

7

2 of 2



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

ESTUDIO DE LA DEPENDENCIA TEMPORAL DEL TUNELAJE

T E S I S

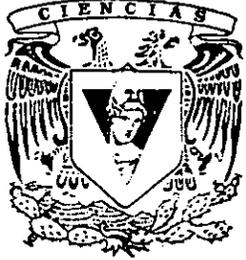
QUE PARA OBTENER EL TITULO DE:

F I S I C O

P R E S E N T A :

ROBERTO BERNAL JAQUEZ

DIRECTOR DE TESIS: DR. GASTON GARCIA CALDERON



MEXICO, D. F.



1998

TESIS CON FALLA DE ORIGEN

FACULTAD DE CIENCIAS SECCION ESCOLAR

268451



Universidad Nacional  
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

**Biblioteca Central**



**UNAM – Dirección General de Bibliotecas**  
**Tesis Digitales**  
**Restricciones de uso**

**DERECHOS RESERVADOS ©**  
**PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

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

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



UNIVERSIDAD NACIONAL  
AUTÓNOMA DE  
MÉXICO

M. en C. Virginia Abrín Batule  
Jefe de la División de Estudios Profesionales de la  
Facultad de Ciencias  
P r e s e n t e

Comunicamos a usted que hemos revisado el trabajo de Tesis:  
"Estudio de la Dependencia Temporal del Tunelaje"

realizado por BERNAL JAQUEZ ROBERTO

con número de cuenta 7951321-8 , pasante de la carrera de Física.

Dicho trabajo cuenta con nuestro voto aprobatorio.

Atentamente

Director de Tesis  
Propietario

DR. GASTON GARCIA CALDERON

Propietario

DR. WOLF LUIS MOCHAN BACKAL

Propietario

DR. MARCOS MOSHINSKY BORODIANSKY

Suplente

DRA. ROCIO JAUREGUI RENAUD

Suplente

DR. ALEJANDRO RAMIREZ SOLIS

*[Handwritten signatures: Gaston Garcia Calderon, Wolf Luis Mochan Backal, Marcos Moshinsky Borodiansky, Rocio Jauregui Renaud, Alejandro Ramirez Solis]*

Centro Departamental de Física



D. A. DR. ROBERTO ALEJANDRO RUELAS MAYORGA  
Coordinador de Licenciatura en Ciencias  
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

**A mi padre.**

**A mi madre in memoriam.**

Es necesario agradecer al pueblo mexicano porque en medio de sus tragedias ha creado opciones educativas tan grandes y generosas como la Universidad Nacional, opción gracias a la cual, pude formarme profesionalmente.

A nivel personal quiero agradecer a mi hermano Sergio Cuevas por su amistad y apoyo incondicionales.

Agradezco en general a la planta docente e investigadores de la Facultad de Ciencias, del Instituto de Física y del Centro de Ciencias Físicas de la UNAM por la formación recibida pero muy particularmente quiero agradecer al Dr. Luis Mochán por su orientación y apoyo. Estoy seguro que, para muchos como yo, tener un maestro como él ha sido crucial y decisivo en nuestra vida académica. Sus sugerencias en torno a esta tesis la hicieron posible en una gran medida.

También quiero hacer patente mi gratitud al Dr. Gastón García Calderón por la acertada dirección de esta tesis. Sus escaledores comentarios y su paciencia hicieron posible que ésta sea una realidad.

Todo hace creer que existe un cierto punto  
del espíritu desde el cual la vida y la muerte,  
lo real y lo imaginario, el pasado y el futuro,  
lo comunicable y lo incommunicable,  
dejan de ser percibidos contradictoriamente.

ANDRÉ BRETON.

# Contenido

Introducción	3
<b>1 La Ecuación de Schrödinger y los Paquetes de Onda.</b>	<b>6</b>
1.1 Introducción.	6
1.2 La ecuación de onda de Schrödinger y la función de onda.	6
1.3 Flujo de probabilidad	8
1.4 Definición de los coeficientes de reflexión y de transmisión	9
1.5 Separación de la ecuación de onda	10
1.6 Solución general de la ecuación de Schrödinger	11
1.7 Los paquetes de ondas.	12
1.8 Evolución temporal de un paquete de ondas.	13
<b>2 La Barrera Rectangular y el paso de Paquetes de Onda a través de ella.</b>	<b>15</b>
2.1 Introducción.	15
2.2 La barrera rectangular de potencial.	16
2.2.1 Caso $E < V_0$	16
2.2.2 Caso $E > V_0$	19
2.3 Definición de $r$ y $t$ .	19
2.4 El paso de un paquete de onda Gaussiano por una barrera de potencial.	20
<b>3 Solución Numérica de la Ecuación de Schrödinger.</b>	<b>23</b>
3.1 Introducción.	23
3.2 Formulación del problema.	24
3.3 El método semiespectral.	25
3.3.1 Un poco de historia del método semiespectral en la solución de la ecuación de Schrödinger.	25
3.3.2 El método semiespectral en nuestro problema.	26
3.4 Criterios y restricciones para escoger las condiciones iniciales.	30

<b>4</b>	<b>Los Tiempos de Tunelaje.</b>	<b>35</b>
4.1	Introducción. . . . .	35
4.2	Definición de tiempo fase. . . . .	36
4.2.1	Tiempo fase en el caso de la barrera de potencial rectangular. . . . .	37
4.2.2	Barreras de Potencial Delgadas y Barreras Opacas. . . . .	39
4.3	Definición del tiempo de permanencia (dwell time). . . . .	40
<b>5</b>	<b>Resultados de la Simulación. Discusión y Análisis.</b>	<b>47</b>
5.1	Introducción. . . . .	47
5.2	Criterios para escoger los parámetros de entrada en la simulación. . . . .	48
5.3	Movimiento de una partícula libre . . . . .	52
5.3.1	La simulación para el paquete de ondas libre. . . . .	52
5.4	Obtención de los resultados gráficos de Goldberg. . . . .	55
5.5	Medición numérica de los tiempos de tunelaje y su comparación con el tiempo de los modelos teóricos. . . . .	58
5.5.1	Caso de la Barrera delgada. . . . .	60
5.5.2	Caso de la Barrera Opaca. . . . .	64
5.5.3	Resonancia dependientes del tiempo. . . . .	65
<b>6</b>	<b>Conclusiones.</b>	<b>70</b>
	<b>Bibliografía</b>	<b>73</b>

# Introducción

Dentro del campo de la mecánica cuántica uno de los problemas que han sido mayormente estudiados es el que plantea el comportamiento de partículas que inciden sobre una barrera de potencial. Este problema que se puede enunciar equivalentemente como el paso de paquetes de onda a través de barreras de potencial sigue suscitando un gran interés debido a las implicaciones e interrogantes diversas que sus resultados conllevan.

En este trabajo nos proponemos estudiar el comportamiento de dichos paquetes de onda a través de barreras de potencial. El método que habremos de seguir consiste básicamente en resolver numéricamente la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo usando un método semiespectral en contraposición de otros autores que han resuelto numéricamente el problema usando el método planteado por Goldberg [Goldberg, A., et al, 1967].

Hemos desarrollado un algoritmo (traducido en un programa de cómputo) que soluciona la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo, no como el objetivo principal de este trabajo de tesis. El algoritmo desarrollado, es tan sólo el medio para poder hacer un análisis del movimiento del paquete de onda que incide sobre una barrera de potencial. El caso que nos ocupará principalmete es el que tenemos cuando la energía del paquete es menor que la energía de la barrera ( $E < V_0$ ), este caso es conocido como el de "tunelaje en regiones clásicamente prohibidas".

Un análisis del movimiento del centro de gravedad del paquete de onda transmitido a través de la barrera después de la dispersión nos lleva al concepto de tiempo de retardo con respecto al caso donde no hay dispersión. También nos lleva a preguntarnos por el tiempo que le toma a una partícula, representada por el paquete de onda, pasar "tuneleando" por la barrera.

El objetivo de este trabajo es arrojar un poco de luz en el tema de los tiempos de tunelaje. Problema en donde aún no se tiene un consenso acerca de cual debe ser el tiempo que se debe asignar al paso de una partícula por una barrera de potencial. Para realizar nuestra investigación hemos usando como herramienta el programa de cómputo que hemos construido para resolver la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo.

El problema del tiempo de tunelaje fué abordado en 1951 por David Bohm

[Bohm, D., 1951], quien relaciona este tiempo con un cambio de fase de la función compleja que se asocia a la función de onda que a su vez representa a la partícula en su interacción con la barrera de potencial. También Wigner abordó el problema de una manera parecida [Wigner, E. P., 1955].

En los años sesentas hay un resurgimiento del problema de cálculo de tiempos de tunelaje, debido principalmente a la aparición de la tecnología de los semiconductores. Datan también, de estas fechas los trabajos que solucionan numericamente la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo en los casos de interacción partícula-barrera de potencial como el ya citado y clásico artículo de Goldberg que ya hemos citado.

Otros autores como como Smith [Smith, F.T., 1960], abordan el problema de una manera diferente. Obtiene un resultado en el que se plantea que el tiempo total que se puede asociar a la partícula dentro de la barrera está dado por un tiempo de permanencia (dwell time) que se define como como la relación del número total de partículas incidentes (ó salientes) sobre la barrera dividido entre flujo incidente (ó saliente). Con esta definición no es posible distinguir si la partícula es reflejada o transmitida sino solamente el tiempo que dura la interacción con la barrera de modo que no se puede conceptualizar como tiempo de travesía.

También en los sesentas surgen trabajos [Baz, A.I., 1967], [Rybachenko, V.F., 1967] donde se propone el diseño de un experimento que permita medir la duración de la interacción. La idea básica consistía en introducir un campo magnético de magnitud pequeña a todo lo ancho de la barrera de tal modo que al hacer incidir una partícula cargada se provoque una precesión de Larmor sobre partícula y con ello un cambio en la orientación de su spin. Este cambio de orientación permitiría, a manera de reloj, calcular el tiempo que tarda la partícula en atravesar la barrera.

A partir de los ochentas y en conexión con las preguntas que surgen en el diseño óptimo de semiconductores que usan el efecto túnel en estructuras cuánticas, resurge el interés por este tema [Büttiker, M., 1983], [Hauge-Stovngeng, 1989]. Se han hecho revisiones [Büttiker-Landauer, 1982], [Colins, S., *et al*, 1987], [Olkhovskiy, V., Recami, E., 1992], [Landauer, R., 1994] de los diversos enfoques y se han propuesto otros para resolver el problema, casi todos basados en las ideas de los pioneros de este campo, sin que hasta la fecha se tenga un acuerdo acerca de cual de las teorías es correcta.

Uno de los objetivos de este trabajo es arrojar un poco de luz sobre este problema haciendo uso de una simulación numérica. La metodología propuesta propone resolver la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo para un paquete que choca contra una barrera y obtener el paquete de onda transmitido. Un análisis

del movimiento del centro de gravedad del paquete de onda transmitido nos llevará a encontrar el tiempo de retardo de este paquete con respecto a un paquete que transita sin ser dispersado.

Tenemos la esperanza de que nuestras simulaciones de electrones que pasan a través de barreras de potencial contribuyan a esclarecer algunas de las preguntas que han sido formuladas por los exponentes de las diversas líneas de pensamiento que tratan de resolver el problema de los tiempos de tunelaje.

# Capítulo 1

## La Ecuación de Schrödinger y los Paquetes de Onda.

### 1.1 Introducción.

En este capítulo haremos una revisión de los conceptos básicos de la mecánica cuántica que nos permitan desarrollar las ideas involucrados en los problemas de tunelamiento y, en general del paso de paquetes de onda através de barreras de potencial. Hablaremos primero de la ecuación de Schrödinger unidimensional y su solución. Diremos algo acerca de la función de onda y de su interpretación porque, como se verá a lo largo de este trabajo, en los problemas de tunelamiento resulta básico tener una idea del significado físico del cuadrado ésta función para comprender los resultados de los problemas de dispersión. Este tema nos lleva directamente a hablar de la ecuación de continuidad y a definir los coeficientes de transmisión y de reflexión. La última parte de este capítulo nos habla de los paquetes de onda Gaussianos, su evolución temporal y su significado físico. Es necesario recalcar el hecho de que nuestro estudio de los fenómenos de tunelamiento y, en general, del paso de paquetes de onda por potenciales unidimensionales, lo haremos usando la parte de la teoría cuántica que corresponde a la mecánica ondulatoria no relativista de partículas, y que tiene como ley dinámica a la ecuación de Schrödinger.

### 1.2 La ecuación de onda de Schrödinger y la función de onda.

La ecuación de onda de Schrödinger dependiente del tiempo con un

potencial  $V$  se escribe como:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + V\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} \quad (1)$$

En nuestro trabajo nos concretaremos al caso unidimensional. La ecuación Schrödinger con un potencial que depende solamente de la posición se escribe con

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + V(x)\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} \quad (1)$$

La función de onda  $\Psi$  que satisface la ecuación anterior es una función compleja que determina completamente el estado de un sistema cuántico. A esta función onda no se le asigna, directamente alguna interpretación física; es a su cuadra  $|\Psi(x)|^2$  a quien se le asigna un significado físico. La interpretación, debida a M Born<sup>1</sup>, nos dice que  $|\Psi(x)|^2$  es una medida de la probabilidad de hallar a la partícula en una posición particular con respecto al origen. Como las probabilidades son cantidades reales y positivas y  $\Psi$  es una cantidad compleja usamos el producto  $\Psi$  y su compleja conjugada  $\Psi^*$  para obtener lo que se conoce como la *densidad de probabilidad*. En términos de la función de onda  $\Psi(r,t)$  escribimos esta densidad como:

$$\rho(r,t) = \Psi^*(r,t)\Psi(r,t) = |\Psi(r,t)|^2 \quad (1)$$

Esto significa que  $\rho(r,t) d^3r$  es la probabilidad de hallar a la partícula en elemento de volumen  $d^3r$  alrededor del punto  $r$  al tiempo  $t$ , cuando un gran número de mediciones precisas de la posición son realizadas sobre partículas independientes cada una de las cuales esta descrita por la función de onda  $\Psi(r,t)$  que, como dijo, describe a una de las partículas [Leonard I. Schiff, 1955]. Esta es la llamada *interpretación estadística* o *probabilística* de la mecánica cuántica, que no hay que confundir con las posiciones que al respecto guardan autores como Luis de la Peña, que se pueden estudiar con más detalle en su libro de texto [De La Peña, 1991].

La probabilidad de hallar en algún lugar del espacio debe de ser igual a la unidad. Esto impone algunas condiciones sobre nuestra función de onda, que de alguna manera se resumen al decir que nuestra función de onda debe estar *normalizado*

$$\int \Psi^*(r,t)\Psi(r,t) d^3r = \int |\Psi(r,t)|^2 d^3r = \int \rho(r,t) d^3r = 1 \quad (1)$$

<sup>1</sup>M. Born, Z.Physik 37,863 (1926); Nature 119, 364 (1927)

Esta integral expresa el hecho que la probabilidad de hallar a la partícula en algún lugar del espacio<sup>2</sup> es igual a la unidad. Cuando esta integral exista debemos asumir que nuestra función de onda está normalizada y que nuestra función es cuadráticamente integrable. Como la partícula está evolucionando en el tiempo es importante que siempre se verifique el hecho de que la probabilidad valga uno, es decir de que la partícula siempre se encuentre en algún lugar del espacio. Esto equivale a pedir que la condición de normalización (1.4) se cumpla para todo  $t$ . Que la condición de normalización es independiente del tiempo se verifica de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \rho(\mathbf{r}, t) d^3r &= \int_{\Omega} \left( \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \Psi \right) d^3r \\ &= \frac{i\hbar}{2m} \int_{\Omega} \left[ \Psi^* \nabla^2 \Psi - (\nabla^2 \Psi^*) \Psi \right] d^3r \\ &= \frac{i\hbar}{2m} \int_{\Omega} \nabla \cdot \left[ \Psi^* \nabla \Psi - (\nabla \Psi^*) \Psi \right] d^3r \\ &= \frac{i\hbar}{2m} \int_A \left[ \Psi^* \nabla \Psi - (\nabla \Psi^*) \Psi \right]_n dA \end{aligned}$$

Nótese que hemos usado la ecuación (1.1) para substituir  $\partial \Psi / \partial t$  y también el complejo conjugado de la ecuación (1.1) para obtener  $\partial \Psi^* / \partial t$ . La última integral fue obtenida por medio del teorema de Green, en donde  $A$  es la superficie que contiene (y limita) a el volumen de integración  $\Omega$  y además  $\square_n$  denota la componente normal del vector que está encerrado entre los parentesis rectangulares y cuya dirección apunta hacia afuera del elemento de superficie  $dA$ .

### 1.3 Flujo de probabilidad

Definimos al vector  $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$  como:

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar}{2mi} \left[ \Psi^* \nabla \Psi - (\nabla \Psi^*) \Psi \right] \quad (1.5)$$

en términos del cual podemos escribir

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \rho(\mathbf{r}, t) d^3r = - \int_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{j} d^3r = \int_A S_n dA \quad (1.6)$$

<sup>2</sup>De aquí en adelante, cuando no se incluyan los límites de integración, se entenderá que las integrales se extienden sobre todo el espacio.

En todos los casos se puede probar sin dificultad que la integral de superficie en (1.6) vale cero, de tal manera que la ecuación (1.4) es constante en el tiempo.

De la ecuación (1.6) se obtiene:

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla \circ \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (1.7)$$

Esta ecuación tiene la forma de una ecuación de continuidad, es decir, está asociada con la conservación de flujo de un fluido de densidad  $\rho$  y densidad de corriente  $\mathbf{j}$ , en la cual no se tienen fuentes ni sumideros. Es entonces razonable interpretar a  $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$  como una *densidad de corriente de probabilidad*.

La utilidad de los conceptos hasta aquí desarrollados salta a la vista cuando consideramos por ejemplo a una partícula en movimiento que incide sobre un blanco dispersor (como por ejemplo una barrera de potencial). Una vez ocurrida la interacción tendremos dos posibilidades: la partícula bien pudiera ser reflejada o bien transmitida a través del blanco dispersor. Si asociamos las distintas densidades de probabilidad para localizar en cada caso a la partícula y por lo tanto distintos flujos de probabilidad tendremos la relación de continuidad del flujo de probabilidad:

$$|\mathbf{j}_i| = |\mathbf{j}_r| + |\mathbf{j}_t| \quad (1.8)$$

donde  $\mathbf{j}_i$  es el flujo de probabilidad incidente,  $\mathbf{j}_r$  es el flujo de probabilidad reflejado, y  $\mathbf{j}_t$  es el flujo de probabilidad transmitido.

Si en la ecuación (1.8) dividimos entre  $\mathbf{j}_i$  tendremos:

$$\frac{|\mathbf{j}_r|}{|\mathbf{j}_i|} + \frac{|\mathbf{j}_t|}{|\mathbf{j}_i|} = 1 \quad (1.9)$$

## 1.4 Definición de los coeficientes de reflexión y de transmisión

Definimos al *coeficiente de reflexión*  $R$  y al *coeficiente de transmisión*  $T$  como sigue:

$$R = \frac{|\mathbf{j}_r|}{|\mathbf{j}_i|} \quad ; \quad T = \frac{|\mathbf{j}_t|}{|\mathbf{j}_i|} \quad (1.10)$$

Cantidades que cumplen (1.9) y de las que resulta:

$$R + T = 1 \quad (1.11)$$

Usando esta expresión podemos entender a  $R$  como la proporción del flujo incidente que es reflejada y a  $T$  como la proporción del flujo incidente que es transmitida.

En el siguiente capítulo definiremos dos nuevas cantidades complejas:  $t$  y  $r$  llamadas *amplitudes de transmisión y de reflexión* respectivamente.

## 1.5 Separación de la ecuación de onda

La ecuación de Schrödinger se puede resolver usando diversos métodos de solución y dependiendo de la forma del potencial que aparece en (1.1). Si el potencial depende solamente de la posición y no varía con el tiempo, podemos expresar su solución general como una suma de productos de funciones que dependen solamente de  $r$  y de  $t$  separadamente. Es decir nuestra solución estará dada por productos de funciones de la forma

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = f(t)\varphi(\mathbf{r}) \quad (1.12)$$

sustituyendo este producto en la ecuación (1.1) tenemos

$$\frac{i\hbar}{f} \frac{df}{dt} = \frac{1}{\varphi(\mathbf{r})} \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \varphi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}) \varphi(\mathbf{r}) \right] \quad (1.13)$$

Como el lado izquierdo de la ecuación depende solamente de  $t$  y el lado izquierdo solo de  $r$ , ambos deben de ser iguales a una constante de separación que tiene dimensiones de energía y que llamaremos  $E$ . Integrando la parte correspondiente a  $f$ , obtenemos:

$$f(t) = \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) \quad (1.14)$$

por otro lado la función  $\varphi(\mathbf{r})$  satisface la ecuación:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \varphi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}) \varphi(\mathbf{r}) = E\varphi(\mathbf{r}) \quad (1.15)$$

Esta ecuación es conocida como la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo en contraste con la ecuación (1.1) que es conocida como la ecuación dependiente del tiempo. La gran importancia de la ecuación independiente del tiempo estriba en que con ella obtenemos todas las soluciones de (1.1) que guardan un interés físico. Una solución particular de la ecuación de onda es

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \varphi(\mathbf{r}) \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) \quad (1.16)$$

## 1.6 Solución general de la ecuación de Schrödinger

Si el potencial  $V(\mathbf{x})$  depende exclusivamente de la posición y si conocemos la solución de la ecuación de la Schrödinger en un tiempo particular podemos obtener la solución formal para cualquier otro tiempo. Para ello se expande  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  en eigenfunciones de la energía al tiempo  $t$ , en cuyo caso tenemos que los coeficientes de la expansión también dependen de  $t$  :

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_B A_B(t) \varphi_B(\mathbf{r}) \quad A_B(t) = \int \varphi_B^*(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}, t) d^3r \quad (1.17)$$

sustituyendo (1.17) en la ecuación de onda (1.1) tenemos

$$i\hbar \sum_B \varphi_B(\mathbf{r}) \frac{dA_B(t)}{dt} = \sum_B A_B(t) E \varphi_B(\mathbf{r}) \quad (1.18)$$

por ortonormalidad de las  $\varphi_B$ , la ecuación (1.18) es equivalente a

$$i\hbar \frac{dA_B(t)}{dt} = E A_B(t)$$

que se integra y obtenemos

$$A_B(t) = A_B(t_0) \exp\left(-\frac{iE(t-t_0)}{\hbar}\right) \quad (1.19)$$

Note que  $\rho(E) = |A_B(t)|^2 = |A_B(t_0)|^2$  se mantiene constante en el tiempo.

Entonces si  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  es conocida para  $t = t_0$ , la solución para cualquier tiempo estará dada en términos de (1.17) y (1.19)

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_B A_B(t_0) \exp\left(-\frac{iE(t-t_0)}{\hbar}\right) \varphi_B(\mathbf{r}) \quad (1.20)$$

$$A_B(t_0) = \int \varphi_B^*(\mathbf{r}') \Psi(\mathbf{r}', t_0) d^3r' \quad (1.21)$$

De donde obtenemos

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \int \left[ \sum_B \varphi_B^*(\mathbf{r}') \varphi_B(\mathbf{r}) \exp\left(-\frac{iE(t-t_0)}{\hbar}\right) \right] \Psi(\mathbf{r}', t_0) d^3r' \quad (1.22)$$

que es la combinación lineal de las soluciones dadas en la ecuación (1.16).

## 1.7 Los paquetes de ondas.

Podemos considerar a los estados estacionarios como estados (no físicos) que representan en el límite a un paquete de ondas muy ancho. Es decir, podemos ver a los estados estacionarios como estados idealizados de los que podemos partir para construir los estados físicos reales usando el principio de superposición. Mostremos como se puede hacer esto. Ya que los estados estacionarios  $\Psi_E$  forman un conjunto completo, podemos expresar cualquier solución arbitraria de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo de la siguiente forma

$$\Psi(x, t) = \int \Psi_E(x) \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) f(E) dE, \quad (1.23)$$

donde la integral se extiende sobre todos los estados continuos y donde también se consideran todos los estados discretos.

Note que lo que estamos haciendo es superponer componentes que correspondan a todos los valores físicamente significativos de momento y energía, tomando cada componente con la debida amplitud y fase; la superposición debe garantizar que las ondas interfieran constructivamente dentro de volumen ocupado por la partícula, pero destructivamente fuera de él. Es decir estamos construyendo un paquete de ondas.

Supongamos que el momento está distribuido en el intervalo  $(k_1, k_2)$  con amplitud  $A(k)$ ; como para la partícula libre  $\omega = E/\hbar = \hbar k^2/2m$ , el paquete de ondas queda representado por

$$\Psi(x, t) = \int_{k_1}^{k_2} A(k) \exp\left[-\frac{i\hbar k^2}{2m} + ikx\right] dk. \quad (1.24)$$

Nótese que este paquete evoluciona con el tiempo, por lo su forma va cambiando conforme se propaga. Su anchura va creciendo conforme pasa el tiempo; fenómeno conocido como de dispersión de los paquetes de onda.

Un ejemplo particularmente interesante es el de la evolución de un paquete de ondas Gaussiano. La función de onda de uno de estos paquetes de onda al tiempo  $t = 0$  está dado por la función Gaussiana

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{(2\pi(\Delta x)^2)^{\frac{1}{4}}} \exp\left[i k_0 x - \frac{(x - x_0)^2}{4(\Delta x)^2}\right] \quad (1.25)$$

Esto es una onda plana, modulada por una función de peso Gaussiana centrada en  $x = x_0$  (que también se escribe: centrada en  $x = \langle x \rangle$ ). La cantidad  $\Delta x$  está

relacionada con el ancho de la función - si la anchura es pequeña, la magnitud de la función decae rápidamente a partir del valor  $x_0$ .

La desigualdad de Heisenberg nos dice que

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar^2}{2} \quad (1.26)$$

o ya que  $p = \hbar k$ , tenemos

$$\Delta x \Delta k \geq \frac{1}{2} \quad (1.27)$$

La Transformada de Fourier de la función Gaussiana es

$$\phi(k, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x, 0) e^{-ikx} dx = \left[ \frac{4(\Delta x)^2}{2\pi} \right]^{\frac{1}{4}} e^{-(\Delta x)^2 (k - k_0)^2} \quad (1.28)$$

que es otra función Gaussiana. Comparando con la ecuación Gaussiana original vemos que la función que acabamos de obtener tiene una anchura de  $\Delta k = 1/(2\Delta x)$ , es decir

$$\Delta x \Delta k = \frac{1}{2} \quad (1.29)$$

como este producto es general mayor que  $1/2$  y en este caso se cumple la igualdad, llamamos a este paquete de mínima incertidumbre.

## 1.8 Evolución temporal de un paquete de ondas.

Como se dijo en la sección anterior los paquetes de onda evolucionan en el tiempo, su forma va cambiando y su anchura va creciendo. Como un ejemplo simple tenemos una vez más el caso del paquete Gaussiano, ecuación (1.25), donde supondremos por facilidad que el paquete está inicialmente centrado en  $x_0 = 0$  y además su momento inicial promedio  $k_0 = 0$ . Usando la ecuación (1.21), tendremos

$$A_k = \left[ 2\pi L^2 (\Delta x)^2 \right]^{-\frac{1}{4}} \int_{-L/2}^{L/2} \exp \left[ -\frac{x^2}{4(\Delta x)^2} - ikx \right] dx \quad (1.30)$$

$$= \left[ \frac{8\pi(\Delta x)^2}{L^2} \right] \exp \left[ -k^2 (\Delta x)^2 \right] \quad (1.31)$$

donde se asume que  $L$  es tan grande que la contribución a la integral proveniente de  $|x| > L/2$  es despreciable. Sustituyendo lo anterior en la ecuación (1.20), tenemos:

$$\Psi(x, t) = \sum_k A_k e^{-iE_k t/\hbar} u_k(x) = \sum_k A_k e^{-i\hbar k^2 t/2m} u_k(x) \quad (1.32)$$

donde  $k = 2\pi n/L$  (porque escogemos la normalización de caja) y  $n$  toma todos los valores positivos, negativos y cero. Haciendo  $L$  arbitrariamente grande,  $n$  pasa a ser una función continua y podemos reemplazar la sumatoria por una integral  $\int dn$  que es equivalente a una integral sobre  $(L/2\pi) \int dk$ . Así:

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &= \left[ \frac{(\Delta x)^2}{2\pi^3} \right]^{\frac{1}{4}} \int_{-\infty}^{\infty} dk \exp \left[ -k^2 (\Delta x)^2 - \frac{i\hbar k^2 t}{2m} + ikx \right] \\ &= 2\pi \left( \Delta x + \frac{i\hbar t}{2m\Delta x} \right)^{-\frac{1}{2}} \exp \left( -\frac{x^2}{4(\Delta x)^2 + 2i\hbar t/m} \right) \end{aligned} \quad (1.33)$$

De aquí se tiene que la densidad de probabilidad se escribe como

$$|\Psi(x, t)|^2 = \left\{ 2\pi \left[ (\Delta x)^2 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2 (\Delta x)^2} \right] \right\}^{-\frac{1}{2}} \exp -\frac{x^2}{2 \left[ (\Delta x)^2 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2 (\Delta x)^2} \right]} \quad (1.34)$$

La ecuación anterior tiene la misma forma que la ecuación para  $|\Psi(x, 0)|^2$ , excepto que ahora  $(\Delta x)^2$  aparece como  $(\Delta x)^2 + \hbar^2 t^2 / 4m^2 (\Delta x)^2$ . Entonces el centro del paquete permanece en  $x = 0$  mientras la anchura del paquete se incrementa conforme  $t$  avanza. Mientras más pequeña sea la incertidumbre en la posición, más grande es la incertidumbre en la cantidad de movimiento y más rápidamente el paquete se dispersa; la parte dependiente del tiempo de la ecuación anterior,  $t(\Delta p)/m$ , es simplemente la distancia que viaja una partícula clásica de cantidad de movimiento  $\Delta p$  en el tiempo  $t$ . Note que el uso de otra normalización nos hubiera conducido a los mismos resultados.

## Capítulo 2

# La Barrera Rectangular y el paso de Paquetes de Onda a través de ella.

### 2.1 Introducción.

La mecánica cuántica nos permite estudiar fenómenos microscópicos que presentan comportamientos totalmente diferentes a los fenómenos de alguna manera análogos, que son estudiados en la mecánica clásica. Tal es el caso de la dispersión de partículas debida a un potencial que depende por ejemplo, solo de la posición. Si el problema que nos interesa estudiar es el de la dispersión de una partícula por un potencial que vale cero en todo lugar excepto en un intervalo de la posición en donde tiene un valor constante, tenemos el problema de la barrera rectangular de potencial. Este problema se presenta tanto en mecánica clásica como en mecánica cuántica. En el caso clásico tenemos que la partícula siempre es reflejada si su energía es menor a la energía del potencial repulsivo rectangular, y siempre es transmitida si su energía es mayor que la energía del potencial repulsivo. En el caso cuántico veremos que las probabilidades de reflexión y de transmisión de la partícula son finitas para la mayoría de las energías de la partícula.

Para tener una idea cabal de lo que sucede en el caso de la dispersión cuántica, estudiaremos en este capítulo el comportamiento de las partículas que son dispersadas por una barrera de potencial rectangular. En el camino habremos de encontrar fenómenos como el de tunelamiento en regiones clásicamente prohibidas. Primero hablaremos del caso estacionario para de ahí pasar a estudiar el caso de paquete Gaussiano que cruza una barrera de potencial. La discusión de este problema será de suma importancia para la comprensión de algunos de los conceptos centrales de esta tesis.

## 2.2 La barrera rectangular de potencial.

Estudiaremos el comportamiento de una partícula (o de un ensemble de partículas, si estamos usando la interpretación estadística de la Mecánica cuántica) cuando colisiona con un campo cuyo potencial es repulsivo, tipo barrera rectangular de ancho  $a$  y altura  $V(x)$ . Consideraremos el problema unidimensional. En este problema estamos interesados en el comportamiento de una partícula que se aproxima desde la región en donde los valores de  $x$  son negativos, colisiona y es reflejada y/o transmitida. Recuerde que en el caso clásico correspondiente la partícula siempre es reflejada si su energía es menor a la energía del potencial repulsivo rectangular, y siempre es transmitida si su energía es mayor que la energía del potencial repulsivo. En el caso cuántico veremos que las probabilidades de reflexión y de transmisión de la partícula son finitas para la mayoría de las energías de la partícula. Asumimos que  $V(x) = 0$  para  $x < 0$  y para  $x > a$  además  $V(x) = V_0$  para  $0 < x < a$ , donde  $V_0$  es positivo. Dividiremos nuestro estudio en dos casos: cuando la energía  $E$  de la partícula incidente esta bien definida y es menor que el potencial repulsivo  $V_0$  y cuando es mayor.

### 2.2.1 Caso $E < V_0$

Para facilitar las cosas, dividiremos el eje  $x$  en tres regiones fácilmente distinguibles y que se ilustran en la figura 2.2. En las regiones I y III donde se tiene que  $V(x) = 0$  tendremos como comportamiento general de la función de onda lo siguiente: en la región  $x < 0$  esperaremos que la función de onda represente a una partícula moviéndose hacia la derecha (partícula incidente) así como una partícula moviéndose hacia la izquierda (partícula reflejada); en la región  $x > a$  tendremos que la función de onda debe representar solamente a partículas que se mueven hacia la derecha (partículas transmitidas). Una partícula que se mueva en una región libre de fuerzas, con una energía bien definida y con un impulso bien definido  $p$  y puede ser representada por la función de onda  $\psi = e^{ipx/\hbar}$  si la partícula se mueve hacia la derecha y por la función de onda  $\psi = e^{-ipx/\hbar}$  si la partícula se mueve en la dirección  $-x$ . La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para regiones donde el potencial es nulo se escribe:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \quad (2.1)$$

de donde se tiene que las soluciones para estas regiones son:

$$\Psi_I = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, x \leq 0 \quad (2.2)$$

$$\Psi_{III} = Ce^{ik(x-a)}, x \geq a \quad (2.3)$$

donde

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (2.4)$$

para la región donde el potencia vale  $V_0$  tenemos:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V_0\Psi = E\psi \quad (2.5)$$

cuya solución está dada por

$$\Psi_{II} = Fe^{-qx} + Ge^{qx}, 0 \leq x \leq a \quad (2.6)$$

donde

$$q = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \quad (2.7)$$

y además  $A, B, C, F, G \in \mathbb{C}$ .

Aplicando las condiciones de continuidad:

$$\Psi_I(0) = \Psi_{II}(0); \Psi_{II}(a) = \Psi_{III}(a) \quad (2.8)$$

$$\Psi'_I(0) = \Psi'_{II}(0); \Psi'_{II}(a) = \Psi'_{III}(a) \quad (2.9)$$

llegamos al siguiente sistema de ecuaciones:

$$\begin{aligned} A + B &= F + G \\ ikA - ikB &= -qF + qG \\ Fe^{-aq} + Ge^{aq} &= C \\ -qFe^{-aq} + qGe^{aq} &= ikC \end{aligned} \quad (2.10)$$

de donde

$$G = A \left[ \frac{-i(q + ik)k e^{aq}}{(q^2 - k^2) \sinh aq - i2kq \cosh aq} \right] \quad (2.11)$$

$$C = G \left[ \frac{2qe^{aq}}{q + ik} \right] \quad (2.12)$$

de las últimas expresiones (2.11) y (2.12), fácilmente obtenemos la razón  $t = C/A$  :

$$t = \frac{C}{A} = \frac{-2ikq}{(q^2 - k^2) \sinh aq - i2kq \cosh aq} \quad (2.13)$$

de nuestro sistema de ecuaciones (2.10) también obtenemos:

$$B = G \left[ \frac{(q - ik) \sinh aq}{ike^{-aq}} \right] \quad (2.14)$$

con la ecuación anterior (2.14) y usando la ecuación para  $G$  (2.11), obtenemos la razón  $r = B/A$  :

$$r = \frac{B}{A} = \frac{-(q^2 + k^2) \sinh aq}{(q^2 - k^2) \sinh aq - i2kq \cosh aq} \quad (2.15)$$

De los resultados anteriores obtenemos los coeficientes de transmisión  $T$  y de reflexión  $R$  :

$$T = t^*t = \frac{4k^2q^2}{4k^2q^2 + (q^2 + k^2)^2 \sinh^2 aq} \quad (2.16)$$

$$R = r^*r = \frac{(q^2 + k^2)^2 \sinh^2 aq}{4k^2q^2 + (q^2 + k^2)^2 \sinh^2 aq} \quad (2.17)$$

de las ecuaciones para  $T$  y para  $R$  obtenemos:

$$R + T = 1 \quad (2.18)$$

Si definimos a

$$K_0 = \frac{2mV_0}{\hbar^2} \quad (2.19)$$

y recordamos (2.4) y (2.7) tendremos que

$$K_0^2 = k^2 + q^2 \quad (2.20)$$

y además :

$$r = \frac{-K_0^2 \sinh aq}{(q^2 - k^2) \sinh aq - i2kq \cosh aq} \quad (2.21)$$

$$t = \frac{-2ikq}{(q^2 - k^2) \sinh aq - i2kq \cosh aq} \quad (2.22)$$

$$R = \frac{K_0^4 \sinh^2 aq}{4k^2q^2 + K_0^4 \sinh^2 aq} \quad (2.23)$$

$$T = \frac{4k^2q^2}{4k^2q^2 + K_0^4 \sinh^2 aq} \quad (2.24)$$

### 2.2.2 Caso $E > V_0$

Para caso en que la energía  $E$  de la partícula es mayor que la energía  $V_0$  de la barrera de potencial podemos realizar un análisis completamente similar al que ya hemos hecho para calcular  $r, t, R, T$  en el caso anterior. Para facilitar nuestro propósito definimos  $q'$  como:

$$q' = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar} \text{ es decir } q = i q' \quad (2.25)$$

y sustituimos esta cantidad en todas las expresiones anteriores donde aparece  $q$ . Note que esto implica que ahora tendremos  $\sinh(i a q') = i \sin(a q')$  y además  $\cosh(i a q') = \cos(a q')$  y  $K_0'^2 = k^2 - q'^2$ . Esto nos lleva directamente a:

$$r = \frac{K_0'^2 \sin a q'}{(q'^2 + k^2) \sin a q' + i 2 k q' \cos a q'} \quad (2.26)$$

$$t = \frac{2 i k q'}{(q'^2 + k^2) \sin a q' + i 2 k q' \cos a q'} \quad (2.27)$$

$$R = \frac{K_0'^4 \sin^2 a q'}{4 k^2 q'^2 + K_0'^4 \sin^2 a q'} \quad (2.28)$$

$$T = \frac{4 k^2 q'^2}{4 k^2 q'^2 + K_0'^4 \sin^2 a q'} \quad (2.29)$$

Una vez podemos comprobar que en este caso:

$$R + T = 1$$

## 2.3 Definición de $r$ y $t$ .

En la sección anterior apreciaron las cantidades  $r = \frac{B}{A}$  y  $t = \frac{C}{A}$  que nombraremos de aquí en adelante como amplitudes de reflexión y transmisión respectivamente, Note que  $R$  y  $T$  son reales pero  $r$  y  $t$  son dos cantidades complejas por lo que podemos escribir:

$$r = |r| e^{i\phi} = \sqrt{R} [\cos \phi + i \sin \phi] \quad (2.30)$$

$$t = |t| e^{i\theta} = \sqrt{T} [\cos \theta + i \sin \theta] \quad (2.31)$$

donde  $\phi$  y  $\theta$  son las fases complejas asociadas a la reflexión y a la transmisión respectivamente. Note también que podemos calcular  $R$  y  $T$  si tenemos  $r$  y  $t$ :

$$\begin{aligned} T &= |t|^2 \\ R &= |r|^2 \end{aligned} \quad (2.32)$$

## 2.4 El paso de un paquete de onda Gaussiano por una barrera de potencial.

Analicemos ahora la situación donde tenemos un paquete de ondas inicialmente angosto, con energía media  $E_0$  y amplitud inicial  $\Psi(x, 0)$ , que cruza una barrera de potencial.

El paquete incidente puede ser expresado en términos de las soluciones de partícula libre, en la forma

$$\Psi(x, t) = \int A(\omega) e^{i(kx - \omega t)} dk \quad (2.33)$$

en donde  $\omega$  representa la energía media en unidades de  $\hbar$ :  $\omega = E/\hbar = \hbar k^2/2m$ .

Consideremos que el paquete inicial consiste en partículas que se lanzan desde la posición  $x_0$  con energías distribuidas alrededor de  $E_0 = \hbar\omega_0 = \hbar k_0^2/2m$  y que esta distribución tiene un máximo agudo alrededor de este valor de energía; esto nos permite escribir:

$$\Psi(x, 0) = 2\pi g(\omega - \omega_0) \delta(x - x_0), \quad (2.34)$$

en donde  $g(z)$  es angosta y tiene un máximo agudo en  $z = 0$ ; el factor numérico  $2\pi$  se introduce por comodidad. Por otra parte, en  $t = 0$ , se obtiene

$$\Psi(x, 0) = \int A(\omega) e^{i k x} dk; \quad (2.35)$$

tomando a transformada inversa

$$A(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int \Psi(x, 0) e^{-i k x} dx \quad (2.36)$$

y sustituyendo el valor de  $\Psi(x, 0)$  queda

$$A(\omega) = \int g(\omega - \omega_0) \delta(x - x_0) e^{-i k x} dx = g(\omega - \omega_0) e^{-i k x_0}. \quad (2.37)$$

Introduciendo este resultado en la expresión para  $\Psi(x, t)$ , obtenemos

$$\Psi_{inc}(x, t) = \int g(\omega - \omega_0) e^{i k(x - x_0) - i \omega t} dk \quad (2.38)$$

Este es el paquete que incide sobre a barrera; para construir el paquete transmitido tenemos que recordar que cada onda plana es transmitida por una barrera de potencial modificando su amplitud pero no su frecuencia; luego la amplitud de la onda transmitida la podemos escribir a partir de la expresión para  $\Psi_{inc}(x, t)$  modificando

a amplitud de cada componente por un factor  $S(\omega)$ , cuyo módulo evidentemente debe ser menor que la unidad,  $|S(\omega)| \leq 1$  :

$$\Psi_{trans}(x, t) = \int g(\omega - \omega_0) S(\omega) e^{ik(x-x_0) - i\omega t} d\omega \quad (2.39)$$

Es claro que  $S(\omega)$  juega el papel de una amplitud de transmisión de una componente de la frecuencia  $\omega$ , en el sentido de que

$$T(\omega) = |S(\omega)|^2; \quad (2.40)$$

invirtiendo esta expresión, podemos escribir  $S(\omega)$  en la forma

$$S(\omega) = \sqrt{T(\omega)} e^{i\delta(\omega)}. \quad (2.41)$$

Esta fórmula nos dice que  $\sqrt{T(\omega)}$  es el factor por el cual se reduce la amplitud de la componente de frecuencia  $\omega$ , mientras que  $\delta(\omega)$  es la fase producida por su retardo (si no hay potencial  $T = 1$  y  $\delta = 0$ , evidentemente). Vamos a limitarnos al caso en que la magnitud de  $T$  varía lentamente con la energía, de tal manera que podemos escribir aproximadamente  $T(\omega) \approx T(\omega_0)$ ; asimismo supondremos que la fase puede ser aproximada hasta términos lineales en la variable  $\epsilon$ ,

$$\epsilon = \omega - \omega_0. \quad (2.42)$$

Con estas consideraciones, escribimos

$$\begin{aligned} S(\omega) &= \sqrt{T(\omega_0 + \epsilon)} \exp(i\delta(\omega_0 + \epsilon)) \\ &\approx \sqrt{T(\omega_0)} \exp\left(i\left(\delta(\omega_0) + \frac{\partial \delta}{\partial \omega} \epsilon\right)\right) \\ &= S(\omega_0) \exp\left(i \frac{\partial \delta}{\partial \omega} \epsilon\right) \end{aligned} \quad (2.43)$$

A su vez, como función de la variable  $\epsilon$  y hasta términos lineales en ella,  $k$  se escribe como

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} = \sqrt{\frac{2m\omega_0}{\hbar}} \left(1 + \frac{\epsilon}{2\omega_0}\right) = k_0 + \frac{m}{p_0} \epsilon. \quad (2.44)$$

Introducimos ahora la aproximación para  $S(\omega)$  en la expresión para  $\Psi_{trans}(x, t)$ ; utilizando que  $\epsilon = \omega - \omega_0$  y la expresión para  $k$  que acabamos de obtener, podemos desarrollar entorno a  $k_0$  y escribir la amplitud transmitida en la forma

$$\begin{aligned} \Psi_{trans}(x, t) &= S(\omega_0) \int g(\epsilon) \exp\left(i\frac{\partial\delta}{\partial\epsilon}\epsilon\right) \exp\left(i\left(k_0 + \frac{m}{p_0}\epsilon\right)(x - x_0) - it(\omega_0 + \epsilon)\right) \frac{m}{p_0} d\epsilon \\ &= S(\omega_0) \exp(ik_0(x - x_0) - it\omega_0) \int g(\epsilon) \exp\left[i\frac{m}{p_0}\left(x - x_0 - \frac{p_0}{m}\left(t - \frac{\partial\delta}{\partial\epsilon}\right)\right)\right] \frac{m}{p_0} d\epsilon. \end{aligned} \quad (2.45)$$

El factor anterior a la integral es la componente central del paquete de energía  $\omega_0$  y momento  $k_0$ ; vemos que su amplitud ha sido reducida por el potencial  $S(\omega_0)$ . Mucho más interesante, sin embargo, es la integral, que nos da la envolvente del paquete de  $\Psi_{inc}$ , pero con la escala del tiempo desplazada en la cantidad

$$\Delta t = \frac{\partial\delta}{\partial\epsilon} = \hbar \frac{\partial\delta}{\partial E}; \quad (2.46)$$

esta expresión establece la relación buscada entre la fase  $\delta$  y el tiempo de retardo.

## Capítulo 3

# Solución Numérica de la Ecuación de Schrödinger.

### 3.1 Introducción.

En esta parte de nuestro trabajo daremos un tratamiento numérico al problema cuántico de la dispersión de un paquete de ondas por una barrera de potencial usando el *método pseudoespectral*. El problema de dispersión ha sido tratado numéricamente por varios autores, [Goldberg, A., *et al*, 1967], [Press, 1986], [Gould, 1988], [Koonin, 1986] usando diversos enfoques pero básicamente su método de solución ha consistido en resolver la ecuación de Schrödinger por medio diferencias finitas. Aquí nos apartaremos un poco de este enfoque para usar un método que deriva de alguna manera de los métodos espectrales clásicos. Aunque nosotros hemos resuelto la ecuación de onda por medio del método pseudoespectral, obtendremos como se verá, los mismos resultados que otros autores que no usan nuestro método de solución pero con limitaciones muy diferentes en las condiciones iniciales que imponen el manejo y la propagación de errores. Dicho sea de paso que, en el caso de las soluciones dadas en términos de diferencias finitas se imponen fuertes restricciones iniciales para que se pueda resolver el problema. En nuestro caso se verá que las restricciones no son tan fuertes, de manera que estamos ante un método que tiene ciertas ventajas sobre los otros aunque no debemos de olvidar que también tiene sus limitaciones. Un trabajo clásico que soluciona el problema, y con el que por fuerza tendremos que compararnos, es el que exponen Goldberg y sus colaboradores en su ya famoso artículo intitulado "Computer Generated Motion of One-Dimensional Quantum Mechanical Transmission and Reflection Phenomena" y que sigue el esquema de discretización de Crank-Nicholson para la ecuación de Schrödinger [Goldberg, A., 1967]. Existen otros métodos de solución de nuestro problema como el que exponen Gould y Tobochnik en su libro "Computer Simulation Methods" y que

consiste en utilizar las soluciones estacionarias de la ecuación de Schrödinger para poder obtener las soluciones dependientes del tiempo. Nos hemos querido apartar de los caminos ya mencionados porque consideramos que el método que se ha utilizado no solo es tan bueno como el desarrollado por Goldberg y por otros autores sino que es considerablemente más rápido a la hora de obtener las soluciones de nuestra ecuación en una computadora personal. Cabe señalar que también se ha desarrollado una interfase gráfica que nos permite ver la evolución de un paquete de ondas (en este caso Gaussiano) libre o seguir paso a paso la colisión contra una barrera y el paquete. Esto es importante señalarlo porque también se puede usar nuestro programa con fines didácticos.

### 3.2 Formulación del problema.

Como vimos en el capítulo dos de esta tesis, el tratamiento tradicional del problema de reflexión y transmisión de partículas que inciden sobre una barrera de potencial, soluciona el problema en una manera *independiente del tiempo* y requiere una solución de la ecuación  $H\Psi = E\Psi$ , sujeta a las condiciones siguientes:

$$\begin{aligned} \Psi &= e^{iks} + Re^{-iks}, & \text{para } z \text{ grande y negativa,} \\ &= Te^{iks}, & \text{para } z \text{ grande y positiva.} \end{aligned}$$

donde se tiene además que el potencial es de corto alcance y está localizado cerca de  $x = 0$  y donde la partícula que colisiona incide desde la izquierda moviéndose hacia la derecha.

Como se vió en el capítulo uno, a partir de las soluciones estacionarias podemos construir cualquier solución dependiente del tiempo. De manera que, si podemos solucionar el problema independiente del tiempo para un potencial dado, tendremos también la solución temporal.

Nuestro propósito es describir el movimiento de un paquete de ondas -en particular un paquete Gaussiano- que evoluciona en el tiempo y se mueve hasta colisionar con una barrera de potencial de manera que tendremos una transmisión y reflexión del paquete de ondas. Habremos de solucionar el problema *resolviendo directamente la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo sin recurrir a las soluciones estacionarias*. Para ello usaremos un método numérico que solucione el problema.

Si recurriéramos a las soluciones estacionarias del problema, tendríamos que una solución formal de la ecuación de onda estaría dada en términos de los eigenvalores y de las eigenfunciones de los estados ligados:  $Hu_n = E_n u_n$ , y en términos de los

eigenvalores y eigenfunciones del continuo  $H u_k = E(k)u_k$  :

$$\Psi(x, t) = \sum_n a_n e^{-iE_n t} u_n(x) + \int dk a(k) e^{-iE(k)t} u_k(x),$$

donde

$$a_n = \langle u_n, \Psi(x, 0) \rangle$$

y además

$$a(k) = \langle u_k, \Psi(x, 0) \rangle$$

donde  $\Psi(x, 0)$  es el estado inicial del sistema. Este procedimiento no se adopta, en general por ningún autor por varias razones. Primero, para casi todos los potenciales, las eigenfunciones y los eigenvalores tienen que ser determinados numéricamente. Aún si -para quitarnos de encima la parte continua del espectro y convertirla en un espectro discreto- cuantisáramos en una región grande pero finita del espacio, habría un número muy grande de estados que tendríamos que calcular. Segundo, aún conociendo todos los eigenvalores y eigenfunciones del problema, la tarea de calcular  $\Psi(x, t)$  no es trivial considerando que lo tendremos que hacer para cada  $x$  y en cada  $t$ . Y tercero, tendríamos que restringirnos a estados iniciales  $\Psi(x, 0)$  que fueran una combinación limitada de eigenestados o en su defecto estaríamos forzados a realizar un número muy grande de integraciones numéricas para evaluar  $a_n$  y  $a(k)$ .

Para evitar todos estos problemas resolveremos *directamente* la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo usando un método pseudoespectral.

### 3.3 El método semiespectral.

#### 3.3.1 Un poco de historia del método semiespectral en la solución de la ecuación de Schrödinger.

En el año de 1982, M.D. Feit publicó el artículo "Solution of The Schrödinger Equation by a Spectral Method" [Feit *et al*, 1982] en el Journal of Computational Physics, donde proponía un nuevo método de solución de la ecuación de Schrödinger. Apartándose de los métodos tradicionales para resolver el problema que se basan en la diagonalización mediante iteraciones numéricas de una matriz que representa el Hamiltoniano independiente del tiempo, encontró la solución de la ecuación de onda basándose en las propiedades espectrales de las soluciones de la *ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo*. Probó su método solucionando el problema de

Hénon -Heiles en dos dimensiones y el problema del pozo doble asimétrico. Este artículo sentó las bases para la solución que aquí presentamos. Su rapidez y precisión son notables si las comparamos con las que arrojan otros métodos. Un estudio mas a fondo de la precisión de este método y su comparación con otros métodos de propagación lo encontraremos en el artículo "A Comparison of Different Propagation Schemes for the Time Dependent Schrödinger Equation" [Leforestier *et al*, 1990].

### 3.3.2 El método semiespectral en nuestro problema.

En una dimensión la solución de la ecuación de Schrödinger es

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

$$= (T + V)\Psi(x, t) \quad (3.1)$$

donde  $m$  es la masa de la partícula,  $T$  es el operador de energía cinética y  $V$  es el potencial tomado como un operador. Para resolver nuestra ecuación resulta tentador trabajar en el espacio transformado de Fourier (momental) sobre todo para simplificar al operador de energía cinética  $T$  y simplificar nuestro problema pero esto resultaría inútil para dar un tratamiento al término  $V$  de la energía potencial. Entonces lo que se antoja es dar un cierto tratamiento al término de energía cinética y otro diferente al término de energía potencial. En particular nos gustaría tratar al término de energía potencial en el espacio de coordenadas, donde es simplemente una función, y tratar al término de energía cinética en el espacio transformado que es donde se puede evaluar de una manera simple (y precisa).

De acuerdo a lo que se ha visto en el capítulo uno de esta tesis, tenemos que una solución formal a la ecuación de Schrödinger es :

$$\psi(x, t) = e^{-i(T+V)(t-t_0)/\hbar} \psi(x, t_0). \quad (3.2)$$

donde es importante recordar que la exponencial de un operador se define como

$$e^A = 1 + A + \frac{1}{2!} AA + \frac{1}{3!} AAA + \dots \quad (3.3)$$

por conveniencia, definimos  $\delta_t = t - t_0$ , de tal manera que la evolución temporal de nuestra ecuación de onda esta dada por

$$\psi(x, t) = e^{-i(T+V)\delta_t/\hbar} \psi(x, t_0). \quad (3.4)$$

Esta ecuación nos brinda una manera de calcular  $\psi(x, t)$  en cualquier tiempo  $t$  si conocemos  $\psi(x, t_0)$  en el instante de tiempo  $t_0$ . Note que ya que tenemos la exponencial de una suma de dos operadores es muy tentador escribir

$$e^{-i(T+V)\delta t/\hbar} = e^{-iT\delta t/\hbar} e^{-iV\delta t/\hbar}. \quad (3.5)$$

Desafortunadamente esta expresión es incorrecta. Pero si fuera cierta, se podría separar el operador de evolución temporal en dos términos, y tratar a cada uno de los términos por separado. Como veremos más adelante, aunque esta igualdad no es válida, la descomposición nos puede servir como una aproximación muy útil. A esta técnica de separar el operador de evolución en dos factores, generalmente se le llama método de separación de operadores (*split operator approach*), y es ampliamente aplicada en muchos otros campos.

De acuerdo al teorema de Baker-Campbell-Hausdorff [Baker, H.F., 1904], [Campbell, J.E., 1898], sabemos que

$$e^A e^B = e^C \quad (3.6)$$

si y solo si

$$C = A + B + \frac{1}{2}[A, B] + \dots \quad (3.7)$$

Entonces, de acuerdo al teorema anterior, nuestra ecuación (4.5) de separación será correcta solamente si  $T$  y  $V$  conmutan ¡cosa que usualmente no ocurre! Sin embargo este teorema nos es extremadamente útil para desarrollar aproximaciones. Por ejemplo, sabemos que la ecuación (4.5), que simplemente ignora al conmutador, tiene un error del orden de  $O(\delta t)$ . Se puede obtener una mejor aproximación usando una descomposición geométrica del producto, o sea, usando la expresión

$$e^{-i(T+V)\delta t/\hbar} \approx e^{-iV\delta t/2\hbar} e^{-iT\delta t/\hbar} e^{-iV\delta t/2\hbar}, \quad (3.8)$$

que tiene un error del orden de  $O(\delta t^2)$ .

Con lo anteriormente dicho estamos ya listos para resolver nuestro problema cuántico de dispersión, usando una mezcla de técnicas que actúan en el espacio de coordenadas espaciales y en el espacio de coordenadas momentales. Este método es llamado el método *pseudo-espectral*. Imaginemos que conocemos  $\psi(x, t_0)$  -esto es que tenemos un arreglo que contiene a  $\psi_j = \psi(x_j, t_0)$  en los puntos  $x_j$  de una malla en cierto tiempo  $t_0$ . Usaremos la transformada rápida de Fourier (FFT) para evaluar las transformaciones que necesitemos, lo que necesariamente implica que el número de puntos en la malla debe ser una potencia de dos. Debido a que los dos espacios, de coordenadas y momental, están íntimamente ligados tendremos que el

dominio de las  $x$  determinará el espaciamiento en la malla de las  $k$ , y viceversa.  $\psi$  en un tiempo  $t$  estará dada de manera aproximada por

$$\psi(x, t) \approx e^{-iV\delta_t/2\hbar} e^{-iT\delta_t/\hbar} e^{-iV\delta_t/2\hbar} \psi(x, t_0) \quad (3.9)$$

Ya que  $V$  es una función, es fácilmente evaluable en  $x_j$ . Podemos definir una cantidad intermedia  $\phi(x)$  como

$$\phi(x) = e^{-iV\delta_t/2\hbar} \psi(x, t), \quad (3.10)$$

y evaluarlo en la malla como

$$\phi(x_j) = e^{-iV(x_j)\delta_t/2\hbar} \psi(x_j, t_0). \quad (3.11)$$

Esta evaluación es completamente directa: en el espacio de coordenadas, es una simple secuencia de operaciones aritméticas. De hecho, si  $\delta_t$  es constante durante el cálculo, tendremos que evaluar un arreglo de estos factores exponenciales solamente una vez, almacenarlos, y usarlos cuando los necesitemos, sin necesidad de reevaluar posteriormente.

El siguiente paso será determinar el resultado de la exponencial de la energía cinética que opera sobre  $\phi$ ,

$$e^{-iT\delta_t/\hbar} \phi(x_i). \quad (3.12)$$

Este es un término problemático en el espacio coordenado. ¡Contiene el operador segunda derivada exponenciado! Pero en el espacio transformado, la derivada es fácil de evaluar, como hemos visto. Para evaluar el término necesitaremos  $\Phi(k)$ , que es la transformada de Fourier de  $\phi(x)$ ,

$$\Phi(k) = F[\phi(x)] = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(x) e^{-ikx} dx, \quad (3.13)$$

y la relación inversa

$$\phi(x) = F^{-1}[\Phi(k)] = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(k) e^{+ikx} dk. \quad (3.14)$$

Entonces

$$\begin{aligned} & e^{-iT\delta_t/\hbar} \phi(x) \\ &= e^{-iT\delta_t/\hbar} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(k) e^{ikx} dk \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \left[ 1 + \frac{-iT\delta_t}{\hbar} + \frac{(-i)^2 TT\delta_t}{2! \hbar^2} + \dots \right] \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(k) e^{ikx} dk \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(k) \left[ 1 + \frac{-iT\delta_t}{\hbar} + \frac{(-i)^2 TT\delta_t}{2! \hbar^2} + \dots \right] e^{ikx} dk \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(k) \left[ 1 + \frac{-i}{\hbar} \frac{-\hbar^2 \delta_t}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2!} \left( \frac{-i}{\hbar} \frac{-\hbar^2 \delta_t}{2m} \right)^2 \frac{d^4}{dx^4} + \dots \right] e^{ikx} dk \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(k) \left[ 1 + \frac{-iT(k)\delta_t}{\hbar} + \frac{1}{2!} \left( \frac{-iT(k)\delta_t}{\hbar} \right)^2 + \dots \right] e^{ikx} dk \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(k) \left[ e^{-iT(k)\delta_t/\hbar} \right] e^{ikx} dk \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-iT(k)\delta_t/\hbar} \Phi(k) e^{ikx} dk \\
&= F^{-1} \left[ e^{-iT(k)\delta_t/\hbar} \Phi \right], \tag{3.15}
\end{aligned}$$

donde hemos introducido el término de energía cinética

$$T(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \tag{3.16}$$

La función de onda en el tiempo  $t$  se obtiene después, multiplicando al final por el factor correspondiente al potencial. Así, la propagación completa del paquete está dada por

$$\psi(x, t) \approx e^{-iV(x)\delta_t/2\hbar} F^{-1} \left[ e^{-iT(k)\delta_t/\hbar} F \left[ e^{-iV(x)\delta_t/2\hbar} \psi(x_j, t_0) \right] \right]. \tag{3.17}$$

El algoritmo salta de adelante hacia atrás, al espacio transformado y de regreso, entretejiendo una solución que contiene contribuciones del espacio transformado y del espacio de coordenadas. El código es bastante simple y no contiene grandes complicaciones. Si la FFT es usada para calcular las transformadas de Fourier, obtenemos resultados eficientes y precisos.

Para resumir, escribiremos en pseudocódigo, un esqueleto del programa que soluciona nuestra ecuación de onda:

```

/*-----*/
Programa que resuelve la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo
en el caso de un paquete Gaussiano usando un método seudoespectral

```

```

/* declaración de variables*/
float re_psi[ ], im_psi[ ], rephi[ ], imphi[ ];
float .....
/* pide los parámetros del problema */
parametros(xmin, xmax, energia, sigma, ..... )
/* Inicializa la función de onda en la malla cuando t = 0*/
inic_psi(re_psi, im_psi)
/* Inicializa los arreglos ExpT y ExpV */
inicExpT(re_ExpT, im_ExpV)
EvalExpV(reExpV, imExpV)
/* inicializa otras variables como paso de tiempo delta.t*/
delta.t = 5.0e-18
/* Empieza el ciclo hasta que reloj > MaxTiempo */
reloj = reloj + delta.t
/* Primer paso: multiplicamos psi por el arreglo ExpV y obtengo phi */
MultpsiExpV(re_psi, im_psi, reExpV, imExpV)
/* Segundo paso: multiplico phi por exp de T para lo cual : */
/* a) transformo la función phi */
FFT(rephi, imphi, potencia, 1)
/* b) multiplico por ExpT */
MultExpTphi(re_ExpT, im_ExpV, rephi, imphi )
/* c) a este producto le aplico la transformada inversa de Fourier*/
FFT(rephi, imphi, potencia, -1)
/* Tercer paso y finale: multiplicamos por ExpV, otra vez */
psi2final(re_psi, im_psi, rephi, imphi, reExpV, imExpV, puntosx)
/* Grafica la función de probabilidad psi**2 */
grafica(psi2, pasos, puntosx, Maxpasos.t)
/* fin del ciclo*/
fin del programa
/*-----*/

```

### 3.4 Criterios y restricciones para escoger las condiciones iniciales.

Vamos a tratar el problema de la evolución temporal de un paquete de ondas Gaussiano (aunque podríamos escoger otro tipo de paquete) que se mueve en una región

donde no existe potencial alguno y este mismo problema cuando el paquete se propaga en una región donde existe un potencial correspondiente a una barrera de potencial rectangular. Como se dijo en capítulo uno, la función de onda de uno de estos paquetes de onda al tiempo  $t = 0$  está dado por la función Gaussiana

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{(2\pi(\Delta x)^2)^{\frac{1}{2}}} \exp \left[ i k_0 x - \frac{(x - x_0)^2}{4(\Delta x)^2} \right]$$

Esto es una onda plana, modulada por una función de peso Gaussiana centrada en  $x = x_0$  (que también se escribe: centrada en  $x = \langle x \rangle$ ). La cantidad  $\Delta x$  (que en la literatura se identifica muchas veces con la letra griega  $\sigma_0$ ) está relacionada con el ancho de la función – si la anchura es pequeña, la magnitud de la función decae rápidamente a partir del valor  $x_0$ . Recuerde además que, como vimos en el capítulo uno, sólo el cuadrado de la función de onda tiene un significado físico y que  $\Delta x$  es la mitad del ancho del cuadrado de la función de onda, medido a partir de los puntos en los cuales la función de onda al cuadrado vale  $1/e$  de su valor máximo. El factor  $e^{i k_0 x}$  produce el efecto de desplazar nuestro paquete hacia la derecha con un impulso  $k_0$ .

Primero considere que no tenemos un potencial ( $V(x) = 0$ ), y que tenemos un paquete de ondas evolucionando en el espacio libre. Es de primera importancia hacer notar el hecho de que la solución que le estamos dando a nuestro problema no conlleva aproximación alguna a la hora de calcular las derivadas que aparecen en la ecuación de onda (como es típico en el caso de las soluciones dadas en términos de diferencias finitas). Esto nos dará una ventaja enorme sobre otros métodos de solución, en donde imponen restricciones muy fuertes sobre las condiciones iniciales para que la solución converja (véase [Goldberg *et al*, 1967]). Nuestra solución también tiene sus restricciones pero nacen fundamentalmente de los puntos que se tienen que tomar en cuenta para evitar los errores típicos al usar la transformada rápida de Fourier (FFT) cuando se resuelven ecuaciones diferenciales. Cuando usamos FFT, tenemos que el espaciamiento en la malla espacial (de las  $x$ 's) y el espaciamiento en el espacio momental (de las  $k$ 's) *no son independientes el uno del otro*. De hecho se tiene que si llamamos  $\delta_x$  al espaciamiento en las  $x$ 's y si  $\delta_k$  el espaciamiento momental, tenemos que

$$\delta_k = \frac{2\pi}{N\delta_x}$$

donde  $N$  denota el número de puntos de la malla menos uno (es decir el primer punto de la malla se llama cero, el último se llama  $N$ ). El tamaño del espaciamiento  $\delta_x$

se calcula fácilmente, una vez que damos las dimensiones del espacio  $x$  en donde se desarrollará la acción. Si llamamos  $L$  a esta longitud total en la coordenada  $x$ , y llamamos  $N$  al número de puntos de la malla menos uno, tenemos

$$\delta_x = \frac{L}{N}$$

es importante hacer notar que el número total de puntos en la malla ( $N + 1$ ) tiene que ser una potencia de dos, debido a que cada punto de nuestra función en el espacio de coordenadas  $x$  sufrirá una transformación rápida de Fourier. Como se sabe la FFT trabaja en espacios que tienen un número de puntos que son, necesariamente, una potencia de dos (véase el libro FFT and its applications [Brigham,1988]).

Tomemos como nuestro paquete inicial a un paquete de ondas Gausiano que tenga como anchura  $\Delta x = \sigma_0 = 450 \text{ \AA}$ . Tomemos tentativamente una longitud de  $L = 6000 \text{ \AA}$ , centrada en  $x = 0$ , y usemos  $N = 512$  puntos en la malla. Con datos tenemos que  $\delta_x \approx 11.742 \text{ \AA}$  que será adecuado para que todos los detalles importantes del paquete de ondas sean *muestreados*, es decir, si el paquete tiene una anchura  $\sigma_0 = 450 \text{ \AA}$ , entonces al menos habrá  $\sigma_0/\delta_x \approx 38$  puntos de la función Gaussiana que serán muestreados inicialmente para seguir su evolución. Se debe hacer notar que conforme el tiempo pasa el paquete evoluciona y se *ensancha* en el espacio coordinado  $x$  (véase el Capítulo uno, ecuación (1.34)) de donde podemos concluir que conforme pasa el tiempo tenemos mas y mas puntos que nos muestrean la evolución del paquete. De aquí podemos enunciar la primera condición que debemos de cumplir: *Escójase  $\delta_x$  suficientemente pequeño como para que la función sea adecuadamente muestreada por un número grande de puntos.*

El siguiente punto a tomar en cuenta concierne al tamaño  $L$  de nuestra rejilla en el espacio coordinado  $x$  y al número de puntos ( $N + 1$ ) de la malla. La FFT impone periodicidad en la función de onda, y aunque nosotros tendemos a ver que nuestro paquete de ondas se propague hacia  $\infty$ , la realidad computacional es que los *extremos izquierdo y derecho de la malla son el mismo punto!* Entonces si alguna porción de nuestro paquete de onda se mueve mas allá del extremo derecho de nuestra rejilla (o malla), se enrolla y aparece en el extremo izquierdo de la misma, dando como resultado una interferencia entre la parte de la función de onda expresada desde antes en el extremo izquierdo de la rejilla y la parte que se enrolló. Esta interferencia carece de sentido físico y es una mera consecuencia de usar la FFT. Entonces nuestra siguiente restricción es: *Usemos siempre una rejilla lo suficientemente grande como para que toda la física del problema se dé lejos de los extremos de la rejilla.* Entonces se debe de tener una  $L$  lo suficientemente grande pero debemos de cuidar que  $\delta_x$  no

aumente de tamaño para poder muestrear la función de onda adecuadamente. El único remedio para esto es aumentar  $N$ , es decir, el número de puntos de la rejilla.

Otro de los puntos a tomar en cuenta es el referente a la distribución de los momentos. La función de onda tiene una cierta distribución en el espacio  $k$ , y existen componentes que podían estar mas allá de lo que se denomina frecuencia de Nyquist o límite de Nyquist. La FFT toma a todas las componentes mayores que la frecuencia de Nyquist como negativas y no las incluye correctamente para describir a la función de onda adecuadamente. Esto es en esencia un problema de enrollamiento pero en el espacio  $k$ . El remedio para evitar esto es simple y se resume de la manera siguiente: *Escójase la rejilla en el espacio momental lo suficientemente grande como para que todas las componentes físicas relevantes del problema estén incluidas dentro del límite de Nyquist.* Esto se logra teniendo un  $\delta_x$  suficientemente pequeño ya que el límite de Nyquist está dado por:  $k_{Nyquist} = N\delta_k/2 = \pi/\delta_x$ . Para saber si nuestras componentes  $k$  se salen del límite de Nyquist podemos obtener la distribución de la función de onda en el espacio momental y verificar si existen componentes negativas. En caso de que si existen tenemos, como ya se dijo, que hacer mas pequeño el valor de  $\delta_x$ . Debemos de evitar los problemas de *enrollamiento* tanto en el espacio momental como en el coordenado. Si evitamos estos problemas podremos apreciar que nuestro método es capaz de producir resultados precisos que ningún otro método puede producir en un tiempo computacional tan corto.

En caso de que exista un potencial  $V(x)$  diferente de cero, tendremos que respetar las constricciones que examinamos en el caso de la partícula libre pero además tenemos que tener en cuenta que si el límite de Nyquist es grande, es decir si el intervalo de las  $k$  es grande tendremos que el intervalo de energías también es grande porque la energía es proporcional a  $k^2$ . Esto quiere decir, por ejemplo, que si duplicamos el intervalo de  $k$  estaremos cuadruplicando el intervalo de la energía. Esto no sería grave sino fuera porque el *indicador del error del método pseudoespectral* que estamos usando, es la cantidad  $[V, T]\delta_t$ . Entonces, por ejemplo, si el valor de la energía se cuadruplica y  $V$  no cambia, necesitaremos reducir el paso de tiempo  $\delta_t$  por un factor de cuatro para que nuestro error no se haga mas grande. Esta constricción se resume de la manera siguiente: *Escójase un paso de tiempo  $\delta_t$  que sea consistente con las energías mas grandes que aparecen en el problema.* En particular, conforme el intervalo de las  $k$  se incrementa, el intervalo de las energías también se incrementa como  $k^2$  y para que nuestro error se mantenga estable, el paso de tiempo debe de ser disminuido por un factor que compense adecuadamente este crecimiento de la energía.

En nuestro capítulo de resultados daremos, para una serie de parámetros ini-

ciales, los resultados que arroja nuestro programa. Analizaremos nuestras respuestas y las compararemos cuando sea posible, con los resultados exactos (como en el caso de la propagación de partícula libre). También reproduciremos los resultados del artículo de Goldberg.

## Capítulo 4

# Los Tiempos de Tunelaje.

### 4.1 Introducción.

En este capítulo nos proponemos hacer una breve revisión de algunas de las posturas han surgido en torno a una vieja pregunta formulada desde los inicios de la mecánica cuántica "¿Cuánto tiempo le lleva a una partícula atravesar a una barrera de potencial cuando se presenta el efecto túnel?". Diversos autores en diferentes épocas han tratado de contestar esta pregunta sin que se haya llegado a un consenso. En años recientes esta pregunta ha resurgido pues su respuesta tiene una importancia mayúscula para la construcción de dispositivos electrónicos basados en estructuras semiconductoras. Aunque el problema es en apariencia muy sencillo, reviste una complejidad que ha producido fuertes controversias a partir de los años 80's y posteriores. Diversos autores han hecho revisiones críticas [Hauge *et al*, 1989], [Landauer y Martin, 1994], de las diversas posturas y teorías que han surgido para resolver el problema, por lo que nuestro propósito en este capítulo no es examinar exhaustivamente a todas ellas sino crear un contexto que nos ayude a comprender los resultados numéricos que hemos obtenido y que se presentan en el próximo capítulo.

En particular, nos centraremos en dos teorías que están bien establecidas y que tienen un significado mas o menos bien definido. Una de ellas, la del *tiempo de permanencia* (dwell time), nos define exactamente (en el contexto de partículas con energía fija que se dispersan al pasar por un potencial) el tiempo de permanencia en una región finita del espacio, promediado sobre todas las partículas incidentes. En este sentido, el tiempo de permanencia puede servir como un punto de referencia en cualquier discusión sobre los tiempos de tunelaje. La debilidad de esta teoría estriba en que el tiempo de permanencia es un promedio total que no distingue entre los diversos canales de dispersión (entendiéndose por canales, los diversos estados finales de transmisión y reflexión). La otra teoría que revisaremos y que también es una teoría bien establecida es la llamada *teoría del tiempo fase*. Esta teoría

describe completamente la colisión (dispersión) de paquetes de onda que tengan una distribución angosta de energía. La teoría nos dá diferentes tiempos fase para la parte transmitida y para la parte reflejada. Por otro lado, cada uno de los tiempos fase incluye varios términos: el primero corresponde al tiempo que se lleva el paquete en moverse como partícula libre desde el punto de partida hasta la región en donde existe un potencial, los siguientes términos corresponden a dos aportaciones que no pueden ser totalmente esclarecidas: el tiempo que se lleva en la región en donde existe la barrera y un tiempo de retraso por autointerferencia al aproximarse a la barrera. Como el concepto de tiempo fase, es un concepto sutil, existe mucha confusión y discusión al respecto.

Aunque existen otras posturas al respecto de los tiempos de tunelamiento, nos centraremos en las ya mencionadas, por ser estas las mas importantes y las que nos dán un marco teórico adecuado para nuestro trabajo. No pretendemos hacer ni un tratamiento, ni una revisión exhaustivos de las teorías que repasaremos sino mas bien, mencionar sus definiciones, enunciados y resultados más relevantes.

## 4.2 Definición de tiempo fase.

Consideremos un paquete de onda con una distribución momental angosta centrada en un cierto valor, incidiendo sobre una barrera de potencial. De acuerdo a lo expuesto en el capítulo uno y dos, sabemos que como resultado de la colisión habrá un paquete de onda transmitido y un paquete de onda reflejado, aparte del que incidió. Podemos representar éstos paquetes mediante las siguientes funciones de onda:

$$\Psi_i(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int b(k) e^{-ikx_0} e^{i(kx - \omega t)} dk \quad ; \quad x < 0 \quad (4.1)$$

$$\Psi_r(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int r b(k) e^{-ikx_0} e^{-i(kx - \omega t)} dk \quad ; \quad x < 0 \quad (4.2)$$

$$\Psi_t(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int t b(k) e^{ikx_0} e^{i(kx - \omega t)} dk \quad ; \quad x > a \quad (4.3)$$

donde hemos tomado una posición inicial  $x = x_0$  para el paquete. Además:

$$\begin{aligned} r &= \sqrt{R} e^{i\phi} \\ t &= \sqrt{T} e^{i\theta} \end{aligned} \quad (4.4)$$

como se definieron en las ecuaciones (2.30) y (2.31).

En la aproximación de fase estacionaria [Wigner E.P, 1955] nos conduce a:

$$\frac{\partial}{\partial k} (-kx_0 + kx - \omega\tau_1) = 0 \quad (4.5)$$

$$\frac{\partial}{\partial k} (\phi - kx_0 - kx - \omega\tau_2) = 0 \quad (4.6)$$

$$\frac{\partial}{\partial k} (\theta - kx_0 + kx - \omega\tau_3) = 0 \quad (4.7)$$

como se cumple que

$$\frac{\partial\omega}{\partial k} = \frac{\hbar k}{m} \quad \text{y también que} \quad \frac{\partial}{\partial k} = \frac{m}{\hbar k} \frac{\partial}{\partial E}$$

Despejando  $\tau_1, \tau_2, \tau_3$ , tenemos

$$\tau_1 = \frac{m}{\hbar k} (x - x_0) \quad (4.8)$$

$$\tau_2 = \frac{m}{\hbar k} (-x - x_0) + \hbar \frac{d\phi}{dE} \quad (4.9)$$

$$\tau_3 = \frac{m}{\hbar k} (x - x_0) + \hbar \frac{d\theta}{dE} \quad (4.10)$$

Entonces vemos claramente que además del tiempo  $\tau_1$  que le lleva al paquete viajar desde la posición inicial  $x_0$  hasta la posición  $x$  la colisión produjo varios tiempos de retraso.

Para la *reflexión* tenemos

$$\tau_{\phi} = \hbar \frac{d\phi}{dE} \quad (4.11)$$

Para la *transmisión* tenemos

$$\tau_{\theta} = \hbar \frac{d\theta}{dE} \quad (4.12)$$

#### 4.2.1 Tiempo fase en el caso de la barrera de potencial rectangular.

En el caso de una barrera de potencial rectangular podemos calcular el tiempo fase de manera sencilla. Para ello recuerde la ecuación (2.31)  $t = \ln |t| + \exp(i\theta)$ , que podemos escribir como

$$\ln t = \ln |t| + i\theta \quad (4.13)$$

derivando esta ecuación con respecto a  $E$  y tomando la parte imaginaria, tenemos

$$\frac{d\theta}{dE} = \text{Im} \left[ \frac{1}{t} \frac{dt}{dE} \right] \quad (4.14)$$

usando la ecuación (2.22) que nos dá el valor de  $t$  (caso  $E < V_0$ ) podemos escribir una expresión donde se han separado la parte real de la imaginaria:

$$t = \frac{4k^2q^2 \cosh aq - i2kq(q^2 - k^2) \sinh aq}{4k^2q^2 + K_0^4 \sinh^2 aq} \quad (4.15)$$

derivando esta expresión con respecto de  $k$  y sustituyendo  $t$ , tenemos

$$\text{Im} \left[ \frac{1}{t} \frac{dt}{dk} \right] = \frac{1}{q} \left[ \frac{2ak^2q(q^2 - k^2) + K_0^4 \sinh 2aq}{4k^2q^2 + K_0^4 \sinh^2 aq} \right] \quad (4.16)$$

Note además que si  $k^2 = 2mE/\hbar^2$  entonces podemos escribir

$$\frac{dk}{dE} = \frac{m}{\hbar^2 k} \quad (4.17)$$

Finalmente para obtener el tiempo fase asociado a la transmisión en la barrera hacemos uso de la expresión para  $\tau_\theta$  ecuación (4.12), junto con los resultados de las ecuaciones (4.14), (4.16) y (4.17) y obtenemos

$$\tau_\theta = \frac{m}{\hbar k q} \left[ \frac{2aqk^2(q^2 - k^2) + K_0^4 \sinh 2aq}{4k^2q^2 + K_0^4 \sinh^2 aq} \right] \quad \text{si } E < V_0. \quad (4.18)$$

que es el tiempo fase asociado a la transmisión en una barrera rectangular de potencial en el caso en que  $E < V_0$ .

En el caso  $E > V_0$  tenemos que seguir un procedimiento similar pero con la diferencia de que ahora usamos la ecuación (2.27) que nos dá el valor de  $t$  si  $E > V_0$  (En vez de la ecuación 2.22). El resultado para el tiempo fase asociado a la transmisión en una barrera de potencial rectangular cuando  $E > V_0$  está dado por

$$\tau_\theta = \frac{m}{\hbar k q'} \left[ \frac{2aq'k^2(q'^2 + k^2) - K_0^4 \sin 2aq'}{4k^2q'^2 + K_0^4 \sin^2 aq'} \right] \quad (4.19)$$

donde tenemos que

$$q'^2 = \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}$$

y las expresiones para  $k$  y  $K'_0$  vienen dadas por

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$K'_0{}^2 = k^2 - q'^2$$

Es importante señalar que el comportamiento del tiempo fase asociado a la transmisión de una partícula que incide en una barrera de potencial rectangular depende de las dimensiones de la barrera (su ancho  $a$  y su altura  $V_0$ ) y de la energía de la partícula que se considera monoenergética. Resaltamos el hecho de que la partícula se está considerando monoenergética porque es sabido por la relación de incertidumbre de Heisenberg que una partícula cuántica no es monoenergética a menos que su momento este bien determinado y se pueda representar en el espacio momental como un pico de anchura cero, en cuyo caso la posición de la partícula esta indefinida pues se tendría que la partícula se localiza en todo el espacio.

#### 4.2.2 Barreras de Potencial Delgadas y Barreras Opacas.

Si tratamos de ver cual es el comportamiento de el tiempo fase para diferentes valores de la energía de la partícula incidente (que como ya se dijo se considera monoenergética) tendremos que este comportamiento depende no solo de los valores de la energía de la partícula incidente sino tambien del producto de las dos cantidades que determinan las dimensiones de la barrera en que nuestra partícula incide, a saber, el ancho de la barrera  $a$  y el valor  $V$  del potencial de la barrera. Si el valor que toma este producto  $aV$  es mucho mayor que la unidad ( $aV \gg 1$ ) tendremos el caso llamado de *barrera opaca*. Si este producto no es mucho mas grande que la unidad tendremos el caso de una *barrera delgada*. El comportamiento del tiempo fase como función de  $E/V$  ( la energía de la partícula incidente dividido entre la energía potencial de la barrera) asociado a la transmisión de una partícula através de una *barrera delgada* se presenta en la figura 4.1. Esta figura se obtuvo a partir de las ecuaciones (4.18) y (4.19) cuando el valor del ancho de la barrera es de  $a = 25 \text{ \AA}$ , la altura es de  $V = 0.1 \text{ eV}$  y si tenemos que el valor de la masa  $m_e = 0.067$  (que es el valor de la masa efectiva del electrón); el tiempo fase aparece en segundos.

En la figura 4.2 aparece el comportamiento del tiempo fase como función de  $E/V$  para el caso de una *barrera opaca* que tiene un ancho de  $a = 200 \text{ \AA}$ , una altura de  $V = 0.3 \text{ eV}$  y cuando el valor de la masa es  $m_e = 0.067$ . Note que el comportamiento del tiempo fase es bastante diferente en el caso de barreras delgadas comparado con el que se sigue en el caso de las barreras opacas sobre todo en las regiones en donde

$E/V > 1$ . En el caso de *barreras opacas* podemos ver que justo cuando  $E = V$  se presenta un *fenómeno de resonancia*. Este fenómeno nos indica que si la barrera es ancha y si la energía de la partícula incidente es igual a la energía de la barrera de potencial entonces la partícula se queda "atrapada" un cierto tiempo dentro de la barrera de potencial. Esto implica necesariamente que en este caso el tiempo fase es muy grande si se compara con los otros valores porque la partícula atrapada tarda mas tiempo en atravesar la barrera de potencial. En la figura 4.3 se presenta varias curvas que muestran gráficamente el comportamiento del *tiempo fase* en función de  $E/V$  para diferentes valores del producto  $aV$ . Cada una de las curvas tiene un valor diferente del producto  $aV$  pero se mantiene fijo el potencial en  $V = 0.1 \text{ eV}$  (de manera que cada una de las curvas representa el caso de anchos diferentes de la barrera de potencial). A medida que el producto  $aV$  se hace mas grande, la estructura típica del comportamiento del tiempo fase en el caso de *barreras opacas* se hace cada vez mas evidente. Por último es útil mostrar gráficamente-figura 4.4- el comportamiento del tiempo fase para barreras delgadas en la misma figura donde se presenta el comportamiento del tiempo fase para barreras opacas. Note que los valores del tiempo fase son menores en el caso de las barreras delgadas si  $E/V > 1$ .

### 4.3 Definición del tiempo de permanencia (dwell time).

En 1960 Smith introdujo [Smith F.T., 1960] el tiempo de permanencia  $\tau_D$ , como una medida del tiempo, promediado sobre todos los canales de dispersión (recuerde que por canal entendemos: estados finales diferentes: reflexión y transmisión por ejemplo en el caso unidimensional), que la partícula permanece en una región del espacio. Definió este tiempo como la densidad  $\rho$  de una función de onda que representa un estado estacionario, integrada sobre la región donde nos interesa (generalmente la región donde se encuentra la barrera) saber el tiempo de permanencia y dividida entre el flujo total  $J$  que incide (o que sale).

Para el caso unidimensional, el tiempo de permanencia fué introducido por primera vez por Büttiker en 1983 [Büttiker M., 1983] y se definió como

$$\tau_D = \frac{1}{J} \int_0^a |\Psi|^2 dx \quad (4.20)$$

donde  $J = \hbar k/m$ .

Para una partícula de masa  $m$  y energía  $E$  que pasa através de una barrera de potencial rectangular de ancho  $a$  y altura  $V_0$ , se puede calcular su tiempo de

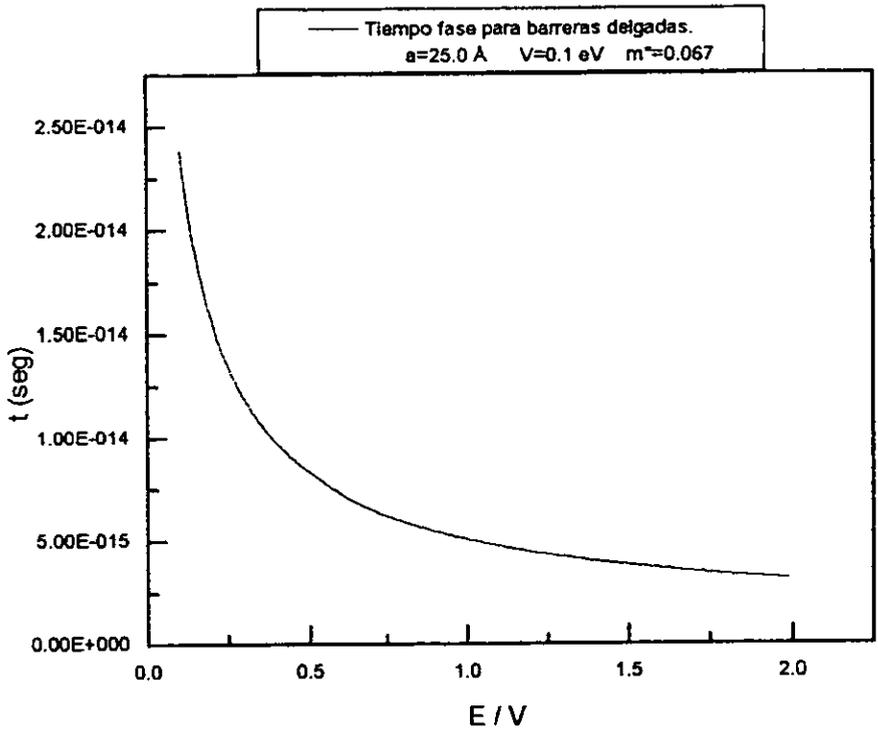


Figura 4.1: Tiempo fase para barreras delgadas

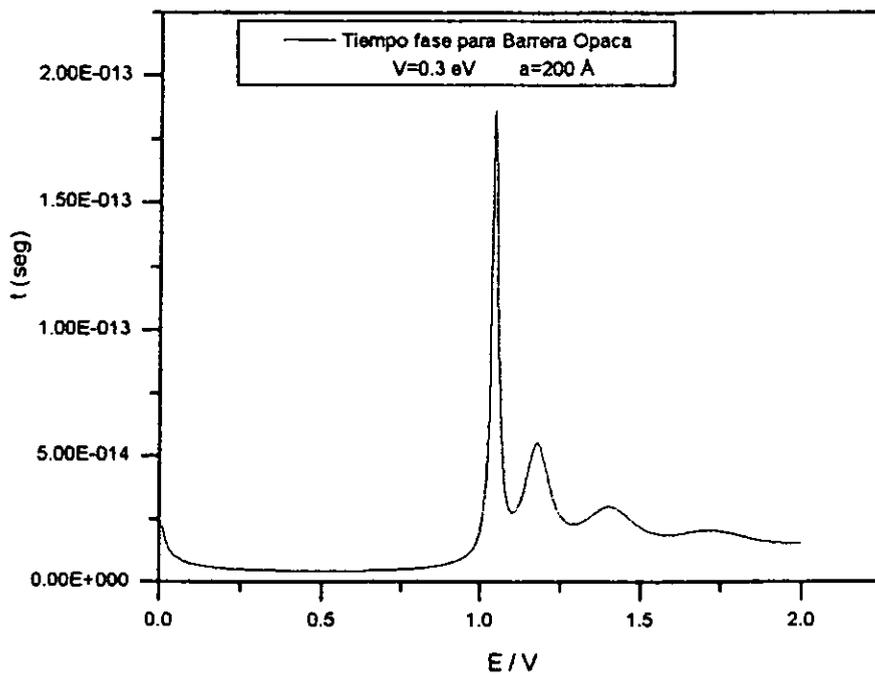


Figura 4.2: Tiempo fase para barreras opacas

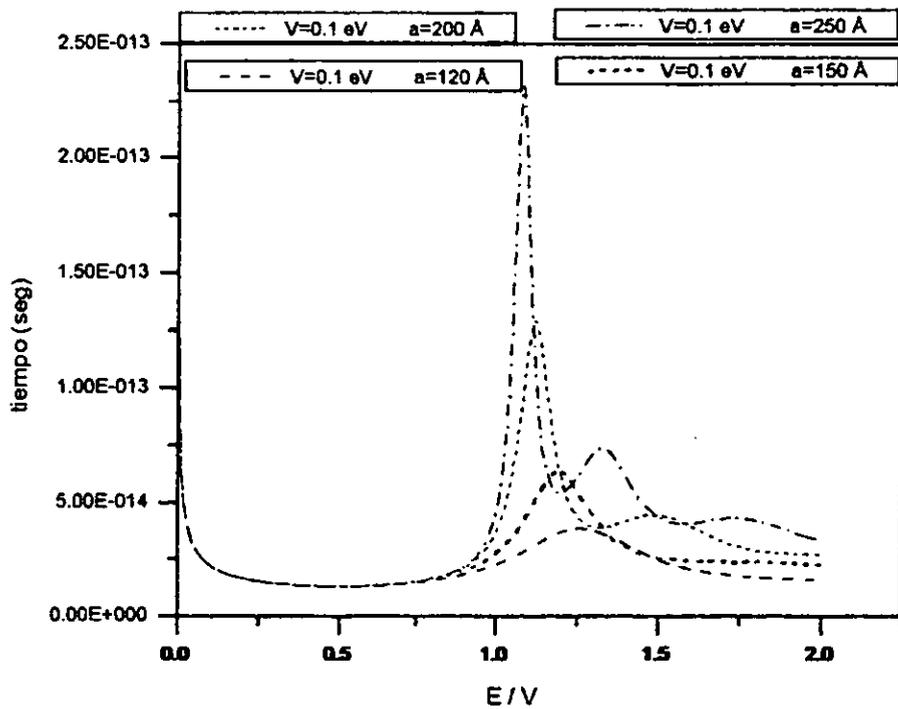


Figura 4.3: Tiempo fase para barreras que incrementan el producto  $aV$ .

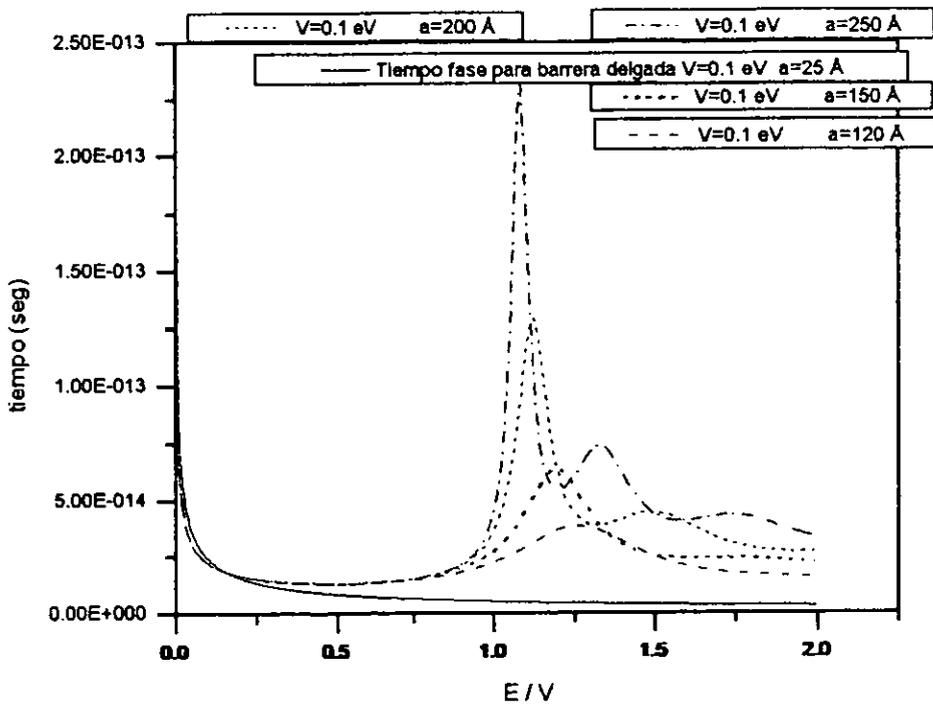


Figura 4.4: Tiempo fase para barrera delgada comparada con tiempo fase para barreras opacas

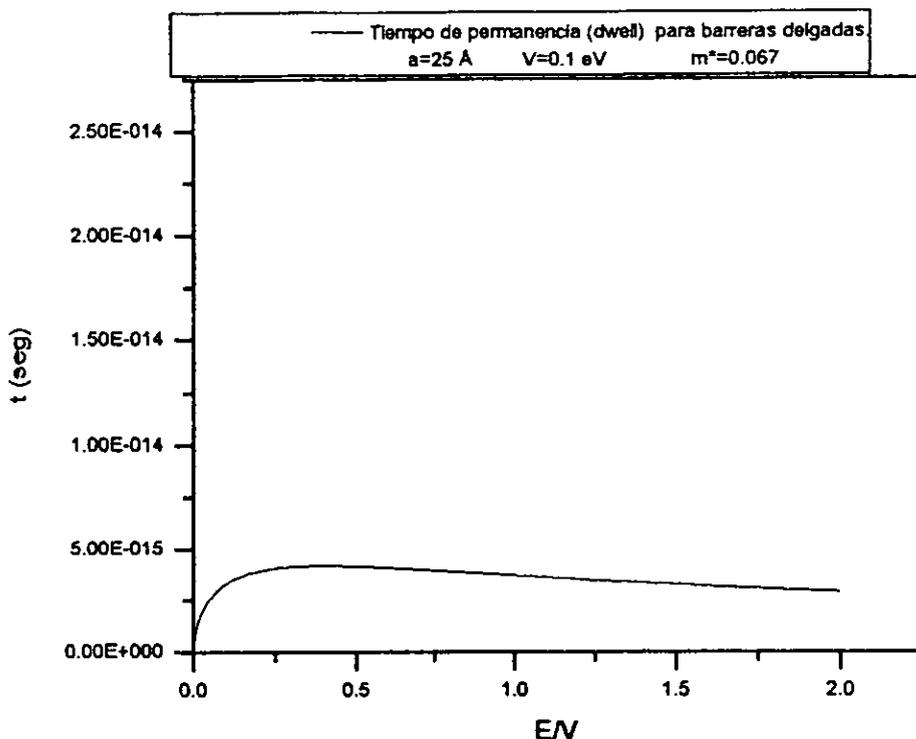


Figura 4.5: Tiempo de permanencia para barreras delgadas

permanencia [Horta F.A,1993] tenemos que el tiempo de permanencia es:

$$\tau_D = \frac{mk}{\hbar q} \left( \frac{2kq(q^2 - k^2) + K_0^2 \sinh 2aq}{4k^2q^2 + K_0^4 \sinh^2 aq} \right)$$

Como fué señalado por Büttiker [Büttiker, M., 1983], la definición del tiempo de permanencia no hace ninguna distinción entre las partes reflejadas y transmitidas, ambas tienen el mismo peso en el promedio que sobre el ensamble calculamos para obtener una medida del tiempo de retraso debido a la presencia de la barrera. Es debido a este hecho que algunos autores descalifican a este tiempo de permanencia como una cantidad física de relevancia para el problema [Collins S *et al*,1987].

En la figura 4.5 se muestra el tiempo de permanencia para barreras rectangulares delgadas.

En la figura 4.6 se muestra el tiempo de permanencia para barreras rectangulares opacas.

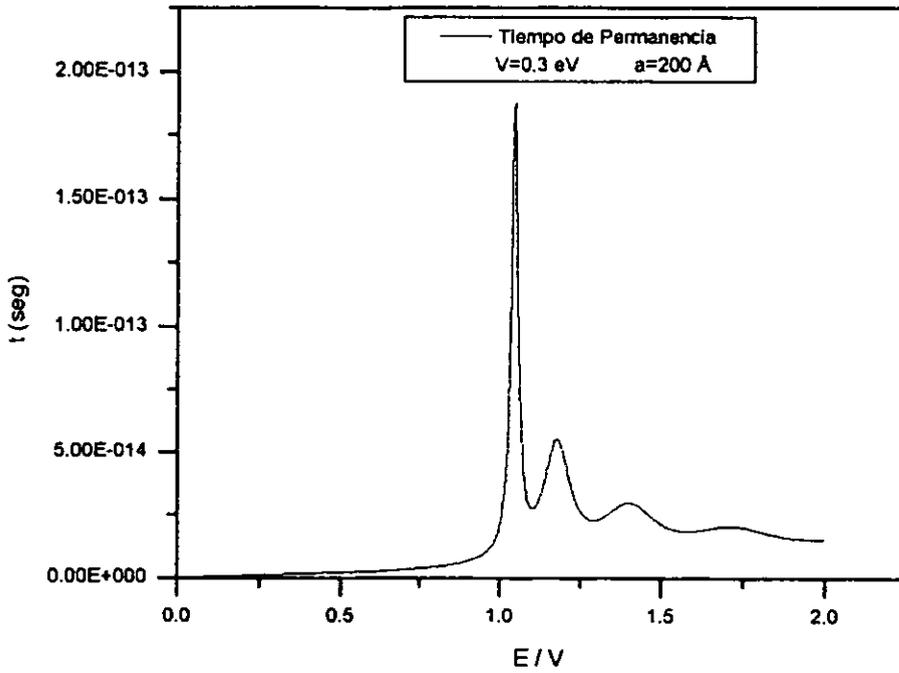


Figura 4.6: Tiempo de permanencia para barreras opacas

## Capítulo 5

# Resultados de la Simulación. Discusión y Análisis.

### 5.1 Introducción.

Uno de los principales problemas a los que nos enfrentamos al estudiar cualquier sistema físico es no solo la elaboración de modelos teóricos que describan el comportamiento de algún fenómeno sino también la validación experimental de dichos modelos para que correspondan y describan correctamente una situación real. Para explorar y descubrir el comportamiento que sigue la naturaleza, no solo contamos con la experimentación sino también con la simulación computacional. La simulación computacional, cuando es realizable, nos permite estudiar los fenómenos físicos e indagar el comportamiento cualitativo y cuantitativo de un sistema. También nos permite, si está basada en las leyes fundamentales, corroborar o desechar formalismos y teorías.

En este capítulo nos proponemos describir el fenómeno de colisión dependiente del tiempo. Es decir queremos estudiar computacionalmente el comportamiento (dependiente del tiempo) de una partícula que atraviesa una barrera de potencial rectangular tanto en el caso en que la partícula tenga una energía menor que la de la barrera (tunelaje) así como en el caso en que la energía de la partícula sea mayor o igual a la de la barrera. Aunque estudiaremos ambos casos, pondremos un énfasis especial en estudiar diferentes aspectos del fenómeno de tunelaje dependiente del tiempo. Uno de los objetivos de nuestro estudio es arrojar alguna luz en torno a la vieja pregunta: *¿Cuánto tiempo le lleva a una partícula atravesar a una barrera de potencial cuando se presenta el efecto túnel?* . Como se vió en capítulo anterior, para contestar esta pregunta han surgido diferentes formalismos de donde se han derivado (analíticamente) respuestas que difieren cualitativa y cuantitativamente y que no pueden ser acertadas simultáneamente. Como veremos en este capítulo, la

solución numérica de este problema de dispersión dá valiosas respuestas que inclinan la balanza a favor del formalismo del Tiempo Fase.

La solución numérica de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo en el caso de la dispersión de un paquete de ondas Gaussiano por una barrera rectangular también arroja respuestas acerca de un problema que hasta ahora ha sido, numéricamente, poco estudiado: los *estados resonantes* para el caso dependiente del tiempo. Aquí hacemos un estudio de estos estados, de su duración y de la forma que sigue el abatimiento de estos estados.

Nuestro capítulo estará dividido en diversas secciones que representan los pasos que se han seguido para obtener nuestro resultado: criterios para escoger los parámetros de entrada de la simulación, movimiento de una partícula libre y validación del método numérico, reproducción de los resultados del artículo de Goldberg, medición de los tiempos de tunelaje, estudio de los estados resonantes dependientes del tiempo.

## 5.2 Criterios para escoger los parámetros de entrada en la simulación.

En cualquier simulación numérica es muy importante saber cuales son los parámetros de entrada que nos van a producir resultados válidos y con un error mínimo. También en el método de solución que hemos usado, debemos de seguir ciertos criterios para escoger los valores iniciales del problema. Los puntos que se deben de tomar en cuenta para formarnos un criterio que rija sobre los parámetros de entrada fueron dados en la sección 3.4 de esta tesis. Lo que tenemos que hacer ahora es aplicar estos criterios en el caso de la partícula libre y de la partícula que colisiona con una barrera de potencial. Las limitaciones y virtudes de nuestro método de solución se reflejan siempre en los resultados obtenidos pero también en las restricciones sobre los parámetros de entrada. Si tenemos el control sobre nuestros parámetros de entrada, es decir si tenemos control sobre los datos de los que vamos a alimentar nuestro programa, evitaremos obtener resultados espurios. Lo mismo podemos decir de la precisión de nuestro método: depende básicamente de los datos de entrada y de las limitaciones del método en sí.

Como primera nota, es importante señalar que en el intervalo de energías en el que hicimos nuestras simulaciones, observamos que con una rejilla de a lo más  $N = 1024$  puntos obteníamos resultados que ya no cambiaban (no se presentaba alguna mejoría) aunque se aumentara el número de puntos de la rejilla al doble o

cuádruple de esta cantidad.

Pasemos ahora a examinar, más formalmente, las condiciones iniciales que debe de llenar los parámetros de la simulación. Como nuestro paquete Gaussiano está dado básicamente por

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{(2\pi(\Delta x)^2)^{\frac{1}{2}}} \exp \left[ i k_0 x - \frac{(x - x_0)^2}{4(\Delta x)^2} \right] \quad (5.1)$$

este paquete esta centrado alrededor de  $x_0$  con un ancho en  $x$  gobernado por  $\sigma_0 = \Delta x$ . El factor  $\exp(i k_0 x)$  hace que nuestra función inicial se mueva hacia la derecha con un momento promedio  $k_0$ . Nuestra malla tiene una longitud  $L$  y debemos de escoger a  $x_0$  y a  $\sigma_0$  de tal forma que la la función de onda sea nula (o prácticamente nula) en los extremos de la malla, es decir  $\Psi(x, 0)$  y  $\Psi(L, 0)$  deben de ser cero. Escogiendo alguna  $L$  y  $x_0 = L/4$ , tenemos :

$$\Psi(0, 0) = \frac{1}{(2\pi(\Delta x)^2)^{\frac{1}{2}}} \exp \left[ -\frac{(L)^2}{64(\Delta x)^2} \right] \quad (5.2)$$

Si escogemos a  $\sigma_0 = \Delta x = L/20$  ó sea el 5% de la longitud  $L$ , de la caja, tenemos

$$\Psi(0, 0) = \frac{1}{(2\pi(\Delta x)^2)^{\frac{1}{2}}} \exp \left[ -\frac{(L)^2}{64(L/20)^2} \right] \quad (5.3)$$

de donde

$$|\Psi(0, 0)| = \frac{1}{(2\pi(L/20)^2)^{\frac{1}{2}}} \exp[-6.25] \quad (5.4)$$

Entonces en cualquier simulación debemos procurar que este número sea muy pequeño tomando en cuenta las dimensiones del problema estudiado. Así por ejemplo si  $L = 6000 \text{ \AA}$ , tenemos que

$$|\Psi(0, 0)| = \frac{1}{(2\pi(300)^2)^{\frac{1}{2}}} \exp[-6.25] \approx 7.039 \times 10^{-5} \quad (5.5)$$

que es un número muy pequeño. Podemos notar entonces que no incurrimos en un error perceptible cuando tomamos estos parámetros de entrada en nuestra simulación. Si hacemos lo mismo para  $|\Psi(L, 0)|$  veremos que el error es aún mas pequeño.

Para evitar que nuestro paquete toque los bordes de nuestra caja (que en realidad es circular) debemos de, además de colocar el centroide del paquete en el punto

$x_0 = L/4$  (como ya se vió), evitar que el paquete viaje a una posición más allá de  $x = 3L/4$ . Esto objetivo se puede llevar a cabo de diversas maneras. La primera es controlando, vía el programa, el número de iteraciones de tal forma que si la posición del centroide  $x_0 > 3L/4$  el programa se pare automáticamente. Otra forma sería poniendo restricciones sobre la energía de entrada. Si queremos que la interacción tenga una duración de  $t_0$  segundos (lo que tarda el máximo del paquete en llegar a  $x = 3L/4$ ), entonces la energía cinética de entrada debe de tener un valor bien determinado. Como la velocidad promedio del paquete está dada por

$$v = \frac{\hbar k}{m} = \frac{L}{2t_0} \quad (5.6)$$

y como además

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad (5.7)$$

se sigue que

$$E = \frac{mL^2}{8t_0^2} \quad (5.8)$$

La siguiente restricción que tenemos sobre los parámetros de entrada tiene que ver con que la anchura del paquete crece conforme el tiempo transcurre. Un análisis de los paquetes de onda, que se presenta en el libro de Merzbacher [Merzbacher, E., 1970], nos muestra que si  $\sigma_0$  es la anchura inicial entonces tendremos, después de un tiempo  $t_0$ , una anchura dada por

$$\sigma^2 = (\sigma_0^4 + 4t_0^2)^{1/2} \quad (5.9)$$

Esta expresión, aunque fué calculada para paquetes de onda moviéndose en el espacio libre, es muy aproximadamente cierta en el caso de que una barrera de potencial esté presente [Goldberg, A., *et al*, 1967]. Si queremos que este cambio en la anchura del paquete sea despreciable (para que no nos afecte) debemos tener que  $4t_0^2$  debe ser pequeño comparado con  $\sigma_0^4$ . Usando (5.8), tenemos

$$4t_0^2 = \frac{mL^2}{2E} \quad (5.10)$$

además reescribiendo (5.9) y sustituyendo (5.10), tenemos

$$\left(\frac{\sigma}{\sigma_0}\right)^2 = \left(1 + \frac{4t_0^2}{\sigma_0^4}\right)^{1/2} = \left(1 + \frac{mL^2}{2E\sigma_0^4}\right)^{1/2} \quad (5.11)$$

si nuestro  $\sigma_0 = L/20$ , tendremos

$$\left(\frac{\sigma}{\sigma_0}\right)^2 = \left(1 + \frac{(20)^4 m}{2EL^2}\right)^{1/2} \quad (5.12)$$

que nunca debe ser mucho más grande que la unidad. Es decir en una buena simulación debemos tener que

$$\left(\frac{\sigma}{\sigma_0}\right)^2 \approx 1 \quad (5.13)$$

o bien

$$\left(\frac{m}{2EL^2}\right) \ll 1 \quad (5.14)$$

Los criterios restantes para una buena simulación ya se mencionaron al hablar del enrollamiento en el espacio momental (sección 3.4). Es decir debemos de tener que todas las  $k$  de nuestro espectro sean menores que la  $k_{nyquist} = k_{max} = \pi/\delta_x$ . Citemos lo dicho en el capítulo tres para que todo quede claro: *Escójase la rejilla en el espacio momental lo suficientemente grande como para que todas las componentes físicas relevantes del problema estén incluidas dentro del límite de Nyquist.* Esto se logra teniendo un  $\delta_x$  suficientemente pequeño ya que el límite de Nyquist está dado por:  $k_{Nyquist} = N\delta_k/2 = \pi/\delta_x$ .

El último criterio que tenemos que contemplar ya fué expuesto en la sección 3.4. Y se refiere al error que se puede generar usando el método semiespectral y como este error tiene que ver con el paso de tiempo  $\Delta t$  de cada iteración, con la energía cinética  $T$  del paquete y con el valor  $V$  del potencial. Para tener mayor claridad citemos lo expuesto en aquella sección:

En caso de que exista un potencial  $V(x)$  diferente de cero, tendremos que respetar las constricciones que examinamos en el caso de la partícula libre pero además tenemos que tener en cuenta que si el límite de Nyquist es grande, es decir si el intervalo de las  $k$  es grande tendremos que el intervalo de energías también es grande porque la energía es proporcional a  $k^2$ . Esto quiere decir, por ejemplo, que si duplicamos el intervalo de  $k$  estaremos cuadruplicando el intervalo de la energía. Esto no sería grave sino fuera porque el indicador del error del método pseudoespectral que estamos usando, es la cantidad  $[V, T]\delta_t$ . Entonces, por ejemplo, si el valor de la energía se cuadruplica y  $V$  no cambia, necesitaremos reducir el paso de tiempo  $\delta_t$  por un factor de cuatro para que nuestro error no se haga mas grande. Esta constricción se resume de la manera siguiente: *Escójase un paso de tiempo  $\delta_t$  que sea consistente con las energías mas grandes que aparecen en el problema.* En particular, conforme el intervalo de las  $k$  se incrementa, el intervalo de las energías también se incrementa

como  $k^2$  y para que nuestro error se mantenga estable, el paso de tiempo debe de ser disminuido por un factor que compense adecuadamente este crecimiento de la energía.

Con los criterios ya señalados podemos proceder a realizar nuestras simulaciones. Los resultados de estas simulaciones se exponen en la siguientes secciones de este capítulo.

### 5.3 Movimiento de una partícula libre

En el capítulo uno de este trabajo analizamos las características que guarda el movimiento de una partícula libre. Hemos visto que si una partícula libre está representada por un paquete de ondas Gaussiano, el centroide del paquete se moverá con velocidad constante cuando no existan potenciales que perturben el movimiento de la partícula. Es decir, tendremos que el centroide del paquete se moverá como una partícula puntual clásica. También sabemos que la anchura del paquete de ondas no se mantiene constante sino que se incrementa conforme el tiempo avanza y que la amplitud del paquete de ondas cambia en el tiempo haciéndose cada vez más pequeña. Entonces el movimiento de un paquete de ondas que representa a una partícula libre es uno en donde mientras más pequeña sea la incertidumbre en la posición, más grande es la incertidumbre en la cantidad de movimiento y más rápidamente el paquete se dispersa. La ecuación correspondiente a la partícula libre (ecuación (1.34)) nos muestra que la parte dependiente del tiempo  $t(\Delta p)/m$ , es simplemente la distancia que viaja una partícula clásica de cantidad de movimiento  $\Delta p$  en el tiempo  $t$ . Con estos elementos teóricos procedamos a la simulación de la partícula libre.

#### 5.3.1 La simulación para el paquete de ondas libre.

Para probar nuestro programa se hicieron varias corridas del programa. En las diferentes corridas se utilizaron diversos valores para los parámetros requeridos por el programa. Los parámetros utilizados por el programa y que el usuario debe de proporcionar son: El tamaño  $L$  del espacio coordinado (dando  $x$  inicial y  $x$  final), la posición inicial  $x_0$  del centroide del paquete, la anchura inicial del paquete  $\sigma_0$ , y la energía del paquete. El número de puntos en la malla se ha escogido previamente y tiene que ser una potencia de dos porque estamos usando la FFT.

En la figura 5.1 se presenta la evolución temporal de un paquete Gaussiano que cumple con los requerimientos que hemos impuesto. Los parámetros utilizados

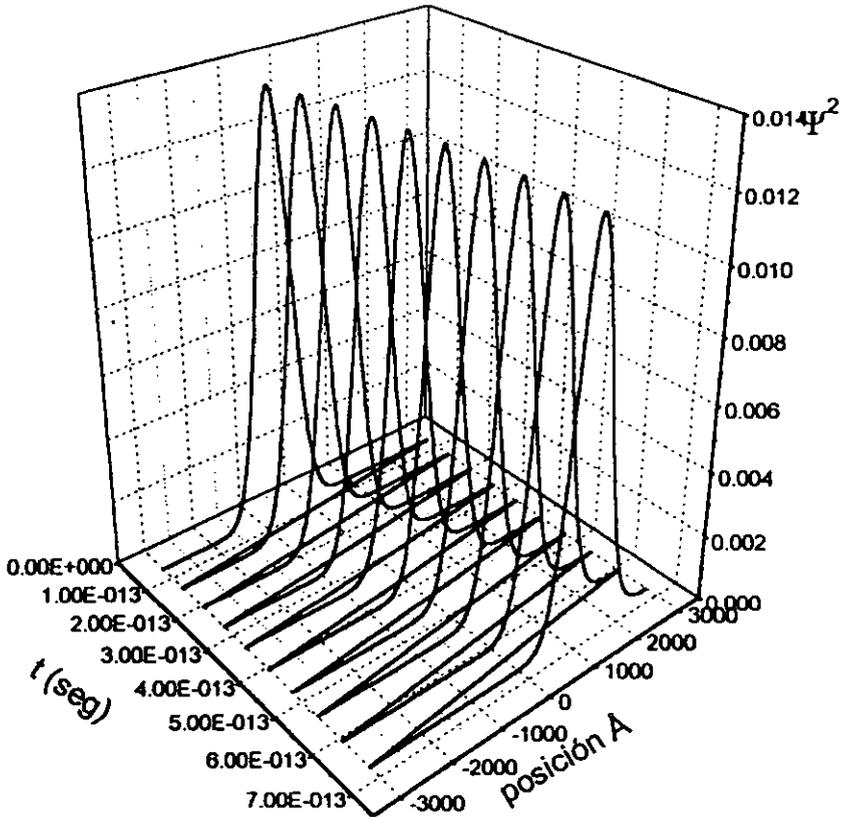


Figura 5.1: Evolución temporal de un paquete de ondas (partícula libre).

fueron:  $L = 6000 \text{ \AA}$ ,  $\sigma_0 = 300 \text{ \AA}$ , Energía cinética del paquete  $T = 0.02 \text{ eV}$ .

En la figura 5.2 presentamos la gráfica de la posición que guarda el centroide del paquete como función del tiempo transcurrido. Los puntos de la gráfica se han obtenido localizando a diversos tiempos, la posición del centroide del paquete que está evolucionando en nuestra simulación. El valor que toma esta posición junto con el tiempo correspondiente se guardan en un archivo de datos. En la figura 5.2 podemos ver que los puntos de la simulación correspondientes a la posición del centroide del paquete para diferentes tiempos están todos sobre la línea teórica. Si calculamos el valor de las pendientes teóricas y de simulación vemos que prácticamente coinciden. Es decir la velocidad teórica es prácticamente la velocidad del paquete de la simulación. Con este hecho queda establecido que nuestro programa arroja resultados precisos. Es importante señalar que en nuestro programa usamos la llamada masa reducida del electrón para hacer nuestros cálculos. Recuerdese que la masa reducida del electrón vale  $m^* = m_e(0.067)$ .

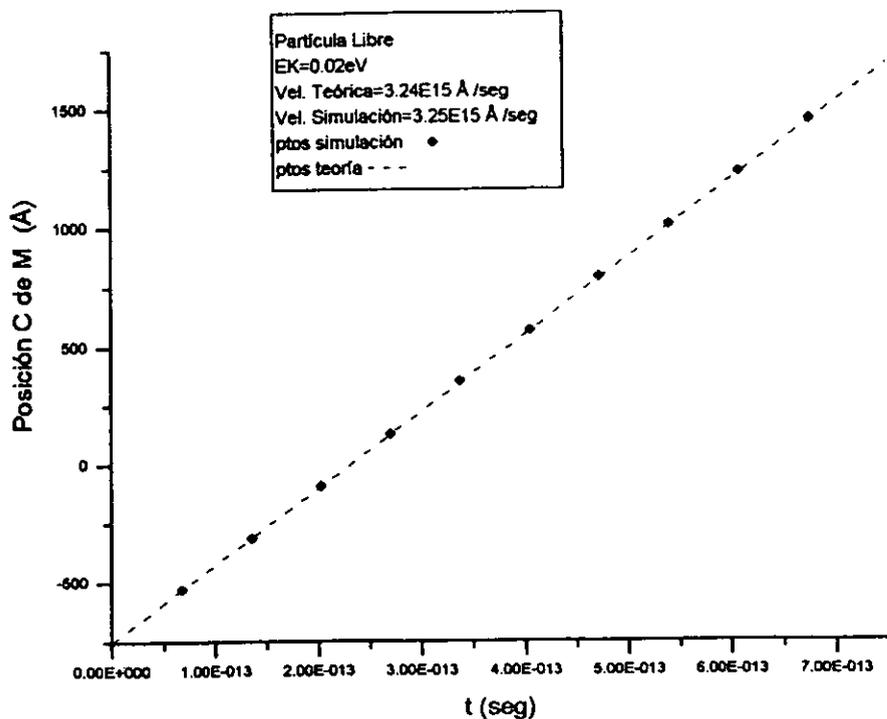


Figura 5.2: Posición del centroide de una partícula libre (simulada) vs tiempo. La línea punteada es la curva teórica que describe el movimiento de la partícula libre.

## 5.4 Obtención de los resultados gráficos de Goldberg.

Como hemos dicho en el capítulo tres, Goldberg [Goldberg67] fué el pionero en la generación de retratos computacionales de paquetes de onda que evolucionan en el tiempo. Ya que dicho trabajo es un clásico para todo aquel que pretenda hacer simulaciones de paquetes de onda que se mueven en una dimensión, es importante poder reproducir sus resultados especialmente si nos hemos apartado del camino que él traza para resolver la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo. Aunque las limitaciones que impone su método (que son una consecuencia de resolver la ecuación con diferencias finitas) a las simulaciones que describe no son compartidas por el método que nosotros estamos usando, hemos querido reproducir los resultados que se presentan en su trabajo. Para una información mas detallada acerca de los diferentes métodos de solución véase el artículo de Leforestier [Leforestier C. *et al*, 1991]. Este artículo aborda el tema de los diversos métodos de solución de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo comparándolos y presentando sus ventajas y desventajas relativas.

Nuestro programa es capaz de retratar el paquete de ondas después de cada iteración temporal. Es decir, cada vez que ha transcurrido un cierto instante de tiempo  $\Delta t$  (que se puede escoger tan pequeño como la capacidad de la máquina lo permita al representar números reales) se calcula la evolución del paquete de ondas y se despliega su foto en la pantalla. Como la evolución del paquete después de cada iteraciones se calcula muy rápidamente (lo que tarda la máquina en calcular cada iteración es el llamado tiempo real) tenemos que las fotos se van desplegando casi continuamente resultando así una película en el monitor que presenta la evolución de un paquete de ondas que incide sobre una barrera de potencial. Cabe anotar que nuestro programa tambien es capaz de resolver el problema del paquete de ondas que se encuentra con un pozo ( en lugar de una barrera de potencial) y también en este caso nos proyecta la película de la interacción. Es importante recalcar que las fotos que se despliegan en pantalla corresponden a la evolución que sufre el paquete de ondas cada vez que pasa un tiempo  $\Delta t$  en el mundo cuántico y que este intervalo  $\Delta t$  se fija con los criterios y restricciones que hemos señalado ya al final del capítulo tres de esta tesis.

Los parámetros que se piden ahora son además de los ya señalados en el caso de la partícula libre, el ancho  $a$  y la energía  $V_0$  de la barrera de potencial rectangular. Se ha predeterminado que la barrera de potencial empieza en el cero del espacio de coordenadas. A partir de este punto, la barrera de potencial se extiende en el

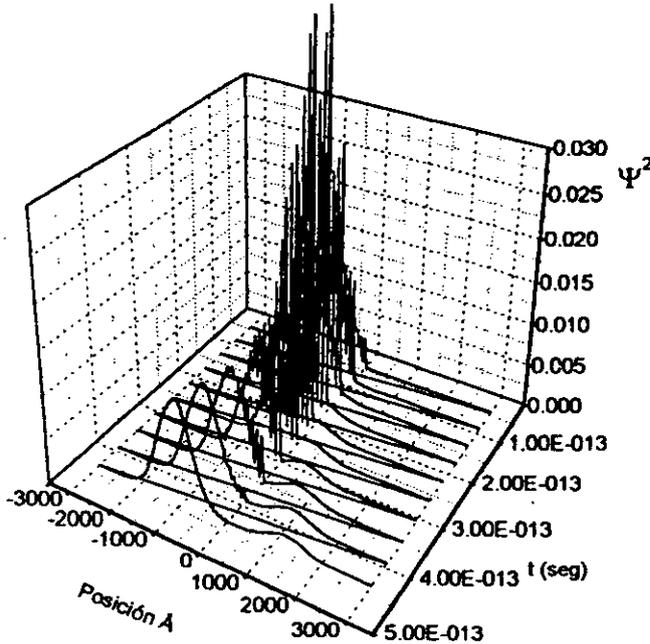


Figura 5.3: Dispersión de un paquete de ondas por una barrera de potencial rectangular caso  $E < V_0$ .

espacio coordenado tanto como su ancho escogido (por el usuario del programa) lo requiera.

En la figura 5.3 presentamos el caso de un paquete de ondas que tiene una energía menor al de la barrera en la cual incide. Los parámetros utilizados para obtener esta figura fueron:  $L = 6000 \text{ \AA}$ , posición inicial del centroide del del paquete  $x_0 = -1000 \text{ \AA}$ , ancho inicial del paquete  $\sigma_0 = 350 \text{ \AA}$ , energía del paquete  $E = 0.05 \text{ eV}$ , ancho de la barrera  $a = 60 \text{ \AA}$ , energía de la barrera de potencial  $V = 0.1 \text{ eV}$ . El paso de tiempo fué de  $\Delta t = 9 \times 10^{-16} \text{ seg}$ . La barrera comienza en  $x = 0.0 \text{ \AA}$ .

La figura 5.4 presenta el caso de un paquete que choca contra una barrera de potencial que tiene una energía menor que la energía del paquete de onda, los parámetros utilizados para generar esta figura fueron:  $L = 6000 \text{ \AA}$ , posición inicial del centroide del del paquete  $x_0 = -1000 \text{ \AA}$ , ancho inicial del paquete  $\sigma_0 = 350 \text{ \AA}$ , energía del paquete  $E = 0.1 \text{ eV}$ , ancho de la barrera  $a = 60 \text{ \AA}$ , energía de la barrera de potencial  $V = 0.05 \text{ eV}$ . El paso de tiempo fué de  $\Delta t = 9 \times 10^{-16} \text{ seg}$ . La barrera

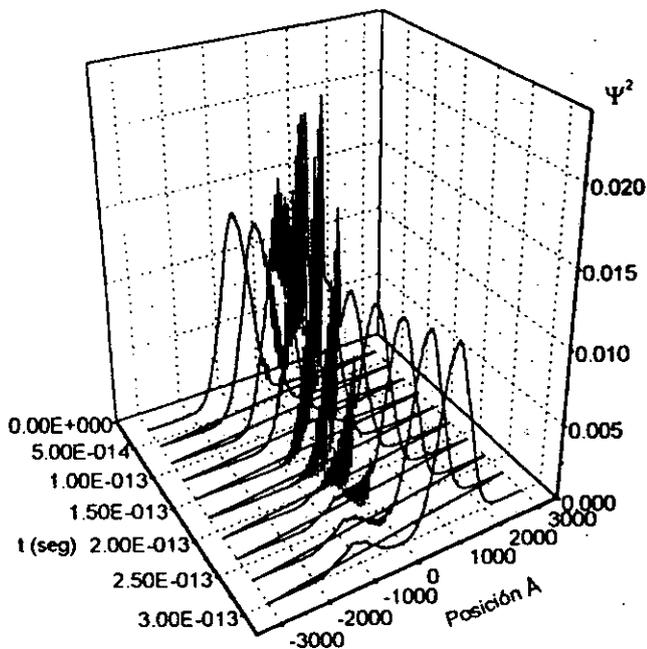


Figura 5.4: Dispersión de un paquete de ondas por una barrera de potencial rectangular, caso  $E > V_0$ .

comienza en  $z = 0.0 \text{ \AA}$ .

El caso de la evolución de un paquete de ondas con una energía igual al de la barrera con la que choca, merece especial atención pues produce un fenómeno conocido como resonancia dependiente del tiempo y será examinado con más detenimiento al final de este mismo capítulo. En la figura 5.5 se muestra un caso donde  $E = V_0$ . Como se puede apreciar en la figura (y con mucha mayor claridad en la película generada en pantalla) vemos que una porción del paquete de ondas es transmitida y otra reflejada desde que se da la colisión pero hay otra porción que es "capturada" por la barrera y se mantiene atrapada por un período de tiempo que es largo comparado con el tiempo que normalmente le lleva a un paquete ser transmitido en una situación diferente a ésta. A la parte atrapada del paquete, que también tiene la forma del paquete original, se le ve rebotando hacia adelante y hacia atrás entre las paredes de la barrera de potencial. En cada rebote una parte del paquete atrapado sale de la barrera como parte transmitida o como parte reflejada. Eventualmente y usando

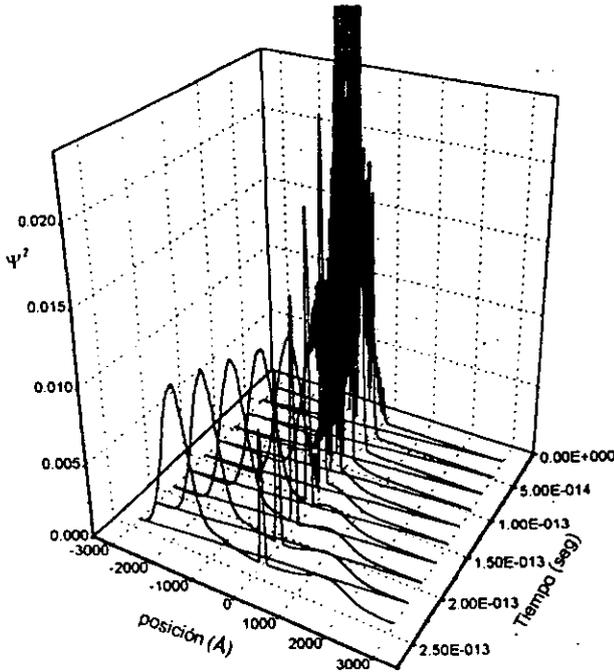


Figura 5.5: Dispersión de un paquete de ondas por una barrera de potencial rectangular, caso  $E = V_0$ .

este mecanismo todo el paquete atrapado logra escapar de la barrera de potencial. En la figura 5.5 se presenta solo parte del evento. Las fotos fueron tomadas a lo largo de toda la duración del evento a intervalos iguales de tiempo.

## 5.5 Medición numérica de los tiempos de tunelaje y su comparación con el tiempo de los modelos teóricos.

Como hemos visto en el capítulo anterior existen diversos modelos que predicen el tiempo que le toma a un paquete Gaussiano cruzar una barrera de potencial. Diversos autores [Collins S et al., 1987] [Hauge et al,1989] , [Olkhovsky y Recami,1992], [Landauer y Martin,1994], han hecho revisiones críticas de los diversos modelos

y han examinado los diferentes argumentos físicos y analíticos que cada uno propone tratando de establecer cual de los tiempos de tunelaje que se predicen será el mas apropiado para describir el fenómeno en los casos mas relevantes. Una vez establecida la validez de nuestro método numérico, *nuestro propósito* será básicamente emplear *simulaciones numéricas de paquetes de onda que inciden sobre barreras rectangulares de potencial* para comparar los resultados que arroje nuestra simulación con las predicciones que hace cada una de los modelos de tiempo de tunelaje. Estas comparaciones han sido hechas por diferentes autores [Schnupp P, 1968] , [Collins S et al., 1987] . Los resultados que se han obtenido han sido analizados criticamente por otros autores [Landauer y Martin,1994].

Como se vió en el capítulo anterior, la definición del tiempo de tunelaje requiere que la forma del paquete transmitido sea aproximadamente la misma que aquella que hubieramos obtenido en el caso de que no hubiera barrera. Entonces un punto de referencia conveniente que podemos emplear para evaluar *el tiempo de tunelaje es la diferencia temporal entre el tiempo de impacto del pico incidente y el tiempo de salida del pico transmitido* (nótese que si nuestro paquete de ondas esta bien localizado en el espacio momental como un pico y si, además, el coeficiente de transmisión vaía lentamente, entonces tendremos solo un pico bien definido en el paquete de onda transmitido). El tiempo que le lleva al pico (centroide) del paquete incidente llegar hasta la barrera es bien conocido y corresponde al tiempo que le llevaría a una partícula clásica el hacerlo. Entonces lo que nos resta es encontrar el instante de tiempo en que el pico del paquete transmitido emerge de la barrera.

Los experimentos numéricos consisten, básicamente, en una serie de corridas en donde el mismo paquete Gaussiano inicial evoluciona y se dirige hacia una barrera de potencial rectangular. Aunque la anchura del paquete y la posición inicial del centroide del paquete son las mismas en todas las corridas, la energía del paquete es incrementada en cada una de las corridas sucesivas. Para cada energía se encuentra el tiempo que le lleva al pico del paquete *arribar* hasta la posición donde empieza la barrera de potencial rectangular. Esto se logra mas eficientemente si llevamos a cabo una corrida en donde a un paquete Gaussiano al que se le ha dado un cierto valor inicial de la energía (y las mismas condiciones iniciales de anchura y posición inicial) es dejado evolucionar en un escenario en donde se ha quitado la barrera de potencial. El *suprimir*, en esta corrida, la barrera de potencial nos permite medir sin ninguna distorsión el tiempo que le lleva a una partícula libre llegar hasta el punto donde empieza la barrera de potencial rectangular. A cada energía diferente del paquete de ondas le corresponde un *tiempo de arribo* diferente para llegar al punto donde empieza la barrera de potencial. Una vez que mediante la simulación, hemos

medido los *tiempos de arribo* del paquete, procedemos a medir el *tiempo que le lleva al máximo del paquete emerger de la barrera de potencial*. Para ello fue necesario contar con una subrutina que nos localice el máximo del paquete a la salida de la barrera y que contabilice el tiempo que transcurrió desde que el paquete salió (con un energía dada) de la posición inicial de salida hasta que emergió de la barrera de potencial como paquete transmitido. Obtenido este tiempo procedemos a restarlo del tiempo que le llevó al máximo del paquete arribar hasta donde se encontraba la barrera. La diferencia entre estos tiempos *es el tiempo que le tomó al paquete de ondas atravesar la barrera de potencial*.

Los resultados de la simulación aparecen representados como puntos en las gráficas de las figuras 5.6 y 5.7. La gráfica 5.6 nos muestra los valores del *tiempo que le lleva a un paquete atravesar una barrera que predicen las diferentes teorías de tiempo de tunelaje*, cuando se dibujan como función de la energía para *barreras rectangulares delgadas*. La gráfica 5.7 muestra lo mismo pero para *barreras de potencial anchas (opacas)*. Como explicamos en el capítulo anterior, existen diferencias ente los tiempo de tunelaje que se predicen para barreras delgadas y barreras opacas. La definición de lo que es barrera delgada y opaca depende de la magnitud del producto de  $aV$  para una barrera de anchura  $a$  y altura  $V$ . En las dos subsecciones siguientes haremos un recuento de la simulación y sus resultados en los casos de barrera delgada y barrera opaca separadamente.

### 5.5.1 Caso de la Barrera delgada.

Por medio de nuestro programa de simulación examinamos el caso de los paquetes de onda Gaussianos que son dispersados por una barrera de potencial rectangular delgada. Como se trataba de una barrera delgada se escogió que el ancho  $a$  de la barrera fuera de  $a = 25.0 \text{ \AA}$  y que el valor de la energía potencial fuera de  $V_0 = 0.1 \text{ eV}$ . De esta forma el producto  $aV_0 = 2.5 \approx 1.0$ . Para cada simulación la energía del paquete era distinta; se partía de energías menores que la energía de la barrera y se incrementaba gradualmente el valor de la energía del paquete en cada simulación. La energía mas pequeña del paquete fué de  $E = 0.01 \text{ eV}$  y la más grande de  $E = 0.2 \text{ eV}$  y los incrementos de la energía del paquete fueron de  $\Delta E = 0.01 \text{ eV}$  entre simulación y simulación. Note que el cociente  $E/V$  se puede ver como la variable independiente en nuestra simulación. Una vez aclarado las variaciones de la energía, escogimos los otros parámetros que entran en juego: la anchura inicial del paquete  $\sigma_0 = 300 \text{ \AA}$  (que fué común en todos los casos) y las dimensiones del espacio de coordenadas donde se iba a llevar la acción: decidimos que para evitar

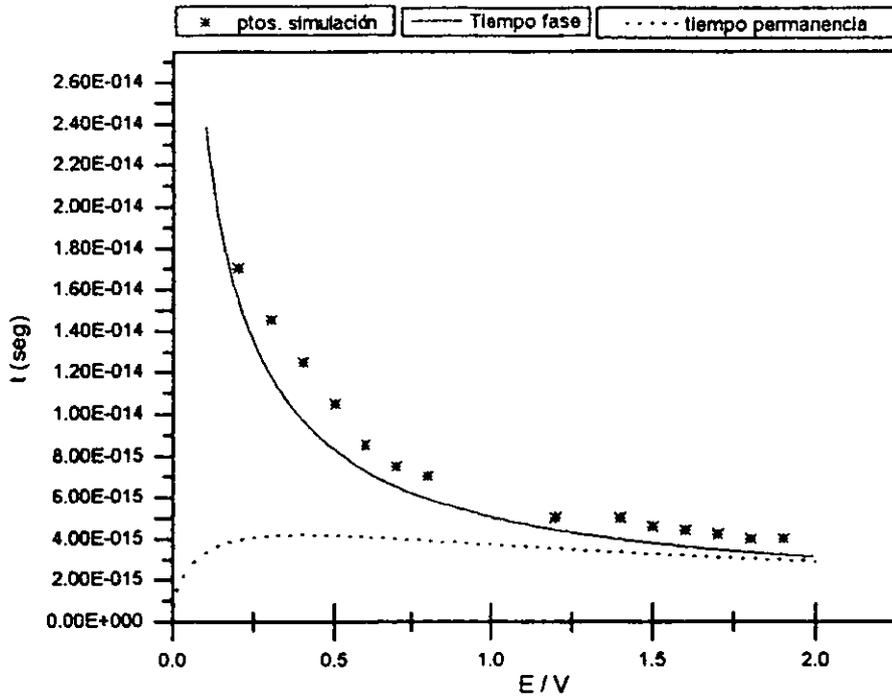


Figura 5.6: Resultados de la simulación, tiempo fase y tiempo de permanencia para barreras delgadas.

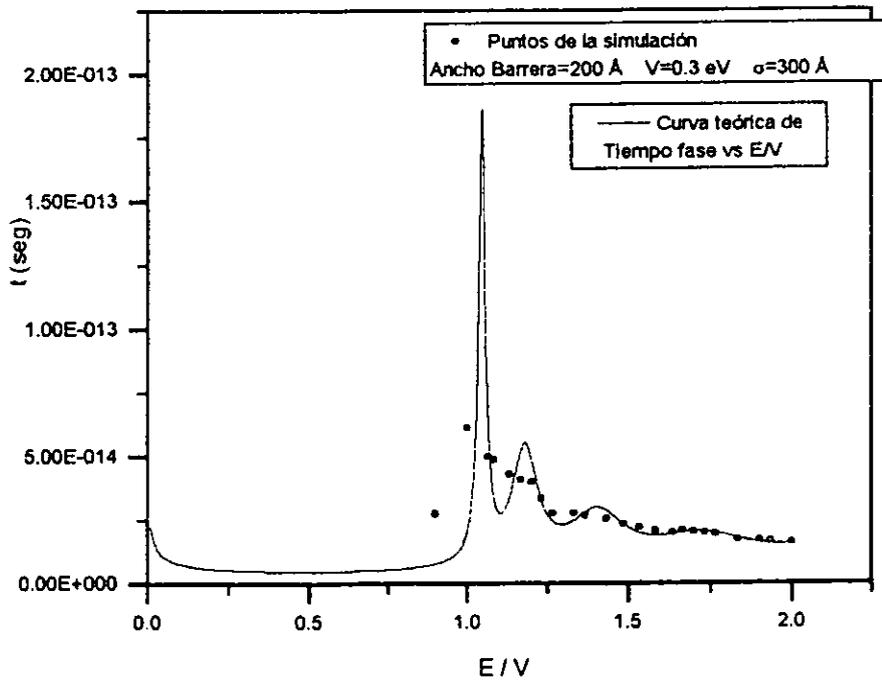


Figura 5.7: Resultados de la simulación y tiempo fase para barreras opacas.

el problema de enrollamiento lo mejor sería que este espacio coordinado fuera lo suficientemente grande para evitar que el paquete transmitido y/o reflejado alcancen los puntos de los bordes izquierdo y derecho que por virtud de la periodicidad de la FFT se vuelven un solo punto. Escogimos un mundo de  $x_{min} = -3000 \text{ \AA}$  y  $x_{max} = 3000 \text{ \AA}$ . De esta manera  $L = 6000 \text{ \AA}$  es la longitud del espacio coordinado donde se realizó la acción. Se observó que cuando el número de puntos de la malla era de 512 y cuando el número de puntos era de 1024 obteníamos exactamente los mismos resultados al medir el tiempo que le toma a un paquete atravesar una barrera de potencial. Cabe señalar que durante la simulación se tiene un reloj que se pone en marcha al tiempo  $t = 0$  cuando empiezan las iteraciones que calculan la evolución del paquete; los incrementos que surge nuestro reloj son de  $\Delta t = 5 \times 10^{-16} \text{ seg}$  (paso de tiempo en esta simulación). Para poder investigar el tiempo que le toma al paquete atravesar la barrera, lo primero que hicimos es escoger un punto inmediatamente afuera de la barrera, llamado punto de observación, donde se detectaba el pico o máximo del paquete transmitido y se registraba la hora a la que este máximo surgía del lado derecho de la barrera como parte del paquete transmitido. Una vez obtenido este tiempo -que llamaremos *tiempo de travesía total*- se procedió a realizar una simulación que nos indicara el tiempo que, *al máximo de un paquete* de idéntica energía a uno de los que chocaron contra la barrera, le llevaba recorrer una distancia que iba desde el punto de salida hasta el punto donde la barrera de potencial empezaba. Es decir el tiempo que al máximo de una partícula libre le lleva el recorrer una distancia que va desde el punto de salida hasta el punto donde empieza la barrera. Es importante recalcar que esta última simulación se hace *sin que la barrera de potencial este presente*. La pregunta que se contesta con esta simulación es: ¿cuanto tiempo tarda una partícula libre recorrer la distancia que hay entre el punto de salida y el punto donde empieza la barrera de potencial?. Obtenido este tiempo -que llamaremos *tiempo de arribo de una partícula libre*- se procedió a restar este tiempo de arribo al tiempo de travesía total (de la partícula que se transmite a través de la barrera) para así obtener el tiempo que una partícula de determinada energía se tarda en atravesar la barrera de potencial estudiada. Los resultados se presentan en la figura 5.6. Es claro de nuestras figura 5.6 que los resultados experimentales que aparecen graficados se ajustan de manera particularmente bien a las predicciones que, para los tiempos de tunelaje, hace la teoría de el tiempo fase.

### 5.5.2 Caso de la Barrera Opaca.

El procedimiento seguido en el caso de la barrera opaca fué el mismo que seguimos en el caso de la barrera delgada. O siendo más descriptivos, podemos decir que primero escogimos la barrera que someteríamos a estudio. Para hablar de una barrera opaca es necesario que el producto  $aV \gg 1$  por lo que escogimos una barrera cuyo ancho fué de  $a = 200 \text{ \AA}$  y cuyo potencial  $V$  era de  $V = 0.3 \text{ eV}$ . El espacio de coordenadas  $x$  donde se llevó acabo la acción tenía una longitud  $L = 6000 \text{ \AA}$  ( $x_{\min} = -3000 \text{ \AA}$ ,  $x_{\max} = 3000 \text{ \AA}$ ). Una vez que escogimos nuestra barrera y el escenario donde se realizaría la simulación, procedimos a escoger varias de las características comunes que iban a tener todos los paquetes que se iban a dispersar en la barrera. Recuérdese que estos paquetes de onda son iguales en todas sus características excepto en el valor de su energía. Entonces escogimos paquetes que tenían una anchura inicial  $\sigma = 300 \text{ \AA}$ , una posición inicial de su máximo en  $x_0 = -1000 \text{ \AA}$ . La energía que poseía cada paquete variaba desde  $E_{\min} = 0.01 \text{ eV}$  hasta  $E_{\max} = 0.60 \text{ eV}$  con incrementos de  $\Delta E = 0.01 \text{ eV}$ . Cabe señalar que durante la simulación se tiene un reloj que se pone en marcha al tiempo  $t = 0$  cuando empiezan las iteraciones que calculan la evolución del paquete; los incrementos que surge nuestro reloj son de  $\Delta t = 9 \times 10^{-16} \text{ seg}$  (paso de tiempo en esta simulación). Procediendo como en el caso de la barrera delgada, escogimos un punto justamente a la salida de la barrera (que llamaremos punto de observación) donde se detectaba el pico o máximo del paquete transmitido y se registraba el tiempo (es decir veíamos la hora que nuestro reloj marcaba) en que este máximo surgía del lado derecho de la barrera como parte del paquete transmitido. Una vez obtenido este tiempo -que llamaremos *tiempo de travesía total*- se procedió a realizar una simulación que nos indicara el tiempo que, al máximo de un paquete de idéntica energía a uno de los que chocaron contra la barrera, le llevaba recorrer una distancia que iba desde el punto de salida hasta el punto donde la barrera de potencial empezaba. Es decir el tiempo que al máximo de una partícula libre le lleva el recorrer una distancia que va desde el punto de salida hasta el punto donde empieza la barrera. También en este caso, es importante recalcar que esta última simulación se hace *sin que la barrera de potencial este presente*. Con esto sabremos cuanto tiempo tarda una partícula libre recorrer la distancia que hay entre el punto de salida y el punto donde empieza la barrera de potencial. A este tiempo le llamaremos *tiempo de arribo de una partícula libre*. Al igual que en el caso de la barrera delgada, se procedió a restar este tiempo de arribo al tiempo de travesía total (de la partícula que se transmite) para así obtener el tiempo que una partícula de determinada energía se tarda en atravesar la barrera de potencial estudiada. Los resultados se presentan en la figura 5.7. Es importante señalar que para valores del

cociente  $E/V < 1$  no se tienen puntos de la simulación. Esto se debe a que cuando la energía del paquete de ondas incidente es menor que la energía de la barrera de potencial (es decir cuando  $E/V < 1$ ) tenemos que los máximos de los paquetes transmitidos no están bien definidos en el caso de la barrera opaca. Es más, cuando la barrera es opaca y la energía del paquete incidente es mucho menor que la energía de la barrera, difícilmente se observa alguna parte transmitida. En general cuando la barrera es opaca y la energía del paquete incidente es menor que la energía de la barrera se observa cierta transmisión pero no un paquete transmitido. Como se dijo en el capítulo cuatro, una de las condiciones para hablar de tiempo fase es el tener un paquete transmitido bien definido y de forma que recuerde al paquete incidente. En la simulación se ve claramente que esta condición no se cumple si  $E/V < 1$  y entonces no es posible asociar un tiempo a la parte transmitida que está muy lejos de ser un paquete. Es más bien una línea horizontal de transmisión sin máximo definido. Para valores donde  $E/V > 1$  se ve claramente que los puntos de la simulación se pegan otra vez a la curva teórica de tiempo fase. Cuando  $E = V$  se presenta un fenómeno de resonancia dependiente del tiempo que la simulación lo muestra en pantalla de manera muy clara y se podría decir que hasta bella.

### 5.5.3 Resonancia dependientes del tiempo.

Cuando nuestra partícula incidente tiene una energía igual a la energía de la barrera de potencial, se presenta el llamado fenómeno de resonancia dependiente del tiempo. En este fenómeno, que es mucho más notorio en barreras opacas, se observa que cuando el paquete incidente choca contra la barrera de potencial parte del paquete se transmite y parte del paquete se refleja, pero una parte del paquete incidente se queda atrapada dentro de la barrera. La parte atrapada, que tiene la forma de un paquete de ondas Gaussiano, rebota dentro de la barrera hacia adelante y hacia atrás. En cada rebote una parte del paquete atrapado sale de la barrera como parte transmitida o como parte reflejada. Eventualmente y usando este mecanismo todo el paquete atrapado logra escapar de la barrera de potencial. Mediante la simulación observamos que suma de la densidad de probabilidad  $\sum |\Psi|^2$  dentro de la barrera se incrementa primero y después decae. Olkhovsky y Recami [Olkhovsky, D., Recami, E., 1992] predicen que este decaimiento, de la suma de la densidad de probabilidad del paquete atrapado, debe ser exponencial en el tiempo. En la figura 5.5 se presenta el choque de un paquete de ondas de anchura inicial  $\sigma_0 = 300 \text{ \AA}$ , posición inicial del centroide en  $x = -1000 \text{ \AA}$  y energía igual al de una barrera de potencial  $V = 0.3 \text{ eV}$ . El ancho de la barrera es de  $a = 200 \text{ \AA}$ . Usando nuestro programa hicimos las

mediciones de la suma de la densidad de probabilidad que se tenía dentro de la barrera. Los resultados se presentan en la figura 5.8. En esta figura se aprecia que la suma de la densidad de probabilidad aumenta primero en el tiempo y después decae. La figura 5.9 muestra que efectivamente este decaimiento es exponencial en el tiempo tal como lo predicen Olkhovsky y Recami. En esta última figura vemos como el decaimiento de la suma de la densidad de probabilidad del paquete de ondas atrapado, una vez que ha alcanzado su máximo, se ajusta a una curva exponencial. Es importante hacer notar que si la energía del paquete es ligeramente mayor o menor que a la energía de la barrera seguimos observando un fenómeno de resonancia y volvemos a tener una situación en donde gran parte del paquete incidente se queda atrapado dentro de la barrera. La evolución temporal de la suma de la densidad de probabilidad dentro de la barrera sigue un comportamiento idéntico al que resulta cuando la energía del paquete incidente es igual a la energía de la barrera de potencial. También en estos casos (en que la energía del paquete incidente es ligeramente mayor o menor que la energía de la barrera) la suma de la densidad de probabilidad  $\sum |\Psi|^2$  dentro de la barrera aumenta al principio muy rápidamente hasta llegar a un máximo para después decaer exponencialmente, como en el caso en que  $E = V_0$ . En la figura 5.10 se muestran y comparan las evoluciones temporales de la suma de la densidad de probabilidad para casos en que  $E$  es ligeramente menor que  $V_0$ ,  $E$  es ligeramente mayor que  $V_0$  y  $E = V_0$ .

Hay un resultado importante que surge al hacer el análisis de los gráficos de la resonancia temporal -figuras 5.8 y 5.9- y del gráfico del tiempo fase teórico para una barrera opaca igual a la que nos ocupa, figura 4.2. En la figura 4.2 se muestra que el tiempo fase que se predice para la energía resonante es de  $\tau = 1.86 \times 10^{-13}$  seg. De un análisis de las figuras 5.8 y 5.9 vemos que en este tiempo la suma de la densidad de probabilidad dentro de la barrera ha disminuído en un 64%. Es decir, de toda la suma de la densidad de probabilidad que llega a quedar atrapada dentro de la barrera, queda por desalojar solo el 36% después de un lapso de tiempo igual a  $\tau$ . O sea que la probabilidad de encontrar atrapada a la partícula dentro de la barrera disminuye en un 64% en este lapso de tiempo. Esto nos indica que el tiempo fase teórico es del mismo orden de magnitud que el tiempo que dura el atrapamiento de la partícula dentro de una barrera en un estado resonante.

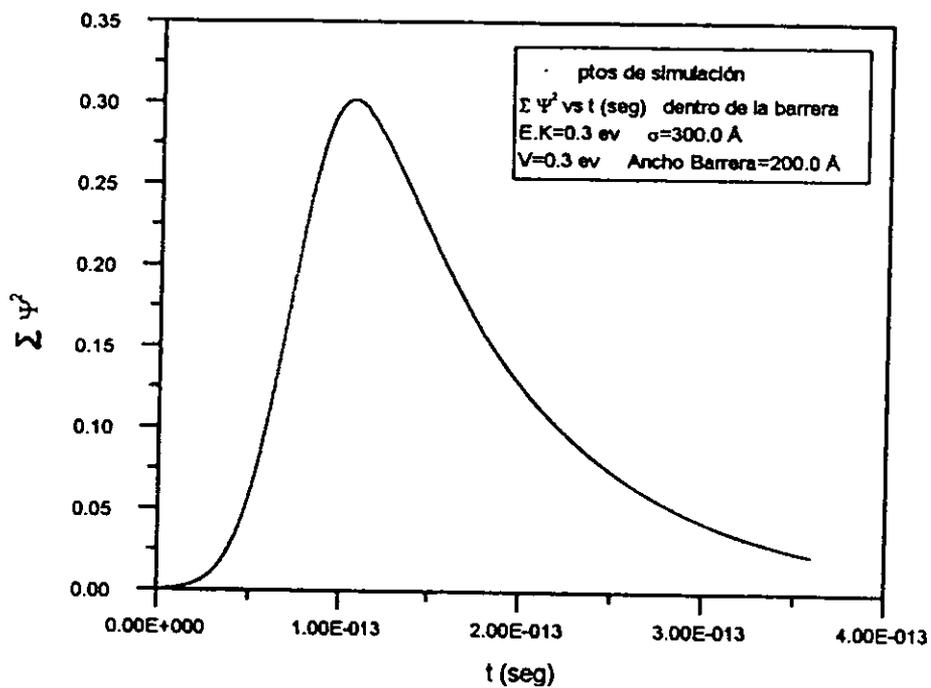


Figura 5.8: Suma de la densidad de probabilidad dentro de una barrera contra tiempo de atrapamiento en el caso resonante.

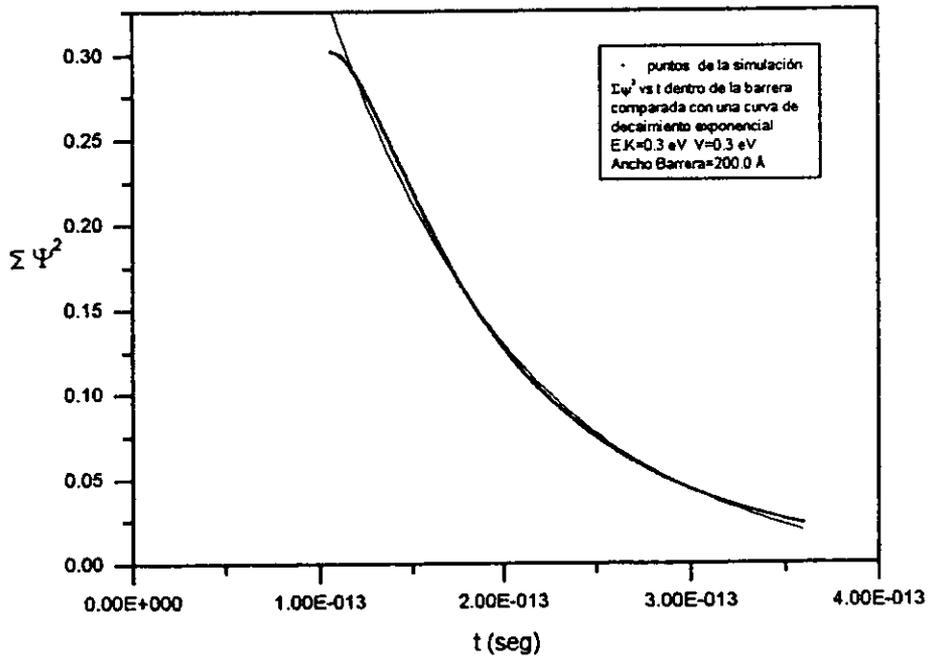


Figura 5.9: Decaimiento exponencial en el tiempo de la suma de la densidad de probabilidad atrapada en una barrera opaca.

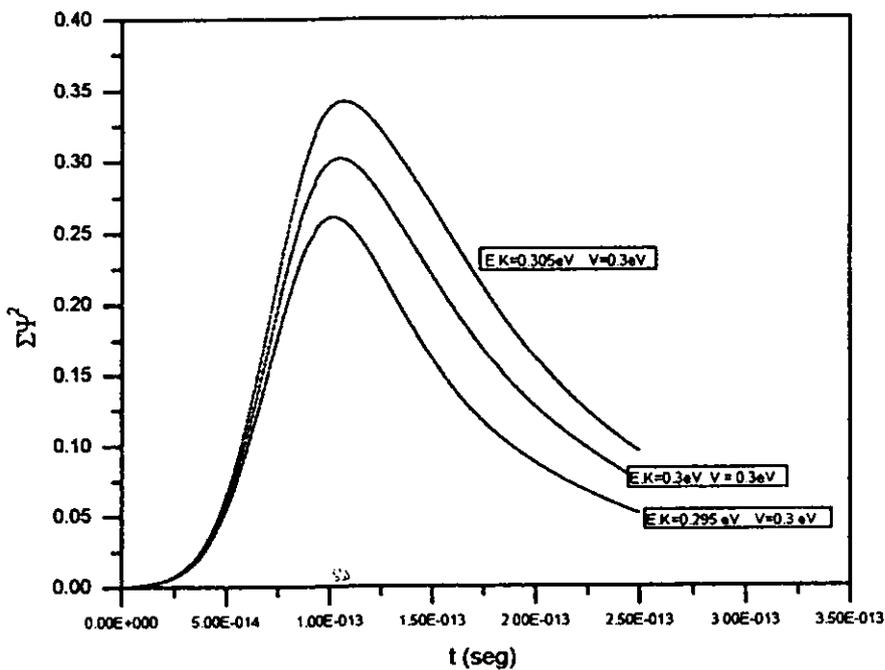


Figura 5.10: Suma de la densidad de probabilidad dentro de una barrera contra tiempo de atrapamiento. Casos donde  $E > V_0$ ,  $E = V_0$ ,  $E < V_0$ .

ESTA TESIS NO DEBE  
SALIR DE LA BIBLIOTECA

## Capítulo 6

### Conclusiones.

A lo largo de este trabajo de tesis hemos tocado diversos temas que tienen un eje común: todos tratan de arrojar alguna luz acerca del problema que plantea la pregunta: ¿Cuánto tiempo tarda una partícula cuántica en atravesar una barrera de potencial?. Para tratar de contestar esta pregunta hemos resuelto numéricamente la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo y hemos simulado la colisión unidimensional de un paquete de onda, que representa una partícula cuántica, con una barrera de potencial. También hemos revisado algunas de las teorías que tratan de dar una respuesta a este cuestionamiento y hemos comparado los resultados que arrojan dichas teorías con los resultados obtenidos por medio de la simulación. La simulación, en sí, nos ha llevado también a analizar algunos fenómenos que, por su interés y relevancia, no podían ser dejados de lado. Este es el caso de las resonancias dependientes del tiempo que se hacen presentes en la simulación de la dispersión de paquetes de onda cuando las energías del paquete y la de la barrera de potencial son iguales. La simulación del fenómeno de resonancias y el análisis de los resultados obtenidos, vienen a arrojar más luz sobre nuestro problema original y nos llevan también, a profundizar en nuestro conocimiento del fenómeno de dispersión.

Hablando más generalmente, el estudio computacional de la evolución temporal de un paquete de ondas tiene la gran virtud de que nos permite la "observación directa" del fenómeno y nos familiariza con él a pesar de las restricciones y limitaciones que se impongan. El poder "medir directamente" ciertas variables relevantes del problema y su evolución temporal junto con la familiaridad que se adquiere por medio de la simulación nos da la posibilidad de arribar a *conclusiones* a las que llegaríamos de una manera mucho más tortuosa, en el caso que dichas conclusiones se pudieran hacer teóricamente. No queremos con esto afirmar que los desarrollos teóricos carecen de importancia, más bien, afirmamos que son ellos los rectores que orientan nuestras investigaciones. Sólo que, muchas conclusiones y aclaraciones conceptuales se pueden hacer si contamos con una solución computacional del problema.

Para hablar de estas conclusiones es necesario no perder de vista que la simulación se realiza para ciertos casos muy específicos y que de éstos, sin descartar sorpresas, se puede deducir un comportamiento general del sistema. Con la simulación podemos deducir un comportamiento general de los paquetes de onda cuánticos que se someten a dispersión sobre todo si los resultados computacionales que se arrojan se ajustan a una de las teorías que predicen el tiempo de tunelaje. Pasemos pues, a presentar las conclusiones de este trabajo.

Desde que se hicieron los primeros estudios teóricos del problema con los trabajos de Wigner [Wigner, E.P, 1955] se han analizado los casos de las barreras delgadas y el de las barreras opacas. Esta división en casos, no constituye un mero capricho sino que viene del hecho de que los resultados que se arrojan en ambos casos son totalmente diferentes. Cada una de las teorías de tiempo de tunelamiento -o de paso por una barrera de potencial- predicen tiempos para barreras angostas que son totalmente diferentes a los tiempos para barreras opacas. Los tiempos que predicen cada una de las teorías para el paso de partículas monoenergéticas a través de barreras opacas son iguales prácticamente en todas las teorías; en cambio los tiempos que se predicen para el paso de partículas monoenergéticas a través de barreras delgadas difieren grandemente en cada una de las teorías. Al hacer nuestro estudio seguimos la misma orientación y separamos los caso de barreras opacas y delgadas. Los tiempos obtenidos por nosotros en la simulación son también, totalmente diferentes en ambos casos. Como vimos en el capítulo cinco, nuestros resultados (el tiempo que le lleva, en la simulación, a un paquete de ondas atravesar una barrera de potencial) se ajustan bastante bien a la predicciones que hace la teoría del tiempo fase tanto en el caso de barreras opacas y como en de barreras delgadas. Los tiempos que se predicen (para las diversas energías del paquete) por las otras teorías analizadas en el capítulo cuatro, son diferentes a los obtenidos en la simulación y están más allá de la magnitud de nuestro error computacional. Hay pues, una convergencia a la teoría del tiempo fase

Es muy importante hacer notar que hay varias condiciones que se tienen que cumplir para que nuestra simulación de los paquetes de onda sea factible: la condición *sine qua non* es que los paquetes antes y después de la colisión tengan una forma que recuerde al paquete original, es decir, que se aproxime en su forma a un paquete gaussiano para poder identificar varias de sus características como podría ser su máximo. Otra de las condiciones, es que tengamos una forma adecuada de medir el tiempo que le lleva a un paquete de onda atravesar una barrera de potencial. Este asunto puede tornarse delicado debido a que existen varias opiniones respecto a este punto. Nosotros hemos seguido el procedimiento expuesto en el capítulo cinco. U-

sando este procedimiento convergemos a los tiempos que predice la teoría del tiempo fase. Si se recuerda, medimos el tiempo (directamente, con nuestro reloj) que le lleva al paquete -o mejor dicho- al máximo del paquete, recorrer la distancia que va desde el punto de salida del paquete (previamente fijado) hasta un punto a la salida de la barrera de potencial. A este tiempo le restamos el tiempo que le llevaría al paquete como partícula libre alcanzar la barrera, es decir el tiempo que le lleva el recorrer (como partícula libre) la distancia que hay entre el punto de salida que hemos fijado y el punto donde empieza la barrera. Seguramente es objetable este método de medición del tiempo. Como relevante es, el hecho de que los puntos de la simulación se ajusten a una teoría previamente establecida.

Las objeciones a nuestro método para medir el tiempo tendrán que ver en última instancia con la interpretación física que se tenga acerca del hecho de que existan, al mismo tiempo, un paquete incidente, uno transmitido y, en el caso de resonancias, un paquete atrapado dentro de la barrera. Diferentes interpretaciones de la función de onda nos llevan a establecer diversas formas de medir el tiempo y a darle un significado diferente a los tiempos obtenidos aún en un mismo experimento. Incluso si hacemos una interpretación tipo Max Born, donde se involucra a un gran número de experimentos con una partícula que tiene, en cada experimento, las mismas condiciones iniciales, tendríamos cuestionamientos como ¿Cuándo atraviesa la partícula a la barrera de potencial? y si no atraviesa ¿tiene sentido de hablar de tiempo de tunelaje?

Como hemos visto a lo largo de esta tesis, las simulaciones numéricas son de gran ayuda para esclarecer algunas situaciones físicas y para apoyar o desmentir lo que se afirma en varias de las teorías del tiempo de travesía pero todavía, como hace cincuenta años, nos remitimos a un problema de interpretación. Desde luego se arroja luz con nuestros experimentos numéricos si se desea contestar categóricamente las preguntas ¿Cuándo atraviesa la partícula a la barrera de potencial? ¿Si la partícula atraviesa, cuanto tiempo se tarda en atravesar la barrera?

# Bibliografía

- [Baker, H.F., 1904] Baker, H.F., Proc. Lond. Math. Soc., Second Ser. 3,24,1904.
- [Baz, A.I., 1967] Baz, A.I., Sov. J. Nucl. Phys. 4,182,1967.
- [Büttiker, M., 1983] Büttiker, M., Larmor precession and the traversal time for tunneling. Physical Review B. 27:6178-6188,1983.
- [Büttiker-Landauer, 1982] Büttiker, M., Landauer, R., Phys. Rev. Lett. 49,1739,1982.
- [Bohm, D., 1951] Bohm, D. *Quantum Theory*. London; Prentice Hall, 1951.
- [Brouard, S., et al, 1994] Brouard, S., Muga, J.G., Sala, R., Systematic approach to define and classify quantum transmission and reflection times. Physical Review A. 49:4312-4325,1994.
- [Campbell, J.E., 1898] Campbell, J.E., Proc. Lond. Math. Soc., 29,14,1898.
- [Collins, S. et al, 1987] Collins, S., Lowe, D., Barker, J.R., The quantum mechanical tunnelling time problem revisited. J. Phys. C: Solid State Physics. 20:6213-6232,1987.
- [De la Peña, Luis, 1991] De La Peña, L. *Mecánica Cuántica*. México; Fondo de Cultura Económica, 1991.

- [Delgado, V., Muga, J.G., 1996] Delgado, V., Muga, J.G., Are anomalously short tunnelling measurable. *Annals of Physics*. 248:122-133,1996.
- [Feit, M.D., *et al*,1982] Feit, M.D., Fleck, Jr., J.A., Steiger, A., Solution of the Schrödinger equation by a spectral method. *Journal of Computational Physics*.47:412-433,1982.
- [Goldberg *et al*, 1967] Goldberg, A., Schey, H., Schwartz, J., Computer-generated motion pictures of one dimensional quantum mechanical transmission and reflection phenomena. *American Journal of Physics*. 35:177-186, 1967
- [Gould, H.,Tobochnik, J.,1988] Gould, H., Tobochnik, J. *Computational Physics*. Reading, MA; Addison-Wesley,1988.
- [Hartman, T.E., 1962] Hartman, T.E., Tunneling of a wave packet. *Journal of Applied Physics*. 33:3427-3433,1962.
- [Hauge, E.H., *et al*, 1989] Hauge, E.H., Stovngeng, J.A., Tunneling times: a critical review. *Reviews of Modern Physics*. 61:917-936,1989.
- [Jauho, A.P., *et al*, 1989] Jauho, A.P., Jonson, M., Tunneling times in heterostructures. *Superlattices and Microstructures*. 6:303-307,1989.
- [Koonin, S.E.,1986] Koonin, S.E. *Computational Physics*. Reading, MA; Addison-Wesley,1986, secciones 7.1,7.2, y 7.5.
- [Landauer, R. *et al*,1992] Landauer, R., Martin, Th., Time delay in wave packet tunneling. *Solid State Communications*. 84:115-117,1992.

- [Landauer, R. *et al*,1994] Landauer, R., Martin, Th., Barrier interaction time in tunneling. *Reviews of Modern Physics*. **66**:217-228,1994.
- [Leforestier, C. *et al*,1991] Leforestier, C *et al*. A comparison of different propagation schemes for the time dependent Schrödinger equation. *Journal of Computational Physics*.**94**:59-80,1991.
- [Muga, J.G., *et al*, 1995] Muga, J.G., Brouard, S., Macías, D. Time of arrival in quantum mechanics. *Annals of Physics*. **240**:351-366,1995.
- [Olkhovsky, V.S., Recami, E., 1992] Olkhovsky, V.S.,Recami, E., Recent developments in the time analysis of tunnelling processes.*Physics Reports*.**214**:339-356,1992.
- [Press *et al*, 1986] Press, W. H., Flannery, B.P., Teukolsky, S.A., Vetterling, W.T. *Numerical Recipes*. Cambridge; Cambridge University Press, 1986.
- [Rybachenko, V.F., 1967] Rybachenko, V.F., *Sov. J. Nucl. Phys*. **5**,635,1967.
- [Smith, F.T., 1960] Smith, F.T., *Phys. Rev*. **118**,349,1960.
- [Wigner, E.P., 1955] Wigner E.P., *Phys. Rev*.**98** :145,1955.