



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA
DE MÉXICO**

**POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS
FACULTAD DE CIENCIAS**

**“MÉTODOS DE VALORES A LA FRONTERA
EN LA SOLUCIÓN DE PROBLEMAS DE
DIFRACCIÓN ESPACIAL Y TEMPORAL
CUÁNTICOS”**

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE:

M A E S T R A E N C I E N C I A S (F Í S I C A)

P R E S E N T A:

NORMA ELIZABETH OLVERA FUENTES

DIRECTOR DE TESIS: DR. SALVADOR VÍCTOR GODOY SALAS

MIEMBRO DE COMITÉ TUTORAL: DR. MANUEL TORRES LABANSAT

MIEMBRO DE COMITÉ TUTORAL: DR. GASTÓN GARCÍA CALDERÓN



**posgrado en ciencias físicas
u n a m**

MÉXICO, D.F.

2006



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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

*“Las grandes cosas no se logran por impulso,
sino por la suma de pequeños hechos”*

Vincent Van Gogh

A mi abuelita Natalia
A mi madre y hermana
A Haydee Tlatelpa Iglesias

Agradecimientos

A la Universidad Nacional Autónoma de México.

Al Dr. Salvador Godoy, por todo el apoyo y facilidades otorgadas para la realización del presente trabajo, entre las cuales destacan: el tiempo que dedicó para despejar mis dudas a la par de mostrarme el camino a seguir en mi formación académica, por su gran dedicación en la revisión y corrección del presente trabajo. Por su gran apoyo académico, personal y por su gran paciencia, muchas gracias.

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT), por la beca recibida a lo largo de mis estudios de Maestría como parte del "Programa de Apoyos para la Formación, el Desarrollo y la Consolidación de Científicos y Tecnólogos y de Recursos Humanos de Alto Nivel", con número de expediente: 186093.

Al Sistema Nacional de Investigadores (SNI), por el estímulo económico que me proporcionó para la conclusión de la presente Tesis: ayudante de investigador con número de expediente 1099- (2006).

A la Dirección General de Estudios de Posgrado (DGEF), por la Beca Complementaria que me brindó en mis estudios de Maestría.

A mi Comité Tutorial: Dr. Manuel Torres Labansat, Dr. Gastón García Calderón, por todas sus sugerencias que complementaron y enriquecieron el presente trabajo, además del apoyo que me brindaron.

A los Sinodales: Dra. Vicenta Sánchez Morales, Dr. Jorge Fujioka Rojas y Dr. Pier Achille Mello Picco, por el tiempo que dedicaron a la revisión del presente trabajo, por sus comentarios y sugerencias, las cuales enriquecieron y complementaron este trabajo.

A mi madre y hermana por todo el amor y apoyo que siempre me han brindado a lo largo de mi vida.

A Roberto Méndez Méndez, por mostrarme otra faceta de la vida, por todo su amor y apoyo.

A Haydee Tlatelpa Iglesias y familia, por ser un ejemplo de vida, por enseñarme a ser una mejor persona, por toda la ayuda y consuelo que siempre recibí.

A mis amigos, de quienes aprendí mucho y que me han enriquecido a nivel académico y personal.

Tengan a bien recibir mi más profunda gratitud.

Índice general

Introducción	2
1. Solución a la ecuación de Schrödinger por el método de valores a la frontera	8
1.1. Caso general	8
1.2. Función de Green para el semiespacio infinito	10
2. El problema del obturador abriéndose con velocidad finita	13
3. La aproximación de Kirchhoff	17
3.1. Comparando la aproximación de Kirchhoff con un caso exacto	18
3.2. Tiempo de relajación longitudinal	21
4. Una nueva condición a la frontera	26
4.1. Una condición a la frontera exacta	26
4.1.1. Tiempo de relajación transversal	28
5. Ejemplos de obturadores abriéndose con velocidad finita	32
5.1. Patrones de difracción espacial	33
5.1.1. Difracción en una orilla recta infinita	33
5.1.2. Difracción por una rendija	42
5.2. Patrones de difracción temporal	51
5.2.1. Difracción por una rendija móvil	51
6. Conclusiones	63
A. Cálculo de $K(z,t)$	69
B. Cálculo de $\psi_0(t_0)$	72
C. Integral (5.9)	74

Introducción

Similitudes entre la Óptica y la Mecánica Cuántica han sido reconocidas hace ya tiempo [1]-[2]. Un ejemplo claro de esto es el fenómeno de difracción en el tiempo, publicado por Moshinsky en 1952 [3]. En un trabajo teórico muy adelantado a su tiempo, Moshinsky investigó el problema del obturador cuántico unidimensional (1D). Consideró un haz de partículas libres, con energía $\varepsilon = p^2/2\mu$, moviéndose paralelamente al eje z . Para todo tiempo negativo, el haz es interceptado en $z = 0$ por un obturador perfectamente absorbente, perpendicular a la dirección del haz. Repentinamente, al tiempo $t = 0$, se abre el obturador a velocidad **infinita**, permitiendo la libre evolución del haz de partículas. ¿Cuál es la densidad de probabilidad observada a una distancia z_0 del obturador?

El problema del obturador implica resolver la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo para una partícula libre, suponiendo la condición inicial:

$$\psi(z, 0) = \begin{cases} \exp(ipz/\hbar) & z \leq 0 \\ 0 & z > 0 \end{cases} . \quad (1)$$

Moshinsky demostró que la libre propagación de esta función de onda inicial tiene solución, $\psi(z, t) = M(z, t; p)$, dada por:

$$M(z, t; p) \equiv \frac{1}{\sqrt{2i}} e^{i(pz - \varepsilon t)/\hbar} \left\{ \sqrt{\frac{i}{2}} + \mathcal{F} \left[\sqrt{\frac{\mu}{\pi \hbar t}} (pt/\mu - z) \right] \right\}, \quad (2)$$

donde $\mathcal{F}(\xi)$ denota la función compleja de Fresnel [4]-[6],

$$\mathcal{F}(\xi) \equiv \int_0^\xi \exp(i\pi u^2/2) du = C(\xi) + iS(\xi), \quad (3)$$

el argumento ξ de la integral de Fresnel es una función de la posición y el tiempo

$$\xi(z, t; p) \equiv \sqrt{\frac{\mu}{\pi \hbar t}} \left(\frac{p}{\mu} t - z \right). \quad (4)$$

Por tanto podemos reescribir la función M como

$$M(z, t; p) \equiv \frac{e^{(i/\hbar)(pz - \varepsilon t)}}{\sqrt{2i}} \left[\left\{ C(\xi(z, t; p)) + \frac{1}{2} \right\} + i \left\{ S(\xi(z, t; p)) + \frac{1}{2} \right\} \right]. \quad (5)$$

La función $M(z, t; p)$ ha sido llamada por Nussenneig [7]-[8] y otros autores la función de Moshinsky; ésta tiene diversas aplicaciones [9]-[16].

De acuerdo a la solución de Moshinsky, para un observador en una posición fija $z = z_0$, la densidad de probabilidad para un haz de partículas liberado en el problema del obturador, evoluciona en el tiempo como:

$$|M(z_0, t; p)|^2 = \frac{1}{2} \left\{ C(\xi(z_0, t; p)) + \frac{1}{2} \right\}^2 + \frac{1}{2} \left\{ S(\xi(z_0, t; p)) + \frac{1}{2} \right\}^2, \quad (6)$$

que es matemáticamente la misma expresión usada en Óptica para la intensidad de luz en la difracción de Fresnel por una orilla recta infinita [17], Fig. (1). Para esta peculiar evolución en el tiempo, Moshinsky acuñó el nombre: *difracción en el tiempo*.

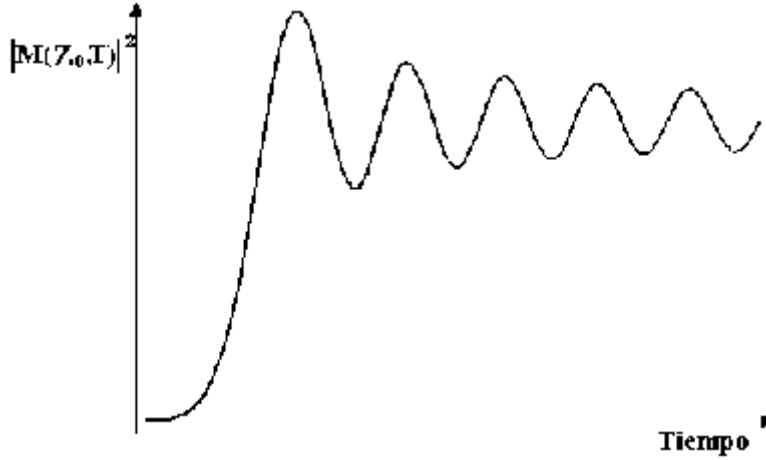


Figura 1: Difracción en el tiempo predicha por la función de Moshinsky.

En la época en que apareció el concepto de difracción en el tiempo, fue claro que la prueba experimental de este efecto era difícil de observar. Para neutrones térmicos, por ejemplo, la teoría cuántica predice oscilaciones temporales en la densidad con una frecuencia del orden de 10^{-6} s. Actualmente los efectos de difracción en el tiempo para partículas masivas tienen la posibilidad de ser verificados utilizando técnicas modernas. Evidencia de esta

predicción cuántica ha sido encontrada recientemente usando neutrones por Felber *et al.* [18], y usando átomos por Szriftigiser *et al.* [19].

Los primeros reportes de difracción en el tiempo por Moshinsky [3] y también por Gerasimov *et al.* [20] fueron para obturadores en una dimensión (1D) que se abren a velocidad infinita. Recientemente los trabajos teóricos y experimentales sobre efectos cuánticos dependientes del tiempo, para obturadores en 3D que se abren a velocidad infinita S. Godoy [21]-[22] y a velocidad finita han sido extensivamente reportados [23]. Estos últimos reportes de difracción a velocidad finita, hechos por la escuela alemana con Felber y Gähler a la cabeza, estudian la transmisión de neutrones monoenergéticos lentos incidiendo sobre dos discos que tienen una pequeña abertura angular y que giran a alta velocidad. Esto es, periódicamente abren y cierran rápidamente el obturador (beam chopping). El problema es que nunca miden la densidad de probabilidad; en vez de esto miden el ensanchamiento del espectro de energía (transformada de Fourier) debido a las discontinuidades del haz.

Debido a la velocidad infinita supuesta en la solución de Moshinsky, es claro que esta solución es inaceptable para describir cualquier experimento real que involucre obturadores.

El objetivo fundamental de esta Tesis es describir una técnica matemática (método de valores a la frontera), para resolver el problema cuántico de obturadores que se abren con velocidad finita.

En el primer capítulo se obtiene la solución a la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo como un problema de valores a la frontera.

En el segundo capítulo veremos como se puede utilizar esta solución de valores a la frontera para obtener soluciones a problemas de obturadores cuánticos que se abren con velocidad finita. Esta técnica tiene la ventaja de incluir no solo la velocidad de apertura de los obturadores, sino también su geometría y cinemática. El inconveniente de esta técnica es que la solución es aproximada, pues para obtener la solución exacta se tiene aún el problema previo de especificar la condición exacta a la frontera dependiente del tiempo, esto es la función de onda $\psi_0(\mathcal{S}, t)$ sobre la superficie frontera \mathcal{S} , tal que describa correctamente el movimiento del obturador. De alguna manera esta función $\psi_0(\mathcal{S}, t)$ depende en forma complicada del transitorio formado por la onda incidente y de la onda dispersada. Desafortunadamente, ni siquiera para las geometrías más simples de un obturador, se sabe cuál es el valor exacto dependiente del tiempo de la función frontera ψ_0 .

En investigaciones sobre electrones, Pauli [24] propuso como remedio a problemas de este tipo, aplicar la bien conocida aproximación de Kirchhoff usada en Óptica [17], la cual define la función frontera como el valor de la

onda plana incidente (*en la ausencia total de cualquier frontera*) calculada en la posición del obturador, multiplicada por una función de transmisión. El problema con esta aproximación es que solamente es válida en estado estacionario, donde el efecto transitorio de la superposición de la onda incidente y la onda dispersada se ha relajado a valores despreciables. Es por esto que el segundo objetivo de esta tesis es incluir como parte del trabajo de esta investigación una nueva función frontera, la cual como veremos es sólo una aproximación válida para obturadores que se abren a gran velocidad.

Por otra parte, las corrientes transitorias en sistemas nanoscópicos que resultan de remover una pared frontera y el corte periódico de un haz monoenergético de partículas para producir pulsos, son justamente algunos de los casos particulares que pueden ser descritos con la teoría de transmisión de ondas cuánticas pasando por obturadores que se abren a velocidad finita. La situación es que, en cada trabajo reportado hasta ahora en la literatura sobre haces pulsados, únicamente la condición a la frontera de Kirchhoff ha sido utilizada para intentar explicar teóricamente los resultados experimentales [19], [25]-[28].

Nos cuestionamos: ¿Para tiempos cortos, qué tan exacta es la aproximación de Kirchhoff?, ¿cuál es su rango de validez?, ¿podemos mejorar la aproximación?

En el tercer capítulo demostraremos que la descripción de la función de onda transmitida usando la condición a la frontera de Kirchhoff puede ser muy poco confiable para trabajos numéricos precisos, especialmente en el régimen transitorio.

En el cuarto capítulo presentaremos la contribución más importante de nuestro trabajo a la investigación. Demostraremos que es posible escribir una nueva función frontera, diferente de la de Kirchhoff. Esta nueva función frontera es también una aproximación, pero en fuerte contraste a la aproximación de Kirchhoff que no es válida para tiempos cortos, la nueva función frontera que aquí encontramos sí es válida para tiempos cortos, y en consecuencia sirve para describir correctamente los efectos de difracción para obturadores que se abren rápidamente.

Dado que la función de onda transmitida en el problema del obturador depende de las coordenadas y el tiempo, esperamos obtener patrones de difracción tanto espaciales como temporales. En el quinto capítulo calcularemos, utilizando nuestra nueva función frontera, funciones de onda transmitidas para distintos obturadores que se abren a velocidades mucho mayores que la velocidad de propagación de la partícula. Para estudiar el caso de difracción espacial, seleccionaremos primero dos modelos de obturador que tengan una contraparte en Óptica, donde podamos comparar nuestros re-

sultados de difracción espacial cuánticos contra los bien conocidos patrones de difracción espaciales en Óptica. Hay dos resultados en Óptica que son bien conocidos: Difracción por una orilla recta y difracción por una rendija. Los patrones de difracción en Óptica son casos estacionarios; es por esto que seleccionaremos obturadores cuánticos tales que la función de onda transmitida, en el límite de tiempos largos, tenga una densidad de probabilidad espacial que se pueda comparar con los patrones de difracción en Óptica. Por otro lado, para comparar patrones de difracción temporal conocemos sólo el caso exacto de la difracción de Moshinsky. Por tanto, para comparar nuestros resultados de difracción temporal contra el de Moshinsky, seleccionaremos otro tipo de obturador que nos permita, para altas velocidades de apertura, ver si nuestros resultados de difracción en el tiempo se asemejan al patrón de Moshinsky.

Para concluir el presente trabajo, se incluyen las conclusiones sobre los resultados obtenidos y los respectivos apéndices.

Capítulo 1

Solución a la ecuación de Schrödinger por el método de valores a la frontera

1.1. Caso general

Consideremos la solución $\psi(\mathbf{r}, t)$ de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo:

$$\frac{\partial\psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} - i\gamma\nabla^2\psi(\mathbf{r}, t) = 0, \quad \gamma \equiv \frac{\hbar}{2\mu}. \quad (1.1)$$

La solución ψ no está definida en el espacio infinito como comúnmente se trabaja, sino en una región \mathcal{R} delimitada por una superficie cerrada \mathcal{S}_0 . Este problema de valores a la frontera tiene solución, como es bien sabido, si especificamos dos condiciones:

1. *Condición inicial* $\psi(\mathbf{r}_0, 0)$ en todo punto interior de la región \mathcal{R} , y
2. *Valores a la frontera* en todos los puntos \mathbf{r}_0 sobre la superficie \mathcal{S}_0 : de la función de onda $\psi(\mathbf{r}_0, t)$ (Dirichlet) o bien de la derivada normal $\nabla\psi(\mathbf{r}_0, t) \cdot \hat{n}$ (Neumann), donde \hat{n} es un vector unitario normal hacia afuera de la superficie. Solo una de estas condiciones a la frontera se elige, no ambas.

La solución de este problema se puede obtener por la técnica de la función de Green $G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}_0, t_0)$, definida como la solución de la ecuación:

$$\frac{\partial G}{\partial t} - i\gamma\nabla^2 G = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)\delta(t - t_0), \quad (1.2)$$

en el mismo dominio \mathcal{R} de nuestro problema original. La función de Green debe satisfacer las condiciones:

1. Condición inicial: $G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}_0, t_0) = 0$ para $t < t_0$ (causalidad).
2. Condiciones a la frontera: la función de Green debe satisfacer en todos los puntos \mathbf{r}_0 sobre la superficie \mathcal{S}_0 , el mismo tipo de condiciones a la frontera que las del problema inicial (Dirichlet o Neumann) pero homogéneas: $G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}_0, t_0) = 0$ (Dirichlet) o bien $\nabla G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}_0, t_0) \cdot \hat{\mathbf{n}} = 0$ (Neumann).

Es bien conocido en la literatura que la solución a la ecuación de Schrödinger en términos de la función de Green está dada por [35]-[37]:

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}, t) &= \int_{\mathcal{R}} d^3x_0 G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}_0, 0) \psi(\mathbf{r}_0, 0) \\ &\quad + i\gamma \int_0^t dt_0 \oint_{\mathcal{S}} [G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}_0, t_0) \nabla_{\mathbf{r}_0} \psi(\mathbf{r}_0, t_0) \\ &\quad - \psi(\mathbf{r}_0, t_0) \nabla_{\mathbf{r}_0} G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}_0, t_0)] \cdot \mathbf{n} dS_0. \end{aligned} \quad (1.3)$$

En esta ecuación podemos ver la influencia sobre la solución ψ , en cada punto de observación (\mathbf{r}, t) , de los dos términos de la solución: la primera integral

$$\int_{\mathcal{R}} d^3x_0 G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}_0, 0) \psi(\mathbf{r}_0, 0), \quad (1.4)$$

es el término que da la contribución de la función de onda inicial $\psi(\mathbf{r}_0, 0)$, donde la función de Green $G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}_0, 0)$ es simplemente el propagador de la onda del punto $(\mathbf{r}_0, 0)$ al punto de observación (\mathbf{r}, t) . La segunda integral es de la forma

$$\int_0^t dt_0 \oint_{\mathcal{S}} [G \nabla_{\mathbf{r}_0} \psi - \psi \nabla_{\mathbf{r}_0} G] \cdot \mathbf{n} dS_0, \quad (1.5)$$

que es la contribución de las fronteras a la solución. Nótese que aquí debemos escoger entre Dirichlet o Neumann pero no ambos. Además, las condiciones a la frontera son dependientes del tiempo y sólo influyen a la solución para $t_0 < t$ (causalidad).

1.2. Función de Green para el semiespacio infinito

En esta sección, obtendremos la función de Green $G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}_0, t_0)$ necesaria para resolver la ecuación de Schrödinger en el volumen semi-infinito del eje z positivo ($z > 0$). Como anticipación a nuestro problema de Física, seleccionaremos explícitamente las condiciones de Dirichlet para la función de Green. Por tanto, necesitamos resolver:

$$\frac{\partial G}{\partial t} - i\gamma \nabla^2 G = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)\delta(t - t_0), \quad (1.6)$$

en la región $z > 0$, con condiciones causales: $G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}_0, t_0) = 0$ para $t < t_0$, y condiciones a la frontera $G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}_0, t_0) = 0$ sobre toda la superficie que incluye el plano $z = 0$ y una semiesfera de radio infinito en la región de z positivas ($x^2 + y^2 + z^2 = R^2 \rightarrow \infty, z \geq 0$) Fig. (1.1).

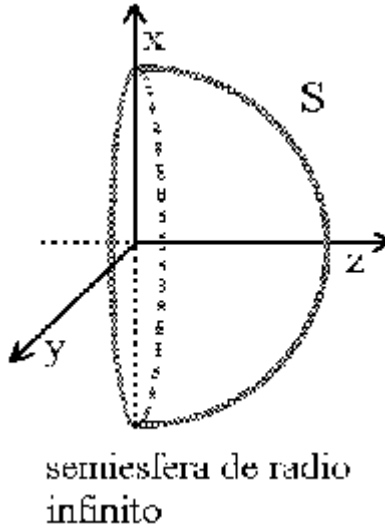


Figura 1.1: Dominio para este problema de valores a la frontera.

Para una partícula libre, en coordenadas cartesianas, la función de Green G es separable en tres funciones de Green unidimensionales [35]:

$$G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}_0, t_0) = g_1(x, t; x_0, t_0)g_2(y, t; y_0, t_0)g_3(z, t; z_0, t_0). \quad (1.7)$$

Dado que no hay condición a la frontera (ni potenciales) a lo largo de los ejes x y y entonces, individualmente g_1 y g_2 son los propagadores libres en

sus subespacios correspondientes:

$$g_1(x, t; x_0, t_0) = \frac{1}{\sqrt{4\pi i\gamma(t-t_0)}} \exp\left(\frac{i(x-x_0)^2}{4\gamma(t-t_0)}\right)\theta(t-t_0), \quad (1.8)$$

$$g_2(y, t; y_0, t_0) = \frac{1}{\sqrt{4\pi i\gamma(t-t_0)}} \exp\left(\frac{i(y-y_0)^2}{4\gamma(t-t_0)}\right)\theta(t-t_0), \quad (1.9)$$

donde $\theta(t-t_0)$ es la función escalón de Heaviside necesaria para satisfacer la condición de causalidad. Podemos en la práctica prescindir de esta función θ puesto que la condición de causalidad ya está incluida en la Ec. (1.3), dado que el rango de integración en t_0 es $0 \leq t_0 \leq t$. Nótese que en la frontera esférica, cuando $x^2 \rightarrow \infty$, g_1 oscila infinitamente rápido y su contribución a la integral es nula; esto hace que la función g_1 satisfaga las condiciones de Dirichlet; en forma semejante para g_2 .

La función de Green g_3 , por otro lado, aunque sigue siendo un propagador libre, debe satisfacer la condición a la frontera: $g_3 = 0$ en $z = 0$. La función g_3 se puede obtener rápidamente por el método de imágenes [36], donde tenemos una función delta en $z = z_0$ y otra función delta negativa en $z = -z_0$:

$$g_3 = \frac{1}{\sqrt{4\pi i\gamma(t-t_0)}} \left\{ \exp\left[\frac{i(z-z_0)^2}{4\gamma(t-t_0)}\right] - \exp\left[\frac{i(z+z_0)^2}{4\gamma(t-t_0)}\right] \right\}. \quad (1.10)$$

Sustituyendo estos resultados en la Ec. (1.3) junto con

$$\nabla_{\mathbf{r}_0} G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}_0, t_0) \cdot (-\hat{\mathbf{k}}) = -g_1 g_2 \frac{\partial g_3}{\partial z_0}, \quad (1.11)$$

tenemos finalmente la solución general de la ecuación de Schrödinger al problema de Dirichlet en la región de zetas positivas:

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}, t) &= \int_{\mathcal{R}} d^3x_0 G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}_0, 0) \psi(\mathbf{r}_0, 0) \\ &+ i\gamma \int_0^t dt_0 \left. \frac{\partial g_3}{\partial z_0} \right|_{z_0=0} \iint_{-\infty}^{+\infty} dx_0 dy_0 g_1 g_2 \psi_0(x_0, y_0, z_0 = 0, t_0), \end{aligned} \quad (1.12)$$

donde

$$\left. \frac{\partial g_3}{\partial z_0} \right|_{z_0=0} = \frac{z \exp[iz^2/4\gamma(t-t_0)]}{\sqrt{4\pi} [i\gamma(t-t_0)]^{3/2}}, \quad (1.13)$$

hemos denotado con un subíndice 0 a la función en la frontera, $\psi_0(x_0, y_0, z_0 = 0, t_0)$, para distinguirla en nuestros comentarios de la solución $\psi(\mathbf{r}, t)$ válida en todos los puntos interiores a la región \mathcal{R} .

En el siguiente capítulo veremos como se puede utilizar esta solución de valores a la frontera para resolver el problema del obturador en Mecánica Cuántica.

Capítulo 2

El problema del obturador abriéndose con velocidad finita

Consideremos un obturador totalmente absorbente, localizado en el plano $z = 0$, sobre el cual incide, por el lado izquierdo, una onda plana

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \exp[i(pz - \varepsilon t)/\hbar]. \quad (2.1)$$

Esta función de onda describe un haz continuo de partículas libres de energía $\varepsilon = p^2/2\mu$ que se mueven paralelamente al eje z . El obturador está cerrado para todo tiempo negativo; súbitamente a $t = 0$ se empieza a abrir con velocidad finita v_0 , ver Fig. (2.1). Deseamos encontrar la función transmitida a la derecha del obturador.

Moshinsky, para el caso de v_0 infinita, específicamente seleccionó la región de interés $\mathcal{R}' = \{0 < |\mathbf{r}_0| < \infty\}$; esto es, todo el espacio infinito. En ese caso, las condiciones a la frontera (Dirichlet o Neumann) son despreciables, y en la solución al problema del obturador, con la selección de Moshinsky, contribuye sólo el primer término de la Ec. (1.3); esto es, tenemos un problema de condiciones iniciales:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \int_{\mathcal{R}'} d^3x_0 G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}_0, 0) \psi(\mathbf{r}_0, 0), \quad (2.2)$$

donde

$$\psi(\mathbf{r}_0, 0) = \begin{cases} \exp[ipz_0/\hbar] & z_0 < 0 \\ 0 & z_0 \geq 0 \end{cases} . \quad (2.3)$$

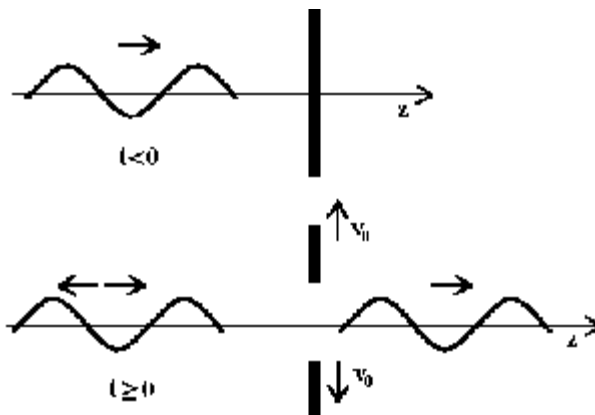


Figura 2.1: Estado físico del obturador abriéndose con velocidad finita. Nótese las ondas entrantes y salientes.

La gran ventaja de esta selección de la región de interés \mathcal{R}' , es que la información de la onda entrante se puede incluir; la desventaja es que, la información del movimiento de apertura continuo del obturador no se puede incluir en esta descripción de condiciones iniciales. Lo que deseamos es poder incluir la información de la apertura con velocidad finita de este obturador. Con este fin, cambiamos la manera de resolver la ecuación de Schrödinger. Pensamos que si incluimos las condiciones a la frontera podremos de alguna manera incluir en esas condiciones el movimiento del obturador.

Como otra alternativa a la selección de Moshinsky, seleccionemos pues la región de interés como el volumen a la derecha del obturador $\mathcal{R} = \{\mathbf{r}_0 \mid 0 < z_0\}$, ver Fig. (2.2). Para obtener la solución de la onda transmitida a la derecha del obturador, consideramos la solución de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo como un problema de valores a la frontera. Como ya vimos la solución particular, válida para la región \mathcal{R} , está dada por la Ec. (1.12):

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}, t; v_0) &= \int_{\mathcal{R}} d^3x_0 G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}_0, 0) \psi(\mathbf{r}_0, 0) \\ &+ i\gamma \int_0^t dt_0 \left. \frac{\partial g_3}{\partial z_0} \right|_{z_0=0} \iint_{-\infty}^{+\infty} dx_0 dy_0 g_1 g_2 \psi_0(x_0, y_0, t_0; v_0). \end{aligned} \quad (2.4)$$

Aquí la superficie frontera \mathcal{S}_0 es el plano $z = 0$ junto con la semiesfera de

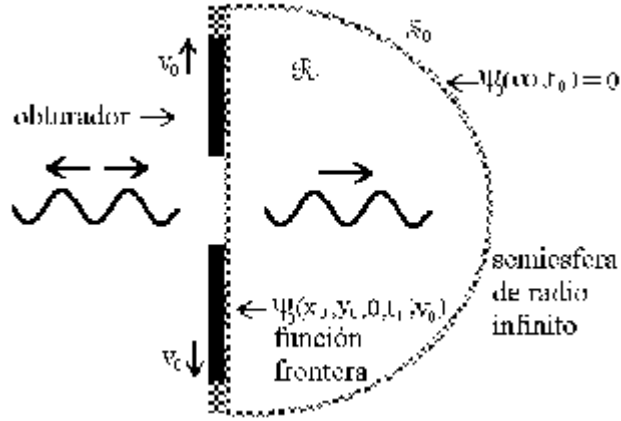


Figura 2.2: Región que define el problema de valores a la frontera para el obturador cuántico.

radio infinito que mencionamos en el capítulo previo.

Obviamente en esta región de interés \mathcal{R} , dado que el obturador estaba inicialmente cerrado, la condición inicial es $\psi(\mathbf{r}, 0) = 0$, para toda $z > 0$. Por otro lado, suponemos que la función frontera ψ_0 sobre la semiesfera infinita es cero, dando la semiesfera una contribución nula a la solución. Por tanto, la solución de la ecuación de Schrödinger contiene únicamente contribuciones de valores a la frontera sobre el plano del obturador ($z = 0$). Tenemos entonces, según la Ec. (2.4), que la solución al problema es:

$$\psi(\mathbf{r}, t; v_0) = +i\gamma \int_0^t dt_0 \left. \frac{\partial g_3}{\partial z_0} \right|_{z_0=0} \iint_{-\infty}^{+\infty} dx_0 dy_0 g_1 g_2 \psi_0(x_0, y_0, t_0; v_0). \quad (2.5)$$

Esta es la solución, como problema de valores a la frontera, para el obturador.

Como todo en la vida, algo se gana y algo se pierde. Para ser honesta la principal desventaja de esta solución es que no conocemos el valor de la función frontera $\psi_0(x_0, y_0, t_0; v_0)$. Conocer ψ_0 como función del tiempo es crítico en esta forma de la solución. Sin embargo no sabemos para el problema del obturador cuál es la forma exacta de esta función. Podemos inferir en base a experiencia previa en teoría de dispersión que la función ψ_0 es la superposición de la onda incidente y la onda dispersada [10]. Esta onda dispersada es a su vez fuertemente dependiente de la geometría y velocidad de apertura del obturador. Conocer esta función exactamente implicaría conocer la solución exacta del problema de dispersión dependiente del tiempo

para el problema del obturador. Como nadie sabe cuál es esta solución, necesitamos recurrir a una aproximación.

Capítulo 3

La aproximación de Kirchhoff

En la solución de la ecuación de Schrödinger en términos de valores a la frontera, en el semiespacio de zetas positivas tenemos:

$$\psi(\mathbf{r}, t; v_0) = i\gamma \int_0^t dt_0 \left. \frac{\partial g_3}{\partial z_0} \right|_{z_0=0} \iint_{-\infty}^{+\infty} dx_0 dy_0 g_1 g_2 \psi_0(x_0, y_0, t_0; v_0). \quad (3.1)$$

Aunque la Ec. (3.1) es una representación exacta, tenemos el problema urgente de especificar la condición a la frontera ψ_0 tal que describa correctamente el problema del obturador. De alguna manera esta función depende de la onda que incide por la izquierda y de la geometría del obturador. Desafortunadamente nadie sabe cuál es el valor exacto de la función frontera ψ_0 . Es por esto que recurrimos a una aproximación. En investigaciones sobre electrones, Pauli [24] propuso como remedio a problemas de este tipo, aplicar la bien conocida aproximación de Kirchhoff usada en Óptica [17].

La aproximación de Kirchhoff define la función frontera ψ_0 como el valor de la onda plana incidente $e^{i(pz - \varepsilon t)/\hbar}$ (en la ausencia total de cualquier frontera) calculada en la posición del obturador en $z = 0$, multiplicada por una función de transmisión T . Esto es, por definición la aproximación de Kirchhoff se escribe:

$$\psi_0(x_0, y_0, t_0; v_0) \equiv e^{-i\varepsilon t_0/\hbar} T(x_0, y_0, t_0; v_0). \quad (3.2)$$

La función de transmisión T es una función dependiente de t para el obturador que se abre con velocidad finita v_0 , definida por $T = 1$ en la región

(x_0, y_0) donde el obturador está abierto, y $T = 0$ en la región donde el obturador está cerrado (T describe una máscara que cambia en el tiempo).

En Óptica es bien sabido que la condición a la frontera de Kirchhoff [17], es válida sólo en el límite de longitudes de onda cortas comparadas con las dimensiones de la abertura difractante. Por consiguiente, esperamos que en Mecánica Cuántica la aproximación de Kirchhoff no pueda dar resultados precisos en el régimen transitorio, porque para tiempos cortos el obturador está en el proceso inicial de apertura y la abertura puede ser tan pequeña como se quiera.

La situación, sin embargo, es que en cada trabajo reportado hasta ahora en la literatura sobre haces transmitidos en forma periódica, únicamente la condición a la frontera de Kirchhoff ha sido utilizada para intentar explicar teóricamente los resultados experimentales [19], [25]-[28]. La validez de la aproximación de Kirchhoff es dudosa para explicar los resultados de pulsos periódicos muy rápidos [28]. Creemos que todo esto ocurre porque no hay otra elección para la condición a la frontera en la literatura.

Para la condición a la frontera de Kirchhoff surgen varias preguntas. ¿Para tiempos cortos, qué tan exacta es la aproximación de Kirchhoff?, ¿cuál es su rango de validez?, ¿podemos mejorar la aproximación?

Responderemos a estas interrogantes en los siguientes capítulos.

3.1. Comparando la aproximación de Kirchhoff con un caso exacto

Con el objeto de comparar qué tan exacta es la aproximación de Kirchhoff resolvamos, usando esta función frontera, un problema donde conocemos la solución exacta. El único problema de obturador del cual conocemos la solución exacta es el problema de Moshinsky mencionado en la Introducción. Derivemos pues, utilizando la aproximación de Kirchhoff, la onda transmitida para un obturador abriéndose a velocidad **infinita**.

Para este problema la función de transmisión del obturador es:

$$T = \begin{cases} 1 & t_0 \geq 0, \text{ para todo } (x_0, y_0) \\ 0 & t_0 < 0. \end{cases} \quad (3.3)$$

La representación integral para la función de onda transmitida en este problema, denotada por $K(\mathbf{r}, t)$ (para diferenciarla de la solución exacta de

Moshinsky $M(\mathbf{r}, t)$ es, según las Ecs. (3.1), (3.2) y (3.3):

$$K(\mathbf{r}, t) = i\gamma \int_0^t dt_0 e^{-i\varepsilon t_0/\hbar} \left. \frac{\partial g_3}{\partial z_0} \right|_{z_0=0} \iint_{-\infty}^{+\infty} dx_0 dy_0 \, 1 \, g_1 g_2. \quad (3.4)$$

Las integrales en x_0, y_0 son inmediatas. Utilizando el hecho de que cada uno de los propagadores g_1 y g_2 es una función gaussiana normalizada, tenemos

$$\int_{-\infty}^{+\infty} g_1 dx_0 = \int_{-\infty}^{+\infty} g_2 dy_0 = 1, \quad (3.5)$$

lo cual implica que K es una función sólo de z , independiente de x, y ; el problema es invariante ante rotaciones alrededor del eje z y traslaciones en el plano xy . Por lo tanto tenemos para K una última integral en t_0

$$K(z, t) = i\gamma \int_0^t dt_0 \exp(-i\varepsilon t_0/\hbar) \frac{z \exp [iz^2/4\gamma(t-t_0)]}{\sqrt{4\pi} [i\gamma(t-t_0)]^{3/2}}. \quad (3.6)$$

Esta integral se mira impresionante, sin embargo como es una convolución, pudimos resolverla en forma *analítica exacta* utilizando técnicas de transformadas de Laplace. El método de integración está mostrado en el Apéndice A y el resultado exacto está dado por la Ec. (A.14):

$$\begin{aligned} K(z, t; p) &= \frac{e^{i(pz-\varepsilon t)/\hbar}}{\sqrt{2i}} \left\{ \sqrt{\frac{i}{2}} + \mathcal{F} \left[\sqrt{\frac{\mu}{\pi\hbar t}} (pt/\mu - z) \right] \right\} + \\ &+ \frac{e^{i(-pz-\varepsilon t)/\hbar}}{\sqrt{2i}} \left\{ \sqrt{\frac{i}{2}} + \mathcal{F} \left[\sqrt{\frac{\mu}{\pi\hbar t}} (-pt/\mu - z) \right] \right\} \\ &= M(z, t; p) + M(z, t; -p). \end{aligned} \quad (3.7)$$

Este resultado matemáticamente exacto muestra, como era de esperarse, que la función K no reproduce la solución exacta $M(z, t; p)$. La predicción errónea en la función de onda K es evidentemente la contribución aditiva de

$$M(z, t; -p) \equiv \frac{e^{i(-pz-\varepsilon t)/\hbar}}{\sqrt{2i}} \left\{ \sqrt{\frac{i}{2}} + \mathcal{F} \left[\sqrt{\frac{\mu}{\pi\hbar t}} (-pt/\mu - z) \right] \right\}, \quad (3.8)$$

que representa, para puntos a la derecha del obturador $z > 0$, un paquete de onda viajando a la *izquierda*; un resultado físicamente inaceptable.

Sin embargo, como demostramos a continuación, el error $M(z, t; -p)$ es, en algunas circunstancias, despreciable. En efecto, escribiendo en forma adimensional el argumento de la función de Fresnel \mathcal{F} que aparece en $M(z, t; -p)$:

$$\xi(z, t; -p) \equiv \sqrt{\frac{\mu}{\pi \hbar t}} (-pt/\mu - z) = -(2\sqrt{T} + \frac{Z}{\sqrt{T}}), \quad (3.9)$$

donde $Z \equiv z/\lambda$ y $T \equiv t\nu$, con $\lambda \equiv 2\pi\hbar/p$ y $\nu = \varepsilon/2\pi\hbar$, son la longitud de onda y la frecuencia de la partícula respectivamente. Es evidente que $\xi(z, t; -p)$ es un número negativo que puede ser muy grande para puntos de observación (Z, T) en cualquiera de las regiones:

- a) Z arbitraria y T grande ($T \gg 1$), o bien
- b) Z grande y T pequeña, de manera que $Z \gg \sqrt{T}$.

Para cualquier punto que se encuentre en dichos rangos $|\xi(z, t; -p)| \gg 1$ y podemos desarrollar la función $M(z, t; -p)$ en una expansión asintótica en la variable ξ [38]:

$$\begin{aligned} M(z, t; -p) &= \frac{e^{i(-pz-\varepsilon t)/\hbar}}{\sqrt{2i}} \left\{ \sqrt{\frac{i}{2}} - \sqrt{\frac{i}{2}} - \frac{i}{\pi\xi} e^{i\pi\xi^2/2} + \dots \right\} \\ &\sim -\frac{e^{i(-pz-\varepsilon t)/\hbar}}{\sqrt{2i}} \frac{i}{\pi\xi} e^{i\pi\xi^2/2}, \end{aligned} \quad (3.10)$$

la cual es despreciable.

En consecuencia, para puntos de observación (Z, T) en las regiones mencionadas tenemos que

$$\lim_{|\xi| \gg 1} K(z, t; p) \rightarrow M(z, t; p). \quad (3.11)$$

Esto lo podemos constatar en la Fig. (3.1) donde gráficamente como función de tiempos pequeños y para valores fijos de $Z = 3$ y $Z = 25$ los valores simultáneos de $|K(Z, T)|^2$ y $|M(Z, T)|^2$.

En el caso contrario, para puntos (Z, T) en el rango de las condiciones $T \leq 1$ y $Z \leq \sqrt{T}$, ocurre que $|\xi(z, t; -p)| < 1$. Podemos entonces hacer una expansión en serie de Taylor de $M(z, t; -p)$ alrededor del origen:

$$M(z, t; -p) \simeq \frac{1}{\sqrt{2i}} e^{i(-pz-\varepsilon t)/\hbar} \left\{ \sqrt{\frac{i}{2}} + \xi + \frac{i\pi}{6} \xi^3 + \dots \right\}. \quad (3.12)$$

Esto demuestra que para valores muy chicos de $|\xi|$, $M(z, t; -p)$ es una función compleja de módulo $1/2$. La adición de esta función y su interferencia,

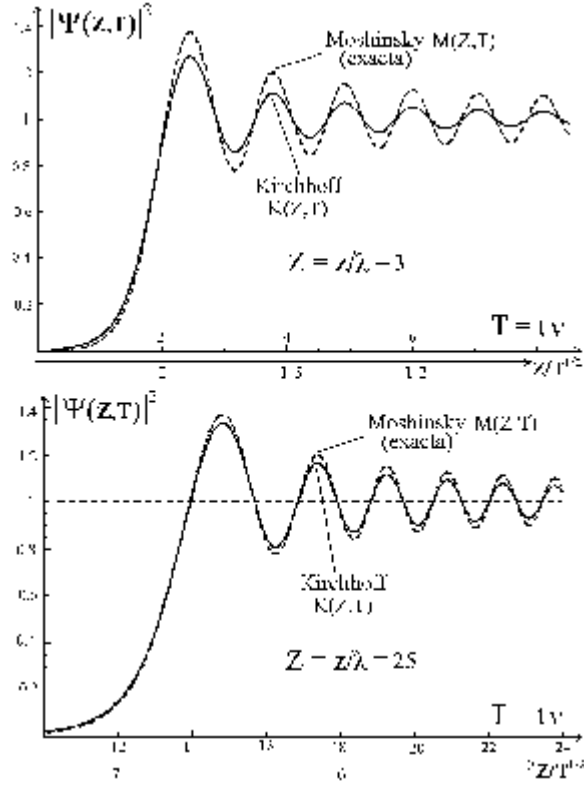


Figura 3.1: Se gráficán como función del tiempo y para valores fijos de $z/\lambda = 3, 25$ los valores simultáneos de $|K(Z, T)|^2$ y $|M(Z, T)|^2$.

no es despreciable para una $M(z, t; +p)$ que oscila entre los valores 0.7 y 1.4. Lo anterior lo podemos constatar al ver la Fig. (3.2) donde graficamos como función del tiempo T y para un valor fijo de $Z = 0.2$, los valores simultáneos y *exactos* de $|K(Z, T)|^2$ y $|M(Z, T)|^2$. En este caso constatamos que la descripción de la función de onda transmitida usando la condición a la frontera de Kirchhoff no es confiable en el régimen transitorio.

3.2. Tiempo de relajación longitudinal

Nuestra teoría no estará completa hasta que definamos para el proceso de difracción en el tiempo, el concepto de *régimen transitorio*. Entendemos por régimen transitorio esencialmente el régimen temporal donde el sistema está

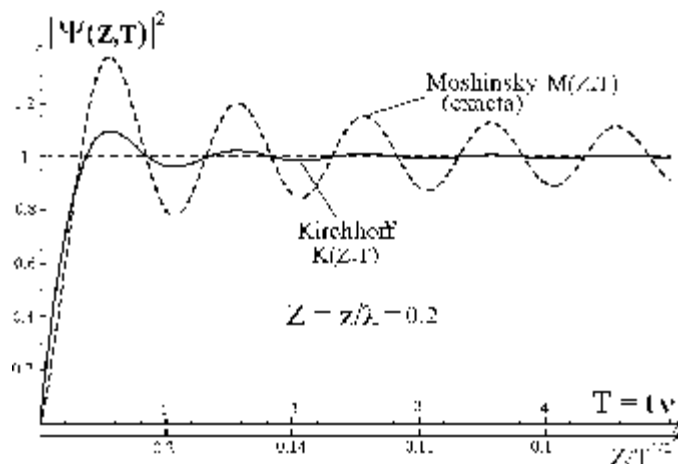


Figura 3.2: Se gráficaron como función del tiempo y para un valor fijo de $z/\lambda = 0.2$, los valores simultáneos de $|K(Z, T)|^2$ y $|M(Z, T)|^2$.

cambiando en el tiempo (mayormente donde existen oscilaciones), en contraposición al régimen estacionario donde ya no hay cambios (oscilaciones) y que sólo ocurre a $t \rightarrow \infty$.

De la Fig. (3.3) vemos que las oscilaciones de $|M(\xi)|^2$ ocurren alrededor del valor estacionario $|M|^2 = 1$, son amortiguadas y su amplitud relativa, medida desde el valor estacionario, decrece asintóticamente en el tiempo. Por tanto, esperamos que a partir de un cierto tiempo τ_L , que llamaremos tiempo de relajación longitudinal, las amplitudes relativas de las oscilaciones sean tan pequeñas que serán prácticamente indetectables (esto depende del aparato de medida).

Definamos τ_L como el tiempo posterior al cual, las amplitudes relativas de las oscilaciones en la función $|M(\xi)|^2$, decaigan a un valor fijo arbitrario menor que su valor en el primer máximo. En la Fig. (3.3) tenemos la gráfica $|M(\xi)|^2$ donde

$$\xi(z, t; p) \equiv \sqrt{\frac{\mu}{\pi \hbar t}} \left(\frac{p}{\mu} t - z \right). \quad (3.13)$$

De esta figura observamos que la amplitud relativa de la primera oscilación es $A = 0.38$. Podemos ahora definir τ_L como el intervalo de tiempo posterior al cual las amplitudes relativas han decaído a una magnitud inferior a un valor arbitrario, digamos A/n , donde n es un número entero mayor que uno. Este valor de n hay que seleccionarlo de tal manera que después del

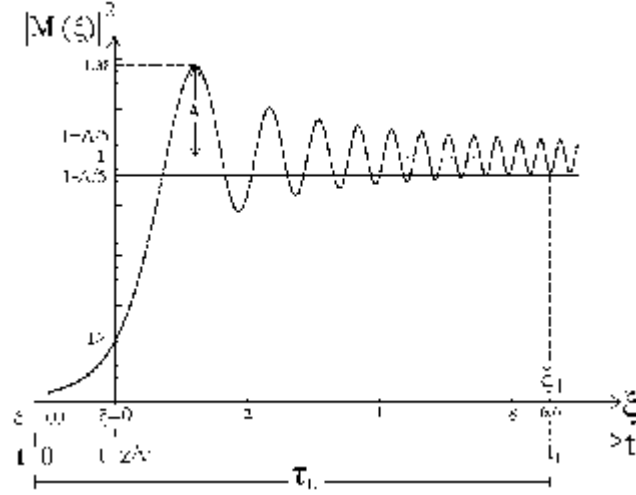


Figura 3.3: Las oscilaciones de $|M(\xi)|^2$ ocurren alrededor del valor estacionario $|M|^2 = 1$. Después del intervalo de tiempo τ_L las amplitudes relativas han decaído a una magnitud inferior a un valor arbitrario A/n .

tiempo τ_L las amplitudes relativas de las oscilaciones sean prácticamente imperceptibles para el aparato de medida.

Como ejemplo numérico tomemos $n = 5$, lo cual implica que buscamos un intervalo $0 < t < \tau_L$ tal que para tiempos posteriores a él, las amplitudes relativas de las oscilaciones de $|M(\xi)|^2$ decaigan a un valor inferior a $A/5 = 0.07$. En realidad cualquier otra selección de n trabaja igualmente bien. De la Fig. (3.3), observamos que a partir del valor $\xi_1(n = 5) = 6.6$ todas las amplitudes son menores que $A/5$. Por otro lado, de acuerdo a la Ec. (3.13) para el valor de $\xi_1(n)$ corresponde un único tiempo de relajación τ_L (para n arbitraria) dado por

$$\tau_L(z, \xi_1(n)) = \frac{\mu z}{p} + \frac{\pi \hbar \mu}{2p^2} \xi_1^2 \left(1 + \sqrt{\frac{4pz}{\pi \hbar \xi_1^2} + 1}\right). \quad (3.14)$$

Es evidente que este tiempo de relajación τ_L es una suma de dos contribuciones que dependen de la posición z :

I) El tiempo clásico de desplazamiento, desde el origen hasta el punto de observación z , del frente de onda viajando a la velocidad $v = p/\mu$ es la primera contribución:

$$\mu z/p = z/v. \quad (3.15)$$

II) Una segunda contribución cuántica (depende de \hbar)

$$\frac{\pi \hbar \mu}{2p^2} \xi_1^2 \left(1 + \sqrt{\frac{4pz}{\pi \hbar \xi_1^2} + 1}\right), \quad (3.16)$$

la cual corresponde al intervalo temporal $z/v < t < \tau_L$, que es aproximadamente el intervalo de las oscilaciones cuánticas.

Es claro que escogiendo z suficientemente grande podemos hacer el tiempo de relajación $\tau_L(z, \xi_1(n))$ tan grande como se quiera.

En el problema de Moshinsky encontramos numéricamente que para neutrones fríos ($v = 116 \text{ m/s}$)[18]

z	z/v	$\frac{\pi \hbar \mu \xi_1^2}{2p^2} \left(1 + \sqrt{\frac{4pz}{\pi \hbar \xi_1^2} + 1}\right)$	$\tau_L(z, \xi_1(n))$
3λ	$8.8 \times 10^{-11} s$	$7.2 \times 10^{-10} s$	$8.1 \times 10^{-10} s$
$1m$	$8.6 \times 10^{-3} s$	$2.3 \times 10^{-6} s$	$8.6 \times 10^{-3} s$

(3.17)

Por tanto, para el problema de Moshinsky, en el punto de observación $z = 3\lambda$, el régimen transitorio es del orden de $\sim 10^{-9} s$; y para un punto de observación lejano $z = 1 \text{ m}$ tenemos $\tau_L \sim 10^{-2} s$. Esto muestra claramente que el tiempo transitorio es función de la posición del observador y resulta tan grande como queramos.

Por otro lado, para encontrar el tiempo de relajación de $|K(Z, T)|^2$ tomamos la misma definición que usamos para $|M|^2$. Esto es, tomamos la misma amplitud relativa A de $|M(\xi)|^2$ como valor de referencia, y consideramos el mismo rango $1 \pm A/5$ de la función $|M(\xi)|^2$ para comparar la función $|K(Z, T)|^2$. Dado que las amplitudes de $|K(Z, T)|^2$ son menores que las de $|M(Z, T)|^2$, esperamos encontrar un tiempo de relajación menor. Efectivamente, para la misma velocidad ($v = 116 \text{ m/s}$) y punto de observación $Z = 3$, de la Fig. (3.4) encontramos que la primera oscilación alrededor del valor estacionario de $|K(Z, T)|^2$ menor que el valor de $A/5$ nos da un tiempo de relajación asociado a K de $\tau_{L(K)} = 2.89 \times 10^{-10} s$ que es casi 3 veces más pequeña que el correspondiente tiempo de relajación para $|M|^2$. Esto muestra numéricamente que la función $|K(Z, T)|^2$ llega al estado estacionario más rápidamente que la función exacta $|M(Z, T)|^2$. Por tanto, la función a la frontera de Kirchhoff da resultados que no son numéricamente precisos en el régimen de tiempos muy pequeños, $t < \tau_L$. Para puntos de observación lejanos, $z \gg \lambda$, de la Fig. (3.1) se ve que ambas funciones frontera generan el mismo tiempo de relajación.

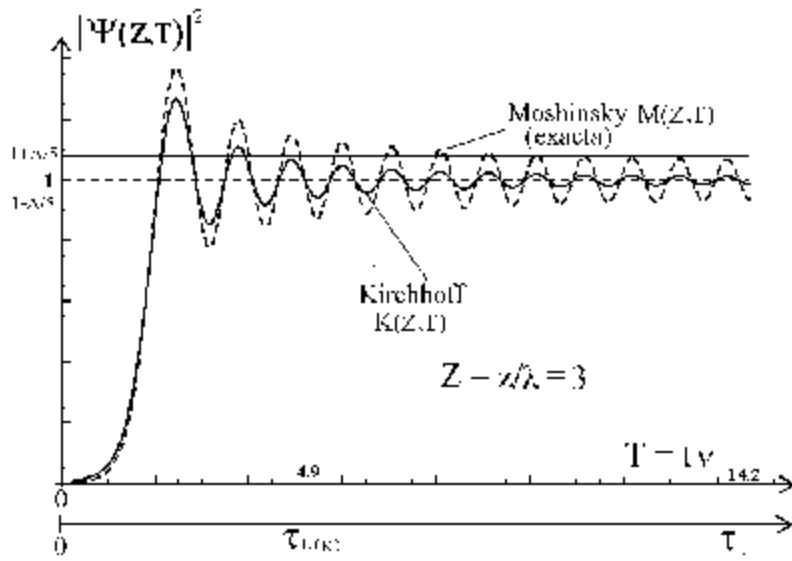


Figura 3.4: La función $|K(3, T)|^2$ llega al estado estacionario más rápidamente que la función exacta $|M(3, T)|^2$.

Capítulo 4

Una nueva condición a la frontera

En este capítulo presentamos la contribución más importante de nuestro trabajo de investigación. Demostraremos que es posible escribir una nueva función frontera diferente de la de Kirchhoff. Esta nueva función frontera es también una aproximación, exacta solamente para obturadores que se abren a velocidad infinita. En fuerte contraste a la función frontera de Kirchhoff, que no es válida para tiempos cortos, la nueva función frontera que aquí encontraremos sí es válida para tiempos cortos, y en consecuencia sirve para describir correctamente los efectos de difracción para obturadores que se abren rápidamente y en puntos de observación cercanos.

4.1. Una condición a la frontera exacta

La primera interrogante que surge en la Ec. (3.1) es: ¿es posible escribir la condición a la frontera exacta ψ_0 para cualquier obturador? Para un obturador de geometría y velocidad arbitraria, nadie sabe cuál es esta función. Sin embargo, para el problema del obturador de Moshinsky la respuesta es obviamente que sí podemos conocer, a posteriori, la función a la frontera *exacta* de ese problema particular. Efectivamente, en el problema de Moshinsky conocemos la solución exacta $\psi(z, t) = M(z, t)$, válida en todos los puntos de la región infinita del espacio $-\infty < z < \infty$ y para toda $t > 0$. Es entonces evidente que para la región *semi-infinita* $0 \leq z < \infty$, tenemos la función $\psi_0(z = 0, t) = M(0, t)$ en la frontera $z = 0$.

Esta afirmación la podemos demostrar matemáticamente de la siguiente manera. La función frontera exacta $\psi_0(t_0)$ para el problema de Moshinsky,

puede ser derivada matemáticamente si suponemos conocida, en la solución para problemas de valores a la frontera Ec. (3.1), la función transmitida $\psi(\mathbf{r}, t) = M(z, t)$. Como resultado, obtenemos una ecuación integral para la función frontera ψ_0 que deseamos encontrar:

$$M(z, t) = i\gamma \int_0^t dt_0 \left. \frac{\partial g_3}{\partial z_0} \right|_{z_0=0} \iint_{-\infty}^{+\infty} dx_0 dy_0 g_1 g_2 \psi_0(x_0, y_0, t_0). \quad (4.1)$$

La solución de esta ecuación integral está dada en el Apéndice B, donde encontramos que efectivamente la función frontera exacta es según la Ec. (B.9):

$$\psi_0(t_0) = \frac{\exp(-i\varepsilon t_0/\hbar)}{\sqrt{2i}} \left\{ \sqrt{\frac{i}{2}} + \mathcal{F} \left[\sqrt{\frac{2\varepsilon t_0}{\pi\hbar}} \right] \right\}. \quad (4.2)$$

Identificamos inmediatamente a nuestra función frontera $\psi_0(t_0)$ con la función $M(z, t)$ evaluada en $t = t_0$ y $z = 0$ dada por la Ec. (2)

$$\begin{aligned} \psi_0(t_0) &= M(0, t_0) = \frac{\exp(-i\varepsilon t_0/\hbar)}{\sqrt{2i}} \left\{ \sqrt{\frac{i}{2}} + \mathcal{F} \left[\sqrt{\frac{2\varepsilon t_0}{\pi\hbar}} \right] \right\} \\ &= K(0, t_0) \left\{ \sqrt{\frac{i}{2}} + \mathcal{F} \left[\sqrt{\frac{2\varepsilon t_0}{\pi\hbar}} \right] \right\} / \sqrt{2i}. \end{aligned} \quad (4.3)$$

Lo cual corresponde al producto de la conocida condición a la frontera de Kirchhoff, $K(0, t_0) \equiv \exp(-i\varepsilon t_0/\hbar)(T = 1)$, por una nueva amplitud dependiente del tiempo

$$\left(\sqrt{i/2} + \mathcal{F}[\sqrt{2\varepsilon t_0/\pi\hbar}] \right) / \sqrt{2i}. \quad (4.4)$$

Esto confirma que nuestras ecuaciones de condiciones a la frontera son correctas.

Con este resultado exacto comprendemos por qué es físicamente incorrecta la condición a la frontera de Kirchhoff. De acuerdo con la derivación de $M(z, t)$, para todo $t < 0$ en la región a la izquierda del obturador $-\infty < z \leq 0$, teníamos solamente una onda plana incidente sobre la frontera. Sin embargo, después de que el obturador es repentinamente removido a $t = 0$, para todo tiempo positivo, no importa que tan corto sea, para la región infinita $-\infty < z < \infty$, la onda plana incidente es instantáneamente transformada en $M(z, t)$. Esto significa que por el simple acto de remover la "pared frontera" se generan simultáneamente una onda transmitida y una onda reflejada, ambas viajando a velocidad *infinita* [10] (esto es debido al

carácter no relativista de la ecuación de Schrödinger). Consecuentemente, para $z < 0$ y $t > 0$, la onda plana incidente e^{ikz} interfiere con la onda reflejada, transformandose en $M(z, t)$. Entonces, no es la onda plana incidente e^{ikz} , como lo propone la función de Kirchhoff, sino la nueva onda superpuesta $M(z, t)$ la que arriba continuamente para tiempos positivos a la frontera. El valor de esta onda con interferencia en $z = 0$, da la correcta condición a la frontera $\psi_0(t) = M(0, t)$. Observamos, sin embargo, que la onda reflejada es transitoria, y para tiempos largos llega a ser despreciable. Por consiguiente, el uso de la condición a la frontera de Kirchhoff es equivalente a despreciar el efecto transitorio de la onda reflejada, lo cual para tiempos cortos es una suposición equivocada.

4.1.1. Tiempo de relajación transversal

La densidad de probabilidad de la función frontera $|M(0, t)|^2$ es una función del tiempo. Si la graficamos obtenemos una gráfica muy semejante a la función $|M(z, t)|^2$. Por tanto $|M(0, t)|^2$ en semejanza a la función $|M(z, t)|^2$, oscila alrededor de su valor estacionario $|M(0, t \rightarrow \infty)|^2 = 1$ con amplitudes que decaen asintóticamente a cero. $|M(0, t)|^2$ posee por tanto su propio tiempo de relajación. El tiempo de relajación (transversal) de $|M(0, t)|^2$ se puede obtener de la misma expresión ya obtenida para el tiempo de relajación longitudinal de $|M(z, t)|^2$ dado por

$$\tau_L(z, \xi_1) = \frac{\mu z}{p} + \frac{\pi \hbar \mu}{2p^2} \xi_1^2 \left(1 + \sqrt{\frac{4pz}{\pi \hbar \xi_1^2} + 1}\right), \quad (4.5)$$

pero evaluado en $z = 0$.

Denotando el tiempo de relajación transversal de $|M(0, t)|^2$ por $\tau_M(\xi)$ y definiéndolo por

$$\tau_M(\xi) \equiv \tau_L(z = 0, \xi) = \frac{\pi \hbar \mu}{p^2} \xi^2, \quad (4.6)$$

es claro que este nuevo tiempo de relajación τ_M es solamente una función de la cinemática del obturador, y evidentemente independiente de la coordenada z del punto de observación. Para el caso de neutrones fríos ($v = 116$ m/s) y con $z = 0$ y la misma $\xi_1(n = 5) = 6.6$, obtenemos

$$\tau_M(\xi_1) = \frac{\pi \hbar \mu}{p^2} \xi_1^2 = 6.4 \times 10^{-10} \text{ s}. \quad (4.7)$$

Este resultado implica que para tiempos mayores que 10^{-9} s la función frontera exacta $M(0, t)$ ya decayó a la función frontera de Kirchhoff $K(0, t)$.

Por otro lado, el tiempo de relajación longitudinal de la onda transmitida de Moshinsky $\tau_L(z, \xi_1)$ es una función monótona creciente del punto de observación z , ver tabla adjunta.

z	z/v	$\frac{\pi\hbar\mu\xi_1^2}{2p^2}(1 + \sqrt{\frac{4pz}{\pi\hbar\xi_1^2} + 1})$	$\tau_L(z, \xi_1)$
0	0	$6.4 \times 10^{-10} s$	$6 \times 10^{-10} s$
λ	$3 \times 10^{-11} s$	$6.7 \times 10^{-10} s$	$7 \times 10^{-10} s$
30λ	$9 \times 10^{-10} s$	$1.1 \times 10^{-9} s$	$2 \times 10^{-9} s$
$1m$	$8.6 \times 10^{-3} s$	$2.3 \times 10^{-6} s$	$9 \times 10^{-3} s$

(4.8)

De esta tabla, válida únicamente para neutrones fríos, vemos que para puntos de observación $z \geq 30\lambda$ tenemos tiempos de relajación para la onda transmitida $\tau_L(z, \xi_1) \geq \tau_M(\xi_1)$.

Por tanto llegamos a la conclusión que en el problema de Moshinsky, para neutrones fríos, para cualquier observador colocado en $z \geq 30\lambda$, la función transmitida, calculada utilizando la fórmula de valores a la frontera

$$\psi(\mathbf{r}, t) = i\gamma \int_0^t dt_0 \frac{\partial g_3}{\partial z_0} \Big|_{z_0=0} \iint_{-\infty}^{+\infty} dx_0 dy_0 g_1 g_2 \psi_0(x_0, y_0, t_0), \quad (4.9)$$

se puede evaluar con excelente aproximación utilizando, en vez de la función frontera exacta $M(0, t)$, la función frontera de Kirchhoff

$$\psi_0(t) = K(0, t)(T = 1) \equiv e^{-i\varepsilon t/\hbar}(T = 1). \quad (4.10)$$

Esta es la explicación del por qué, nuestras gráficas de la densidad de la onda transmitida usando la función frontera de Kirchhoff, que de antemano sabíamos que era una aproximación, resultan en gráficas que son sorprendentemente semejantes a la función de Moshinsky ver Fig.(3.1).

Conjetura: *Podemos conjeturar que para obturadores que se abren a alta velocidad, la función frontera exacta, que es desconocida, tendrá un tiempo de relajación transversal τ_M del mismo orden de magnitud que el tiempo de relajación del problema de Moshinsky $\sim 10^{-9} s$. Por tanto, para estos obturadores rápidos, la función frontera de Kirchhoff podrá utilizarse con gran exactitud, a condición de que el punto de observación sea suficientemente grande (digamos para estar seguros $z > 100\lambda$), para que el tiempo de relajación longitudinal de la densidad transmitida sea mucho mayor que el tiempo de relajación transversal de la función frontera exacta.*

Todo lo anterior, basado en métodos de tiempos de relajación, se puede volver a considerar algebraicamente con el estudio asintótico de la función frontera de Moshinsky. Consideremos para la función compleja de Fresnel su comportamiento asintótico [38],

$$\mathcal{F}(z) \approx \sqrt{\frac{i}{2}} - \frac{i}{\pi z} e^{i\pi z^2/2} - \frac{1}{\pi^2 z^3} e^{i\pi z^2/2} + \dots (z \rightarrow \infty). \quad (4.11)$$

Obtenemos que, para tiempos largos, la amplitud de la función frontera $M(0, t)$, Ec. (4.4), se puede expresar como

$$\left(\sqrt{i/2} + \mathcal{F}[\sqrt{2\varepsilon t/\pi\hbar}] \right) / \sqrt{2i} \approx \left(1 - \sqrt{\frac{i\hbar}{4\pi t\varepsilon}} e^{i\varepsilon t/\hbar} + \right. \\ \left. - \frac{1}{4} \sqrt{\frac{\hbar^3}{i\pi t^3 \varepsilon^3}} e^{i\varepsilon t/\hbar} + \dots \right), \quad (4.12)$$

por lo que la expresión asintótica para la función frontera $M(0, t)$, dada por la Ec. (4.3), está dada por

$$M(0, t) \approx K(0, t) \left(1 - \sqrt{\frac{i\hbar}{4\pi t\varepsilon}} e^{i\varepsilon t/\hbar} + \dots \right) \quad (4.13)$$

$$\sim K(0, t). \quad (4.14)$$

De aquí deducimos que en el límite de tiempos largos, digamos,

$$\sqrt{\frac{\hbar}{4\pi t\varepsilon}} < 10^{-2} \quad (4.15)$$

la función frontera $M(0, t)$ es totalmente equivalente a la condición de Kirchhoff. Ejemplo: para neutrones fríos ($v = 116 \text{ m/s}$) se necesita $t > 10^4 \hbar/4\pi\varepsilon \sim 10^{-9} \text{ s}$ para que la condición a la frontera $M(0, t)$ relaje a la condición a la frontera de Kirchhoff $K(0, t)$. Nótese que con esta técnica algebraica obtenemos un tiempo de relajación que tiene el mismo orden de magnitud obtenido con el método gráfico, esto es, $t > 10^{-9}$ para el tiempo de relajación τ_M .

En resumen, podemos proponer como una alternativa a la función frontera de Kirchhoff la nueva función frontera definida por

$$\psi_0(x_0, y_0, t_0; v_0) \equiv M(0, t_0) T(x_0, y_0, t_0; v_0) \\ = \frac{\exp(-i\varepsilon t_0/\hbar)}{\sqrt{2i}} \left[\sqrt{\frac{i}{2}} + \mathcal{F}[\sqrt{2\varepsilon t_0/\pi\hbar}] \right] T(x_0, y_0, t_0; v_0). \quad (4.16)$$

Esta función frontera es nueva en la literatura; nunca antes se había propuesto; queremos utilizarla para encontrar la onda transmitida a la derecha de un obturador que se abre con velocidad constante.

Nótese sin embargo que nuestra función propuesta es exacta únicamente para el obturador abriéndose a velocidad infinita. Si la usamos para un obturador abriéndose a velocidad finita, debemos entender que esta función frontera será una aproximación válida para obturadores que se abren con velocidad v_0 muy grande comparada con la velocidad de la partícula: $v_0 \gg p/m$. Esto nos dará soluciones que difieran de las obtenidas con la aproximación de Kirchhoff, pero nuestra solución debe ser mejor en el régimen de tiempos cortos, donde la aproximación de Kirchhoff es incorrecta.

En el siguiente capítulo calcularemos, utilizando nuestra nueva función frontera, funciones de onda transmitidas para distintos obturadores que se abren a gran velocidad finita.

Capítulo 5

Ejemplos de obturadores abriéndose con velocidad finita

La función de onda $\psi(\mathbf{r}, t)$ depende de las coordenadas y el tiempo [29]-[34]. Por tanto, esperamos obtener patrones de difracción tanto espaciales como temporales. Para el caso espacial, seleccionaremos primero modelos de obturador que tengan una contraparte en Óptica, donde podamos comparar nuestros resultados de difracción espacial cuánticos contra los bien conocidos patrones espaciales de difracción en Óptica. Hay dos resultados en Óptica que son bien conocidos: Difracción por una orilla recta y difracción por una rendija. Los patrones de difracción en Óptica son casos estacionarios; es por esto que seleccionaremos obturadores cuánticos tales que la función de onda transmitida, en el límite de tiempos largos, tenga una densidad de probabilidad espacial que esperamos se asemeje a los patrones de difracción en Óptica.

Patrones de difracción temporal, para obturadores que se abren con velocidad finita, no se conoce ninguno que sea exacto; por lo tanto no nos es posible comparar nuestros resultados contra nada conocido que sea confiable. Es por esto, que para comparar patrones de difracción temporal tenemos sólo el caso exacto de la difracción de Moshinsky que es de velocidad infinita. Por tanto, para comparar nuestros resultados temporales contra los de Moshinsky, seleccionaremos otro tipo de obturador que nos permita, para altas velocidades de apertura, ver si nuestros resultados de difracción en el tiempo se asemejan al patrón de Moshinsky. Esto por supuesto no comprueba nada sobre la exactitud de la aproximación de mantener como

función frontera a la función $M(0, t)$. En caso de obtener una semejanza con el resultado de Moshinsky, esto sólo prueba que nuestra álgebra no tiene errores. Pero ciertamente no demuestra que nuestra aproximación de función frontera sea adecuada para toda t y r .

Para una investigación posterior proponemos llevar a cabo un cálculo numérico de la ecuación diferencial de Schödinger para velocidades finitas. Esperamos que este cálculo confirme de alguna manera nuestros resultados aproximados expresados en esta tesis.

5.1. Patrones de difracción espacial

Consideremos en esta sección obturadores tales que las funciones transmitidas, en el límite de tiempos largos, den resultados que se puedan comparar con los patrones de difracción ópticos. En caso de obtener una concordancia, es una fuerte sugerencia de que efectivamente, para tiempos largos, la condición a la frontera exacta para velocidades finitas o infinitas es irrelevante. Creemos que todas las condiciones a la frontera exactas, adecuadas para obturadores que se abren a velocidad finita o infinita, tienen tiempos de relajación tales que después de ese tiempo la función frontera decae en la función de Kirchhoff. Dado que es la función de Kirchhoff la que se usa en Óptica, tener una concordancia es sugerencia de la bondad de esta conjetura.

5.1.1. Difracción en una orilla recta infinita

En completa semejanza con el problema de Moshinsky, consideremos el caso de una onda plana $\exp[i(pz - \varepsilon t)/\hbar]$ incidiendo en la dirección del eje z sobre un obturador totalmente absorbente, cerrado para $t \leq 0$, localizado en el plano $z = 0$. Supongamos que el obturador está compuesto por dos hojas planas infinitas, separadas por el eje y . Al tiempo $t = 0$ la hoja superior se empieza a abrir sin detenerse desde $x = 0$, con velocidad de apertura finita v_0 a lo largo del eje x . La hoja inferior permanece estática, definiendo una orilla recta infinita en el eje y , ver Fig. (5.1).

La función de onda transmitida a la zona positiva del eje z , está dada exactamente por la Ec. (2.5)

$$\psi(\mathbf{r}, t; v_0) = i\gamma \int_0^t dt_0 \left. \frac{\partial g_3}{\partial z_0} \right|_{z_0=0} \iint_{-\infty}^{+\infty} dx_0 dy_0 g_1 g_2 \psi_0(x_0, y_0, t_0; v_0). \quad (5.1)$$

donde $\gamma \equiv \hbar/2\mu$, y la función frontera ψ_0 es aproximada ahora por *nuestra*

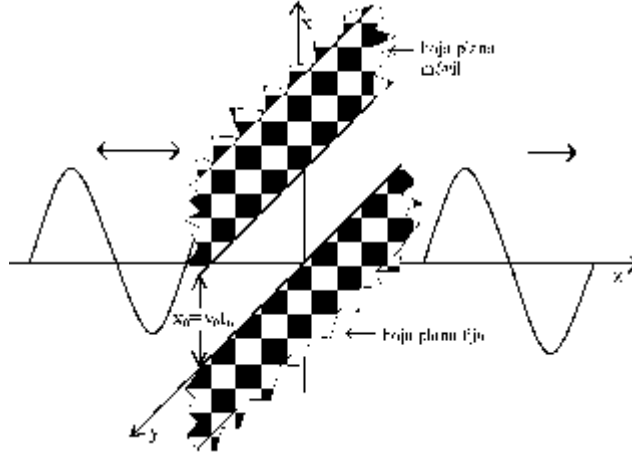


Figura 5.1: Obturador de dos hojas planas, al tiempo $t = 0$ la hoja superior comienza a moverse sin detenerse en la dirección positiva del eje x a velocidad finita v_0 .

nueva función Ec. (4.16):

$$\begin{aligned}
 \psi_0(x_0, y_0, t_0; v_0) &\simeq M(z = 0, t_0)T(x_0, y_0, t_0; v_0) \\
 &= \frac{\exp(-i\varepsilon t_0/\hbar)}{\sqrt{2i}} \left[\sqrt{\frac{i}{2}} + \mathcal{F}[\sqrt{2\varepsilon t_0/\pi\hbar}] \right] T.
 \end{aligned} \tag{5.2}$$

Esta condición frontera es válida solamente para obturadores que se abren a alta velocidad, $v_0 \gg p/\mu$. La función de transmisión T describe la cinemática del obturador. Debe simular, en este caso, un obturador plano con una hoja móvil semi-infinita ($-\infty \leq y \leq \infty, 0 < x < \infty$) abriéndose sin detenerse, desde $x = 0$, con velocidad de apertura finita v_0 a lo largo del eje x positivo. La parte inferior del obturador permanece cerrada. La función de transmisión T se puede escribir entonces como:

$$T(x_0, y_0, t_0; v_0) \equiv \begin{cases} 1 & 0 \leq x_0 \leq v_0 t_0, \quad -\infty < y_0 < \infty, \\ 0 & \text{cualquier otra } x_0 \quad -\infty < y_0 < \infty. \end{cases} \tag{5.3}$$

Las funciones de Green g_1 , g_2 y g_3 para cualquier condición a la frontera en el plano $z = 0$, como ya se dijo en el capítulo 1, están dadas por las Ecs.

(1.8), (1.9), (1.10) y (1.13):

$$g_1(x, t; x_0, t_0) = \frac{1}{\sqrt{4\pi i\gamma(t-t_0)}} \exp\left[\frac{i(x-x_0)^2}{4\gamma(t-t_0)}\right], \quad (5.4)$$

$$g_2(y, t; y_0, t_0) = \frac{1}{\sqrt{4\pi i\gamma(t-t_0)}} \exp\left[\frac{i(y-y_0)^2}{4\gamma(t-t_0)}\right], \quad (5.5)$$

$$\left. \frac{\partial g_3}{\partial z_0} \right|_{z_0=0} = \frac{z \exp[iz^2/4\gamma(t-t_0)]}{\sqrt{4\pi} [i\gamma(t-t_0)]^{3/2}}. \quad (5.6)$$

Sustituyendo las Ecs. (5.2), (5.3), (5.4), (5.5), (5.6) en la Ec. (5.1) tenemos la solución aproximada para $\psi(\mathbf{r}, t)$ al problema de este obturador.

Como se ve de inmediato, la integral en y_0 es inmediata:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} g_2 dy_0 = 1, \quad (5.7)$$

por lo cual

$$\psi(\mathbf{r}, t; v_0) = \frac{i\gamma}{\sqrt{2i}} \int_0^t dt_0 \left. \frac{\partial g_3}{\partial z_0} \right|_{z_0=0} e^{-i\varepsilon t_0/\hbar} \left[\sqrt{\frac{i}{2}} + \mathcal{F}\left[\sqrt{\frac{2\varepsilon t_0}{\pi\hbar}}\right] \right] \int_0^{v_0 t_0} dx_0 g_1. \quad (5.8)$$

El valor de la integral en x_0 se puede obtener en forma exacta por métodos elementales, Ec. (C.9):

$$\begin{aligned} I &\equiv \int_0^{v_0 t_0} dx_0 g_1(x, t; x_0, t_0) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2i}} \left\{ \mathcal{F}\left[\frac{v_0 t_0 - x}{\sqrt{2\pi\gamma(t-t_0)}}\right] + \mathcal{F}\left[\frac{0 + x}{\sqrt{2\pi\gamma(t-t_0)}}\right] \right\}. \end{aligned} \quad (5.9)$$

Sustituyendo esta integral en la Ec. (5.8) tenemos una última integral en la variable t_0 .

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}, t; v_0) &= \frac{\gamma}{2} \int_0^t \frac{z e^{iz^2/4\gamma(t-t_0)} e^{-i\varepsilon t_0/\hbar}}{\sqrt{4\pi} [i\gamma(t-t_0)]^{3/2}} \left[\sqrt{\frac{i}{2}} + \mathcal{F}\left[\sqrt{\frac{2\varepsilon t_0}{\pi\hbar}}\right] \right] \\ &\quad \times \left\{ \mathcal{F}\left[\frac{v_0 t_0 - x}{\sqrt{2\pi\gamma(t-t_0)}}\right] - \mathcal{F}\left[\frac{0 + x}{\sqrt{2\pi\gamma(t-t_0)}}\right] \right\} dt_0. \end{aligned} \quad (5.10)$$

Esta integral luce impresionante; sin embargo, con un cambio de variable:

$$\xi \equiv \frac{z^2}{4\gamma(t-t_0)}, \quad (5.11)$$

obtenemos una expresión que muestra que la función $\psi(\mathbf{r}, t)$ es un paquete de ondas moviéndose a la derecha,

$$\psi(x, z, t; v_0) = A(x, z, t; v_0) \exp[i(pz - \varepsilon t)/\hbar], \quad (5.12)$$

con una amplitud A dada por el factor:

$$\begin{aligned} A(x, z, t; v_0) \equiv & \frac{1}{2\pi^{1/2}i^{3/2}} \int_{z^2/4\gamma t}^{\infty} d\xi \frac{1}{\sqrt{\xi}} \exp \left[i \left(\frac{kz}{2} \right)^2 \left(\frac{1}{\sqrt{\xi}} - \frac{2}{kz} \sqrt{\xi} \right)^2 \right] \\ & \times \left\{ \sqrt{\frac{i}{2}} + \mathcal{F} \left[\sqrt{\frac{2\varepsilon}{\pi\hbar}} \left(t - \frac{\mu z^2}{2\hbar\xi} \right) \right] \right\} \\ & \times \left\{ \mathcal{F} \left[\sqrt{\frac{2}{\pi}} \left((v_0 t - x) \frac{\sqrt{\xi}}{z} - \frac{v_0 \mu}{2\hbar} \frac{z}{\sqrt{\xi}} \right) \right] + \mathcal{F} \left[\sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{x}{z} \sqrt{\xi} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (5.13)$$

Como puede verse, la expresión para la amplitud está dada por una integral muy complicada. No es posible hacer esta integral en forma analítica, por lo que tenemos dos opciones: 1) realizarla en forma numérica, o bien, 2) obtener una expresión analítica aproximada de la integral.

Elegimos la segunda opción. Para esto, observemos que en el integrando tenemos un término oscilante:

$$\exp i \left(\sqrt{\xi} - \frac{kz}{2} \frac{1}{\sqrt{\xi}} \right)^2. \quad (5.14)$$

Para valores macroscópicos del punto de observación ($z \gg \lambda$), el factor $kz/2 = \pi z/\lambda \gg 1$. Por lo tanto, como sugieren las rápidas oscilaciones de la función $\cos[(\sqrt{\xi} - kz/2\sqrt{\xi})^2]$, ver Fig. (5.2), nos damos cuenta inmediatamente que las contribuciones del integrando a la integral de amplitud en la Ec. (5.13), van a ser cero en todo el rango de valores de $\sqrt{\xi}$, excepto en la pequeña vecindad donde la fase $(\sqrt{\xi} - kz/2\sqrt{\xi})$ es *estacionaria*. Esta observación justifica aproximar nuestra integral por el *método asintótico de fase estacionaria* [41]-[42].

De acuerdo con el método de fase estacionaria, si tenemos una integral de la forma:

$$I = \int_a^b e^{i\alpha f(x)} g(x) dx, \quad \alpha \gg 1, \quad (5.15)$$

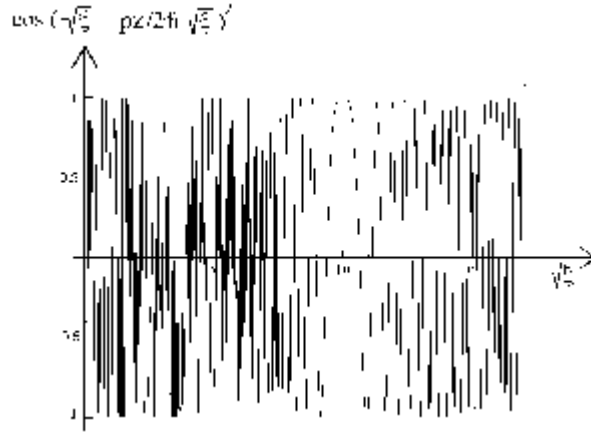


Figura 5.2: Oscilación del factor $\text{Cos}[(\sqrt{\xi} - pz/2\hbar\sqrt{\xi})^2]$, con $pz/2\hbar \equiv 100$.

entonces buscamos puntos estacionarios x_0 , definidos por $f'(x_0) = 0$, a lo largo del intervalo (a, b) . En cada punto estacionario x_0 , tendremos una contribución asintótica a la integral dada por:

$$I(x_0) \sim \sqrt{\frac{2\pi}{\alpha |f''(x_0)|}} e^{i\alpha f(x_0)} g(x_0) e^{i\pi/4(\text{sign} f''(x_0))}. \quad (5.16)$$

En nuestro caso, el punto estacionario está dado por

$$\xi_0 = \pm \frac{kz}{2}. \quad (5.17)$$

La aproximación de fase estacionaria tiene sentido sólo si el punto estacionario ξ_0 es un punto interior al intervalo de integración por lo cual se escoge la raíz positiva; además, se tiene que satisfacer $z^2/4\gamma t < \xi_0 < \infty$, o sea

$$\frac{z}{2\gamma t} < k. \quad (5.18)$$

Simplificando tenemos

$$z < \frac{p}{\mu} t. \quad (5.19)$$

Esto nos dice que nuestra aproximación de fase estacionaria es válida solamente cuando el punto de observación z es menor a la posición del frente de onda clásico pt/μ . Bajo esta restricción, el valor aproximado de la amplitud

(5.13) resulta con $v = p/\mu$:

$$A(x, z, t; v_0) \sim \frac{1}{2i} \times \left\{ \sqrt{\frac{i}{2}} + \mathcal{F}\left[\sqrt{\frac{2\varepsilon}{\pi\hbar}}\left(t - \frac{z}{v}\right)\right] \right\} \quad (5.20)$$

$$\times \left\{ \mathcal{F}\left[\sqrt{\frac{p}{z\pi\hbar}}\left(v_0\left(t - \frac{z}{v}\right) - x\right)\right] + \mathcal{F}\left[x\sqrt{\frac{p}{z\pi\hbar}}\right] \right\},$$

dando como resultado la expresión final para la función de onda:

$$\psi(x, z, t; v_0) \sim \frac{e^{i(pz - \varepsilon t)/\hbar}}{2i} \times \left\{ \sqrt{\frac{i}{2}} + \mathcal{F}\left[\sqrt{\frac{2\varepsilon}{\pi\hbar}}\left(t - \frac{z}{v}\right)\right] \right\} \quad (5.21)$$

$$\times \left\{ \mathcal{F}\left[\sqrt{\frac{p}{z\pi\hbar}}\left(v_0\left(t - \frac{z}{v}\right) - x\right)\right] + \mathcal{F}\left[x\sqrt{\frac{p}{z\pi\hbar}}\right] \right\}.$$

Esta es la función de onda aproximada en espacio de coordenadas y tiempo, válida para $z/v < t$.

Densidad de probabilidad

A partir de la Ec. (5.21), la densidad de probabilidad está dada por:

$$|\psi(x, z, t; v_0)|^2 \sim \frac{1}{4} \left| \left\{ \sqrt{\frac{i}{2}} + \mathcal{F}\left[\sqrt{\frac{2\varepsilon}{\pi\hbar}}\left(t - \frac{z}{v}\right)\right] \right\} \right. \\ \left. \times \left\{ \mathcal{F}\left[\sqrt{\frac{p}{z\pi\hbar}}\left(v_0\left(t - \frac{z}{v}\right) - x\right)\right] + \mathcal{F}\left[x\sqrt{\frac{p}{z\pi\hbar}}\right] \right\} \right|^2. \quad (5.22)$$

Pruebas de consistencia algebraica

A partir de la función de onda Ec. (5.21), analizamos dos casos límites para comprobar la corrección de nuestra álgebra:

1) si la velocidad de apertura es cero, $v_0 \rightarrow 0$, en la Ec. (5.21) tenemos

$$\mathcal{F}\left[-x\sqrt{\frac{p}{z\pi\hbar}}\right] + \mathcal{F}\left[x\sqrt{\frac{p}{z\pi\hbar}}\right] = 0, \quad (5.23)$$

donde hemos utilizado el hecho de que la función de Fresnel es impar, $\mathcal{F}[-x] = -\mathcal{F}[x]$. El hecho de que la función de onda transmitida sea nula, $\psi \rightarrow 0$, es un resultado físicamente correcto, pues si el obturador no se abre, ninguna onda será transmitida al lado de las z positivas.

2) Por otra parte, si la velocidad de apertura es infinita, $v_0 \rightarrow \infty$, y si observamos a grandes distancias x de la orilla de la rendija inferior, $x \gg z$, esperamos obtener una función de onda semejante a Moshinsky. Efectivamente, utilizando en la Ec. (5.22) el comportamiento asintótico de la función de Fresnel, $F[\infty] = \sqrt{i}/2$, obtenemos

$$\psi(x, z, t) \sim \frac{e^{i(pz-\varepsilon t)/\hbar}}{\sqrt{2i}} \times \left\{ \sqrt{\frac{i}{2}} + \mathcal{F}\left[\sqrt{\frac{2\varepsilon}{\pi\hbar}}\left(t - \frac{z}{v}\right)\right] \right\}. \quad (5.24)$$

Este resultado luce un poco diferente de la función de Moshinsky $M(z, t)$. Sin embargo, notamos que para tiempos largos $t \gg z/v$ se tiene la siguiente aproximación

$$\frac{t - \frac{z}{v}}{\sqrt{t}} = \sqrt{t - \frac{z}{v}} \left(1 - \frac{z}{2vt} + \dots\right) \sim \sqrt{t - \frac{z}{v}}, \quad (5.25)$$

por lo cual podemos reescribir la Ec. (5.24) como

$$\begin{aligned} \psi(x, z, t) &\sim \frac{e^{i(pz-\varepsilon t)/\hbar}}{\sqrt{2i}} \times \left\{ \sqrt{\frac{i}{2}} + \mathcal{F}\left[\sqrt{\frac{2\varepsilon}{\pi\hbar t}}\left(t - \frac{z}{v}\right)\right] \right\} \\ &= M(z, t). \end{aligned} \quad (5.26)$$

En este caso recuperamos la función de Moshinsky. Es muy importante resaltar el hecho que este resultado se obtiene con la fuerte suposición de que $x \gg z$, puesto que al situar nuestro punto de observación con una x positiva muy grande estamos despreciando los efectos de orilla del obturador inferior. Sólo en este caso tiene sentido comparar con el problema de Moshinsky.

Por lo tanto nuestro resultado satisface las pruebas de consistencia algebraicas.

Prueba de consistencia con un caso estacionario

Queremos ahora comparar los resultados estacionarios obtenidos con nuestra teoría contra casos conocidos. Obtengamos primero el límite estacionario (independiente del tiempo) de la Ec. (5.21). En el límite de tiempos largos, $t \rightarrow \infty$, tenemos utilizando, $\mathcal{F}[\infty] = \sqrt{i}/2$ y por lo tanto las dos primeras integrales de Fresnel son independientes de v_0 en la Ec. (5.21) [38]:

$$\psi \sim \frac{e^{i(pz-\varepsilon t)/\hbar}}{\sqrt{2i}} \left\{ \sqrt{\frac{i}{2}} + \mathcal{F}\left[x\sqrt{\frac{p}{z\pi\hbar}}\right] \right\}. \quad (5.27)$$

De donde se obtiene la densidad de probabilidad

$$|\psi(x, z, \infty)|^2 \sim \frac{1}{2} \left\{ \left(\frac{1}{2} + C(\varphi(x, z)) \right)^2 + \left(\frac{1}{2} + S(\varphi(x, z)) \right)^2 \right\}, \quad (5.28)$$

donde hemos definido la función $\varphi(x, z)$ como:

$$\varphi(x, z) \equiv x \sqrt{\frac{p}{z\pi\hbar}}. \quad (5.29)$$

En este límite, $t \rightarrow \infty$, puesto que la orilla superior de la apertura está en infinito, describimos una densidad de probabilidad para un haz de partículas que pasa en forma continua a través de una orilla recta infinita (la orilla superior de la hoja inferior inmóvil).

Este resultado se puede comparar ahora contra el bien conocido caso estacionario de difracción de luz estudiada en Óptica. En efecto, en Óptica, el estudio de la difracción de la luz por una orilla recta infinita es un caso de difracción espacial independiente del tiempo, y está perfectamente documentado [17]. El resultado óptico de difracción de luz por una orilla recta infinita está dado por [43]:

$$I = \frac{1}{2} \left\{ \left(\frac{1}{2} + C(w) \right)^2 + \left(\frac{1}{2} + S(w) \right)^2 \right\}, \quad (5.30)$$

donde w es una función lineal de la posición x .

Comparando el resultado estacionario de nuestra teoría cuántica Ec. (5.28) contra la expresión óptica Ec. (5.30), vemos sin lugar a dudas que nuestra expresión cuántica es semejante a la correspondiente expresión que nos da la Óptica para la intensidad de la luz, a lo largo de la dirección paralela a la abertura (eje x), en la difracción de Fresnel por una orilla recta infinita [43].

Para gráficar la Ec. (5.30), definimos las siguientes cantidades adimensionales:

$$X = \frac{x}{\lambda} = \frac{xp}{2\pi\hbar}, \quad Z = \frac{z}{\lambda} = \frac{zp}{2\pi\hbar}, \quad (5.31)$$

por lo que el argumento de la integral de Fresnel, Ec. (5.29), expresado en función de las variables adimensionales X y Z queda como:

$$\varphi(X, Z) = \sqrt{\frac{2}{Z}} X. \quad (5.32)$$

Para una posición fija $Z_0 = 1$, la gráfica de la densidad de probabilidad estacionaria $|\psi(X, Z_0)|^2$ como función de la coordenada X se muestra en

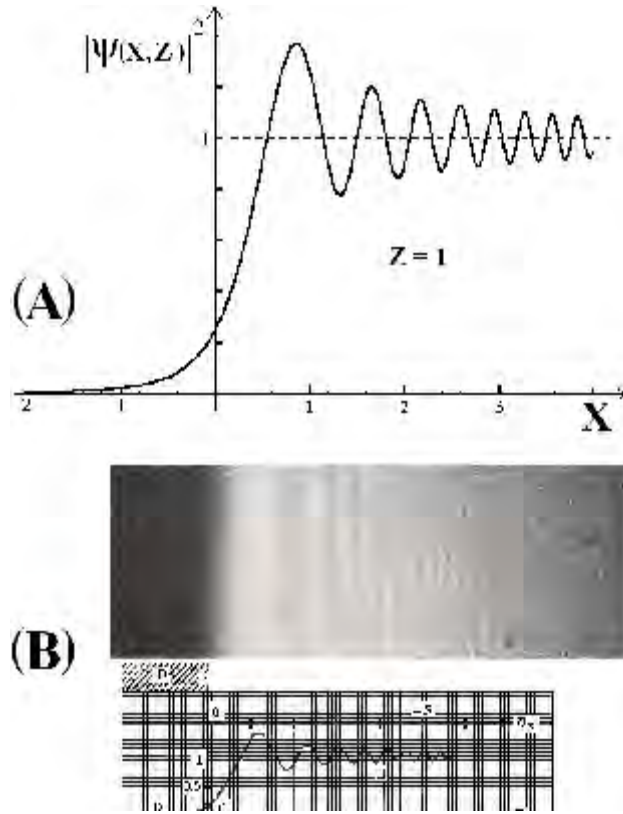


Figura 5.3: (A) Difracción espacial cuántica, según Ec. (5.28); $X \equiv x/\lambda$ y $Z \equiv z/\lambda$ son cantidades adimensionales. (B) Difracción óptica de Fresnel por un borde recto, copiado del libro Optics de Klein [44].

la Fig. (5.3). Se hace hincapié en el hecho de que el *patrón de difracción cuántica espacial* es idéntico al patrón de difracción en Óptica, puesto que en ambos casos los correspondientes argumentos de las integrales de Fresnel son lineales en la distancia a la rendija.

Comparando en la Fig. (5.3), la parte superior (A) muestra nuestra predicción cuántica contra la parte inferior (B) donde presentamos, copiado de un libro de Óptica [44], el patrón de difracción espacial por una orilla recta infinita. Concluimos, debido a la excelente concordancia entre la predicción cuántica y el resultado óptico, que nuestra función de onda satisface una prueba de consistencia para tiempos largos.

Por desgracia en el límite de tiempos largos ($t \rightarrow \infty$) la dependencia

cuántica en v_0 desaparece, y el resultado final no permite dilucidar si nuestra aproximación para v_0 finita es correcta. Deberíamos comparar nuestra aproximación contra un caso exacto de obturador con velocidad finita; por desgracia tal caso no se conoce. Concluimos entonces, que las comparaciones hasta ahora presentadas, no demuestran nada respecto a la validez de nuestra aproximación para obturadores que se abren con velocidad finita. A lo mucho sólo son pruebas de consistencia algebraica.

5.1.2. Difracción por una rendija

Como en el caso anterior, consideremos el caso de un obturador inicialmente cerrado, localizado en el plano $z = 0$, con dos hojas planas infinitas. La diferencia ahora, es que en este problema a partir del tiempo $t = 0$ *ambas* hojas se empiezan a mover a lo largo del eje x desde $x = 0$, una hacia arriba y otra hacia abajo con velocidad finita v_0 hasta llegar a una amplitud máxima donde la hoja de abajo está en la posición $x = -a$ y la hoja de arriba en $x = a$. Al llegar a esta amplitud $2a$ máxima, las dos hojas se detienen y permanecen estáticas formando una rendija de anchura $2a$, ver Fig. (5.4).

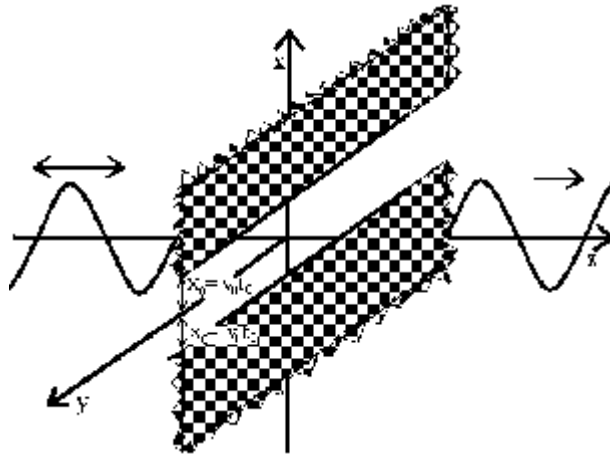


Figura 5.4: Obturador de dos hojas abriéndose a velocidad finita v_0 .

Como en el caso anterior, la función frontera ψ_0 es aproximada por la

Ec. (4.16):

$$\begin{aligned}
\psi_0(x_0, y_0, t_0; v_0) &\simeq M(0, t_0)T(x_0, y_0, t_0; v_0) \\
&= \frac{\exp(-i\varepsilon t_0/\hbar)}{\sqrt{2i}} \left[\sqrt{\frac{i}{2}} + \mathcal{F}[\sqrt{2\varepsilon t_0/\pi\hbar}] \right] T(x_0, y_0, t_0; v_0).
\end{aligned} \tag{5.33}$$

Donde ahora la función de transmisión T debe mostrar la nueva cinemática del obturador, describiendo un obturador con dos hojas infinitas ($-\infty \leq y \leq \infty$) móviles abriéndose con una velocidad finita v_0 a lo largo del eje x , desde $x = 0$, una hacia arriba y la otra hacia abajo, hasta llegar a la amplitud máxima $2a$, donde ambas permanecen en reposo:

$$T(x_0, y_0, t_0; v_0) = \begin{cases} 1 & 0 \leq |x_0| \leq v_0 t_0, \quad -\infty < y_0 < \infty, \quad 0 \leq t_0 \leq a/v_0, \\ 1 & |x_0| \leq a, \quad -\infty < y_0 < \infty, \quad a/v_0 \leq t_0 \leq \infty, \\ 0 & \text{cualquier otro punto } (x_0, y_0, t_0). \end{cases} \tag{5.34}$$

Tenemos entonces la solución formal, reducida a cuadraturas:

$$\begin{aligned}
\psi(\mathbf{r}, t; v_0) &= +i\gamma \int_0^{a/v_0} dt_0 \left. \frac{\partial g_3}{\partial z_0} \right|_{z_0=0} M(0, t_0) \int_{-v_0 t_0}^{v_0 t_0} dx_0 g_1(x, t; x_0, t_0) \\
&\quad + i\gamma \int_{a/v_0}^t dt_0 \left. \frac{\partial g_3}{\partial z_0} \right|_{z_0=0} M(0, t_0) \int_{-a}^a dx_0 g_1(x, t; x_0, t_0) \\
&\equiv \psi_1(\mathbf{r}, t; v_0) + \psi_2(\mathbf{r}, t).
\end{aligned} \tag{5.35}$$

donde hemos definido $\psi_1(\mathbf{r}, t)$ y $\psi_2(\mathbf{r}, t)$ como:

$$\psi_1(\mathbf{r}, t; v_0) \equiv \frac{i\gamma}{\sqrt{2i}} \int_0^{a/v_0} dt_0 \left. \frac{\partial g_3}{\partial z_0} \right|_{z_0=0} e^{-i\varepsilon t_0/\hbar} \left[\sqrt{\frac{i}{2}} + \mathcal{F}[\sqrt{\frac{2\varepsilon t_0}{\pi\hbar}}] \right] \int_{-v_0 t_0}^{v_0 t_0} dx_0 g_1, \tag{5.36}$$

$$\psi_2(\mathbf{r}, t) \equiv \frac{i\gamma}{\sqrt{2i}} \int_{a/v_0}^t dt_0 \left. \frac{\partial g_3}{\partial z_0} \right|_{z_0=0} e^{-i\varepsilon t_0/\hbar} \left[\sqrt{\frac{i}{2}} + \mathcal{F}[\sqrt{\frac{2\varepsilon t_0}{\pi\hbar}}] \right] \int_{-a}^a dx_0 g_1. \tag{5.37}$$

Es claro que $\psi_1(\mathbf{r}, t; v_0)$ describe la onda transmitida mientras se abre paulatinamente la rendija, por lo que esperamos que esta función nos proporcione el comportamiento transitorio de dicha onda. Por el contrario $\psi_2(\mathbf{r}, t)$

representa la onda transmitida cuando la rendija permanece estática, por lo que esperamos que esta función nos dé el comportamiento estacionario.

El valor de las integrales para g_1 para ambos casos $\psi_1(\mathbf{r}, t; v_0)$ y $\psi_2(\mathbf{r}, t)$ se pueden obtener en forma exacta por métodos elementales, ver Ecs. (D.3) y (D.4):

$$\begin{aligned}
I_1 &\equiv \int_{-v_0 t_0}^{v_0 t_0} dx_0 g_1(x, t; x_0, t_0) \\
&= \frac{1}{\sqrt{2i}} (\mathcal{F}[\sqrt{\frac{\mu}{\pi\hbar(t-t_0)}}(v_0 t_0 - x)] + \mathcal{F}[\sqrt{\frac{\mu}{\pi\hbar(t-t_0)}}(v_0 t_0 + x)]),
\end{aligned} \tag{5.38}$$

y

$$\begin{aligned}
I_2 &\equiv \int_{-a}^{+a} dx_0 g_1(x, t; x_0, t_0) \\
&= \frac{1}{\sqrt{2i}} (\mathcal{F}[\sqrt{\frac{\mu}{\pi\hbar(t-t_0)}}(a-x)] + [\mathcal{F}[\sqrt{\frac{\mu}{\pi\hbar(t-t_0)}}(a+x)]],
\end{aligned} \tag{5.39}$$

con lo que finalmente obtenemos una integral en el tiempo para cada una de las funciones:

$$\begin{aligned}
\psi_1(\mathbf{r}, t; v_0) &= \frac{\gamma}{2} \int_0^{a/v_0} dt_0 \left. \frac{\partial g_3}{\partial z_0} \right|_{z_0=0} e^{-i\varepsilon t_0/\hbar} \left[\sqrt{\frac{i}{2}} + \mathcal{F}[\sqrt{\frac{2\varepsilon t_0}{\pi\hbar}}] \right] \times \\
&\quad \{ \mathcal{F}[\sqrt{\frac{\mu}{\pi\hbar(t-t_0)}}(v_0 t_0 - x)] + \mathcal{F}[\sqrt{\frac{\mu}{\pi\hbar(t-t_0)}}(v_0 t_0 + x)] \},
\end{aligned} \tag{5.40}$$

y

$$\begin{aligned}
\psi_2(\mathbf{r}, t) &= \frac{\gamma}{2} \int_{a/v_0}^t dt_0 \left. \frac{\partial g_3}{\partial z_0} \right|_{z_0=0} e^{-i\varepsilon t_0/\hbar} \left[\sqrt{\frac{i}{2}} + \mathcal{F}[\sqrt{\frac{2\varepsilon t_0}{\pi\hbar}}] \right] \times \\
&\quad \{ \mathcal{F}[\sqrt{\frac{\mu}{\pi\hbar(t-t_0)}}(a-x)] + \mathcal{F}[\sqrt{\frac{\mu}{\pi\hbar(t-t_0)}}(a+x)] \}.
\end{aligned} \tag{5.41}$$

Estas integrales pueden simplificarse con el cambio de variable:

$$\xi \equiv \frac{z^2}{4\gamma(t-t_0)}, \quad (5.42)$$

obteniendo nuevas expresiones que muestran que las funciones $\psi_1(\mathbf{r}, t)$ y $\psi_2(\mathbf{r}, t)$ son paquetes de ondas moviéndose a la derecha, multiplicadas por amplitudes A_1 y A_2 respectivamente:

$$\psi_1(x, z, t; v_0) = A_1(x, z, t; v_0) \exp[i(pz - \varepsilon t)/\hbar], \quad (5.43)$$

$$\psi_2(x, z, t) = A_2(x, z, t) \exp[i(pz - \varepsilon t)/\hbar], \quad (5.44)$$

donde las amplitudes A_1 y A_2 están dadas por:

$$\begin{aligned} A_1(x, z, t; v_0) &\equiv \frac{1}{2\pi^{1/2}i^{3/2}} \int_{z^2/4\gamma t}^{z^2/[4\gamma(t-a/v_0)]} \frac{1}{\sqrt{\xi}} d\xi \exp i \left(\frac{kz}{2} \right)^2 \left(\frac{1}{\sqrt{\xi}} - \frac{2}{kz} \sqrt{\xi} \right)^2 \\ &\times \left\{ \sqrt{\frac{i}{2}} + \mathcal{F} \left[\sqrt{\frac{2\varepsilon}{\pi\hbar}} \left(t - \frac{\mu z^2}{2\hbar\xi} \right) \right] \right\} \\ &\times \left\{ \mathcal{F} \left[\sqrt{\frac{2}{\pi}} \left((v_0 t - x) \frac{\sqrt{\xi}}{z} - \frac{v_0 \mu}{2\hbar} \frac{z}{\sqrt{\xi}} \right) \right] + \right. \\ &\left. + \mathcal{F} \left[\sqrt{\frac{2}{\pi}} \left((v_0 t + x) \frac{\sqrt{\xi}}{z} - \frac{v_0 \mu}{2\hbar} \frac{z}{\sqrt{\xi}} \right) \right] \right\}, \quad (5.45) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} A_2(x, z, t) &\equiv \frac{1}{2\pi^{1/2}i^{3/2}} \int_{z^2\mu/2\hbar(t-a/v_0)}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{\xi}} d\xi \exp i \left(\frac{kz}{2} \right)^2 \left(\frac{1}{\sqrt{\xi}} - \frac{2}{kz} \sqrt{\xi} \right)^2 \\ &\times \left\{ \sqrt{\frac{i}{2}} + \mathcal{F} \left[\sqrt{\frac{2\varepsilon}{\pi\hbar}} \left(t - \frac{\mu z^2}{2\hbar\xi} \right) \right] \right\} \\ &\times \left\{ \mathcal{F} \left[\sqrt{\frac{2}{\pi}} (a - x) \frac{\sqrt{\xi}}{z} \right] + \mathcal{F} \left[\sqrt{\frac{2}{\pi}} (a + x) \frac{\sqrt{\xi}}{z} \right] \right\}. \quad (5.46) \end{aligned}$$

Como puede verse, las expresiones para las amplitudes están dadas por integrales muy complicadas. De nueva cuenta, por la presencia del factor de oscilación en el integrando:

$$\exp \left[i \left(\sqrt{\xi} - \frac{kz}{2} \frac{1}{\sqrt{\xi}} \right)^2 \right], \quad (5.47)$$

está justificado el utilizar el *método de fase estacionaria* [41]-[42] para obtener una aproximación analítica de ambas integrales.

En ambos casos el punto estacionario está dado por

$$\xi_0 = \pm \frac{kz}{2}. \quad (5.48)$$

La aproximación de fase estacionaria tiene sentido sólo si el punto estacionario ξ_0 es un punto interior al intervalo de integración, por lo cual se escoge la raíz positiva; además, se tiene que satisfacer que el punto estacionario se encuentre dentro del siguiente intervalo:

$$z^2/4\gamma t < \frac{kz}{2} < z^2/4\gamma(t - a/v_0), \quad (5.49)$$

para $A_1(\mathbf{r}, t; v_0)$ y en el intervalo:

$$z^2/4\gamma(t - a/v_0) < \frac{kz}{2} < \infty, \quad (5.50)$$

para $A_2(\mathbf{r}, t)$.

Bajo estas restricciones los valores aproximados de las integrales Ec. (5.45) y Ec. (5.46) resultan ser:

$$\begin{aligned} A_1(\mathbf{r}, t; v_0) &\sim \frac{1}{2i} \left[\sqrt{\frac{i}{2}} + \mathcal{F}\left[\sqrt{\frac{2\varepsilon}{\pi\hbar}}\left(t - \frac{z}{v}\right)\right] \right] \times \\ &\quad \left\{ \mathcal{F}\left[\sqrt{\frac{p}{\pi\hbar z}}\left(v_0\left(t - \frac{z}{v}\right) - x\right)\right] + \mathcal{F}\left[\sqrt{\frac{p}{\pi\hbar z}}\left(v_0\left(t - \frac{z}{v}\right) + x\right)\right] \right\}, \end{aligned} \quad (5.51)$$

$$\begin{aligned} A_2(\mathbf{r}, t) &\sim \frac{1}{2i} \left[\sqrt{\frac{i}{2}} + \mathcal{F}\left[\sqrt{\frac{2\varepsilon}{\pi\hbar}}\left(t - \frac{z}{v}\right)\right] \right] \times \\ &\quad \left\{ \mathcal{F}\left[\sqrt{\frac{p}{\pi\hbar z}}(a - x)\right] + \mathcal{F}\left[\sqrt{\frac{p}{\pi\hbar z}}(a + x)\right] \right\}, \end{aligned} \quad (5.52)$$

con lo cual se obtiene finalmente:

$$\begin{aligned} \psi_1(\mathbf{r}, t; v_0) &\sim \frac{1}{2i} e^{i(pz - \varepsilon t)/\hbar} \left[\sqrt{\frac{i}{2}} + \mathcal{F}\left[\sqrt{\frac{2\varepsilon}{\pi\hbar}}\left(t - \frac{z}{v}\right)\right] \right] \times \\ &\quad \left\{ \mathcal{F}\left[\sqrt{\frac{p}{\pi\hbar z}}\left(v_0\left(t - \frac{z}{v}\right) - x\right)\right] + \mathcal{F}\left[\sqrt{\frac{p}{\pi\hbar z}}\left(v_0\left(t - \frac{z}{v}\right) + x\right)\right] \right\}, \end{aligned} \quad (5.53)$$

$$\begin{aligned} \psi_2(\mathbf{r}, t) \sim & \frac{1}{2i} e^{i(pz - \varepsilon t)/\hbar} \left[\sqrt{\frac{i}{2}} + \mathcal{F}\left[\sqrt{\frac{2\varepsilon}{\pi\hbar}}\left(t - \frac{z}{v}\right)\right] \right] \times \\ & \{ \mathcal{F}\left[\sqrt{\frac{p}{\pi\hbar z}}(a - x)\right] + \mathcal{F}\left[\sqrt{\frac{p}{\pi\hbar z}}(a + x)\right] \}. \end{aligned} \quad (5.54)$$

Estado estacionario

En el límite de tiempos largos, tenemos una rendija de longitud infinita, con anchura cuyos bordes en el estado estacionario se encuentran en $x_0 = \pm a$. Como vemos de la Ec. (5.45) es claro que para $t \rightarrow \infty$, ambos límites de integración son cero y por tanto se obtiene $\psi_1 \rightarrow 0$. Como es de esperarse, la función de onda que describe el estado *transitorio* se anula para tiempos largos. Por otra parte en este mismo límite la expresión para ψ_2 es :

$$\psi_2(\mathbf{r}, \infty) \sim \frac{1}{\sqrt{2i}} e^{i(pz - \varepsilon t)/\hbar} \{ \mathcal{F}\left[\sqrt{\frac{p}{\pi\hbar z}}(a - x)\right] + \mathcal{F}\left[\sqrt{\frac{p}{\pi\hbar z}}(a + x)\right] \}. \quad (5.55)$$

Y ahora estamos en posición de estudiar para el caso de una rendija infinita el efecto de difracción espacial.

Densidad de probabilidad estacionaria

De la Ec. (5.55) derivamos, para el límite de tiempos largos ($t \rightarrow \infty$), la densidad de probabilidad total dada por:

$$|\psi(\mathbf{r}, \infty)|^2 \sim |\psi_2(\mathbf{r}, \infty)|^2 = \frac{1}{2} |\mathcal{F}[\alpha] + \mathcal{F}[\beta]|^2 \quad (5.56)$$

donde los argumentos, α, β , de las integrales de Fresnel son funciones de (x, z, a) dadas por:

$$\alpha(x, z, a) \equiv \sqrt{\frac{p}{\pi\hbar z}}(a - x), \quad \beta(x, z, a) \equiv \sqrt{\frac{p}{\pi\hbar z}}(a + x). \quad (5.57)$$

La expresión (5.56) está en completo acuerdo con Óptica, y describe la superposición de dos amplitudes de difracción de Fresnel a lo largo del eje x generadas por las correspondientes orillas rectas de la rendija. Comparando el ancho de la rendija $2a$ con la longitud de onda λ , tenemos dos casos límites importantes: 1) difracción por una rendija estrecha $2a \sim \lambda$

y 2) difracción por una rendija ancha $2a \gg \lambda$. Cada uno de estos casos límites generan, respectivamente, los correspondientes patrones ópticos de difracción de Fraunhofer y Fresnel por una rendija. Finalmente haciendo el ancho de la rendija infinito, $a \rightarrow \infty$, recobramos el resultado previo sobre el borde recto.

Para graficar la Ec. (5.56), definimos las siguientes cantidades adimensionales:

$$X \equiv \frac{x}{\lambda} = \frac{xp}{2\pi\hbar}, \quad Z \equiv \frac{z}{\lambda} = \frac{zp}{2\pi\hbar}, \quad A \equiv \frac{a}{\lambda} = \frac{ap}{2\pi\hbar}, \quad (5.58)$$

por lo que los argumentos de las integrales de Fresnel, Ec. (5.57) expresados en función de las variables adimensionales X , Z , y A quedan como:

$$\alpha = \sqrt{\frac{2}{Z}}(A - X), \quad \beta = \sqrt{\frac{2}{Z}}(A + X). \quad (5.59)$$

Difracción por una rendija angosta

Para una posición fija $Z_0 = 3$ y anchura de la rendija $A = 0.5$, la gráfica de la densidad de probabilidad estacionaria $|\psi(X, Z_0, A)|^2$ como función de la coordenada X se muestra en la Fig. (5.5). Se hace hincapié en el hecho de que el *patrón de difracción es espacial*. En este caso, la superposición de las dos funciones de Fresnel inducen fuertes efectos de interferencia. Este límite de interferencia fuerte da un patrón de *difracción espacial* idéntico al patrón de difracción de Fraunhofer por una rendija encontrado en Óptica.

Difracción por una rendija ancha

Para una posición fija $Z_0 = 3$ y anchura de la rendija $A = 10$, la gráfica de la densidad de probabilidad estacionaria $|\psi(X, Z_0, A)|^2$ como función de la coordenada X se muestra en la Fig. (5.5). De nueva cuenta se hace hincapié en el hecho de que el *patrón de difracción es espacial*. Tenemos aquí un patrón de interferencia débil, que en Óptica es llamado un patrón de difracción de Fresnel por una rendija ancha. En este caso, un observador en Z_0 fija detecta la superposición espacial de dos patrones, casi independientes, de difracción de Fresnel, generados cada uno de ellos, por los correspondientes bordes inferior y superior de la rendija.

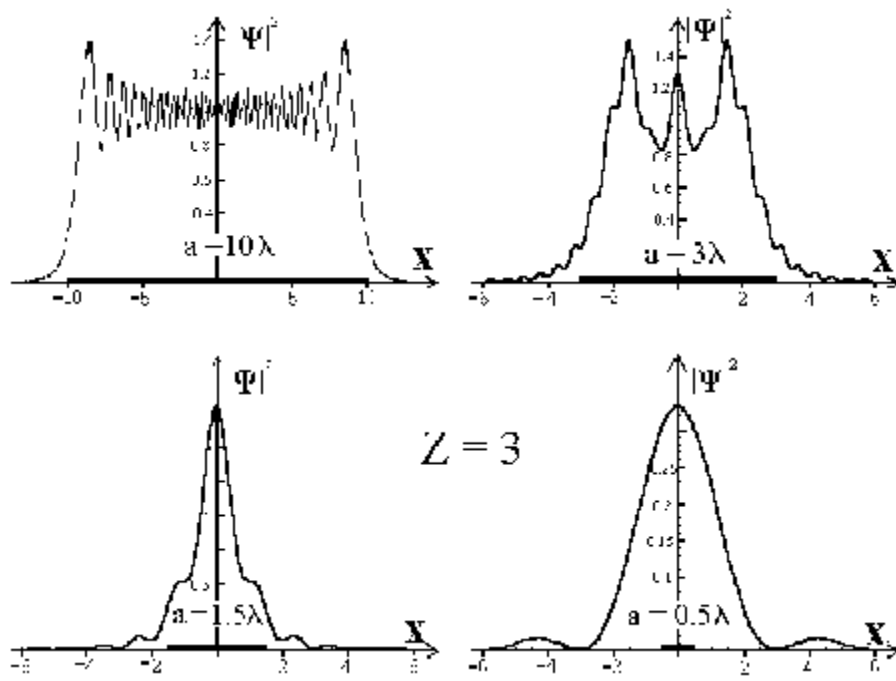


Figura 5.5: Resultados cuánticos. La primera gráfica corresponde a difracción de Fresnel ($2a \gg \lambda$) y la última corresponde a difracción de Fraunhofer ($2a \sim \lambda$).

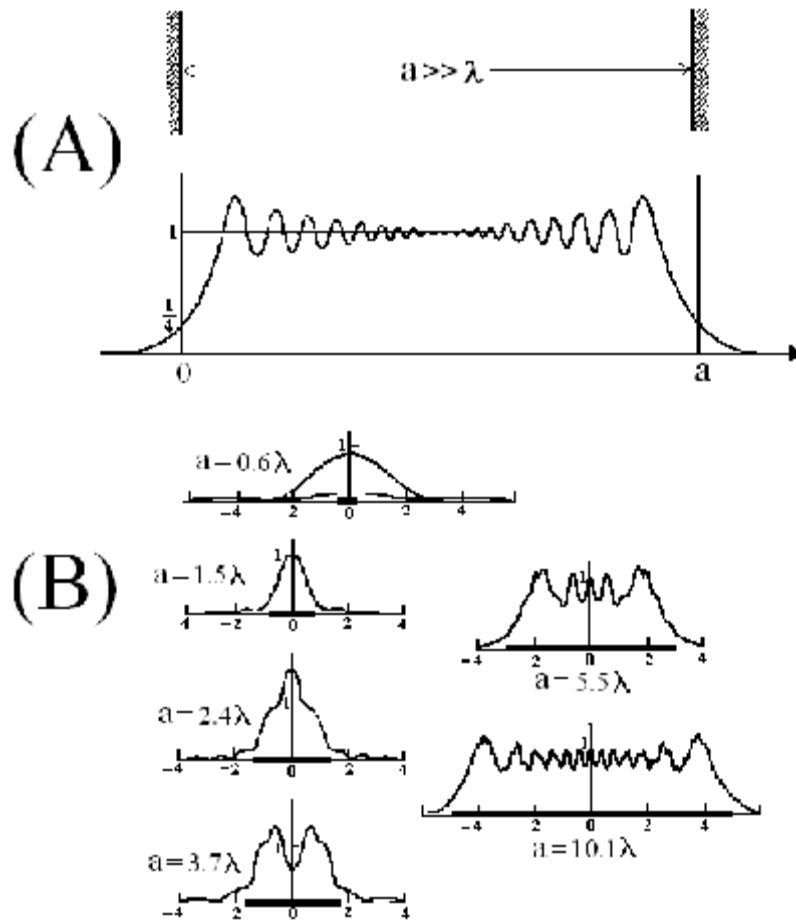


Figura 5.6: Resultados ópticos: (A) Difracción de Fresnel por una rendija ancha. (B) Difracción de Fresnel para diferentes tamaños de rendija a (línea gruesa en el eje horizontal)[45].

Al comparar los patrones de difracción por una rendija, Fig. (5.6) copiada de un libro de Óptica [45], con nuestra solución cuántica generada por la Ec. (5.56), ver Fig. (5.5), vemos que nuestra solución cuántica al problema de difracción en una rendija, contiene correctamente los casos límites Fresnel y Fraunhofer, además de todos los casos intermedios. Nótese que en el caso estacionario, el resultado cuántico final es independiente de v_0 : por lo tanto, nuestra comparación con el caso óptico no es más que una prueba de consistencia de nuestro resultado en el caso estacionario, pero no constituye ninguna prueba de la validez de nuestra teoría para obturadores con velocidad finita. De nueva cuenta mencionamos que no es posible comparar contra un caso conocido de obturador que se abre a velocidad finita simplemente porque dicho modelo no existe.

5.2. Patrones de difracción temporal

Consideremos en esta sección obturadores tales que la función transmitida, para puntos de observación fijos, dé resultados temporales que se puedan comparar con los patrones de difracción en el tiempo (Moshinsky).

5.2.1. Difracción por una rendija móvil

Consideremos ahora un caso de rendija donde podamos tener un resultado de difracción temporal que podamos comparar con la solución de Moshinsky. Esperamos que, para el caso de velocidades grandes de apertura $v_0 \gg v$, la función transmitida observada en un punto simétrico de la apertura nos dé una función de onda que sea semejante a la función de Moshinsky.

Para tal fin, consideramos como último caso un obturador inicialmente cerrado, localizado en el plano $z = 0$, con dos hojas planas infinitas. Ahora, a partir del tiempo $t = 0$ ambas hojas se empiezan a abrir *sin detenerse* a lo largo del eje x desde $x = 0$, una hacia arriba y otra hacia abajo con velocidad finita v_0 , ver Fig. (5.7).

Como se ha explicado anteriormente, la función frontera ψ_0 es nuestra nueva función:

$$\begin{aligned} \psi_0(x_0, y_0, t_0; v_0) &\equiv M(0, t_0)T(x_0, y_0, t_0; v_0) \\ &= \frac{\exp(-i\varepsilon t_0/\hbar)}{\sqrt{2i}} \left[\sqrt{\frac{i}{2}} + \mathcal{F}[\sqrt{2\varepsilon t_0/\pi\hbar}] \right] T(x_0, y_0, t_0; v_0). \end{aligned} \tag{5.60}$$

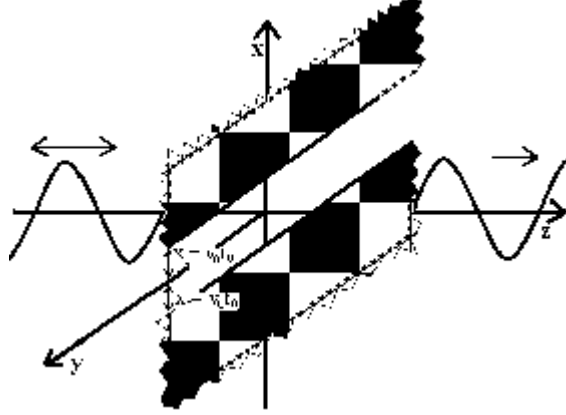


Figura 5.7: Obturador de dos hojas abriéndose a velocidad finita v_0 .

Ahora la función de transmisión T debe describir la cinemática del obturador, describiendo un obturador con dos hojas infinitas móviles ($-\infty \leq y \leq \infty$) abriéndose sin detenerse a lo largo del eje x , desde $x = 0$, una hacia arriba y la otra hacia abajo con una velocidad finita v_0 .

$$T(x_0, y_0, t_0; v_0) = \begin{cases} 1 & 0 \leq |x_0| \leq v_0 t_0, \quad -\infty < y_0 < \infty, \\ 0 & \text{cualquier otro punto } (x_0, y_0, t_0). \end{cases} \quad (5.61)$$

Tenemos entonces la solución formal reducida a cuadraturas:

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}, t; v_0) &= +i\gamma \int_0^t dt_0 \left. \frac{\partial g_3}{\partial z_0} \right|_{z_0=0} M(0, t_0) \int_{-v_0 t_0}^{v_0 t_0} dx_0 g_1(x, t; x_0, t_0) \\ &= \frac{i\gamma}{\sqrt{2i}} \int_0^t dt_0 \left. \frac{\partial g_3}{\partial z_0} \right|_{z_0=0} e^{-i\varepsilon t_0/\hbar} \left[\sqrt{\frac{i}{2}} + \mathcal{F}\left[\sqrt{\frac{2\varepsilon t_0}{\pi\hbar}}\right] \right] \int_{-v_0 t_0}^{v_0 t_0} dx_0 g_1. \end{aligned} \quad (5.62)$$

El valor de la integral en x_0 como se ha visto anteriormente se puede obtener en forma exacta expresada en términos de funciones de Fresnel ver

Ec. (D.3):

$$\begin{aligned}
& \int_{-v_0 t_0}^{v_0 t_0} dx_0 g_1(x, t; x_0, t_0) \\
&= \frac{1}{\sqrt{2i}} (\mathcal{F}[\sqrt{\frac{\mu}{\pi\hbar(t-t_0)}}(v_0 t_0 - x)] + \mathcal{F}[\sqrt{\frac{\mu}{\pi\hbar(t-t_0)}}(v_0 t_0 + x)]),
\end{aligned} \tag{5.63}$$

con lo que finalmente obtenemos una sola integral en el tiempo:

$$\begin{aligned}
\psi(\mathbf{r}, t; v_0) &= \frac{\gamma}{2} \int_0^t dt_0 \left. \frac{\partial g_3}{\partial z_0} \right|_{z_0=0} e^{-i\varepsilon t_0/\hbar} \left[\sqrt{\frac{i}{2}} + \mathcal{F}\left[\sqrt{\frac{2\varepsilon t_0}{\pi\hbar}}\right] \right] \times \\
& \quad \{ \mathcal{F}\left[\sqrt{\frac{\mu}{\pi\hbar(t-t_0)}}(v_0 t_0 - x)\right] + \mathcal{F}\left[\sqrt{\frac{\mu}{\pi\hbar(t-t_0)}}(v_0 t_0 + x)\right] \}.
\end{aligned} \tag{5.64}$$

De nueva cuenta la integral que se obtiene luce impresionante; sin embargo, como se ha visto anteriormente al emplear en este tipo de integrales el siguiente cambio de variable

$$\xi \equiv \frac{z^2}{4\gamma(t-t_0)}, \tag{5.65}$$

obtenemos una expresion que muestra que la función $\psi(\mathbf{r}, t)$ es un paquete de ondas moviéndose a la derecha,

$$\psi(x, z, t; v_0) = A(x, z, t; v_0) \exp[i(pz - \varepsilon t)/\hbar], \tag{5.66}$$

con una amplitud A dada por el factor:

$$\begin{aligned}
A(x, z, t; v_0) &\equiv \frac{1}{2\pi^{1/2}i^{3/2}} \int_{z^2/4\gamma t}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{\xi}} d\xi \exp \left[i \left(\frac{kz}{2} \right)^2 \left(\frac{1}{\sqrt{\xi}} - \frac{2}{kz} \sqrt{\xi} \right)^2 \right] \\
& \quad \times \left(\sqrt{\frac{i}{2}} + \mathcal{F}\left[\sqrt{\frac{2\varepsilon}{\pi\hbar}} \left(t - \frac{\mu z^2}{2\hbar\xi} \right) \right] \right) \\
& \quad \times \left\{ \mathcal{F}\left[\sqrt{\frac{2}{\pi}} \left((v_0 t - x) \frac{\sqrt{\xi}}{z} - \frac{v_0 \mu}{2\hbar} \frac{z}{\sqrt{\xi}} \right) \right] \right. \\
& \quad \left. + \mathcal{F}\left[\sqrt{\frac{2}{\pi}} \left((v_0 t + x) \frac{\sqrt{\xi}}{z} - \frac{v_0 \mu}{2\hbar} \frac{z}{\sqrt{\xi}} \right) \right] \right\}.
\end{aligned} \tag{5.67}$$

Como puede verse, de nueva cuenta se obtiene una expresión para la amplitud dada por una integral muy complicada.

Esta integral no se puede hacer en forma analítica, por lo que tenemos dos opciones: 1) realizarla en forma numérica, o bien, 2) obtener una aproximación analítica de la integral.

Como en todo este trabajo, siempre elegimos la segunda opción. De nueva cuenta, la presencia del factor de oscilación en el integrando dado por:

$$\exp[i(\frac{kz}{2})^2(\frac{1}{\sqrt{\xi}} - \frac{2}{kz}\sqrt{\xi})^2], \quad (5.68)$$

nos permite utilizar el método de fase estacionaria [41]-[42] para obtener una aproximación analítica de la integral.

Suponiendo $kz \gg 1$, el punto estacionario está dado por

$$\xi_0 = \pm \frac{kz}{2}. \quad (5.69)$$

La aproximación de fase estacionaria tiene sentido sólo si el punto estacionario ξ_0 es un punto interior al intervalo de integración por lo cual se escoge la raíz positiva; además, se tiene que satisfacer

$$z^2/4\gamma t < \frac{kz}{2}, \quad (5.70)$$

o en forma equivalente

$$z < \frac{p}{\mu}t = vt. \quad (5.71)$$

Bajo esta restricción el valor aproximado de la integral para la amplitud (5.67) resulta

$$\begin{aligned} A(\mathbf{r}, t; v_0) \sim & \frac{1}{2i} \left[\sqrt{\frac{i}{2}} + \mathcal{F}\left[\sqrt{\frac{2\varepsilon}{\pi\hbar}}\left(t - \frac{z}{v}\right)\right] \right] \times \\ & \{ \mathcal{F}\left[\sqrt{\frac{p}{\pi\hbar z}}\left(v_0\left(t - \frac{z}{v}\right) - x\right)\right] + \mathcal{F}\left[\sqrt{\frac{p}{\pi\hbar z}}\left(v_0\left(t - \frac{z}{v}\right) + x\right)\right] \}, \end{aligned} \quad (5.72)$$

con lo que se obtiene finalmente:

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}, t; v_0) \sim & \frac{1}{2i} e^{i(pz - \varepsilon t)/\hbar} \left[\sqrt{\frac{i}{2}} + \mathcal{F}\left[\sqrt{\frac{2\varepsilon}{\pi\hbar}}\left(t - \frac{z}{v}\right)\right] \right] \times \\ & \{ \mathcal{F}\left[\sqrt{\frac{p}{\pi\hbar z}}\left(v_0\left(t - \frac{z}{v}\right) - x\right)\right] + \mathcal{F}\left[\sqrt{\frac{p}{\pi\hbar z}}\left(v_0\left(t - \frac{z}{v}\right) + x\right)\right] \}, \end{aligned} \quad (5.73)$$

resultado válido con las condiciones de fase estacionaria: $2\pi z/\lambda \gg 1$, $t > z/v$. Si en adición a estas condiciones pedimos que $t \gg z/v$ entonces obtenemos la aproximación ya vista anteriormente (ver Ecs. (5.24), (5.25) y (5.26))

$$\frac{1}{\sqrt{2i}} e^{i(pz - \varepsilon t)/\hbar} \left[\sqrt{\frac{i}{2}} + \mathcal{F}\left[\sqrt{\frac{2\varepsilon}{\pi\hbar}}\left(t - \frac{z}{v}\right)\right] \right] \sim M(z, t), \quad (5.74)$$

por lo que la onda transmitida se puede expresar aproximadamente como:

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}, t; v_0) &\sim \frac{1}{\sqrt{2i}} M(z, t) \times \\ &\quad \left\{ \mathcal{F}\left[\sqrt{\frac{p}{\pi\hbar z}}\left(v_0\left(t - \frac{z}{v}\right) - x\right)\right] + \mathcal{F}\left[\sqrt{\frac{p}{\pi\hbar z}}v_0\left(t - \frac{z}{v}\right) + x\right] \right\}, \end{aligned} \quad (5.75)$$

resultado válido para $2\pi z/\lambda \gg 1$, $t \gg z/v$.

Deberíamos checar como prueba algebraica de consistencia que nuestra solución satisface la condición a la frontera. Desgraciadamente esto implicaría evaluar nuestra solución Ec. (5.75) en el punto $z = 0$. Esto está prohibido por la condición $kz \gg 1$, por lo que no es posible realizar dicha prueba de consistencia en nuestra aproximación.

Otra prueba de consistencia sería comparar nuestra solución, donde la velocidad v_0 es finita, contra el caso conocido de la solución de Moshinsky donde $v_0 \rightarrow \infty$. Esto, evidentemente, no es una prueba de validez de nuestra solución con velocidad finita. Sería conveniente comparar nuestra solución contra alguna otra solución exacta que contuviera dicha velocidad de apertura. Por desgracia no existe tal solución, por lo que procedemos a hacer únicamente pruebas de consistencia contra la función de Moshinsky.

Para poder comparar con la función de Moshinsky, consideremos un punto de observación simétrico, esto es, un punto de observación a la misma distancia de los dos bordes móviles: $x = 0$. Por lo tanto la Ec. (5.75) se convierte en:

$$\psi(\mathbf{r}, t; v_0) \sim \sqrt{\frac{2}{i}} M(z, t) \left\{ \mathcal{F}\left[\sqrt{\frac{p}{\pi\hbar z}}\left(v_0\left(t - \frac{z}{v}\right)\right)\right] \right\}. \quad (5.76)$$

Directamente de esta ecuación notamos que si $v_0 = 0$ y usando $\mathcal{F}[0] = 0$ tenemos, como era de esperarse, $\psi(\mathbf{r}, t) = 0$, que físicamente corresponde al caso trivial en el cual si el obturador permanece cerrado, no hay onda transmitida. En el otro extremo, si $v_0 \rightarrow \infty$, y utilizando el comportamiento asintótico de la función de Fresnel, $\mathcal{F}[\infty] = (i/2)^{1/2}$, se obtiene

$$\lim_{v_0 \rightarrow \infty} \psi(\mathbf{r}, t; v_0) = M(z, t), \quad (5.77)$$

lo cual nos indica que tenemos el comportamiento asintótico correcto. Esto no es una prueba de la validez, para velocidad finita, de nuestra función.

Densidad de probabilidad

De la Ec. (5.76) obtenemos que la densidad de probabilidad está dada por:

$$|\psi(\mathbf{r}, t; v_0)|^2 \sim |M(z, t)|^2 2 \left| \mathcal{F} \left[\sqrt{\frac{p}{\pi \hbar z}} \left\{ v_0 \left(t - \frac{z}{v} \right) \right\} \right] \right|^2, \quad (5.78)$$

lo cual indica que la densidad de probabilidad es la superposición de las oscilaciones de $|M|^2$ con las oscilaciones de $|\mathcal{F}|^2$.

Difracción temporal

De la Ec. (5.78) obtenemos que la densidad de probabilidad en un punto de observación $(0, 0, z)$ está dada por:

$$|\psi(0, z, t; v_0)|^2 = 2 \left[\left(\frac{1}{2} + C(\xi(z, t)) \right)^2 + \left(\frac{1}{2} + S(\xi(z, t)) \right)^2 \right] \times [C(\sigma(z, t; v_0))^2 + S(\sigma(z, t; v_0))^2], \quad (5.79)$$

donde los argumentos de las integrales de Fresnel están dados por:

$$\xi(z, t) \equiv \sqrt{\frac{2\varepsilon}{\pi \hbar t}} \left(t - \frac{z}{v} \right), \quad (5.80)$$

y

$$\sigma(z, t; v_0) \equiv \sqrt{\frac{p}{\pi z \hbar}} \left\{ v_0 \left(t - \frac{z}{v} \right) \right\}. \quad (5.81)$$

Para graficar la Ec. (5.79), definimos las siguientes cantidades adimensionales:

$$Z \equiv \frac{z}{\lambda} = \frac{zp}{2\pi \hbar}, \quad T \equiv t\nu = \frac{t\varepsilon}{2\pi \hbar}, \quad N = \frac{v_0}{v}, \quad (5.82)$$

por lo que los argumentos de las integrales de Fresnel, Ecs. (5.80) y (5.81), expresadas en función de las variables adimensionales Z , T y N quedan como:

$$\xi(Z, T) = 2\sqrt{T} - \frac{Z}{\sqrt{T}}, \quad (5.83)$$

$$\sigma(Z, T, N) = \sqrt{\frac{2}{Z}} N(2T - Z), \quad (5.84)$$

donde las condiciones para fase estacionaria se pueden escribir en forma adimensional como:

$$0,16 = 1/(2\pi) \ll Z \ll 2T. \quad (5.85)$$

Densidad de probabilidad como función del tiempo

Caso $Z=2$ (cerca de la frontera) A continuación se muestra la gráfica de la densidad de probabilidad como función de T para $X = 0$, $Z = 2$, a distintas velocidades de apertura $N = 1, 5, 10$, ver Fig. (5.8). Nota el valor $Z = 2$ esta permitido pues cumple con la condición $0,16 \ll Z$.

Caso $Z=200$ (lejos de la frontera) Se muestra la gráfica de la densidad de probabilidad como función de T para $X = 0$, $Z = 200$, a distintas velocidades de apertura $N = 1, 5, 10$, ver Fig. (5.9).

Como puede verse obtuvimos patrones de difracción temporal análogos al de Moshinsky, con la diferencia de que nuestra solución presenta muchas oscilaciones superpuestas a la solución de Moshinsky; conforme la velocidad de apertura aumenta nos acercamos asintóticamente al patrón de difracción temporal de Moshinsky. Las oscilaciones observadas las atribuimos al hecho de que el proceso de apertura se realiza a velocidad finita.

Densidad de probabilidad como función de la posición

Caso $T=6$ En la Fig. (5.10) presentamos la gráfica de la densidad de probabilidad como función de Z para $X = 0$ y $T = 6$, a distintas velocidades de apertura, 1, 5, 10. De las condiciones de fase estacionaria tenemos las restricciones para Z :

$$0,16 \ll Z \ll 2T. \quad (5.86)$$

Caso $T=300$ En la Fig. (5.11) presentamos la gráfica de la densidad de probabilidad como función de Z para $X = 0$ y $T = 300$, a distintas velocidades de apertura, $N = 1, 5, 10$.

De las gráficas mostradas se ve que obtuvimos patrones de difracción espacial análogos al de Moshinsky, con la diferencia de que nuestra solución presenta muchas oscilaciones superpuestas a la solución de Moshinsky; estas oscilaciones las atribuimos al hecho de que el proceso de apertura se realiza a velocidad finita; notamos como era de esperarse que mientras más grande es la velocidad de apertura, la densidad de probabilidad de la función de onda se parece más al patrón de difracción espacial de Moshinsky; conforme la velocidad de apertura aumenta nos acercamos asintóticamente al patrón de Moshinsky. Esto todo lo que confirma es que tenemos un buen resultado en la prueba de consistencia en la frontera de v_0 . Por supuesto esto no demuestra que nuestra teoría para velocidad finita sea correcta.

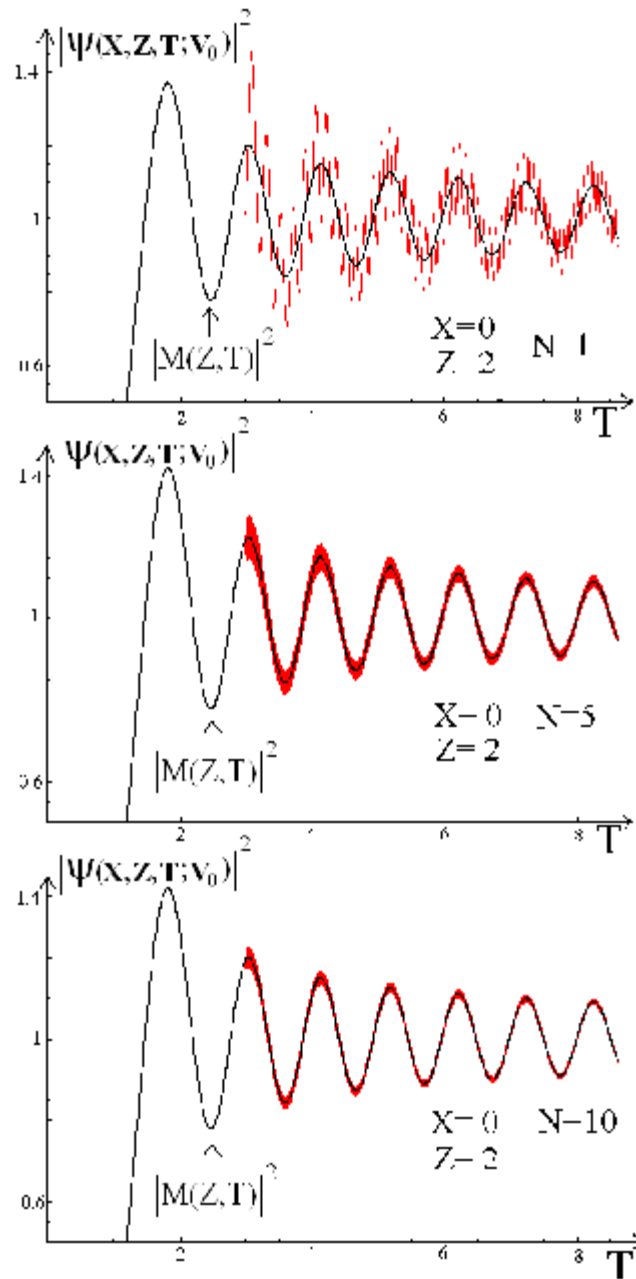


Figura 5.8: Difracción cuántica en el tiempo para distintas velocidades de apertura. $X \equiv x/\lambda$, $Z \equiv z/\lambda$ y $T \equiv t\nu$ son cantidades adimensionales. Punto de observación $X = 0$, $Z = 2$.

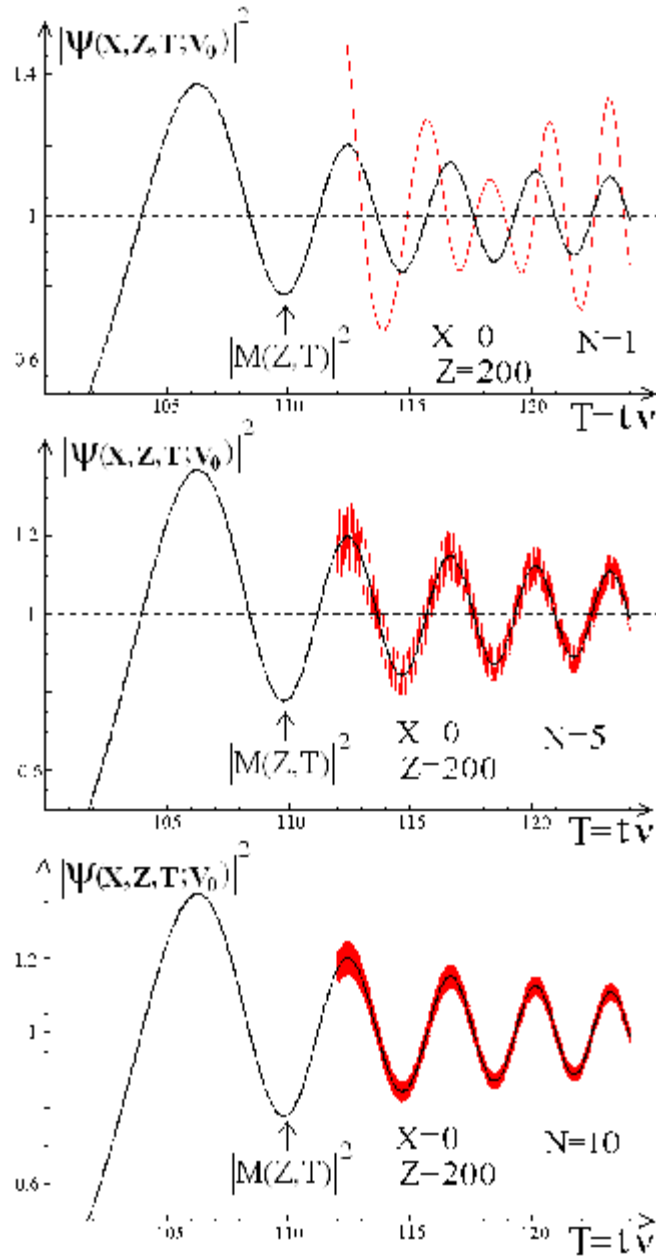


Figura 5.9: Difracción cuántica en el tiempo para distintas velocidades de apertura. $X \equiv x/\lambda$, $Z \equiv z/\lambda$ y $T \equiv t\nu$ son cantidades adimensionales. Punto de observación $X = 0$, $Z = 200$.

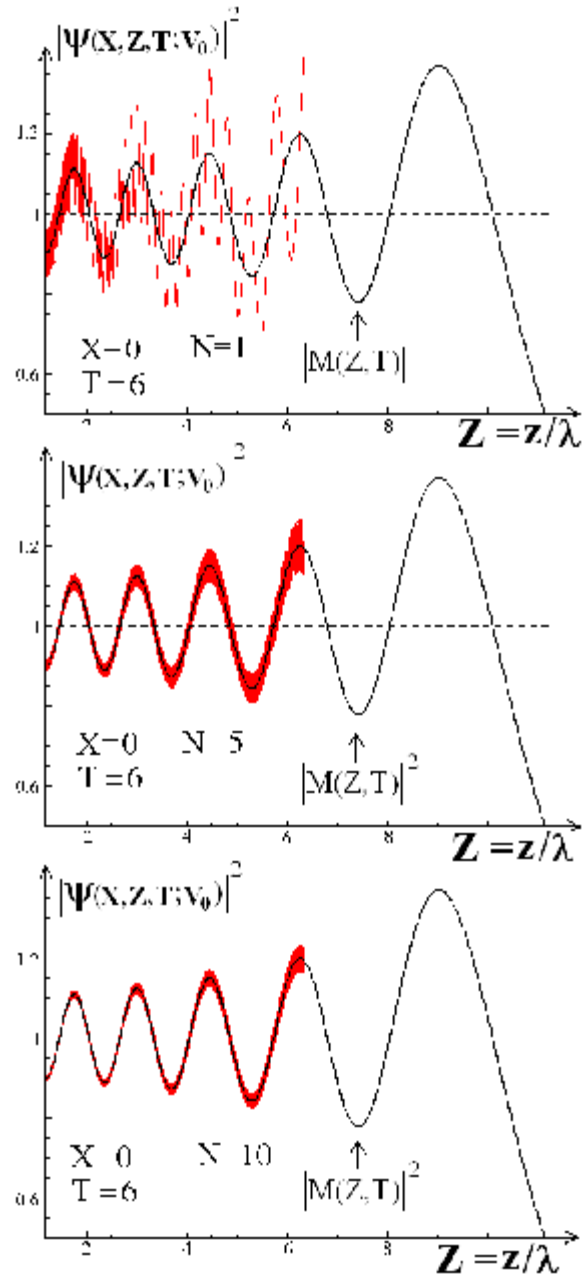


Figura 5.10: Difracción cuántica en el espacio para distintas velocidades de apertura. $X \equiv x/\lambda$, $Z \equiv z/\lambda$ y $T \equiv t\nu$ son cantidades adimensionales. Punto de observación $X = 0$, $T = 6$.

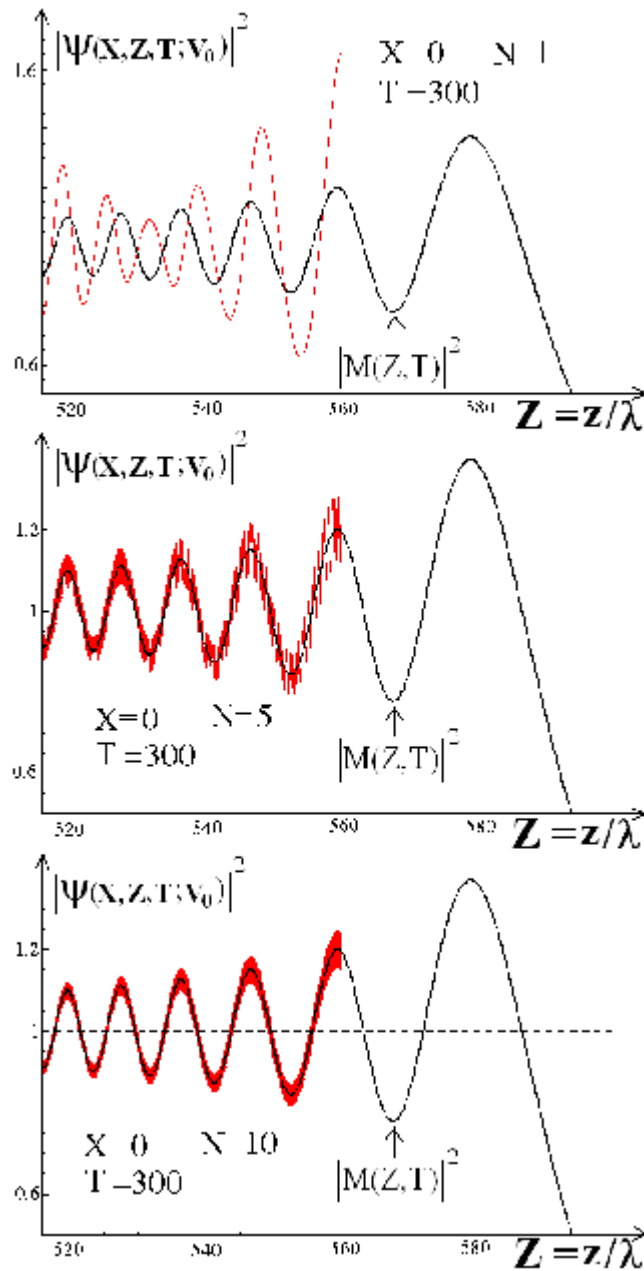


Figura 5.11: Difracción cuántica en el espacio para distintas velocidades de apertura. $X \equiv x/\lambda$, $Z \equiv z/\lambda$ y $T \equiv tv$ son cantidades adimensionales. Punto de observación $X = 0$, $T = 300$.

Capítulo 6

Conclusiones

La investigación pionera de Moshinsky [3] fue sobre un obturador que se abre a velocidad infinita, y la solución que se encontró en la región infinita del espacio es la función de onda $M(z, t)$. Por ser una solución en el espacio infinito, la técnica para resolver la ecuación de Schrödinger no pudo ser de condiciones a la frontera, ya que sólo se trata de un problema de condiciones iniciales. La principal objeción a esta solución es que por la velocidad de apertura, el problema teórico no corresponde a ningún obturador de la vida real. Por otro lado, tiene la gran ventaja de que proporciona una solución exacta a un problema de un obturador. Es importante hacer hincapié que la solución de Moshinsky nos proporciona el valor exacto de la función de onda debido a la interferencia de la onda incidente (estacionaria) y la onda reflejada (transitoria), generada por el movimiento a velocidad infinita del obturador. Esto ya en sí es muy importante, puesto que tenemos la solución exacta para un caso particular del problema de dispersión dependiente del tiempo para un obturador. Fuera del problema de Moshinsky, nadie ha encontrado otra solución exacta que proporcione la función de onda dependiente del tiempo al problema de la interferencia de la onda incidente (estacionaria) con la reflejada (transitoria). Este problema de dispersión dependiente del tiempo es un problema abierto, que esperamos algún día sea resuelto para obturadores con distintas geometrías y velocidades de apertura finitas.

Es el desconocimiento de esta función exacta de interferencia en los puntos frontera del obturador lo que nos llevó a utilizar la aproximación de la función $M(z, t)$ para construir funciones frontera en problemas de obturadores que se abren con velocidad finita. Es claro que esta aproximación se espera que sea válida únicamente para obturadores que se abren a gran

velocidad (velocidad de apertura mucho mayor que la velocidad de grupo de la partícula).

El objetivo de esta tesis fue resolver el problema cuántico del obturador incluyendo : a) velocidad de apertura finita, b) geometría específica de la apertura, c) la aproximación de una nueva función frontera que no había sido discutida anteriormente en la literatura y d) la definición y estudio de los tiempos de relajación τ_L y τ_M para la onda transmitida y la función frontera respectivamente.

Para esto resolvimos la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo como un problema de valores a la frontera. Si bien es posible obtener una solución exacta en una región semi-infinita, se tiene el problema urgente de especificar la condición a la frontera, $\psi_0(\mathcal{S}_0, t_0)$, tal que ψ_0 describa correctamente, en la superficie frontera \mathcal{S}_0 , la interferencia de la onda incidente (estacionaria) y la onda reflejada (transitoria) generada por el obturador que se abre. La onda reflejada es a su vez fuertemente dependiente de la geometría y velocidad de apertura del obturador. Conocer esta función exactamente implicaría conocer la solución exacta del problema de dispersión dependiente del tiempo para el problema del obturador; sin embargo, nadie sabe cuál es el valor exacto de la función frontera $\psi_0(\mathcal{S}_0, t_0)$, motivo por el cual se recurre a una aproximación. Pauli propuso como remedio utilizar la aproximación de Kirchhoff (usada en Óptica) para la función frontera. La aproximación de Kirchhoff define la función frontera como el valor de la onda plana incidente evaluada en la posición del obturador, $\exp[-i\epsilon t_0/\hbar]$ (en la ausencia total de cualquier frontera), multiplicada por una función de transmisión $T(\mathbf{r}_0, t_0)$. El problema es que la aproximación de Kirchhoff solamente es válida en estado estacionario, como ocurre en Óptica. Por lo tanto, para problemas cuánticos dependientes del tiempo la aproximación de Kirchhoff es poco confiable en el régimen transitorio.

Como ejemplos del uso de la aproximación de Kirchhoff, se tiene que en cada trabajo reportado hasta ahora en la literatura sobre haces pulsados, únicamente la condición a la frontera de Kirchhoff ha sido utilizada para intentar explicar teóricamente los resultados experimentales [19], [25]-[28]. Sin embargo, como demostramos, la descripción de la función de onda transmitida usando la condición a la frontera de Kirchhoff es muy poco confiable para trabajos numéricos precisos, especialmente en el régimen transitorio; esto es tiempos $t < \tau_M$. Demostramos sin embargo que si los tiempos de observación son mayores que τ_M , la función frontera se puede aproximar con un buen grado de exactitud a la función de Kirchhoff.

La razón por la cual la descripción física de la condición a la frontera de Kirchhoff es incorrecta, es la siguiente: el simple acto de remover la "pared

frontera" genera una onda transmitida y además una onda transitoria reflejada; consecuentemente, para z negativas y tiempos positivos, la onda plana incidente (estacionaria) interfiere con la onda transitoria reflejada. Entonces, no es la onda plana incidente, sino la nueva onda superpuesta la que llega continuamente para tiempos positivos a la frontera. El valor de esta onda con interferencia en $z_0 = 0$ da la correcta condición a la frontera $\psi_0(t_0)$. Como vimos, la onda reflejada es transitoria, y para tiempos largos es despreciable. Por consiguiente, el uso de la condición a la frontera de Kirchhoff es equivalente a despreciar el efecto transitorio de la onda reflejada, lo cual para tiempos cortos ($t < \tau_M$) es una suposición equivocada.

Por esta razón, nos dimos a la tarea de encontrar una nueva función frontera. La contribución más importante de este trabajo de investigación fue demostrar que es posible escribir una nueva función frontera, diferente de la de Kirchhoff. Si bien esta nueva función frontera es también una aproximación, en fuerte contraste a la aproximación de Kirchhoff, que no es válida para tiempos cortos, la nueva función frontera que aquí encontramos sí es válida para tiempos cortos, y en consecuencia sirve para describir correctamente los efectos de difracción para obturadores que se abren rápidamente y para puntos de observación cercanos a la frontera. La validez de nuestra teoría para tiempos cortos y velocidades finitas no se pudo verificar contra ningún modelo; pues al comparar contra casos conocidos, la velocidad de estos modelos fue infinita o nula. A lo más nuestras verificaciones fueron pruebas positivas de consistencia algebraica en los valores límite de v_0 .

Nuestra nueva función frontera propuesta es la función de Moshinsky evaluada en la frontera, $M(z_0 = 0, t_0)$, multiplicada por una función de transmisión $T(x_0, y_0, t_0; v_0)$. En el límite de tiempos largos, la nueva condición a la frontera es equivalente a la condición de Kirchhoff. Esta nueva función frontera propuesta es exacta únicamente para el obturador abriéndose a velocidad infinita. Si la usamos para un obturadores abriéndose a velocidad finita, nuestra función frontera será una aproximación válida para obturadores que se abren con velocidad muy grande comparada con la velocidad de la partícula $v_0 \gg p/m$. Esto nos dará soluciones, para tiempos cortos, que difieran de las obtenidas con la aproximación de Kirchhoff donde la aproximación de Kirchhoff es incorrecta.

Puesto que la función de onda $\psi(\mathbf{r}, t)$ depende de las coordenadas y el tiempo, se esperaba obtener patrones de difracción tanto espaciales como temporales. Utilizando nuestra nueva función frontera, obtuvimos las funciones de onda transmitidas para distintos obturadores que se abren a gran velocidad finita. Para el caso espacial, seleccionamos dos modelos de obturador que tuvieran una contraparte en Óptica, donde pudieramos comparar

nuestros resultados de difracción espacial cuánticos contra los bien conocidos patrones espaciales de difracción en Óptica: I) Difracción por una orilla recta y II) difracción por una rendija. Los patrones de difracción en Óptica son casos estacionarios: es por esto que seleccionamos obturadores cuánticos tales que la función de onda transmitida, en el límite de tiempos largos, tuvieran una densidad de probabilidad espacial que se pudiera comparar con los patrones de difracción en Óptica.

En completa semejanza con el problema de Moshinsky, en el caso de difracción por un borde recto, consideramos el caso de una onda plana incidiendo en la dirección del eje z , sobre un obturador totalmente absorbente, cerrado para $t \leq 0$, localizado en el plano $z = 0$. Este obturador está compuesto por dos hojas planas infinitas, separadas por el eje y . Al tiempo $t = 0$ la hoja superior se empieza a abrir sin detenerse desde $x = 0$, con velocidad de apertura finita v_0 a lo largo del eje x . La hoja inferior permanece estática, definiendo una orilla recta infinita en el eje y .

En el límite, $t \rightarrow \infty$, la orilla superior de la apertura está en infinito, por lo cual describe una densidad de probabilidad para un haz de partículas que pasa en forma continua a través de una orilla recta infinita (la orilla superior de la hoja inferior inmóvil).

Al comparar la expresión para la densidad de probabilidad estacionaria cuántica con la ecuación clásica, se vió sin lugar a dudas que nuestra expresión cuántica es la misma expresión matemática que nos da la Óptica para la intensidad de la luz, a lo largo de la dirección paralela a la apertura (eje x). El *patrón de difracción cuántico espacial* que se obtuvo es idéntico al patrón de difracción de Fresnel por una orilla recta en Óptica, puesto que en ambos casos los correspondientes argumentos de las integrales de Fresnel son lineales en la distancia a la rendija. Esto comprueba únicamente que nuestra solución tiene un correcto valor asintótico para tiempos largos, pero no es demostración de la validez de nuestra teoría para velocidades finitas de apertura a tiempos arbitrarios.

El estudio del caso de difracción por una rendija es muy parecido al anterior; la diferencia es que en este caso ambas hojas se mueven a velocidad constante v_0 , hasta llegar a una amplitud máxima $2a$; después de eso permanecen estáticas. La densidad de probabilidad estacionaria es idéntica a la expresión que se tiene en Óptica para la intensidad de luz en la difracción de Fresnel por una rendija de ancho $2a$. En esta densidad de probabilidad, se tiene la superposición de dos amplitudes de Fresnel generadas por los correspondientes bordes de la rendija. Se consideraron dos casos límites importantes: difracción por una rendija angosta y por una rendija ancha.

La rendija angosta se obtiene cuando la separación entre los bordes de la

rendija es del orden de la longitud de onda de la partícula es decir $2a \sim \lambda$; en este caso se tuvieron efectos de interferencia muy fuertes, en este caso, el observador que se encuentra en un posición Z fija detecta que la densidad de probabilidad como función de X exhibe un patrón idéntico a la difracción de Fraunhofer por una rendija.

El caso de la rendija ancha aparece cuando la separación entre los bordes de la rendija es muy grande comparada con la longitud de onda de la partícula, es decir cuando $2a \gg \lambda$; en este caso los efectos de cada función de Fresnel casi no interfieren entre sí, por lo cual se tiene un patrón de interferencia débil; en este caso, el observador que se encuentra en un posición Z fija detecta que la densidad de probabilidad como función de X presenta un patrón de difracción en el espacio idéntico al de dos patrones de Fresnel por un borde recto, independientes. Nuestra densidad de probabilidad en el estado estacionario $|\psi(\mathbf{r}, \infty)|^2$ para una rendija infinita además de tener estos dos casos límites, tiene todos los casos intermedios. De nueva cuenta estas verificaciones son sólo pruebas de consistencia de nuestra solución. La validez para velocidades finitas de apertura en tiempos arbitrarios no es demostrada.

Finalmente, para comparar patrones de difracción temporal tenemos sólo el caso exacto de la difracción de Moshinsky. Por tanto, para comparar nuestros resultados temporales contra los de Moshinsky, seleccionamos otro tipo de obturador que nos permitiera, para altas velocidades de apertura, ver si nuestros resultados de difracción en el tiempo se asemejan al patrón de Moshinsky. Este último obturador consistió de dos hojas planas infinitas, las cuales a partir de $t \geq 0$, comenzaron a moverse sin detenerse. Para poder comparar con el caso de Moshinsky, consideramos que nuestro punto de observación se encuentra en un punto simétrico entre las dos hojas del obturador, $z = 0$. Obtuvimos patrones de difracción espacial y temporal análogos a los de Moshinsky, con la diferencia de que en nuestra solución presenta muchas oscilaciones superpuestas a la solución de Moshinsky; conforme la velocidad de apertura aumenta nos acercamos asintóticamente a los patrones de difracción espacial y temporal de Moshinsky. Las oscilaciones observadas las atribuimos al hecho de que el proceso de apertura se realiza a velocidad finita.

Para una investigación posterior proponemos llevar acabo un cálculo numérico de la ecuación diferencial de Schödinger para velocidades finitas. Esperamos que este cálculo confirme de alguna manera nuestros resultados aproximados expresados en esta tesis.

Por último, como ejemplo de una nueva ruta de investigación que genera esta tesis, sería el de considerar geometrías distintas en la construcción de los

obturadores, como podría ser un obturador circular, y estudiar el comportamiento de la densidad de probabilidad de la función de onda transmitida, cuando este obturador comienza a abrirse a velocidad finita en forma semejante al obturador de una cámara fotográfica, utilizando para esto una función frontera adecuada al problema.

Bibliografía

- [1] M. O. Scully and S. Zubary, *Quantum Optics* (Cambridge University Press, Cambridge, 1997).
- [2] H. M. Nussenzveig, *Introduction to Quantum Optics* (Gordon and Breach, London, 1973).
- [3] M. Moshinsky, *Phys. Rev.* **88**, 625 (1952).
- [4] M. Abramowitz and I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions* (Dover, New York, 1965).
- [5] E. Butkov, *Mathematical Physics* (Addison-Wesley, Reading, Mass, 1968).
- [6] N. N. Lebedev, *Special Functions & Their Applications* (Dover Publications, New York, 1972).
- [7] H. M. Nussenzveig, *Causality and Dispersion Relations* (Academic, New York, 1972).
- [8] H. M. Nussenzveig, in *Symmetries in Physics*, edited by A. Franck and K. B. Wolf (Springer-Verlag, Berlin, 1992), pp. 293-310.
- [9] M. Kleber, *Phys. Rev.* **236**, 331 (1994).
- [10] W. E. Frahn, *Riv. Nuovo Cimento*, **7**, 499 (1977).
- [11] G. García-Calderón, J. L. Mateos, and M. Moshinsky, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 337 (1995); G. García-Calderón and J. Villavicencio, *Phys. Rev. A*, **64**, 12107 (2001).
- [12] W. Eberfeld and M. Kleber, *Am. J. Phys.* **56**, 154, (1988).
- [13] G. Monsivais, M. Moshinsky, and G. Loyola, *Phys. Scr.* **55**, 216 (1996).

- [14] B. Gaveau, L. S. Schulman, J. Phys. A **19**, 1833 (1986).
- [15] V. Man'ko, M. Moshinsky, and A. Sharma, Phys. Rev. A **59**, 1809 (1999).
- [16] G. Sheitler, M. Kleber, Z. Physik D-Atoms, Molecules and Clusters **9**, 267 (1988).
- [17] M. Born and E. Wolf, Principles of Optics. 6thed. (Pergamon Press, Oxford, 1980).
- [18] J. Felber, R. Gähler, C. Rausch, and R. Golub, Phys. Rev. A, **53**, 319 (1996).
- [19] S. Zifftiger, D. Guéry-Odelin, M. Arndt, and J. Dalibard, Phys. Rev. Lett. **77**, 4 (1996).
- [20] A. S. Gerasimov and M. V. Kasarnovskii, Sov. Phys. JETP **44**, 892, (1976).
- [21] S. Godoy, Phys. Rev. A **65**, 42111 (2002).
- [22] S. Godoy, Phys. Rev. A **67**, 12102 (2003).
- [23] P. S. Zifftiger, D. Guéry-Odelin, P. Desbiolles, M. Arndt, J. Dalibard, and A. Steane, Acta Phys. Pol. A **93**, 197, (1998); M. Arndt, P. S. Zifftiger, J. Dalibard, and A. Steane, Phys. Rev. A, **53**, 3369 (1996); S. Bernet, M. Oberthaler, R. Abfalterer, J. Schmiedmayer, and A. Zeilinger, Quantum Semiclassic Opt. **8**, 497 (1996); Phys. Rev. Lett. **77**, 5160 (1996); B. Saubamea, T. Hijmans, S. Kulin, E. Rasel, E. Peik, M. Leduc, and C. Cohen-Tannoudi, Phys. Rev. Lett. **79**, 3146 (1997).
- [24] W. Pauli, *Optics and the Theory of Electrons, Pauli Lectures on Physics*, Vol. 2, ed. C. P. Enz, MIT Press, (Cambridge, London, 1973.)
- [25] R. Gähler and R. Golub, J. Phys. (Paris), Colloq. **45**, C3-229, (1984).
- [26] R. Gähler and R. Golub, Z. Phys. B - Cond. Matt, **56**, 5, (1984).
- [27] J. Felber, R. Gähler, G. Müller, and R. Golub, Physica B **151**, 135 (1998); **162**, 191, (1990).
- [28] Th. Hils, J. Felber, R. Gähler, W. Gläser, R. Golub, K. Habicht, and P. Wille, Phys. Rev. A **58**, 4787, (1998).
- [29] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. Lalöe, Quantum Mechanics (John Wiley, New York, 1977), Vol. I.

- [30] A. Messiah, Mecánica Cuántica (Tecnos, Madrid 1983). Vol. I.
- [31] W. Greiner, Quantum Mechanics an Introduction. 3^a ed. (Springer, Germany, 1994).
- [32] E. Merzbacher, Quantum Mechanics(John Wiley, New York 1970).
- [33] Borowitz, Fundamentals of Quantum Mechanics (Benjamin, New York, 1967).
- [34] L. I. Schiff, Quantum Mechanics (McGraw-Hill, New York, 1968).
- [35] P. M. Morse and H. Feshbach, Methods of Theoretical Physics. (Mc. Graw Hill. U. S. A.,1953),Part II.
- [36] R. Haberman, Ecuaciones en Derivadas Parciales con Series de Fourier y problemas de Contorno. 3^a ed. (Prentice Hall, Madrid, 2003).
- [37] D. G. Duffy, Green's Functions with Applications, (Chapman & Hall/CRC, 2001), pp. 177.
- [38] M. Abramowitz and I. A. Stegun, Handbook of Mathematical Functions. (Dover, New York, 1965), p. 301, Ec. 7. 3. 20.
- [39] M. Abramowitz and I. A. Stegun, Handbook of Mathematical Functions. (Dover, New York, 1965), p. 297, Ec. 7.1.1.
- [40] M. Abramowitz and I. A. Stegun, Handbook of Mathematical Functions. (Dover, New York, 1965), p. 1026, Ec. 29.3.90.
- [41] N. Bleinstein and R. A. Handelsman, Asymptotic Expansions of Integrals (Dover, New York, 1986), p. 220.
- [42] H. Jeffreys and B. Jeffreys, Methods of Mathematical Physics, Third Ed. (1953), p. 506.
- [43] M. Born and E. Wolf, Principles of Optics. 7^a ed. (Pergamon Press, Oxford, 1980), p. 483, Ec. 28.
- [44] M. V. Klein, Optics (John Wiley, New York, 1970), p. 415.
- [45] M. V. Klein, Optics (John Wiley, New York, 1970), pp. 422-423 .

Apéndice A

Cálculo de $K(z,t)$

De la Ec. (3.4), tenemos que la función $K(z, t)$ está dada por:

$$K(z, t) = i\gamma \int_0^t dt_0 \exp(-i\epsilon t_0/\hbar) \frac{z \exp [iz^2/4\gamma(t - t_0)]}{\sqrt{4\pi} [i\gamma(t - t_0)]^{3/2}}. \quad (\text{A.1})$$

Como podemos apreciar, esta integral es del tipo convolutivo,

$$\mathcal{L}\left[\int_0^t g(t_0)f(t - t_0)\right] = \mathcal{L}[f(t)]\mathcal{L}[g(t)]. \quad (\text{A.2})$$

Aplicando una transformada de Laplace a la Ec. (A.1), se obtiene

$$\mathcal{L}[K(z, t)] = i\gamma \mathcal{L}\left[\frac{z \exp [iz^2/4\gamma t]}{\sqrt{4\pi}(i\gamma t)^{3/2}}\right] \mathcal{L}[e^{-i\epsilon t/\hbar}], \quad (\text{A.3})$$

utilizando tablas de transformadas de Laplace estándar [40] obtenemos:

$$\mathcal{L}\left[\frac{z \exp [iz^2/4\gamma t]}{\sqrt{4\pi}(i\gamma t)^{3/2}}\right] = \frac{1}{i\gamma} \exp(-z\sqrt{\frac{s}{i\gamma}}), \quad (\text{A.4})$$

y

$$\mathcal{L}[e^{-i\epsilon t/\hbar}] = \frac{1}{s + i\epsilon/\hbar}. \quad (\text{A.5})$$

Sustituyendo las Ecs. (A.4) y (A.5) en la Ec. (A.3), se obtiene

$$\mathcal{L}[K(z, t)] = \frac{1}{s + i\epsilon/\hbar} \exp(-z\sqrt{s/i\gamma}), \quad (\text{A.6})$$

expresión que podemos reescribir de la siguiente forma

$$\mathcal{L}[K(z, t)] = \frac{\exp(-z\sqrt{s/i\gamma})}{2i\sqrt{i\epsilon/\hbar}} \left[\frac{1}{\sqrt{s - i\sqrt{i\epsilon/\hbar}}} - \frac{1}{\sqrt{s + i\sqrt{i\epsilon/\hbar}}} \right]. \quad (\text{A.7})$$

Para obtener a la función $K(z, t)$ aplicamos la transformada inversa de Laplace a la Ec. (A.7), obteniendo con ello

$$K(z, t) = \frac{1}{2i\sqrt{i\varepsilon/\hbar}} \left\{ \mathcal{L}^{-1} \left[\frac{\exp(-z\sqrt{s/i\gamma})}{\sqrt{s} - i\sqrt{i\varepsilon/\hbar}} \right] - \mathcal{L}^{-1} \left[\frac{\exp(-z\sqrt{s/i\gamma})}{\sqrt{s} + i\sqrt{i\varepsilon/\hbar}} \right] \right\}. \quad (\text{A.8})$$

Nuevamente utilizando una tabla de transformadas de Laplace estándar [40] sabemos que :

$$\mathcal{L}^{-1} \left[\frac{\exp(-k\sqrt{s})}{a + \sqrt{s}} \right] = \frac{1}{\sqrt{\pi t}} e^{(-k^2/4t)} - a e^{ak} e^{a^2 t} \operatorname{erf} c \left(a\sqrt{t} + \frac{k}{2\sqrt{t}} \right), \quad \operatorname{Im} k < 0, \quad (\text{A.9})$$

por lo cual

$$\begin{aligned} \mathcal{L}^{-1} \left[\frac{\exp(-z\sqrt{s/i\gamma})}{\sqrt{s} - i\sqrt{i\varepsilon/\hbar}} \right] &= \frac{1}{\sqrt{\pi t}} \exp\left(-\frac{z^2}{4i\gamma t}\right) + \\ & i\sqrt{\frac{i\varepsilon}{\hbar}} e^{i(-pz-\varepsilon t)/\hbar} \operatorname{erf} c \left(-i\sqrt{\frac{i\varepsilon t}{\hbar}} + \frac{z}{2\sqrt{i\gamma t}} \right), \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

y

$$\begin{aligned} \mathcal{L}^{-1} \left[\frac{\exp(-z\sqrt{s/i\gamma})}{\sqrt{s} + i\sqrt{i\varepsilon/\hbar}} \right] &= \frac{1}{\sqrt{\pi t}} \exp\left(-\frac{z^2}{4i\gamma t}\right) - \\ & i\sqrt{\frac{i\varepsilon}{\hbar}} e^{i(pz-\varepsilon t)/\hbar} \operatorname{erf} c \left(i\sqrt{\frac{i\varepsilon t}{\hbar}} + \frac{z}{2\sqrt{i\gamma t}} \right). \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

Sustituyendo las Ecs. (A.10) y (A.11) en la Ec. (A.8) obtenemos

$$\begin{aligned} K &= \frac{1}{2} \left[e^{i(-pz-\varepsilon t)/\hbar} \operatorname{erf} c \left(-i\sqrt{\frac{i\varepsilon t}{\hbar}} + \frac{z}{2\sqrt{i\gamma t}} \right) + \right. \\ & \left. e^{i(pz-\varepsilon t)/\hbar} \operatorname{erf} c \left(i\sqrt{\frac{i\varepsilon t}{\hbar}} + \frac{z}{2\sqrt{i\gamma t}} \right) \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

Utilizando las siguientes identidades [39]

$$\operatorname{erf} c(x) = 1 - \operatorname{erf}(x), \quad \operatorname{erf} \left(\sqrt{\frac{\pi}{2i}} x \right) = \sqrt{\frac{2}{i}} \mathcal{F}(z), \quad (\text{A.13})$$

obtenemos finalmente:

$$\begin{aligned}
K(z, t) &= \frac{e^{i(pz-\varepsilon t)/\hbar}}{\sqrt{2i}} \left\{ \sqrt{\frac{i}{2}} + \mathcal{F}\left(\sqrt{\frac{2\varepsilon t}{\pi t}}\left(1 - \frac{\mu z}{tp}\right)\right) \right\} + \\
&\quad \frac{e^{i(-pz-\varepsilon t)/\hbar}}{\sqrt{2i}} \left\{ \sqrt{\frac{i}{2}} - \mathcal{F}\left(\sqrt{\frac{2\varepsilon t}{\pi t}}\left(1 + \frac{\mu z}{tp}\right)\right) \right\} \\
&= M(z, t; p) + M(z, t; -p). \tag{A.14}
\end{aligned}$$

Al ver este resultado, nos damos cuenta de que pudimos hacer una demostración mucho más fácil, si tan sólo hubieramos tenido la inspiración de haber reescrito la función de Kirchhoff usando la siguiente identidad:

$$\begin{aligned}
&\exp(-i\varepsilon t/\hbar) \\
&= \exp(-i\varepsilon t/\hbar) \left[\frac{1}{2} + \frac{1}{\sqrt{2i}} \mathcal{F}\left(\sqrt{\frac{t}{\pi\hbar\mu}}p\right) \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{2} - \frac{1}{\sqrt{2i}} \mathcal{F}\left(\sqrt{\frac{t}{\pi\hbar\mu}}p\right) \right] \\
&= M(0, t; p) + M(0, t; -p). \tag{A.15}
\end{aligned}$$

De aquí es evidente que si tenemos la función frontera

$$M(0, t_0; p) + M(0, t_0; -p),$$

válida para $0 < t_0 < t$, entonces la función transmitida para toda t es:

$$M(z, t; p) + M(z, t; -p). \tag{A.16}$$

Apéndice B

Cálculo de $\psi_0(t_0)$

Consideremos la solución ψ_0 de la ecuación integral Ec. (4.1)

$$M(z, t) = i\gamma \int_0^t dt_0 \left. \frac{\partial g_3}{\partial z_0} \right|_{z_0=0} \iint_{-\infty}^{+\infty} dx_0 dy_0 g_1 g_2 \psi_0(x_0, y_0, t_0), \quad (\text{B.1})$$

donde suponemos conocida $M(z, t)$ y deseamos encontrar $\psi_0(x_0, y_0, t_0)$. Puesto que M no depende de las variables (x, y) , ψ_0 debe ser tal que la integración de $g_1 g_2 \psi_0$ en el lado derecho de la ecuación no dé contribuciones en las variables (x, y) . Esto puede cumplirse sólo si ψ_0 es una función de t_0 , y no función de x_0 y y_0 . Para el caso particular $\psi_0 = \psi_0(t_0)$ las integrales sobre x_0 y y_0 pueden ahora ser calculadas fácilmente

$$\int_{-\infty}^{+\infty} g_1 dy_0 = \int_{-\infty}^{+\infty} g_2 dz_0 = 1,$$

y $\psi_0(t_0)$ satisface entonces una ecuación integral de Volterra

$$M(z, t) = i\gamma \int_0^t dt_0 \psi_0(t_0) \frac{z \exp [iz^2/4\gamma(t - t_0)]}{\sqrt{4\pi} [i\gamma(t - t_0)]^{3/2}}. \quad (\text{B.2})$$

Esta integral es del tipo convolutivo, y bajo una transformada de Laplace la solución formal resulta:

$$\mathcal{L}[\psi_0] = \frac{1}{i\gamma} \mathcal{L}[M(z, t)] / \mathcal{L} \left[\frac{z \exp [iz^2/4\gamma t]}{\sqrt{4\pi} (i\gamma t)^{3/2}} \right]. \quad (\text{B.3})$$

Donde hemos denotado el operador de Laplace \mathcal{L} como

$$\mathcal{L}[f(t)] \equiv \int_0^{\infty} f(t) \exp(-st) dt. \quad (\text{B.4})$$

Utilizando las identidades [39]

$$\operatorname{erf}\left(\sqrt{\frac{\pi}{2i}}z\right) = \sqrt{\frac{2}{i}}\mathcal{F}(z), \quad (\text{B.5})$$

$$\mathcal{F}(-z) = -\mathcal{F}(z), \quad (\text{B.6})$$

y utilizando tablas de transformadas de Laplace [40], obtenemos

$$\begin{aligned} \mathcal{L}[M(z, t)] &= \mathcal{L}\left[\frac{e^{i(pz-\varepsilon t)/\hbar}}{\sqrt{2i}}\left\{\sqrt{\frac{i}{2}} - \mathcal{F}\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi\gamma t}}(z - pt/\mu)\right]\right\}\right] \\ &= \frac{\exp(-z\sqrt{s/i\gamma})}{2\sqrt{s}(\sqrt{s} - \sqrt{\varepsilon/i\hbar})}, \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

y

$$\mathcal{L}\left[\frac{z \exp[iz^2/4\gamma t]}{\sqrt{4\pi}(i\gamma t)^{3/2}}\right] = \frac{1}{i\gamma} \exp(-z\sqrt{s/i\gamma}). \quad (\text{B.8})$$

Finalmente, utilizando $\gamma = \hbar/2\mu$, encontramos la solución exacta

$$\begin{aligned} \psi_0(t) &= \mathcal{L}^{-1}\left(\frac{1}{2\sqrt{s}(\sqrt{s} - \sqrt{\varepsilon/i\hbar})}\right) \\ &= \frac{\exp(-i\varepsilon t/\hbar)}{\sqrt{2i}}\left[\sqrt{\frac{i}{2}} + \mathcal{F}[\sqrt{2\varepsilon t/\pi\hbar}]\right]. \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

Esta es la condición a la frontera exacta para el problema de condiciones a la frontera donde tenemos la función de Moshinsky $M(z, t)$ transmitida en la región de $z > 0$.

Apéndice C

Integral (5.9)

En este apéndice calcularemos la integral

$$I \equiv \int_0^{v_0 t_0} dx_0 g_1 = \frac{1}{\sqrt{4\pi i \gamma (t - t_0)}} \int_0^{v_0 t_0} dx_0 \exp -\frac{(x_0 - x)^2}{4i\gamma(t - t_0)}. \quad (\text{C.1})$$

Utilizando el siguiente cambio de variable:

$$\eta = \frac{x_0 - x}{\sqrt{4i\gamma(t - t_0)}}, \quad (\text{C.2})$$

obtenemos

$$I = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-x/\sqrt{4i\gamma(t-t_0)}}^{(-x+v_0 t_0)/\sqrt{4i\gamma(t-t_0)}} d\eta \exp(-\eta^2). \quad (\text{C.3})$$

Por otra parte, la función $\text{erf}(z)$ se define como [39]:

$$\text{erf}[z] \equiv \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z dt \exp(-t^2) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{-z}^0 dt \exp(-t^2), \quad (\text{C.4})$$

y la función de Fresnel [39]:

$$\mathcal{F}[z] \equiv \int_0^z d\xi \exp\left(\frac{i\pi\xi^2}{2}\right), \quad (\text{C.5})$$

a partir de estas dos definiciones, se ve claramente que

$$\text{erf}\left[\sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{z}{\sqrt{i}}\right] = \sqrt{\frac{2}{i}} \mathcal{F}[z], \quad (\text{C.6})$$

o en forma equivalente

$$\operatorname{erf}\left[\frac{z}{\sqrt{i}}\right] = \sqrt{\frac{2}{i}} \mathcal{F}\left[z\sqrt{\frac{2}{\pi}}\right]. \quad (\text{C.7})$$

Aplicando las Ec. (C.4) en la Ec. (C.3) obtenemos

$$I = \frac{1}{2} \left\{ \operatorname{erf}\left[\frac{-x + v_0 t_0}{\sqrt{4i\gamma(t - t_0)}}\right] - \operatorname{erf}\left[\frac{-x}{\sqrt{4i\gamma(t - t_0)}}\right] \right\}, \quad (\text{C.8})$$

o en términos de la función de Fresnel Ec. (C.7), se obtiene finalmente:

$$I = \frac{1}{\sqrt{2i}} \left\{ \mathcal{F}\left[\sqrt{\frac{\mu}{\pi\hbar(t - t_0)}}(v_0 t_0 - x)\right] + \mathcal{F}\left[\sqrt{\frac{\mu}{\pi\hbar(t - t_0)}}x\right] \right\}. \quad (\text{C.9})$$

Apéndice D

Integrales (5.38) y (5.39)

Por calcular la siguiente integral

$$I_1 \equiv \int_{-v_0 t_0}^{v_0 t_0} dx_0 g_1 = \frac{1}{\sqrt{4\pi i \gamma (t - t_0)}} \int_{-v_0 t_0}^{v_0 t_0} dx_0 \exp -\frac{(x_0 - x)^2}{4i\gamma(t - t_0)}. \quad (\text{D.1})$$

Utilizando nuevamente las Ecs. (C.4), (C.5) y (C.6) se obtiene:

$$I_1 = \frac{1}{2} \left\{ \operatorname{erf}\left[\frac{v_0 t_0 - x}{\sqrt{4i\gamma(t - t_0)}}\right] + \operatorname{erf}\left[\frac{v_0 t_0 + x}{\sqrt{4i\gamma(t - t_0)}}\right] \right\}, \quad (\text{D.2})$$

utilizando Ec. (C.7) para expresar la solución en términos de la función de Fresnel se obtiene:

$$I_1 = \frac{1}{\sqrt{2i}} \left\{ \mathcal{F}\left[\sqrt{\frac{\mu}{\pi\hbar(t - t_0)}}(v_0 t_0 - x)\right] + \mathcal{F}\left[\sqrt{\frac{\mu}{\pi\hbar(t - t_0)}}(v_0 t_0 + x)\right] \right\}. \quad (\text{D.3})$$

De forma análoga obtenemos:

$$I_2 = \int_{-a}^a dx_0 g_1 = \frac{1}{\sqrt{2i}} (\mathcal{F}\left[\sqrt{\frac{\mu}{\pi\hbar(t - t_0)}}(a - x)\right] + \mathcal{F}\left[\sqrt{\frac{\mu}{\pi\hbar(t - t_0)}}(a + x)\right]). \quad (\text{D.4})$$