



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA
DE MÉXICO
POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS
INSTITUTO DE FÍSICA

**Escala Temporal para la Acumulación de la Densidad de
Probabilidad en el Decaimiento Cuántico**

T E S I S

QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE
MAESTRO EN CIENCIAS (FÍSICA)

PRESENTA:

FIS. MARIO ALBERTO MONROY YÉPEZ

TUTOR PRINCIPAL

Dr. GASTÓN GARCÍA CALDERÓN
INSTITUTO DE FÍSICA UNAM

MIEMBROS DEL COMITÉ TUTOR

Dr. MAURICIO FORTES BESPROSVANI
INSTITUTO DE FÍSICA UNAM

Dra. ROCÍO JÁUREGUI-RENAUD
INSTITUTO DE FÍSICA UNAM

MÉXICO, D. F. DICIEMBRE 2013



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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

A mi Mamá, Maty y a mi Papá, Miguel.

A mi abuelita, Caridad...

A mis hermanas y hermanos.

Agradecimientos

Quiero agradecer, en primer lugar, al doctor Gastón García Calderón que, más que un tutor, ha sido para mí un mentor excepcional. Gracias por compartir su conocimiento y su talento; gracias, también, por haber tenido conmigo más paciencia de la que yo mismo me hubiera tenido. Por su apoyo y su guía, gracias.

Gracias a mis demás tutores y sinodales: Dr. Mauricio Fortes, Dra. Rocío Jáuregui, Dr. Sergio Cordero, Dr. Roberto Romo y Dra. Lorea Chaos, sus aportaciones a la elaboración de esta tesis han sido invaluable, cualquier error que éste trabajo pudiera aún contener es responsabilidad sólo mía.

Gracias a mi Mamá, Maty y mi Papá, Miguel de quienes he recibido mucho más que la vida y a quienes nunca podré retribuir lo que siguen dándome y haciendo por mí. Tal vez no siempre me entienden pero, eso sí, siempre me quieren.

Quiero agradecer a mi abuelita, Caridad. La biología te dio un hijo, la vida te dio nueve más, ha sido una fortuna y un privilegio ser uno de ellos. Desgraciadamente no viviste lo suficiente para ver este trabajo terminado, no viviré lo suficiente para terminar de agradecerte.

Agradezco el apoyo de mis hermanas y hermanos entre los que incluyo a mi primo Beto. Quiero mencionar, especialmente, a mis sobrinas Fer, Nicky, Yamy y Mony; en los pocos años que tienen en el mundo han aprendido lecciones que yo estoy lejos de imaginar, demostrando lo grandes que pueden ser. ¡Gracias mis niñas, sin ustedes la vida sería tan gris!

Gracias, muchísimas gracias, Gaby. Cuando te conocí no imaginé el significado que tendrías para siempre en mi vida, me has dado más de lo que en realidad una amistad requiere, espero algún día merecerlo. Gracias, hermanita, asociaré siempre tu imagen a la definición de lealtad.

Gracias, Corina por ayudarme a sobrellevar el proceso, tu amistad y tu compañía en estos últimos meses han sido un regalo, inesperado pero animoso.

Gracias a Jessy, Eduardo y Marcela de quienes he recibido apoyo en todo momento .

Gracias a mis compañeros: Laura, Fernanda y Armando, no olvido los momentos que compartimos en el curso propedéutico y las maratónicas y poco saludables desveladas del primer semestre, no pude haber tenido mejor apoyo y compañía.

Gracias al profesor Gilberto Fuentes de quien he aprendido más de lo que él mismo imagina, espero ser digno seguidor de su ejemplo.

Gracias Jackie Rebolledo, sin tu ayuda los huecos, te aseguro, habrían sido más oscuros y difíciles de llenar.

Me gustaría pensar que Dios existe, así
sabría que nuestras discusiones y
desacuerdos no han sido en vano.

Resumen

El presente es un trabajo en el que se investiga la escala de tiempo de la acumulación de la densidad de probabilidad de una partícula en el proceso de decaimiento cuántico, para lo cual se utiliza el formalismo de los estados resonantes. El modelo que se considera es el decaimiento de estados iniciales descritos por un estado de la caja y algunas de sus variaciones. El estudio se hace en la superficie del potencial de interacción, que en este caso es un potencial delta, en onda s ($l = 0$). Para ello, se considera la acumulación de la densidad de probabilidad como función del tiempo. La función de onda que describe la evolución temporal del estado posee contribuciones exponenciales y no exponenciales debidas a distintos términos resonantes. Se obtiene que la acumulación de densidad de probabilidad es debida principalmente a los términos de interferencia en la suma de las contribuciones exponenciales de la solución. Se obtiene, también, que la escala temporal de la acumulación de densidad de probabilidad es un proceso que toma una fracción de la vida media del sistema y que depende, significativamente, del estado inicial.

Abstract

This is a work in which we investigate the time scale of the accumulation of the probability density of a particle in quantum decay process, for which we use the formalism of resonant states. The model considered is the decay of initial states described by a state of the box and some of its variations. The study was done at the surface of the interaction potential, which in this case is a delta potential, in s wave ($l = 0$). For this, we consider the accumulation of the probability density as a function of time. The wave function describing the temporal evolution of the states has exponential and non-exponential contributions due to different resonant terms. It's obtained that the accumulation density probability is mainly due to the interference terms in the sum of exponential contributions to the solution. It's also obtained that the time scale accumulation probability density is a process that takes a fraction of the half-life of the state and relies, significantly, on the initial state.

Índice general

Resumen	v
Introducción	ix
1. Formalismo de los Estados Resonantes	1
1.1. Estados Resonantes	1
1.2. Evolución Temporal	3
1.3. Probabilidad de Supervivencia	7
1.4. Función de Onda en Términos de Estados Resonantes	8
2. El Potencial Delta	10
2.1. Cálculo de los Polos k_n	11
2.2. Cálculo de los Estados Resonantes $u_n(r)$	16
3. Probabilidad de Supervivencia y Densidad de Probabilidad	19
3.1. Cálculo de la Probabilidad de Supervivencia $S(t)$	19
3.2. Cálculo de Densidad de Probabilidad	20
4. Escala Temporal para la Acumulación de la Densidad de Probabilidad	30
4.1. Caso 1	31
4.2. Caso 2	34
5. Conclusiones	42
Apéndices	46
A. Normalización de los Estados Resonantes	47
B. Cálculo de los residuos en los polos de la Función de Green	49
C. Completez de los Estados Resonantes	53
D. Las reglas de suma	54

E. Coeficientes de Desarrollo	56
Bibliografía	59

Introducción

Algunos años después de la publicación de los trabajos de Schrödinger sobre la mecánica ondulatoria, George Gamow [1], en su estudio sobre el decaimiento α en núcleos atómicos, introdujo las primeras nociones acerca de los estados resonantes, siendo éste, además, uno de los primeros estudios teóricos de un sistema cuántico abierto y constituyó una de las primeras descripciones exitosas del efecto túnel. Gamow estudió el decaimiento de las partículas α e hizo la hipótesis de que la partícula se creaba instantáneamente dentro del núcleo (región interna del potencial), además supuso que ésta puede escapar de dicha región vía efecto túnel. Despreciando el efecto de las colas (lo que equivale a considerar distancias grandes) se dió cuenta de que las condiciones físicas del problema son de condición de onda saliente. Al resolver el problema encontró que estas condiciones conducen a un estado que decae exponencialmente, de esa forma explicó exitosamente el decaimiento cuántico encontrando que la razón de desintegración de las partículas α se comporta según $e^{(-t/\tau)}$, donde τ es la vida media del sistema e introdujo los estados resonantes en su descripción del proceso de decaimiento.

Considerar ondas puramente salientes en la solución de la ecuación de Schrödinger implica que, en general, los eigenvalores de energía son complejos y, por lo tanto, las reglas usuales de normalización y completéz de las eigenfunciones no son válidas. Esto condujo a pensar que los estados resonantes no serían útiles en cálculos; no obstante, desde hace varios años se han estudiado sus propiedades y se han obtenido la condición de normalización y la completéz de estas eigenfunciones lo que ha permitido su aplicación exitosa, particularmente, en la descripción de problemas que dependen del tiempo [2][3][4][5][6].

La desaparición de la onda incidente en la solución para distancias más allá del rango de interacción requiere que el coeficiente correspondiente sea cero, lo que corresponde a un polo complejo de la matriz S del problema. En 1939, Siegert también empleó la condición de onda saliente para la derivación de una fórmula para la dispersión elástica en un potencial de alcance finito y, si bien, no menciona el estudio de Gamow, en su trabajo se refiere a los estados resonantes como los "estados radiactivos" del sistema [7].

En 1957, Khalfin concluyó que, a tiempos largos comparados con la vida media del sistema, existe una desviación del comportamiento exponencial del decaimiento. Posteriormente, en 1968, demostró que, para tiempos cortos, el decaimiento tampoco es exponencial [8][9].

Son varios los autores que han impulsado el desarrollo de la teoría de los estados resonantes. En 1961, Humblet y Rossenfeld los usaron para desarrollar una teoría de reacciones nucleares basada en una expansión de la matriz S para potenciales de alcance finito [10]. También se ha avanzado en la cuestión de la normalización y completez de estas eigenfunciones complejas [10][11][12]. La idea es tener un procedimiento consistente con el fin de utilizar estos estados en la descripción de un conjunto de procesos donde las resonancias juegan un papel importante. Peierls y García-Calderón, consideraron las propiedades analíticas de la función de Green para su aplicación al problema, conduciendo a la expansión de esta función y a una condición de normalización consistente para los estados resonantes [13].

La teoría de estados resonantes permite hacer una descripción unificada de los problemas de decaimiento y dispersión [14]. Se ha demostrado, también, que existe una equivalencia exacta entre la descripción obtenida usando los estados del continuo y la obtenida usando los estados resonantes [15][16] a los que también se les conoce como estados de Gamow, estados de Siegert, modos cuasi-normales o modos cuasi-estacionarios.

En la actualidad se tiene una descripción de la evolución temporal del proceso de decaimiento cuántico en distintos regímenes temporales usando el formalismo de estados resonantes [17][18][19][20]. Se sabe que existen tres regímenes, a saber el régimen de decaimiento exponencial, y dos regímenes donde el decaimiento es no exponencial, los cuales corresponden a tiempos cortos y tiempos largos (comparados con el tiempo de vida media).

En 1997 se publicó la primera confirmación experimental del comportamiento no exponencial de la ley de decaimiento en un sistema cuántico artificial para tiempos cortos [21] y más recientemente, en 2006, se verificó experimentalmente el comportamiento no exponencial del decaimiento para tiempos largos [22].

En el presente trabajo se investiga la escala de tiempo para la acumulación de la densidad de probabilidad de una partícula en el proceso de decaimiento cuántico.

En el capítulo uno se presenta el formalismo de los estados resonantes, el cálculo de la probabilidad de supervivencia así como la obtención de la función de onda dependiente del tiempo en términos de estados resonantes. En el capítulo dos, se hace el cálculo de

los polos k_n asociados a las eigenfunciones $u_n(r)$ correspondientes, específicamente, al potencial delta y se calculan, también, las funciones $u_n(r)$. En el capítulo tres se describen, en términos generales, la probabilidad de supervivencia y la densidad de probabilidad; se hace también un estudio de la acumulación de la densidad de probabilidad. En el cuarto capítulo se hace un estudio sistemático de la escala temporal de la acumulación para la densidad de probabilidad para un potencial delta en tres dimensiones con dos estados iniciales diferentes. En el quinto capítulo, se presentan las conclusiones obtenidas y algunas propuestas a futuro.

Capítulo 1

Formalismo de los Estados Resonantes

1.1. Estados Resonantes

En éste capítulo se expondrán algunas propiedades de los estados resonantes, lo que se hará con base en el trabajo desarrollado por García-Calderón [17]. Se hará una descripción del formalismo para potenciales esféricamente simétricos, de alcance finito, específicamente para onda \mathbf{s} (momento angular $l = 0$).

El Hamiltoniano H del sistema está dado por

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + U(r), \quad (1.1)$$

la ecuación radial de Schrödinger para una onda continua

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + U(r) \right) \psi = E\psi \quad (1.2)$$

puede escribirse como

$$\psi''(k, r) + [k^2 - V(r)]\psi(k, r) = 0 \quad (1.3)$$

donde $k^2 = 2mE/\hbar^2$ y $V(r) = 2mU(r)/\hbar^2$ y cuya solución asintótica es:

$$\psi(k, r) \sim A(k)e^{ikr} + B(k)e^{-ikr}. \quad (1.4)$$

Se observa en (1.4) que la condición de onda saliente se obtiene al forzar que la solución satisfaga $B(k) = 0$, entonces $\psi(k, r) \sim A(k)e^{ikr}$, lo que es incompatible con k real. Es decir, no existe una solución con k real que origine sólo onda saliente; en cambio, se verá que al imponer esta condición las soluciones de la ecuación (1.3) en general poseen eigenvalores complejos de energía que corresponden a estados cuya densidad decae exponencialmente con el tiempo. En adelante se emplearán unidades naturales $\hbar = 2m = 1$.

Los estados resonantes $u_n(r)$ satisfacen la ecuación radial de Schrödinger

$$u_n''(r) + [k_n^2 - V(r)]u_n(r) = 0 \quad (1.5)$$

con condición de onda saliente

$$\left[\frac{d}{dr} u_n(r) \right]_{r=a} = ik_n u_n(a). \quad (1.6)$$

Se puede mostrar que los valores complejos de k_n (excepto los estados ligados) tienen parte imaginaria negativa, por lo que es conveniente escribirlos como

$$k_n = \alpha_n - i\beta_n \quad (1.7)$$

Conjugando las ecuaciones (1.5) y (1.6) dado que el potencial considerado es real, se observa que u_n^* es solución, con eigenvalor k_n^* , se denotarán estas soluciones con índice negativo, i.e.

$$u_{-n}(r) = u_n^*(r). \quad (1.8)$$

Si $E_n = k_n^2$, entonces

$$k_n^2 = (\alpha_n - i\beta_n)^2 = (\alpha_n^2 - \beta_n^2) - 2i\alpha_n\beta_n. \quad (1.9)$$

Reescribiendo

$$\varepsilon_n = \alpha_n^2 - \beta_n^2$$

y

$$\Gamma_n = 4\alpha_n\beta_n$$

se tiene

$$E_n = \varepsilon_n - i\Gamma_n/2. \quad (1.10)$$

En (1.10) se distinguen dos cantidades esenciales para describir el decaimiento: ε_n y Γ_n . De lo anterior se observa que los estados resonantes no corresponden a una energía definida sino a una distribución Lorentziana de energías centradas en el valor ε_n y cuya distribución es de anchura Γ_n , medida a la semialtura de la misma [23]. Además, Γ_n representa la razón de decaimiento y permite calcular la vida media mediante la relación $\tau_n = 1/\Gamma_n$. Del valor de Γ_n depende la rapidez del decaimiento, pues los valores de k_n que estén más alejados

del eje real, implicarán un valor mayor de Γ_n decayendo más rápido que los más cercanos al eje real. En general, sólo es el primer eigenvalor, el que tiene el valor más pequeño posible de Γ_n , por lo que será éste el dominante (figura 1.1).

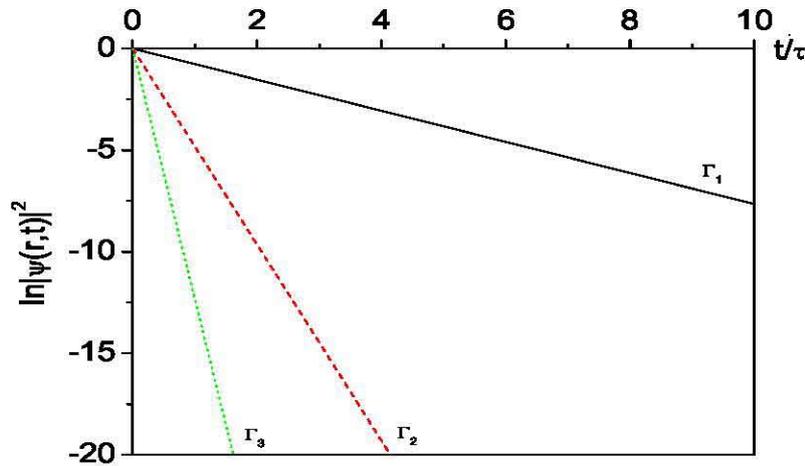


Figura 1.1: Se observa el comportamiento de Γ_n en el tiempo, mostrándose los tres primeros valores correspondientes, respectivamente, a los tres primeros valores de k_n ; Γ_1 decae más lentamente que el resto.

1.2. Evolución Temporal

Para el desarrollo de esta sección es necesario conocer la condición

$$\sum_{-\infty}^{\infty} \frac{u_n(r)u_n(r')}{k_n} = 0. \quad (1.11)$$

que puede reescribirse como

$$\sum_{n=1}^{\infty} \left[\frac{u_n(r)u_n(r')}{k_n} - \frac{u_n^*(r)u_n^*(r')}{k_n^*} \right] = 0. \quad (1.12)$$

Además, se puede demostrar que la función de Green tiene desarrollo en resonancias, la cual toma la forma [17]

$$G^+(r, r'; k) = \sum_{-\infty}^{\infty} \frac{u_n(r)u_n(r')}{2k_n(k - k_n)}. \quad (1.13)$$

El apéndice **B.** muestra la obtención de los residuos en los polos de la función de Green. En el apéndice **C.** se obtienen las propiedades de completitud de los estados resonantes. En

conjunto con la aplicación de la transformada inversa de Laplace y el teorema de los residuos, estos cálculos permitirán hacer el análisis de la evolución temporal. El apéndice **D**, muestra la obtención de las reglas de suma.

Considérese un estado $\psi(r, t = 0)$, que se encuentra confinado inicialmente en la región interna de un potencial $V(r)$ de alcance finito, esto es

$$V(r) = 0, \quad r > a.$$

La solución $\psi(r, t)$ a un tiempo $t > 0$ puede expresarse en términos de la función de Green retardada $g(r, r'; t)$ como:

$$\psi(r, t) = \int_0^a g(r, r'; t) \psi(r', 0) dr'. \quad (1.14)$$

La función de Green retardada puede escribirse mediante técnicas de la transformada de Laplace como

$$g(r, r'; t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{C_0} G^+(r, r'; k) e^{-ik^2 t} 2k dk; \quad (1.15)$$

donde $G^+(r, r'; k)$ es la función de Green asociada a la solución de la ecuación de Schrödinger del sistema [24],

$$G^+(r, r'; k) = -\frac{\phi(k, r_<) f_+(k, r_>)}{J_+(k)}, \quad (1.16)$$

en la que $r_< \equiv \text{Min}\{r, r'\}$ y $r_> \equiv \text{Máx}\{r, r'\}$. La función $\phi(k, r)$ corresponde a solución regular de la ecuación de Schrödinger del problema, satisfaciendo las condiciones a la frontera en el origen

$$\phi(k, 0) = 0, \quad \phi'(k, 0) = 1, \quad (1.17)$$

$\phi'(k, 0)$ indica la derivación con respecto a r . La función $f_+(k, r_>)$ es una solución de la ecuación de Schrödinger del problema la cual es regular en el origen y se define como

$$f_+(k, r_>) = e^{ikr} \quad r > a. \quad (1.18)$$

Finalmente, la función $J_+(k)$ está dada por el Wronskiano $J_+(k) = [f_+(k)\phi' - f'_+(k)\phi]$.

De la función de Green descrita en (1.16) se aprovecharán sus propiedades analíticas para calcular la integral (1.15).

Al realizar el cambio de variable del plano E al plano k los cuadrantes I y II de la hoja física quedan en el primer cuadrante del plano k (figura 1.2b). Entonces, el contorno C_0 se curva y permanece en el primer cuadrante, como lo muestra la figura 1.2c.

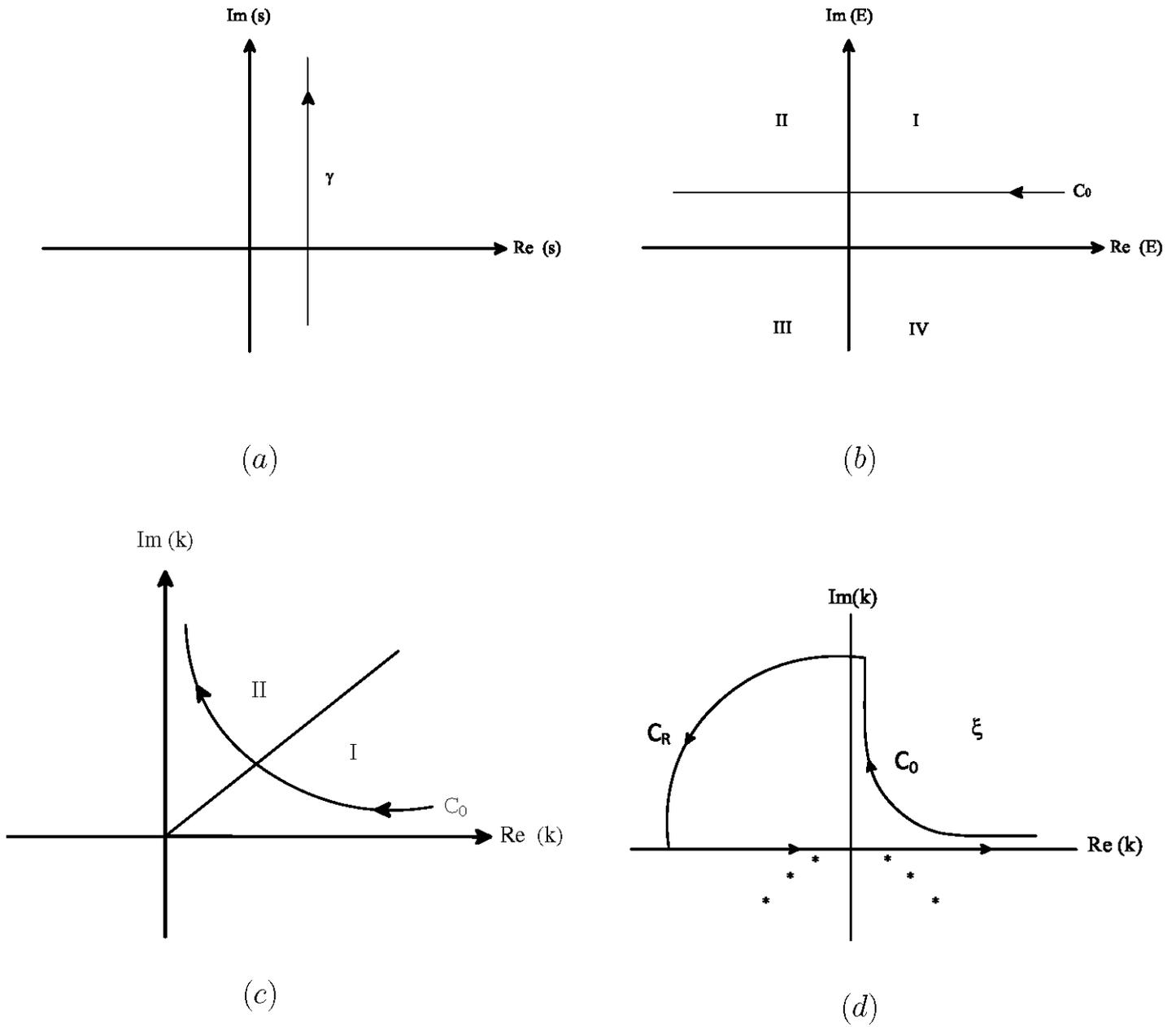


Figura 1.2: En a se muestra la trayectoria de integración en el plano s . En b el contorno atraviesa los dos primeros cuadrantes de derecha a izquierda. En c, debido a que G^+ es univaluada en k , el contorno se curva y permanece en el primer cuadrante. En d se muestra el contorno en el plano complejo k empleado para hacer la evaluación de (1.15).

Para hacer el cálculo, la integral se evalúa deformando el contorno C_0 al contorno C_R y después sobre el eje real en el plano k como se muestra en la figura 1.2d [17]. Donde ξ es el contorno formado por C_0 , C_R y el eje real.

Entonces

$$\int_{\xi} G^+(r, r'; k) e^{-ik^2 t} 2k dk = \int_{C_0} G^+(r, r'; k) e^{-ik^2 t} 2k dk + \int_{C_R} G^+(r, r'; k) e^{-ik^2 t} 2k dk + \int_{-\infty}^{\infty} G^+(r, r'; k) e^{-ik^2 t} 2k dk. \quad (1.19)$$

Se puede mostrar que para valores r y r' dentro de la región interna del potencial, que $G^+(r, r'; k) \rightarrow 0$ cuando $k \rightarrow \infty$ con k en el plano complejo. Por otro lado, notando que el término exponencial que aparece en la integral (1.19) se desvanece en el mismo límite, se concluye que la integral sobre la trayectoria C_R es nula en el límite $R \rightarrow \infty$, por lo que

$$\int_{\xi} G^+(r, r'; k) e^{-ik^2 t} 2k dk = \int_{C_0} G^+(r, r'; k) e^{-ik^2 t} 2k dk + \int_{-\infty}^{\infty} G^+(r, r'; k) e^{-ik^2 t} 2k dk. \quad (1.20)$$

Si se supone que el potencial no soporta estados ligados, al usar el teorema de Cauchy se encuentra que la integral sobre la trayectoria C_0 (Fig. 1.2d) se anula, por lo tanto

$$g(r, r'; t) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} G^+(r, r'; k) e^{-ik^2 t} 2k dk. \quad (1.21)$$

Restringiendo el estudio a la región interna ($r, r' < a$), sustituyendo (1.13) en (1.21) y reescribiendo $\frac{1}{2k_n(k - k_n)} = \frac{1}{2k} \left[\frac{1}{k - k_n} + \frac{1}{k_n} \right]$ es posible obtener:

$$\begin{aligned} g(r, r'; k) &= \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{-\infty}^{\infty} \frac{u_n(r) u_n(r')}{2k_n(k - k_n)} = \\ &= \frac{i}{2\pi} \left[\sum_{-\infty}^{\infty} u_n(r) u_n(r') \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-ik^2 t}}{k - k_n} dk + \sum_{-\infty}^{\infty} \frac{u_n(r) u_n(r')}{k_n} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ik^2 t} dk \right]. \end{aligned} \quad (1.22)$$

El segundo término de (1.22) se anula pues aparece la regla de suma (1.11), lo que significa que

$$g(r, r'; k) = \sum_{-\infty}^{\infty} u_n(r)u_n(r') \left[\frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-ik^2t}}{k - k_n} dk \right], \quad (1.23)$$

por lo que (1.21) puede escribirse como

$$g(r, r'; t) = \sum_{-\infty}^{\infty} u_n(r)u_n(r') M(k_n, t), \quad (1.24)$$

donde $M(k_n, t) \equiv M(y_n)$ es la función de Moshinsky [25] y puede escribirse como

$$M(y_n) \equiv M(0, k_n, t) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-ik^2t}}{k - k_n} dk = \frac{1}{2} w(iy_n),$$

donde el argumento y_n es

$$y_n = e^{-i\pi/4} k_n t^{1/2} \quad (1.25)$$

y $w(iy_n)$ es la función de Faddeyeva que se relaciona con la función de error complementario [26][27]

$$w(y_n) = e^{-y_n^2} \left(1 + \frac{2i}{\sqrt{\pi}} \int_0^{y_n} e^{t^2} dt \right) = e^{-y_n^2} \operatorname{erfc}(-iy_n).$$

Sustituyendo (1.24) en (1.14) se obtiene, de manera inmediata, la función de onda

$$\psi(r, t) = \sum_{-\infty}^{\infty} C_n u_n(r) M(y_n) \quad (1.26)$$

con

$$C_n = \int_0^a \psi(r', 0) u_n(r') dr'. \quad (1.27)$$

Ahora es posible calcular dos cantidades importantes en la descripción del decaimiento: la amplitud de supervivencia $A(t)$ de la que se puede obtener la probabilidad de supervivencia $S(t)$, y la densidad de probabilidad $|\psi(r, t)|^2$.

1.3. Probabilidad de Supervivencia

La amplitud de supervivencia $A(t)$, definida por

$$A(t) = \int_0^a \psi^*(r, 0) \psi(r, t) dr, \quad (1.28)$$

proporciona la probabilidad de que la partícula se encuentre en su estado inicial después de un tiempo $t > 0$. Entonces la probabilidad de supervivencia $S(t)$ puede definirse como

$$S(t) = |A(t)|^2. \quad (1.29)$$

Sustituyendo (1.26) en (1.28), la amplitud de supervivencia se expresa como

$$A(t) = \sum_{-\infty}^{\infty} C_n \bar{C}_n M(y_n). \quad (1.30)$$

donde

$$\bar{C}_n = \int_0^a \psi^*(r, 0) u_n(r) dr. \quad (1.31)$$

Al aplicar la relación de simetría de la función $M(y_n)$ [18][27]

$$M(y_n) = e^{-ik_n^2 t} - M(-y_n) \quad (1.32)$$

y considerando (1.8), la amplitud de supervivencia puede expresarse como una suma sobre las contribuciones exponencial y no-exponencial:

$$A(t) = \sum_{n=1}^{\infty} \{C_n \bar{C}_n e^{-ik_n^2 t} - [C_n \bar{C}_n M(-y_n) - (C_n \bar{C}_n)^* M(y_{-n})]\}. \quad (1.33)$$

donde $M(-y_n) = M(-k_n, t)$ y $M(y_{-n}) = M(-k_n^*, t)$.

1.4. Función de Onda en Términos de Estados Resonantes

Dos cantidades de interés para el problema de decaimiento son: la amplitud de supervivencia, expuesta anteriormente y la densidad de probabilidad $|\psi(r, t)|^2$.

Nuevamente, empleando tanto (1.32) como (1.8), se tiene

$$g(r, r'; t) = \sum_{n=1}^{\infty} u_n(r) u_n(r') e^{-ik_n^2 t} - I, \quad (1.34)$$

siendo

$$I = \sum_{n=1}^{\infty} \{u_n(r) u_n(r') M(-y_n) - (u_n(r) u_n(r'))^* M(y_{-n})\}. \quad (1.35)$$

Al sustituir (1.34) en (1.14) se obtiene una expresión para la función de onda, a saber:

$$\psi(r, t) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n u_n(r) e^{-ik_n^2 t} - \sum_{n=1}^{\infty} [C_n u_n(r) M(-y_n) - (C_n u_n(r))^* M(y_{-n})]. \quad (1.36)$$

En adelante a la primera suma del lado derecho de (1.36), se le llamará "términos exponenciales", a la segunda suma se le llamará "términos no exponenciales" (no obstante, la función de Moshinsky también posee términos exponenciales), por lo que puede decirse que la función de onda (1.36) se expresa como una suma de términos exponenciales y no exponenciales.

Por otra parte, al aplicar algunas propiedades de la función de Moshinsky, a tiempos largos puede desarrollarse como [17]:

$$M(y_n) \approx \frac{1}{2} \left[\frac{1}{\pi^{1/2} y_n} - \frac{1}{2\pi^{1/2} y_n^3} + \dots \right], \quad (1.37)$$

siendo y_n como en (1.25), por lo que, aplicando (1.37) en (1.35), se obtiene

$$I \approx -a \sum_{n=1}^{\infty} \left[\frac{u_n(r) u_n(r')}{k_n} - \left(\frac{u_n(r) u_n(r')}{k_n} \right)^* \right] \frac{1}{t^{1/2}} - b \sum_{n=1}^{\infty} \left[\frac{u_n(r) u_n(r')}{k_n^3} - \left(\frac{u_n(r) u_n(r')}{k_n^3} \right)^* \right] \frac{1}{t^{3/2}} \quad (1.38)$$

donde $a = \frac{i}{2\sqrt{\pi i}}$ y $b = \frac{1}{4\sqrt{\pi i}}$. Obsérvese que el primer término de (1.38) se cancela pues los términos entre corchetes se identifican con la regla de suma (1.12). Entonces

$$I \approx -b \sum_{n=1}^{\infty} \left[\frac{u_n(r) u_n(r')}{k_n^3} - \left(\frac{u_n(r) u_n(r')}{k_n^3} \right)^* \right] \frac{1}{t^{3/2}}, \quad (1.39)$$

que, sustituyendo en (1.34), queda

$$g(r, r'; t) \approx \sum_{n=1}^{\infty} u_n(r) u_n(r') e^{-ik_n^2 t} - \frac{1}{4\sqrt{\pi i}} \sum_{n=1}^{\infty} \left[\frac{u_n(r) u_n(r')}{k_n^3} - \left(\frac{u_n(r) u_n(r')}{k_n^3} \right)^* \right] \frac{1}{t^{3/2}}, \quad (1.40)$$

misma que al sustituir en (1.14) permite obtener una expresión para la función de onda que es útil para describir la evolución temporal a tiempos grandes con respecto a la vida media [16][18]:

$$\psi(r, t) \approx \sum_{n=1}^N C_n u_n(r) e^{-ik_n^2 t} - \frac{1}{4\sqrt{\pi i}} \sum_{n=1}^N \left[\frac{C_n u_n(r)}{k_n^3} - \left(\frac{C_n u_n(r)}{k_n^3} \right)^* \right] \frac{1}{t^{3/2}}. \quad (1.41)$$

Así, es posible expresar la misma función de onda ya sea (1.36) o (1.41) como una suma de términos exponenciales y no exponenciales. Con estas expresiones se realizará el cálculo de la densidad de probabilidad $|\psi(r, t)|^2$.

Capítulo 2

El Potencial Delta

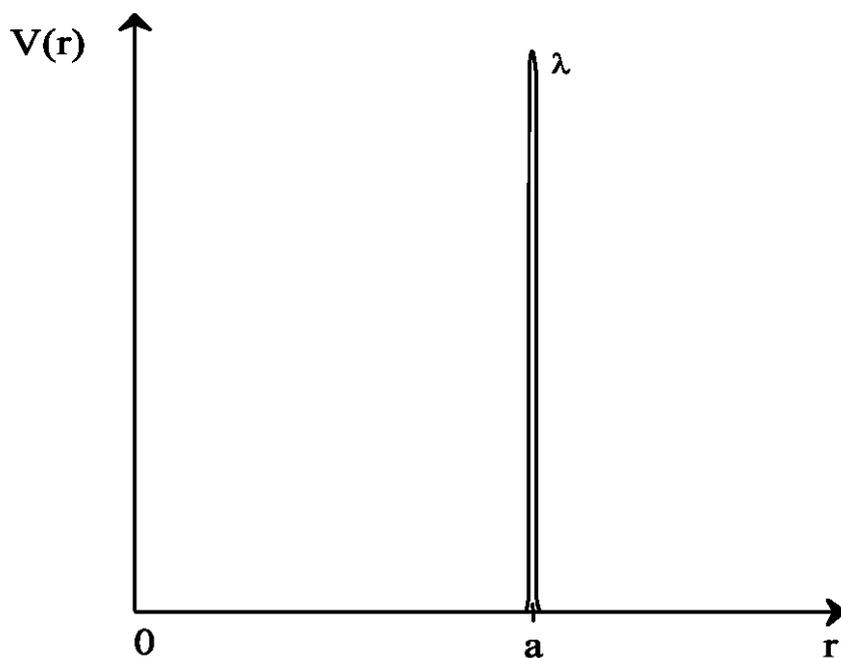


Figura 2.1: Potencial $V(r) = \lambda\delta(r - a)$ en el semieje $[0, \infty)$.

Hasta ahora se han presentado cálculos aplicables a cualquier potencial tridimensional de alcance finito. Con el fin de orientar el análisis hacia el estudio de un potencial específico, en éste y los capítulos siguientes, se estudiará el sistema descrito por una partícula confinada en un potencial delta, $V(r) = \lambda\delta(r - a)$ en onda s ($l = 0$), donde λ es la intensidad del potencial (figura 2.1).

2.1. Cálculo de los Polos k_n

Se encontrará una expresión para los polos k_n , siendo k_n , como se ha mencionado, una cantidad compleja de la forma

$$k_n = \alpha_n - i\beta_n, \quad (2.1)$$

haciendo uso de la teoría de dispersiones pues el conocimiento teórico de la matriz S permite evaluar la sección eficaz $\sigma = \frac{\pi}{k^2} |i - S|^2$ que, a su vez, da información sobre el espectro de energía del sistema; por lo que hay que obtener $S(k)$. El procedimiento es el siguiente.

Las soluciones de la ecuación de Schrödinger para las regiones interna y externa son:

$$\begin{cases} \psi(k, r_-) = C(k) \text{sen}(kr) & 0 \leq r < a, \\ \psi(k, r_+) = A(k)e^{ikr} + B(k)e^{-ikr} & r > a. \end{cases} \quad (2.2)$$

Dado que tanto la función de onda como su primer derivada deben ser continuas, se deben satisfacer

$$C(k) \text{sen}(ka) = A(k)e^{ika} + B(k)e^{-ika} \quad (2.3)$$

y

$$\psi'(k, r_+) - \psi'(k, r_-) = \lambda C(k) \text{sen}(ka). \quad (2.4)$$

La matriz $S(k)$, definida por $S(k) = -\frac{A(k)}{B(k)}$, proporcionará una expresión que permita calcular los polos del sistema, pues estos corresponden a los eigenvalores del problema de estados resonantes. Resolviendo el sistema formado por (2.3) y (2.4) con $r = a$, y aplicando identidades trigonométricas, se obtiene

$$S(k) = \frac{-2ik + \lambda(e^{-2ika} - 1)}{2ik + \lambda(e^{2ika} - 1)}. \quad (2.5)$$

Imponer la condición de onda saliente implica que $B(k) = 0$, por lo que el denominador de (2.5) proporciona una ecuación trascendental para los polos:

$$2ik_n + \lambda(e^{2ik_n a} - 1) = 0. \quad (2.6)$$

En general, no existe una solución analítica exacta para (2.6), sin embargo, se puede obtener una expresión aproximada para los polos.

Una forma de calcular los polos con gran precisión es mediante el método de Newton-Raphson.

El método de Newton-Raphson es un método iterativo que permite, con gran efectividad, calcular ceros de una función; para poder aplicarlo, es necesario que la función de la que se desea obtener los ceros sea derivable. Para el caso del potencial delta:

Sea

$$F(k_n) = 2ik_n + \lambda(e^{2ik_n a} - 1). \quad (2.7)$$

Se quieren encontrar los ceros k_n^r , de modo que, según el método Newton-Raphson

$$k_n^r = k_n^{r-1} - \frac{F(k_n^{r-1})}{\dot{F}(k_n^{r-1})} \quad (2.8)$$

donde

$$\dot{F} \equiv \frac{d}{dk_n} F. \quad (2.9)$$

Para aproximar un cero, es necesario conocer primero un valor aproximado a éste.

Sustituyendo (2.1) en (2.6) y separando la parte real y la imaginaria, se tiene

$$2\beta_n + \lambda \cos(2\alpha_n a) e^{2\beta_n a} - \lambda = 0 \quad (2.10a)$$

$$2\alpha_n + \lambda \operatorname{sen}(2\alpha_n a) e^{2\beta_n a} = 0 \quad (2.10b)$$

despejando

$$\lambda \cos(2\alpha_n a) e^{2\beta_n a} = \lambda - 2\beta_n \quad (2.11a)$$

$$\lambda \operatorname{sen}(2\alpha_n a) e^{2\beta_n a} = -2\alpha_n \quad (2.11b)$$

elevando (2.11a) al cuadrado y sumando con el cuadrado de (2.11b)

$$\lambda^2 e^{4\beta_n a} = (\lambda - 2\beta_n)^2 + 4\alpha_n^2. \quad (2.12)$$

Al aplicar \ln en (2.12) se puede encontrar β_n , de modo que

$$\beta_n = \frac{1}{4a} \ln \left[\left(\frac{2\alpha_n}{\lambda} \right)^2 + \left(1 - \frac{2\beta_n}{\lambda} \right)^2 \right], \quad (2.13)$$

luego, dividiendo (2.11b) por (2.11a)

$$\alpha_n = \frac{1}{2a} \tan^{-1} \left(\frac{2\alpha_n}{2\beta_n - \lambda} \right). \quad (2.14)$$

El sistema puede visualizarse como un cascarón esférico en el que la "transparencia" depende de λ , por lo que, tomando el límite en que $\lambda \rightarrow \infty$, se obtiene

$$\beta_n = 0 \quad (2.15a)$$

$$\alpha_n = \frac{n\pi}{a} \quad (2.15b)$$

lo que es consistente con el caso en el que se tiene una partícula confinada en una caja:

$$\psi(r) = C \text{sen } kr. \quad (2.16)$$

Sustituyendo (2.15) en (2.1):

$$k_p = \alpha_p = \frac{p\pi}{a} \quad (2.17)$$

donde $p = 1, 2, 3, \dots$ y

$$C = \sqrt{\frac{2}{a}}. \quad (2.18)$$

Para evitar confusiones, en (2.17) se ha empleado p en vez de la usual n . Ahora, se muestra lo que ocurre al tener $\lambda < \infty$:

Si $\lambda \gg 1$:

$$\alpha_n \simeq \frac{n\pi}{a} + \varepsilon_n; \quad (2.19)$$

con

$$0 < \varepsilon_n < \frac{n\pi}{a}$$

entonces

$$\tan(2\alpha_n a) \simeq \frac{2\alpha_n}{2\beta_n - \lambda} \quad (2.20)$$

pero, comparada con λ , $\beta_n \rightarrow 0$, por lo que

$$\tan(2\alpha_n a) \simeq -\frac{2\alpha_n}{\lambda} \quad (2.21)$$

sustituyendo

$$\tan(2[n\pi/a + \varepsilon_n]a) \simeq -\frac{2n\pi}{\lambda a}, \quad (2.22)$$

nótese que, debido a que ε_n es una cantidad muy pequeña, se ha despreciado en el lado derecho de (2.22). Aplicando técnicas de variable compleja

$$\varepsilon_n \simeq -\frac{1}{2a} \tan^{-1} \left(\frac{2n\pi}{\lambda a} \right) \quad (2.23)$$

entonces, sustituyendo (2.23) en (2.19)

$$\alpha_n \simeq \frac{n\pi}{a} - \frac{1}{2a} \tan^{-1} \left(\frac{2n\pi}{\lambda a} \right). \quad (2.24)$$

Ahora, se buscará una expresión para β_n partiendo de (2.13):
Si $\lambda \gg n\pi$:

$$\beta_n \simeq \frac{1}{4a} \ln \left[1 + \left(\frac{2\alpha_n}{\lambda} \right)^2 \right]. \quad (2.25)$$

Nuevamente, en el lado derecho de (2.25), $\beta_n \rightarrow 0$, por lo que se ha despreciado y sólo sobrevive el 1.

Se sabe que a primer orden $\ln(1+z) \simeq z$ y, dado que $z = 2n\pi/\lambda a$, se tiene

$$\beta_n \simeq \frac{1}{4a} \left(\frac{2n\pi}{\lambda a} \right)^2 = \frac{1}{a} \frac{n^2 \pi^2}{\lambda^2 a^2}$$

por lo tanto

$$\beta_n \simeq \frac{1}{a} \left(\frac{n\pi}{\lambda a} \right)^2. \quad (2.26)$$

Se han obtenido entonces, expresiones para α_n y β_n :

$$\alpha_n \simeq \frac{n\pi}{a} - \frac{1}{2a} \tan^{-1} \left(\frac{2n\pi}{\lambda a} \right) \quad (2.27)$$

$$\beta_n \simeq \frac{1}{a} \left(\frac{n\pi}{\lambda a} \right)^2.$$

Si $\lambda \gg 1$, entonces $\lambda a \gg 1$. Además, si $z < 1$, $\tan^{-1} z \simeq z$; por lo que, de (2.27)

$$\alpha_n \simeq \frac{n\pi}{a} \left(1 - \frac{1}{\lambda a} \right) \quad (2.28)$$

$$\beta_n \simeq \frac{1}{a} \left(\frac{n\pi}{\lambda a} \right)^2.$$

La condición $\lambda a \gg 1 \gg n\pi \gg \beta_n$, restringe los valores de n .

Puede hacerse otra aproximación partiendo de (2.27), ahora con $n\pi \gg 1 \gg \lambda a > \beta_n$:

Para valores grandes de z se puede aproximar

$$\tan^{-1} z \sim \frac{\pi}{2}, \quad |z| > 1 \quad (2.29)$$

entonces

$$\alpha_n \simeq \frac{n\pi}{a} - \frac{1}{2a} \left(\frac{\pi}{2} \right) = \frac{\pi}{a} \left(n - \frac{1}{4} \right) \quad (2.30)$$

y

$$\beta_n \simeq \frac{1}{4a} \ln \left(\frac{2\alpha_n}{\lambda} \right)^2 \simeq \frac{1}{4a} \ln \left(\frac{2n\pi}{\lambda a} \right)^2 \simeq \frac{1}{2a} \ln \left(\frac{2n\pi}{\lambda a} \right). \quad (2.31)$$

Por lo tanto, se tienen dos expresiones analíticas aproximadas para k_n expresadas en términos de los parámetros del potencial:

$$k_n \simeq \frac{n\pi}{a} \left(1 - \frac{1}{\lambda a} \right) - \frac{i}{a} \left(\frac{n\pi}{\lambda a} \right)^2, \quad \lambda a \gg 1 \gg n\pi \gg \beta_n \quad (2.32a)$$

$$k_n \simeq \frac{\pi}{a} \left(n - \frac{1}{4} \right) - \frac{i}{2a} \ln \left(\frac{2n\pi}{\lambda a} \right), \quad n\pi \gg 1 \gg \lambda a > \beta_n. \quad (2.32b)$$

Ahora, si $\lambda > 1$, de modo que $2\beta_n/\lambda \ll 1$, es posible escribir k_n , utilizando (2.19) y (2.23), como¹[20]:

$$k_n \simeq \frac{n\pi}{a} - \frac{1}{2a} \tan^{-1} \left[\frac{2n\pi}{\lambda a} \right] - i \frac{1}{4a} \ln \left[1 + \left(\frac{2n\pi}{\lambda a} \right)^2 \right]. \quad (2.33)$$

Que λ tenga un valor finito, implica que la región interna tendrá una conexión con la región externa y que los estados de la caja adquirirán un ancho directamente relacionado con la parte imaginaria β_n .

La figura 2.2 muestra la distribución de polos, en el plano complejo, correspondiente al potencial delta.

¹En el programa creado para la realización del presente trabajo se empleó la expresión (2.33)

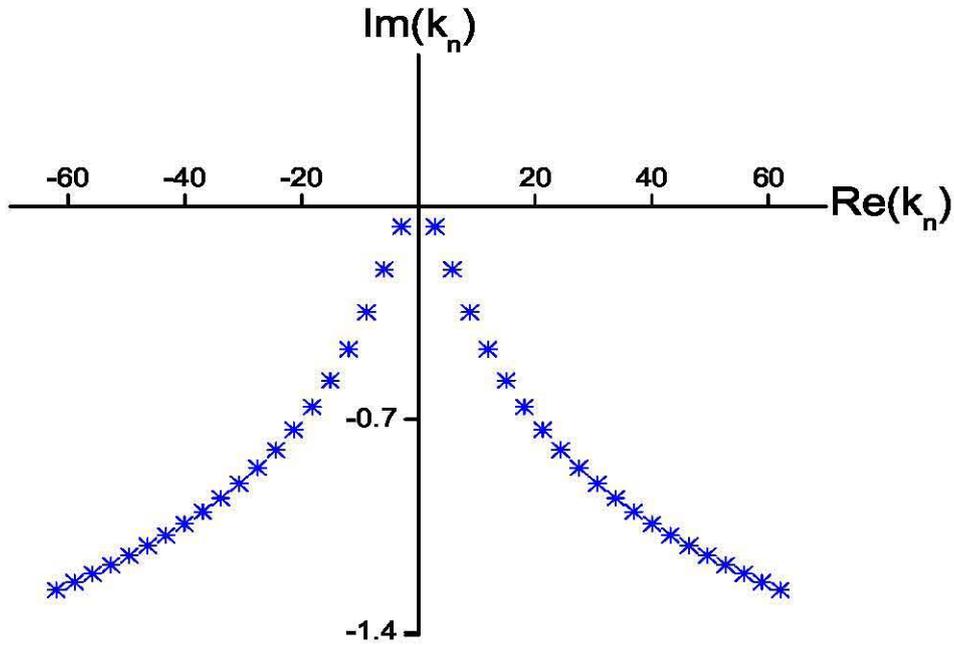


Figura 2.2: Distribución en el plano plano complejo de los primeros 20 polos k_{-n} y k_n del potencial delta calculados empleando el método de Newton-Raphson con una precisión de 10^{-20} . Los parámetros del potencial son $a = 1$, y $\lambda = 10$.

2.2. Cálculo de los Estados Resonantes $u_n(r)$

Como se ha mencionado, los estados resonantes aparecen tras imponer la condición de onda saliente en la solución de la ecuación de Schrödinger

$$u_n''(r) + [k_n^2 - \lambda\delta(r - a)]u_n(r) = 0.$$

Con la condición de onda saliente, las soluciones en las regiones interna y externa, son

$$u_n(r) = A_n \text{sen}(k_n r), \quad 0 \leq r < a \quad (2.34a)$$

$$u_n(r) = D_n e^{ik_n r}, \quad r > a. \quad (2.34b)$$

Para la región interna, el coeficiente de normalización A_n puede encontrarse mediante:

$$\int_0^a u_n^2(r) dr + \frac{i}{2k_n} u_n^2(a) = 1. \quad (2.35)$$

En el apéndice **A**, se muestran los cálculos conducentes a encontrar la condición de normalización de los estados resonantes.

Sustituyendo la solución para la región interna de (2.34) en (2.35), se tiene que

$$A_n^2 \int_0^a \text{sen}^2(k_n r) dr + \frac{i}{2k_n} A_n^2 \text{sen}^2(k_n a) = 1, \quad (2.36)$$

despejando A_n^2 se obtiene la fracción

$$A_n^2 = \frac{1}{\int_0^a \text{sen}^2(k_n r) dr + \frac{i}{2k_n} \text{sen}^2(k_n a)}. \quad (2.37)$$

Desarrollando el primer término del denominador de (2.37)

$$\int_0^a \text{sen}^2(k_n r) dr = \frac{1}{2} \int_0^a [1 - \cos(2k_n r)] dr = \frac{a}{2} - \frac{1}{4k_n} \text{sen}(2k_n a) \quad (2.38)$$

y, desarrollando el segundo término se tiene que

$$\frac{i}{2k_n} \text{sen}^2(k_n a) = \frac{i}{4k_n} [1 - \cos(2k_n a)], \quad (2.39)$$

ahora, reemplazando (2.38) y (2.39) en (2.37)

$$A_n^2 = \frac{1}{\frac{a}{2} - \frac{1}{4k_n} \text{sen}(2k_n a) + \frac{i}{4k_n} [1 - \cos(2k_n a)]}. \quad (2.40)$$

Es sabido que

$$e^{-2ik_n a} = \cos(2k_n a) - i \text{sen}(2k_n a), \quad (2.41)$$

de donde, al despejar $\cos(2k_n a)$, se obtiene la expresión

$$\cos(2k_n a) = e^{-2ik_n a} + i \text{sen}(2k_n a) \quad (2.42)$$

que puede emplearse en (2.40) para obtener

$$\begin{aligned} A_n^2 &= \frac{4k_n}{2k_n a - \text{sen}(2k_n a) + i - i \cos(2k_n a)} = \\ &= \frac{4k_n}{2k_n a - \text{sen}(2k_n a) + i - i(e^{-2ik_n a} + i \text{sen}(2k_n a))}, \end{aligned} \quad (2.43)$$

en la que puede sustituirse (2.6)

$$A_n^2 = \frac{4k_n}{2k_n a + i - i \left(\frac{\lambda}{\lambda - 2ik_n} \right)}, \quad (2.44)$$

despejando A_n se obtendrá la expresión para el coeficiente de normalización:

$$A_n = \left(\frac{2(a\lambda - 2ik_n a)}{a(1 + a\lambda - 2ik_n a)} \right)^{1/2}, \quad (2.45)$$

ahora es posible también obtener la expresión para los estados resonantes $u_n(r)$

$$u_n(r) = \left(\frac{2(a\lambda - 2ik_n a)}{a(1 + a\lambda - 2ik_n a)} \right)^{1/2} \text{sen}(k_n r). \quad (2.46)$$

Nótese, para el cálculo anterior, que, en el límite $\lambda \rightarrow \infty$, se recupera el caso de la caja, (2.45) adquiere la forma $\left(\frac{2}{a} \right)^{1/2}$ que es el coeficiente de normalización para tal caso.

Capítulo 3

Probabilidad de Supervivencia y Densidad de Probabilidad

3.1. Cálculo de la Probabilidad de Supervivencia $S(t)$

Anteriormente se hizo la deducción de la función de onda que describe el comportamiento del sistema a través del tiempo, con lo que es posible hacer el cálculo de la probabilidad de supervivencia $S(t)$ y de la densidad de probabilidad $|\psi(r, t)|^2$ para potenciales tridimensionales de alcance finito. Ahora las deducciones hechas en los capítulos anteriores se aplicarán al análisis del decaimiento en un potencial delta.

Con el fin de estudiar sistemáticamente la probabilidad de supervivencia en el tiempo, adicionalmente a los parámetros del potencial es necesario especificar el estado inicial. Como ejemplo, en este capítulo se estudiará el decaimiento de un estado inicial descrito por un estado de la caja,

$$\psi_p(r, 0) = \sqrt{\frac{2}{a}} \operatorname{sen} \left(\frac{p\pi r}{a} \right), \quad (3.1)$$

en la frontera del potencial de interacción. Los parámetros del potencial son $\lambda = 10$ y $a = 1$. La figura 3.1 muestra la probabilidad de supervivencia (en escala logarítmica) como función del tiempo para el estado $p = 1$ (línea continua). En la misma se muestran la contribución exponencial de la solución (línea cortada) y su contribución no exponencial a tiempos largos (línea punteada).

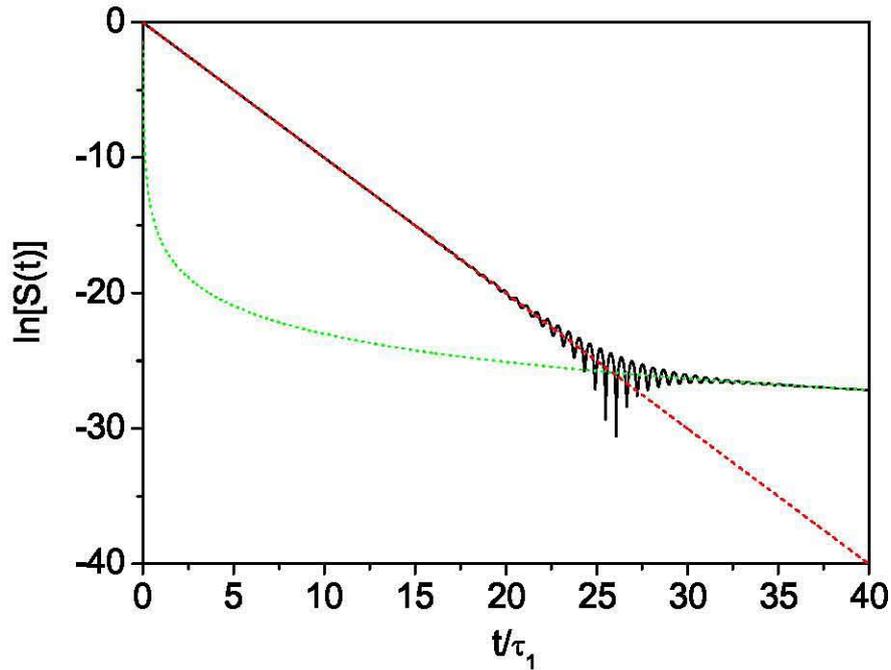


Figura 3.1: Logaritmo de la probabilidad de supervivencia $S(t)$ en un potencial delta para el estado inicial $\psi_p(r,0) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{p\pi r}{a}\right)$; donde $\tau_1 = 1/\Gamma_1$. Los parámetros del potencial son $\lambda = 10$ y $a = 1$ con $p = 1$. En la figura, la línea continua corresponde al cálculo exacto (1.33), la línea discontinua corresponde a la contribución exponencial y la línea punteada corresponde a la contribución no exponencial.

3.2. Cálculo de Densidad de Probabilidad

Ahora se presenta el cálculo de la densidad de probabilidad, que se hará para el mismo potencial, con los mismos parámetros y el mismo estado inicial que la sección anterior.

Como se mostró anteriormente, es posible expresar la función de onda que describe la evolución temporal del sistema ya sea como (1.36) o como (1.41). En cualquier caso, la figura 3.2 muestra la contribución tanto de los términos exponenciales como de los términos no exponenciales en la construcción de la densidad de probabilidad, de manera semejante a la probabilidad de supervivencia.

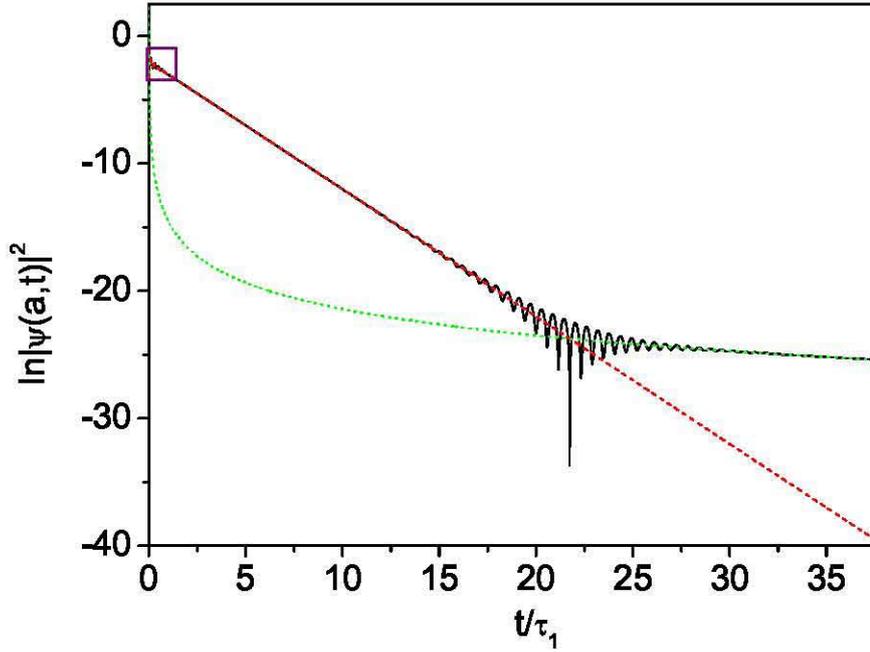


Figura 3.2: Logaritmo de la densidad de probabilidad $|\psi(a, t)|^2$ para un potencial $V(r) = \lambda\delta(r-a)$ con parámetros $\lambda = 10$, $a = 1$ y con $p = 1$ con el estado inicial $\psi_p(r, 0) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{p\pi r}{a}\right)$. En la figura, la línea discontinua corresponde a la contribución de los términos exponenciales y la línea punteada corresponde a la contribución de los términos no exponenciales. Obsérvese el recuadro al inicio de la gráfica.

Al comparar la probabilidad de supervivencia con la densidad de probabilidad, se aprecia en ambas un comportamiento similar. La principal diferencia se observa al inicio de la evolución temporal del sistema como se señala con un recuadro en la figura 3.2, cuya amplificación se muestra en la figura 3.3. La densidad de probabilidad muestra, al inicio, un efecto de acumulación (conocido en la literatura como *build up*) que, en un tiempo muy corto, alcanza un valor máximo para después dar paso al decaimiento. En la probabilidad de supervivencia no se observa tal acumulación pues el cálculo de la misma se hace en la región interna del potencial.

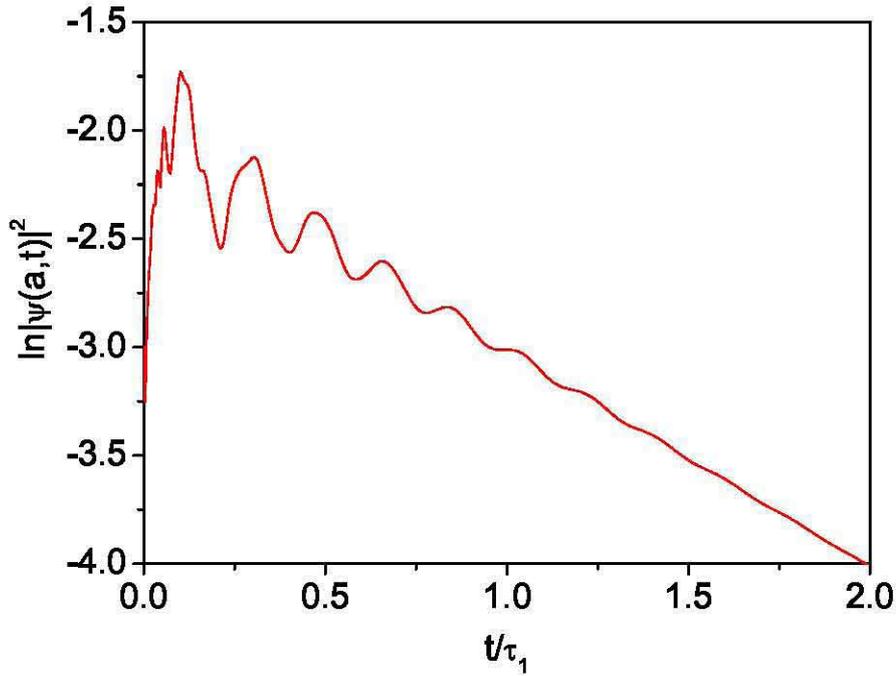


Figura 3.3: Logaritmo de la densidad de probabilidad $|\psi(a, t)|^2$ como función del tiempo para un potencial $V(r) = \lambda\delta(r-a)$ con parámetros $\lambda = 10$, $a = 1$ y $p = 1$ en el estado inicial $\psi_p(r, 0) = \sqrt{\frac{2}{a}} \text{sen}\left(\frac{p\pi r}{a}\right)$. Se presenta el comportamiento al inicio del proceso de decaimiento.

De este efecto de acumulación, al que en este trabajo se le llamará *Acumulación de la Densidad de Probabilidad*, se hará el estudio analítico a continuación con lo que se presentarán los primeros resultados obtenidos.

Como ya se ha visto, durante el proceso de decaimiento se da una acumulación de la densidad de probabilidad estructurada por un patrón oscilatorio. Para caracterizar la acumulación es necesario volver a (1.36) y (1.41) que describen la evolución temporal del sistema.

Se hará un análisis cualitativo sistemático, término a término, para conocer cuál de estos describe la acumulación, comenzando con (1.36) que, para simplificar el análisis se reescribirá

$$\psi(a, t) = \psi_{exp} - I \quad (3.2)$$

donde

$$\psi_{exp} = \sum_{n=1}^N C_n u_n(a) e^{-ik_n^2 t}, \quad (3.3)$$

definiendo I como

$$I = \sum_{n=1}^N [C_n u_n(a) M(-y_n) - (C_n u_n(a))^* M(y_n)]. \quad (3.4)$$

Dado que se quiere estudiar la acumulación de la densidad de probabilidad, el módulo cuadrado de la función de onda debe expresarse de la siguiente manera:

$$|\psi(a, t)|^2 = |\psi_{exp}|^2 + |I|^2 - 2Re\{\psi_{exp}^* I\}. \quad (3.5)$$

Se presentará primero el análisis gráfico de $|\psi_{exp}|^2$, posteriormente se presentará el análisis de $|I|^2$ y de $-2Re\{\psi_{exp}^* I\}$. Se mostrarán los resultados obtenidos al ir aumentando el valor de N en cada término, siendo $N = 1$, $N = 2$, $N = 5$ y $N = 100$ los valores empleados.

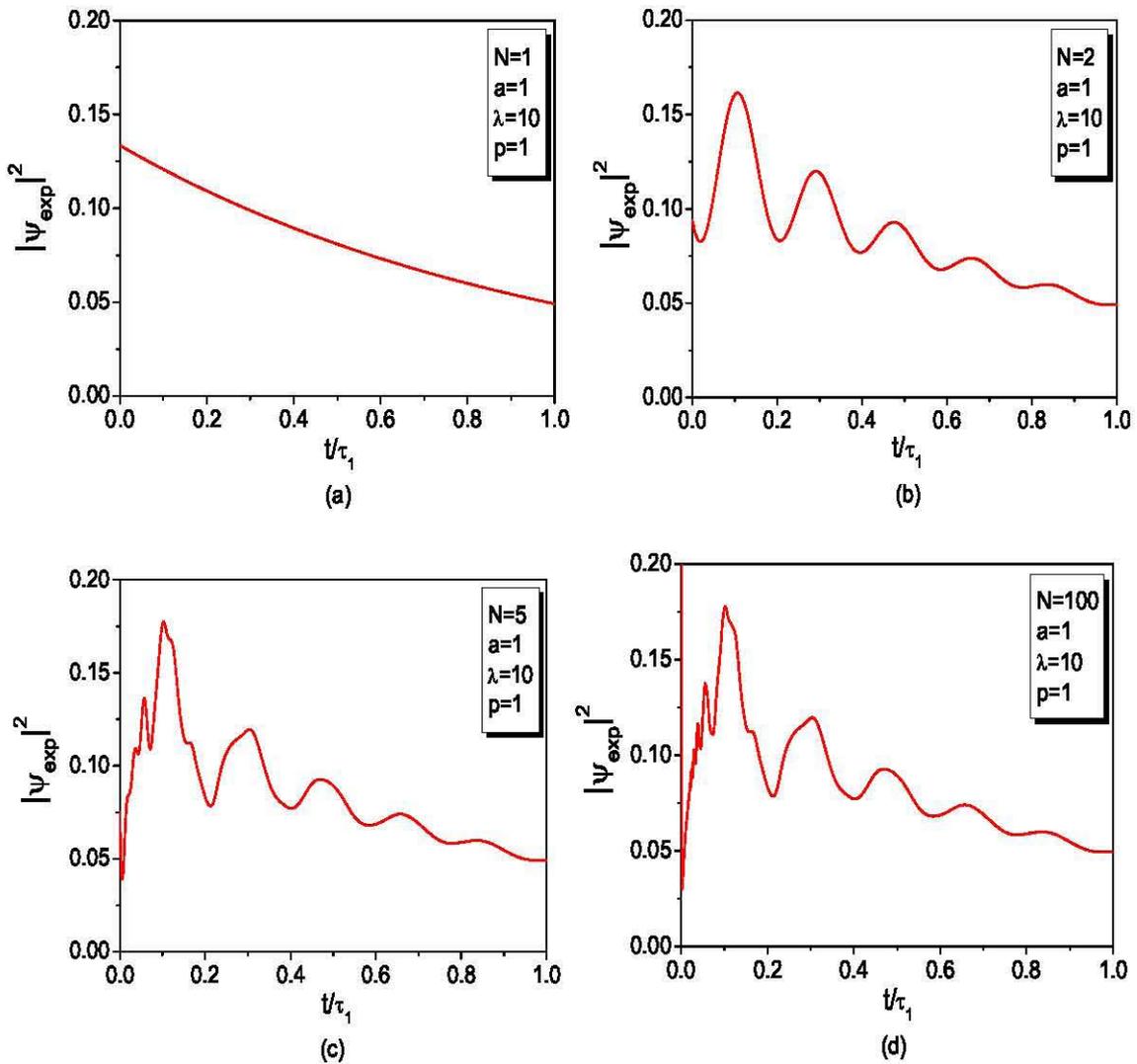


Figura 3.4: Contribución de la ecuación (3.3) en la acumulación de la densidad de probabilidad. Conforme se aumenta el número de polos el comportamiento se asemeja más a la figura 3.3.

La figura 3.4 muestra la contribución de (3.3) en la acumulación de la densidad de probabilidad. Se aprecia que, para un solo polo (figura 3.4a), no hay acumulación. Al hacer la suma con dos polos, empieza a manifestarse la acumulación (figura 3.4b). Con cinco polos (figura 3.4c), se aprecia una acumulación que, además, presenta una estructura oscilatoria que se hace más compleja conforme se va aumentando el número de polos, como puede verse en la figura 3.4d. Es evidente que, conforme se aumenta el número de polos, el comportamiento es cada vez más semejante al que se muestra en la figura 3.3.

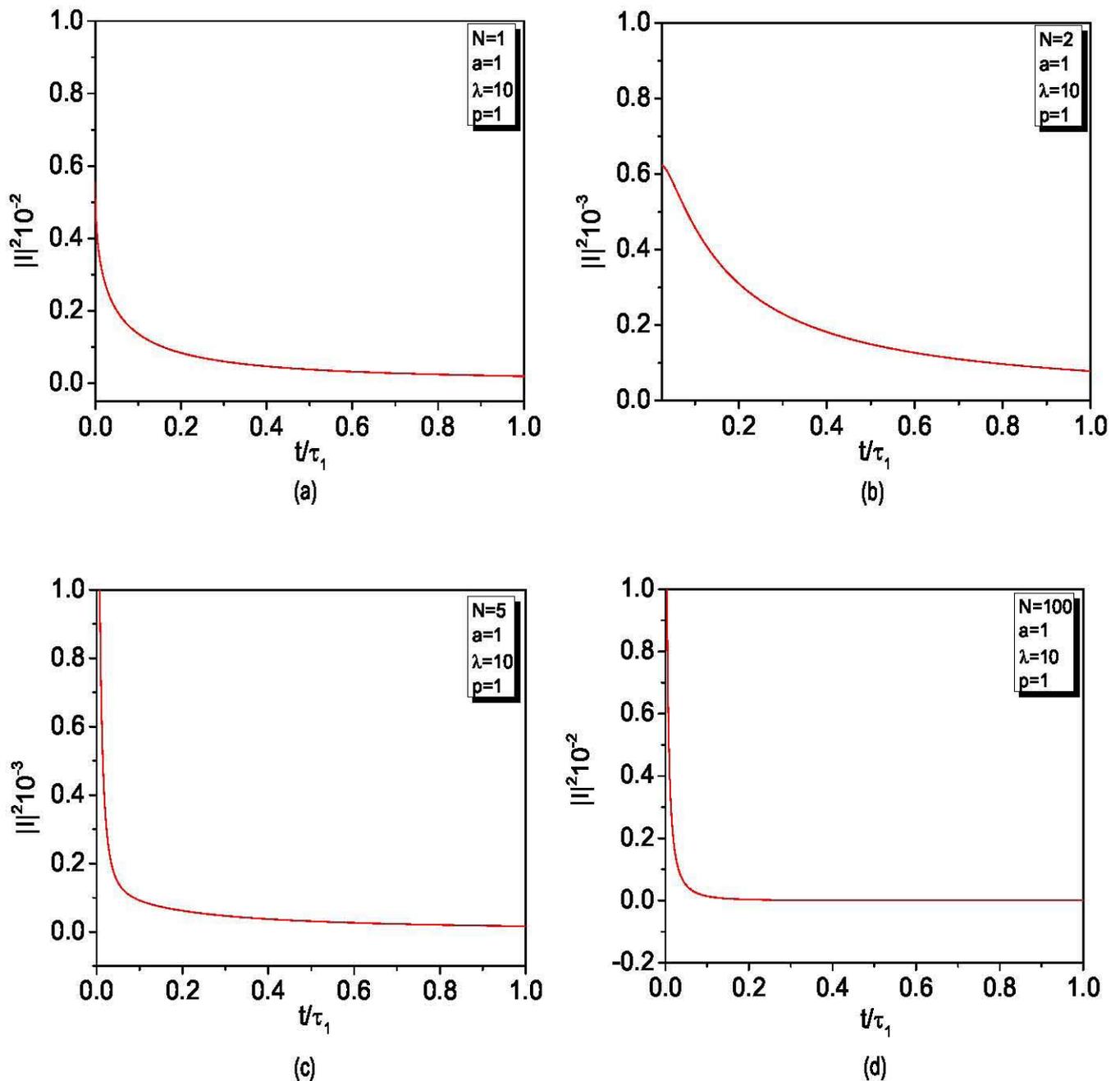


Figura 3.5: Contribución de la ecuación (3.4) en la acumulación de la densidad de probabilidad, presentada en la figura 3.3.

La figura 3.5 muestra la contribución de la ecuación (3.4) a la acumulación de la densidad de probabilidad. Evidentemente, sin importar el número de polos que se utilicen, esta parte de la función no contribuye significativamente a la acumulación de la densidad de probabilidad. Ahora, se efectuará la comparación entre la función completa (ecuación 3.2) y la parte exponencial (ecuación 3.3) empleando el mismo número de polos que se ha utilizado para hacer el análisis anterior, es decir, 1, 2, 5 y 100 polos.

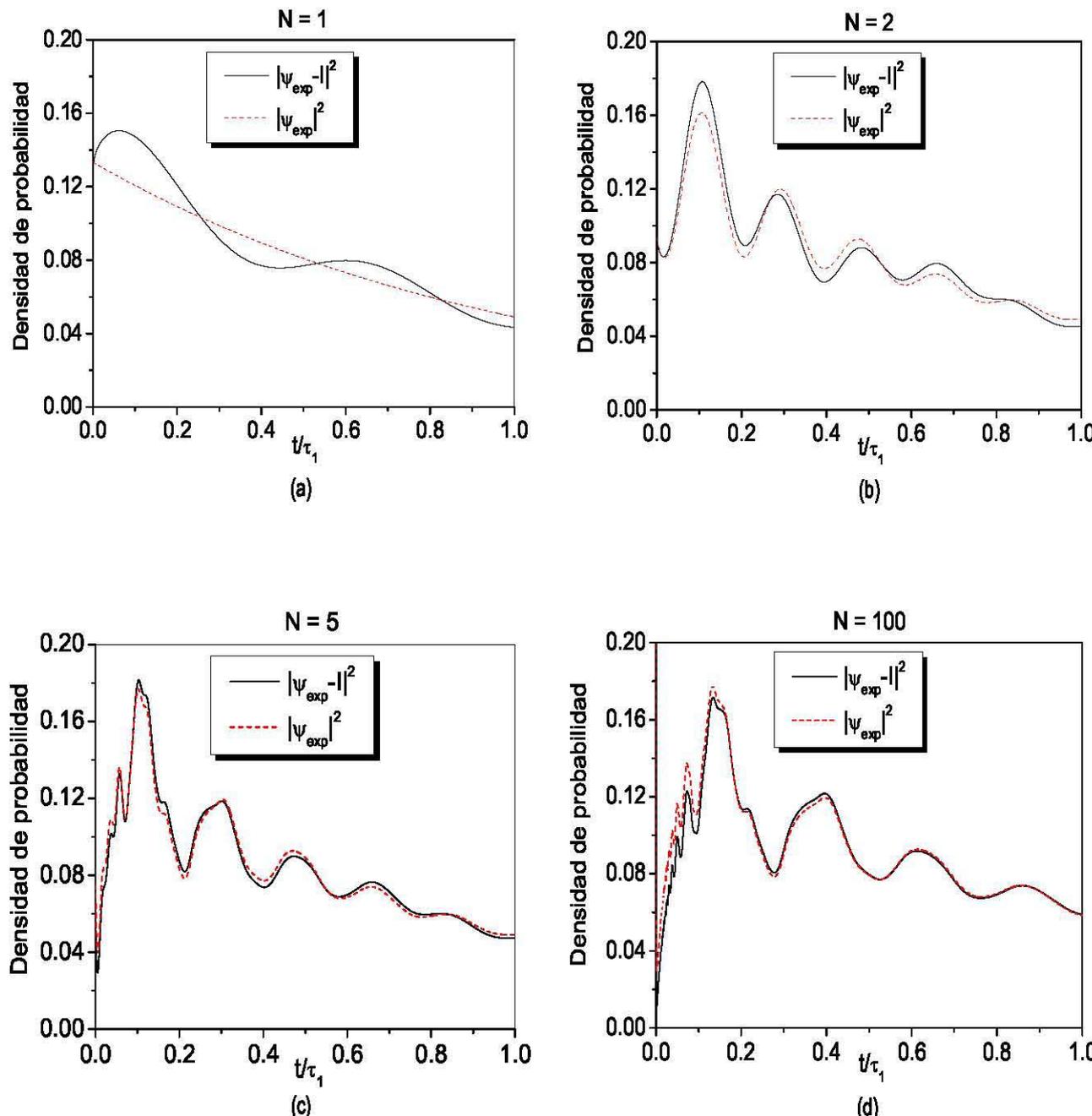


Figura 3.6: Comparación entre (3.2) y (3.3). En (a) la función (3.3) apenas manifiesta una pequeña acumulación y (3.2) no lo hace. En (b), ambas funciones muestran una ligera acumulación aunque aún inestable. En (c) $|\psi_{exp} - I|^2 = 0.1815$ y $|\psi_{exp}|^2 = 0.1773$. En tanto que en (d) $|\psi_{exp} - I|^2 = 0.1716$ y $|\psi_{exp}|^2 = 0.1778$.

La figura 3.6 muestra la comparación entre el cálculo asociado a (3.2) y el cálculo asociado a (3.3).

En la figura 3.6d la contribución de (3.3) sobrepasa ligeramente a (3.2); pudiera pensarse que, si se tuviera una mayor cantidad de polos, la diferencia se haría aún mayor pero no ocurre así, como lo muestra la figura 3.7 en la que se hace el cálculo con 1000 polos y no se observa una diferencia significativa entre ambas funciones pues al hacer el cálculo con 1000 polos el valor de $|\psi_{exp}|^2$ es el mismo que el obtenido con 100 polos, es decir, $|\psi_{exp}|^2 = 0.1778$, lo que manifiesta un comportamiento estable para la contribución exponencial.

Evidentemente, como muestran las figuras 3.6 y 3.7, existe una diferencia (aunque pequeña) entre la función completa y su parte exponencial.

Puede notarse que, conforme se aumenta el número de polos, ambas funciones se asemejan cada vez más aunque en ningún momento son exactamente iguales. Esto ocurre debido a la influencia del término de interferencia $-2Re\{\psi_{exp}^* I\}$.

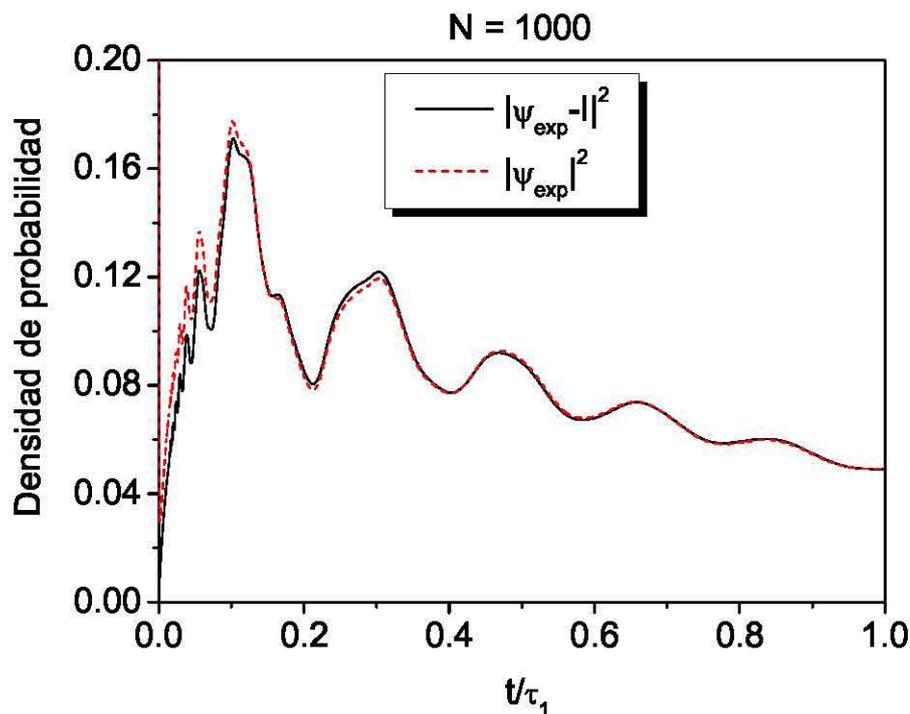


Figura 3.7: Comparación entre (3.2) y (3.3) empleando 1000 polos. Se tiene que $|\psi_{exp} - I|^2 = 0.1711$ y que $|\psi_{exp}|^2 = 0.1778$.

En la figura 3.8 se muestra la comparación entre $|I|^2$ y el término de interferencia $-2\text{Re}\{\psi_{exp}^* I\}$. Puede verse que, si bien este último no contribuye en la acumulación de la densidad de probabilidad, presenta oscilaciones cuya influencia disminuye conforme aumenta el valor de N lo que explica el comportamiento de las discrepancias entre (3.2) y (3.3).

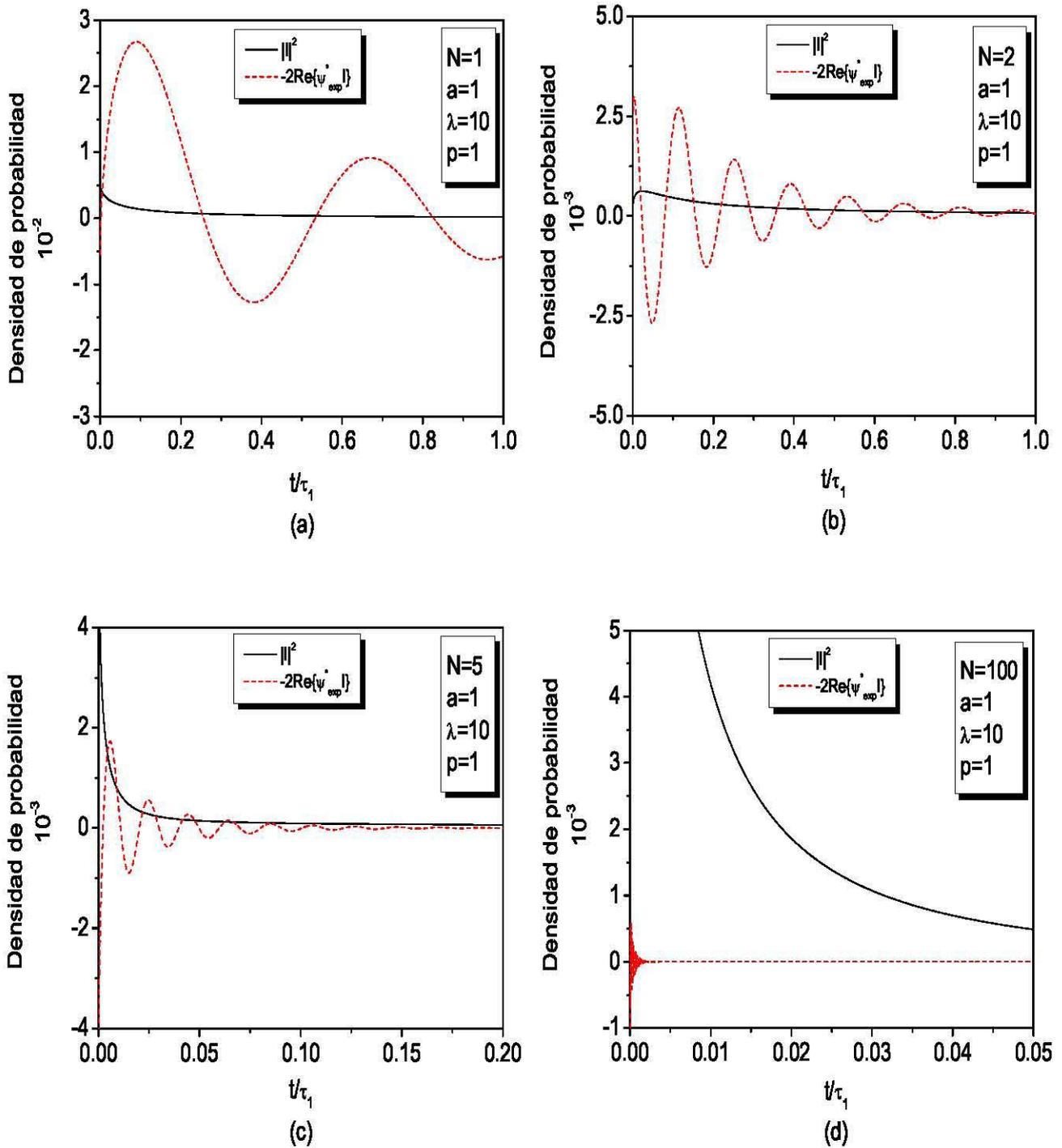


Figura 3.8: Comparación entre $|I|^2$ y $-2\text{Re}\{\psi_{exp}^* I\}$. Véase que conforme aumenta el valor de N la influencia del término de interferencia es menos significativa.

Del análisis anterior se desprende que, de la función que describe la evolución temporal del estado, es la parte exponencial la que representa la acumulación de la densidad de probabilidad, mientras que la parte no exponencial tiene una mínima participación.

Al hacer un análisis semejante al anterior para (1.41),

$$\psi(r, t) = \sum_{n=1}^N \left\{ \underbrace{C_n u_n(a) e^{-ik_n^2 t}}_{\psi_{exp}} - \underbrace{\frac{1}{4\sqrt{\pi i}} \left[\frac{C_n u_n(a)}{k_n^3} - \left(\frac{C_n u_n(a)}{k_n^3} \right)^* \right]}_{I'} \frac{1}{t^{3/2}} \right\},$$

se obtuvo nuevamente que los términos no exponenciales no influyen de manera significativa en la acumulación de la densidad de probabilidad.

Análogamente a lo que se hizo en la figura 3.7, la figura 3.9 muestra la diferencia entre $|\psi_{exp}|^2$ y (1.41). Puede verse que, la diferencia es mínima aunque no igual a la observada en la figura 3.7. No obstante, la existencia de estas discrepancias no representa una diferencia importante en el valor de la densidad de probabilidad pues, en todos los casos, se tiene una coincidencia en las primeras dos cifras significativas. Así, se tiene que $|\psi_{exp} - I|^2 = |\psi_{exp} - I'|^2 = |\psi_{exp}|^2 = 0.17$.

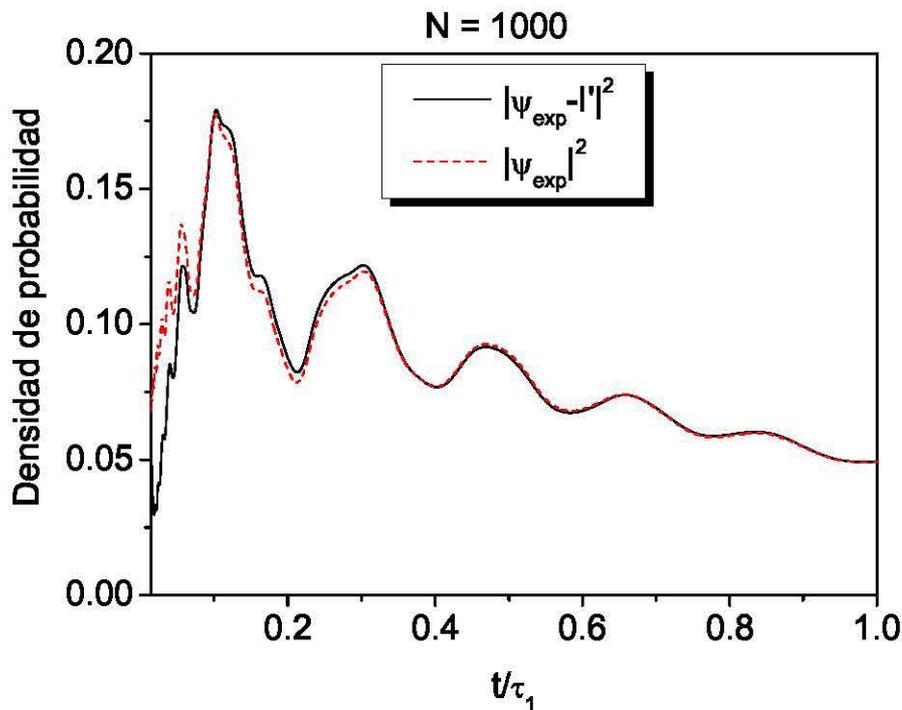


Figura 3.9: Comparación entre las ecuaciones (3.2) y (1.41) empleando 1000 polos. Se tiene que $|\psi_{exp} - I'|^2 = 0.1792$ y que $|\psi_{exp}|^2 = 0.1778$.

Del estudio de la contribución de cada término de la ecuación (3.2) se observa que, indudablemente, es el término exponencial $\psi_{exp} = \sum_{n=1}^N C_n u_n(a) e^{-ik_n^2 t}$ el que mejor describe la acumulación de la densidad de probabilidad y que la parte denominada como I no contribuye en la acumulación.

En el próximo capítulo se hará el cálculo de la escala temporal para la acumulación de la densidad de probabilidad, en el que se prescindirá de los términos no exponenciales, pues el análisis no los requiere; la importancia de tales términos, como lo ha demostrado García-Calderón [17], se observa al hacer los cálculos para tiempos extremadamente cortos o muy largos respecto a la vida media del sistema.

Por otra parte, nótese que en $t = 0$ se tiene un comportamiento muy distinto al que se esperaría tratándose de un proceso de acumulación, es decir, pareciera que inicialmente hay un decaimiento que después da lugar a la acumulación. Sin embargo, esta interpretación es errónea. Esta aparente caída al inicio de la acumulación de la densidad de probabilidad que se observa en algunos casos, es debida a que es necesario un gran número de términos en la suma ya que la serie converge muy lentamente; se trata pues, de una característica de las matemáticas que describen el sistema y no una propiedad del sistema en sí.

Capítulo 4

Escala Temporal para la Acumulación de la Densidad de Probabilidad

En éste capítulo se presentará el cumplimiento de uno de los principales objetivos del trabajo, se determinará la escala de tiempo en la que ocurre la acumulación de la densidad de probabilidad en la superficie del potencial $r = a$, con $a = 1$

Con anterioridad se hizo la deducción de la función que describe el comportamiento del sistema en el tiempo, la cual está dada por (3.2).

Para calcular la escala temporal para la acumulación de la densidad de probabilidad, se realizó un análisis comparando la parte exponencial (ecuación 3.3) con la solución completa (ecuación 3.2); tanto en el estado base ($p = 1$) como en el primer estado excitado ($p = 2$). Se procedió a evaluar ambas funciones elevando gradualmente el número de términos hasta encontrar un valor para el que el tiempo en que se alcanza el máximo en la acumulación de la densidad de probabilidad es constante. Se presentan los resultados obtenidos para dos estados iniciales diferentes¹:

$$1. \psi_p([0, a], 0) = \sqrt{\frac{2}{a}} \operatorname{sen} \left(\frac{p\pi r}{a} \right)$$

$$2. \psi_p \left(\left[\frac{2a}{5}, \frac{3a}{5} \right], 0 \right) = \sqrt{\frac{10}{a}} \operatorname{sen} \left[\frac{5\pi(2p-1)}{a} \left(r - \frac{a}{2} \right) + \frac{\pi}{2} \right].$$

¹En ambas expresiones, los corchetes indican el intervalo cerrado del estado inicial en la región interna del potencial.

4.1. Caso 1

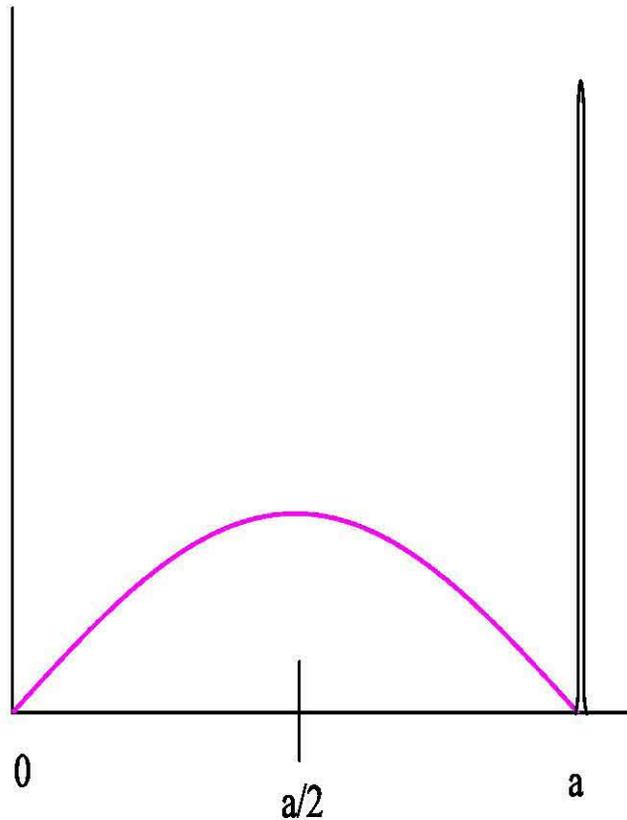
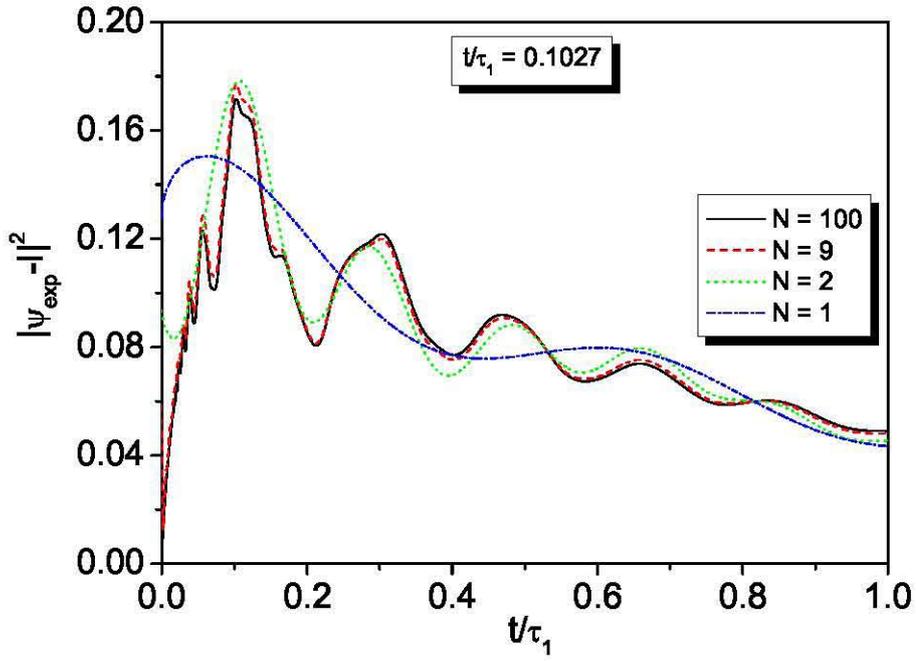


Figura 4.1: Estado inicial $\psi_p([0, a], 0) = \sqrt{\frac{2}{a}} \text{sen}\left(\frac{p\pi r}{a}\right)$

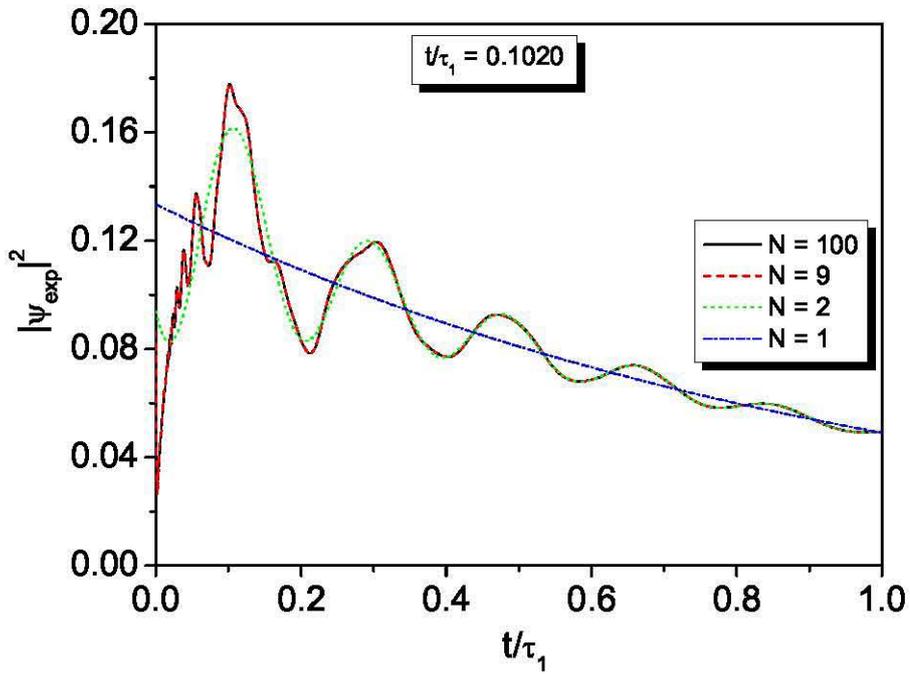
El estado inicial es tal que tiene contacto con las paredes del potencial, como se muestra en la figura 4.1, en la que se presenta el esquema del estado inicial descrito por $\psi_p([0, a], 0) = \sqrt{\frac{2}{a}} \text{sen}\left(\frac{p\pi r}{a}\right)$.

Como ejemplo, en la figura 4.2 se presentan los resultados obtenidos al evaluar la función completa y la parte exponencial en el estado base ($p = 1$) del caso 1 con diferentes valores de N . Los parámetros del potencial son $a = 1$ y $\lambda = 10$.

La suma correrá desde $n = 1$ hasta N , en donde el valor de N será aquel en el que se obtenga un valor estable para la escala temporal de la acumulación de la densidad de probabilidad.



(a)



(b)

Figura 4.2: Acumulación de la densidad de probabilidad para el estado inicial $\psi_p([0, a], 0) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{p\pi r}{a}\right)$ con $a = 1$, $\lambda = 10$ y $p = 1$. En (a) se presenta $|\psi_{exp} - I|^2$ y en (b) $|\psi_{exp}|^2$, en ambos casos se contrastan los resultados obtenidos con $N=1$, $N=2$, $N=9$ y $N=100$. En ambas gráficas se indica la escala temporal para la acumulación de la densidad de probabilidad tomada del máximo principal de las curvas.

Las gráficas se realizaron empleando el programa Origin 8.5 y se construyeron con 10,000 puntos cada una. El valor del tiempo se obtuvo mediante inspección numérica del máximo principal de la gráfica colocando el cursor lector de datos sobre la misma.

En la figura (4.2a), se muestra lo que ocurre al hacer el cálculo para la función completa con uno, dos, nueve y cien polos. Con un polo, la función presenta una ligera acumulación; con dos polos la acumulación queda mejor definida, presentando una estructura de máximos y mínimos. Con 9 polos el sistema adquiere un valor estable para el tiempo de acumulación máxima, siendo éste de 0.1027 veces la vida media. Se comprueba que éste valor es estable al hacer el cálculo con cien polos, obteniéndose el mismo resultado.

La figura (4.2b) muestra el resultado de haber hecho los cálculos con el mismo número de polos que en (4.2a), pero utilizando ψ_{exp} dada por la ecuación (3.3). A diferencia de la función completa, con un solo polo, no se observa acumulación, obteniéndose una curva monótonamente decreciente. Con 2 polos, puede verse una acumulación similar la que ocurre en la función completa aunque, en comparación, la acumulación correspondiente a la parte exponencial es ligeramente menor. Con 9 polos ya se tiene un valor fijo para el tiempo que, como se verifica con cien polos, es de 0.102 veces la vida media.

Existe una discrepancia en la cuarta cifra, sin embargo, puede decirse con seguridad que, para este caso, el tiempo en que la máxima acumulación de la densidad de probabilidad es de alrededor de un décimo de la vida media.

Del mismo modo que se hizo para el estado base ($p = 1$), se realizaron los cálculos para el primer estado excitado ($p = 2$). Más adelante también se presentarán los resultados obtenidos para tal situación, aunque se mostrará únicamente el valor de N con el que se obtiene una cifra estable para la escala de tiempo.

A continuación se muestra un ejemplo semejante al anterior, esta vez aplicado al estado base del caso dos. De igual manera, se mostrarán las gráficas obtenidas al hacer el análisis, con diferentes valores de N , para la función completa y para la parte exponencial.

4.2. Caso 2

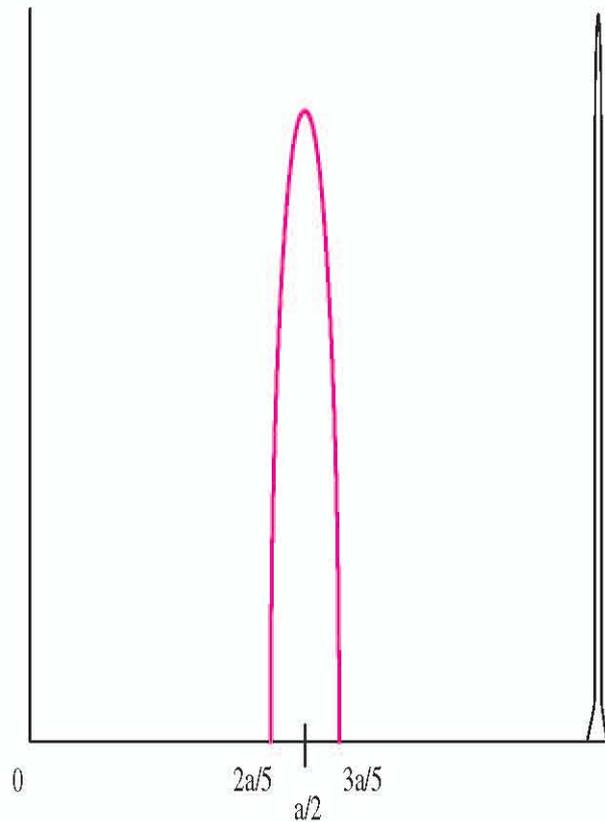
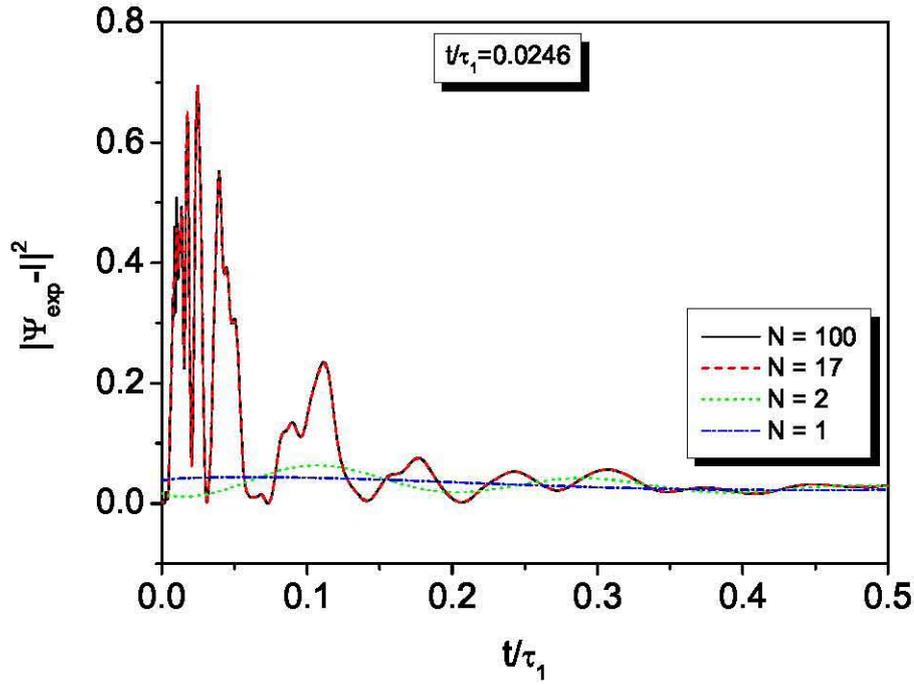


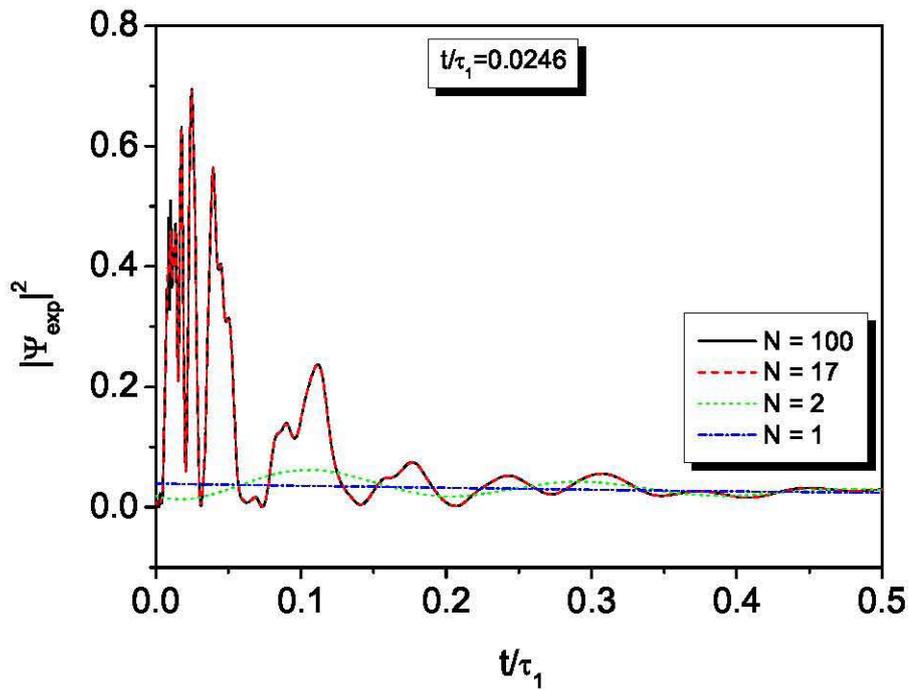
Figura 4.3: Estado inicial $\psi_p \left(\left[\frac{2a}{5}, \frac{3a}{5} \right], 0 \right) = \sqrt{\frac{10}{a}} \operatorname{sen} \left[\frac{5\pi(2p-1)}{a} \left(r - \frac{a}{2} \right) + \frac{\pi}{2} \right]$.

En el segundo caso, el estado inicial queda restringido a ocupar la parte central de la región interna del potencial, como lo muestra la figura 4.3 en la que se presenta el esquema del estado inicial descrito por $\psi_p \left(\left[\frac{2a}{5}, \frac{3a}{5} \right], 0 \right) = \sqrt{\frac{10}{a}} \operatorname{sen} \left[\frac{5\pi(2p-1)}{a} \left(r - \frac{a}{2} \right) + \frac{\pi}{2} \right]$..

Del mismo modo que en el primer caso, se muestra como ejemplo, la figura 4.4 en la que se presentan los resultados obtenidos al evaluar la función completa y la parte exponencial en el estado base ($p = 1$) con diferentes valores de N . Los parámetros del potencial son $a = 1$ y $\lambda = 10$.



(a)



(b)

Figura 4.4: Acumulación de la densidad de probabilidad para el estado inicial $\psi_p \left(\left[\frac{2a}{5}, \frac{3a}{5} \right], 0 \right) = \sqrt{\frac{10}{a}} \sin \left[\frac{5\pi(2p-1)}{a} \left(r - \frac{a}{2} \right) + \frac{\pi}{2} \right]$ con $a = 1$, $\lambda = 10$ y $p = 1$. En (a) se presenta $|\psi_{exp} - I|^2$ y en (b) $|\psi_{exp}|^2$, en ambos casos se contrastan los resultados obtenidos con $N=1$, $N=2$, $N=17$ y $N=100$. En ambas gráficas se indica la escala temporal para la acumulación de la densidad de probabilidad tomada del máximo principal de las curvas.

En la figura (4.4a), se muestra lo que ocurre al hacer el cálculo de la función completa con uno, dos, diecisiete y cien polos. Con uno y dos polos, la acumulación es prácticamente nula. Al hacer el cálculo con diecisiete polos, el sistema adquiere, notoriamente, un valor estable para el tiempo de acumulación máxima, siendo éste de 0.0246 veces la vida media. Se comprueba que éste valor es estable al hacer el cálculo con cien polos, obteniéndose el mismo resultado.

La figura (4.4b) muestra el resultado de haber hecho los cálculos con el mismo número de polos que en (4.4a) pero para la parte exponencial. De igual manera que para la función completa, con uno y dos polos, prácticamente no se observa acumulación. Con diecisiete polos ya se tiene un valor fijo para el tiempo de máxima acumulación que es de 0.0246 veces la vida media, como puede verificarse al hacer el cálculo con cien polos. Para ambas funciones, la coincidencia en el valor del tiempo en que se alcanza la acumulación máxima es notable, pues el valor es exactamente el mismo.

Ya en el capítulo anterior se observaron diferencias al comparar las distintas representaciones de la evolución temporal con la parte exponencial. Al analizar la función completa se tiene que, si el cálculo se hace con la representación (1.41), se incluyen los términos proporcionales a $1/t^{3/2}$, que son importantes a tiempos largos comparados con la vida media del sistema, pero que a tiempos cortos impiden una correcta descripción de la acumulación de la densidad de probabilidad. Al hacer el análisis con la ecuación (1.36), se observa que esta describe mejor, estructuralmente, la acumulación de la densidad de probabilidad; además, para hacer el análisis en $t = 0$ se aprovechan las propiedades de la función de Moshinsky. Por esta razón, es conveniente emplear (1.36) para describir el comportamiento a tiempos muy cortos. La función de Moshinsky tiene un papel importante en la descripción de la acumulación de la densidad de probabilidad, no sólo en $t = 0$ sino también en tiempos muy cortos inmediatamente superiores a $t = 0$. En definitiva, si se quiere tener una descripción precisa, no sólo de la escala temporal de la acumulación de la densidad de probabilidad, sino de la estructura de la acumulación misma, el análisis tiene que hacerse de la siguiente forma:

- Primero, se tiene que graficar desde $t = 0$ y hasta un tiempo inferior al tiempo en que se alcanza el máximo de la acumulación, empleando la función (1.36).
- Segundo y debido a que, como se ha demostrado, la parte exponencial es la que representa la acumulación de la densidad de probabilidad, se tiene que graficar sólo la parte exponencial a partir del límite de tiempo superior del punto anterior.

Entonces, la descripción tanto del proceso de acumulación de la densidad de probabilidad como de la escala temporal en la que se alcanza su máximo, queda como sigue:

Caso 1

Se muestra la escala de tiempo en la que se alcanza el máximo de la acumulación de la densidad de probabilidad para el estado inicial

$$\psi_p([0, a], 0) = \sqrt{\frac{2}{a}} \operatorname{sen} \left(\frac{p\pi r}{a} \right).$$

Se observa que, para el estado base (figura 4.5), la escala temporal para la acumulación de la densidad de probabilidad es de 0.1020 veces la vida media, es decir, la escala de tiempo de la acumulación es del orden de un décimo de vida media del modelo.

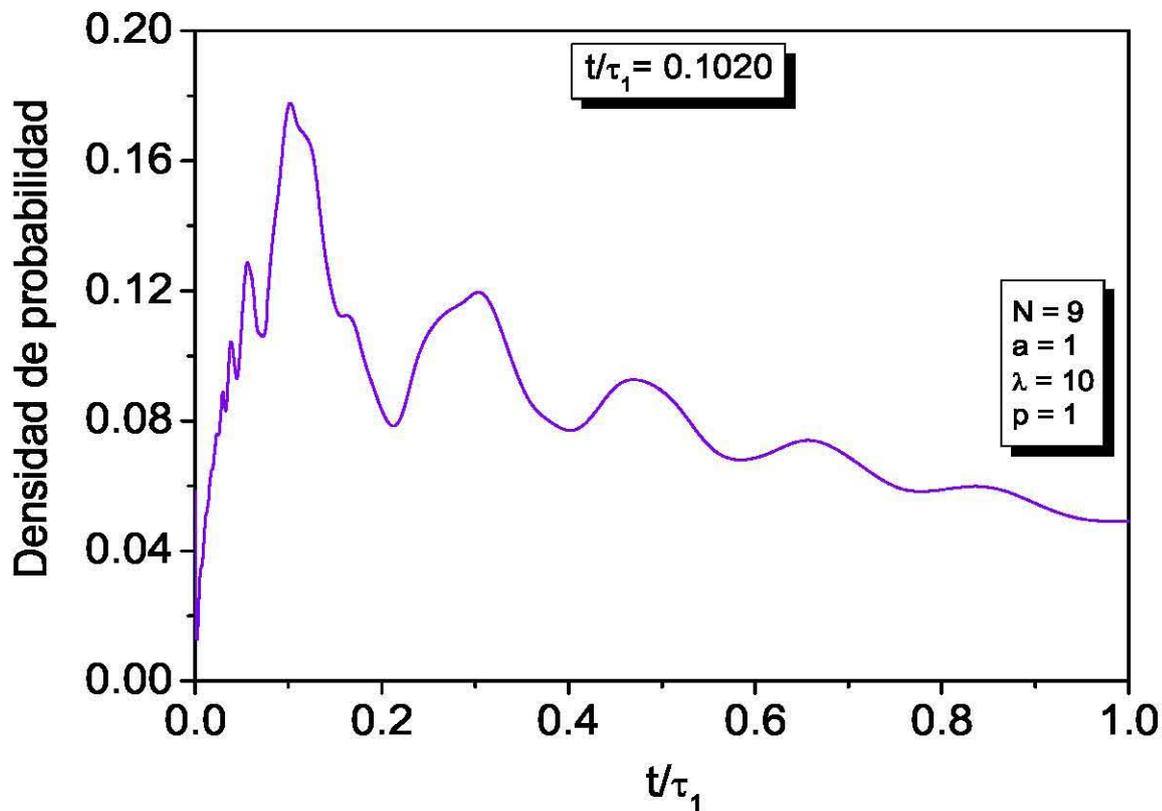


Figura 4.5: Acumulación de la densidad de probabilidad para el estado inicial $\psi_p([0, a], 0) = \sqrt{\frac{2}{a}} \operatorname{sen} \left(\frac{p\pi r}{a} \right)$ con $a = 1$, $\lambda = 10$ y $p = 1$. Se indica la escala temporal para la acumulación de la densidad de probabilidad tomada del máximo principal de la curva.

Para este mismo caso pero en el primer estado excitado (figura 4.6), se observa que, la escala de tiempo es 0.0643 veces la vida media; el tiempo se reduce a cerca de la mitad del obtenido en el estado base.

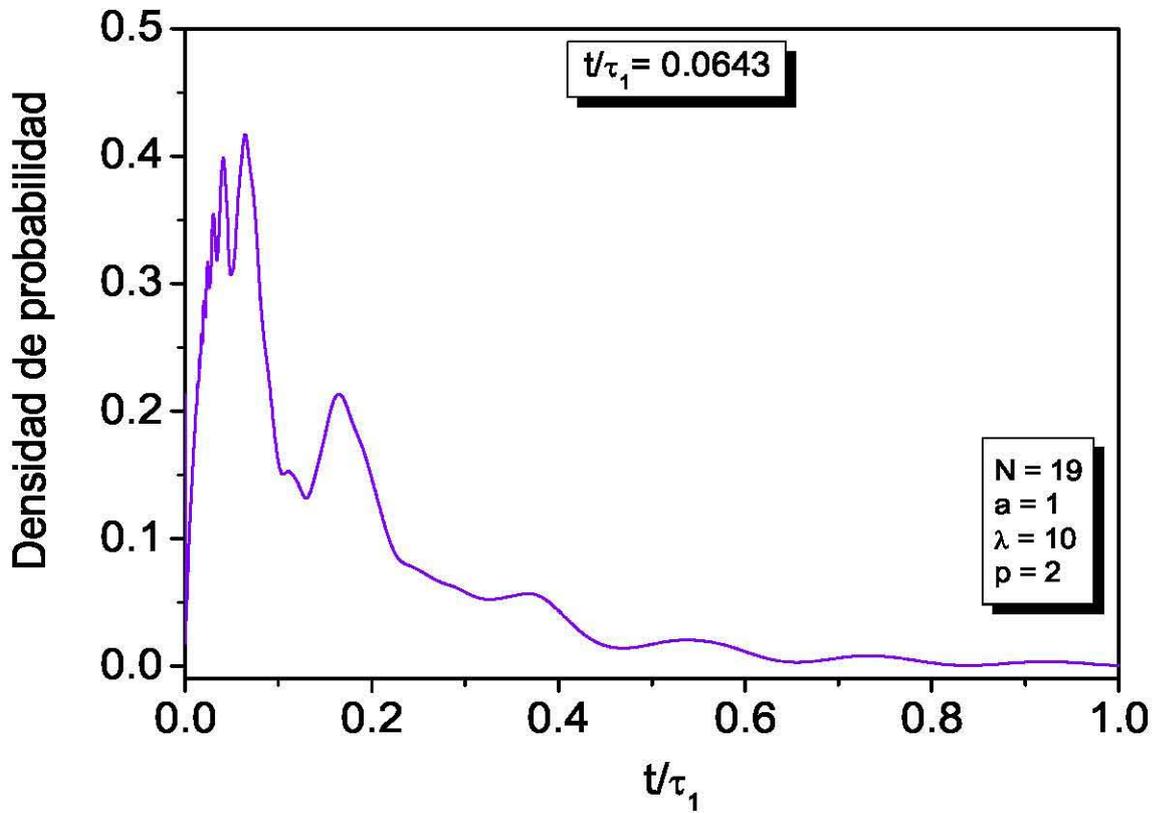


Figura 4.6: Escala temporal para la acumulación de la densidad de probabilidad para el estado inicial $\psi_p([0, a], 0) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{p\pi r}{a}\right)$ con $a = 1$, $\lambda = 10$ y $p = 2$. Se indica la escala temporal para la acumulación de la densidad de probabilidad tomada del máximo principal de la curva.

Caso 2

Se muestra la escala de tiempo en la que se alcanza el máximo de la acumulación de la densidad de probabilidad para el estado inicial

$$\psi_p \left(\left[\frac{2a}{5}, \frac{3a}{5} \right], 0 \right) = \sqrt{\frac{10}{a}} \operatorname{sen} \left[\frac{5\pi(2p-1)}{a} \left(r - \frac{a}{2} \right) + \frac{\pi}{2} \right].$$

Se observa que, para el estado base (figura 4.7), la escala temporal para la acumulación de la densidad de probabilidad es de 0.0246 veces la vida media.

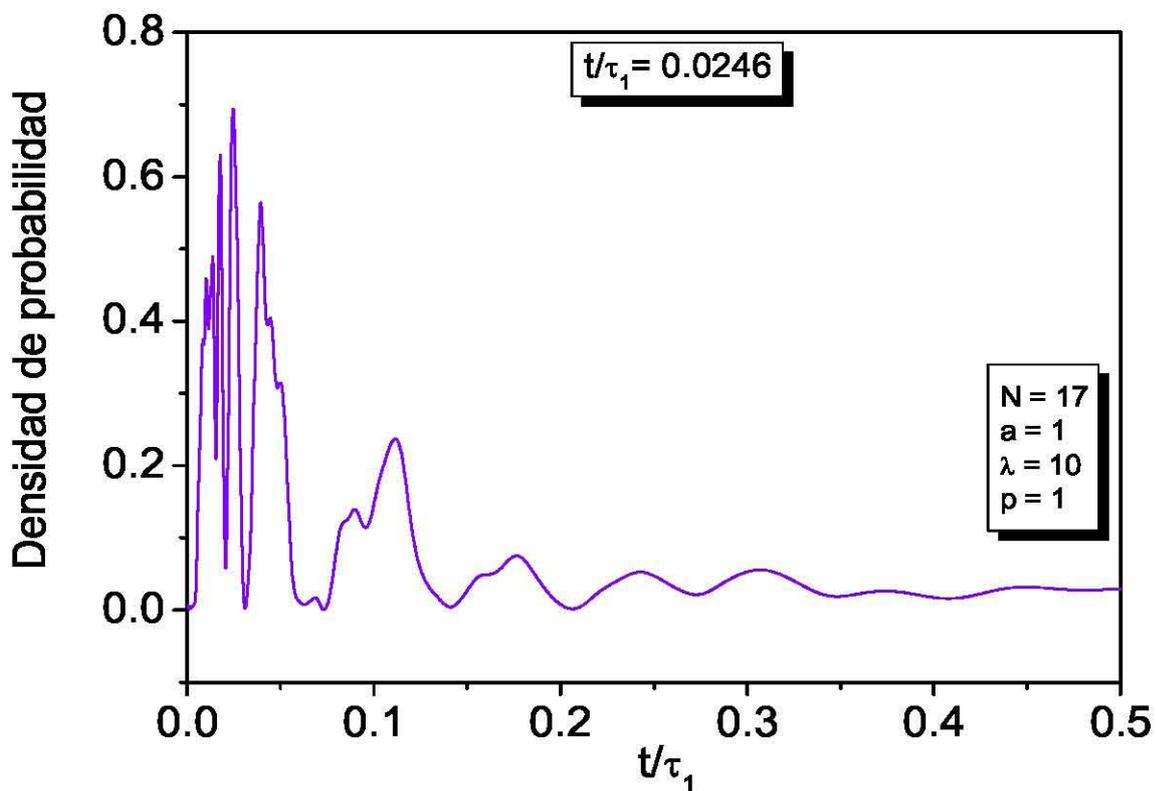


Figura 4.7: Acumulación de la densidad de probabilidad para el estado inicial $\psi_p \left(\left[\frac{2a}{5}, \frac{3a}{5} \right], 0 \right) = \sqrt{\frac{10}{a}} \operatorname{sen} \left[\frac{5\pi(2p-1)}{a} \left(r - \frac{a}{2} \right) + \frac{\pi}{2} \right]$, con $a = 1$, $\lambda = 10$ y $p = 1$. Se indica la escala temporal para la acumulación de la densidad de probabilidad tomada del máximo principal de la curva.

Al estudiar el primer estado excitado ($p=2$) en éste mismo caso (figura 4.8), se obtiene un tiempo de acumulación de 0.0041 veces la vida media; es decir, el tiempo de acumulación es de alrededor de 41 diezmilésimos de la vida media. De todos los estados iniciales considerados en este trabajo, con sus variantes en la intensidad del potencial, es en este caso que se aprecia que el proceso de acumulación toma un tiempo más corto.

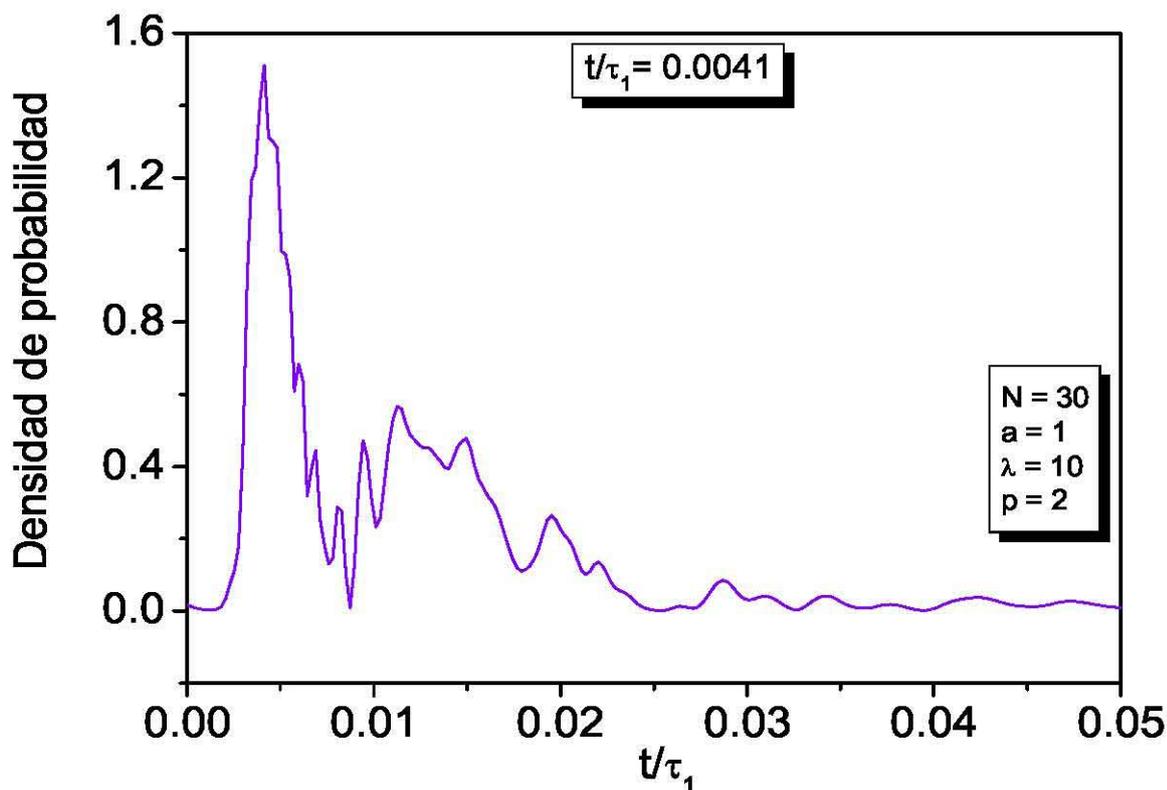


Figura 4.8: Acumulación de la densidad de probabilidad para el estado inicial $\psi_p \left(\left[\frac{2a}{5}, \frac{3a}{5} \right], 0 \right) = \sqrt{\frac{10}{a}} \sin \left[\frac{5\pi(2p-1)}{a} \left(r - \frac{a}{2} \right) + \frac{\pi}{2} \right]$. con $a = 1$, $\lambda = 10$ y $p = 2$. Se indica la escala temporal para la acumulación de la densidad de probabilidad tomada del máximo principal de la curva.

Ahora, los casos uno y dos representan los extremos del estudio; pues en el primero el estado inicial tiene contacto con las paredes en la región interna del potencial mientras que el otro está restringido a ocupar una región muy pequeña comparada con la del caso uno y está centrada en $a/2$, además, tiene un traslape importante con niveles de energía superiores al estado base. En los sistemas presentados la intensidad del potencial es de $\lambda = 10$, al hacer la comparación entre ambos, el tiempo correspondiente al caso uno es aproximadamente 76% mayor que el correspondiente al sistema dos en el estado base; en tanto que, en el primer estado excitado el tiempo es aproximadamente 94% mayor en el caso uno que en el caso dos.

Además de los casos presentados en este trabajo se investigaron otros estados iniciales, a saber:

Caso 3

$$\psi_p \left(\left[0, \frac{a}{2} \right], 0 \right) = \sqrt{\frac{4}{a}} \operatorname{sen} \left(\frac{2p\pi r}{a} \right)$$

Caso 4

$$\psi_p \left(\left[\frac{a}{4}, \frac{3a}{4} \right], 0 \right) = \sqrt{\frac{4}{a}} \operatorname{sen} \left[\frac{2\pi(2p-1)}{a} \left(r - \frac{a}{2} \right) + \frac{\pi}{2} \right],$$

los análisis gráficos de tales estados no se presentan por mostrar un comportamiento cualitativamente igual a los presentados.

Para todos los estados iniciales, además de hacer el estudio para $\lambda = 10$, también se analizaron las variaciones en las que $\lambda = 5$ y $\lambda = 15$. Se observó que las diferencias entre los resultados obtenidos para tales casos y los que se presentan en este trabajo no son muy grandes, como se observa en el cuadro 4.1 donde se muestran las escalas temporales obtenidas.

		Caso 1	Caso 2	Caso 3	Caso 4
		t/t_1	t/t_2	t/t_1	t/t_2
$\lambda = 5$	$p = 1$	0.1091	0.0746	0.0404	0.0477
	$p = 2$	0.0424	0.0041	0.0076	0.0112
$\lambda = 10$	$p = 1$	0.182	0.0246	0.0643	0.0429
	$p = 2$	0.0643	0.0041	0.0094	0.0112
$\lambda = 15$	$p = 1$	0.1021	0.0248	0.064	0.0429
	$p = 2$	0.064	0.0041	0.0111	0.0112

Cuadro 4.1: Se muestran las escalas de tiempo para la acumulación de la densidad de probabilidad de los distintos casos estudiados. Se resaltan los resultados ya presentados en este trabajo.

Capítulo 5

Conclusiones

En el presente trabajo, se hizo un estudio sistemático de la acumulación de la densidad de probabilidad, en el decaimiento de sistemas cuánticos con distintos estados iniciales, en la superficie de un potencial delta, aplicando el formalismo de los estados resonantes.

Al hacer el análisis del origen de la acumulación de la densidad de probabilidad, se obtuvo que, al analizar por separado los términos de la función que describe la evolución temporal del sistema (ecuaciones 1.36 ó 1.41), bien sean los términos denominados como I o I' respectivamente, la contribución de estos a la acumulación de la densidad de probabilidad, es insignificante. Por otra parte, el resultado es notoriamente distinto al estudiar la contribución de los términos exponenciales:

$$\sum_{n=1}^N C_n u_n(a) e^{-ik_n^2 t},$$

pues es esta contribución la que describe, de manera precisa, el proceso de acumulación de la densidad de probabilidad. Entonces, de la función que describe la evolución temporal del sistema se obtiene que la acumulación de la densidad de probabilidad se debe, principalmente, a los términos de interferencia en la suma de las contribuciones exponenciales de la función. Como se vio en el capítulo tres, la contribución de los términos no exponenciales es prácticamente nula como puede apreciarse en la figura 3.5 que muestra, en conjunto, la contribución de estos términos.

En el proceso de acumulación de la densidad de probabilidad, aparece un patrón oscilatorio debido a la interferencia en la suma de los términos exponenciales, la complejidad de esta estructura depende del número de términos (polos) empleados al hacer la suma sobre la función; se determinó que, para obtener una buena descripción de tal estructura, es necesario tomar en cuenta los términos dependientes de la función de Moshinsky. No obstante, existe un valor mínimo de N para el que el tiempo en que ocurre la acumulación no cambia. Por lo tanto, para obtener una escala temporal confiable en la que se alcanza el máximo de acumulación de la densidad de probabilidad, no es necesario emplear un

gran número de términos; en ninguno de los casos estudiados fueron necesarios más de 100 polos para encontrar un valor confiable. Entonces, ahora se tiene un criterio que permite establecer una N mínima para obtener una escala confiable de tiempo, para cada λ y cada p .

Se estudiaron varios casos, cada uno correspondiente a un estado inicial distinto de los demás. En cada caso se analizó lo que ocurre con distintas intensidades del potencial ($\lambda = 5$, $\lambda = 10$ y $\lambda = 15$), tanto en el estado base ($p = 1$) como en el primer estado excitado ($p = 2$). En este trabajo sólo se presenta el análisis gráfico para los estados iniciales

$$1. \psi_p([0, a], 0) = \sqrt{\frac{2}{a}} \operatorname{sen} \left(\frac{p\pi r}{a} \right)$$

$$2. \psi_p \left(\left[\frac{2a}{5}, \frac{3a}{5} \right], 0 \right) = \sqrt{\frac{10}{a}} \operatorname{sen} \left[\frac{5\pi(2p-1)}{a} \left(r - \frac{a}{2} \right) + \frac{\pi}{2} \right],$$

con $\lambda = 10$.

La función (1.36), que es la que describe la evolución temporal, se compone de una suma de términos exponenciales y una suma de términos no exponenciales proporcionales a la función de Moshinsky; al comparar gráficamente la función completa con solamente la parte exponencial, se observa que, aunque son muy parecidas, no son exactamente iguales, esta diferencia es más notoria en el caso uno que es en el que el estado inicial contacta las paredes del potencial y menos notoria en el caso dos en que el estado inicial es más estrecho y está centrado en la mitad de la región interna del potencial. La diferencia entre las distintas funciones es mayor al inicio del proceso de acumulación y va disminuyendo conforme el sistema evoluciona en el tiempo. Esta diferencia puede explicarse por la existencia del término de interferencia $-2\operatorname{Re}\{\psi_{exp}^* I\}$ que, como se mostró en la figura 3.8 influye cada vez menos conforme aumenta el valor de N .

El cuadro 4.1 presenta los tiempos obtenidos para los distintos estados iniciales con diferentes intensidades del potencial. Para el caso uno puede verse que, en general, la escala de tiempo en que ocurre la máxima acumulación de la densidad de probabilidad en el estado base, es de alrededor de un décimo de vida media y para el primer estado excitado es de alrededor de cuatro centésimos de vida media con $\lambda = 5$ y seis centésimos de vida media con $\lambda = 10$ y $\lambda = 15$.

Para el caso dos, el tiempo es de alrededor de dos centésimos de vida media para el estado base y de alrededor de cuatro milésimos para el primer estado excitado con cualquiera de las intensidades del potencial.

En el caso tres se tiene que la escala de tiempo es de alrededor de cuatro centésimos de vida media, para el estado base y de setenta y seis diezmilésimos de vida media, para el primer estado excitado, si $\lambda = 5$; en tanto que, si $\lambda = 10$, el tiempo es de alrededor de seis centésimos de vida media en el estado base y de alrededor de nueve milésimos de vida media en el primer estado excitado. Para el mismo caso, con $\lambda = 15$, se tiene también un tiempo de alrededor de seis centésimos de vida media en el estado base y de un centésimo de vida media en el primer estado excitado.

El caso cuatro tiene un tiempo de alrededor de cuatro centésimos de vida media en el estado base y de alrededor de un centésimo de vida media en el primer estado excitado, esto para $\lambda = 5$, $\lambda = 10$ y $\lambda = 15$.

Por otra parte, al comparar los resultados obtenidos para $p = 1$ en el caso 3 con lo obtenido para $p = 2$ en el caso 1, los tiempos son iguales, es decir, el tiempo que toma alcanzar un máximo en la acumulación de la densidad de probabilidad cuando se tiene el estado inicial

$$\psi_p([0, a], 0) = \sqrt{\frac{2}{a}} \operatorname{sen} \left(\frac{p\pi r}{a} \right),$$

con $p = 2$, es el mismo que si se tiene el estado inicial

$$\psi_p([0, a/2], 0) = \sqrt{\frac{4}{a}} \operatorname{sen} \left(\frac{2p\pi r}{a} \right),$$

con $p = 1$. Esto es debido a que el estado inicial en el caso 3, con $p = 1$, tiene un fuerte traslape con el estado $p = 2$ del caso 1.

Puede verse entonces que, conforme el estado inicial se restringe a espacios reducidos, centrados en el medio de la región interna del potencial, la escala de tiempo en que ocurre la acumulación de la densidad de probabilidad es menor y que también se reduce al aumentar la energía del sistema y si el estado inicial se traslapa con niveles de energía superiores al estado base, como ocurre con el caso dos. Por lo tanto, la escala temporal de la acumulación de densidad de probabilidad es un proceso que toma una fracción de la vida media del sistema y depende, significativamente, del estado inicial.

La relevancia física del estudio de la acumulación de la densidad de probabilidad es tener un mejor entendimiento del proceso de decaimiento en la región externa del potencial. Claramente el sistema debe experimentar un proceso de acumulación de la densidad de probabilidad antes de decaer. El proceso de acumulación de la densidad de probabilidad no ha sido reportado, hasta donde sabemos, en la literatura. El análisis que se ha realizado en

este trabajo, aunque considera un modelo muy sencillo, muestra que es un proceso muy rápido, de una fracción de vida media y ello podría ser la causa de que no haya sido reportado.

Se ha reportado acumulación de la densidad de probabilidad en la región externa a distancias grandes comparadas con el ancho de la región interna del potencial, observándose interferencias producidas por la propagación de las partículas [15][17].

Entender el proceso de acumulación de la densidad de probabilidad permite su aplicación en el estudio de sistemas que van desde reacciones nucleares a materiales semiconductores. Al momento de escribir este trabajo no existe una realización experimental del modelo considerado, una aproximación podría ser una barrera cuadrada, muy estrecha y alta.

En el presente trabajo, se analizó la acumulación de la densidad de probabilidad, especialmente, la escala de tiempo en que esta ocurre, para un potencial delta en tres dimensiones, con estados sinusoidales confinados, inicialmente, en la región interna del potencial. Como perspectiva a futuro, podrían realizarse estudios semejantes ya sea para potenciales esféricos pero de intensidades superiores a las mostradas aquí o bien para sistemas multibarrera con los mismos o diferentes estados iniciales. En este sentido, Cordero *et al* [14], han hecho avances; en su trabajo se muestra la escala de tiempo del proceso de decaimiento de un par de sistemas consistentes en dos o cuatro barreras, respectivamente. En su trabajo, se muestra lo que ocurre al confinar un pulso sinusoidal como el empleado aquí y se muestra, también, lo que ocurre al hacer incidir, por la izquierda, un paquete de ondas Gaussiano obteniendo resultados análogos a los mostrados en este trabajo.

Otra derivación podría ser realizar los cálculos para la densidad de corriente J .

Apéndices

Apéndice A

Normalización de los Estados Resonantes

Partiendo de la ecuación 1.5

$$u_n''(r) + [k_n^2 - V(r)]u_n(r) = 0, \quad (\text{A.1})$$

con las condiciones

$$u_n(0) = 0, \quad (\text{A.2})$$

$$u_n'(a) = ik_n u_n(a), \quad (\text{A.3})$$

puede escribirse también

$$u_m''(r) + [k_m^2 - V(r)]u_m(r) = 0, \quad (\text{A.4})$$

con las condiciones

$$u_m(0) = 0, \quad (\text{A.5})$$

$$u_m'(a) = ik_m u_m(a). \quad (\text{A.6})$$

Si bien, sólo se están considerando las ecuaciones para dos estados resonantes, no se pierde generalidad en la argumentación.

Multiplicando $u_m(r)$ por (A.1) y $u_n(r)$ por (A.4), se tienen, respectivamente

$$u_m(r)u_n''(r) + u_m(r)[k_n^2 - V(r)]u_n(r) = 0 \quad (\text{A.7})$$

y

$$u_n(r)u_m''(r) + u_n(r)[k_m^2 - V(r)]u_m(r) = 0. \quad (\text{A.8})$$

Restando (A.8) de (A.7) se obtiene que

$$u_m(r)u_n''(r) - u_n(r)u_m''(r) + (k_n^2 - k_m^2)u_n(r)u_m(r) = 0. \quad (\text{A.9})$$

Luego, integrando en la región interna

$$\int_0^a dr [u_m(r)u_n'(r) - u_n(r)u_m'(r)] + (k_n^2 - k_m^2) \int_0^a dr u_n(r)u_m(r) = 0. \quad (\text{A.10})$$

Después de resolver la integral (A.10), además de aplicarse las condiciones (A.3) y (A.6), se tiene

$$i(k_n - k_m)u_n(a)u_m(a) + (k_n^2 - k_m^2) \int_0^a u_n(r)u_m(r)dr = 0. \quad (\text{A.11})$$

Factorizando $(k_n^2 - k_m^2)$ se tiene

$$(k_n^2 - k_m^2) \left(i \frac{k_n - k_m}{k_n^2 - k_m^2} u_n(a)u_m(a) + \int_0^a u_n(r)u_m(r)dr \right) = 0. \quad (\text{A.12})$$

Retomando (1.7) y (1.8), si $m = -n$:

$$-\frac{1}{2\beta_n} |u_n(a)|^2 + \int_0^a |u_n(r)|^2 dr = 0, \quad (\text{A.13})$$

de donde

$$\beta_n = \frac{1}{2} \frac{|u_n(a)|^2}{\int_0^a |u_n(r)|^2 dr}. \quad (\text{A.14})$$

La ecuación anterior demuestra que β_n es idéntica a β_{-n} y no puede ser negativo.

Dado que

$$\delta_{m,n} = \begin{cases} 1; & m = n \\ 0; & m \neq n, \end{cases}$$

si $m \neq n$ se tiene

$$\frac{i}{k_n + k_m} u_n(a)u_m(a) + \int_0^a u_n(r)u_m(r)dr = 0. \quad (\text{A.15})$$

Luego, si $m = n$:

$$\int_0^a u_n^2(r)dr + i \frac{u_n^2(a)}{2k_n} = 1, \quad (\text{A.16})$$

que proporciona la condición de normalización de los estados resonantes.

Apéndice B

Cálculo de los residuos en los polos de la Función de Green

Partiendo de la distribución en el plano k' . Considérese un contorno cerrado de radio R , que se recorre en sentido horario; dentro del contorno se tiene un número n de polos que son rodeados, cada uno, en sentido antihorario, como se muestra en la figura B.1.

Entonces, la integral correspondiente al contorno es

$$J = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma} \frac{G^+(r, r'; k') dk'}{k' - k} = 0, \quad (\text{B.1})$$

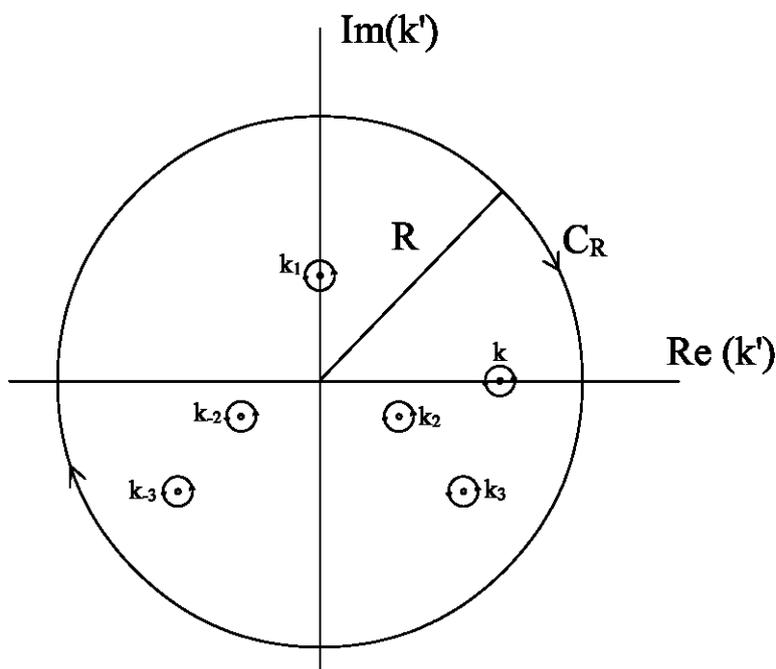


Figura B.1: Contorno en el plano complejo k' con el que se hace el cálculo de los residuos en los polos de la función de Green.

donde $\Upsilon = C_R + \sum_n C_n + C_k$; el polo k se encuentra, sobre el eje real positivo y la posición de los polos k_n es determinada por los parámetros del potencial.

Las contribuciones que se asocian a cada contorno son:

$$J = \frac{1}{2\pi i} \left\{ - \int_{C_R} \frac{G^+(r, r'; k') dk'}{k' - k} + \sum_n \int_{C_n} \frac{G^+(r, r'; k') dk'}{k' - k} + \int_{C_k} \frac{G^+(r, r'; k') dk'}{k' - k} \right\} = 0, \quad (\text{B.2})$$

el residuo en el polo k' es

$$\lim_{k' \rightarrow k} (k' - k) \left[\frac{G^+(r, r'; k')}{k' - k} \right] = G^+(r, r'; k), \quad (\text{B.3})$$

entonces

$$G^+(r, r'; k) = -\frac{1}{2\pi i} \sum_n \int_{C_n} \frac{G^+(r, r'; k') dk'}{k' - k} + \frac{1}{2\pi i} \int_{C_R} \frac{G^+(r, r'; k') dk'}{k' - k}; \quad (\text{B.4})$$

(B.4) significa que es posible expresar la función de Green asociada a un valor real de k como un desarrollo en términos de la contribución proveniente de cada polo y la proveniente del contorno C_R .

Ahora, dado que la función $G^+(r, r'; k)$ tiene polos en los valores k_n , se puede definir el residuo

$$r_n(r, r') = \lim_{k' \rightarrow k_n} (k' - k_n) \left[\frac{G^+(r, r'; k')}{k' - k} \right]; \quad (\text{B.5})$$

la función $G^+(r, r'; k)$ puede expresarse, en la vecindad de los polos, como

$$G^+(r, r'; k) \simeq \frac{r_n(r, r')}{k' - k_n} + \chi(r, r'; k'), \quad (\text{B.6})$$

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

$$\begin{aligned} \lim_{k' \rightarrow k_n} (k' - k_n) \left[\frac{1}{k' - k} \frac{r_n(r, r')}{k' - k_n} + \chi(r, r') \right] &= \\ &= \frac{1}{k_n - k} r_n(r, r') \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

por lo que (B.4) puede reescribirse como

$$G^+(r, r'; k) = \sum_n \frac{r_n(r, r')}{k - k_n} + \frac{1}{2\pi i} \int_{C_R} \frac{G^+(r, r'; k') dk'}{k' - k}. \quad (\text{B.8})$$

La función $G^+(r, r'; k) \rightarrow 0$ cuando $|R| \rightarrow \infty$ si y sólo si $(r, r') < a$ excepto si $r = r' = a$, por lo que puede conseguirse un desarrollo de la forma

$$G^+(r, r'; k) = \sum_{-\infty}^{\infty} \frac{r_n}{k - k_n} \quad (\text{B.9})$$

A continuación se hará el cálculo con el que se determinará el valor del residuo r_n . Partiendo de

$$G^{+''}(r, r'; k) + [k^2 - V(r)]G^+(r, r'; k) = \delta(r - r'), \quad (\text{B.10})$$

con condiciones en la frontera

$$\begin{cases} G^+(0, r'; k) = 0 \\ G^{+'}(a, r'; k) = ikG^+(a, r'; k). \end{cases} \quad (\text{B.11})$$

Como ya se mencionó, (B.6) en la cercanía del polo es

$$G^+(r, r'; k) \simeq \frac{r_n(r, r')}{k - k_n} + \chi(r, r'; k);$$

sustituyendo (B.6) en (B.10) y sumando y restando $k_n^2 C_n / k - k_n$ de la operación anterior se puede aplicar el límite $k \rightarrow k_n$ y tener que

$$\begin{cases} r_n''(r, r') + (k^2 - V)r_n(r, r') = 0 \\ \chi''(r, r'; k_n) + (k^2 - V)\chi(r, r'; k_n) + 2k_n r_n(r, r') = \delta(r - r') \end{cases} \quad (\text{B.12})$$

luego, volviendo a sustituir (B.6) en la primera de las condiciones en la frontera con $r = 0$, se tiene

$$\frac{1}{k - k_n} r_n(0, r') + \chi(0, r'; k) = 0, \quad (\text{B.13})$$

por lo que

$$\begin{cases} r_n(0, r') = 0 \\ \chi(0, r'; k) = 0. \end{cases} \quad (\text{B.14})$$

Sustituyendo (B.6) y agregando $\pm \frac{ik_n r_n(a, r')}{k - k_n}$ en la segunda de las condiciones en la frontera, se obtienen las ecuaciones

$$\begin{cases} r_n'(a, r') - ik_n r_n(a, r') = 0 \\ \chi'(a, r'; k_n) - ir_n(a, r') - ik_n \chi(a, r'; k_n) = 0 \end{cases} \quad (\text{B.15})$$

de donde puede verse que

$$r_n(r, r') = u_n(r)P(r'), \quad (\text{B.16})$$

entonces

$$\chi''(r, r'; k_n) + (k_n^2 - V)\chi(r, r'; k_n) + 2k_n r_n(r, r') = \delta(r - r') \quad (\text{B.17})$$

con condiciones en la frontera

$$\begin{cases} \chi(0, r'; k_n) = 0 \\ \chi'(a, r'; k_n) - ik_n\chi(a, r'; k_n) - ir_n(a, r') = 0. \end{cases} \quad (\text{B.18})$$

Multiplicando la segunda ecuación de (B.12) por u_n , $u_n''(r) + (k_n^2 - V)u_n(r) = 0$ por $\chi(r, r'; k_n)$ e integrando de 0 a a , se tiene que

$$P(r') = \frac{u_n(r')}{2k_n \left(\int_0^a u_n^2(r) dr + \frac{i u_n^2(a)}{2k_n} \right)} \quad (\text{B.19})$$

y sustituyendo en (B.16)

$$r_n(r, r') = \frac{u_n(r)u_n(r')}{2k_n \left(\int_0^a u_n^2(r) dr + i \frac{u_n^2(a)}{2k_n} \right)} \quad (\text{B.20})$$

donde se identifica la condición de normalización (A.16) con lo que (B.9) puede reescribirse como

$$G^+(r, r'; k) = \sum_{-\infty}^{\infty} \frac{u_n(r)u_n(r')}{2k_n(k - k_n)}. \quad (\text{B.21})$$

Apéndice C

Completez de los Estados Resonantes

Una vez obtenida la expresión (B.21), puede sustituirse en (B.10):

$$\begin{aligned} \sum_{-\infty}^{\infty} \frac{u_n''(r)u_n(r')}{2k_n(k-k_n)} + [k^2 - V(r)] \sum_{-\infty}^{\infty} \frac{u_n(r)u_n(r')}{2k_n(k-k_n)} = \\ = \sum_{-\infty}^{\infty} \frac{u_n(r')}{2k_n(k-k_n)} [u_n''(r) + (k^2 - V(r))u_n(r)] = \delta(r-r'), \end{aligned} \quad (\text{C.1})$$

sumando y restando $k_n^2 u_n(r)$ en (C.1):

$$\sum_{-\infty}^{\infty} \frac{u_n(r')}{2k_n(k-k_n)} \left[\underbrace{u_n''(r) + [k_n^2 - V(r)] u_n(r)}_0 + (k^2 - k_n^2)u_n \right] = \delta(r-r'),$$

reescribiendo,

$$\frac{k}{2} \sum_{-\infty}^{\infty} \frac{u_n(r)u_n(r')}{k_n} + \frac{1}{2} \sum_{-\infty}^{\infty} u_n(r)u_n(r') = \delta(r-r'), \quad (\text{C.2})$$

la expresión (C.2) es claramente inconsistente debido a la dependencia de k en el primer término del lado izquierdo, a menos que se cumplan las siguientes relaciones [17]

$$\sum_{-\infty}^{\infty} \frac{u_n(r)u_n(r')}{k_n} = 0 \quad (\text{C.3a})$$

$$\frac{1}{2} \sum_{-\infty}^{\infty} u_n(r)u_n(r') = \delta(r-r'). \quad (\text{C.3b})$$

La ecuación (C.3a) indica que el conjunto de estados ligados, antiligados y resonantes es linealmente dependiente. Por otro lado, la ecuación (C.3b) establece el hecho de que el conjunto de las funciones obedece a una relación de cerradura modificada. Esto demuestra que los estados resonantes forman una base completa.

Apéndice D

Las reglas de suma

Como ya se ha mencionado, los polos del tercer cuadrante se relacionan con los polos del cuarto cuadrante mediante $k_{-n} = -k_n^*$, por lo que la segunda relación de (1.11b) puede expresarse como

$$\frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \left[\frac{u_n(r)u_n(r') + u_n^*(r)u_n^*(r')}{2\text{Re}[u_n(r)u_n(r')]} \right] = \delta(r - r'),$$

lo que implica que

$$\text{Re} \sum_{n=1}^{\infty} u_n(r)u_n(r') = \delta(r - r'); \quad (\text{D.1})$$

análogamente, (1.11a) puede expresarse como sigue

$$\sum_{n=1}^{\infty} \left[\frac{u_n(r)u_n(r')}{k_n} - \frac{u_n^*(r)u_n^*(r')}{k_n^*} \right] = 0, \quad (\text{D.2})$$

de modo que

$$\text{Im} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{u_n(r)u_n(r')}{k_n} = 0. \quad (\text{D.3})$$

Ahora, supóngase que se tiene una función $F(r)$, tal que

$$F(r) = \frac{1}{2} \sum_{-\infty}^{\infty} C_n u_n(r); \quad r \leq a \quad (\text{D.4})$$

con

$$C_n = \int_0^a F(r') u_n(r') dr', \quad (\text{D.5})$$

entonces,

$$\sum_{-\infty}^{\infty} \frac{C_n \bar{C}_n}{k_n} = 0 \quad (\text{D.6})$$

siendo

$$\bar{C}_n = \int F^*(r)u_n(r)dr. \quad (D.7)$$

Puede multiplicarse $F(r)$ por $F^*(r)$ e integrar:

$$\int_0^a F^*(r)F(r)dr, \quad (D.8)$$

supóngase que (D.8) se normaliza a la unidad, esto implica que

$$\int_0^a F^*(r)F(r)dr = \frac{1}{2} \sum_{-\infty}^{\infty} C_n \bar{C}_n = 1. \quad (D.9)$$

(D.6) y (D.9) pueden reescribirse, respectivamente, como

$$Im \sum_{n=1}^{\infty} \frac{C_n \bar{C}_n}{k_n} = 0 \quad (D.10)$$

y

$$Re \sum_{n=1}^{\infty} C_n \bar{C}_n = 1. \quad (D.11)$$

Al introducir, en el lugar de $F(r)$, una función de onda $\psi(r, 0)$ que represente un estado inicial de una partícula confinada en la región interna de un potencial de alcance finito, las expresiones (D.5) y (D.7) proporcionan los coeficientes de desarrollo.

El empleo de (D.10) y (D.11) permite verificar la consistencia en la descripción de la solución de problemas en los que se aplica el formalismo de los estados resonantes. En cuanto a su interpretación física, el problema aún está abierto.

Apéndice E

Coeficientes de Desarrollo

A continuación, se hará el cálculo de los coeficientes de desarrollo C_n y \bar{C}_n , definidos por

$$C_n = \int_0^a \psi(r, 0) u_n(r) dr \quad y \quad \bar{C}_n = \int_0^a \psi^*(r, 0) u_n(r) dr. \quad (\text{E.1})$$

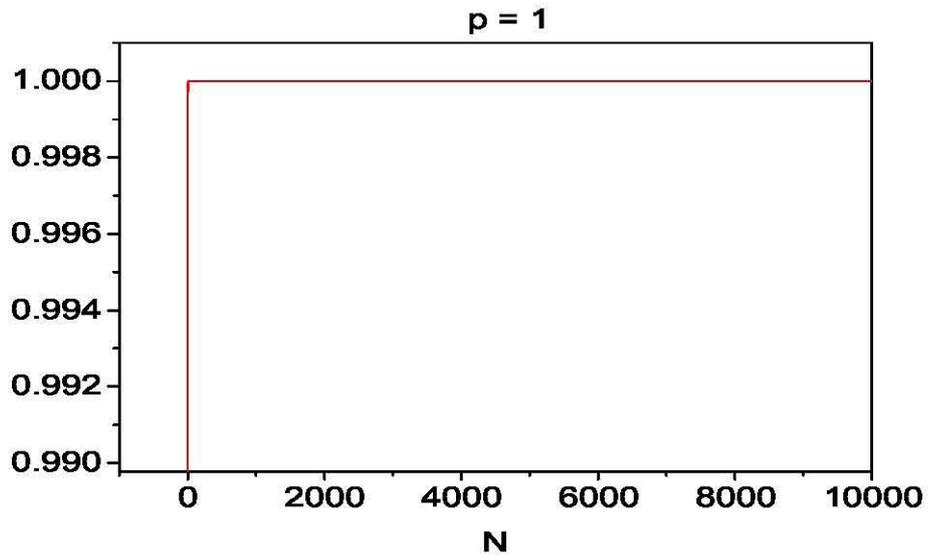
Entonces, para el primer caso:

$$C_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \sqrt{\frac{2(a\lambda - 2ik_n a)}{a(1 + a\lambda - 2ik_n a)}} \int_0^a \text{sen}(kr) \text{sen}(k_n r) dr, \quad (\text{E.2})$$

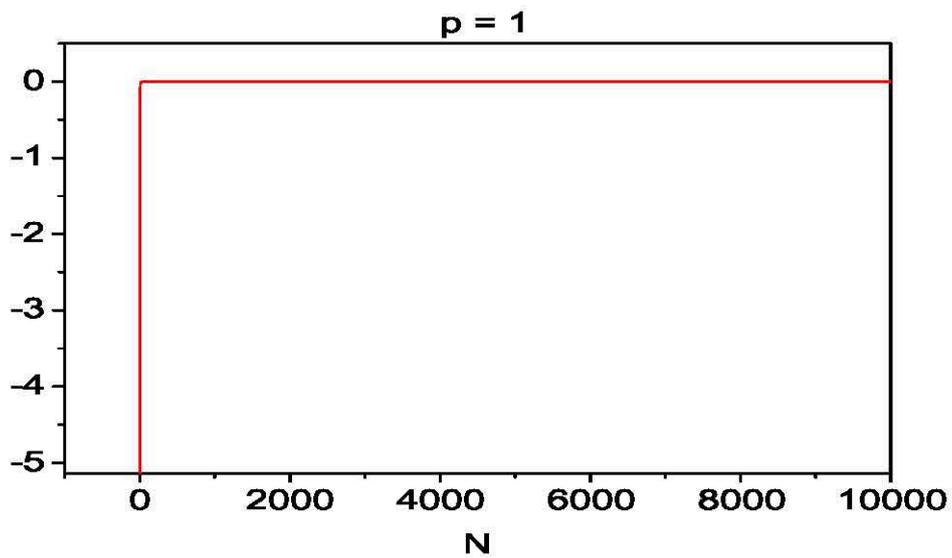
desarrollando la integral, aplicando identidades trigonométricas y dado que $\psi(r, 0) = \psi^*(r, 0)$, se tiene:

$$C_n = \bar{C}_n = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2}{a}} \left[\frac{2(a\lambda - 2ik_n a)}{a(1 + a\lambda - 2ik_n a)} \right]^{1/2} \left[\frac{\text{sen}[(k - k_n)a]}{k - k_n} - \frac{\text{sen}[(k + k_n)a]}{k + k_n} \right]. \quad (\text{E.3})$$

Una vez obtenida la expresión (E.3) puede aplicarse en (D.10) y (D.11) para verificar la consistencia del cálculo (figura E.1).



(a)



(b)

Figura E.1: (a) muestra el resultado de evaluar (D.11) desde $n = 1$ hasta $N = 10000$, obteniéndose un valor de 0.99999997215431413 ; (b) muestra el resultado de evaluar (D.10) desde $n = 1$ hasta $N = 10000$, obteniéndose un valor de -6.8×10^{-10} . En ambos casos se hace el cálculo para el estado base ($p = 1$) y se verifica la consistencia del cálculo de los coeficientes de desarrollo.

De igual manera, se procederá a calcular los coeficientes de desarrollo para el caso 2.

Sustituyendo el estado inicial $\psi \left(\left[\frac{2a}{5}, \frac{3a}{5} \right], 0 \right) = \sqrt{\frac{10}{a}} \operatorname{sen} \left[\frac{5\pi(2p-1)}{a} \left(r - \frac{a}{2} \right) + \frac{\pi}{2} \right]$ y $u_n(r)$ en la expresión (E.1)

$$C_n = \sqrt{\frac{10}{a}} \sqrt{\frac{2(a\lambda - 2ik_n a)}{a(1 + a\lambda - 2ik_n a)}} \int_0^a \operatorname{sen} \left[\frac{5\pi(2p-1)}{a} \left(r - \frac{a}{2} \right) + \frac{\pi}{2} \right] \operatorname{sen}(k_n r) dr. \quad (\text{E.4})$$

Nuevamente, desarrollando la integral y aplicando identidades trigonométricas, se obtiene

$$C_n = \bar{C}_n = \sqrt{\frac{10}{a}} \sqrt{\frac{2(a\lambda - 2ik_n a)}{a(1 + a\lambda - 2ik_n a)}} \left(\frac{1}{k - k_n} [L - M] + \frac{1}{k + k_n} [N - O] \right), \quad (\text{E.5})$$

donde

$$k = \frac{5\pi(2p-1)}{a}$$

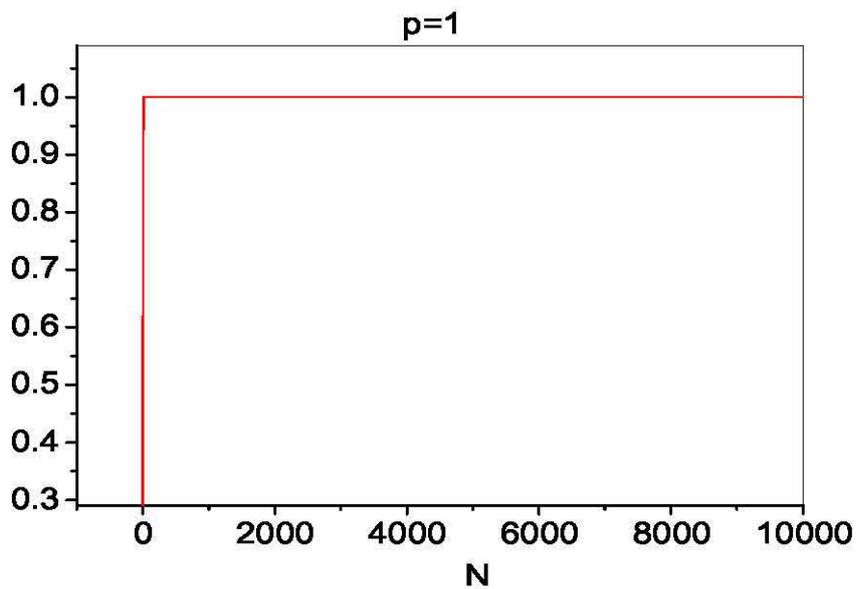
$$L = \operatorname{sen} \left(\frac{5(\pi - ak) + 6a(k - k_n)}{10} \right)$$

$$M = \operatorname{sen} \left(\frac{5(\pi - ak) + 4a(k - k_n)}{10} \right)$$

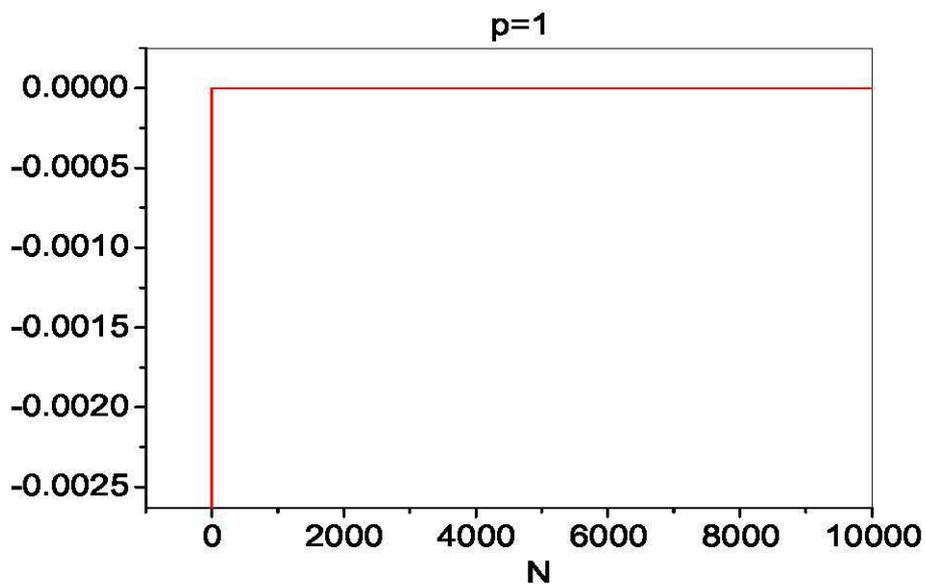
$$N = \operatorname{sen} \left(\frac{5(\pi - ak) + 4a(k + k_n)}{10} \right)$$

$$O = \operatorname{sen} \left(\frac{5(\pi - ak) + 6a(k + k_n)}{10} \right).$$

Una vez obtenida la expresión(E.5) puede aplicarse en (D.10) y (D.11) para verificar la consistencia del cálculo (figura E.2).



(a)



(b)

Figura E.2: (a) muestra el resultado de evaluar (D.11) desde $n = 1$ hasta $N = 10000$, obteniéndose un valor de 0.99999997209807101 ; (b) muestra el resultado de evaluar (D.10) desde $n = 1$ hasta $N = 10000$, obteniéndose un valor de -1.4×10^{-12} . En ambos casos se hace el cálculo para el estado base ($p = 1$) y se verifica la consistencia del cálculo de los coeficientes de desarrollo.

Bibliografía

- [1] G. Gamow, "Zur quantentheorie des atomkernes," *Z. Phys.*, vol. 51, pp. 204–212, 1928.
- [2] G. García-Calderón and A. Rubio, "Characteristic time for resonant tunneling in one dimension," *Phys. Rev. B*, vol. 36, 8, p. 4462, 1987.
- [3] G. García-Calderón, J. L. Mateos, and M. Moshinsky, "Resonant spectra and the time evolution of the survival and nonescape probabilities," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 74, pp. 337–340, 1995.
- [4] G. García-Calderón and J. Villavicencio, "Transient time-domain resonances and the time scale for tunneling," *Phys. Rev. A*, vol. 68, p. 052107, 2003.
- [5] G. García-Calderón and J. Villavicencio, "Full-time nonexponential decay in double-barrier quantum structures," *Phys. Rev. A*, vol. 73, p. 062115, 2006.
- [6] G. García-Calderón, I. Maldonado, and J. Villavicencio, "Resonant-sates expansions and the long-time behavior of quantum decay," *Phys. Rev. A*, vol. 76, p. 012103, 2007.
- [7] A. F. J. Siegert, "On the derivation of the dispersion formula for nuclear reactions," *Phys. Rev.*, vol. 56, p. 750, 1939.
- [8] L. A. Khal'fin, "Contribution to the decay theory of a quasi-stationary state," *Sov. Phys.-JETP*, vol. 6, p. 1053, 1958.
- [9] L. A. Khal'fin, "Phenomenological theory of k^0 mesons and their non-exponential character of the decay," *JETP Lett.*, vol. 8, pp. 65–68, 1968.
- [10] J. Humblet and L. Rosenfeld, "Theory of Nuclear Reactions I. Resonant States and Collision Matrix," *Nuclear Physics*, vol. 26, p. 529, 1961.
- [11] Y. B. Zel'dovich *JETP*, vol. 12, p. 542, 1961.
- [12] T. Berggren, "On the use of resonant states in eigenfunction expansions of scattering and reaction amplitudes.," *Nucl. Phys. A*, vol. 109, pp. 265–287, 1968.

- [13] G. García-Calderón and R. Peierls, "Resonant states and their uses," *Nucl. Phys. A*, vol. 265, no. 3, p. 443, 1976.
- [14] S. Cordero, G. García-Calderón, R. Romo, and J. Villavicencio, "Unified analytical description of the time evolution of decay for initial states formed by wave-packet scattering and by initial decaying states in quantum systems," *Phys. Rev. A*, vol. 84, p. 042118, 2011.
- [15] G. García-Calderón, A. Máttar, and J. Villavicencio, "Hermitian and non hermitian formulations of the time evolution of quantum decay," *Phys. Scr.*, vol. T151, p. 1, 2012.
- [16] A. Máttar, *Equivalencia entre las bases de los estados resonantes y el continuo*. Tesis de Maestría en ciencias (Física), Universidad Nacional Autónoma de México, 2011.
- [17] G. García-Calderón, "Theory of resonant states: An exact analytical approach for open quantum systems," *Adv. Quant. Chem.*, vol. 60, pp. 407 – 455, 2010.
- [18] G. García-Calderón, *Resonant States and the Decay Process: Symmetries in Physics*, ch. 17, p. 252. Springer–Verlag Berlin, 1992.
- [19] S. Cordero and G. García-Calderón, "Analytical study of quadratic and nonquadratic short-time behavior of quantum decay," *Physical Review A*, vol. 86, p. 062116, 2012.
- [20] G. García-Calderón, "Transient effects in quantum decay," *AIP Conference Proceedings*, vol. 1334, pp. 84–122, 2011.
- [21] S. R. Wilkinson, C. F. Bharucha, M. C. Fischer, K. W. Madison, P. R. Morrow, Q. Niu, B. Sundaram, and M. G. Raizen, "Experimental evidence for non-exponential decay in quantum tunnelling," *Nature*, vol. 387, pp. 575–577, 1997.
- [22] C. Rothe, S. I. Hintschich, and A. P. Monkman, "Violation of the exponential decay-law at long times," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 96, p. 163601, 2006.
- [23] M. de Llano, *Mecánica Cuántica*. Facultad de ciencias, UNAM, 2002.
- [24] R. G. Newton, *Scattering Theory of Waves and Particles*. Dover Publications INC., second ed., 2002.
- [25] M. Moshinsky, "Diffraction in time," *Phys. Rev.*, vol. 88, p. 626, 1952.
- [26] V. N. Faddeyeva and M. N. Terentev, *Tables of values of the function $\omega(z) = e^{-z^2} \left(1 + \frac{2i}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{t^2} dt\right)$, for complex argument*. Edited by Academician V. A. Fock, printed in Great Britain by Pergamon Printing & Art Services LTD. London, 1961.
- [27] M. Abramowitz and I. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions*. Dover, N. Y., 1968.