y Stegun, 1972):

$$M(a,b;z) = \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(a)} \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} \frac{\Gamma(-s)\Gamma(a+s)}{\Gamma(b+s)} (-z)^s ds$$

donde $|\arg(-z)| < \pi/2$ y el contorno debe separar los polos de $\Gamma(-s)$ de los de $\Gamma(a+s)$.

$$U(a,b;z) = \frac{z^{-a}}{\Gamma(a)\Gamma(1+a-b)} \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} \Gamma(-s)\Gamma(a+s)\Gamma(1+a-b+s) z^{-s} ds$$

donde $|\arg z| < 3\pi/2$ y el contorno debe separar los polos de

$\Gamma(-s)$, $\Gamma(a+s)$ y $\Gamma(1+a-b+s)$.

Propiedades

Existen relaciones de recurrencia que expresan a $M(a,b;z)$ ($U(a,b;z)$) en términos de cualquier par de funciones $M(a+m,b+n;z)$ (o respectivamente $U(a+m,b+n;z)$), con m y n cualquier entero. Otras de las relaciones recursivas son:

$$z^{1-b}M(1+a-b, 2-b; z) = z^{1-b}e^z M(1-a, 2-b; z)$$

para $M(a,b;z)$, y:

$$U(a,b;z) = z^{1-b}U(1+a-b, 2-b; z)$$

Las derivadas de esas funciones pueden también expresarse en términos de ellas mismas.

Las funciones hipergeométricas confluentes han sido estudiadas ampliamente debido a la importancia que tienen. Estas funciones pueden relacionarse con muchas otras funciones especiales de acuerdo a los valores que tomen sus argumentos. En particular, es inmediato que, por (C.3):

$$M(a,a;z) = e^z \quad (C.5)$$

Las funciones hipergeométricas confluentes pueden relacionarse, entre otras, con las integrales de probabilidad, funciones de Bessel, polinomios de Hermite y de Laguerre, funciones cilíndricas y parabólicas, funciones de Whittaker, integrales exponenciales, funciones de error y función gamma incompleta. En particular, para estas dos últimas se tiene que:

$$M(1/2, 3/2; -z) = \frac{\sqrt{\pi}}{2z} e^{-z^2} \operatorname{Erf}(z)$$

$$U(1/2, 1/2; z) = e^{-z^2} \operatorname{Erfc}(z)$$

donde las funciones de error se han multiplicado por el factor $\sqrt{\pi}/2$. En la literatura, pueden encontrarse con este factor de normalización incorporado (Lebedev, 1977), por lo cual en las expresiones anteriores no aparece $\sqrt{\pi}/2$.

La función gamma incompleta puede expresarse en términos de la función hipergeométrica confluyente de segunda clase como:

$$\Gamma(a, z) = z^a e^{-z} U(1, 1+a; z)$$

o alternativamente:

$$\Gamma(a, z) = e^{-z} U(1-a, 1-a; z) \quad (\text{C.6})$$

Los comportamientos asintóticos de las funciones hipergeométricas confluentes para $z \rightarrow 0$ y $z \rightarrow \infty$ han sido ya estudiados. Cuando el argumento z es muy pequeño, usando (C.3) se obtiene que:

$$M(a, b; z) \approx 1 + \frac{a}{b} z + O(|z|^2) \quad (\text{C.7})$$

En particular, si $0 < b < 1$, por (C.3), (C.4) y (C.5), se tiene que:

$$U(a, b; z) \approx \frac{\pi}{\operatorname{sen} \pi b} \frac{1}{\Gamma(1+a-b)\Gamma(a)} \left(1 - \frac{\Gamma(1+a-b)}{\Gamma(2-b)} z^{1-b} + \frac{a}{b} z + (|z|^{2-b}) \right) \quad (\text{C.8})$$

Cuando $z \rightarrow \infty$, a partir de la expresión integral para $U(a,b;z)$ puede encontrarse la expresión (Lebedev, 1977; Abramowitz y Stegun, 1972):

$$U(a,b;z) \approx z^{-a} \left(\sum_{k=0}^n \frac{(a)_k (1+a-b)_k}{k!} (-z)^{-k} + O(|z|^{-n-1}) \right)$$

Evaluación de la integral en el plano z

La integral por evaluar,

$$I(t) = \int_0^{\infty} e^{-zt} \frac{\sqrt{z}}{z-k} dz$$

puede hallarse en términos de la función hipergeométrica confluente de segunda clase, utilizando la expresión 3.383(10) de Gradshteyn, Ryzhik; o equivalentemente la expresión 4.3(7) del *Bateman Manuscript Project*:

$$3.383(10): \int_0^{\infty} \frac{x^{\nu-1}}{x-\beta} e^{-\mu x} dx = \beta^{\nu-1} e^{\beta\mu} \Gamma(\nu) \Gamma(1-\nu, \beta\mu)$$

$$|\arg \beta| < \pi, \operatorname{Re} \mu > 0, \operatorname{Re} \nu > 0$$

$$4.3(7): \int_0^{\infty} \frac{t^{\nu}}{t+a} e^{-\rho t} dt = \Gamma(\nu+1) a^{\nu} e^{a\rho} \Gamma(-\nu, a\rho)$$

$$|\arg a| < \pi, \operatorname{Re} \rho > 0, \operatorname{Re} \nu > -1$$

que, utilizando la ecuación (C.6) y sustituyendo con los valores adecuados, da:

$$I(t) = t^{-1/2} \Gamma(3/2) U(1, 1/2; kt) \quad (C.9)$$

Dado que existe una relación entre $U(a, b; z)$ y $\text{Erfc}(\sqrt{z})$, puede expresarse el resultado también en términos de la función de error.

Tanto las gráficas como las tablas reportadas por Abramowitz (1972) son para $M(a, b; z)$ y no para $U(a, b; z)$. La dificultad para evaluar numéricamente esta última utilizando su expresión en series hace que sea más directo el cálculo de $I(t)$ numéricamente por medio de los métodos numéricos para evaluar la integral de Laguerre:

$$\int_0^{\infty} e^{-x} f(x) dx = \sum_{i=1}^n w_i f(x_i) + R_n$$

Los polinomios relacionados con esta expresión son los polinomios de Laguerre: las abscisas x_i corresponden al i -ésimo cero del polinomio $L_n(x)$ y los pesos están dados por

$$w_i = \frac{(n!)^2 x_i}{(n+1)^2 [L_{n+1}'(x_i)]^2}$$

Los valores para x_i y w_i pueden encontrarse en la tabla 25.9 de Abramowitz para diferentes valores de n .

APENDICE D.

Método del Punto Silla de Montar.

Cuando se quiere evaluar una integral del tipo:

$$I(t) = \int_C e^{t\phi(z)} h(z) dz \quad , t > 0 \quad (D.1)$$

donde $\phi(z)$ y $h(z)$ son funciones analíticas de la variable compleja z en la región donde se encuentra la trayectoria C , es posible encontrar un valor aproximado de la integral para valores muy grandes de t

El método del punto silla de montar se basa en tomar la mayor contribución a la integral donde la función $\text{Re}(\phi(z))$ tiene un máximo, para lo cual se debe encontrar la trayectoria C más conveniente para la evaluación de la integral. Esta trayectoria debe satisfacer las condiciones de Debye, a saber:

- a). $\text{Im}(\phi(z)) = \text{const.}$
- b). $\exists z_0 \in C$ tal que $\left. \frac{d}{dz} \phi(z) \right|_{z=z_0} = 0$.
- c). Se escoge la trayectoria que cumpla que $\text{Re}(\phi(z_0))$ sea un máximo local.

Las condiciones de Debye garantizan que no hay oscilaciones debidas al término exponencial del integrando, que la trayectoria entonces cumple la ecuación $\text{Im}(\phi(z)) = \text{Im}(\phi(z_0))$ para $z \in C$ y que la función integrando tiene un máximo en $z = z_0$ que se vuelve más pronunciado a medida que t aumenta, de manera que la contribución principal a la integral se encuentra en este valor de z . La aproximación es más exacta mientras mayor sea el valor de la variable $t > 0$.

El punto z_0 , o *punto silla de montar*, no es en general un máximo absoluto para funciones analíticas. Cerca de z_0 puede expresarse $\phi(z)$ en serie de Taylor como:

$$\phi(z) = \phi(z_0) + \frac{1}{2} (z-z_0)^2 \left. \frac{d^2}{dz^2} \phi(z) \right|_{z=z_0} + \dots \quad (\text{D.2})$$

Llamando ahora:

$$re^{i\theta} \equiv z - z_0 \quad \text{y} \quad \left. \frac{d^2}{dz^2} \phi(z) \right|_{z=z_0} \equiv Re^{i\phi} \quad \text{tendremos que:}$$

$$\operatorname{Re}(\phi(z) - \phi(z_0)) = r^2 R \cos(2\theta + \phi)$$

$$\operatorname{Im}(\phi(z) - \phi(z_0)) = r^2 R \operatorname{sen}(2\theta + \phi)$$

donde se ha cortado la serie (D.2) despreciando las potencias de $(z-z_0)$ mayores que 2.

Por la primera condición,

$$\operatorname{sen}(2\theta + \phi) = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \theta = -\frac{\phi}{2} + n \frac{\pi}{2} \quad (n = 0, 1, 2, \dots)$$

(D.3.A)

y por la definición de $re^{i\theta}$:

$$z = z_0 \pm re^{-i\phi/2} \quad \left\{ \begin{array}{l} n = 0 \text{ toma el signo } + \\ n = 2 \text{ toma el signo } - \end{array} \right.$$

$$z = z_0 \mp re^{i(-\phi/2 + \pi/2)} \quad \left\{ \begin{array}{l} n = 1 \text{ toma el signo } + \\ n = 3 \text{ toma el signo } - \end{array} \right.$$

Como ϕ es el argumento de la segunda derivada de $\phi(z)$ evaluada en $z = z_0$, las ecuaciones anteriores pueden determinarse obteniendo dos rectas con la característica $\operatorname{Im}\phi(z) = \text{const.}$ Estas rectas dividen las vecindades de z_0 en cuatro regiones donde, al

ternativamente:

$$\operatorname{Re}\phi(z) > \operatorname{Re}\phi(z_0)$$

y

$$\operatorname{Re}\phi(z) < \operatorname{Re}\phi(z_0)$$

Estas son las características de lo que se denomina punto silla de montar, para z_0 . Para evaluar $I(t)$, una vez que se escoge la trayectoria adecuada (que cumpla la tercera condición de Debye) se escribe $\phi(z)$ como:

$$\phi(z) = \phi(z_0) - \tau^2$$

donde la variable τ es real (dado que $\operatorname{Im}\phi(z) = \operatorname{Im}\phi(z_0)$). El signo negativo se debe a que $\operatorname{Re}\phi(z)$ tiene un máximo en z_0 cuando z está sobre la trayectoria escogida. Por (D.2) :

$$\tau^2 = -\frac{1}{2} (z-z_0)^2 \frac{d^2}{dz^2} \phi(z) \Big|_{z=z_0}$$

(despreciando los demás términos), de donde:

$$z - z_0 = \sqrt{2} \tau \left(\frac{d^2}{dz^2} \phi(z) \Big|_{z=z_0} \right)^{-1/2} e^{i\omega}, \text{ donde } \omega = \arg(z-z_0).$$

De esta forma, la integral es:

$$I(t) = e^{t\phi(z_0)} \int_C e^{-t\tau^2(z)} h(z) dz \quad (D.4)$$

Como puede verse de inmediato, para t muy grande la contribución dominante proviene de la región donde τ es muy pequeña - (que corresponde a las vecindades de $\phi(z_0)$ en $\phi(z)$), ya que - para valores grandes de τ el integrando decrece exponencialmente. Tomando entonces la región $\tau \ll 1$ y efectuando un cambio - de variable para integrar sobre el eje real, se obtiene que:

$$I(t) = e^{t\phi(z_0)} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-t\tau^2} h(z(\tau)) \frac{dz}{d\tau}(\tau) d\tau \quad (D.5)$$

Como $\tau \ll 1$, puede sustituirse la función $h(z(\tau)) \frac{dz}{d\tau}(\tau)$ por su desarrollo en serie alrededor de $\tau = 0$,

$$h(z(\tau)) \frac{dz}{d\tau}(\tau) = \sum_{m=0}^{\infty} c_m \tau^m \quad (D.6)$$

de manera que en (D.5) se obtiene:

$$I(t) = e^{t\phi(z_0)} \sum_{m=0}^{\infty} c_m \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-t\tau^2} \tau^m d\tau$$

Donde las integrales que aparecen pueden evaluarse:

$$J_m \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-t\tau^2} \tau^m d\tau$$

y están dadas por las expresiones:

$$J_0 = \frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{t}}$$

$$J_{2m+1} \equiv 0 \quad y$$

$$J_{2m} = \sqrt{\pi} \frac{1 \cdot 2 \cdot 3 \cdots (2m-1)}{2^m t^{(2m+1)/2}}, \quad m > 0$$

De esta forma:

$$I(t) = e^{t\phi(z_0)} \left(c_0 \frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{t}} + \sum_{m=0}^{\infty} c_{2m} \sqrt{\pi} \frac{1 \cdot 3 \cdot 5 \cdots (2m-1)}{2^m} t^{(2m+1)/2} \right) \quad (D.7)$$

En la integral $I(t)$ que se calcula en el capítulo IV la función del exponente es:

$$\phi(k) = -ik$$

$$y \quad h(k) = G(r, r'; k) 2k$$

El cálculo del punto silla k_0 es inmediato:

$$\frac{d\phi(k)}{dk} = -2ik = 0 \quad k_0 = 0$$

Para encontrar las líneas que dividen al plano en cuatro regiones con la propiedad $\text{Im}(-ik^2) = \text{Im}(-ik_0^2) = 0$ se lleva a cabo el

procedimiento anteriormente descrito, de donde se obtienen las ecuaciones para las rectas:

$$k = \pm re^{-i3\pi/4}$$

y
$$k = \pm re^{i(-3\pi/4 + \pi/2)} = \pm ire^{-3\pi/4}$$

que son perpendiculares, como se muestra en la FIGURA D.1. Es inmediato verificar que la recta que tiene un máximo en $k = 0$ para la función $\phi(k) = -ik^2$ es la segunda de las dos rectas, y que para la otra dicho punto es un mínimo. De esta manera, la trayectoria adecuada para la evaluación de la integral por el método del punto silla de montar es exactamente L .

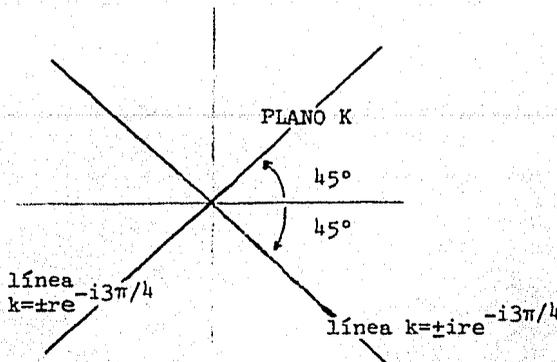


FIGURA D.1. Trayectorias que cumplen $\text{Im}(-ik^2) = 0$, donde $k_0 = 0$ es el punto silla de montar.

APENDICE E.

Programas de Cómputo y Tablas.

El programa para calcular la probabilidad $P(t)$ está estructurado de manera modular, utilizando programas simples e independientes que evalúan los polos k_n , los coeficientes de las funciones de estado resonante A_n y D_n , y otro para los coeficientes $c_n \bar{c}_n$.

El programa principal utiliza solamente los archivos de polos k_n y de coeficientes $c_n \bar{c}_n$, que pueden variarse para analizar diversos casos. Se muestra a continuación el listado del mismo, donde las integrales de Laguerre se han evaluado para $L = 12$ puntos.

Se calcula $P(t)$ para las diferentes regiones temporales, así como su logaritmo natural, que puede graficarse contra el tiempo en unidades de vidas medias.

Para calcular la amplitud para tiempos muy cortos, fue necesario utilizar la expresión (IV.12) dado que no se obtenía la convergencia numérica con suficiente precisión para anular el término $t^{-1/2}$.

En la TABLA E.1 se muestran los primeros 20 polos k_n para el potencial delta repulsivo con parámetros $a = 1$, $\lambda = 50$, así como los coeficientes A_n y D_n .

En la TABLA E.2 se muestran los coeficientes $c_n \bar{c}_n$ y las sumas (V.12) para dos casos correspondientes a una gaussiana delgada centrada en el tercer polo y una ancha centrada en el primer polo, para el mismo potencial, con parámetros:

$$1. r_0 = a/4, \sigma_0 = a/20, k_0 = \text{Re } k_3$$

$$2. r_0 = a/2, \sigma_0 = a/5, k_0 = \text{Re } k_1$$

En la TABLA E.3 se muestran los valores para el tiempo (en unidades de vida media), el logaritmo de la probabilidad, la amplitud y el término no exponencial, dividida por regiones. La tabla E.3A corresponde al primer caso (FIGURA V.8.A) y la tabla E.3.B al segundo (FIGURA V.8.B).

WORKFILE: FELI/TESIS2 (03/04/83)

```

1000 $RESET FREE
1010 C
1020 C
1030 C
1040 C
1050 C
1060 C
1070 C
1080 C
1090 C
1100 C
1110 C
1120 C
1130 C
1140 C
1150 C
1160 C
1170 C
1180 C
1190 C
1200 C
1210 C
1220 C
1230 C
1240 C
1250 C
1260 C
1270 C
1280 C
1290 C
1300 C
1310 C
1320 C
1330 C
1340 C
1350 C
1360 C
1370 C
1380 C
1390 C
1400 C
1410 FILE 1(KIND=REMOTE)
1420 FILE 2(KIND=DISK,FILETYPE=7,TITLE="FELI/POLOS ON CSC1.")
1430 FILE 3(KIND=DISK,FILETYPE=7,TITLE="FELI/CN3 ON CSC1.")
1440 FILE 4(KIND=DISK,FILETYPE=7,TITLE="FELI/D12 ON CSC1.")
1450 C
1460 IMPLICIT REAL*4(A-H,O-Z)
1470 COMPLEX CI,AM,ED,HEB,Z,C,K,CH,KN,KC,S1,S2
1480 DIMENSION CN(20),KN(20),X(12),W(12),DEL(4),TO(4),NO(4)
1490 DO 10 N = 1,20
1500 READ(2,1000) KN(N)
1510 10 READ(3,2000) CN(N)
1520 DO 20 L = 1,12
1530 20 READ(4,3000) X(L),W(L)
1540 PI = 4*ATN(1.0)
1550 CI = CMPLX(0.0,1.0)
1560 TAU = -1/(2 * AIMAG( KN(1) ** 2 ) )

```

```

1570      DATA ( DEL(J), J=1,4)/0.005,4.0,9.5,5.0/
1580      DATA ( TO(J), J=1,4)/0.5,7.0,31.5,45/
1590      DATA ( NO(J), J=1,4)/15,5,15,10/
1600
1610      WRITE(1,4000)
1620
1630      C
1640      C
1650      C
1660      C
1670      C
1680      C
1690      C
1700      C
1710      C
1720      C
1730      C
1740      C
1750      C
1760      C
1770      C
1780      C
1790      C
1800      C
1810      C
1820      C
1830      C
1840      C
1850      C
1860      C
1870      C
1880      C
1890      C
1900      C
1910      C
1920      C
1930      C
1940      C
1950      C
1960      C
1970      C
1980      C
1990      C
2000      C
2010      C
2020      C
2030      C
2040      C
2050      C
2060      C
2070      C
2080      C
2090      C
2100      C
2110      C
2120      C
2130      C
2140      C
2150      C
2160      C

```

DATA (DEL(J), J=1,4)/0.005,4.0,9.5,5.0/
DATA (TO(J), J=1,4)/0.5,7.0,31.5,45/
DATA (NO(J), J=1,4)/15,5,15,10/
WRITE(1,4000)
CALCULO DE A(T) PARA TIEMPOS CORTOS
S1 = (0.0,0.0)
S2 = (0.0,0.0)
DO 30 N = 1,20
S1 = S1 + CN(N) * KN(N)
S2 = S2 + CN(N) * (KN(N) ** 2)
CONTINUE
INTERVALO TEMPORAL DE LA REGION I
DO 40 J = 1,5
XDEL = (.2E-11) * J
T = XDEL * TAU
HED = -2*AIMAG(S1)*(CSQRT(T/(CI*PI)))
AM = 1.0 - CSQRT(CI)*(REAL(S2))*T + HED
PR = ABS(AM) ** 2
PL = ALOG(PR)
WRITE(1,5000)
WRITE(1,6000) XDEL,PL,AM,HED
CONTINUE
SE DELIMITAN LAS REGIONES TEMPORALES II,III,IV Y V
WRITE(1,5000)
DO 80 II = 1,4
WRITE(1,7000)
IF (II.EQ.3) WRITE (1,4000)
NI = NO(II)
SE CALCULAN LOS PUNTOS EN CADA REGION
DO 70 IJ = 1,NI
XDEL = DEL(II) * IJ + TO(II)
T = XDEL * TAU
CALCULO DE LA AMPLITUD A(T)
ED = (0.0,0.0)
HED = (0.0,0.0)
Z = CSQRT(CI/T)/(2 * PI)
DO 60 N = 1,20
C = CN(N)
K = KN(N)
KC = CONJG(K)
CALCULO DE LAS INTEGRALES DE LAGUERRE
S1 = (0.0,0.0)
S2 = (0.0,0.0)
DO 50 L = 1,12
XL = X(L)

```

2170      UL = W(L)
2180      S1 = S1 + SQRT(XL)*WL/(XL -CI* K*K *T)
2190      S2 = S2 + SQRT(XL)*WL/(XL -CI * KC*KC *T)
2200      CONTINUE
50      C
2210      C ED ES EL DECAIMIENTO EXPONENCIAL Y NED EL DECAIMIENTO
2220      C NO EXPONENCIAL
2230      C
2240      C ED = C * CEXP(-CI * K*K * T) + ED
2250      NED = Z * ((C/K)*S1 - CONJG(C/K) * S2) + NED
2260      CONTINUE
60      AM = ED + NED
2270      C
2280      C CALCULO DE LA PROBABILIDAD P(T)
2290      C
2300      PR = CABS(AM) ** 2
2310      PL = ALOG(PR)
2320      WRITE(1,5000)
2330      WRITE(1,8000) XDEL,PL,AM,NED
2340      CONTINUE
70      WRITE(1,5000)
2350      CONTINUE
80      WRITE(1,9000)
2360      C
2370      C
2400      1000  FORMAT(E13.8,E15.8)
2410      2000  FORMAT(E15.8,E15.8)
2420      3000  FORMAT(E17.12,1X,E17.12)
2430      4000  FORMAT(1X,66(" "),/, " ",11X,"*",8X,"*",2(21X,"*"),/,
2440      * * TIEMPO T * LNP(T) * AMPLITUD ACT) * DEC. ",
2450      * NO EXPONENCIAL *),/, " ",11X,"*",8X,"*",2(21X,"*"),
2460      */,1X,66(" "))
2470      5000  FORMAT(" ",11X,"*",8X,"*",2(21X,"*"))
2480      6000  FORMAT(" * ",E9.3," * ",E8.2,"*",2(1X,2(E9.3,1X),"*"))
2490      7000  FORMAT(1X,66(" "))
2500      8000  FORMAT(" ",F6.3," * ",F6.2," * ",2(1X,2(E9.3,1X),"*"))
2510      9000  FORMAT(1X,66(" "))
2520      CALL EXIT
2530      END
2540

```



TABLA E.1

POLOS KH	COEF REGION INTERNA	COEF REGION EXTERNA
.308E+01 - .369E-02	.140E+01 - .167E-02	-.850E-01 - .103E-01
.616E+01 - .145E-01	.140E+01 - .320E-02	-.163E+00 - .394E-01
.925E+01 - .315E-01	.140E+01 - .449E-02	-.229E+00 - .830E-01
.123E+02 - .536E-01	.140E+01 - .550E-02	-.280E+00 - .136E+00
.154E+02 - .795E-01	.140E+01 - .621E-02	-.316E+00 - .192E+00
.185E+02 - .108E+00	.141E+01 - .667E-02	-.339E+00 - .247E+00
.216E+02 - .138E+00	.141E+01 - .692E-02	-.352E+00 - .299E+00
.247E+02 - .169E+00	.141E+01 - .701E-02	-.356E+00 - .346E+00
.279E+02 - .200E+00	.141E+01 - .699E-02	-.354E+00 - .388E+00
.310E+02 - .231E+00	.141E+01 - .688E-02	-.349E+00 - .425E+00
.341E+02 - .261E+00	.141E+01 - .672E-02	-.341E+00 - .457E+00
.372E+02 - .290E+00	.141E+01 - .653E-02	-.331E+00 - .485E+00
.403E+02 - .319E+00	.141E+01 - .633E-02	-.320E+00 - .509E+00
.435E+02 - .346E+00	.141E+01 - .611E-02	-.309E+00 - .530E+00
.466E+02 - .373E+00	.141E+01 - .589E-02	-.298E+00 - .548E+00
.497E+02 - .398E+00	.141E+01 - .568E-02	-.287E+00 - .563E+00
.528E+02 - .423E+00	.141E+01 - .547E-02	-.277E+00 - .577E+00
.560E+02 - .447E+00	.141E+01 - .527E-02	-.267E+00 - .589E+00
.591E+02 - .470E+00	.141E+01 - .508E-02	-.257E+00 - .599E+00
.622E+02 - .492E+00	.141E+01 - .490E-02	-.248E+00 - .609E+00

```

*****
*
*           TABLA E.2
*
*****
*
*           COEFICIENTES CNCH
*
*  N  -----
*  *  GAUSSIANA DELGADA *  GAUSSIANA ANCHA
*  *
*  *  *****
*  *
*  1 *  .136E+00 .251E-03 *  .757E+00 .382E-03
*  *
*  2 *  .263E+00 .372E-04 *  .143E+00 .337E-03
*  *
*  3 *  .135E+00 .193E-02 *  .905E-01 .147E-02
*  *
*  4 *  .160E-01 .215E-03 *  .844E-02 .419E-03
*  *
*  5 *  .876E-01 .277E-02 *  .691E-03 .525E-04
*  *
*  6 *  .143E+00 .633E-03 *  .123E-03 .281E-05
*  *
*  7 *  .751E-01 .383E-02 *  .223E-05 .139E-05
*  *
*  8 *  .218E-01 .646E-03 *  .331E-04 .575E-05
*  *
*  9 *  .348E-01 .135E-02 *  .467E-06 .945E-06
*  *
* 10 *  .408E-01 .864E-03 *  .257E-04 .542E-05
*  *
* 11 *  .209E-01 .173E-02 *  .152E-06 .820E-06
*  *
* 12 *  .803E-02 .443E-03 *  .196E-04 .497E-05
*  *
* 13 *  .716E-02 .280E-04 *  .258E-07 .694E-06
*  *
* 14 *  .588E-02 .315E-03 *  .153E-04 .452E-05
*  *
* 15 *  .278E-02 .314E-03 *  .135E-06 .583E-06
*  *
* 16 *  .112E-02 .103E-03 *  .122E-04 .410E-05
*  *
* 17 *  .692E-03 .362E-04 *  .204E-06 .488E-06
*  *
* 18 *  .412E-03 .410E-04 *  .989E-05 .273E-05
*  *
* 19 *  .172E-03 .259E-04 *  .249E-06 .407E-06
*  *
* 20 *  .649E-04 .902E-05 *  .920E-05 .341E-05
*  *
*  *  *****
*  *
*  *  S1=.9999, S2=.0006 *  S1=.9996, S2=.0008
*  *
*  *  *****

```

TABLA E.3.A

TIEMPO T	LNP(T)	AMPLITUD A(KT)		DEC. NO EXPONENCIAL	
.200E-11	-.12E-05*	.100E+01	.596E-05	-.605E-06	.605E-06
.400E-11	-.17E-05*	.100E+01	.838E-06	-.856E-06	.856E-06
.600E-11	-.21E-05*	.100E+01	.102E-05	-.105E-05	.105E-05
.800E-11	-.25E-05*	.100E+01	.117E-05	-.121E-05	.121E-05
.100E-10	-.28E-05*	.100E+01	.131E-05	-.135E-05	.135E-05

0.505	-4.61	.378E-01	.925E-01	-.118E-06	-.114E-06
0.510	-4.23	.860E-01	.850E-01	-.116E-06	-.112E-06
0.515	-4.60	.634E-01	-.777E-01	-.114E-06	-.111E-06
0.520	-4.26	.304E-01	-.115E+00	-.113E-06	-.109E-06
0.525	-4.60	-.987E-01	-.181E-01	-.111E-06	-.108E-06
0.530	-4.29	-.113E+00	.300E-01	-.109E-06	-.106E-06
0.535	-4.59	.319E-01	.956E-01	-.108E-06	-.105E-06
0.540	-4.32	.893E-01	.822E-01	-.106E-06	-.103E-06
0.545	-4.59	.687E-01	-.740E-01	-.105E-06	-.102E-06
0.550	-4.35	.307E-01	-.109E+00	-.103E-06	-.100E-06
0.555	-4.59	-.980E-01	-.244E-01	-.102E-06	-.991E-07
0.560	-4.38	-.109E+00	.271E-01	-.101E-06	-.978E-07
0.565	-4.58	.260E-01	.979E-01	-.992E-07	-.965E-07
0.570	-4.41	.762E-01	.797E-01	-.979E-07	-.953E-07

11.000	-14.99	.541E-03	.123E-03	-.114E-08	-.114E-08
15.000	-18.99	-.325E-04	.677E-04	-.716E-09	-.715E-09
19.000	-22.99	-.785E-05	-.632E-05	-.502E-09	-.502E-09
23.000	-26.99	.107E-05	-.859E-06	-.377E-09	-.377E-09
27.000	-31.00	.806E-07	.167E-06	-.296E-09	-.296E-09

TABLA E.3.A (continuación)

TIEMPO T	LNP(T)	AMPLITUD A(T)	DEC. NO EXPONENCIAL
32.000	-36.02	-361E-06 .147E-07	-.230E-09 -.230E-09
32.500	-36.45	-417E-06 -114E-07	-.224E-09 -.224E-09
33.000	-37.06	-703E-06 .555E-08	-.219E-09 -.219E-09
33.500	-37.43	-739E-06 -101E-08	-.215E-09 -.214E-09
34.000	-38.03	-485E-06 -265E-08	-.210E-09 -.210E-09
34.500	-38.52	-253E-06 .350E-08	-.205E-09 -.205E-09
35.000	-38.88	-205E-06 -361E-08	-.201E-09 -.201E-09
35.500	-39.71	-122E-06 .205E-08	-.197E-09 -.197E-09
36.000	-39.76	-206E-06 -109E-08	-.193E-09 -.192E-09
36.500	-40.69	-141E-06 -370E-09	-.189E-09 -.189E-09
37.000	-40.91	-116E-06 .598E-09	-.185E-09 -.185E-09
37.500	-41.23	-140E-06 -110E-08	-.181E-09 -.181E-09
38.000	-42.59	-759E-11 .564E-09	-.179E-09 -.177E-09
38.500	-41.80	-593E-09 -.592E-09	-.174E-09 -.174E-09

50.000	-45.06	-116E-09 -117E-09	-.118E-09 -.118E-09
55.000	-45.32	-102E-09 -102E-09	-.102E-09 -.102E-09
60.000	-45.58	-895E-10 -895E-10	-.895E-10 -.895E-10
65.000	-45.82	-794E-10 -793E-10	-.794E-10 -.793E-10
70.000	-46.04	-710E-10 -710E-10	-.710E-10 -.710E-10
75.000	-46.25	-640E-10 -640E-10	-.640E-10 -.640E-10
80.000	-46.44	-581E-10 -581E-10	-.581E-10 -.581E-10
85.000	-46.63	-531E-10 -531E-10	-.531E-10 -.531E-10
90.000	-46.80	-487E-10 -487E-10	-.487E-10 -.487E-10
95.000	-46.96	-449E-10 -449E-10	-.449E-10 -.449E-10

E.3.B

TIEMPO T	LHP(T)	AMPLITUD A(T)		DEC. NO EXPOENCIAL	
.200E-11	-14E-06	.100E+01	.701E-07	-.708E-07	.708E-07
.400E-11	-.20E-06	.100E+01	.987E-07	-.100E-06	.100E-06
.600E-11	-.25E-06	.100E+01	.121E-06	-.123E-06	.123E-06
.800E-11	-.29E-06	.100E+01	.139E-06	-.142E-06	.142E-06
.100E-10	-.32E-06	.100E+01	.155E-06	-.158E-06	.158E-06

0.505	-1.08	.374E-01	.591E+00	-.637E-06	-.611E-06
0.510	-1.05	.512E+00	.298E+00	-.627E-06	-.602E-06
0.515	-1.09	.486E+00	-.316E+00	-.618E-06	-.593E-06
0.520	-1.06	.745E-02	-.589E+00	-.609E-06	-.585E-06
0.525	-1.10	-.512E+00	-.267E+00	-.600E-06	-.576E-06
0.530	-1.07	-.513E+00	.282E+00	-.592E-06	-.568E-06
0.535	-1.11	.187E-01	.575E+00	-.583E-06	-.561E-06
0.540	-1.08	.495E+00	.306E+00	-.575E-06	-.553E-06
0.545	-1.11	.490E+00	-.297E+00	-.567E-06	-.545E-06
0.550	-1.09	.229E-01	-.578E+00	-.559E-06	-.538E-06
0.555	-1.12	-.497E+00	-.280E+00	-.552E-06	-.531E-06
0.560	-1.11	-.512E+00	.263E+00	-.544E-06	-.524E-06
0.565	-1.13	.467E-03	.568E+00	-.537E-06	-.517E-06
0.570	-1.12	.478E+00	.314E+00	-.530E-06	-.510E-06

11.000	-11.56	.301E-02	.690E-03	-.614E-08	-.613E-08
15.000	-15.56	-.182E-03	.377E-03	-.386E-08	-.385E-08
19.000	-19.56	-.443E-04	-.354E-04	-.271E-08	-.270E-08
23.000	-23.56	.600E-05	-.478E-05	-.203E-08	-.203E-08
27.000	-27.56	.448E-06	.934E-06	-.160E-08	-.160E-08

E.3.B (continuación)

TIEMPO T	LHP(T)	AMPLITUD A(T)		DEC. NO EXPONENCIAL	
32.000	-32.58	-203E-07	.818E-07	-.124E-08	-.124E-08
32.500	-33.01	-230E-07	-.638E-07	-.121E-08	-.121E-08
33.000	-33.62	.392E-07	.311E-07	-.118E-08	-.118E-08
33.500	-33.99	-.411E-07	-.571E-08	-.116E-08	-.115E-08
34.000	-34.59	.271E-07	-.147E-07	-.113E-08	-.113E-08
34.500	-35.08	-.141E-07	.195E-07	-.111E-08	-.110E-08
35.000	-35.44	-.106E-08	-.201E-07	-.108E-08	-.108E-08
35.500	-36.26	.680E-08	.115E-07	-.106E-08	-.106E-08
36.000	-36.33	-.114E-07	-.605E-08	-.104E-08	-.104E-08
36.500	-37.25	.791E-08	-.201E-08	-.102E-08	-.102E-08
37.000	-37.47	-.647E-08	.336E-08	-.995E-09	-.995E-09
37.500	-37.81	.829E-09	-.611E-08	-.976E-09	-.975E-09
38.000	-39.13	-.193E-10	.318E-08	-.956E-09	-.956E-09
38.500	-38.38	-.327E-08	-.328E-08	-.938E-09	-.937E-09

50.000	-41.69	-.624E-09	-.629E-09	-.634E-09	-.633E-09
55.000	-41.95	-.549E-09	-.548E-09	-.549E-09	-.549E-09
60.000	-42.21	-.482E-09	-.482E-09	-.482E-09	-.482E-09
65.000	-42.45	-.427E-09	-.427E-09	-.427E-09	-.427E-09
70.000	-42.68	-.382E-09	-.382E-09	-.382E-09	-.382E-09
75.000	-42.88	-.345E-09	-.345E-09	-.345E-09	-.345E-09
80.000	-43.08	-.313E-09	-.313E-09	-.313E-09	-.313E-09
85.000	-43.26	-.286E-09	-.286E-09	-.286E-09	-.286E-09
90.000	-43.43	-.262E-09	-.262E-09	-.262E-09	-.262E-09
95.000	-43.59	-.242E-09	-.242E-09	-.242E-09	-.242E-09

BIBLIOGRAFIA

BIBLIOGRAFIA.

- M. Abramowitz, I. A. Stegun: *Handbook of Mathematical Functions* (1972).
- R. Alzetta, E. D'Ambrgio: *Nucl. Phys.*, **82**, 683 (1966).
- T. Berggren: *Nucl. Phys. A*, **109**, 265 (1968).
- M. Berrondo, G. García Calderón: *Lett. Nuovo Cim.*, **20**, 34 (1977).
- C. B. Chiu, E. C. Sudarshan: *Phys. Rev. D*, **16**, 520 (1977).
- R. V. Churchill, J. W. Brown, R. F. Verhey: *Complex Variables and their Application*. (Tokio, 1974).
- C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloe: *Quantum Mechanics* (Paris, 1977).
- A. S. Davydov: *Quantum Mechanics*. (Oxford, 1969).
- P. Dennery, A. Krzywicki: *Mathematics for Physicists*. (New York, N.Y., 1967).
- A. Erdélyi, W. Magnus, F. Oberhettinger, F. G. Tricomi: *Tables of Integral Transforms*. Bateman Manuscript Project (1954).
- R. P. Feynman, R. B. Leighton, M. Sands: *The Feynman Lectures on Physics*, Vol. III (Cal., 1963).
- L. Fonda, G. C. Ghirardi: *Nuovo Cim.*, **7A**, 180 (1972).
- _____ : *Nuovo Cim.*, **10A**, 850 (1972).
- L. Fonda, G. C. Ghirardi, A. Rimini: *Rep. Prog. Phys.*, **41**, 587 (1978).
- M. Fortes, G. García Calderón: *Lett. Nuovo Cim.*, **28**, 390 (1980).
- G. Gamow: *Z. Phys.*, **51**, 204 (1928).
- G. García Calderón, R. E. Feieris: *Nucl. Phys. A*, **265**, 443 (1976).
- G. García Calderón: *Nucl. Phys. A*, **261**, 130 (1976).
- _____ : *Nucl. Phys. A*, **284**, 209 (1977).
- G. García Calderón, M. Berrondo: *Lett. Nuovo Cim.*, **26**, 562 (1979).
- G. García Calderón: *Lett. Nuovo Cim.*, **33**, 253 (1982).
- M. L. Goldberger, K. M. Watson: *Collision Theory*, (New York, N.Y., 1964).
- I. S. Gradshteyn, I. M. Ryzhik: *Table of Integrals, Series, and Products*.
- (
- M. N. Hack: *Phys. Lett.*, **40A**, 351 (1972).
- E. J. Hellund: *Phys. Rev.*, **89**, 919 (1953).
- N. Hokkyo: *Progr. Theor. Phys.* **33**, 1116 (1956).

- L.A.Khalfin:*Sov. Phys. JETP*, **6**, 1053 (1958).
- N.N.Lebedev: *Special Functions and Their Applications*. (Toronto, 1972)
- M.Moshinski:*Phys. Rev.* **88**, 625 (1952).
- R.G.Newton: *Scattering Theory of Waves & Particles*. (N.Y., 1966).
- C.A.Nicolaidis, D.R.Beck:*Phys. Rev. Lett.*, **38**, 683 (1977).
- H.M.Nussensveig: *Causality & Dispersion Relations*. (New York, N.Y., 1974).
- D.S.Saxon: *Elementary Quantum Mechanics* (S. Francisco, Cal., 1968).
- E.C.G.Sudarshan, C.B.Chiu, V.Gorini:*Phys. Rev. D*, **18**, 2914 (1978).
- V.F.Weisskopf, E.P.Wigner:*Z. Phys*, **63**, 54 (1930).
- E.T.Whittaker, G.N.Watson: *A Course of Modern Analysis* (1952).