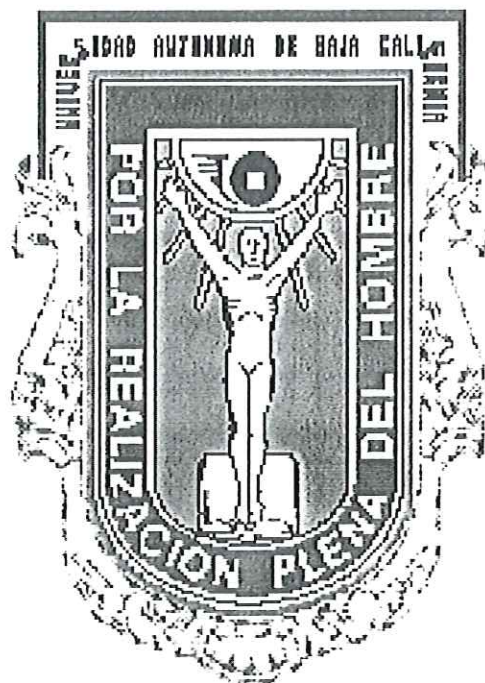


UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE BAJA CALIFORNIA

FACULTAD DE CIENCIAS



Efectos Transitorios en la Dinámica del Tunelaje Cuántico

Memorias del Servicio Social

Que para obtener el Título de:

FÍSICO

Presenta:

MENA BARBOZA ERI ATAHUALPA

ENSENADA, B. C.

FEBRERO 1999

**COORD. DEL SISTEMA DE INFORMACION
ACADEMICA U.A.B.C.**

UNIVERSIDAD AUTONOMA DE BAJA CALIFORNIA
FACULTAD DE CIENCIAS

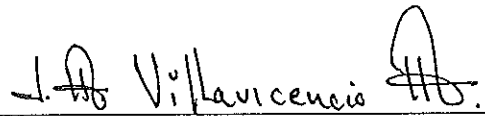
**EFFECTOS TRANSITORIOS EN LA DINÁMICA DEL
TUNELAJE CUÁNTICO**

Memorias del Servicio Social

Que presenta:

Mena Barboza Eri Atahualpa

Aprobado por:



M. en C. Jorge Alberto Villavicencio A.
Presidente



M. en C. Alberto Hernández M.
Secretario



Dr. Roberto Romo Martínez
1er. Vocal

DEDICATORIA

A mis padres:

ELODIA BARBOZA
MIGUEL ANGEL MENA

Con todo mi corazón y respeto

A mis hermanos:

CINDY
ROMMNEY MIGUEL

Con todo mi ser

AGRADECIMIENTOS

Agradezco al M. en C. Jorge Alberto Villavicencio, director de este trabajo, el haberme permitido trabajar en este proyecto contando en todo momento con su apoyo y valiosas sugerencias, sin las cuales no hubiera sido posible este trabajo.

Al Dr. Roberto Romo, por sus grandes sugerencias y valiosas aportaciones durante el trabajo y mi carrera.

A mi maestros y amigos Norma y José Oliveros.

A mis grandes amigos Omar, Paola, Sergio (pollo), Julio Cesar, Franco (nana), Miguel S., Gabriela L., Rodrigo, Ivan, Pablo, Liliana, Roberto (piano), Martain, Araceli, Mike, Aurora, Andrea D., Idania Solorio Z., Virginia, Claudia, Sergio S., Beretta, Luis, René, Jesús, Ana, E. Alejandro, Yee, pepe chuy, Sayola, Jesus E., Roberto V., Siero y Newton, también a la Fam. Ramos Tsuchiya por su ayuda desinteresada durante mis estudios.

A mis compañeros del salón, con los que compartí grandes emociones.

También mi más profundo agradecimiento a la Sra. Rosa C., Sra. Zarela C., Sr. Guillermo L. por su apoyo y comprensión durante una gran parte mis estudios, también a el Sr. Guillermo Jr., Sra. Carmen, Valentin, Valeria, Cecilia, Fabiola, Aldo y Cielo.

A mis amigos surfers Julio D. y Sinuhe P. por su compañía desinteresada .

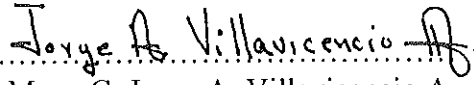
Y en especial y con infinito afecto a Gabriela Leal Rivera, por su amor, comprensión, y gran apoyo durante el término de mi carrera y principio de mi nueva vida a su lado.

A el todo poderoso que está en alguna parte.

por eso y mucho ... gracias... totales.

RESUMEN de las Memorias de Servicio Social de Eri Atahualpa Mena Barboza presentada como requisito parcial para la obtención de la Licenciatura en Física. Ensenada, Baja California, México. Febrero de 1999.

Efectos Transitorios en la Dinámica del Tunelaje Cuántico

Resumen aprobado por :..... 
M. en C. Jorge A. Villavicencio A.
Director del Proyecto

Se presenta un estudio comparativo de los transitorios para dos tipos de condiciones iniciales. Específicamente se analizó el comportamiento de las soluciones del problema del Obturador de Moshinsky con la condición inicial reflejante y condición inicial absorbente a regímenes de tiempo largos y cortos para los siguientes sistemas cuánticos: Potencial Cero (Libre) y potencial delta de Dirac. Asimismo se evaluaron las expresiones analíticas de las densidades de probabilidad como función del tiempo y la posición, para las cuales se encontró que a tiempos largos las propiedades físicas son independientes de la condición inicial. En cambio a tiempos cortos se aprecia claramente que las soluciones dependen de la condición inicial, lo cual se refleja en la discrepancia observada en las soluciones. Estos efectos no son de naturaleza física sino matemática ya que son consecuencias de la discontinuidad que a $t=0$ introduce la condición absorbente.

CONTENIDO

	Página
I. INTRODUCCIÓN.	1
II. FORMALISMO DE LOS OBTURADORES ABSORBENTES.	4
II.1 El caso libre	4
II.2 El potencial delta de Dirac	8
III. FORMALISMO DE LOS OBTURADORES REFLEJANTES.	11
III.1. El caso libre.	11
III.2. El potencial delta de Dirac.	13
IV. ESTUDIO NUMÉRICO DE LOS FENÓMENOS TRANSITORIOS.	16
IV.1. Los fenómenos transitorios asociados a las condiciones iniciales absorbentes.	16
IV.2. Resultados del estudio comparativo de los transitorios asociados a condiciones iniciales reflejantes.	19
V. CONCLUSIONES.	32
LITERATURA CITADA.	34

LISTA DE FIGURAS

Figura		Página
1	Obturador de Moshinsky Caso Libre.	5
2	Obturador de Moshinsky Caso delta de Dirac.	9
3	Densidad de probabilidad como función del tiempo para el caso del Obturador Libre Absorbente con parámetros: $x = .5 \text{ \AA}$, $E = .08 \text{ eV}$.	23
4	Densidad de probabilidad como función de la distancia para el Obturador Libre Absorbente con parámetros: $t = 1 \text{ ps}$, $E = .08 \text{ eV}$. En el recuadro mostramos el avance del frente de onda para $t = 1 \text{ ps}$ (línea punteada), $t = 2 \text{ ps}$ (línea a trazos), $t = 3 \text{ ps}$ (línea continua). La flecha indica la posición del frente de onda semiclásico.	24
5	Densidad de probabilidad como función del Tiempo para el caso el potencial delta de Dirac con la condición inicial Absorbente con parámetros: $x = .5 \text{ \AA}$, $\lambda = 15 \text{ eV \AA}$, $E = .08 \text{ eV}$. En esta gráfica se presenta la solución para el potencial delta (línea continua) y los términos que la forman: $t(k)M(x,k,t)$ (línea a trazos), término $r(k)M(x,-i\alpha,t)$ (línea a puntos).	25
6	Densidad de probabilidad como función de la posición para el caso del potencial delta de Dirac con la condición inicial Absorbente con parámetros: $x = .5 \text{ \AA}$, $\lambda = 15 \text{ eV \AA}$, $E = .08 \text{ eV}$. Se muestra el nacimiento del de onda semiclásico para distintas escalas de tiempos: $t = .5 \text{ ps}$ (línea continua), $t = 10 \text{ ps}$ (línea trazos), $t = 50 \text{ ps}$ (línea a puntos). En el recuadro observamos la misma solución en la situación asintótica donde el frente esta bien definido ($t = 1 \text{ ps}$).	26
7	Densidad de probabilidad como función de la posición para los casos libre (línea continua) y delta de Dirac (línea a trazos) con la condición inicial Absorbente con parámetros: $t = 1 \text{ ps}$, $\lambda = 2 \text{ eV \AA}$, $E = .08 \text{ eV}$.	27
8	Densidad de probabilidad como función del tiempo para el caso libre con la condición inicial Absorbente (línea continua) y Reflejante (línea a trazos) con parámetros: $x = .5 \text{ \AA}$, $\lambda = 15 \text{ eV \AA}$, $E = .08 \text{ eV}$. En el recuadro mostramos las mismas soluciones a tiempos largos del orden de $t = 10^3 \text{ fs}$.	28

LISTA DE FIGURAS (CONTINUACIÓN)

- | | | |
|----|---|----|
| 9 | <p>Densidad de probabilidad como función del tiempo para el caso libre con la condición del potencial delta con la condición inicial Absorbente (línea continua) y Reflejante (línea a trazos) a tiempos cortos, con parámetros: $x=.5 \text{ \AA}$, $\lambda=15 \text{ Ev.\AA}$, $E=.08 \text{ eV}$. En el recuadro mostramos el caso asintótico con t del orden de 10^3 fs donde ambas gráficas se superponen.</p> | 29 |
| 10 | <p>Densidad de probabilidad como función del tiempo para el caso delta con las siguientes condiciones iniciales: Reflejante (línea a trazos) y Absorbente (línea continua), en el régimen de tiempos cortos como se ilustra en la gráfica principal. En el recuadro se presenta la evolución a tiempos largos, con parámetros: $x=.5 \text{ \AA}$, $\lambda=20 \text{ eV \AA}$, $E=.08 \text{ eV}$. en ambas situaciones.</p> | 30 |
| 11 | <p>Densidad de probabilidad como función del tiempo para el casos delta con la condición inicial Reflejante a tiempos cortos con parámetros: $x=.5 \text{ \AA}$, $\lambda=20 \text{ eV \AA}$, $E=.08 \text{ eV}$. Delta Total (línea continua), término $t(-k)M(x,-k,t)$ (línea a trazos y doble punto), término $t(k)M(x,k,t)$ (línea a trazos), término $[t(-k)+ t(k)]M(x,-i\alpha,t)$ (línea a puntos).</p> | 31 |

EFFECTOS TRANSITORIOS EN LA DINÁMICA DEL TUNELAJE CUÁNTICO.

I.- INTRODUCCIÓN.

Uno de los problemas fundamentales en la mecánica cuántica que ha dado lugar a un notable desarrollo tanto en la investigación básica como en la aplicada es el del *tunelaje cuántico*. Los orígenes del problema de tunelaje son casi tan antiguos como la mecánica cuántica, ciertamente en 1928 fueron publicados una serie de trabajos donde fueron aplicadas las nociones de tunelaje en diversas áreas de la física (Oppenheimer, 1928; Gamow, 1928).

En contraste con la descripción estacionaria del tunelaje para el cuál existe una enorme cantidad de trabajos publicados, el estudio de la propiedades del tunelaje dependiente del tiempo ha sido un campo poco explorado. Un ejemplo de ésto es el caso del problema de la propagación de un electrón en una región clásicamente prohibida, que ha dado lugar a una serie de aspectos controversiales, como el del tiempo de tránsito (Hauge, 1989; Landauer, 1994) por mencionar alguno. Recientemente ha surgido un creciente interés en estudiar la propiedades del transporte electrónico desde un punto de vista dinámico para dar luz en éstos problemas fundamentales aún no resueltos.

La mayoría de los estudios en la dinámica del tunelaje cuántico se basan en *soluciones numéricas* de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo, con la condición inicial de un paquete Gaussiano (Hartman, 1962; Collins *et al.*, 1987). Un

aspecto criticado ampliamente en la literatura a estos modelos es la aparición de efectos no locales asociados a la función de onda inicial en la región de potencial que se pretende estudiar. Por otro lado es claro que la ruta numérica no siempre resulta satisfactoria y que para estudiar la dinámica del tunelaje en términos simples es preciso disponer de *soluciones analíticas* exactas.

Un tratamiento analítico que permite realizar tal descripción es el estudio de los fenómenos transitorios asociados a la evolución temporal de una onda plana. Este problema, originalmente planteado por Moshinsky (Moshinsky, 1952, 1976) en 1952, consiste en analizar la evolución temporal de una función de onda plana que inicialmente, al tiempo $t = 0$, ocupa la región $x < 0$, a la izquierda de un obturador situado en $x = 0$. Al resolver la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo con la condición inicial arriba descrita, se obtiene un fenómeno transitorio para las soluciones a tiempos $t > 0$ que Moshinsky llamó *difracción en el tiempo*.

Un aspecto que ha surgido recientemente en el estudio de los transitorios es el problema de las condiciones iniciales. Algunos autores (García-Calderón *et al.*, 1999) han sugerido la utilización de una condición inicial de obturador reflejante para dar una descripción más realista de los fenómenos transitorios que la dada por el obturador absorbente. Por otro lado un aspecto poco estudiado en la literatura es el de las posibles implicaciones de la discontinuidad a $t = 0^+$ de la función de onda inicial y la función de onda transmitida en $x = 0$.

Un modelo de potencial que ha sido ampliamente utilizado por su sencillez matemática para investigar las propiedades de la evolución temporal es el potencial delta de Dirac (Elberfeld *et al.*, 1988; Villavicencio, 1999; Hernández, 1998). Este potencial resulta

un buen candidato para estudiar los transitorios en los distintos regímenes temporales y poder hacer inferencias respecto al problema análogo de la barrera de potencial (García-Calderón *et al.*, 1999; Brouard *et al.*, 1996).

Recientemente se obtuvo la solución analítica exacta para el caso de un potencial delta de Dirac en $x = 0$, utilizando la condición inicial de obturador reflejante (Villavicencio, 1999), aún no reportada en la literatura. En este trabajo se presenta un estudio de los fenómenos transitorios en la situación libre y para el potencial descrito líneas arriba, con el objeto de determinar en que medida las distintas condiciones iniciales modifican a los fenómenos transitorios. El estudio de los fenómenos transitorios en los distintos regímenes temporales puede resultar relevante en el estudio del controversial problema de los *tiempos de tunelaje* (Landauer, 1994), así como el de el problema de los fenómenos no-locales (Holland, 1995) en mecánica cuántica.

II.- EL FORMALISMO DE LOS OBTURADORES ABSORBENTES.

En este capítulo presentamos un estudio de los fenómenos transitorios en los casos de potencial cero (caso libre) y de potencial delta de Dirac, resueltos bajo la condición de *obturador absorbente* de Moshinsky. La discusión de este fenómeno ha sido realizada con anterioridad en la literatura (Moshinsky, 1952) y se presenta en este capítulo con la finalidad de que el trabajo sea autocontenido. Es importante contar con la descripción de los transitorios basada en las condiciones iniciales absorbentes para realizar un estudio comparativo en situaciones con condiciones iniciales reflejantes, dado que es el objetivo fundamental de este trabajo.

II.1.- El caso libre.

El estudio de los fenómenos transitorios en el caso libre ($V(x) = 0$) involucra la solución de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo,

$$H\Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) \quad (1)$$

donde $H = (-\hbar^2/2m)\partial^2/\partial x^2$. A continuación analizaremos el modelo del Obturador de Moshinsky que consiste en estudiar la evolución temporal de una función de onda plana con momento k la cual inicialmente al tiempo $t = 0$ ocupa la región $x \leq 0$, a la izquierda de un obturador en $x = 0$ (Fig. (1)).

Esta condición inicial a $t = 0$ representa el caso de un obturador que absorbe totalmente la onda incidente, la cual puede escribirse como,

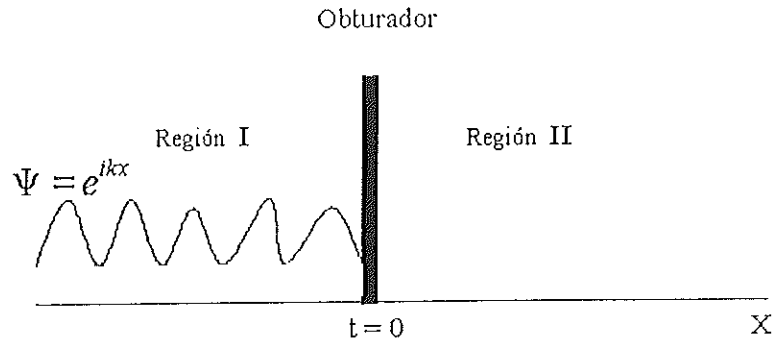


Figura 1.- El obturador de Moshinsky Libre.

$$\Psi(x, 0) = \begin{cases} e^{ikx}, & x \leq 0. \\ 0, & x > 0. \end{cases} \quad (2)$$

Enseguida procedemos a resolver la ecuación diferencial (Ec.(1)) con la condición inicial arriba descrita, que puede resolverse utilizando diversos métodos matemáticos existentes en la literatura, como por ejemplo el método de la transformada de Fourier o el método de propagadores (Moshinsky, 1952, 1976). En nuestro caso aplicamos el método de la *Transformada de Laplace* (Arfken, 1985), que nos permite expresar la ecuación diferencial parcial Ec.(1) como una ecuación diferencial de segundo orden independiente de t ,

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \bar{\Psi}(x, s) + \frac{2mis}{\hbar} \bar{\Psi}(x, s) = \frac{2mi}{\hbar} \Psi(x, 0) \quad (3)$$

Aplicando las condiciones iniciales dadas por la Ec.(2) a la Ec.(3) obtenemos un sistema de ecuaciones diferenciales para las regiones $x \leq 0$ y $x > 0$,

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \bar{\Psi}(x, s) + \frac{2mis}{\hbar} \bar{\Psi}(x, s) = \begin{cases} \frac{2im}{\hbar} e^{ikx}, & x \leq 0. \\ 0, & x > 0. \end{cases} \quad (4)$$

La condición de que las soluciones físicamente aceptables $\Psi(x, t)$ se anulen en el infinito se extiende a la solución $\bar{\Psi}^+(x, s)$, de tal forma que para este caso la solución es,

$$\bar{\Psi}^+(x, s) = c^+ e^{i\sqrt{2\frac{m}{\hbar}}isx}, \quad x > 0 \quad (5)$$

Por otro lado, para el caso $x \leq 0$, tenemos una ecuación diferencial inhomogénea cuya solución físicamente aceptable se escribe como:

$$\bar{\Psi}^-(x, s) = c^- e^{-i\sqrt{2\frac{m}{\hbar}}isx} + \frac{2i\frac{m}{\hbar}}{2is\frac{m}{\hbar} - k^2} e^{ikx} \quad x \leq 0 \quad (6)$$

A continuación aplicamos las siguientes condiciones de acoplamiento a las Ecs.(5, 6) en $x = 0$ para la función de onda así como de su derivada,

$$\bar{\Psi}^+(0, s) = \bar{\Psi}^-(0, s), \quad \frac{d}{dx} \bar{\Psi}^+(0, s) = \frac{d}{dx} \bar{\Psi}^-(0, s) \quad (7)$$

donde después de algunas manipulaciones algebraicas obtenemos el siguiente par de expresiones,

$$c^+ = c^- + \frac{2i\frac{m}{\hbar}}{2is\frac{m}{\hbar} - k^2} \quad (8)$$

$$c^+ = -c^- + \frac{2i\frac{m}{h}}{\sqrt{2\frac{m}{h}is}} \frac{k\frac{m}{h}}{(2\frac{m}{h}is - k^2)} \quad (9)$$

La solución para la función de onda transmitida $\bar{\Psi}^+(x, s)$ se obtiene determinando el valor de la constante c^+ de las ecuaciones (8) y (9), lo que nos conduce a la expresión,

$$\bar{\Psi}^+(x, s) = \frac{i}{\sqrt{2\frac{m}{h}is}} \left[\frac{\frac{m}{h}}{\sqrt{2\frac{m}{h}is} - k} \right] e^{i\sqrt{2\frac{m}{h}is}x}, \quad x > 0 \quad (10)$$

La solución dependiente del tiempo $\Psi(x, t)$ se obtiene calculando la Transformada de Laplace Inversa (TLI) de la ecuación (10). Afortunadamente la TLI de esta expresión puede encontrarse en las tablas matemáticas (Abramowitz, 1968), la cual finalmente nos permite escribir la solución de la onda transmitida $\Psi_t^a(x, t)$ para $t > 0$ y $x > 0$,

$$\Psi_t^a(x, t) = \frac{1}{2} e^{i(kx - k^2\hbar t/2m)} \operatorname{erfc} \left[\frac{x - \frac{k\hbar t}{m}}{\sqrt{\frac{2i\hbar t}{m}}} \right] = M(x; k; t) \quad (11)$$

Aquí hemos introducido la llamada función de Moshinsky, $M(x; k; t)$, quien en 1957 obtuvo por primera vez este resultado. Es conveniente comentar que en nuestro estudio fue necesario evaluar la función $M(x; k; t)$, para lo cual se implementó un programa de cómputo para evaluar numéricamente la función de error complementaria $\operatorname{erfc}(z)$ dada por,

$$\operatorname{erfc}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_z^\infty e^{-t^2} dt \quad (12)$$

Una forma alternativa para calcular la TLI es mediante técnicas de variable compleja para la evaluación de integrales de Bromwich (Arfken, 1985; Churchill, 1986).

Si $f(s)$ es la Transformada de Laplace de una función $F(t)$, la *TLI* se define como,

$$F(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} e^{st} f(s) ds, \quad t > 0 \quad (13)$$

donde la constante γ se elige en el plano complejo de tal manera que todas las singularidades se encuentren a la derecha de la recta $s = \gamma$.

En nuestro caso la representación integral de la función de Moshinsky se escribe como,

$$\Psi_l^a(x, t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} \frac{\frac{m}{\hbar} i e^{i\sqrt{2\frac{m}{\hbar}} is x} e^{st}}{\sqrt{2\frac{m}{\hbar}} is (\sqrt{2\frac{m}{\hbar}} is - k)} ds = M(x; k; t) \quad (14)$$

expresión que será de gran utilidad cuando consideremos el caso del potencial Delta de Dirac del cual nos ocuparemos en la siguiente sección.

II.2.- El potencial delta de Dirac.

En este caso consideramos un modelo de obturador similar al descrito en la sección anterior, con la diferencia de que a un tiempo $t = 0$, el obturador se abre instantáneamente y las partículas interaccionan en $x = 0$ con un potencial delta de Dirac $V(x) = \lambda \delta(x)$, donde λ es la intensidad de la delta Fig.(2). La evolución temporal para $t > 0$ estará dada por la solución de la ecuación (1), con el Hamiltoniano dado por $H = (-\hbar^2/2m)\partial^2/\partial x^2 + \lambda \delta(x)$.

Las condiciones iniciales en este caso están dadas por la Ec.(2). Aquí empleamos de nuevo el método de Transformada de Laplace para resolver la Ec.(1) para las regiones $x > 0$ y $x \leq 0$. Sin embargo, en el caso del potencial delta las condiciones de

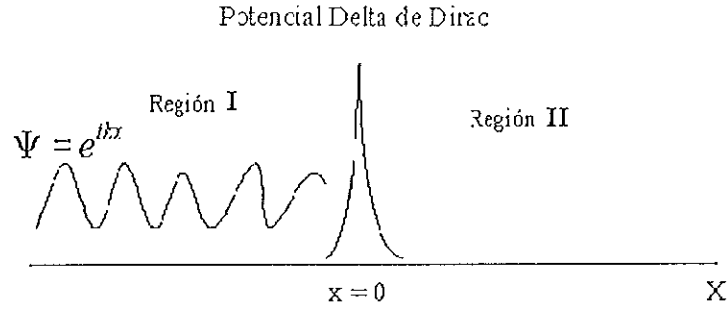


Figura 2.- El obturador de Moshinsky para un potencial Delta de Dirac.

acoplamiento difieren a las correspondientes al caso libre debido a la discontinuidad de la derivada del potencial en $x = 0$. Las nuevas condiciones de acoplamiento en $x = 0$ son las siguientes,

$$\bar{\Psi}^+(0, s) = \bar{\Psi}^-(0, s), \quad \frac{d}{dx} \bar{\Psi}^+(0, s) - \frac{d}{dx} \bar{\Psi}^-(0, s) = 2\alpha \bar{\Psi}(0, s) \quad (15)$$

en donde definimos el parámetro $\alpha = m\lambda/\hbar^2$. Evaluando estas condiciones y resolviendo el sistema de ecuaciones resultantes para c^+ , la solución para la onda transmitida es,

$$\bar{\Psi}^+(x, s) = \frac{i \frac{m}{\hbar} e^{i \sqrt{2 \frac{m}{\hbar}} i s x}}{\left(\sqrt{2 \frac{m}{\hbar}} i s + i \alpha \right) \left(\sqrt{2 \frac{m}{\hbar}} i s - k \right)} \quad (16)$$

A continuación utilizamos la expresión integral de Bromwich (Ec.(13) para calcular la *TLI*,

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} \frac{\frac{m}{\hbar} i e^{i \sqrt{2 \frac{m}{\hbar}} i s x} e^{s t} ds}{\left(\sqrt{2 \frac{m}{\hbar}} i s + i \alpha \right) \left(\sqrt{2 \frac{m}{\hbar}} i s - k \right)} \quad (17)$$

Desarrollando en fracciones parciales el integrando de la ecuación anterior, expresamos la solución $\Psi(x, t)$ como sigue,

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) = & \left[\frac{k}{(k + i\alpha)} \right] \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma - i\infty}^{\gamma + i\infty} \frac{\frac{m}{\hbar} i e^{i\sqrt{2\frac{m}{\hbar}} i s x} e^{st} ds}{\sqrt{2\frac{m}{\hbar}} i s (\sqrt{2\frac{m}{\hbar}} i s - k)} + \\ & + \left[\frac{i\alpha}{(k + i\alpha)} \right] \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma - i\infty}^{\gamma + i\infty} \frac{\frac{m}{\hbar} i e^{i\sqrt{2\frac{m}{\hbar}} i s x} e^{st} ds}{\sqrt{2\frac{m}{\hbar}} i s (\sqrt{2\frac{m}{\hbar}} i s + i\alpha)} \end{aligned} \quad (18)$$

Las integrales en la expresión anterior pueden ser evaluadas inmediatamente utilizando la representación integral de las funciones de Moshinsky Ec.(14). En la Ec.(18) identificamos las funciones $M(x; k; t)$ y $M(x; -i\alpha; t)$, de tal forma que la solución para $t > 0$ se escribe,

$$\Psi_{\delta}^a(x, t) = t(k) M(x; k; t) + r(k) M(x; -i\alpha; t) \quad (19)$$

donde las cantidades $t(k) = k/(k + i\alpha)$ y $r(k) = i\alpha/(k + i\alpha)$ son las amplitudes de transmisión y de reflexión respectivamente, para un potencial delta de Dirac en la situación estacionaria.

III.- EL FORMALISMO DE OBTURADORES REFLEJANTES.

En este capítulo presentamos el estudio de los fenómenos transitorios para los casos de potencial delta de Dirac y el caso libre, con la condición inicial de *obturador reflejante*. En este caso el tratamiento analítico de los transitorios se sigue a lo largo de las mismas líneas discutidas en el capítulo II. Los resultados obtenidos en el presente capítulo son fundamentales para entender el efecto de las condiciones iniciales sobre los efectos transitorios, tanto en la situación libre como en presencia de un potencial, que es el objetivo principal del presente trabajo.

III.1 El caso libre.

El modelo de obturador reflejante que utilizaremos en nuestro análisis se basa en la solución de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo con la condición inicial,

$$\Psi(x, 0) = \begin{cases} e^{ikx} - e^{-ikx}, & x \leq 0. \\ 0, & x > 0. \end{cases} \quad (20)$$

mediante la cual representamos a un obturador de Moshinsky que refleja parte de la onda incidente. Utilizando el método de la *Transformada de Laplace* para resolver la ecuación de Schrödinger Ec.(1) con la condición inicial Ec.(20) obtenemos un sistema de ecuaciones diferenciales para las regiones $x \leq 0$ y $x > 0$,

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \bar{\Psi}(x, s) + \frac{2mis}{\hbar} \bar{\Psi}(x, s) = \begin{cases} -\frac{4m}{\hbar} \text{sen}(kx), & x \leq 0 \\ 0, & x > 0. \end{cases} \quad (21)$$

Para el caso $x > 0$, la solución físicamente aceptable $\bar{\Psi}^+(x, s)$ es,

$$\bar{\Psi}^+(x, s) = c^+ e^{i\sqrt{2\frac{m}{\hbar}}isx}, \quad x > 0. \quad (22)$$

Al igual que en la sección anterior, para el caso $x \leq 0$ tenemos una ecuación diferencial inhomogénea cuya solución está dada por,

$$\bar{\Psi}^-(x, s) = c^- e^{-i\sqrt{2\frac{m}{\hbar}}isx} - \frac{4\frac{m}{\hbar}}{2is\frac{m}{\hbar} - k^2} \text{sen}(kx), \quad x \leq 0 \quad (23)$$

A continuación aplicamos las condiciones de acoplamiento Ecs. (7) a las ecuaciones (22) (23), y después de algunas manipulaciones algebraicas obtenemos el sistema de ecuaciones,

$$c^+ = c^-, \quad c^+ i\sqrt{2\frac{m}{\hbar}}is = -c^+ i\sqrt{2\frac{m}{\hbar}}is - \frac{4\frac{m}{\hbar}}{2is\frac{m}{\hbar} - k^2}. \quad (24)$$

Resolviendo para c^+ la solución para la onda transmitida $\bar{\Psi}^+(x, s)$ es,

$$\bar{\Psi}^+(x, s) = \frac{m}{\hbar} \frac{1}{\sqrt{2\frac{m}{\hbar}}is} \frac{ie^{i\sqrt{2\frac{m}{\hbar}}isx}}{(\sqrt{2\frac{m}{\hbar}}is - k)} + \frac{m}{\hbar} \frac{1}{\sqrt{2\frac{m}{\hbar}}is} \frac{ie^{i\sqrt{2\frac{m}{\hbar}}isx}}{(\sqrt{2\frac{m}{\hbar}}is + k)}, \quad x > 0. \quad (25)$$

Para calcular la TLI de la Ec.(??), utilizamos la representación integral de la función de Moshinsky dada por la Ec.(14) que nos conduce finalmente a,

$$\Psi_l^r(x, t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} \frac{\frac{m}{\hbar} ie^{i\sqrt{2\frac{m}{\hbar}}isx} e^{st}}{\sqrt{2\frac{m}{\hbar}}is(\sqrt{2\frac{m}{\hbar}}is - k)} ds - \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} \frac{\frac{m}{\hbar} ie^{i\sqrt{2\frac{m}{\hbar}}isx} e^{st}}{\sqrt{2\frac{m}{\hbar}}is(\sqrt{2\frac{m}{\hbar}}is + k)} ds \quad (26)$$

$$\Psi_l^r(x, t) = M(x; k; t) - M(x; -k; t) \quad (27)$$

III.2 El Potencial delta de Dirac.

En esta sección presentamos la solución analítica de la ecuación de Schrödinger para un potencial delta de Dirac $V(x) = \lambda \delta(x)$ en $x = 0$, con la condición inicial de obturador reflejante.

Este resultado fué obtenido recientemente por J. Villavicencio como parte de su proyecto de Tesis doctoral (Villavicencio, 1999) en donde se discuten la solución en el contexto de los fenómenos transitorios relativistas. Es importante señalar que en el presenta trabajo realizamos un estudio de ésta solución en los distintos regímenes temporales, con la finalidad de estimar en que medida las condiciones iniciales modifica los fenómenos transitorios.

Procedemos a resolver la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo con las condiciones iniciales Ec.(20) empleando el método de la Transformada de Laplace descrito en secciones anteriores. El sistema de ecuaciones correspondiente a las regiones a la izquierda y derecha del potencial son,

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \bar{\Psi}(x, s) + \frac{2mis}{\hbar} \bar{\Psi}(x, s) = \begin{cases} -\frac{4m}{\hbar} \text{sen} kx, & x \leq 0 \\ 0, & x > 0. \end{cases} \quad (28)$$

Las soluciones correspondientes al sistema de ecuaciones (28) ya fueron determinadas en la sección III.1 y están dadas por las ecuaciones (22) y (23). Las condiciones de acoplamiento en $x = 0$ Ec.(15) nos conducen a un sistema de ecuaciones para las constantes c^- y c^+ , el cual una vez resuelto para c^+ permite expresar la función de onda transmitida $\bar{\Psi}^+(x, s)$ como,

$$\bar{\Psi}^+(x, s) = \frac{ik\alpha}{\left(k + i\frac{m\lambda}{\hbar^2}\right) \left(\sqrt{2\frac{m}{\hbar}}is - k\right) \left(\sqrt{2\frac{m}{\hbar}}is + i\frac{m\lambda}{\hbar^2}\right)} e^{i\sqrt{2\frac{m}{\hbar}}isx}. \quad (29)$$

En la expresión analítica anterior Ec.(29) no es posible identificar directamente los términos que dan lugar a las funciones de Moshinsky. Sin embargo, mediante un desarrollo en fracciones parciales reescribimos la ecuación anterior como,

$$\begin{aligned} \bar{\Psi}^+(x, s) = \frac{i \frac{m}{\hbar} e^{i \sqrt{2 \frac{m}{\hbar}} i s x}}{\left(\sqrt{2 \frac{m}{\hbar}} i s\right)} & \left[\frac{t(k)}{\left(\sqrt{2 \frac{m}{\hbar}} i s - k\right)} - \frac{t(k)}{\left(\sqrt{2 \frac{m}{\hbar}} i s + i \frac{m \lambda}{\hbar^2}\right)} - \right. \\ & \left. - \frac{t(-k)}{\left(\sqrt{2 \frac{m}{\hbar}} i s + k\right)} + \frac{t(-k)}{\left(\sqrt{2 \frac{m}{\hbar}} i s + i \frac{m \lambda}{\hbar^2}\right)} \right] \end{aligned} \quad (30)$$

La representación anterior resulta conveniente, dado que escribiendo explícitamente la *TLI* Ec.(13) de $\Psi^+(x, s)$,

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} \frac{\frac{m}{\hbar} i}{\left(\sqrt{2 \frac{m}{\hbar}} i s\right)} i e^{i \sqrt{2 \frac{m}{\hbar}} i s x} e^{s t} & \left[t(k) \frac{1}{\left(\sqrt{2 \frac{m}{\hbar}} i s - k\right)} - t(k) \frac{1}{\left(\sqrt{2 \frac{m}{\hbar}} i s + i \alpha\right)} - \right. \\ & \left. - t(-k) \frac{1}{\left(\sqrt{2 \frac{m}{\hbar}} i s + k\right)} + t(-k) \frac{1}{\left(\sqrt{2 \frac{m}{\hbar}} i s + i \alpha\right)} \right] ds, \end{aligned} \quad (31)$$

podemos recurrir a la representación integral de las funciones de Moshinsky Ec.(14) e identificar las funciones $M(x; k; t)$, $M(x; -k; t)$ y $M(x; -i\alpha; t)$ en la Ec.(31), de tal forma que podemos escribir la solución dependiente del tiempo como,

$$\Psi_\delta^r(x, t) = t(k) M(x; k; t) - t(k) M(x; -i\alpha; t) - t(-k) M(x; -k; t) + t(-k) M(x; -i\alpha; t) \quad (32)$$

En la expresión anterior identificamos a las cantidades $t(\pm k) = \pm k / (\pm k + i\alpha)$ como las amplitudes de transmisión para un potencial delta en la situación estacionaria evaluadas en $\pm k$. La solución en este caso difiere notablemente al del la situación

absorbente Ec.(19) como se puede verificar en la Ec.(32). En la expresión anterior notamos la aparición de la función de Moshinsky $M(x; -k; t)$ evaluada para valores negativos de k , además de la ausencia total de la amplitud de reflexión $r(k)$. En el estudio numérico que se llevará a cabo en el Capítulo IV, determinaremos en que medida la aparición de este nuevo ingrediente en la expresión analítica modifica el comportamiento de la función de onda electrónica. En general un análisis asintótico de $M(x; -k; t)$ (a lo largo de las mismas líneas del apéndice B del artículo de García-Calderón y A. Rubio (García-Calderón *et al.*, 1997)) en el régimen a tiempos grandes, nos muestra que la contribución de esta función es despreciable. Sin embargo el papel que desempeñe en el régimen de tiempos muy cortos será objeto de estudio en el capítulo IV.

IV.- ESTUDIO NUMÉRICO DE LOS FENÓMENOS TRANSITORIOS.

El estudio de los efectos de las condiciones iniciales sobre los transitorios en distintos regímenes temporales, en particular el de tiempos cortos es un campo poco explorado. Aparte ser interesante por sí mismo, nos permite dar luz a problemas fundamentales en la dinámica del tunelaje cuántico aún no resueltos, como el problema del tiempo de tunelaje (Landauer, 1994; García-Calderón *et al.*, 1999) y el de los fenómenos no-locales en la mecánica cuántica. Respecto a los modelos de obturador que han sido tratados en la literatura, un aspecto que ha recibido poca atención es el de las posibles implicaciones de la discontinuidad a $t = 0^+$ de la función de onda inicial y la función de onda transmitida en $x = 0$. Con la finalidad de aclarar algunos aspectos de este problema en este capítulo realizamos un estudio comparativo de los fenómenos transitorios asociados a las distintas condiciones iniciales, a saber, las condiciones iniciales de *obturador absorbente y reflejante* discutidas en los capítulos II y III. El estudio estará basado en el análisis de la densidad de probabilidad $|\Psi(x, t)|^2$ como función de las variables x y t para el caso del potencial delta de Dirac y el caso libre. Para realizar el presente análisis fue necesario implementar una serie de programas de cómputo necesarios para la evaluación las funciones de Moshinsky $M(x; k; t)$ y $|\Psi(x, t)|^2$ para las situaciones arriba descritas.

IV.1.- Los fenómenos transitorios asociados a las condiciones iniciales absorbentes.

Con la finalidad de que el trabajo sea autocontenido se incluye en esta sección el análisis de los fenómenos transitorios asociados a una onda plana e^{ikx} en el caso libre y

de un potencial delta de Dirac en $x = 0$, con las *condiciones iniciales absorbentes*. En esta sección se discute la dinámica de la función de onda en las diferentes situaciones asintóticas y se presenta de manera transparente la transición del régimen transitorio a la situación estacionaria. Los resultados obtenidos en esta sección son relevantes para poner en perspectiva las diferencias que existen en las descripciones de los transitorios basadas en distintas condiciones iniciales.

A continuación iniciamos con la descripción de los transitorios en el caso libre, con la finalidad de ilustrar el comportamiento asintótico de la función de onda como función de t en los distintos regímenes asintóticos. En la Fig.(3) se gráfica la densidad de probabilidad para las siguientes cantidades: $x = .5$ y $E = .08 \text{ eV}$. Observamos que a $t = 0$ la densidad de probabilidad es cero $|\Psi_l^a(x, 0)|^2 = 0$, dado que no existe solución en el semiplano $x > 0$. Conforme se incrementa el valor de t , la función crece monótonicamente hasta alcanzar un valor máximo a partir del cuál oscila alrededor de $|\Psi_l^a(x, t)|^2 = 1$, comportamiento que resulta razonable ya que en el límite cuando $t \rightarrow \infty$ la función de onda tiende a una onda plana *i.e.* $\lim_{t \rightarrow \infty} M(x; k; t) = e^{ikx}$ recuperando así la situación estacionaria. El fenómeno descrito en la Fig. (3) se conoce en la literatura como *difracción en el tiempo* (Moshinsky, 1952), debido a la analogía con el problema en óptica de difracción de Fresnel por un semiplano.

En la Fig.(4) se muestra en la gráfica principal la variación de la densidad de probabilidad $|\Psi_l^a(x, t)|^2$ como función de la posición x para los siguientes parámetros: $t = 1 \text{ ps}$ y $E = .08 \text{ eV}$. Observamos que para valores crecientes de t , la densidad de probabilidad oscila alrededor de $|\Psi_l^a(x, t)|^2 = 1$, para luego disminuir a cero en la vecindad de $x = vt$ definiéndose claramente un frente de onda. La evolución temporal

del frente semiclásico resulta evidente en el recuadro de la Fig. (4), donde para distintos valores de ($t = 1, 2, 3 \text{ ps}$) se exhibe una propagación que ocurre a velocidades semiclásicas dadas por $v = \hbar/km$. Un aspecto sobresaliente que es preciso enfatizar, es que el estudio comparativo de estos frentes permite analizar cuantitativamente los fenómenos de atraso y avance temporal en estructuras cuánticas (Elberfeld, 1988; Hernández, 1998; Villavicencio, 1999).

A continuación presentamos el análisis de los transitorios para el potencial Delta de Dirac. En la Fig. (5) se muestra el comportamiento de la densidad de probabilidad $|\Psi_\delta^a(x, t)|^2$ para un potencial delta de Dirac ($V(x) = \lambda\delta(x)$) de intensidad $\lambda = 15 \text{ eV}$, $E = .08 \text{ eV}$ y un valor fijo de $x = .5$. Observamos que la densidad de probabilidad $|\Psi_\delta^a(x, t)|^2$ (línea continua) Ec.(19) se comporta de manera similar al caso libre discutido en la sección anterior, presentando oscilaciones alrededor de $|\Psi_\delta^a(x, t)|^2 = .75$, valor que corresponde al coeficiente de transmisión para un potencial delta en la situación estacionaria *i.e.* $|\Psi_\delta^a(x, t)|^2 \rightarrow T = |t|^2 = k^2/(k^2 + \alpha^2)$. Este comportamiento resulta razonable ya que para valores grandes del tiempo la función $M(x; -i\alpha; t) \rightarrow 0$ (línea punteada), de tal forma que el término dominante en este régimen es la función $M(x; k; t)$ (línea a trazos).

En la Fig. 6 se muestra el nacimiento de la función de onda transmitida y su evolución temporal desde .5 a 50 fs . En el recuadro se presenta el comportamiento a un tiempo posterior ($t = 1 \text{ ps}$), donde puede observarse que el frente de onda para el potencial delta exhibe un comportamiento similar al caso libre, con la diferencia de una notable disminución de la densidad de probabilidad, la cual oscila alrededor del valor del coeficiente de transmisión en la situación estacionaria.

Para concluir esta sección debemos agregar que el estudio comparativo de estos frentes con respecto a los del caso libre es relevante para la determinación del tiempo de retraso. Esto se muestra en la Fig. (7) en donde se presenta la evolución temporal de la función de onda (línea a trazos) para un potencial delta con intensidad $\lambda = 2 \text{ eV}$ y energía de incidencia de la partícula dada por $E = .08 \text{ eV}$. Un aspecto sobresaliente que podemos observar en la Fig. (7) es el retraso temporal de la solución para el potencial delta, con respecto a la situación libre (línea continua). El fenómeno de retraso temporal es característico del potencial delta y ha sido reportado en la literatura para distintos parámetros del potencial a distintas escalas temporales (Elberfeld, 1989).

IV.2.- Resultados del estudio comparativo de los transitorios asociados a condiciones iniciales reflejantes.

En esta sección nos enfocaremos al estudio de los transitorios asociados a *condiciones iniciales reflejantes*, con la finalidad de comparar los efectos sobre la función de onda electrónica debido a las diferentes condiciones iniciales. El primer caso que discutiremos a continuación corresponde a la situación libre de potencial ($V(x) = 0$), el cual se ilustra en la Fig. (8). En esta gráfica se presenta la variación de la densidad de probabilidad como función del tiempo para la función de onda correspondiente a los casos absorbente (línea continua) y reflejante (línea a trazos). Observamos que ambas descripciones son distintas en el régimen de tiempos cortos. Sin embargo en el recuadro de la Fig. (8) podemos observar que en la situación para valores grande de t , se empieza a notar una superposición parcial de las gráficas, la cual es total en el límite cuando $t \rightarrow \infty$. El origen de estas diferencias cualitativas y cuantitativas a

tiempos cortos será discutida con mayor detalle a continuación, cuando consideremos el caso del potencial delta de Dirac.

Con la finalidad de ilustrar los transitorios en presencia de un potencial simple, en la gráfica principal de la Fig. (9) se muestra el comportamiento de la densidad de probabilidad como función del tiempo para un potencial delta de Dirac para los parámetros típicos ($\lambda = 5 \text{ eV}$, $E = .08 \text{ eV}$), distinguiendo entre el resultado para la condición absorbente (Ec.(19)) y la correspondiente a la condición reflejante Ec.(32) en el régimen de tiempos cortos. En la Fig. (9) se observa que el efecto de la *condición inicial reflejante* es disminuir notablemente la densidad de probabilidad. Un aspecto sobresaliente es que en la presente escala de tiempo ambos comportamientos son cualitativamente similares, sin embargo existe una diferencia *cuantitativa* que puede ser explicada mediante un análisis de las propiedades analíticas de las funciones de Moshinsky. En particular las diferencias observadas a tiempos cortos se deben a fuertes interferencias del nuevo factor $M(x; -k; t)$ que aparece en la Ec.(32) con las funciones $M(x; k; t)$ y $M(x; -i\alpha; t)$. En el recuadro de la Fig. (9) fueron gráficos los mismos casos en el régimen de tiempos largos considerando los mismos parámetros que en la gráfica principal. En contraste con el comportamiento a tiempos cortos los términos de interferencia debidos a la funciones $M(x; k; t)$ y $M(x; -i\alpha; t)$ son despreciables, lo cual se manifiesta en una evidente superposición de las gráficas para ambas expresiones.

Sin embargo existen ciertas situaciones a tiempos cortos donde la solución para el potencial delta para el caso absorbente difiere notablemente de la situación reflejante. Para ilustrar esta situación, en la gráfica principal de la Fig. (10) se muestra el

nacimiento de la densidad de probabilidad como función del tiempo para un potencial potencial delta para las cantidades: $x = .5$, $E = .08 \text{ eV}$ y $\lambda = 20 \text{ eV}$. Este sistema fue originalmente estudiado por A. Hernández (Hernández, 1998) para el caso de *condiciones absorbentes*, y muestra un comportamiento muy peculiar. Como puede observarse, la función de la probabilidad para el caso absorbente (línea continua) exhibe un máximo bien definido que tiene las características de un precursor. Por otro lado la solución correspondiente al caso de la *condición inicial reflejante* (línea a trazos) crece monotónicamente y no presenta este comportamiento. Un aspecto digno de destacar en la gráfica principal es que las condiciones iniciales modifican a los fenómenos transitorios en el régimen de tiempos cortos, mientras que en el régimen de tiempos largos el comportamiento de este sistema es esencialmente el mismo como se aprecia en el recuadro de la Fig. (10). Este es un resultado importante que debe ser considerado en el estudio de la dinámica del transporte electrónico a través de sistemas con perfiles de potencial con geometrías más complicadas. En particular los efectos de las condiciones iniciales en el régimen de tiempos cortos deben ser considerados en el estudio de los tiempos de tunelaje (Landauer, 1994) en virtud de que resultados, como el mostrado en la Fig. (10) podrían conducir a interpretaciones físicas erróneas de estos '*pseudo-frentes*'. El origen de estos frentes puede explicarse desde el punto de vista matemático, ciertamente un aspecto que se omite en la mayoría de los estudios de los transitorios es la discontinuidad a $t = 0^+$ de la función de onda inicial y la función de onda transmitida en $x > 0$, la cual en estos ejemplos se manifiesta en un salto abrupto de la densidad de probabilidad, con las características de un frente bien definido. Es importante comentar que los efectos de la condiciones iniciales son aún

mas evidentes en los casos relativistas, como se ha mostrado para las soluciones de la ecuación de Klein-Gordon y la ecuación de ondas para el caso libre y un potencial delta de Dirac (García-Calderón *et al.*, 1999).

Podemos profundizar más acerca del comportamiento de la solución para el caso reflejante discutido en la Fig. (10) si estudiamos por separado las contribuciones de los términos que integran la ecuación (32). En la Fig. (11) se analiza la evolución temporal de la densidad de probabilidad (línea continua) para el caso reflejante discutido en la Fig. (10). Notamos que el término correspondiente al factor $[t(-k) - t(k)] M(x, -i\alpha, t)$ (línea punteada) exhibe el comportamiento observado en el obturador absorbente de la Fig.(10), por lo que el factor responsable del máximo en la densidad de probabilidad es $M(x, -i\alpha, t)$. Sin embargo este máximo no está presente en la solución reflejante debido a que el nuevo factor $M(x, -k, t)$ (línea a trazos) que aparece en la solución (Ec.(32)) interfiere con los términos de la forma $M(x, -i\alpha, t)$ y $M(x, k, t)$ (línea a trazo y doble punto), de tal forma que se elimina totalmente el máximo. De la figura también resulta claro que los factores $M(x, -i\alpha, t)$ y $M(x, k, t)$ tienden rápidamente a cero conforme se incrementa el valor del tiempo, comportamiento que resulta razonable ya que en este límite debe reproducirse la situación estacionaria.

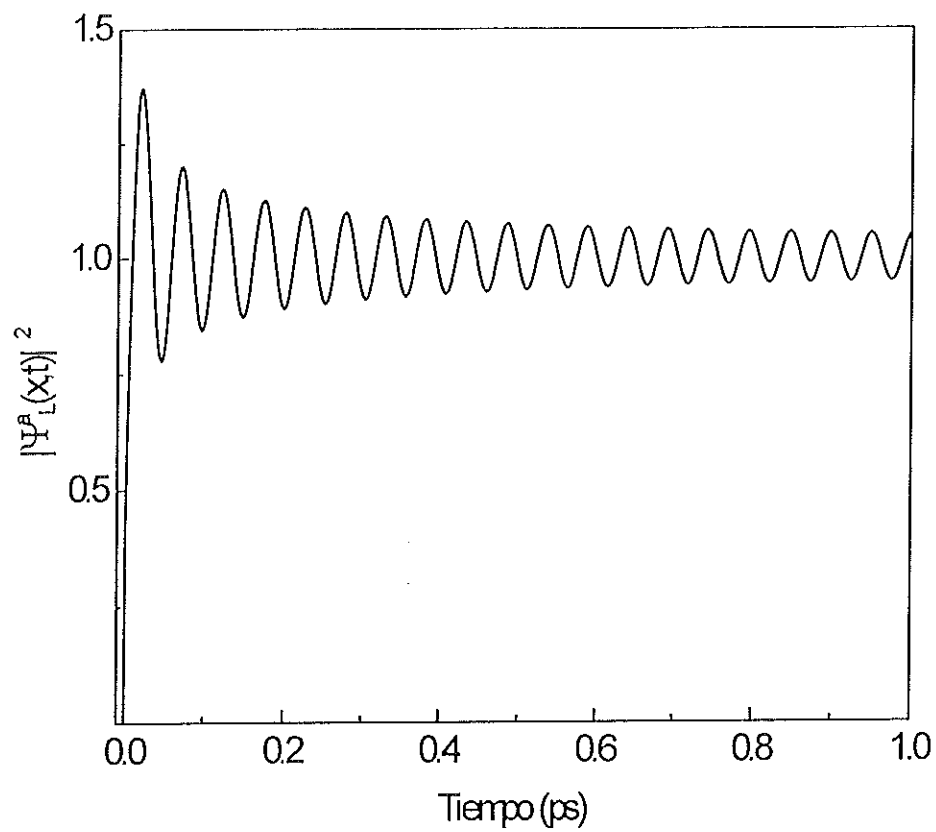


Figura 3. Densidad de probabilidad como función del tiempo para el caso del Obturador Libre Absorbente con parámetros: $x = .5 \text{ \AA}$, $E = .08 \text{ eV}$.

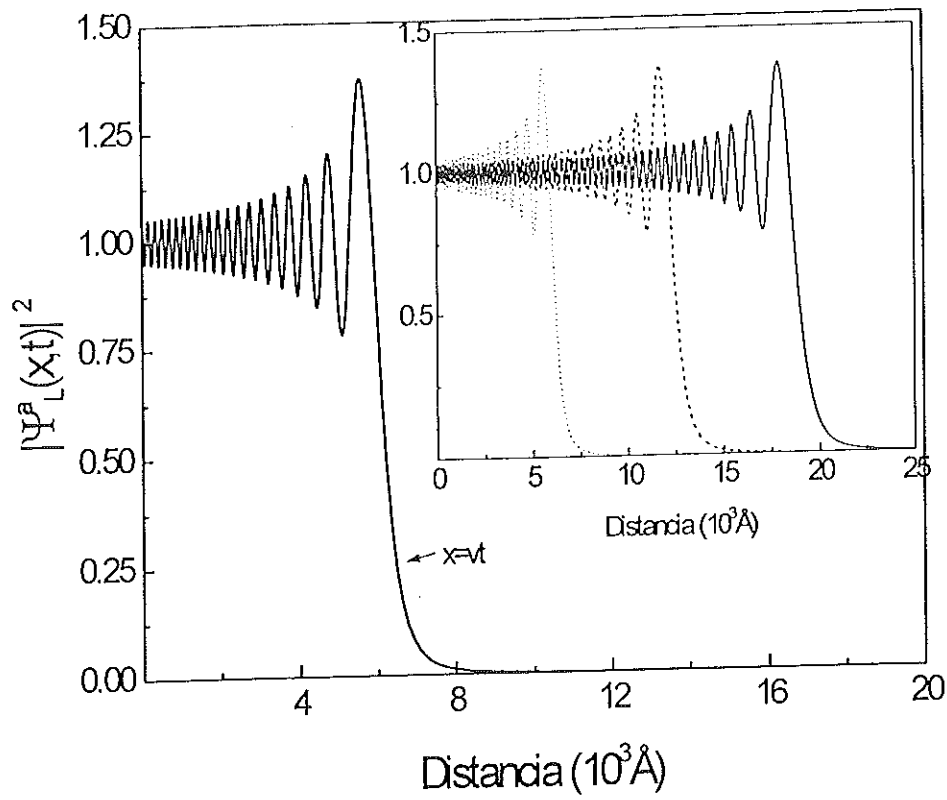


Figura 4. Densidad de probabilidad como función de la distancia para el Obturador Libre Absorbente con parámetros: $t = 1 \text{ ps}$, $E = 0.08 \text{ eV}$. En el recuadro mostramos el avance del frente de onda para $t = 1 \text{ ps}$ (línea punteada), $t = 2 \text{ ps}$ (línea a trazos), $t = 3 \text{ ps}$ (línea continua). La flecha indica la posición del frente de onda semiclásico.

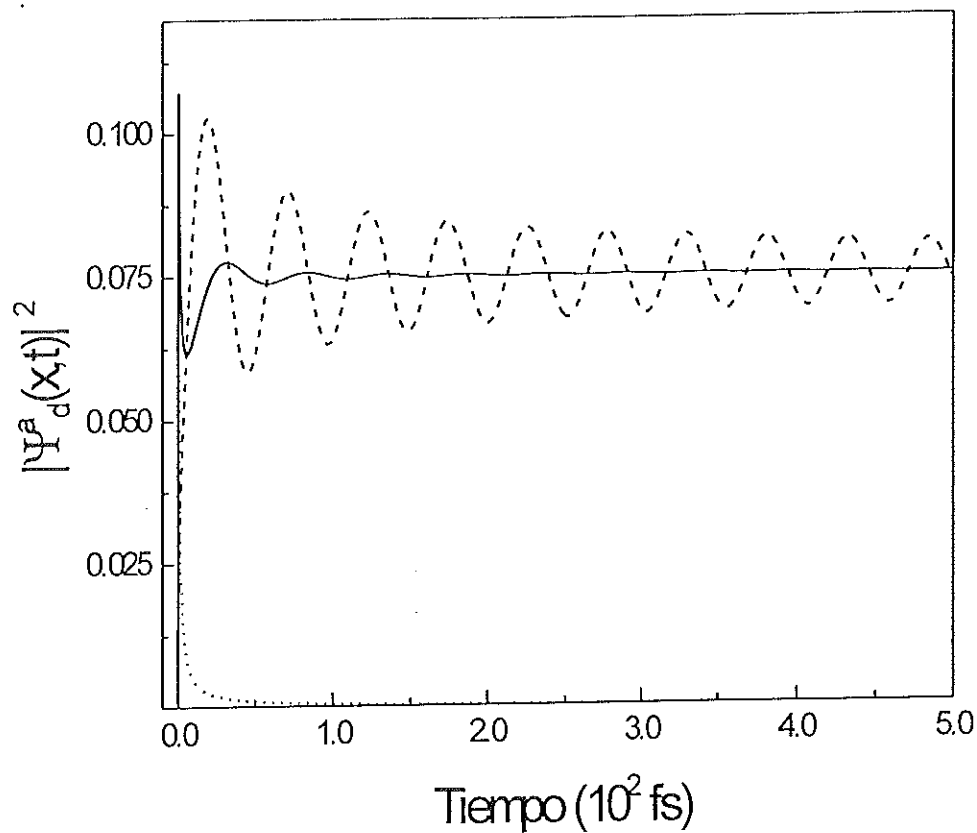


Figura 5. Densidad de probabilidad como función del Tiempo para el caso del potencial delta de Dirac con la condición inicial Absorbente con parámetros: $x=.5 \text{ \AA}$, $\lambda=15 \text{ eV \AA}$, $E=.08 \text{ eV}$. En esta gráfica se presenta la solución para el potencial delta (línea continua) y los términos que la forman: $t(k)M(x,k,t)$ (línea a trazos), término $r(k)M(x,-i\alpha,t)$ (línea a puntos).

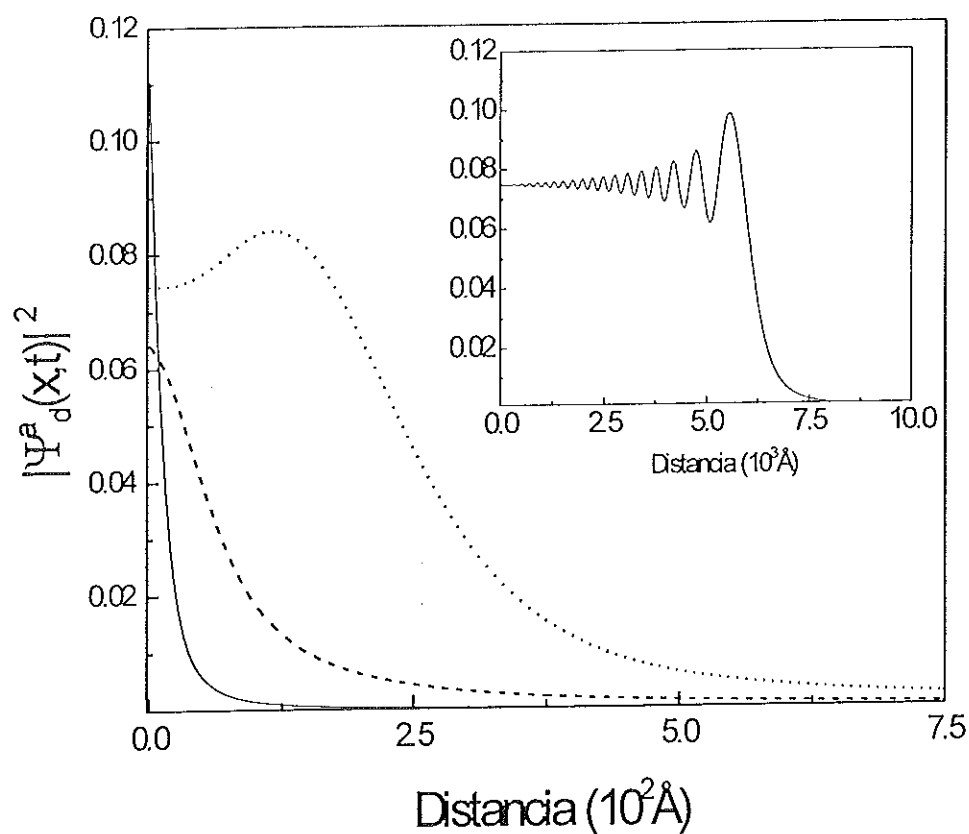


Figura 6. Densidad de probabilidad como función de la posición para el caso del potencial delta de Dirac con la condición inicial Absorbente con parámetros: $x=5 \text{ Å}$, $\lambda=15 \text{ eV Å}$, $E=.08 \text{ eV}$. Se muestra el nacimiento del de onda semiclásico para distintas escalas de tiempos: $t=5 \text{ ps}$ (línea continua), $t=10 \text{ ps}$ (línea trazos), $t=50 \text{ ps}$ (línea a puntos). En el recuadro observamos la misma solución en la situación asintótica donde el frente esta bien definido ($t=1 \text{ ps}$).

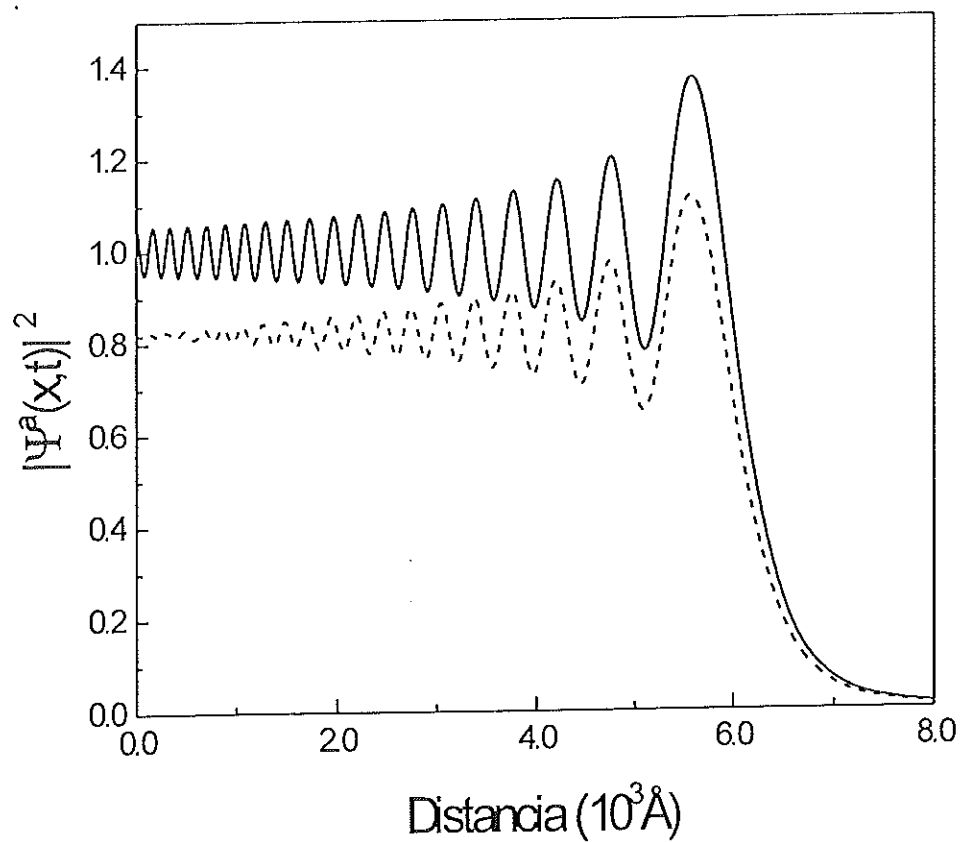


Figura 7. Densidad de probabilidad como función de la posición para los casos libre (línea continua) y delta de Dirac (línea a trazos) con la condición inicial Absorbente con parámetros: $t=1\text{ps}$, $\lambda=2\text{ eV \AA}$, $E=.08\text{ eV}$.

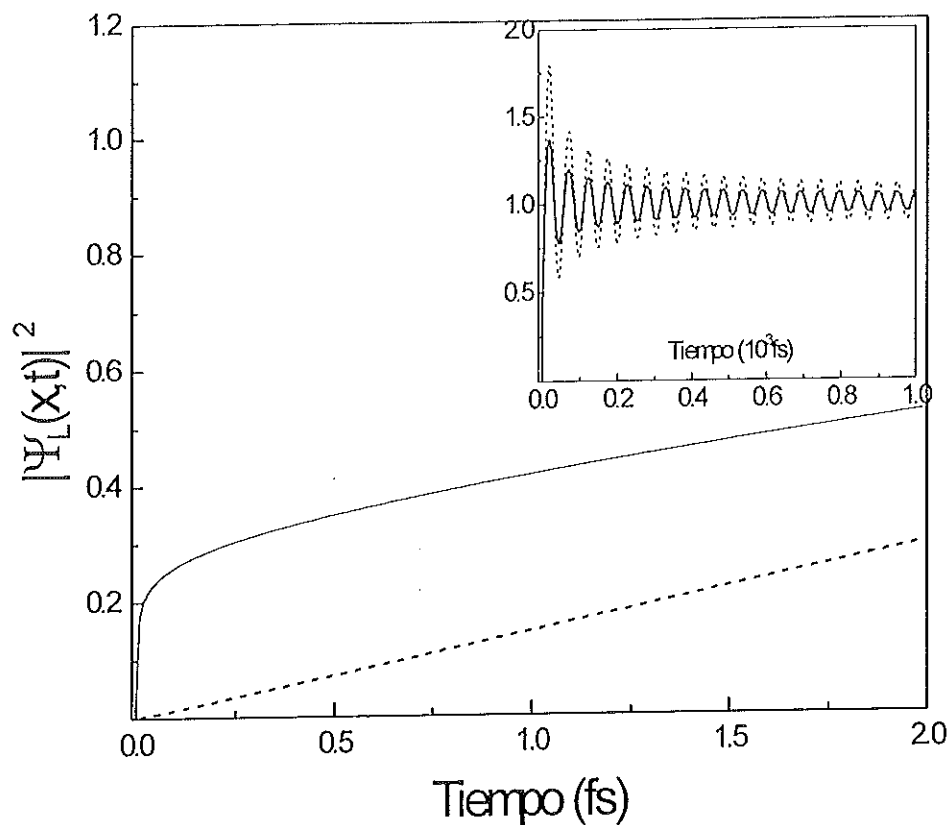


Figura 8. Densidad de probabilidad como función del tiempo para el caso libre con la condición inicial Absorbente (línea continua) y Reflejante (línea a trazos) con parámetros: $x=5 \text{ \AA}$, $\lambda=15 \text{ eV \AA}$, $E=.08 \text{ eV}$. En el recuadro mostramos las mismas soluciones a tiempos largos del orden de $t=10^3 \text{ fs}$.

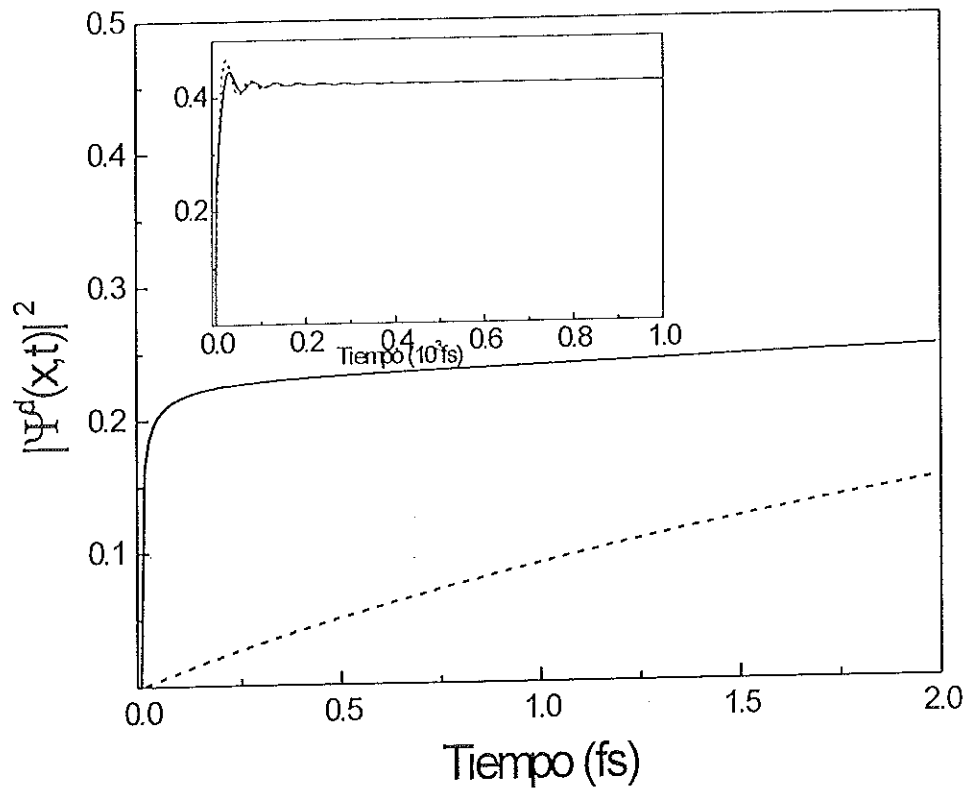


Figura 9. Densidad de probabilidad como función del tiempo para el caso libre con la condición del potencial delta con la condición inicial Absorbente (línea continua) y Reflejante (línea a trazos) a tiempos cortos, con parámetros: $x=.5 \text{ \AA}$, $\lambda=15 \text{ eV \AA}$, $E=.08 \text{ eV}$. En el recuadro mostramos el caso asintótico con t del orden de 10^3 fs donde ambas gráficas se superponen.

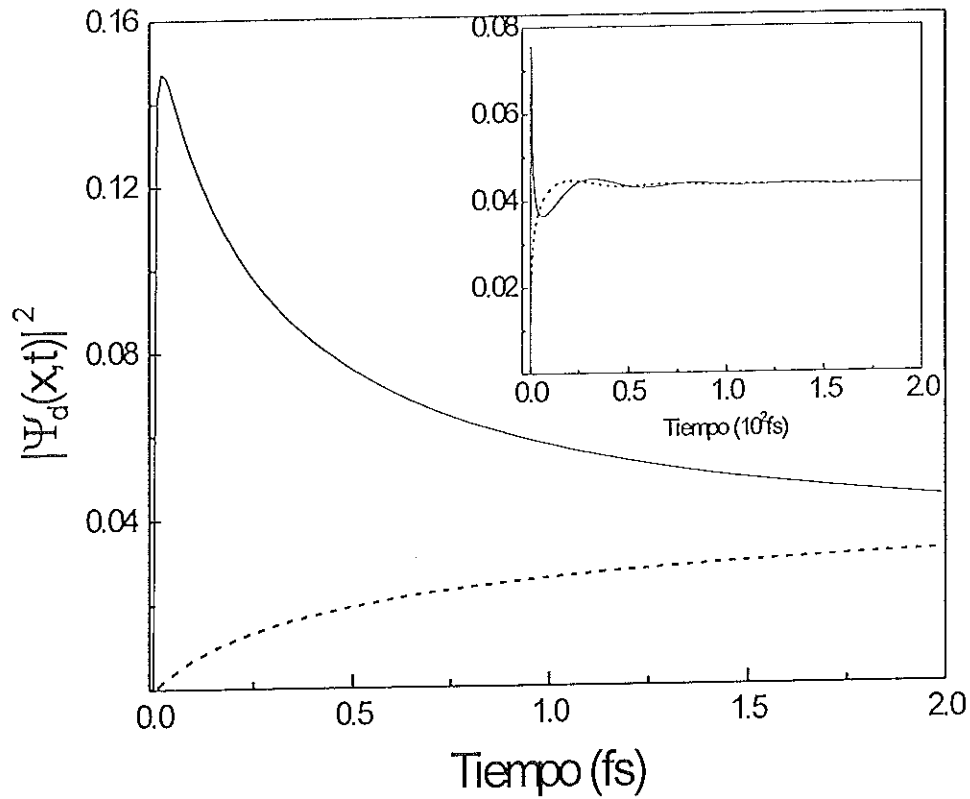


Figura 10. Densidad de probabilidad como función del tiempo para el caso delta con las siguientes condiciones iniciales: Reflejante (línea a trazos) y Absorbente (línea continua), en el régimen de tiempos cortos como se ilustra en la gráfica principal. En el recuadro se presenta la evolución a tiempos largos, con parámetros: $x=5 \text{ \AA}$, $\lambda=20 \text{ eV \AA}$, $E=0.08 \text{ eV}$. en ambas situaciones.

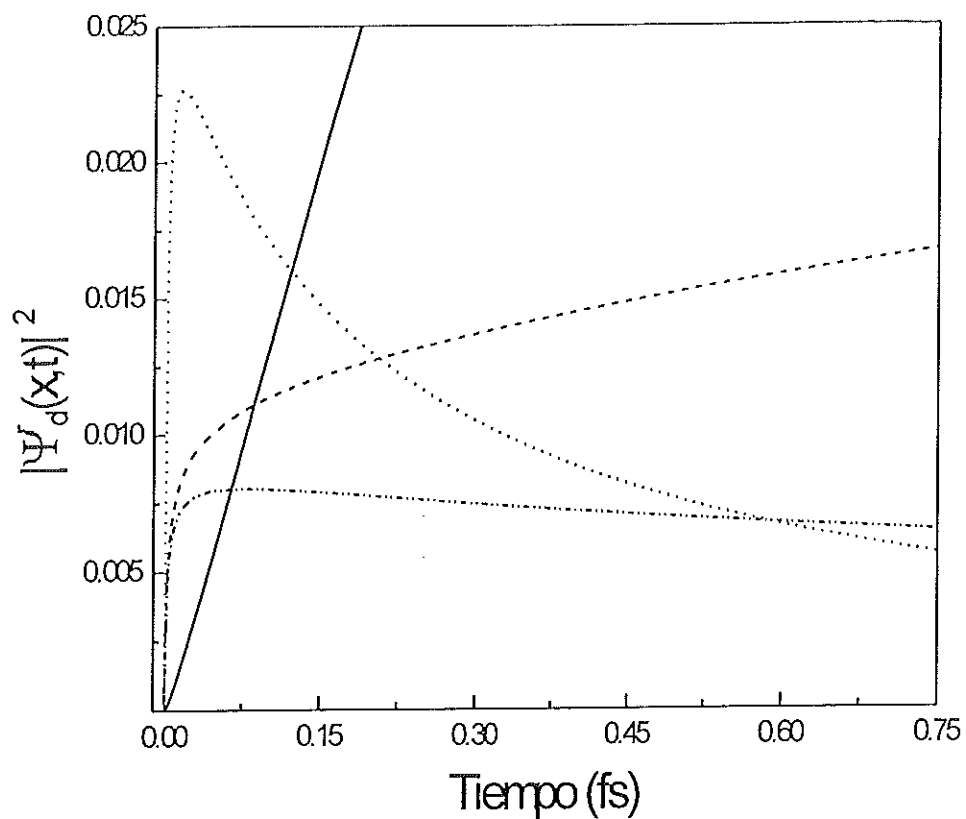


Figura 11. Densidad de probabilidad como función del tiempo para el casos delta con la condición inicial Reflejante a tiempos cortos con parámetros: $x=.5 \text{ \AA}$, $\lambda=20 \text{ eV \AA}$, $E=.08 \text{ eV}$. Delta Total (línea continua), término $t(-k)M(x,-k,t)$ (línea a trazos y doble punto), término $t(k)M(x,k,t)$ (línea a trazos), término $[t(-k)+ t(k)]M(x,-i\alpha,t)$ (línea a puntos).

V.- CONCLUSIONES.

En el presente trabajo se realizó un estudio comparativo de los efectos de las *condiciones iniciales* sobre los transitorios en la dinámica del tunelaje cuántico. Para ello se discutió un formalismo que provee una descripción de los fenómenos transitorios en forma exacta, el cual permite obtener expresiones analíticas de la función de onda electrónica dependiente del tiempo para el caso libre y un potencial delta de Dirac. Específicamente se analizó el comportamiento de la función de onda obturador absorbente versus el reflejante a diferentes regímenes temporales.

Como resultado del estudio comparativo de los efectos de las condiciones iniciales absorbentes y reflejantes en la situación libre y para un potencial delta de Dirac, puede concluirse resumidamente lo siguiente:

- En el régimen de tiempos cortos existen *notables diferencias* en el comportamiento de la función de onda electrónica al emplear diferentes condiciones iniciales. Existen algunos casos particulares de los fenómenos transitorios asociados a un potencial delta de Dirac (*caso absorbente*), donde como resultado de la discontinuidad en $x = 0$ de la función de onda inicial a $t = 0^+$ (*con respecto a la función de onda transmitida para $x \geq 0$*), surgen comportamientos muy peculiares en la densidad de probabilidad. Estos efectos son de naturaleza matemática y *no física* como se demuestra al resolver el problema con las condiciones iniciales de obturador reflejante, las cuales garantizan la continuidad de las funciones de onda en $x = 0$.
- En el régimen asintótico de tiempos largos no existen diferencias apreciables de

los efectos transitorios para las distintas condiciones iniciales estudiadas (reflejante y absorbente). Este resultado fue verificado numéricamente y puede ser demostrado rigurosamente en forma analítica.

- Los resultados obtenidos en este trabajo pueden ser utilizados para hacer inferencias en situaciones de potenciales con geometrías más complicadas y dar luz en cuestiones de la dinámica del tunelaje cuántico aún no resueltas, como el controversial problema de los tiempos de tunelaje.

LITERATURA CITADA.

- Abramowitz M. e I. Stegun. 1968. *Handboook of Mathematical Functions*. 1027, 297 pp.
- Arkfen G. 1985. *Mathematical Methods for Physicists*. Academic Press. 824 y 853 pp.
- Brouard S. y J. G. Muga. 1966. Phys. Rev A, 54 , 4: 3055.
- Churchill R. y J. Brown. 1986. *Variable compleja y sus aplicaciones*. Mc Graw-Hill. 115 y 193 p.
- Collins S., D. Lowey y J. R. Barker. 1987. J. Phys. C 20, 6213.
- Elberfeld W. y M. Kleber. 1988. *Time-dependent tunneling through thin barriers: A simple analytical solution*, Am. J. Phys., 56 154
- Gamow G. 1928. *Zur quantentheorie des atomkernes*, Z. Phys. 51, 204-212.
- García-Calderón G. y A. Rubio. 1997. Phys. Rev. A, 55, 3, 3361.
- García-Calderón G., Rubio A. y J. Villavicencio. 1999. Phys. Rev. A, 59, 3.
- Hartman T. E. 1962. , J. Appl. Phys. 33, 3427.
- Hauge E. H. , J. A. Stvneng 1989. *Tunneling times: A critical review*, Mod. Phys. 61 917.
- Hernandez M. A. 1998. *Tesis de Maestria*, CICESE.
- Holland R. P. 1995. *"The Quantum theory of motion"*. Cambridge University Press. 490 p.
- Kleber M. 1994. *Exact solutions for time-dependent phenomena in quantum mechanics*, Phys. Rep. 236, 6 331-393.

- Landauer R. 1994. *Barrier interaction time in tunneling*, Rev. Mod. Phys. 66 217-228.
- Moshinsky M. 1952. *Diffraction in Time*, Phys. Rev. 88. 625.
- Moshinsky M. 1976. *Diffraction in Time and the time-energy uncertainty relation*, Am. J. Phys., 44, 11 1037.
- Moshinsky M. 1952, *Difracción en el tiempo y la ecuación de Dirac*, Rev. Mex. Fís.I, 3, 151.
- Oppenheimer J. R. 1928. *Three notes on the quantum theory of aperiodic effects*, Phys. Rev. 13, 66-81.
- Villavicencio J. A. 1999. *Tesis de Doctorado (en proceso)*, CICESE.