

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE BAJA CALIFORNIA  
FACULTAD DE CIENCIAS



DISPERSIÓN POR POTENCIALES UNIDIMENSIONALES DE  
PAQUETES DE ONDA GAUSSIANOS TRUNCADOS

TESIS

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE

FÍSICO

PRESENTA

ELMER CRUZ MENDOZA

Ensenada, Baja California

Junio de 2006

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE BAJA CALIFORNIA

FACULTAD DE CIENCIAS

DISPERSIÓN POR POTENCIALES UNIDIMENSIONALES DE  
PAQUETES DE ONDA GAUSSIANOS TRUNCADOS

TESIS PROFESIONAL

QUE PRESENTA

ELMER CRUZ MENDOZA

APROBADO POR:



---

DR. JORGE ALBERTO VILLAVICENCIO AGUILAR

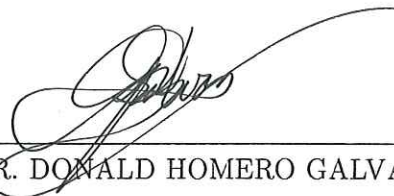
PRESIDENTE DEL JURADO



---

DR. ROBERTO ROMO MARTÍNEZ

SECRETARIO



---

DR. DONALD HOMERO GALVÁN MARTÍNEZ

1 ER. VOCAL

RESUMEN de la tesis que como requisito parcial para la obtención de la Licenciatura en Física presenta Elmer Cruz Mendoza. Ensenada, Baja California, México. Junio de 2006.

## DISPERSIÓN POR POTENCIALES UNIDIMENSIONALES DE PAQUETES DE ONDA GAUSSIANOS TRUNCADOS

Resumen aprobado por:



---

DR. JORGE ALBERTO VILLAVICENCIO AGUILAR

DIRECTOR DE TESIS



---

DR. ROBERTO ROMO MARTÍNEZ

DIRECTOR DE TESIS

En el presente trabajo se desarrolla y aplica un formalismo que permite describir la dinámica de paquetes gaussianos truncados en el caso libre y en presencia de potenciales unidimensionales de alcance finito. Dicho formalismo se fundamenta en un desarrollo en estados del continuo que permite en general obtener una representación integral de la función de onda dependiente del tiempo. Se demuestra que la evolución temporal y espacial de los paquetes gaussianos está gobernada por el grado de truncamiento, el cual está caracterizado por la razón  $|x_0/\sigma|$ , donde  $x_0$  es la posición del centroide y  $\sigma$  es la dispersión espacial del mismo. Esto permite identificar dos regímenes: el de máximo truncamiento  $|x_0/\sigma| < 1$  y el de mínimo truncamiento  $|x_0/\sigma| > 1$ . En el caso de propagación libre se demuestra que en la situación de mínimo truncamiento, la dinámica de los paquetes truncados es idéntica a la de los paquetes gaussianos exactos. Además, en este caso se obtiene una expresión analítica exacta para describir la dinámica de estos estados cuánticos. En el caso de potenciales unidimensionales, se obtiene una representación integral que permite describir la propagación en la región de transmisión. Se demuestra que en el caso particular de una barrera de potencial transparente en el límite de energías cercanas al umbral, es posible obtener una expresión analítica exacta para describir los fenómenos transitorios asociados a los paquetes gaussianos.

## Dedicatoria

Dedico este trabajo a mi padre Atenógenes Cruz, mi madre María F. Mendoza, a Aney, a Sury, al Mike, a mis abuelitos, a Ferni, a Mayboca y a todos aquellos con los que he compartido tantos momentos bellos.

## Agradecimientos

Agradezco enormemente a los Doctores Jorge Villavicencio y Roberto Romo por todo el apoyo brindado para el desarrollo de la tesis, así como por la amistad generada. Así también agradezco a mis sinodales. También agradezco todo el apoyo de mi familia y amigos, ya que sin ellos me hubiera vuelto loco. Agradezco enormemente a Mini por su apoyo en la elaboración de este material y sobre todo por su amistad. Pero sobre todo un profundo agradecimiento a Dios por permitirme realizar este bonito sueño. Agradezco el apoyo recibido mediante una beca-tesis a través del Proyecto de Investigación-UABC de la 8va. Convocatoria Interna, intitulado *tunelaje cuántico en heteroestructuras semiconductoras*.

# Contenido

<b>1</b>	<b>INTRODUCCIÓN</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>FORMALISMO</b>	<b>5</b>
2.1	El paquete gaussiano truncado libre . . . . .	6
2.2	Dispersión de un paquete gaussiano por un potencial de alcance finito $V(x)$ .	10
2.3	La normalización de los paquetes gaussianos truncados . . . . .	13
<b>3</b>	<b>FÓRMULAS ANALÍTICAS PARA LA EVOLUCIÓN DE PAQUETES GAUSSIANOS TRUNCADOS</b>	<b>16</b>
3.1	El paquete gaussiano truncado libre . . . . .	17
3.2	Dispersión de un paquete gaussiano truncado: fórmula analítica para el caso de barreras transparentes. . . . .	23
<b>4</b>	<b>EVOLUCIÓN TEMPORAL Y PROPAGACIÓN DEL PAQUETE GAUS- SIANO TRUNCADO LIBRE</b>	<b>27</b>
4.1	El paquete gaussiano truncado en el espacio de momentos . . . . .	28
4.2	Propagación espacial del paquete gaussiano truncado . . . . .	30
4.2.1	Régimen de truncamiento pequeño $ x_0/\sigma  > 1$ . . . . .	31
4.2.2	Régimen de truncamiento grande ( $ x_0/\sigma  < 1$ ) . . . . .	37

4.3	Evolución temporal del paquete gaussiano truncado . . . . .	40
4.3.1	Régimen de truncamiento pequeño ( $ x_0/\sigma  > 1$ ) . . . . .	40
4.3.2	Régimen de truncamiento grande ( $ x_0/\sigma  < 1$ ) . . . . .	42
<b>5</b>	<b>PAQUETE GAUSSIANO TRUNCADO INCIDIENDO SOBRE UNA BARRERA DE POTENCIAL</b>	<b>45</b>
5.1	Evolución de paquetes gaussianos incidiendo sobre una barrera de potencial	45
5.1.1	Paquete gaussiano truncado dispersado por una barrera como función de la posición . . . . .	47
5.1.2	Paquete gaussiano dispersado por una barrera de potencial como función del tiempo . . . . .	48
5.2	Comparación de la solución analítica e integral para el caso de barreras transparentes . . . . .	50
5.2.1	Solución analítica vs integral como función de la posición . . . . .	50
5.2.2	Solución analítica vs integral como función del tiempo . . . . .	52
<b>6</b>	<b>CONCLUSIONES</b>	<b>54</b>
	<b>APÉNDICE A. Evolución del paquete gaussiano libre</b>	<b>58</b>
	<b>APÉNDICE B. La amplitud de transmisión para una barrera de potencial</b>	<b>61</b>

## Lista de Figuras

1	El modelo de obturador cuántico. El paquete gaussiano truncado a $t = 0$ .	7
2	El paquete gaussiano truncado justo en el momento en que se abre el obturador e interacciona con un potencial $V(y)$ .	11
3	Grado de truncamiento del estado inicial. Se ilustran los casos de truncamiento pequeño $ x_0/\sigma  > 1$ y truncamiento grande $ x_0/\sigma  < 1$ , respectivamente.	28
4	El paquete gaussiano truncado (línea a trazos) y el paquete gaussiano exacto (línea continua) en el espacio de momentos. En (a) $x_0 = -25 \text{ \AA}$ y $\sigma = 5 \text{ \AA}$ ( $ x_0/\sigma  > 1$ ) y en (b) $x_0 = -20 \text{ \AA}$ y $\sigma = 30 \text{ \AA}$ ( $ x_0/\sigma  < 1$ ). Obsérvese que a mayor $\sigma$ , menor es la dispersión en el espacio de momentos. Además, observamos que el paquete truncado exhibe una mayor dispersión y una menor amplitud que el paquete exacto en el régimen $ x_0/\sigma  < 1$ .	29
5	Densidad de probabilidad de los paquetes gaussianos truncado y exacto. La curva que contienen círculos corresponde al paquete gaussiano exacto, las líneas a trazos y continua corresponden al paquete gaussiano truncado, en su forma analítica $ \Psi_{0+} ^2$ e integral $ \Psi_0 ^2$ respectivamente. Las tres curvas coinciden entre sí.	32

- 6 Densidad de probabilidad del paquete gaussiano truncado vs exacto, a diferentes tiempos. La línea continua corresponde a la solución integral, la línea punteada a la solución analítica y la línea a trazos para el paquete exacto. Se utilizan los parámetros  $E_0 = 1.0$  eV,  $\sigma = 5.0$  Å y  $x_0 = -25.0$  Å. Se observa un traslape de los paquetes a todo tiempo. Los máximos los podemos localizar en  $x = v_{sc}t$ , donde  $v_{sc}$  es la velocidad semiclásica del paquete. . . . . 33
- 7 comparación de la solución analítica  $\Psi_{0+}$  vs  $\Psi_L$ . Parámetros:  $E_0 = 1$  eV,  $x_0 = -25$  Å,  $\sigma = 5$  Å,  $t = 1$  fs. Bajo las condiciones de truncamiento pequeño, se puede observar que ambas soluciones tienen el mismo comportamiento. . . . . 34
- 8 Comparación de las densidades de probabilidad del paquete gaussiano exacto con las soluciones analítica e integral para el paquete gaussiano truncado libre en el régimen de truncamiento pequeño,  $|x_0/\sigma| > 1$ . La solución analítica está representada con línea a puntos, con línea a trazos la solución integral y el paquete gaussiano exacto con línea continua. Obsérvese el traslape de las dos soluciones a diferentes tiempos. . . . . 35
- 9 Comparación de las soluciones analítica (línea continua) e integral (línea a trazos), para el paquete gaussiano truncado libre. Se puede observar que ambas soluciones presentan efectos transitorios a  $t=0.0001$  fs. . . . . 37

- 10 Secuencia de gráficas que muestran la densidad de probabilidad,  $|\Psi|^2$ , correspondiente a los paquetes truncado (línea continua) y exacto (línea a trazos) como función de la posición a diferentes tiempos, los cuales se encuentran especificados en cada gráfica. (a) Al inicio el paquete truncado exhibe una notable distorsión en la vecindad del obturador ( $x = 0$ ), (b) y ésta se manifiesta en todo el paquete. (c) Las oscilaciones disminuyen en frecuencia y la curva se hace más suave conforme transcurre el tiempo, adoptando finalmente una forma gaussiana distorsionada (d). . . . . 39
- 11 Evolución temporal de las densidades de probabilidad, para  $x = 5.0 \text{ \AA}$ ,  $50.0 \text{ \AA}$  y  $100.0 \text{ \AA}$ . Las líneas continua y punteada correspondientes al paquete truncado, integral y analítico respectivamente, así como la línea a trazos asignada al paquete gaussiano exacto. Se traslapan totalmente en las diferentes posiciones,  $x$ . . . . . 41
- 12 Densidad de probabilidad del paquete truncado (línea continua) vs exacto (línea a trazos) como función del tiempo, en las posiciones  $x = 5 \text{ \AA}$  (a) y  $x = 100 \text{ \AA}$  (b). En (a) se observa que para  $x$  pequeñas el paquete truncado exhibe una amplitud mayor en comparación con el paquete exacto. Y en (b), la amplitud del paquete gaussiano decrece para  $x$  grandes. . . . . 43
- 13 Paquete gaussiano truncado incidiendo sobre una barrera de potencial. La energía de incidencia es mucho menor que la intensidad de la barrera, de tal forma que  $E_0/V_0 \ll 1$ . . . . . 46

- 14 Transmisión del paquete gaussiano centrado en  $x_0 = -45 \text{ \AA}$  y dispersión  $\sigma = 5 \text{ \AA}$ , como función de la posición. Para diferentes tiempos el paquete se desplaza y su dispersión aumenta, lo cual hace que el máximo de la densidad de probabilidad disminuya. . . . . 47
- 15 Transmisión del paquete gaussiano centrado en  $x_0 = -45 \text{ \AA}$  y dispersión  $\sigma = 5 \text{ \AA}$ , como función del tiempo. Para diferentes posiciones el paquete se desplaza y su dispersión aumenta, la serie de curvas nos muestra como evoluciona la densidad de probabilidad del paquete transmitido. . . . . 49
- 16 Transmisión de un paquete gaussiano que interacciona con una barrera de potencial transparente ( $\alpha < 1$ ). La línea continua representa la solución integral, mientras que la línea a trazos representa la solución analítica. Obsérvese que a  $t = 100 \text{ fs}$  hay traslape de ambas soluciones. . . . . 51
- 17 Densidad de probabilidad del paquete transmitido a través de una barrera transparente. Se gráfica la solución analítica (línea a trazos) vs integral (línea continua) como función del tiempo, en  $x = 1000 \text{ \AA}$ . Se puede observar que ambas densidades de probabilidad tienen el mismo comportamiento en  $x = 1000 \text{ \AA}$ . . . . . 52
- 18 Paquete gaussiano definido en la región  $-\infty \leq y \leq \infty$ , con una dispersión espacial  $\sigma$  y momento  $p_0 = \hbar k_0$ . . . . . 59
- 19 El problema de dispersión para una barrera de potencial de altura  $V_0$  y anchura  $L$ . . . . . 61

## Capítulo 1

# INTRODUCCIÓN

Uno de los modelos paradigmáticos frecuentemente utilizados en los textos de mecánica cuántica (Cohen, 1977) para describir los procesos de dispersión, es el de un paquete gaussiano interaccionando con una barrera de potencial. Aunque se trata de un modelo relativamente simple, éste ha permitido obtener información acerca de cantidades importantes en los procesos de dispersión, como lo son los coeficientes de transmisión y de reflexión. Más aún, ha permitido estudiar diversos efectos de naturaleza cuántica tales como el tunelaje (Razavy, 2003), el efecto Hartman (Hartman, 1962; Palao J. P., 1997; García-Calderón y Villavicencio, 2002) y los fenómenos de avance y retraso temporales (García-Calderón y Villavicencio, 2002). También ha sido utilizado para ejemplificar o verificar diferentes teorías acerca de cantidades temporales tales como los tiempos de permanencia (Landauer y Martin, 1992; Leavens C. R., 1989) y los tiempos de decaimiento (Muga J. G, 2002), por mencionar algunas.

Este tipo de problemas de dispersión es intrínsecamente de naturaleza dinámica, e involucra la solución de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo con la condición inicial de un paquete gaussiano que describe el estado inicial de la partícula a  $t = 0$ . Sin embargo, como es bien sabido, el planteamiento de este tipo de problemas dependientes del

tiempo conduce complicaciones matemáticas que impiden hacer un tratamiento exacto del problema. Con excepción de la utilización de algunos métodos analíticos aproximados (Hartman, 1962), la solución de este problema de dispersión ha sido abordado mediante métodos numéricos que utilizan las técnicas de transformadas rápidas de Fourier, o el método de diferencias finitas. En este contexto, es importante destacar el trabajo de Goldberg et al. (Goldberg, 1967) quienes fueron los primeros en estudiar el problema de la evolución de paquetes gaussianos utilizando el método de diferencias finitas. Es claro que en muchos casos se pueden obtener soluciones por esta vía, sin embargo estos métodos pueden llegar a ser insuficientes en algunas situaciones debido a que resultan computacionalmente prohibitivos. Estas dificultades pueden evitarse si se cuenta con expresiones analíticas que exhiban de manera transparente el comportamiento de las cantidades físicas relevantes, que permitan realizar análisis asintóticos de las soluciones y obtener las contribuciones más importantes en los distintos límites o regímenes de interés.

Existen en la literatura algunos modelos cuánticos alternativos que permiten explorar problemas de dispersión con base en soluciones analíticas, pero que involucran otro tipo de condiciones iniciales, distintas a la de los paquetes gaussianos. Entre estos se encuentran el problema de dispersión de estados tipo Lorentziano por potenciales delta de Dirac (Elberfeld y Kleber, 1988), así como aquellos que involucran ondas planas truncadas incidiendo sobre escalones (Delgado F. et al., 2002; García-Calderón et al., 2002) y barreras de potencial (Brouard y Muga, 1996; García-Calderón y Villavicencio, 2001; García-Calderón et al., 2003). Todos estos trabajos se basan en un modelo de obturador cuántico para el caso de una partícula libre, introducido originalmente por Moshinsky en 1952 y generalizado al caso

de potenciales unidimensionales de alcance finito por García-Calderón y Rubio en 1997. El modelo de obturador cuántico nos plantea una situación física en donde la función de onda inicial asociada a las partículas que inciden sobre el potencial se encuentra inicialmente confinada a la izquierda del mismo mediante un obturador cuántico localizado en  $x = 0$ . Una vez que el obturador se abre instantáneamente a un tiempo  $t = 0$ , el estado cuántico interacciona con el potencial dando lugar a la evolución de la onda cuántica tanto en la región interna como en la región de transmisión del potencial. Los enfoques basados en el modelo de obturador cuántico han sido herramientas muy útiles para estudiar el comportamiento dinámico de partículas en diversas estructuras cuánticas (García-Calderón y Rubio, 1997; García-Calderón y Villavicencio, 2002; Villavicencio y Romo, 2003).

Es importante mencionar que dichos enfoques son novedosos pues involucran desarrollos de la función de onda dependiente del tiempo en términos de cantidades como los estados resonantes (García-Calderón y Rubio, 1997), los polos de la amplitud de transmisión así como las funciones de error complementarias con argumentos complejos (García-Calderón y Rubio, 1997; Abramowitz y Stegun, 1964; Faddeyeva y Terent'ev, 1961). Aunque ciertamente estos enfoques difieren de los utilizados en la mecánica cuántica convencional, su equivalencia con los más conocidos desarrollos de la función de onda dependiente del tiempo en términos de los estados del continuo, ha sido demostrada recientemente (García-Calderón et al., 2003).

Inspirados en este tipo de conexiones analíticas, en este trabajo de tesis se desarrolla un formalismo que permite describir la evolución temporal de paquetes gaussianos truncados en la región de transmisión de potenciales de alcance finito, utilizando el método del

obturador cuántico. Este planteamiento permite obtener una representación integral de la solución, utilizando un desarrollo de la función de onda en término de los estados del continuo. En algunas situaciones, es posible obtener expresiones analíticas a partir de las funciones integrales, donde la evaluación es mucho más sencilla que resolver la ecuación de Schrödinger a través del método de diferencias finitas como lo hicieron Goldberg et al.. Por lo tanto, otro de nuestros objetivos del presente trabajo de tesis es el de obtener las expresiones analíticas a partir de la representación integral de la función de onda dependiente del tiempo, tanto para el caso libre como el de una barrera de potencial. Con base en estas nuevas expresiones analíticas exploraremos los principales aspectos de la propagación de los paquetes gaussianos truncados. Entre estos se encuentran los aspectos de la evolución espacial y temporal, los fenómenos transitorios, así como la transición del régimen dependiente del tiempo al estacionario. Este estudio nos permitirá caracterizar los regímenes de validez de nuestra nueva herramienta analítica así como su aplicabilidad en sistemas de potenciales con diversas geometrías. Cabe señalar que el utilizar paquetes gaussianos permite realizar diversos estudios dinámicos como se haría con ondas planas. Sin embargo, a diferencia de las ondas planas, el centroide del paquete gaussiano en el espacio de posiciones se propaga con velocidad semiclásica, la cual está determinada por la energía de incidencia. Además, se sabe que si consideramos el caso de un paquete muy ancho en el espacio de posiciones, éste tendrá una dispersión muy pequeña en el espacio de momentos, con lo cual se recupera el régimen de onda plana.

## Capítulo 2

### FORMALISMO

En el presente capítulo desarrollaremos una herramienta analítica que nos permitirá estudiar la dinámica de un paquete gaussiano inicialmente truncado en el espacio, i.e. un paquete definido en el semiespacio  $y \leq 0$ . El problema involucra la solución de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo con la condición inicial de obturador cuántico, obteniendo una representación integral de la función de onda dependiente del tiempo en la región de transmisión de un potencial de alcance finito. Dicha representación se obtiene utilizando un desarrollo de la función de onda en términos de estados del continuo. Es importante mencionar que el desarrollo del presente formalismo es una de las principales aportaciones del trabajo de tesis.

En la Sec. 2.1 obtendremos la representación integral de la función dependiente del tiempo para el caso de un paquete gaussiano truncado libre. En la Sec. 2.2 obtendremos la representación integral de la función de onda para describir la evolución temporal y espacial de un paquete gaussiano truncado en la región de transmisión de un potencial. Los aspectos de la normalización relacionados con el paquete gaussiano inicial se presentan en la Sec. 2.3.

## 2.1 El paquete gaussiano truncado libre

Nuestro modelo puede visualizarse como un *gedankenexperiment* que consiste en un obturador cuántico situado en  $y = 0$ , el cual confina inicialmente a un paquete gaussiano en la región del semi espacio  $y < 0$ , ver Fig.1. Esto ocurre inicialmente a un tiempo  $t = 0$ , donde el estado inicial  $\Psi(y, t = 0)$ , está descrito por

$$\Psi(y, 0) = \begin{cases} Ae^{ik_0y} e^{-\frac{(y-y_0)^2}{4a^2}} & \text{para } y \leq 0, \\ 0, & \text{para } y > 0. \end{cases} \quad (1)$$

El paquete gaussiano truncado posee una dispersión espacial  $\sigma$  y su centroide se propaga con un momento inicial promedio  $\hbar k_0$ . La posición inicial del centroide es  $y = y_0$ , y  $A$  es la constante de normalización. Una vez que el obturador es abierto instantáneamente a un tiempo  $t = 0$ , el paquete evoluciona libremente en la región  $y > 0$ .

La evolución temporal del paquete gaussiano truncado involucra la solución de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(y, t)}{\partial y^2} = i\hbar \frac{\partial \Psi(y, t)}{\partial t}, \quad (2)$$

con la condición inicial dada por la ecuación (1).

Para resolver el problema planteado líneas arriba, utilizaremos un método basado en el desarrollo de la función de onda en estados del continuo. Partiremos de la expresión general

$$\Psi_0(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dy K_0(x, y, t) \Psi(y, 0), \quad (3)$$

la cual nos da la relación que hay entre el estado inicial  $\Psi(y, 0)$  y las funciones de onda  $\Psi(x, t)$  a un tiempo posterior. El subíndice cero se utiliza por tratarse del caso libre.

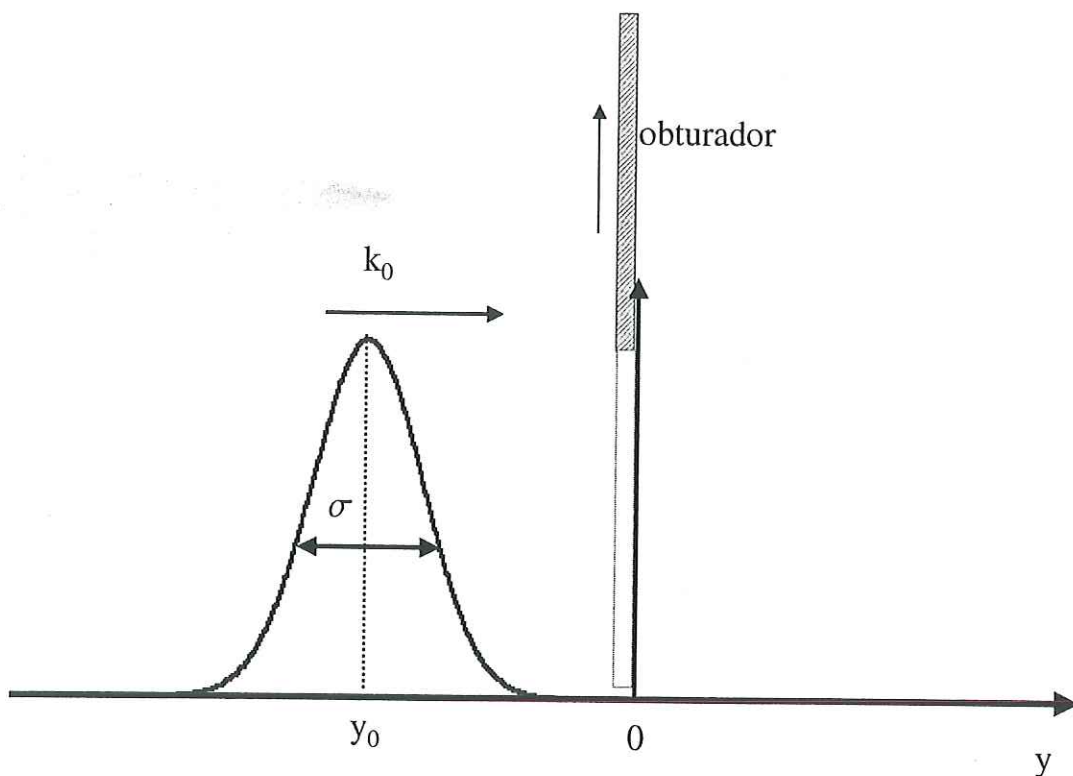


FIGURA 1.- El modelo de obturador cuántico. El paquete gaussiano truncado a  $t = 0$ .

La función  $K_0(x, y, t)$  es el propagador del sistema, el cual representa la amplitud de probabilidad de que una partícula inicialmente localizada en  $y$  a un tiempo  $t = 0$  se propague a una posición  $x$  en un tiempo  $t$ . En nuestro caso utilizaremos el propagador de la partícula libre ya que el paquete se mueve en ausencia de un potencial. La expresión para  $K_0(x, y, t)$  puede obtenerse analíticamente (Shankar, 1980; Schiff, 1968) y está dada por

$$K_0(x, y, t) = \sqrt{\frac{m}{i2\pi\hbar t}} e^{i(x-y)^2 m/2\hbar t}. \quad (4)$$

Por otra parte, sabemos que el estado inicial puede representarse como una suma de

estados del continuo, es decir, mediante una representación en el espacio de momentos (espacio- $k$ ) dada por

$$\Psi_0(y, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk \phi(k) e^{iky}, \quad (5)$$

donde  $\phi(k)$  es la representación función de onda en el espacio- $k$ . Sustituyendo las ecuaciones (4) y (5) en la ecuación (3) obtenemos,

$$\Psi_0(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{\frac{m}{i2\pi\hbar t}} \int_{-\infty}^{\infty} dk \phi(k) \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{iky} e^{i(x-y)^2 m/2\hbar t}. \quad (6)$$

Para evaluar la expresión anterior, realizamos el cambio de variable  $\eta = x - y$ , y utilizamos el resultado conocido para la integral gaussiana  $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-u\eta^2} e^{v\eta} d\eta = \sqrt{\pi/u} \exp(v^2/4u)$ . Esto nos permite escribir,

$$\Psi_0(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk \phi(k) e^{ikx} e^{-ik^2\hbar t/2m}. \quad (7)$$

Para determinar el valor de  $\phi(k)$ , utilizamos la representación dada por

$$\phi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-iky} \Psi(y, 0). \quad (8)$$

Sustituyendo la condición inicial  $\Psi(y, 0)$  dada por la ecuación (1),

$$\phi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} A \int_{-\infty}^0 dy \exp \left\{ -iky + ik_0 y - \frac{(y - y_0)^2}{4\sigma^2} \right\}, \quad (9)$$

y realizando el cambio de variable  $\gamma = -y$ , podemos escribir  $\phi(k)$  de la siguiente manera

$$\phi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} A \int_0^{\infty} d\gamma \exp \left\{ - \left[ \frac{\gamma^2}{4\sigma^2} + 2 \left( \frac{y_0}{4\sigma^2} + i(k_0 - k) \right) \gamma + \frac{y_0^2}{4\sigma^2} \right] \right\}. \quad (10)$$

La integral dada por la ecuación (10) puede ser evaluada con la ayuda de la identidad,

$$\int_0^{\infty} e^{-(\alpha t^2 + 2\beta t + \delta)} dt = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} e^{\frac{\beta^2 - \alpha\delta}{\alpha}} \operatorname{erfc} \left[ \frac{\beta}{\sqrt{\alpha}} \right]. \quad (11)$$

Después de algunas manipulaciones de los coeficientes resultantes, obtenemos la solución exacta para  $\phi(k)$ ,

$$\phi(k) = \frac{A\sqrt{\pi\sigma^2}}{\sqrt{2\pi}} e^{z_0^2} e^{-(y_0/2\sigma)^2} \operatorname{erfc}(\chi), \quad (12)$$

donde  $\chi = y_0/2\sigma + i(k_0 - k)\sigma$ . La función  $\operatorname{erfc}(\chi)$  es conocida como la *función error complementaria*. Esta función puede escribirse en términos de la *función de error compleja*  $w(z)$  (Abramowitz y Stegun, 1964; Faddeyeva y Terent'ev, 1961), la cual se relaciona con la función error complementaria mediante la expresión,

$$\operatorname{erfc}(-iz) = e^{z^2} w(z). \quad (13)$$

Aplicando la relación (13) sobre la ecuación (12) tenemos que

$$\phi(k) = \frac{A\sqrt{\pi\sigma^2}}{\sqrt{2\pi}} w(i\chi). \quad (14)$$

Finalmente, introduciendo la ecuación (14) en la ecuación (7), obtenemos

$$\Psi_0(x, t) = \frac{A\sqrt{\pi\sigma^2}}{\sqrt{2\pi}} e^{-y_0^2/4\sigma^2} \int_{-\infty}^{\infty} dk w(i\chi) e^{ikx} e^{-ik^2\hbar t/2m}. \quad (15)$$

La función  $\Psi_0(x, 0)$  describe el comportamiento del paquete truncado como función del tiempo para toda  $x$ . En la expresión anterior debemos considerar que  $y_0$  es la posición donde se encuentra inicialmente centrado el paquete gaussiano cuando estamos en el espacio de  $y$ .

Si cambiamos de notación (de  $y$  a  $x$ ) entonces  $y_0 = x_0$ , por lo tanto  $\chi = x_0/2\sigma + i(k_0 - k)\sigma$ .

Con respecto a la constante de normalización  $A$ , ésta se calculará más adelante en la Sec.

2.3.

## 2.2 Dispersión de un paquete gaussiano por un potencial de alcance finito

$V(x)$ .

En esta sección desarrollaremos el formalismo para describir la evolución en la región de transmisión de un paquete gaussiano truncado que incide por la izquierda sobre un potencial definido en el intervalo  $0 \leq y \leq L$ . Este modelo nos plantea una situación física en donde la función de onda inicial asociada al paquete que incide sobre el potencial se encuentra inicialmente confinada a la izquierda del mismo mediante un obturador cuántico localizado en  $y = 0$  (ver figura 2). Una vez que el obturador se abre instantáneamente a un tiempo  $t = 0$ , el estado cuántico interacciona con el potencial dando lugar a la evolución de la onda cuántica en la región de transmisión  $x > L$ .

En este problema, es necesario resolver la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo para un potencial de alcance finito  $V(y)$  definido en el intervalo  $[0, L]$ , esto es, debemos resolver la ecuación

$$\left[ \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + V(y) \right] \Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}, \quad (16)$$

con la condición inicial dada por la ecuación (1).

Denotaremos en este caso mediante  $\Psi_V(x, t)$  a la solución de la ecuación (16), la cual está dada formalmente por la expresión integral

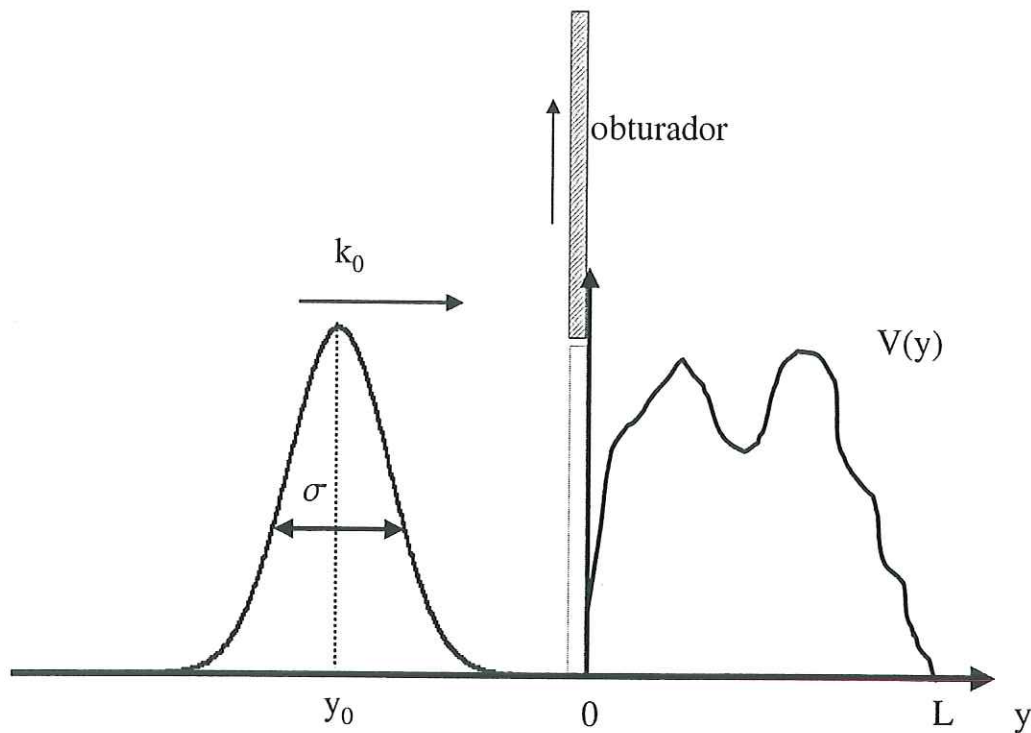


FIGURA 2.- El paquete gaussiano truncado justo en el momento en que se abre el obturador e interacciona con un potencial  $V(y)$ .

$$\Psi_V(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dy K(x, y, t) \Psi(x, 0), \quad (17)$$

donde  $K(x, y, t)$  es el propagador del sistema. El propagador que permite describir la evolución del paquete en la región de transmisión está dado por (García-Calderón et al., 2003)

$$K(x, y, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk T(k) \exp \left\{ ik(x - y) - \frac{i\hbar k^2 t}{2m} \right\}, \quad (18)$$

donde  $T(k)$  es la amplitud de transmisión del sistema.

Sustituyendo la expresión anterior para el propagador y la condición inicial dada por la ecuación (1) en la fórmula (17), obtenemos una integral cuyo integrando depende sólo de las variables  $y$  y  $k$  :

$$\Psi_V(x, t) = A \int_{-\infty}^0 dy \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} T(k) \exp \left\{ ik(x - y) - \frac{i\hbar k^2 t}{2m} + ik_0 y - \frac{(y - y_0)^2}{4\sigma^2} \right\}. \quad (19)$$

Para resolver las integrales en la ecuación (19), procedemos como sigue. Primero separamos los términos que dependen de la variable  $y$  intercambiando el orden de integración como sigue,

$$\Psi_V(x, t) = A \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} T(k) e^{ikx - \frac{i\hbar k^2 t}{2m}} \int_{-\infty}^0 dy \exp \left\{ -iy(k - k_0) - \frac{(y - y_0)^2}{4\sigma^2} \right\}. \quad (20)$$

Lo anterior nos permite reescribir convenientemente la ecuación (19) en la forma

$$\Psi_V(x, t) = A \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} T(k) e^{ikx - \frac{i\hbar k^2 t}{2m}} \int_0^{\infty} d\eta \exp \left\{ - \left[ \frac{\eta^2}{4\sigma^2} + 2\eta \left( \frac{y_0}{4\sigma^2} + \frac{i(k_0 - k)}{2} \right) + \frac{y_0^2}{4\sigma^2} \right] \right\}, \quad (21)$$

donde se ha realizado el cambio de variable  $\eta = -y$ .

Utilizando la identidad integral (11) en la ecuación (21) nos conduce a la siguiente ecuación simplificada

$$\Psi_V(x, t) = \frac{A\sigma^2}{\sqrt{4\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk T(k) e^{ikx} e^{-ik^2\hbar t/2m} e^{\chi^2} \operatorname{erfc}(\chi), \quad (22)$$

donde  $\chi = y_0/2\sigma + i(k_0 - k)\sigma$ .

Utilizando la relación que existe entre las función de error complementaria y la función  $w(z)$  (ecuación (13)), podemos escribir en forma alternativa la ecuación (22) como

$$\Psi_V(x, t) = \frac{A\sigma^2}{\sqrt{4\pi}} e^{-y_0^2/(4\sigma^2)} \int_{-\infty}^{\infty} dk T(k) w(i\chi) e^{ikx} e^{-ik^2\hbar t/2m}. \quad (23)$$

En virtud de que hemos utilizado una expresión del propagador válida sólo en la región de transmisión (ecuación (18)) las anteriores expresiones para  $\Psi_V(x, t)$  (ecuaciones (22) y (23)) sólo se aplican para  $x > L$ , donde  $L$  es la anchura del sistema. También señalamos que  $y_0 = x_0$ , ya que hemos cambiado de notación de  $y$  a  $x$ , por lo tanto  $\chi = x_0/2\sigma + i(k_0 - k)\sigma$ .

Las expresiones obtenidas para  $\Psi_V(x, t)$  pueden utilizarse para estudiar la transmisión de paquetes gaussianos truncados a través de sistemas como la barrera de potencial, el doble barrera y superredes unidimensionales, por mencionar algunos. Nosotros nos ocuparemos en probar esta herramienta para el caso de una barrera de potencial. Cabe señalar que las ecuaciones (22) y (23) no presentan muchas diferencias. Sin embargo, en este trabajo los cálculos se basan en la última de éstas.

### 2.3 La normalización de los paquetes gaussianos truncados

En esta sección calcularemos la constante de normalización del paquete gaussiano con condiciones iniciales de obturador cuántico, definido mediante la ecuación (1). Iniciamos con la condición usual de normalización,

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(y, 0)|^2 dy = 1. \quad (24)$$

Sustituyendo en (24) la condición inicial (1), obtenemos:

$$A^2 \int_{-\infty}^0 e^{-(y-y_0)^2/2\sigma^2} dy = 1, \quad (25)$$

donde  $A$  es la constante de normalización. Mediante el cambio de variable  $\eta = (y - y_0)/\sqrt{2\sigma^2}$ , podemos escribir la ecuación (25) como sigue

$$A^2 \sqrt{2\sigma^2} \int_{y_0/\sqrt{2\sigma^2}}^{\infty} e^{-\eta^2} d\eta = 1. \quad (26)$$

Evaluamos la integral anterior utilizando el resultado conocido (Abramowitz y Stegun, 1964),

$$\operatorname{erfc}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_z^{\infty} e^{-t^2} dt, \quad (27)$$

así como la ecuación (13), para escribir finalmente

$$A = \left[ \frac{2}{\sigma^2 \pi} \right]^{1/4} \frac{e^{y_0^2/4\sigma^2}}{w(iy_0/\sqrt{2\sigma^2})}. \quad (28)$$

Una vez obtenida la expresión para la constante de normalización  $A$ , podemos garantizar que las mediciones de la densidad de probabilidad, ya sea como función de la posición o del tiempo, estarán debidamente normalizadas en todo el espacio.

Una vez calculada la constante de normalización  $A$ , las funciones obtenidas para el caso del paquete gaussiano truncado libre  $\Psi_0$  y paquete gaussiano truncado en presencia de un potencial  $\Psi_V$  pueden escribirse respectivamente como,

$$\Psi_0(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{\frac{\sigma}{\sqrt{2\pi}}} \frac{1}{\sqrt{w(iy_0/\sqrt{2\sigma^2})}} \int_{-\infty}^{\infty} dk w(i\chi) e^{ikx} e^{-ik^2 \hbar t/2m}, \quad (29)$$

y

$$\Psi_V(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{\frac{\sigma}{\sqrt{2\pi}}} \frac{1}{\sqrt{w(iy_0/\sqrt{2\sigma^2})}} \int_{-\infty}^{\infty} dk T(k) w(i\chi) e^{ikx} e^{-ik^2 \hbar t/2m}. \quad (30)$$

Las expresiones anteriores permiten explorar la evolución espacial y temporal de paquetes gaussianos truncados libres y en presencia de un potencial. Un aspecto digno de

destacar es que las expresiones (29) y (30) son fórmulas novedosas que nunca antes se habían estudiado en la literatura para explorar la evolución de un paquete gaussiano. Estas soluciones a diferencia de los resultados obtenidos por Goldberg et al. nos permiten, en algunas situaciones de interés, obtener soluciones analíticas las cuales son más sencillas de evaluar. Las expresiones (29) y (30) pueden ser evaluadas mediante métodos conocidos de integración numérica, como lo discutiremos en el capítulo 4 para el caso libre y de dispersión por una barrera de potencial. En el capítulo 3 exploraremos bajo que condiciones y en qué regímenes es posible obtener expresiones analíticas para describir la evolución de paquetes gaussianos, en los casos libre y de una barrera de potencial.

## Capítulo 3

# FÓRMULAS ANALÍTICAS PARA LA EVOLUCIÓN DE PAQUETES GAUSSIANOS TRUNCADOS

En este capítulo retomaremos las soluciones obtenidas en el capítulo anterior dadas por las expresiones (29) y (30). Estas soluciones corresponden a los casos de los paquetes gaussianos libre y en presencia de un potencial, respectivamente. Dichas soluciones pueden ser evaluadas directamente mediante el uso de técnicas numéricas. Sin embargo, una vía alternativa para evaluar las soluciones es mediante la obtención de expresiones analíticas en ciertos regímenes de interés, lo cual nos permite describir la dinámica de paquetes gaussianos en diversos sistemas de potencial sin necesidad de recurrir a la integración numérica. Esto es ventajoso ya que nos permite tener un mayor grado de control sobre las variables físicas involucradas, lo cual es más limitado con el uso de las técnicas numéricas.

En el presente capítulo obtendremos expresiones analíticas exactas a partir de las ecuaciones (29) y (30) en regímenes de interés. En la Sec. 3.1 obtendremos la expresión analítica para el caso del paquete gaussiano truncado libre, posteriormente, en la Sec. 3.2 abordaremos el caso del paquete gaussiano truncado en presencia de un potencial en donde derivamos una fórmula analítica de la solución dinámica. Es importante mencionar que el grado de complejidad de la amplitud de transmisión,  $T(k)$ , en la ecuación (30) es precisamente lo que

dificulta (o facilita según el caso) la evaluación de la integral numérica. En este trabajo decidimos obtener una expresión analítica para  $\Psi_v(x, t)$ , para el caso de un potencial en donde la  $T(k)$  sea una cantidad simple, como lo es el caso de una barrera de potencial. Veremos que, tanto en el caso libre como el que involucra un potencial, la dinámica de los paquetes gaussianos puede ser descrita en términos de cantidades conocidas como las funciones de Moshinsky (Moshinsky, 1952). Dichas funciones están relacionadas con la función de error complementaria y por lo tanto pueden ser evaluadas fácilmente.

Las expresiones analíticas obtenidas no sólo son más fáciles de evaluar computacionalmente, sino que también nos proveen información física relevante del sistema. Estas soluciones nos permitirán caracterizar el régimen de transitorios y determinar con precisión la escala de tiempo relevante para la duración los efectos que ahí se observan.

### 3.1 El paquete gaussiano truncado libre

En esta sección retomaremos el problema del paquete gaussiano truncado libre, presentado en la Sec. 2.1. El propósito es encontrar una expresión analítica que nos permita estudiar la evolución temporal y espacial del paquete en ciertos regímenes de interés. Específicamente, se considerará el caso de paquetes gaussianos que se encuentran centrados en  $x_0$ , y con una dispersión espacial  $\sigma$  que satisfaga la condición  $|x_0| \gg \sigma$ , i.e. un paquete gaussiano centrado en una posición  $x_0$  cuya distancia al obturador sea mucho mayor que la anchura  $\sigma$  del mismo. Esto da lugar a un paquete inicial al cual le han sido truncadas sólo una pequeña fracción de componentes de su lado derecho. Bajo estas consideraciones, la ecuación (29) puede manipularse utilizando las propiedades de las funciones de error complejas  $w(iy)$ , esto

debido a que los argumentos de dichas funciones que aparecen en el integrando, dependen esencialmente de los parámetros de interés,  $x_0$  y  $\sigma$ . En nuestro caso observamos que el argumento  $|\chi| \gg 1$ , si  $|x_0/\sigma| \gg 1$ .

Las funciones  $w(iy)$ , poseen propiedades muy importantes, las cuales dependen de los valores del argumento  $y$ . Cuando el argumento  $|y| \gg 1$ , la  $w(iy)$  puede escribirse de la siguiente manera (García-Calderón y Rubio, 1997).

$$w(iy) = \frac{i}{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \left[ \frac{\Gamma(n + 1/2)}{(iy)^{2n+1}} \right], \quad (31)$$

donde  $\Gamma(n + 1/2)$  es la conocida función gamma para números fraccionarios. Además si la variable  $y$  se encuentra en el intervalo  $\pi/2 \leq y < 3\pi/2$  i.e. en el segundo y tercer cuadrante del plano complejo, la función  $w$  satisface la siguiente relación

$$w(-iy) = 2e^{y^2} - w(iy). \quad (32)$$

Si combinamos las ecuaciones (31) y (32), obtenemos la siguiente relación,

$$w(-iy) = 2e^{y^2} - \frac{i}{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(n + 1/2)}{(iy)^{2n+1}}. \quad (33)$$

Este es precisamente nuestro caso, en donde  $y = -\chi$ , y  $\chi = x_0/2\sigma + i(k_0 - k)\sigma$ . Podemos ver que el módulo de  $\chi$  siempre será grande debido a que  $|x_0| \gg \sigma$ .

Utilizando el resultado (33) en (29) escribimos la solución como

$$\Psi_{0+}(x, t) = \Theta \int_{-\infty}^{\infty} dk \left[ 2e^{z_0^2} - \frac{i}{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(n+1/2)}{(-i\chi)^{2n+1}} \right] e^{ikx} e^{-ik^2 \hbar t / 2m}, \quad (34)$$

donde

$$\Theta = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{\frac{\sigma}{\sqrt{2\pi}}} \left\{ w\left( ix_0/\sqrt{2\sigma^2} \right) \right\}^{-1/2}. \quad (35)$$

Al desarrollar la ecuación (33), obtenemos

$$w(i\chi) = 2e^{\chi^2} + \frac{1}{\pi^{1/2}\chi} - \frac{1}{2\pi^{1/2}\chi^3} + \frac{3}{4\pi^{1/2}\chi^5} + \dots \quad (36)$$

Para obtener el resultado anterior hemos utilizado las siguientes propiedades de la función gama:  $\Gamma(n+1) = n\Gamma(n)$  y  $\Gamma(1/2) = \sqrt{\pi}$ . Esto nos permite aproximar a la función  $w(ix_0/\sqrt{2\sigma^2})$  que aparece en  $\Theta$  como:

$$w(ix_0/\sqrt{2\sigma^2}) \simeq 2e^{x_0^2/2\sigma^2}, \quad (37)$$

con lo que la ecuación (34) se puede escribir de la siguiente manera

$$\Psi_{0+}(x, t) = \Delta \int_{-\infty}^{\infty} dk \left[ 2e^{\chi^2} - w(-i\chi) \right] e^{ikx} e^{-ik^2\hbar t/2m} \quad (38)$$

donde

$$\Delta = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{\frac{\sigma}{\sqrt{2\pi}}} (2e^{x_0^2/2\sigma^2})^{-1/2}. \quad (39)$$

El término dominante en la ecuación (38) está dado por  $2e^{\chi^2}$ , de tal forma que como primera aproximación, obtendremos la expresión analítica para este caso i.e. omitiremos la contribución de  $w(-i\chi)$ . La integral correspondiente será  $\Psi_L$

$$\Psi_L = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{\frac{\sigma}{\sqrt{2\pi}}} \frac{e^{-x_0^2/(4\sigma^2)}}{\sqrt{2}} \int_{-\infty}^{\infty} dk 2e^{\chi^2} e^{ikx} e^{-ik^2\hbar t/2m}. \quad (40)$$

Podemos evaluar la integral de la ecuación (40) con la ayuda de la identidad

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-u\eta^2} e^{v\eta} d\eta = \sqrt{\frac{\pi}{u}} e^{v^2/4u}. \quad (41)$$

Después de algunas manipulaciones algebraicas obtenemos la siguiente solución analítica

$$\Psi_L(x, t) = \frac{1}{\sigma^{1/2}(2\pi)^{1/4}} \frac{1}{\sqrt{1+it/\tau}} e^{ik_0x_0 - k_0^2\sigma^2} \exp \left\{ \frac{[i(x-x_0) + 2k_0\sigma^2]^2}{4\sigma^2(1+it/\tau)} \right\}. \quad (42)$$

Esta expresión es una representación de la solución del paquete truncado libre, en el caso  $|x_0/\sigma| \gg 1$ . Sin embargo, si deseamos obtener una mejor aproximación es necesario considerar la contribución debida a la función  $w(i\chi)$  en la ecuación (38). Para esto, sustituimos en la ecuación (34) el desarrollo en serie para  $w(i\chi)$ , utilizando la ecuación (31). Por lo tanto, la ecuación (34) puede ser reescrita como

$$\Psi_{0+}(x, t) = \Psi_L + \frac{2}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{\frac{\sigma}{\sqrt{2\pi}}} \frac{e^{-x_0^2/(4\sigma^2)}}{\sqrt{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(n + \frac{1}{2})}{\sigma^{2n+1}} \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \frac{\exp\{ikx - ik^2\hbar t/2m\}}{[k - \beta]^{2n+1}}, \quad (43)$$

donde  $\beta = k_0 - ix_0/2\sigma^2$ .

Para evaluar las integrales que aparecen en la expresión anterior utilizamos la siguiente representación de las funciones de Moshinsky

$$\frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \frac{e^{ikx} e^{-ik^2\hbar t/2m}}{(k - \beta)} = \begin{cases} -M(y_{-\beta}); & \text{Im}(\beta) > 0, \\ M(y_{\beta}); & \text{Im}(\beta) < 0, \end{cases} \quad (44)$$

donde

$$y_{\mp\beta} = \frac{\mp x \pm \beta\hbar t/m}{\sqrt{2i\hbar t/m}}. \quad (45)$$

A continuación procedemos a derivar 2n-veces la ecuación (44) (para el caso  $Im(\beta < 0)$ ) con respecto al parámetro  $\beta$ . El objetivo es obtener una representación de las integrales que aparecen en (43) en términos de derivadas de las funciones  $M$ . Esto nos conduce a

$$-\frac{\partial^{2n} M(y-\beta)}{\partial \beta^{2n}} = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ikx} e^{-ik^2 \hbar t / 2m} \left\{ \frac{(2n)!}{(k-\beta)^{2n+1}} \right\}. \quad (46)$$

Sustituyendo la ecuación (46) en la ecuación (43)

$$\Psi_{0+}(x, t) = \Psi_L - \frac{2}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{\frac{\sigma}{\sqrt{2\pi}}} \frac{e^{-x_0^2/(4\sigma^2)}}{\sqrt{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(n + \frac{1}{2})}{(2n)! \sigma^{2n+1}} \frac{\partial^{2n} M(y-\beta)}{\partial \beta^{2n}}. \quad (47)$$

Para evaluar la serie de la ecuación (47), es necesario calcular  $\partial^{2n} M(-x; -\beta; t) \partial \beta^{2n}$ . A continuación evaluaremos la derivada utilizando la representación de la función  $M(y_{\hat{k}})$

(García-Calderón y Rubio, 1997)

$$M(y_{\hat{k}}) = \frac{1}{2} e^{im\hat{x}/(2\hbar t)} e^{y_{\hat{k}}} \operatorname{erfc}(y_{\hat{k}}), \quad (48)$$

donde en nuestro caso  $\hat{x} = -x$  y  $\hat{k} = -\beta$ . Si ahora derivamos n-veces a  $M(-x, -\beta, t)$  con respecto a  $\beta$ , se obtiene la siguiente relación

$$\frac{d^n}{d\beta^n} M(y-\beta) = \frac{1}{2} e^{imx^2/(2\hbar t)} \left( \frac{dy-\beta}{d\beta} \right)^n \left\{ \frac{d^n}{dy_{-\beta}^n} \left[ e^{y^2-\beta} \operatorname{erfc}(y-\beta) \right] \right\}, \quad (49)$$

donde  $dy/d\beta = \hbar t/m (2i\hbar t/m)^{1/2}$ .

Utilizando la identidad para las derivadas de las funciones error complementario multiplicada por una gaussiana (Abramowitz y Stegun, 1964),

$$\frac{d^n}{dz^n} \left[ e^{z^2} \operatorname{erfc}(z) \right] = (-1)^n 2^n n! e^{z^2} i^n \operatorname{erfc}(z), \quad (50)$$

la ecuación (49) puede reescribirse como

$$\frac{d^n}{d\beta^n} M(y_{-\beta}) = \left( \frac{\hbar t/m}{\sqrt{2i\hbar t/m}} \right)^n [i^n (-1)^n 2^n n!] M(y_{-\beta}). \quad (51)$$

Tomando sólo las derivadas pares, tenemos que

$$\frac{d^{2n}}{d\beta^{2n}} M(y_{-\beta}) = \left( \frac{\hbar t/m}{\sqrt{2i\hbar t/m}} \right)^{2n} [i^{2n} (-1)^{2n} 2^{2n} (2n)!] M(y_{-\beta}). \quad (52)$$

Sustituimos la ecuación (52) en la ecuación (47)

$$\Psi_{0+}(x, t) = \Psi_L - \frac{2}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{\frac{\sigma}{\sqrt{2\pi}}} \frac{e^{-x_0^2/(4\sigma^2)} M(y_{-\beta})}{\sqrt{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{i^{2n} \Gamma(n + \frac{1}{2})}{\sigma^{2n+1}} \left( \frac{-2\hbar t/m}{\sqrt{2i\hbar t/m}} \right)^{2n}. \quad (53)$$

Si manipulamos algebraicamente la ecuación (53), podemos reescribirla de la siguiente manera

$$\Psi_{0+}(x, t) = \Psi_L - \frac{\sqrt{\pi} e^{-x_0^2/(4\sigma^2)} M(y_{-\beta})}{2\sigma^{1/2} (2\pi)^{1/4}} \frac{i}{\sqrt{\frac{\hbar t}{2im\sigma^2}}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(n + \frac{1}{2})}{(-\sigma \sqrt{2i\hbar t/m})^{2n+1}}. \quad (54)$$

La ecuación (54) puede ser escrita en términos de la función de error compleja utilizando la ecuación (31), y se escribe de la siguiente manera

$$\Psi_{0+}(x, t) = \Psi_L - \frac{\sqrt{\pi} e^{-x_0^2/(4\sigma^2)}}{2\sigma^{1/2} (2\pi)^{1/4}} \sqrt{\frac{i\tau}{t}} M(y_{-\beta}) w(iy_{\sigma}), \quad (55)$$

donde

$$y_{\sigma} = \frac{i\sigma}{\sqrt{2i\hbar t/m}}. \quad (56)$$

La expresión dada por la ecuación (55) será válida siempre que se cumpla la condición

$$\left| \frac{\sigma}{\sqrt{2i\hbar t/m}} \right|^2 > 1, \quad (57)$$

lo que implica  $t < \tau/4$ , donde hemos definido  $\tau = 2m\sigma^2/\hbar$ ; la cantidad  $\tau$  nos proporciona la escala de tiempo a la que un paquete gaussiano se empieza a distorsionar notablemente (Liboff, 1992). Finalmente la ecuación (55) se puede reescribir de la siguiente manera utilizando la ecuación (13)

$$\Psi_{0+}(x, t) = \Psi_L - \frac{\sqrt{\pi} e^{-x_0^2/(4\sigma^2)} e^{i\tau/t}}{\sigma^{1/2} (2\pi)^{1/4}} \sqrt{\frac{i\tau}{t}} M(y_{-\beta}) M(y_{\sigma}). \quad (58)$$

Esta solución es la forma más general para estudiar la evolución de paquetes gaussianos truncados bajo las condiciones  $|x_0/\sigma| > 1$ , y  $t < \tau/4$ . Sin embargo, para el caso de tiempos grandes (comparados con  $\tau/4$ ) podemos demostrar que el segundo término de  $\Psi_{0+}$  tiende a cero ( $\Psi_{0+} \approx \Psi_L$ ), esto utilizando las propiedades de las funciones  $M$ . Todo se podrá ver claramente en el capítulo 4, donde se expondrán los resultados obtenidos con las expresiones aquí desarrolladas.

### 3.2 Dispersión de un paquete gaussiano truncado: fórmula analítica para el caso de barreras transparentes.

En esta sección retomaremos el problema del paquete gaussiano truncado que incide sobre una barrera de potencial, presentado en la Sec. 2.2. El propósito es poder encontrar una solución analítica que permita explorar la evolución temporal y espacial de la densidad de probabilidad en la región de transmisión. En particular, se considerará el caso de paquetes que interaccionan con barreras de potencial denominadas transparentes. Estas barreras se

caracterizan por tener una opacidad  $\alpha \ll 1$ , donde  $\alpha = k_v L$  ( $k_v = \sqrt{2mV_0/\hbar}$ ). Además, como en la Sec. 3.1, se considerará el caso de paquetes gaussianos centrados en  $x_0$  y dispersión espacial  $\sigma$ , tal que satisfagan la condición  $|x_0/\sigma| \gg 1$ . La energía de incidencia sólo podrá tomar valores pequeños, tal que  $V_0/E_0 \approx 0$ , i.e. energías rasantes.

Para el caso de  $\alpha \ll 1$  y  $V_0 \gg E_0$ , se obtiene (Apéndice B) que la amplitud de transmisión está dada por la expresión

$$T_{\alpha < 1}(k) = \frac{ke^{-ikL}}{k - i\beta}, \quad (59)$$

donde  $\beta = -k_v L/2$ . Utilizando la expresión (33) y considerando que el argumento  $|x_0/\sigma| > 1$ , escribimos la ecuación(30) como

$$\Psi_{\alpha < 1}(x, t) = \Theta \int_{-\infty}^{\infty} dk \left\{ \left[ 2e^{\chi^2} - \frac{i}{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(n+1/2)}{(-i\chi)^{2n+1}} \right] T_{\alpha < 1}(k) e^{ikx} e^{-ik^2 \hbar t / 2m} \right\}, \quad (60)$$

donde  $\Theta = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{\frac{\sigma}{\sqrt{2\pi}}} \left\{ w\left(ix_0/\sqrt{2\sigma^2}\right) \right\}^{-1/2}$ . Podemos aproximar (en el caso  $|x_0/\sqrt{2\sigma^2}| > 1$ ) a la función  $w(ix_0/\sqrt{2\sigma^2})$  que se encuentra implícita en  $\Theta$ , utilizando el desarrollo (33), lo cual nos conduce a

$$\Delta = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{\frac{\sigma}{\sqrt{2\pi}}} \frac{e^{-x_0/\sqrt{2\sigma^2}}}{\sqrt{2}}, \quad (61)$$

esto si sólo nos quedamos con el término de la exponencial. A lo largo de estas líneas podemos aproximar la función  $w(i\chi)$ , quedándonos sólo con el término  $2\exp\{\chi^2\}$ .

Sustituyendo las anteriores aproximaciones, así como la amplitud de transmisión para barreras transparentes (ecuación(59)), podemos escribir la función (60) como

$$\Psi_{\alpha < 1}(x, t) = \Delta \int_{-\infty}^{\infty} dk \frac{2k e^{\chi^2} e^{-ikL}}{k - i\beta} e^{ikx} e^{-ik^2 \hbar t / 2m}. \quad (62)$$

Con la sustitución de  $\chi = x_0/2\sigma + i(k_0 - k)\sigma$ , la integral anterior se puede expresar así

$$\Psi_{\alpha < 1}(x, t) = \Delta \int_{-\infty}^{\infty} dk \exp \left\{ \left[ \frac{x_0}{2\sigma} + i(k_0 - k)\sigma \right]^2 - ikL + ikx - \frac{ik^2 \hbar t}{2m} \right\} \left[ \frac{2k}{k - i\beta} \right]. \quad (63)$$

La anterior expresión puede ser simplificada utilizando la relación

$$\frac{k}{k - i\beta} = 1 + \frac{i\beta}{k - i\beta}, \quad (64)$$

con lo cual la función (63) se puede separar en dos integrales como sigue

$$\begin{aligned} \Psi_{\alpha < 1}(x, t) = \Delta_{\alpha} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} dk \exp \left\{ k[i(x - x_0 - L) + 2k_0\sigma^2] - (1 + 2m\sigma^2/i\hbar t) \frac{i\hbar tk^2}{2m} \right\} \right. \\ \left. + 2\pi\beta \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \exp \left\{ k[i(x - x_0 - L) + 2k_0\sigma^2] - k^2 \left( \frac{i\hbar t}{2m} + \sigma^2 \right) \right\} \frac{1}{i\beta(k - i\beta)} \right\}, \end{aligned} \quad (65)$$

donde

$$\Delta_{\alpha} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sqrt{\frac{\sigma}{\sqrt{2\pi}}} e^{ik_0 x_0 - k_0^2 \sigma^2}. \quad (66)$$

La primer integral puede ser evaluada utilizando la identidad (41), mientras que la segunda integral puede ser identificada como una función de Moshinsky mediante la ecuación (44), para el caso  $Im(\hat{k}) < 0$ . Por lo tanto la ecuación (65) se escribe finalmente como:

$$\Psi_{\alpha < 1}(x, t) = \Delta_{\alpha} \left\{ \frac{1}{\sqrt{1+it/\tau}} \exp \left\{ \frac{[i(x - x_0 - L) + 2k_0\sigma^2]^2}{4\sigma^2(1 + it/\tau)} \right\} - \sqrt{\pi} \sigma k_v \alpha M(x', k', t') \right\}, \quad (67)$$

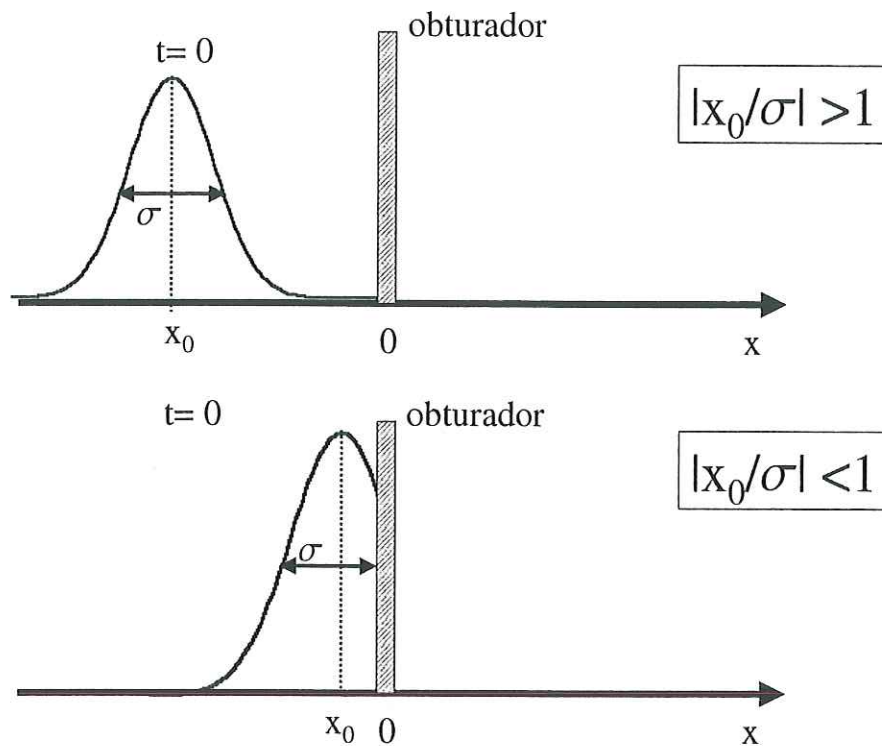
donde hemos definido  $\tau = 2m\sigma^2/\hbar$ ,  $x' = (x - x_0 - L) - 2ik_0\sigma^2$ ,  $k' = -imLV_0/\hbar^2$  y  $t' = t(1 - i\tau/t)$ . La expresión obtenida es una aproximación a primer orden de la solución para el paquete gaussiano truncado que incide sobre una barrera de potencial, señalando nuevamente que es válida sólo en el régimen  $|x_0/\sigma| > 1$ .

## Capítulo 4

# EVOLUCIÓN TEMPORAL Y PROPAGACIÓN DEL PAQUETE GAUSSIANO TRUNCADO LIBRE

En este capítulo se estudiará la evolución espacial y temporal del paquete gaussiano truncado en ausencia de potenciales. El objetivo es estudiar y caracterizar los efectos en la dinámica del paquete gaussiano producidos por el truncamiento del estado inicial. En general, estudiaremos dos regímenes de interés, los cuales están caracterizados por la razón entre la posición inicial  $x_0$  del centroide y la anchura  $\sigma$  del paquete. Estos dos regímenes son el *truncamiento grande*  $|x_0/\sigma| < 1$  y el *truncamiento pequeño*,  $|x_0/\sigma| > 1$  (Fig. 3).

En el presente estudio analizaremos la densidad de probabilidad como función de la posición  $x$  y el tiempo  $t$  asociada a la solución integral (ecuación (29)) y la fórmula analítica aproximada (ecuación (58)). Ambas representaciones serán comparadas con la conocida fórmula (ecuación(73)) que describe la evolución de un paquete gaussiano definido inicialmente (a  $t = 0$ ) en todo el espacio ( $-\infty < x < \infty$ ). En la Sec. 4.1 analizaremos la distribución en el espacio de momentos  $\phi(k)$  del paquete gaussiano. Esto permitirá determinar el efecto del truncamiento inicial de  $\Psi(x, 0)$  sobre el comportamiento de  $|\phi(k)|^2$  en el espacio-k. En la Sec. 4.2 analizaremos la evolución espacial y en la Sec. 4.3 la evolución temporal del paquete gaussiano truncado.



**FIGURA 3.-** Grado de truncamiento del estado inicial. Se ilustran los casos de truncamiento pequeño  $|x_0/\sigma| > 1$  y truncamiento grande  $|x_0/\sigma| < 1$ , respectivamente.

#### 4.1 El paquete gaussiano truncado en el espacio de momentos

El objetivo de esta sección es investigar el comportamiento de la función de onda en el espacio- $k$ , asociada a la condición inicial dada por la ecuación (1). Esto permitirá analizar el efecto del truncamiento en la distribución de las distintas componentes de momento que forman al paquete inicial a  $t=0$ . La función de onda  $\phi(k)$  en el espacio de momentos para el paquete gaussiano truncado está dada por la ecuación (14), y será comparada con la función  $\phi(k)$  en el espacio- $k$  del paquete gaussiano exacto (ecuación (69)) obtenida en el *Apéndice*

A.

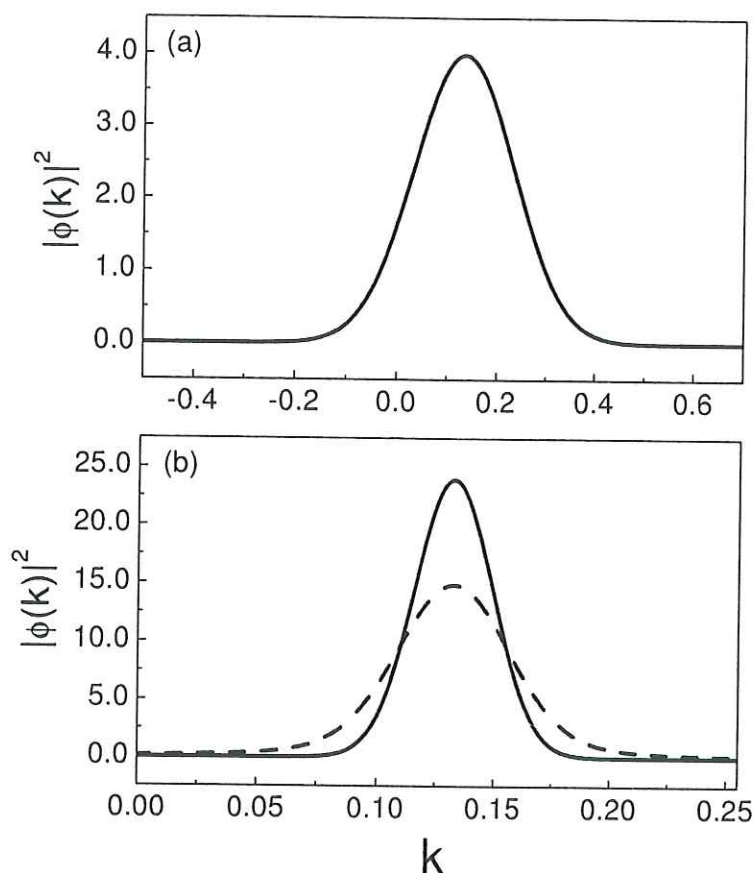


FIGURA 4.- El paquete gaussiano truncado (línea a trazos) y el paquete gaussiano exacto (línea continua) en el espacio de momentos. En (a)  $x_0 = -25 \text{ \AA}$  y  $\sigma = 5 \text{ \AA}$  ( $|x_0/\sigma| > 1$ ) y en (b)  $x_0 = -20 \text{ \AA}$  y  $\sigma = 30 \text{ \AA}$  ( $|x_0/\sigma| < 1$ ). Obsérvese que a mayor  $\sigma$ , menor es la dispersión en el espacio de momentos. Además, observamos que el paquete truncado exhibe una mayor dispersión y una menor amplitud que el paquete exacto en el régimen  $|x_0/\sigma| < 1$ .

Para el análisis de la función de onda en el espacio de momentos, consideremos dos casos representativos. El primero corresponde al caso del truncamiento pequeño,  $|x_0/\sigma| > 1$ , para lo cual consideramos un paquete gaussiano centrado en  $x_0 = -25 \text{ \AA}$  y una dispersión espacial  $\sigma = 5 \text{ \AA}$ . El segundo caso corresponde a un truncamiento grande,  $|x_0/\sigma| < 1$ , para el cual consideramos un paquete centrado en  $x_0 = -20 \text{ \AA}$  y  $\sigma = 30 \text{ \AA}$ . En la Figura 4 se

compara el paquete gaussiano truncado (línea a trozos) y el paquete gaussiano exacto (línea continua) en los dos regímenes de interés. De la Figura 4(a) se puede observar que para la situación de truncamiento pequeño en  $x$ , la distribución en el espacio- $k$  de los paquetes gaussianos, truncado y exacto, son iguales. Sin embargo, de la Figura 4(b), podemos darnos cuenta que para  $|x_0/\sigma| < 1$ , la distribución en el espacio de momentos del paquete gaussiano truncado es más ancha con respecto a la del paquete gaussiano exacto. Esto puede ser asociado con el principio de incertidumbre, ya que al cortar el paquete gaussiano creamos otro paquete que se encuentra muy localizado en el espacio de posición, lo que imposibilita saber cual es la energía exacta de éste. Por dicho motivo, se crean otras componentes en el espacio de momentos. Cabe señalar que la densidad de probabilidad integrada sobre todo el espacio, en cada uno de los casos, es 1.

Los resultados que acaban de ser presentados, serán de gran utilidad en la Sec. 4.2.

## 4.2 Propagación espacial del paquete gaussiano truncado

En esta sección se analizará la propagación espacial del paquete gaussiano truncado, la cual es caracterizada de manera simple en dos regímenes a través de los parámetros  $x_0$  y  $\sigma$  del paquete inicial.

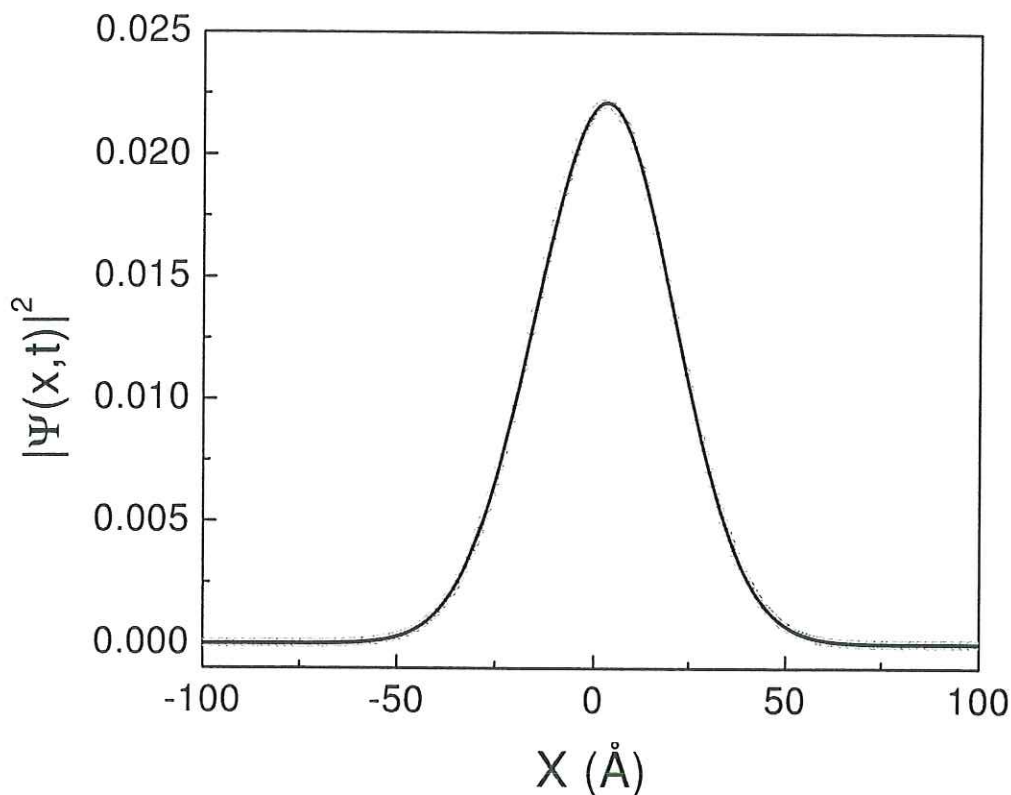
El estudio de la densidad de probabilidad  $|\Psi|^2$ , como función de la posición se presentará en las siguientes dos subsecciones. Primeramente en la subsección 4.2.1 se estudiará el régimen de truncamiento pequeño  $|x_0/\sigma| > 1$  y finalmente en la subsección 4.2.2 se analizará el caso de truncamiento grande  $|x_0/\sigma| < 1$ .

#### 4.2.1 Régimen de truncamiento pequeño $|x_0/\sigma| > 1$

En este régimen utilizamos la expresión integral de la solución del paquete gaussiano truncado (ecuación (29)) así como la solución analítica obtenida para este caso (ecuación (58)) y comparamos con el cálculo del paquete gaussiano exacto (ecuación (73)). La solución integral mencionada será calculada numéricamente utilizando el *método trapezoidal extendido* (Press et al., 1986).

A continuación comparemos los paquetes (truncado y exacto), centrados en  $x_0 = -25.0$  Å a un tiempo  $t = 0$  fs y utilizando una energía de incidencia  $E_0 = 1.0$  eV. Ambos paquetes poseen una dispersión espacial inicial  $\sigma = 5.0$  Å. Para el paquete truncado consideraremos el intervalo de integración  $-2 \leq k \leq 2$ , con una iteración de 60000 puntos. Este intervalo de integración será utilizado en algunos resultados más de esta sección, así como el número de iteraciones, debido a que con estos parámetros podemos obtener buenos resultados sin tener que emplear mucho tiempo de cómputo; el criterio utilizado para decidir esto, es basado en la experimentación con varios intervalos de integración así como del número de iteraciones. En la Figura 5 podemos observar que a  $t = 1$  fs, la densidad de probabilidad del paquete gaussiano exacto  $|\Psi|^2$  (ecuación (73)), coincide con las densidades de probabilidad obtenidas para el paquete truncado. Debido que estamos en el régimen  $|x_0/\sigma| > 1$ , las componentes que estamos cortando a  $t = 0$  son simplemente las colas, de donde inferimos que dichas componentes no contribuyen significativamente a la densidad de probabilidad total. Cabe mencionar que el centroide del paquete gaussiano exacto se propaga con una velocidad semiclassical  $v_{sc} = \hbar k_0/m$ ,  $k_0 = \sqrt{2mE_0/\hbar^2}$ , y su posición  $x = v_{sc}t$ . En base a lo antes dicho, podemos argumentar que a  $t = 1$  fs el paquete gaussiano truncado tiene las

mismas propiedades que el paquete gaussiano exacto.



**FIGURA 5.-** Densidad de probabilidad de los paquetes gaussianos truncado y exacto. La curva que contiene círculos corresponde al paquete gaussiano exacto, las líneas a trazos y continua corresponden al paquete gaussiano truncado, en su forma analítica  $|\Psi_{0+}|^2$  e integral  $|\Psi_0|^2$  respectivamente. Las tres curvas coinciden entre sí.

A continuación estudiaremos la propagación espacial del paquete truncado y exacto a diferentes tiempos. El resultado se exhibe en la Figura 6, donde podemos verificar que a los tiempos  $t = 1.0$  fs,  $t = 2.0$  fs y  $t = 3.0$  fs, las curvas correspondientes al paquete truncado [integral (línea continua) y analítica (línea a puntos)] y al paquete exacto (línea a trazos) son indistinguibles, lo que nos indica que bajo estas circunstancias, ambos paquetes tienen el mismo comportamiento y la expresión analítica (ecuación (58)) es una excelente

aproximación. Además, la velocidad con la que se propagan los máximos corresponden a la velocidad semiclásica  $v_{sc}$ . Se estudió el comportamiento de las tres soluciones a tiempos mayores y se mantiene la equivalencia entre ellas.

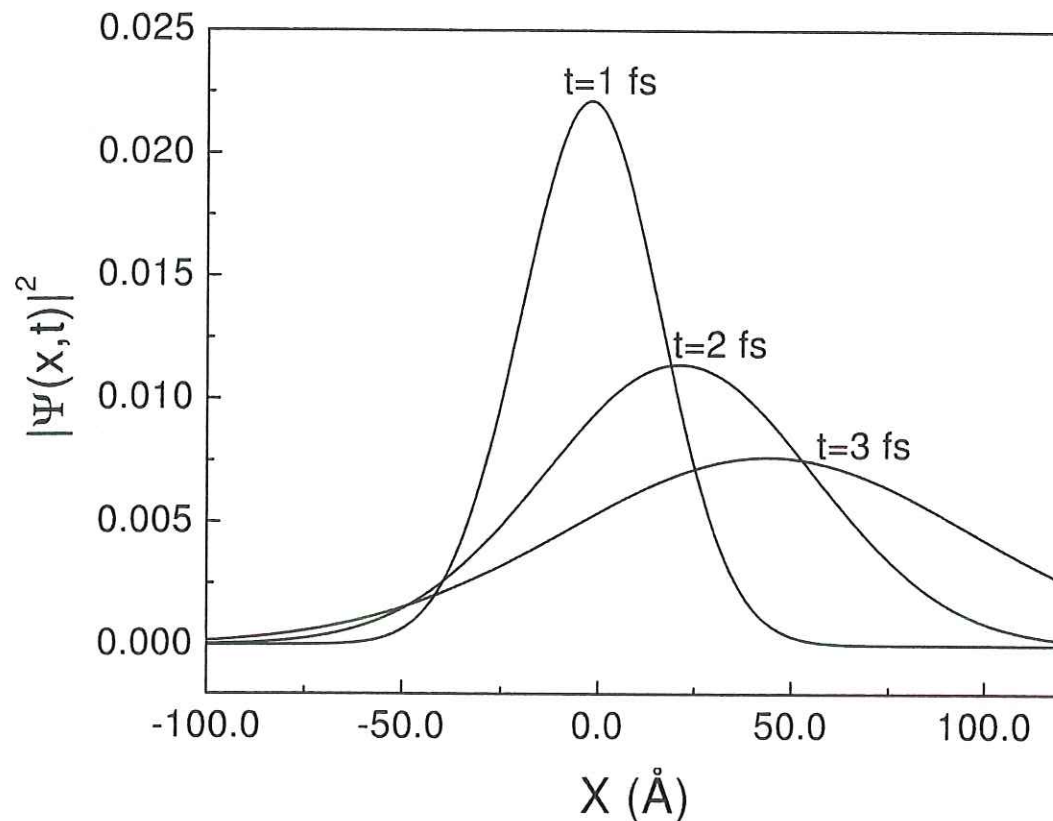
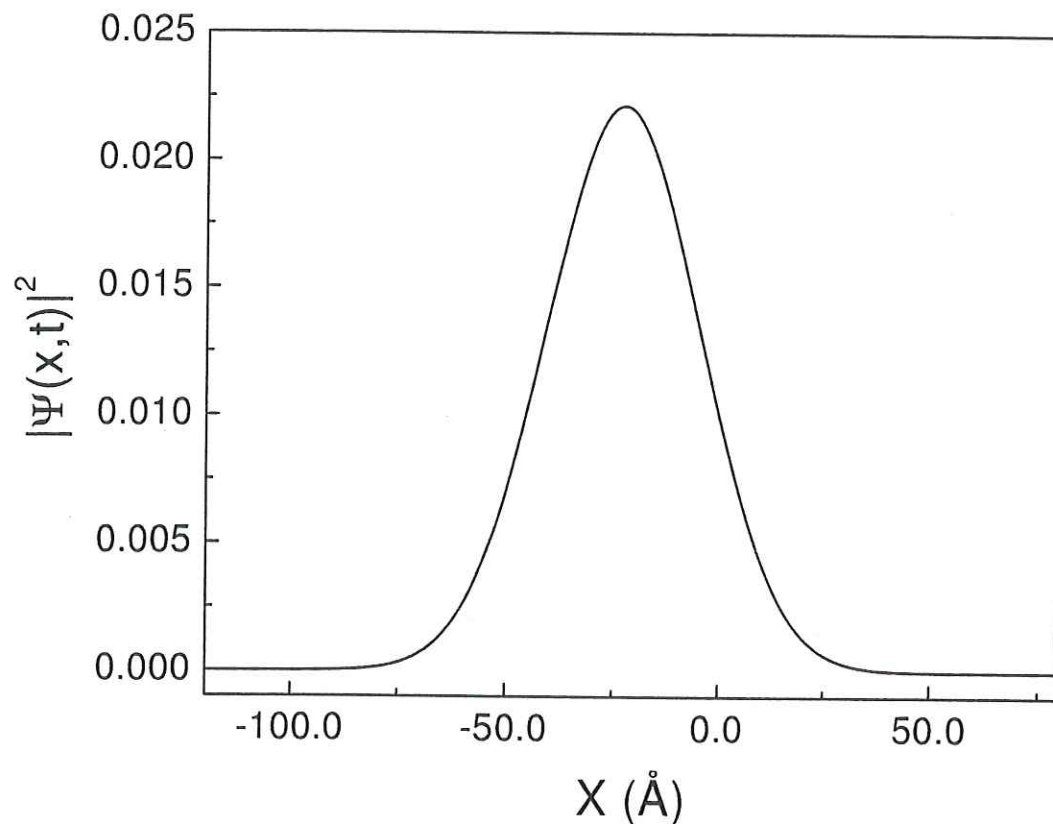


FIGURA 6.- Densidad de probabilidad del paquete gaussiano truncado vs exacto, a diferentes tiempos. La línea continua corresponde a la solución integral, la línea punteada a la solución analítica y la línea a trazos para el paquete exacto. Se utilizan los parámetros  $E_0 = 1.0$  eV,  $\sigma = 5.0$   $\text{\AA}$  y  $x_0 = -25.0$   $\text{\AA}$ . Se observa un traslape de los paquetes a todo tiempo. Los máximos los podemos localizar en  $x = v_{sc}t$ , donde  $v_{sc}$  es la velocidad semiclásica del paquete.

Cabe señalar que si se cumple efectivamente la condición  $|x_0/\sigma| > 1$ , podemos aproximar  $\Psi_{0+} \simeq \Psi_L$  y reproducir los mismos resultados que se obtuvieron con la solución completa para el paquete gaussiano truncado, tanto en su forma integral como analítica, así como

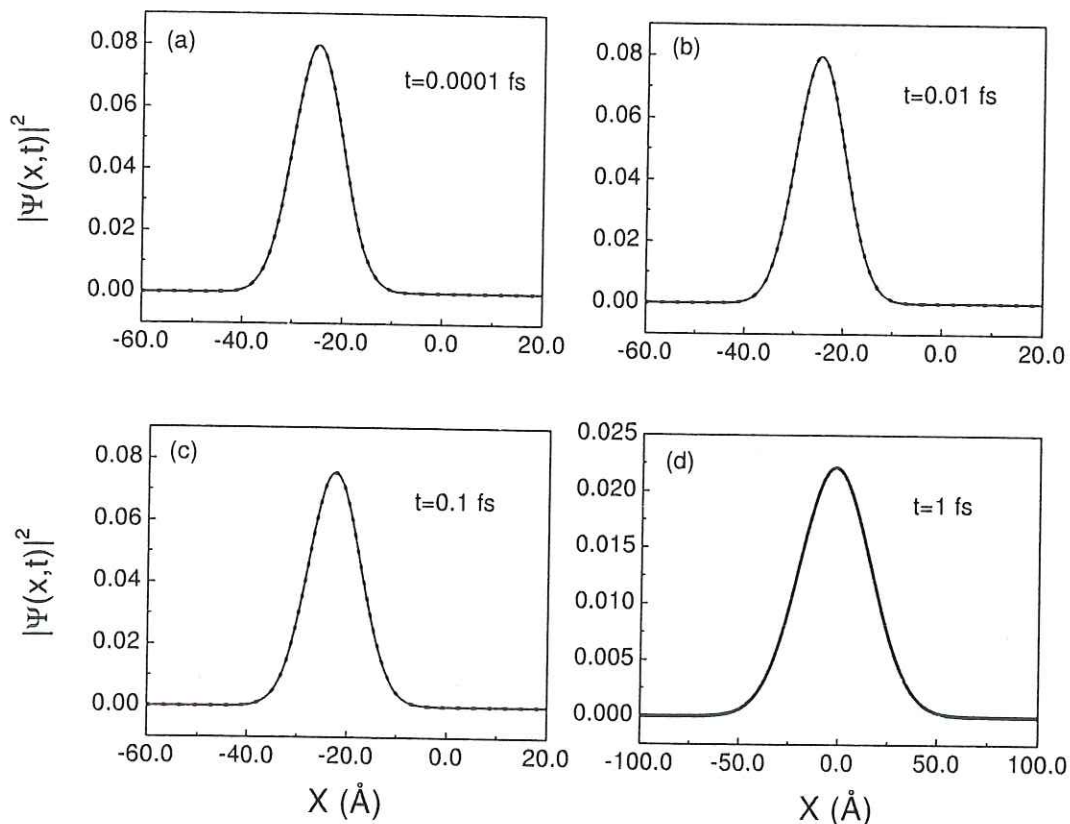
para el paquete gaussiano exacto (ver Figura 7) . Recordemos que  $\Psi_L$  es la aproximación a primer término de la solución del paquete gaussiano truncado,  $\Psi_{0+}$ , por lo cual, el término complicado de la ecuación (58) resulta despreciable en este caso.



**FIGURA 7.-** comparación de la solución analítica  $\Psi_{0+}$  vs  $\Psi_L$ . Parámetros:  $E_0 = 1$  eV,  $x_0 = -25$  Å,  $\sigma = 5$  Å,  $t = 1$  fs. Bajo las condiciones de truncamiento pequeño, se puede observar que ambas soluciones tienen el mismo comportamiento.

En las Figuras 5 y 6 se observó la evolución del paquete gaussiano a tiempos que cumplen con la relación  $t > \tau/4$ , donde  $\tau = 2m\sigma^2/\hbar$ . Para estudiar el comportamiento del paquete gaussiano truncado a tiempos menores que  $\tau/4$ , consideremos el caso anterior para tiempos  $t = 1 \times 10^{-4}$  fs, 0.01 fs, 0.1 fs y 1 fs. El análisis de este paquete se muestra en la figura

8, donde se puede observar que para  $t < \tau/4$ , las soluciones analítica (línea a puntos) y numérica (línea continua) reproducen los mismos resultados que el paquete gaussiano exacto (línea a trazos).



**FIGURA 8.-** Comparación de las densidades de probabilidad del paquete gaussiano exacto con las soluciones analítica e integral para el paquete gaussiano truncado libre en el régimen de truncamiento pequeño,  $|x_0/\sigma| > 1$ . La solución analítica está representada con línea a puntos, con línea a trazos la solución integral y el paquete gaussiano exacto con línea continua. Obsérvese el traslape de las dos soluciones a diferentes tiempos.

Sin embargo, es preciso señalar que el comportamiento del paquete gaussiano truncado no siempre será igual al del paquete gaussiano exacto. Para ilustrarlo consideremos un caso especial en el cual nos acercamos al régimen  $t \simeq \tau/4$ . En este régimen temporal ( $t < \tau/4$ ),

al cual llamaremos régimen transitorio, es necesario utilizar la ecuación (58) para describir al paquete gaussiano truncado. Consideremos un paquete con centroide en  $x_0 = -15.0 \text{ \AA}$  y  $\sigma = 5.0 \text{ \AA}$  a  $t = 0$ , con una energía inicial  $E_0 = 0.01 \text{ eV}$ . En la Figura 9 comparamos la evolución de la densidad de probabilidad a un tiempo  $t = 0.0001 \text{ fs}$  calculada con las ecuaciones (29) (línea a trazos) y (58) (línea continua). La escala de tiempo considerada satisface la condición  $t < \tau/4$ , ya que  $\tau = 0.28 \text{ fs}$  para este caso. Observamos en la vecindad del origen, justo en la región del truncamiento, un comportamiento oscilatorio en la densidad de probabilidad. Este fenómeno transitorio puede ser descrito con gran precisión utilizando tanto la representación integral como analítica de la función de onda (ecuaciones (29) y (58)). Sin embargo, es necesario aclarar que para el cálculo de la integral (29), fue necesario extender el intervalo de integración en  $k$  ( $|k| \gg 1$ ). Para reproducir los transitorios que se observan en la Figura 9 fue necesario considerar un intervalo de integración  $-205 < k < 205$ , con  $3 \times 10^6$  iteraciones. Esto, debido a que los transitorios son generados por las componentes rápidas del paquete, por lo que para describirlos es necesario extender el intervalo en  $k$ , mientras más grande, mejor es la descripción.

Resumidamente, en esta sección se pudo observar que las soluciones para el paquete gaussiano truncado en sus representaciones analítica e integral para el caso de truncamiento pequeño  $|x_0/\sigma| \gg 1$ , reproducen los mismos resultados, como función de la posición así como del tiempo. Además la solución analítica puede ser aproximada como  $\Psi_a \simeq \Psi_L$ , ya que sólo en estos casos el paquete gaussiano no exhibe los efectos provocados por el truncamiento. Para el caso en que  $|x_0/\sigma| > 1$ , la solución analítica obtenida reproduce los transitorios en la vecindad del obturador los cuales exhiben un comportamiento oscilatorio.

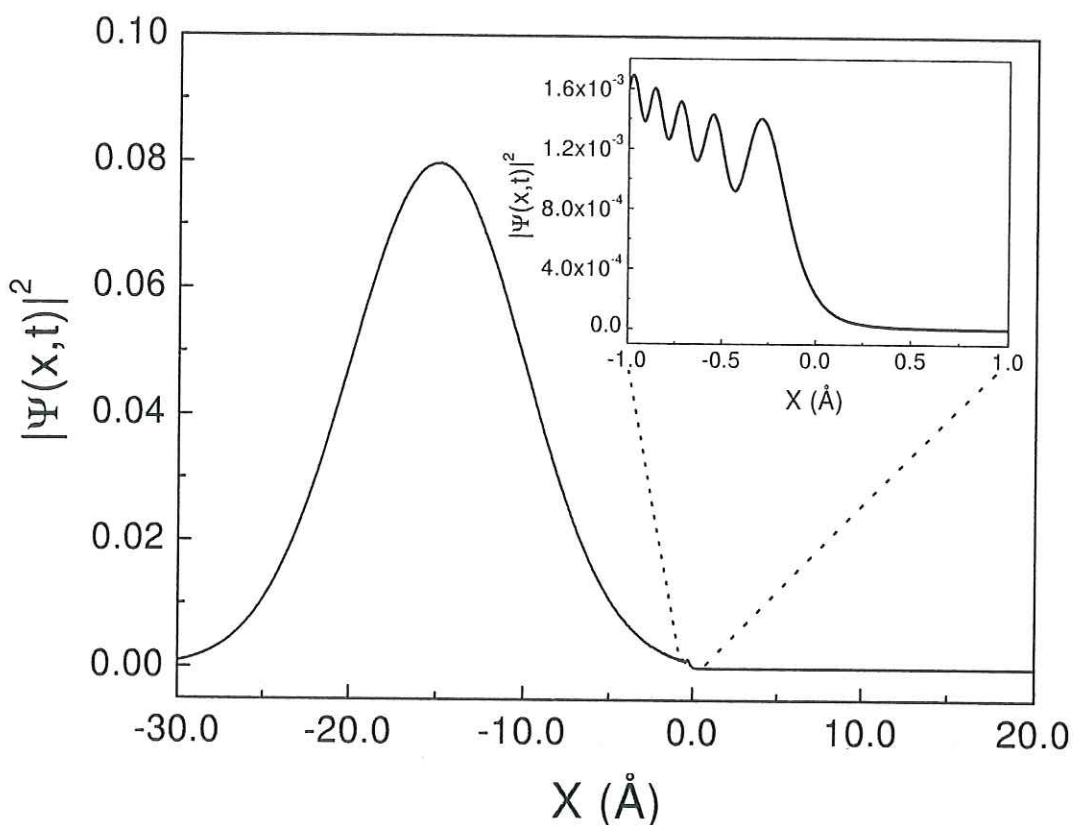


FIGURA 9.- Comparación de las soluciones analítica (línea continua) e integral (línea a trazos), para el paquete gaussiano truncado libre. Se puede observar que ambas soluciones presentan efectos transitorios a  $t=0.0001$  fs.

Cabe señalar que las oscilaciones se hacen más notorias cuando el paquete gaussiano se encuentra en el régimen de truncamiento grande. Esto se discutirá en la siguiente subsección.

#### 4.2.2 Régimen de truncamiento grande ( $|x_0/\sigma| < 1$ )

Ahora consideremos propagación espacial de un paquete gaussiano cuando éste se encuentra muy cerca del obturador en el sentido en que  $|x_0/\sigma|$  es pequeño. Se realizará la comparación de la solución integral para el paquete gaussiano truncado libre ecuación (29) con el paquete gaussiano exacto. La solución analítica obtenida para el paquete gaussiano truncado libre no

será utilizada en este caso, ya que sólo es válida para truncamientos pequeños ( $|x_0/\sigma| > 1$ ). El paquete que analizaremos posee los siguientes parámetros: una energía  $E_0 = 1.0$  eV, anchura  $\sigma = 30.0$  Å, y posición inicial  $x_0 = -20.0$  Å. En la Figura 10 se presenta la evolución espacial de la densidad de probabilidad a diferentes tiempos:  $t = 0.01$  fs,  $t = 0.1$  fs,  $t = 1.0$  fs y  $t = 10$  fs. En dicha figura se puede observar claramente que el paquete truncado (línea continua) no es simétrico, mientras que el paquete exacto (línea a trazos) sí lo es. Podemos entender esta diferencia aduciendo que al abrir el obturador el paquete truncado sufre una distorsión en la parte derecha justo donde fue truncado por el obturador (Figura 10 (a)). Esta distorsión da lugar a oscilaciones que se propagan hasta el extremo izquierdo del mismo (Figura 10 (b)). Las oscilaciones generadas se suavizan y desvanecen para desaparecer a tiempos relativamente largos (Figuras 10 (c) y 10 (d)). Estos tiempos son menores que  $t = \tau/4$ . Inicialmente el paquete truncado supera en amplitud al paquete exacto, pero este último decae más rápido y se retrasa conforme transcurre el tiempo por lo que su amplitud termina siendo menor que la del primero. Además, anteriormente habíamos visto que cuando el paquete se encontraba inicialmente lejos del obturador, éste se movía con velocidad semiclásica  $v_{sc}$ , la cual depende de la energía de incidencia  $E_0$ . En el caso en que a  $t = 0$  fs nos encontramos muy cerca del obturador, la velocidad con que se propagará el máximo del paquete es diferente a  $v_{sc}$ . Esto como resultado de los efectos transitorios que aparecen a tiempos  $t < \tau/4$  ( $t = 0.01$  fs,  $0.1$  fs,  $1.0$  fs), y desaparecen a tiempos mayores ( $t = 10.0$  fs).

De acuerdo con el estudio hecho en la subsección 4.1 se sabe que el paquete truncado en el espacio de momentos tiene una distribución más amplia que el paquete gaussiano exacto,

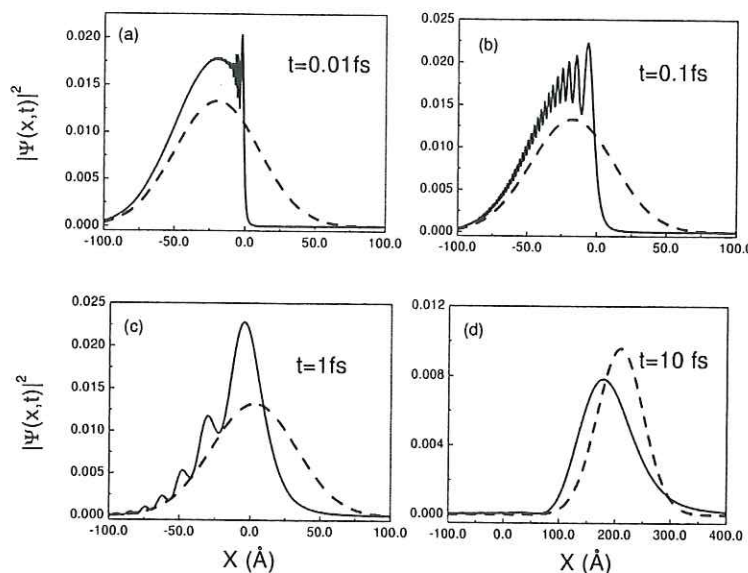


FIGURA 10.- Secuencia de gráficas que muestran la densidad de probabilidad,  $|\Psi|^2$ , correspondiente a los paquetes truncado (línea continua) y exacto (línea a trazos) como función de la posición a diferentes tiempos, los cuales se encuentran especificados en cada gráfica. (a) Al inicio el paquete truncado exhibe una notable distorsión en la vecindad del obturador ( $x = 0$ ), (b) y ésta se manifiesta en todo el paquete. (c) Las oscilaciones disminuyen en frecuencia y la curva se hace más suave conforme transcurre el tiempo, adoptando finalmente una forma gaussiana distorsionada (d).

siempre que el primero sea truncado considerablemente (Fig. 10(b)). De esto, se deduce que los efectos transitorios son ocasionados principalmente por las componentes de momento más rápidas, las cuales interfieren como consecuencia del truncamiento del estado inicial. Cabe destacar que dicho fenómeno ocurre en el intervalo de tiempo  $t < \tau/4$ . Además, el paquete gaussiano truncado exhibe una amplitud menor que el paquete exacto, esto debido a que las ondas que interfieren destructivamente no contribuirán a la probabilidad total, y como consecuencia la distribución se ensancha más rápido para que la densidad de probabilidad integrada en el espacio sea uno.

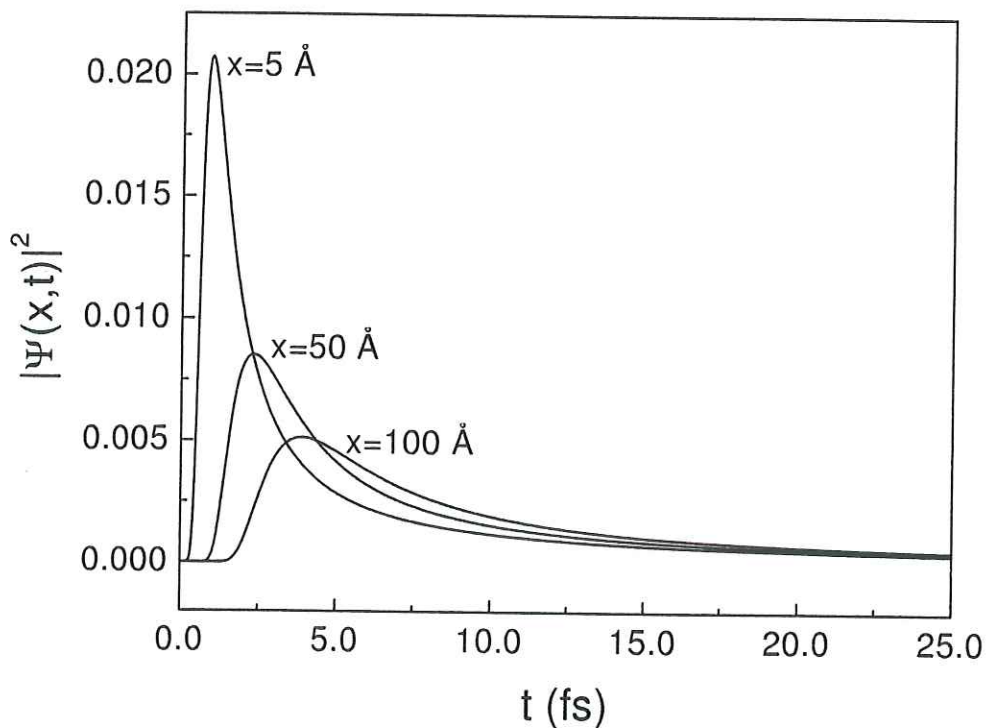
### 4.3 Evolución temporal del paquete gaussiano truncado

En la presente sección estudiaremos la evolución temporal del paquete truncado libre, utilizando las soluciones (29) y (58). Al igual que en la Sec. 4.2, consideraremos los regímenes de truncamiento pequeño (Subsec. 4.3.1) y grande (Subsec. 4.3.2). En ambos casos, se cotejarán los resultados obtenidos, con el caso exacto (ecuación (73)).

#### 4.3.1 Régimen de truncamiento pequeño ( $|x_0/\sigma| > 1$ )

Iniciaremos nuestro estudio, analizando la evolución temporal de un paquete con energía  $E_0 = 1$  eV, posición inicial  $x_0 = -25.0$  Å y anchura  $\sigma = 5.0$  Å. En la figura 11 presentamos la densidad de probabilidad en los puntos  $x = 5.0$  Å,  $x = 50.0$  Å,  $x = 100.0$  Å. Se observa que los paquetes gaussianos truncados (integral y analítico), así como el exacto tienen el mismo comportamiento como función del tiempo ya que las correspondientes gráficas de  $|\Psi(x, t)|^2$  vs  $t$  se traslapan entre sí. Vemos que cuando nos colocamos muy cerca del obturador, el tiempo que tarda en llegar el máximo del paquete es pequeño. Si nos alejamos, dicho tiempo aumenta y la amplitud del paquete disminuye. Este comportamiento se debe a una combinación de efectos: el de propagación del centroide, y la disminución de la amplitud del paquete conforme éste se desplaza en  $x$ . A tiempos largos, las curvas correspondientes a cada una de las posiciones de observación, se empalman. De la Figura 6, habíamos visto que este paquete como función de la posición, tenía una velocidad semiclassical dada por  $v_{sc} = x/t$ . Sin embargo, visto como función del tiempo (Figura 11), vemos que no cumple la relación  $t = x/v_{sc}$ , ya que el tiempo al que se localiza el máximo no corresponde al tiempo semiclassical. Esto se debe a que el máximo que se mide en una posición fija,

corresponde a un punto que se encuentra adelante del verdadero máximo. En otras palabras, el máximo del paquete gaussiano truncado decae de tal forma que cuando llega al punto de observación es mucho menor en amplitud, con respecto a los demás puntos que ya han pasado. Este problema ha sido observado en el problema de propagación de ondas en un potencial escalón utilizando una fuente puntual (Villavicencio et al., 2002). Esto también ocurre en la evolución temporal del paquete exacto.



**FIGURA 11.-** Evolución temporal de las densidades de probabilidad, para  $x = 5.0 \text{ \AA}$ ,  $50.0 \text{ \AA}$  y  $100.0 \text{ \AA}$ . Las líneas continua y punteada correspondientes al paquete truncado, integral y analítico respectivamente, así como la línea a trazos asignada al paquete gaussiano exacto. Se traslapan totalmente en las diferentes posiciones,  $x$ .

Hay que destacar que en este régimen, tanto la solución analítica (ecuación (58)) como la solución integral (ecuación (29)) para el paquete gaussiano truncado libre, exhiben un

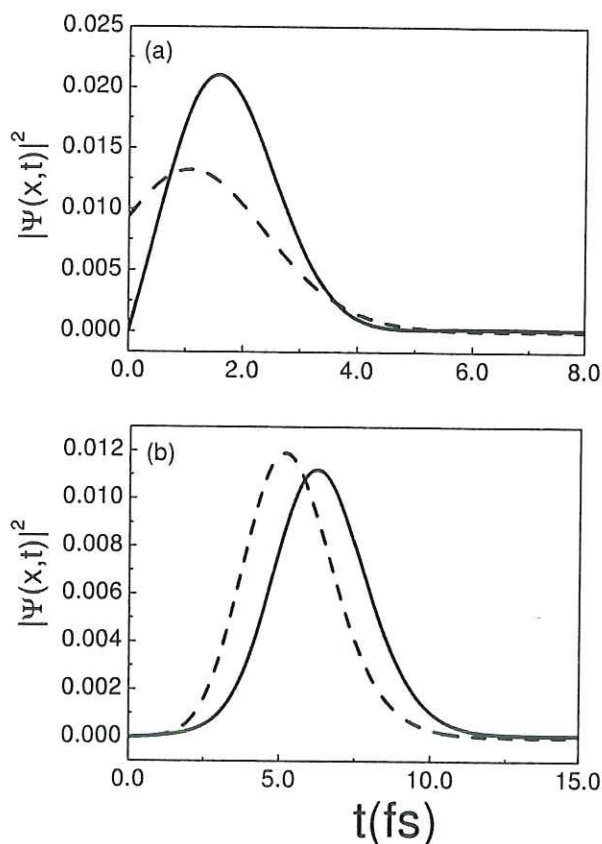
comportamiento idéntico como función del tiempo. Esto es de suma importancia, ya que la solución analítica resulta más fácil de evaluar que la solución integral. Sin embargo, hay que aclarar que la solución analítica para el paquete gaussiano truncado libre sólo es válida en el régimen  $|x_0/\sigma| > 1$ , por lo que para el caso  $|x_0/\sigma| < 1$  utilizaremos la solución integral.

En esta sección se obtuvieron resultados con las soluciones integral  $\Psi_0$  y analítica  $\Psi_{0+}$  para el paquete gaussiano truncado. Aquí es importante señalar que en el régimen  $|x_0/\sigma| > 1$ , también pudimos haber utilizado la aproximación a primer término de la solución analítica,  $\Psi_L$  para describir la evolución temporal.

#### 4.3.2 Régimen de truncamiento grande ( $|x_0/\sigma| < 1$ )

Para analizar el comportamiento del paquete gaussiano truncado (ecuación (29)) vs el exacto (ecuación (73)) en este régimen, consideraremos un paquete con los siguientes parámetros:  $E_0 = 1$  eV,  $x_0 = -20.0$  Å y  $\sigma = 30.0$  Å. Aquí evaluaremos la densidad de probabilidad en los puntos  $x = 5.0$  Å y  $x = 100.0$  Å. Es preciso aclarar que para este caso no utilizaremos la solución analítica para el paquete gaussiano truncado libre, ya que no se aplica para las condiciones iniciales dadas. De la Figura 12(a) podemos observar que el máximo del paquete truncado aparece más tarde con respecto al paquete exacto. El paquete exacto aparece instantáneamente debido a que a  $t = 0$  fs ya hay presencia de sus componentes en  $x > 0$ , ya que es muy ancho. Además, el paquete exacto está definido sobre todo el espacio a  $t = 0$  fs. Debido a las condiciones iniciales a las que es sujeto el paquete gaussiano truncado, a éste le tomará cierto tiempo en aparecer y ser detectado en la posición  $x$ . Para tiempos cortos, el paquete truncado tiene amplitud mucho mayor que el exacto, pero después de

cierto intervalo ésta decae considerablemente. Este efecto es producido por el truncamiento del paquete gaussiano.



**FIGURA 12.-** Densidad de probabilidad del paquete truncado (línea continua) vs exacto (línea a trazos) como función del tiempo, en las posiciones  $x = 5 \text{ \AA}$  (a) y  $x = 100 \text{ \AA}$  (b). En (a) se observa que para  $x$  pequeñas el paquete truncado exhibe una amplitud mayor en comparación con el paquete exacto. Y en (b), la amplitud del paquete gaussiano decrece para  $x$  grandes.

Observamos que cuando acercamos el paquete truncado al obturador, de tal forma que  $|x_0/\sigma| < 1$ , su amplitud decrece con mayor rapidez y su máximo se retrasa con respecto al paquete gaussiano exacto. Estos dos puntos los asociamos al hecho de que el paquete gaussiano truncado es mucho más ancho que el paquete exacto, en el espacio de momentos.

Las componentes más rápidas del paquete gaussiano truncado se suman destructivamente quedando principalmente las componentes lentas, lo que se refleja en el retraso. La disminución en el máximo es consecuencia del ensanchamiento del paquete conforme se propaga en,  $x$  y también de la normalización de la densidad de probabilidad.

También se observó que el máximo del paquete gaussiano truncado libre no aparece al tiempo semiclásico, es decir  $t \neq x/v_{sc}$ . Recordemos que para el caso  $|x_0/\sigma| > 1$  tampoco se cumple la relación anterior, como se vió en la subsección previa. Además, el paquete gaussiano truncado colocado inicialmente cerca del obturador, tarda un cierto intervalo de tiempo, mayor que el tiempo que tarda el paquete gaussiano exacto, antes de ser detectado en una posición fija, debido a que a  $t = 0$  fs éste se encontraba confinado en el semiespacio de  $\infty < x \leq 0$ , por lo cual requiere cierto tiempo para viajar de su posición inicial al punto de medición.

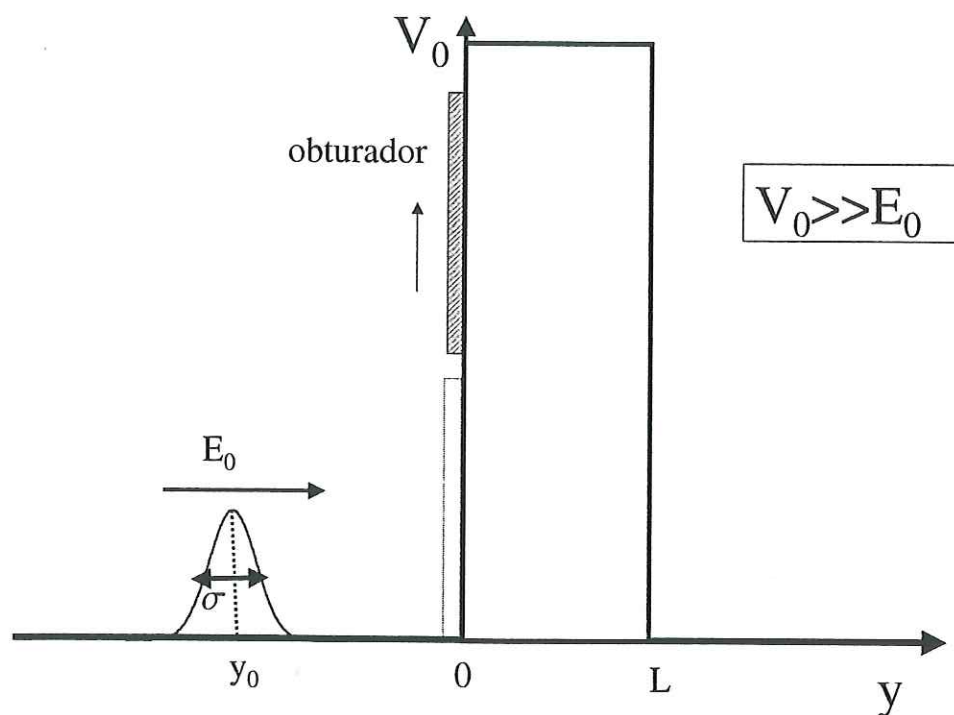
## Capítulo 5

# PAQUETE GAUSSIANO TRUNCADO INCIDIENDO SOBRE UNA BARRERA DE POTENCIAL

En este capítulo se realizará el estudio de la evolución temporal y espacial de paquetes gaussianos truncados en presencia de potenciales. Específicamente observaremos la dinámica de paquetes gaussianos truncados en la región de transmisión, en presencia de barreras rectangulares con altura  $V_0$  y anchura  $L$  (Sec. 5.1). El estudio consistirá en un análisis de la densidad de probabilidad en el régimen de paquetes gaussianos con truncamiento pequeño i.e.  $|x_0/\sigma| \gg 1$ . Para esto, utilizaremos la solución integral  $\Psi_V$  (ecuación (30)) y la solución analítica  $\Psi_{\alpha < 1}$  (ecuación (67)). Además, verificaremos la validez de la solución analítica aproximada para barreras transparentes y energías de incidencia rasantes, dada por la ecuación (5.2),  $\Psi_{\alpha < 1}$ . Ver Figura 13.

### 5.1 Evolución de paquetes gaussianos incidiendo sobre una barrera de potencial

En esta sección, se estudiará la evolución de un paquete gaussiano truncado que incide sobre una barrera de potencial de altura  $V_0$  y anchura  $L$ . Analizaremos la densidad de probabilidad en la región de transmisión como función de la posición y del tiempo. Esto

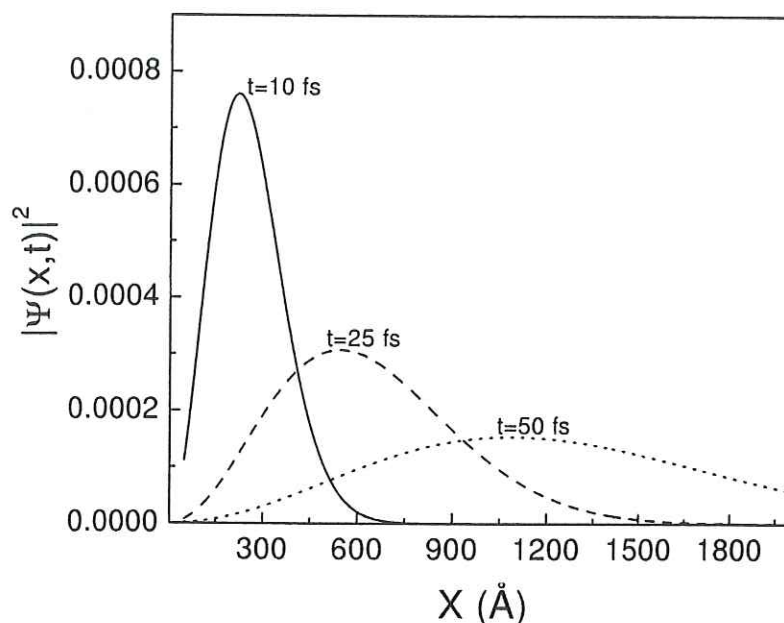


**FIGURA 13.-** Paquete gaussiano truncado incidiendo sobre una barrera de potencial. La energía de incidencia es mucho menor que la intensidad de la barrera, de tal forma que  $E_0/V_0 \ll 1$ .

nos permitirá verificar que con la solución numérica dada por la ecuación (30) es posible obtener información acerca del paquete dispersado. En la subsección 5.1.1 se estudia la evolución del paquete gaussiano como función de la posición, mientras que en la subsección 5.1.2 se estudia la evolución de dicho paquete como función del tiempo. Para poder evaluar la función integral, dada por la ecuación (30), se utilizará el método trapezoidal extendido (Press et al., 1986).

### 5.1.1 Paquete gaussiano truncado dispersado por una barrera como función de la posición

A continuación, se realiza el estudio de la evolución espacial de un paquete gaussiano truncado dispersado por una barrera de potencial. Se considera el paquete gaussiano centrado en  $x_0 = -45 \text{ \AA}$ , con una dispersión  $\sigma = 5 \text{ \AA}$  y energía de incidencia  $E_0 = 0.1 \text{ eV}$ . La barrera de potencial tiene una altura  $V_0 = 0.3 \text{ eV}$  y una anchura  $L = 50.0 \text{ \AA}$ . El paquete es observado a diferentes tiempos, con el fin de poder detectar los cambios en su densidad de probabilidad. Esto nos permite claramente determinar propiedades de los paquetes gaussianos al ser dispersados por estos potenciales. Los tiempos para los cuales se calcula la densidad de probabilidad son  $t = 10 \text{ fs}$ ,  $t = 25 \text{ fs}$  y  $t = 50 \text{ fs}$ . De la Figura 14, se puede apreciar



**FIGURA 14.-** Transmisión del paquete gaussiano centrado en  $x_0 = -45 \text{ \AA}$  y dispersión  $\sigma = 5 \text{ \AA}$ , como función de la posición. Para diferentes tiempos el paquete se desplaza y su dispersión aumenta, lo cual hace que el máximo de la densidad de probabilidad disminuya.

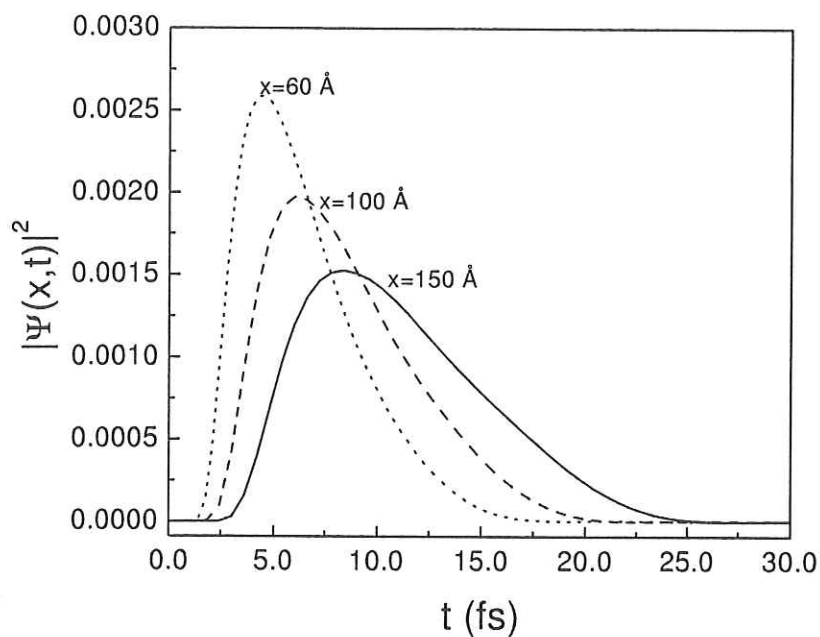
claramente la dinámica del paquete gaussiano transmitido en donde se utilizó el intervalo de integración  $-1 \leq k \leq 1$  y realizando  $3 \times 10^5$  iteraciones por punto. Podemos apreciar en las gráficas de esta figura que la densidad de probabilidad tiene un comportamiento similar al del paquete gaussiano libre, ya que tiende a extenderse en el espacio conforme se propaga.

Con el anterior resultado, podemos constatar que contamos con una herramienta que permite realizar estudios acerca de la densidad de probabilidad del paquete transmitido, como los realizados por Hartman (1962).

### 5.1.2 Paquete gaussiano dispersado por una barrera de potencial como función del tiempo

En esta sección se realizará un estudio como función del tiempo, de la densidad de probabilidad del paquete gaussiano truncado en presencia de una barrera de potencial. El paquete gaussiano tiene los siguientes parámetros:  $x_0 = -45 \text{ \AA}$ ,  $\sigma = 5 \text{ \AA}$  y  $E_0 = 0.1 \text{ eV}$ . La barrera de potencial tiene altura  $V_0 = 0.3 \text{ eV}$  y anchura  $L = 50 \text{ \AA}$ . Éste es el mismo caso discutido en la Subsec. 5.1.1. Las posiciones en las cuales se mide la densidad de probabilidad son:  $x = 60 \text{ \AA}$ ,  $x = 100 \text{ \AA}$  y  $x = 150 \text{ \AA}$ . De la Figura 15 se observa que el máximo del paquete gaussiano se va desplazando para las diferentes posiciones que se han escogido. Además, se puede ver la relación que existe entre el desplazamiento y ensanchamiento de dicho paquete. Para evaluar la integral (30) se utilizó el intervalo de integración  $-1 \leq k \leq 1$  y  $3 \times 10^5$  iteraciones por punto.

Resumidamente en esta sección verificamos que la ecuación (30) es una herramienta útil para efectuar análisis sobre la evolución de la densidad de probabilidad de un paquete



**FIGURA 15.-** Transmisión del paquete gaussiano centrado en  $x_0 = -45 \text{ \AA}$  y dispersión  $\sigma = 5 \text{ \AA}$ , como función del tiempo. Para diferentes posiciones el paquete se desplaza y su dispersión aumenta, la serie de curvas nos muestra como evoluciona la densidad de probabilidad del paquete transmitido.

gaussiano truncado, que interacciona con una barrera de potencial. Cabe señalar que este mismo análisis puede ser efectuado para cualquier otro potencial del cual se conozca o se pueda calcular la amplitud de transmisión. Por ello, la ecuación (30) constituye una de las principales aportaciones de este trabajo, ya que es una expresión con un gran potencial de aplicabilidad.

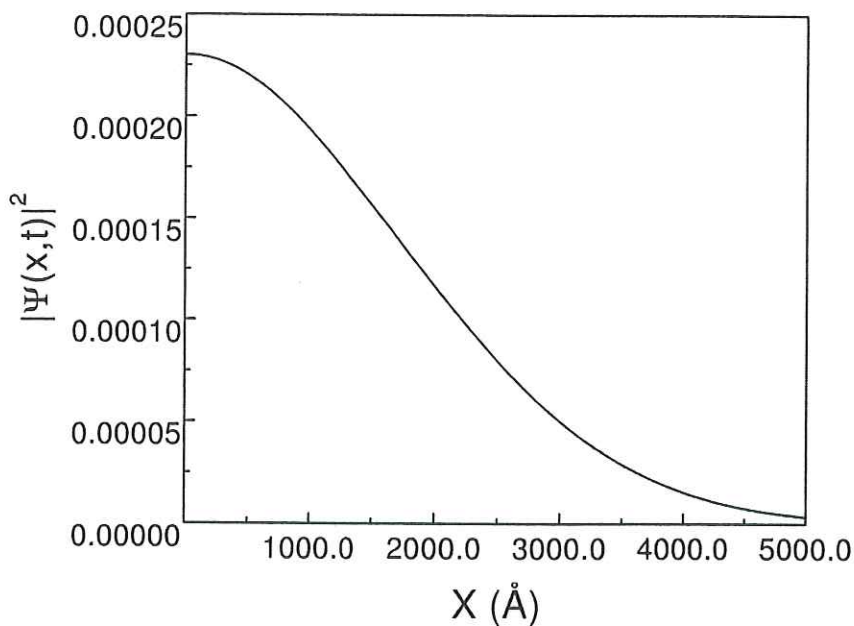
## 5.2 Comparación de la solución analítica e integral para el caso de barreras transparentes

En esta sección se realizará un estudio de las densidades de probabilidad a través de la solución analítica  $\Psi_{\alpha < 1}$  y de la solución integral  $\Psi_V$ . El objetivo es mostrar la validez de la primera para el caso de barreras transparentes, es decir, para los casos de  $\alpha \ll 1$ . Se considerarán paquetes gaussianos que se encuentren en el régimen de truncamiento pequeño ( $|x_0/\sigma| > 1$ ) y donde además  $E_0/V_0 \ll 1$ . Esto, con el fin de poder realizar estudios dinámicos que se ubiquen dentro del régimen de validez de la solución analítica  $\Psi_{\alpha < 1}$ . En la Subsec. 5.2.1 se presentará un análisis como función de la posición, mientras que el Subsec. 5.2.2 se hará como función del tiempo.

### 5.2.1 Solución analítica vs integral como función de la posición

A continuación se realizará una comparación de la densidad de probabilidad asociada a la soluciones (30) y (67). El propósito es mostrar la gran importancia que tiene la solución analítica (ecuación (67)) para realizar estudios dinámicos acerca de un problema de gran interés físico, como lo es el de barreras transparentes (Hartman, 1962). Para el análisis de la función, se utiliza un paquete gaussiano centrado en  $x_0 = -45 \text{ \AA}$ , con una dispersión espacial  $\sigma = 5 \text{ \AA}$  y una energía de incidencia  $E_0 = 1 \times 10^{-4} \text{ eV}$ . La barrera de potencial posee una altura  $V_0 = 10 \text{ eV}$  y una opacidad,  $\alpha = 6 \times 10^{-5}$ . La densidad de probabilidad es calculada a un tiempo,  $t = 100\text{fs}$ . De la Figura 16 se puede observar claramente que la curva perteneciente a la solución integral (línea continua) se empalma con la solución analítica (línea a trazos) lo cual muestra la validez de ambas ecuaciones en este régimen.

Cabe señalar, que el traslape de ambas soluciones se observa a otros tiempos, los cuales no se presentan en la gráfica. Para evaluar la integral (30) se utilizó el intervalo de integración  $-1 \leq k \leq 1$  e implementamos  $3 \times 10^5$  iteraciones por punto.

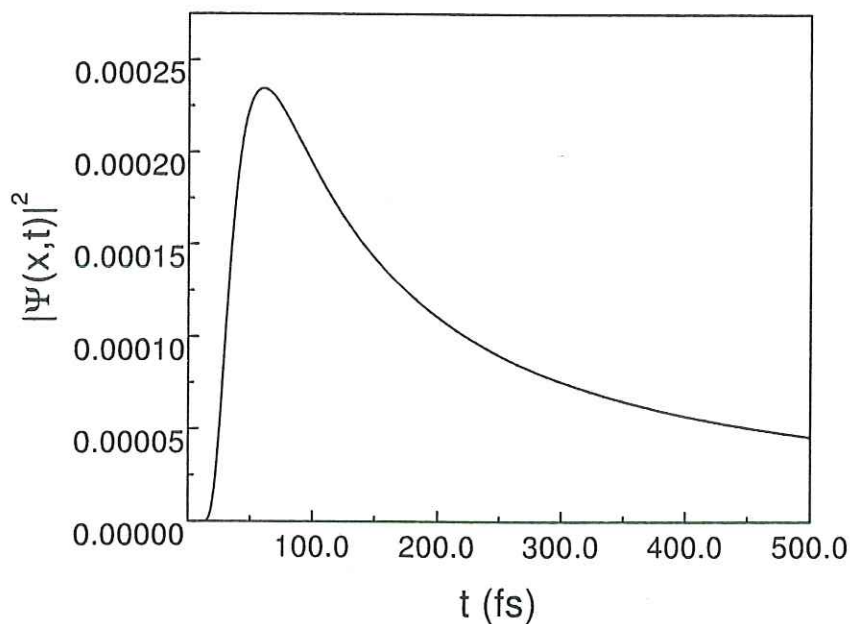


**FIGURA 16.-** Transmisión de un paquete gaussiano que interactúa con una barrera de potencial transparente ( $\alpha < 1$ ). La línea continua representa la solución integral, mientras que la línea a trazos representa la solución analítica. Obsérvese que a  $t = 100$  fs hay traslape de ambas soluciones.

Por los resultados obtenidos del análisis de la densidad de probabilidad como función de la posición  $x$ , podemos decir que la solución analítica así como la solución integral son válidas para el caso de barreras transparentes y energías de incidencia rasantes. Sin embargo, sólo faltaría mostrar esta validez como función del tiempo. Dicho estudio se llevará a cabo en la siguiente subsección.

### 5.2.2 Solución analítica vs integral como función del tiempo

A continuación analizaremos las densidades de probabilidad de las funciones (30) y (67) como función del tiempo a una posición fija. Para este caso utilizamos el paquete gaussiano con parámetros:  $x_0 = -45 \text{ \AA}$ ,  $\sigma = 5 \text{ \AA}$  y  $E_0 = 1 \times 10^{-4} \text{ eV}$ . La barrera tendrá altura  $V_0 = 10 \text{ eV}$  y opacidad,  $\alpha = 6 \times 10^{-5}$ . La posición de medición es  $x = 1000 \text{ \AA}$ . De la Figura 17 se ve que la densidad de probabilidad obtenida con la solución analítica  $|\Psi_{\alpha < 1}|^2$  (línea a trazos) se comporta de igual manera que la obtenida con la solución numérica  $|\Psi_V|^2$  (línea continua).



**FIGURA 17.-** Densidad de probabilidad del paquete transmitido a través de una barrera transparente. Se gráfica la solución analítica (línea a trazos) vs integral (línea continua) como función del tiempo, en  $x = 1000 \text{ \AA}$ . Se puede observar que ambas densidades de probabilidad tienen el mismo comportamiento en  $x = 1000 \text{ \AA}$ .

El hecho de que la solución analítica reproduzca los resultados de la solución integral,



nos es de gran importancia, ya que la primera es más fácil de evaluar, lo que permite realizar cálculos con mayor rapidez ahorrándonos tiempo de cómputo. Para resolver la integral (30), se utilizó el intervalo de integración y el número de iteraciones considerado en la sección 5.2.1.

En resumen, el estudio realizado en esta sección nos permitió corroborar la validez de los resultados obtenidos mediante la fórmula analítica con aquellos que se obtienen mediante integración numérica. Por lo tanto, una de las principales aportaciones del trabajo es esta herramienta con la cual podemos realizar estudios dinámicos sobre estos sistemas. Entre las posibles cuestiones a analizar se encuentran problemas de avances y retrasos temporales así como efecto Hartman entre otros.

## Capítulo 6

### CONCLUSIONES

En el presente trabajo se realizó un estudio del problema de la evolución espacial y temporal de paquetes gaussianos truncados en presencia de potenciales unidimensionales de alcance finito, así como para el caso libre. La parte central de este estudio se fundamentó en el desarrollo y aplicación de nuevas herramientas teóricas para estudiar la dinámica de paquetes gaussianos. Se trata de un formalismo basado en un desarrollo de la función de onda en estados del continuo que permite obtener una representación integral de la función de onda, tanto para el caso libre como para la región de transmisión de potenciales unidimensionales de alcance finito. Dentro de las aportaciones más importantes de esta investigación se encuentra el desarrollo de nuevas herramientas teóricas para estudiar la dinámica de paquetes gaussianos. Entre estas destaca la representación integral de la función de onda para el caso libre, de la cual se obtuvo una expresión analítica válida para regímenes de interés físico. Además, se dedujo una representación integral para la función de onda en la región de transmisión de potenciales unidimensionales en donde uno de los componentes principales del integrando es la amplitud de transmisión del sistema, cantidad que puede ser evaluada fácilmente. Así mismo obtuvimos una expresión analítica para describir la evolución de paquetes gaussianos truncados en barreras transparentes en el régimen de bajas energías de

incidencia. A continuación presentaremos los resultados que se desprenden de los estudios de la evolución de paquetes gaussianos en el caso libre y en presencia de un potencial.

### **El paquete gaussiano truncado libre**

En este caso se obtuvo una representación de la función de onda utilizando un desarrollo en estados del continuo que permite describir la evolución de los paquetes gaussianos en todo el espacio, i.e.,  $-\infty < x < \infty$ . Se muestra que dicha evolución está gobernada por el grado de truncamiento del estado inicial, lo que da origen a dos regímenes: régimen de máximo truncamiento  $|x_0/\sigma| \gg 1$ , y régimen de mínimo truncamiento  $|x_0/\sigma| \leq 1$ , donde el parámetro  $|x_0/\sigma|$ , es la razón entre la posición del centroide  $x_0$  y su dispersión  $\sigma$ . En el primer régimen de mínimo truncamiento ( $|x_0/\sigma| \gg 1$ ), la evolución del paquete gaussiano truncado coincide exactamente con la del paquete gaussiano que se extiende inicialmente en todo el espacio. Este régimen corresponde a una situación de un estado inicial con un mínimo truncamiento. Además, demostramos que es posible obtener una fórmula analítica en términos de las funciones de Moshinsky, a partir de la representación integral de la función de onda. Contar con este tipo de representaciones analíticas ofrece una gran ventaja sobre las representaciones integrales debido a que estas últimas requieren ser evaluadas mediante técnicas numéricas. Más aún, dicha expresión analítica permite realizar un estudio del comportamiento asintótico de la solución, utilizando los desarrollos asintóticos de las funciones  $M$ .

En el régimen de máximo truncamiento ( $|x_0/\sigma| < 1$ ), se observó que la dinámica de los paquetes gaussianos truncados difiere notablemente de la de los paquetes no truncados. En esta situación se encontró un fenómeno transitorio en la densidad de probabilidad, como

función de la posición, el cual se origina en la vecindad del punto de truncamiento del paquete. Dicho transitorio se manifiesta como un pequeño frente de onda que ocurre a escalas de tiempo menores que  $\tau/4$ , donde  $\tau = 2m\sigma^2/\hbar$ . Dicha escala de tiempo  $\tau$  es relevante en el contexto de la propagación de paquetes gaussianos, ya que representa el tiempo a partir del cual un paquete empieza a distorsionarse apreciablemente.

### **Dispersión por potenciales unidimensionales de alcance finito**

Otro de los aspectos que abordamos en el presente trabajo fue el desarrollo de una representación integral para estudiar la evolución de paquetes gaussianos truncados en la región de transmisión de potenciales unidimensionales. Éste es un resultado de carácter general, pues se trata de una herramienta que puede ser de gran utilidad para describir la dinámica de paquetes gaussianos en diversos sistemas como lo son, la barrera de potencial, el doble barrera o incluso superredes finitas. Una de las ventajas de esta representación es que sólo es necesario conocer la amplitud de transmisión de estos sistemas, cantidad que puede ser evaluada fácilmente mediante métodos estándares de mecánica cuántica, como por ejemplo el método matriz de transferencia. Otro de los resultados importantes que se desprenden de este estudio es la obtención de una fórmula analítica en términos de las funciones de Moshinsky que permite describir la evolución de un paquete gaussiano en el régimen de mínimo truncamiento ( $|x_0/\sigma| > 1$ ) para una barrera de potencial. Dicha fórmula analítica es válida para barreras de potencial transparentes en la situación de bajas energías de incidencia.

Para verificar las diversas expresiones analíticas obtenidas para la descripción de la dinámica de los paquetes gaussianos truncados se realizó un estudio numérico de la densi-

dad de probabilidad como función de la posición y el tiempo. Esto nos permitió corroborar la validez de los resultados obtenidos con nuestras fórmulas analíticas con aquellos que se obtienen mediante integración numérica. Resumidamente, podemos afirmar que contamos con una herramienta poderosa para estudiar evolución temporal y espacial de paquetes gaussianos truncados, con base en funciones analíticas exactas. El enfoque teórico presentado en éste trabajo podría ser la base para incursionar en diversos problemas de interés actual como lo son los fenómenos de avance y retrasos temporales, el efecto Hartman, entre otros.

# APÉNDICE A. EVOLUCIÓN DEL PAQUETE GAUSSIANO LIBRE

En este apéndice presentamos el problema de la evolución temporal del típico paquete gaussiano estudiado en la literatura básica de mecánica cuántica (Shankar, 1980; Cohen, 1977). Considere un paquete gaussiano centrado inicialmente en  $y = y_0$  y una dispersión espacial  $\sigma$ . Ver Figura 18. La energía de incidencia del paquete está dada por  $E_0 = \hbar^2 k_0^2 / 2m$ , donde  $k_0$  es la componente en el espacio momentos asociada al centroide. El estado inicial a  $t = 0$  está dado por,

$$\Psi(y, 0) = \frac{1}{\sqrt{\sigma\sqrt{2\pi}}} e^{ik_0 y - (y-y_0)^2 / 4\sigma^2}. \quad (68)$$

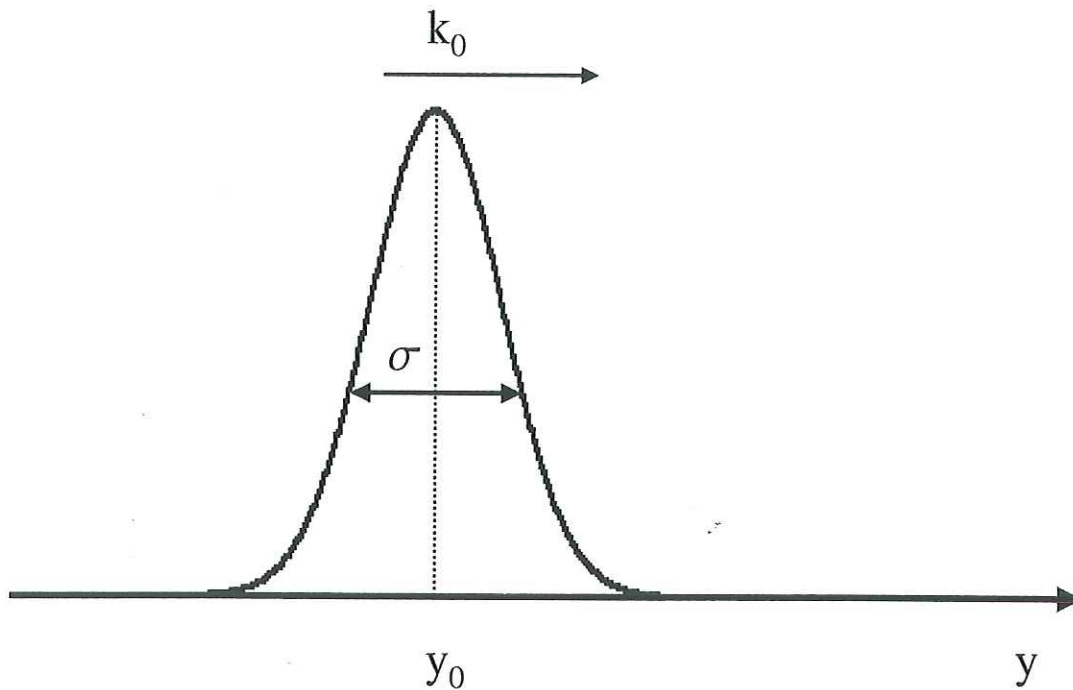
Este estado tiene una representación en el espacio de momentos, misma que se escribe de la siguiente manera

$$\phi(k) = \sqrt{\frac{2\sigma}{\sqrt{2\pi}}} \exp \left\{ - \left[ ik_0 y_0 + \sigma^2 (k_0 - k)^2 - ik_0 y_0 \right] \right\}. \quad (69)$$

La evolución temporal del paquete está dada por la conocida expresión basada en un desarrollo en estados del continuo

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{\sigma\sqrt{2\pi}}} \int_{-\infty}^{\infty} dy K_0(y, x, t) \Psi(y, 0), \quad (70)$$

donde  $K_0(y, x, t)$  es el propagador de la partícula libre (Liboff, 1992), el cuál está dado por



**FIGURA 18.-** Paquete gaussiano definido en la región  $-\infty \leq y \leq \infty$ , con una dispersión espacial  $\sigma$  y momento  $p_0 = \hbar k_0$ .

$$K_0(y, x, t) = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar it}} e^{i(x-y)^2 m/2\hbar t} \quad (71)$$

Sustituyendo (71) en (70)

$$\Psi(x, t) = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar it}} \frac{1}{\sqrt{\sigma\sqrt{2\pi}}} \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{im(x-y)^2/2\hbar t} e^{ik_0 y - (y-y_0)^2/4\sigma^2} \quad (72)$$

Utilizando la identidad integral (41) en la ecuación (72) obtenemos la función que describe la evolución temporal del paquete gaussiano libre para toda  $x$ ,

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{\sigma\sqrt{2\pi}}} \sqrt{\frac{1}{1 + it/\tau}} \exp \left[ \frac{1}{4\sigma^2} (x^2 i\tau/t - y_0^2) \right] \exp \left[ \frac{-(i\tau/4\sigma^2 t)(x - \hbar k_0 t/m + ity_0/\tau)^2}{1 + it/\tau} \right], \quad (73)$$

donde  $\tau = 2m\sigma^2/\hbar$  es una escala de tiempo que nos da una medida de cuánto tarda un

paquete gaussiano en distorsionarse apreciablemente (Liboff, 1992).

## APÉNDICE B. LA AMPLITUD DE TRANSMISIÓN PARA UNA BARRERA DE POTENCIAL

Considerese el típico problema de dispersión de una onda plana que incide por la izquierda sobre una barrera de potencial rectangular de anchura  $L$  y altura  $V_0$  (Cohen, 1977; Shankar, 1980; Liboff, 1992), como se muestra en la Figura 19.

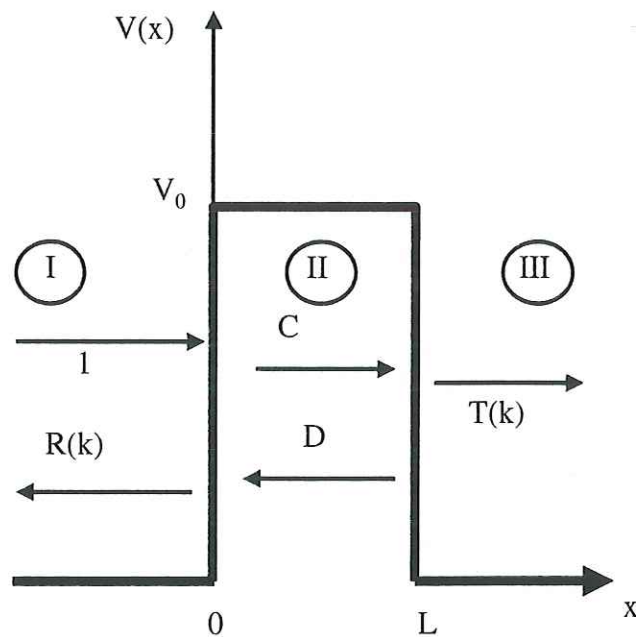


FIGURA 19.- El problema de dispersión para una barrera de potencial de altura  $V_0$  y anchura  $L$ .

El problema involucra la solución de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} + V(x)\Psi(x) = E\Psi(x), \quad (74)$$

para el caso en que la energía de incidencia es menor que la altura de la barrera ( $E < V_0$ ).

Las soluciones para cada una de las regiones del potencial son

$$\Psi_I = e^{ikx} + R(k)e^{-ikx}, \quad (75)$$

$$\Psi_{II} = Ce^{qx} + De^{-qx}, \quad (76)$$

$$\Psi_{III} = T(k)e^{ikx}, \quad (77)$$

donde  $T(k)$  y  $R(k)$  son las amplitudes de transmisión y de reflexión, respectivamente. Hemos definido los momento  $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$  y  $q = \sqrt{k_v^2 - k^2}$ , así como  $k_v = \sqrt{2mV_0/\hbar^2}$ . Aplicando las condiciones de acoplamiento de las funciones anteriores en  $x = 0$  y  $x = L$ , i.e.

$$\begin{aligned} \Psi_I(0) &= \Psi_{II}(0) \\ \Psi_{II}(L) &= \Psi_{III}(L) \end{aligned}, \quad (78)$$

se obtienen el siguiente grupo de ecuaciones

$$1 + R(k) = C + D, \quad (79)$$

$$Ce^{qL} + De^{-qL} = T(k)e^{ikL}. \quad (80)$$

De las condiciones de acoplamiento sobre las derivadas de las funciones

$$\begin{aligned}\Psi'_I(0) &= \Psi'_{II}(0), \\ \Psi'_{II}(L) &= \Psi'_{III}(L),\end{aligned}\tag{81}$$

se obtiene el siguiente par de ecuaciones

$$ik(1 - R(k)) = (C - D)q\tag{82}$$

$$q(Ce^{qL} - De^{-qL}) = ik T(k)e^{ikx}\tag{83}$$

Efectuando algunas manipulaciones algebraicas con las ecuaciones (79), (80), (82) y (83), llegamos a la siguiente expresión para la amplitud de transmisión

$$T(k) = e^{-ikL} \left[ \cosh(qL) + \frac{i(q^2 - k^2)}{2qk} \sinh(qL) \right]^{-1}.\tag{84}$$

### Rescalamiento de la amplitud de transmisión

A continuación se reescribirá la amplitud de transmisión en función de dos parámetros  $\alpha$  y  $u$ , lo cual nos permitirá obtener resultados de carácter general. En la ecuación (84) introducimos explícitamente el valor de  $q$  y  $k$  y realizamos los cambios de variable  $u = (E/V_0)$  y  $\alpha = \sqrt{2mV_0/\hbar^2}L$ ;  $\alpha$  es conocida como la opacidad de la barrera. Con estas consideraciones podemos escribir la ecuación (84) de la siguiente manera

$$T(k) = e^{-i\sqrt{u}\alpha} \left[ \cosh(\xi) + \frac{i}{2} \frac{(1 - 2u)}{\sqrt{(u - u^2)}} \sinh(\xi) \right]^{-1},\tag{85}$$

donde  $\xi = \sqrt{\alpha^2(1 - u)}$ .

Una vez obtenida la amplitud de transmisión como función de sólo dos parámetros adimensionales  $\alpha$  y  $u$  procedemos a obtener una fórmula analítica para el caso de barreras transparentes. Esto es consideremos los casos de barreras que son muy delgadas y altas o muy bajas y anchas i.e. estudiaremos el caso en que la opacidad  $\alpha \ll 1$ . Además, si consideramos la condición  $E \ll V_0$ , entonces  $u \approx 0$ . Por lo tanto la ecuación (85) se puede reescribir como sigue

$$T(k) = e^{-i\sqrt{u}\alpha} \left[ \frac{\sqrt{u}\alpha}{\sqrt{u}\alpha - i\alpha^2/2} \right]. \quad (86)$$

Si ahora escribimos la amplitud de transmisión en términos de las componentes  $k$ , tenemos que

$$T(k) = \frac{ke^{-ikL}}{k - i\beta}, \quad (87)$$

donde  $\beta = -k_v^2 L/2$ . Esta expresión será de gran utilidad, ya que nos permitirá explorar sistemas de barreras transparentes en los Capítulos 3 y 5.

## Bibliografía

- Abramowitz, M. y Stegun, I. A., editores (1964). *Handbook of Mathematical Functions*.  
Dover, New York.
- Brouard, S. y Muga, J. G. (1996). Transient and asymptotic effects in tunneling. *Phys. Rev. A*, 54:3055.
- Cohen, C. B. D. y F. L. (1977). *Quantum Mechanics*. Pergamon, London.
- Delgado F., H. C., Muga, J. G., y Ruschhaupt, A. (2002). The transient response of a quantum wave to an instantaneous potential step switching. *J. Phys. A (Mat. Gen.)*, 35:10377.
- Elberfeld, W. y Kleber, M. (1988). Time-dependent tunneling through thin barriers: a simple analytical solution. *Am. J. Phys.*, 56:155.
- Faddeyeva, V. N. y Terent'ev, N. M. (1961). *Tables of values of the function*, page 297.  
Pergamon, London.
- García-Calderón, G. y Rubio, A. (1997). Transient effects and delay time in the dynamics of resonant tunneling. *Phys. Rev. A*, 55:3361.
- García-Calderón, G. y Villavicencio, J. (2001). Time dependence of the probability density in the transient regime for tunneling. *Phys. Rev. A*, 64(1):012107.

- García-Calderón, G. y Villavicencio, J. (2002). Delay time and tunneling transient phenomena. *Phys. Rev. A*, 66(3):032104.
- García-Calderón, G., Villavicencio, J., Delgado, F., y Muga, J. G. (2002). Time scale of forerunners in quantum tunneling. *Phys. Rev. A*, 66(4):042119.
- García-Calderón, G., Villavicencio, J., y Yamada, N. (2003). Equivalence between the real-time feynman histories and the quantum-shutter approaches for the "passage time" in tunneling. *Phys. Rev. A*, 67:052106.
- Goldberg, A. H. M. S. y. J. L. S. (1967). Computer-generated motion pictures of one-dimensional quantum-mechanical transmission and reflection phenomena. *Am. J. Phys.*, 35:177.
- Hartman, T. E. (1962). Tunneling of a wave packet. *J. Appl. Phys.*, 33:3427.
- Landauer, R. y Martin, T. (1992). *Solid State Comm*, 84:115.
- Leavens C. R., y. G. C. A. (1989). *Phys Rev. B*, 39:1202.
- Liboff, R. L. (1992). *Introductory Quantum Mechanics*. Addison-Wesley.
- Moshinsky, M. (1952). Diffraction in time. *Phys. Rev.*, 88:625.
- Muga J. G. R. S. M. e. I. L. E. e. (2002). *Time in Quantum Mechanics*. Berlin, Springer.
- Palao J. P., J. G. Muga, S. B. y. A. J. (1997). *Phys. Lett. A*, 233:227.
- Press, W. H., Flannery, B. P., Teukolsky, S. A., y Vetterling, W. T. (1986). *Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing*. Cambridge University Press, New York.

- Razavy, M. (2003). *Quantum Theory of Tunneling*. World Scientific.
- Schiff, L. I. (1968). *Quantum Mechanics*. McGraw-Hill.
- Shankar, R. (1980). *Principles of Quantum Mechanics*. Plenum Press, New York.
- Villavicencio, J. y Romo, R. (2003). Resonance forerunners in superlattices. *Phys. Rev. B*, 68(15):153311.
- Villavicencio, J., Romo, R., y y Silva, S. S. (2002). Quantum-wave evolution in a step potential barrier. *Phys. Rev. A*, 66:042110.