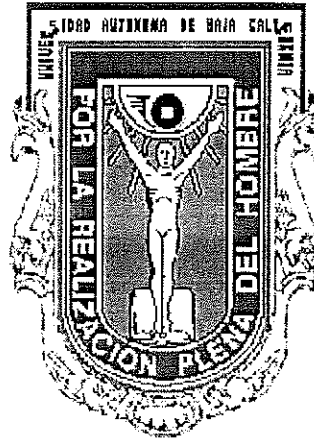


UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE BAJA CALIFORNIA
FACULTAD DE CIENCIAS



**EVOLUCIÓN DE ONDAS CUÁNTICAS EN UN
POTENCIAL ESCALÓN**

TESIS

Que para obtener el Título de:

FÍSICO

Presenta:

SUKEY SOSA Y SILVA SALGADO

Ensenada, B.C.

Agosto de 2002

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE BAJA CALIFORNIA

FACULTAD DE CIENCIAS

EVOLUCIÓN DE ONDAS CUÁNTICAS
EN UN POTENCIAL ESCALÓN

TESIS PROFESIONAL

QUE PRESENTA

SUKEY SOSA Y SILVA SALGADO

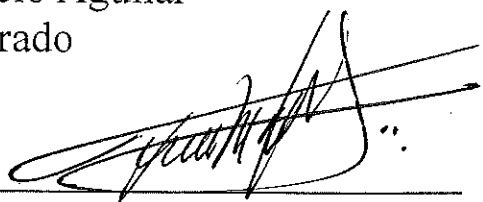
APROBADO POR:



Dr. Jorge A. Villavicencio Aguilar
Presidente del Jurado



Dr. Roberto Romo Martínez
Secretario



Dr. Francisco Mireles Higuera
1er. Vocal

AGRADECIMIENTOS

A mis maestros por compartir conmigo sus conocimientos, especialmente a Roberto Romo y Jorge Villavicencio por todo su apoyo durante el desarrollo de este trabajo.

A mi familia, sobre todo a mis padres y hermanos por el apoyo que me han brindado durante estos años, por su confianza, por motivarme y ayudarme a salir adelante. A Luis Alberto Torres por todo su apoyo.

A Roberto Guerrero, por estar a mi lado. A mis amigos, por hacer más agradables estos años en la Universidad, especialmente a Gina.

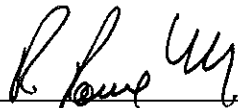
Y en general a todas las personas que de una u otra manera me han apoyado durante mi carrera profesional.

Gracias .

RESUMEN de la tesis que como requisito parcial para la obtención de la Licenciatura en Física presenta Sukey Sosa y Silva Salgado. Ensenada, Baja California, México. Agosto de 2002.

EVOLUCIÓN DE ONDAS CUÁNTICAS EN UN POTENCIAL ESCALÓN

Resumen aprobado por:



Dr. Roberto Romo Martínez
Director de Tesis



Dr. Jorge A. Villavicencio Aguilar
Director de Tesis

Con base en la solución analítica de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo con la condición inicial de fuente puntual, se investiga la evolución temporal y espacial de ondas cuánticas para un potencial escalón. Para una fuente con una energía menor que la altura del potencial, se encuentra que la dinámica de la densidad de probabilidad está caracterizada por dos regímenes claramente distinguibles. El primero de ellos (régimen no-opaco) ocurre a distancias cortas dentro del potencial, donde la densidad de probabilidad fluctúa alrededor del valor estacionario. El segundo (régimen opaco) ocurre para distancias mayores a la longitud de penetración característica de la onda estacionaria, donde la densidad de probabilidad exhibe un *pulso transitorio* cuyo máximo se propaga en el espacio exactamente con la velocidad de grupo. Estos resultados permiten entender el origen de la controversia acerca de la existencia de los frentes de onda monocromáticos de Stevens, propuestos en 1983. Otro resultado importante de este trabajo consiste en el esclarecimiento del papel que juega el tiempo de Büttiker–Landauer, τ , como el *tiempo de arribo* del pulso transitorio. Específicamente, se demuestra que el tiempo de arribo del máximo del pulso a una posición fija, está dado exactamente por τ , y no por $3^{-1/2}\tau$ como lo proponen Muga y Büttiker [J. G. Muga y M. Büttiker, Phys. Rev. A 62 023808 (2000)]. El *status* de estas dos escalas de tiempo es aclarado utilizando las propiedades analíticas de la solución.

ÍNDICE	Página
I. Introducción	1
I.1 Antecedentes	1
I.2 La controversia	2
I.3 Objetivos	4
II. Formalismo	6
II.1 El problema de la fuente puntual	6
II.2 Comportamiento asintótico de las soluciones	9
II.2.1 Régimen de tiempos largos	10
II.2.2 Régimen de tiempos cortos	12
III. Evolución temporal y espacial de la densidad de probabilidad	13
III.1 Evolución temporal y espacial de la densidad de probabilidad para el caso $E_0 > V_0$	13
III.2 Evolución temporal y espacial de la densidad de probabilidad para el caso $E_0 < V_0$	16
III.2.1 Dinámica del pulso transitorio y tiempos de arribo	20
IV. Conclusiones	28
Literatura citada	30
Apéndice A: La función de Moshinsky	33
Apéndice B: Espectrogramas	36

Figura 1:	Esquema de un potencial escalón $V(x) = \Theta(x)V_0$.	7
Figura 2:	Evolución espacial de la densidad de probabilidad para energías de incidencia por encima de la altura del escalón, $ \Psi_>(x,t) ^2$. Se observa la propagación de un frente de onda semiclásico.	14
Figura 3:	Comportamiento de $ \Psi_>(x,t) ^2$ como función del tiempo para distintos valores de la posición. Se observa la propagación de un frente de onda.	15
Figura 4:	Evolución espacial de la densidad de probabilidad para energías de incidencia menores a la altura del escalón, $ \Psi_<(x,t) ^2$, para distintos valores del tiempo. Se observa como $ \Psi_<(x,t) ^2$ fluctúa alrededor de la solución estacionaria y como después de $2x_p$ exhibe el nacimiento de un máximo.	17
Figura 5:	Espectrograma de la solución, $\Psi_<(x,t)$, para un valor fijo de la posición en la región $x < 2x_p$. Se observa que el proceso es gobernado por frecuencias por debajo la barrera.	18
Figura 6:	Evolución espacial del máximo exhibido por la densidad de probabilidad para distintos valores del tiempo. Se observa que dicho máximo se propaga en la región clásicamente prohibida como un paquete de ondas.	19

ÍNDICE DE FIGURAS (continuación)

Página

- Figura 7:** Comportamiento espacial de la densidad de probabilidad exacta en la vecindad del frente transitorio comparado con $|\Psi_p|^2$. 22
- Figura 8:** Se compara $|\Psi_p|^2$ con la densidad de probabilidad exacta como función del tiempo, para un valor fijo de la posición, $x = 8.0$ nm. 23
- Figura 9:** Evolución espacial de la densidad de probabilidad exacta donde se muestra el comportamiento del máximo del pulso transitorio. 25
- Figura 10:** (a) Espectrograma de $|\Psi_{<(x,t)}|^2$ para un valor fijo de la posición, $x = 8.0$ nm. Se observa que la solución es dominada por frecuencias por debajo de la frecuencia de corte. (b) Se muestra la densidad de probabilidad como función del tiempo. 27

EVOLUCIÓN DE ONDAS CUÁNTICAS EN UN POTENCIAL ESCALÓN

I INTRODUCCIÓN

I.1 Antecedentes

El tunelaje a través de una región clásicamente prohibida es uno de los problemas fundamentales en la mecánica cuántica el cual ha originado un notable desarrollo tanto en la investigación básica como en la aplicada. El fenómeno del tunelaje es un proceso bien entendido en el dominio de la energía, donde usualmente se resuelve la ecuación de Schrödinger estacionaria. Un ejemplo típico es el problema de tunelaje a través de barreras y escalones de potencial, discutidos en la gran mayoría de los textos de mecánica cuántica. Sin embargo, en el dominio del *tunelaje dependiente del tiempo* aún existen en la literatura problemas abiertos a la investigación. Ciertamente, la mayoría de los trabajos realizados en este régimen consisten en estudios numéricos de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo, con la condición inicial de un paquete Gaussiano (Hartman, 1962; Collins, *et al.*, 1987; Weis y Weis, 2000). Es claro que en muchos casos es posible obtener soluciones por la vía numérica, sin embargo en este contexto dinámico se han desarrollado enfoques alternativos que conducen a soluciones analíticas exactas de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo. Uno de estos es el modelo de obturador cuántico desarrollado por Moshinsky (1952) para el caso de propagación libre. Otro enfoque menos usual es conocido en

la literatura como el modelo de la *fente puntual* (Stevens, 1983).

El modelo de obturador fue recientemente generalizado por García-Calderón y Rubio (1997) a situaciones con potenciales, lo cual ha permitido explorar los fenómenos transitorios en sistemas físicos de interés (García-Calderón y Rubio, 1997; García-Calderón, *et al.*, 1999; Romo y Villavicencio, 1999; Villavicencio y Romo, 2000; Romo y Villavicencio, 2001; García-Calderón y Villavicencio, 2001; Romo, *et al.*, 2002; Romo, 2002; García-Calderón y Villavicencio, 2002).

A diferencia del modelo anterior, el cual considera un estado inicial dado por una onda extendida, el modelo de la *fente puntual* involucra la generación de una onda en un punto. Este último es el modelo que se utilizará en el presente estudio para explorar la evolución de ondas cuánticas en un potencial escalón. Este problema es conocido en la literatura como el *primer problema de Stevens*. Recientemente, dicho problema ha despertado gran interés (Thomas y Büttiker, 1998; Muga y Büttiker, 2000) debido a la controversia desatada en torno a la existencia de frentes de onda semiclásicos predicha por Stevens (1983) y apoyada por Moretti (1992). La motivación del presente estudio es investigar el origen de dicha controversia y aclarar aspectos del problema que aún no han sido del todo entendidos.

I.2 La controversia

Conforme a lo que se ha mencionado en la subsección anterior, el primer problema de Stevens aborda la solución al problema de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo para un potencial escalón de altura constante V_0 , utilizando como la condición inicial una fente puntual de frecuencia ω_0 , *i.e.*, $\Psi_0(x=0, t) = \exp(-i\omega_0 t)$, donde $\omega_0 = E_0/\hbar$, con E_0 la energía inicial de la fente. El estudio realizado original-

mente por Stevens (1983) se fundamenta en un análisis asintótico de la representación integral de las soluciones, inspirado en las técnicas desarrolladas por Sommerfeld y Brillouin (Brillouin, 1960). En su análisis, Stevens encuentra que para el caso $E_0 > V_0$, la velocidad de propagación del frente de onda ocurre con la velocidad de grupo semiclásica, $v_{sc} = (\hbar k_0/m)$, donde $k_0 = [2m(E_0 - V_0)]^{1/2}/\hbar$. Sin embargo, la conclusión más polémica de Stevens en este sentido, es la existencia de un frente de onda semiclásico propagándose en el interior del potencial para el caso de energías iniciales menores que la altura del escalón ($E_0 < V_0$). En otras palabras, propone que el concepto de velocidad de grupo permanece válido en la región clásicamente prohibida del escalón.

Por una parte, la existencia de tales frentes de onda es soportada por el análisis asintótico de la solución analítica exacta de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo, realizado por Moretti (1992). En su estudio sustenta la existencia de propagación de un frente de onda semiclásico, argumentando que la función de onda tiende a alcanzar a la solución estacionaria con velocidad semiclásica denominada por el propio Moretti como “*velocidad de tunelaje*” dada por $v_{\chi_0} = (\hbar \chi_0/m)$, donde $\chi_0 = [2m(V_0 - E_0)]^{1/2}/\hbar$. Sin embargo, la propuesta realizada por Stevens ha encontrado oposición en otros investigadores, quienes con base en evidencias tanto numéricas (Jauho, *et al.*, 1989) como analíticas (Brouard y Muga, 1996; Villavicencio, 2000; García-Calderón y Villavicencio, 2001) han enfatizado que para distintas condiciones iniciales, no se observa la propagación de dichos frentes de onda monocromáticos.

Recientemente, Muga y Büttiker (2000) han abordado el problema, pero a diferencia de Moretti (quien sólo analizó el comportamiento asintótico), ellos analizan la

dependencia temporal del régimen transitorio así como el contenido en frecuencias (espectrogramas) de la solución. Su análisis los conduce a una conclusión contraria a la de Moretti *i.e.* no se observa la propagación del frente monocromático de Stevens. En lugar del polémico frente encontraron una estructura transitoria cuyo tiempo de arribo a una posición fija x_f , está dado inesperadamente por $3^{-1/2}\tau$, donde τ es el tiempo de Büttiker-Landauer (Büttiker y Landauer, 1982), definido por $\tau = (x_f/v_{x_0})$.

I.3 Objetivos

El objetivo general del presente trabajo es investigar la evolución temporal y espacial de ondas cuánticas para un potencial escalón con base en la solución analítica exacta de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo, con la condición inicial de fuente puntual. En particular, se pretende esclarecer la controversia anteriormente mencionada, estudiando no sólo la parte temporal sino también la evolución espacial de la solución, la cuál no ha sido explorada. Además de lo anterior, se estudiará el papel que juega τ en la dependencia espacial de la solución.

A diferencia de las derivaciones de la solución analítica existentes en la literatura (Moretti, 1992; Muga y Büttiker, 2000) basadas en el método de la transformada de Fourier y distintas técnicas de integración compleja, nuestro enfoque involucra el método de la transformada de Laplace (Villavicencio, *et al.*, 2002). Dicho método reduce notablemente las complicaciones de carácter matemático presentes en las derivaciones basadas en el método de la transformada de Fourier.

Una vez expuesta la idea general de nuestra investigación, a continuación se presenta la distribución del material por capítulos. En el capítulo II se presenta la solución analítica del problema utilizando el método de la transformada de Laplace,

con base en la cual se estudiará la evolución de la densidad de probabilidad. En el capítulo III se presenta un estudio de la densidad de probabilidad tanto para energías menores que la altura del escalón, como para mayores que ella. Finalmente, en el capítulo IV se exponen las conclusiones y aportaciones de nuestra investigación.

II FORMALISMO

En este capítulo se desarrolla el marco teórico en el cual se fundamenta el presente estudio de la evolución temporal y espacial de ondas cuánticas generadas por una fuente puntual de frecuencia ω_0 . Específicamente, en la sección II.1 se discute la solución de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo para un potencial escalón utilizando el método de la transformada de Laplace (Villavicencio *et al.*, 2002). Esto nos permite describir mediante fórmulas exactas los aspectos dinámicos de la función de onda. En la sección II.2 se analiza el comportamiento asintótico de dichas soluciones.

II.1 El problema de la fuente puntual

El problema que nos ocupa en esta subsección es la solución del *primer problema de Stevens*, utilizando el método de la transformada de Laplace. Esto involucra la solución de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo para un potencial escalón de altura constante $V(x) = \Theta(x)V_0$ (véase la figura 1), la cual está dada como

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

con la condición inicial de fuente puntual dada por:

$$\psi_0(x=0, t) = \begin{cases} \exp(-i\omega_0 t); & t > 0 \\ 0; & t < 0. \end{cases} \quad (2)$$

Aquí se ha definido $\omega_0 = (E_0/\hbar)$, donde E_0 es la energía inicial de la fuente. Además, debemos suponer que a $t = 0$ en la región interna del potencial $x < 0$, el estado inicial

satisface la siguiente condición de frontera,

$$\psi_0(x, t = 0) = 0. \quad (3)$$

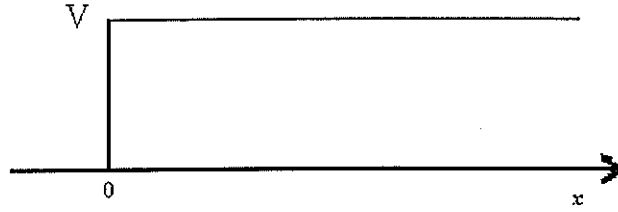


Figura 1: El potencial escalón $V(x) = \Theta(x) V_0$.

Consideremos el caso en que la energía inicial de la fuente es mayor que la altura del escalón, el cual corresponde a la siguiente relación de dispersión

$$k_0 = \sqrt{\beta(\omega_0 - V)}, \quad (4)$$

donde se ha definido $\beta = (2m/\hbar)$ y $V = (V_0/\hbar)$.

Tomando la transformada de Laplace de la ecuación (1) y aplicando la condición de frontera dada por la ecuación (3) obtenemos la siguiente ecuación diferencial:

$$\frac{d^2 \bar{\Psi}(x, s)}{dx^2} + \beta(is - V) \bar{\Psi}(x, s) = 0, \quad (5)$$

donde la función $\bar{\Psi}(x, s)$ es la transformada de Laplace de $\Psi(x, t)$, definida por

$$\bar{\Psi}(x, s) = \int_0^{\infty} e^{-st} \Psi(x, t) dt. \quad (6)$$

La solución físicamente aceptable para la ecuación (5) es,

$$\bar{\Psi}(x, s) = c_1 e^{i\sqrt{\beta(is-V)}x}. \quad (7)$$

Para determinar el valor de la constante c_1 , es necesario calcular la transformada de Laplace de la condición inicial, dada por la ecuación (2), ésta es,

$$\bar{\psi}_0(0, s) = \frac{1}{s + i\omega_0}, \quad (8)$$

donde ω_0 está dada por la relación de dispersión como $\omega_0 = (k_0^2 + \beta V)/\beta$. La constante c_1 se obtiene combinando las ecuaciones (7) y (8) evaluadas en $x = 0$, lo cual nos conduce a

$$\bar{\Psi}(x, s) = \frac{e^{i\sqrt{\beta(is-V)}x}}{s + i\omega_0}. \quad (9)$$

Después de realizar una descomposición en fracciones parciales podemos escribir la expresión anterior como sigue:

$$\bar{\Psi}(x, s) = \frac{i\beta}{2\sqrt{\beta(is-V)}} \left[\frac{1}{\sqrt{\beta(is-V)} + k_0} + \frac{1}{\sqrt{\beta(is-V)} - k_0} \right] e^{i\sqrt{\beta(is-V)}x}. \quad (10)$$

La solución dependiente del tiempo para $x > 0$ y $t > 0$, $\Psi(x, t)$, se obtiene calculando la transformada de Laplace inversa de la ecuación (10), la cual se define como:

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} \bar{\Psi}(x, s) e^{st} ds. \quad (11)$$

Sustituyendo la ecuación (10) en la expresión anterior, tenemos que:

$$\Psi(x, t) = \psi_+ + \psi_-, \quad (12)$$

donde

$$\psi_{\pm} = \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} \frac{i\beta}{2} \frac{e^{i\sqrt{\beta(is-V)}x} e^{st}}{\sqrt{\beta(is-V)} (\sqrt{\beta(is-V)} \pm k_0)} ds. \quad (13)$$

Realizando el cambio de variable $(is - V) = is'$ en la expresión anterior obtenemos,

$$\psi_{\pm} = e^{-iVt} \left[\frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} \frac{i\beta}{2} \frac{e^{i\sqrt{\beta is'}x} e^{s't}}{\sqrt{\beta is'} (\sqrt{\beta is'} \pm k_0)} ds' \right]. \quad (14)$$

En la ecuación anterior es posible identificar la representación integral de las funciones de Moshinsky (véase Apéndice A), por lo que podemos escribir la ecuación (14) como:

$$\psi_{\pm} = e^{-iVt} M(x, \pm k_0, t). \quad (15)$$

Esto nos permite obtener finalmente la solución en la región de propagación ($\omega_0 > V$), la cual está dada por:

$$\Psi_{>}(x, t) = e^{-iVt} [M(x, k_0, t) + M(x, -k_0, t)] ; \omega_0 > V. \quad (16)$$

La solución correspondiente al caso $\omega_0 < V$, se obtiene siguiendo un procedimiento a lo largo de las mismas líneas que en el caso anterior. La solución se escribe como sigue:

$$\Psi_{<}(x, t) = e^{-iVt} [M(x, i\chi_0, t) + M(x, -i\chi_0, t)] ; \omega_0 < V, \quad (17)$$

donde se ha definido $\chi_0 = [\beta(V - \omega_0)]^{1/2} = ik_0$.

Las ecuaciones (16) y (17) concuerdan con las expresiones analíticas obtenidas por Moretti (1992) así como por Muga y Büttiker (2000), las cuales fueron derivadas utilizando el método de transformada de Fourier.

II.2 Comportamiento asintótico de las soluciones

En esta sección se discuten las propiedades asintóticas de las soluciones, en los límites $t \rightarrow \infty$ y $t \rightarrow 0$. Para esto resulta conveniente utilizar una representación alternativa de las funciones M de Moshinsky (véase Apéndice A),

$$M(x, q, t) = M(y_q) = \frac{1}{2} e^{imx^2/2\hbar t} w(iy_q), \quad (18)$$

donde $w(z)$ es la función de error compleja y y_q está dada por

$$y_q = e^{-i\pi/4} \left(\frac{m}{2\hbar t} \right)^{1/2} \left[x - \frac{\hbar q}{m} t \right], \quad (19)$$

con $q = \pm k_0, \pm i\chi_0$.

La ventaja que nos ofrece dicha representación, es que permite desarrollar las funciones M en potencias de la variable y_q . En particular, para valores grandes del argumento dado por la ecuación (19), es decir para $|y_q| \gg 1$ (condición que se satisface en ambos límites), la función $M(y_q)$ puede ser representada de la siguiente manera (García-Calderón, Rubio, 1997):

$$M(y_q) \approx \frac{1}{2} e^{imx^2/2\hbar t} \left[2e^{y_q^2} + \frac{1}{\sqrt{\pi}y_q} - \frac{1}{\sqrt{\pi}y_q^3} + \dots \right] \quad (20)$$

si $\pi/2 < \arg y_q < 3\pi/2$. Por otro lado, si $-\pi/2 < \arg y_q < \pi/2$, entonces $M(y_q)$ se escribe como

$$M(y_q) \approx \frac{1}{2} e^{imx^2/2\hbar t} \left[\frac{1}{\sqrt{\pi}y_q} - \frac{1}{\sqrt{\pi}y_q^3} + \dots \right]. \quad (21)$$

II.2.1 Régimen de tiempos largos

En el límite de valores grandes de t , el argumento y_q de las funciones M tiende al siguiente valor:

$$y_q \rightarrow -e^{-i\pi/4} q \sqrt{\frac{t}{\beta}}. \quad (22)$$

Consideremos el caso $q = i\chi_0$. La fase del argumento es $\theta = -5\pi/4$, de tal manera que $\pi/2 < \arg y_{i\chi_0} < 3\pi/2$, por lo que podemos escribir $M(y_{i\chi_0})$ a partir de la ecuación (20) como:

$$M(y_{i\chi_0}) \approx \frac{1}{2} e^{imx^2/2ht} \left[2e^{y_{i\chi_0}^2} + \frac{1}{\sqrt{\pi}y_{i\chi_0}} - \frac{1}{\sqrt{\pi}y_{i\chi_0}^3} + \dots \right]. \quad (23)$$

Al tomar el límite de la expresión anterior cuando $t \rightarrow \infty$ y, después de algunas manipulaciones algebraicas, obtenemos

$$M(y_{i\chi_0}) \approx e^{-\chi_0 x} e^{i\chi_0^2 t/\beta}. \quad (24)$$

Para $q = -i\chi_0$ tenemos que $-\pi/2 < \arg y_{-i\chi_0} < \pi/2$, de tal forma que $M(y_{-i\chi_0})$ está dada por

$$M(y_{-i\chi_0}) \approx \frac{1}{2} e^{imx^2/2ht} \left[\frac{1}{\sqrt{\pi}y_{-i\chi_0}} - \frac{1}{\sqrt{\pi}y_{-i\chi_0}^3} + \dots \right] \quad (25)$$

Notése que cuando $t \rightarrow \infty$ el término $(1/y_{-i\chi_0}) \rightarrow 0$, así que en este límite la función $M(y_{-i\chi_0})$ no contribuye.

Sustituyendo la expresión para $M(y_{i\chi_0})$ dada por la ecuación (24) en la ecuación (17), obtenemos la solución para regímenes de tiempos largos en la región interna del potencial,

$$\Psi_{<}^a \approx e^{-i\omega_0 t} e^{-\chi_0 x}; \quad \omega_0 < V. \quad (26)$$

Aquí es importante señalar que la solución oscila alrededor de la frecuencia $\omega_0 = E_0/\hbar$ asociada a la energía de incidencia, y que decae exponencialmente a lo largo de la región interna del potencial como función de la posición x . Es claro de la ecuación (26) que en el régimen estacionario la densidad de probabilidad es,

$$|\Psi_{<}^a|^2 \approx e^{-2\chi_0 x}, \quad \text{cuando } t \rightarrow \infty. \quad (27)$$

Realizando un procedimiento análogo para el caso de energía inicial mayor que la altura del escalón, se obtiene que el comportamiento asintótico cuando $t \rightarrow \infty$ está gobernado por,

$$\Psi_{>}^a \approx e^{-i\omega_0 t} e^{-ik_0 x}; \omega_0 > V. \quad (28)$$

II.2.2 Régimen de tiempos cortos

En el límite de valores pequeños del tiempo, el argumento de las funciones M tiende a,

$$y_q \rightarrow \frac{1}{2} e^{-i\pi/4} \sqrt{\frac{\beta}{t}} x, \quad (29)$$

expresión que resulta independiente de q .

Dado que en este caso la fase es $\theta = -\pi/4$, a partir de la ecuación (21) podemos escribir,

$$M(y_{\pm i\chi_0}) \approx \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{i\pi/4} e^{imx^2/2ht} \sqrt{\frac{t}{\beta}} \frac{1}{x}. \quad (30)$$

Entonces, en el límite $t \rightarrow 0$, la solución en la región interna del potencial está dada por

$$\Psi_{<}(x, t) \approx \frac{2}{\sqrt{\pi}} e^{i\pi/4} e^{-iVt} e^{imx^2/2ht} \sqrt{\frac{t}{\beta}} \frac{1}{x}; \omega_0 < V. \quad (31)$$

En este caso la densidad de probabilidad crece linealmente con t para un valor fijo de la posición x ($x \neq 0$), esto es,

$$|\Psi_{<}|^2 \approx \left(\frac{4}{\pi\beta} \right) \frac{t}{x^2}, \text{ cuando } t \rightarrow 0. \quad (32)$$

III EVOLUCIÓN TEMPORAL Y ESPACIAL DE LA DENSIDAD DE PROBABILIDAD

En el presente capítulo estudiaremos el comportamiento espacial y temporal de la solución de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo para un potencial escalón, con la condición inicial de *fente puntual* con frecuencia ω_0 . En la sección III.1 se inicia nuestro estudio considerando el caso de energías mayores que la altura del escalón ($E_0 > V_0$). Por otra parte, en la sección III.2 se discute el comportamiento de la solución para energías menores a la altura del escalón ($E_0 < V_0$).

III.1 Evolución temporal y espacial de la densidad de probabilidad para el caso $E_0 > V_0$

En esta sección exploraremos el comportamiento de la solución $\Psi_>(x, t)$, dada por la ecuación (16), mediante un estudio de la densidad de probabilidad, $|\Psi_>|^2$, como función de la posición y del tiempo. Es importante señalar que en este caso se involucra la evolución de ondas en la región clásicamente permitida del potencial. Por tal motivo, se trata de un régimen libre de controversias en donde la propagación de frentes de onda semiclásicos es un hecho aceptado en la literatura. Aunque el propósito principal de este trabajo es explorar la dinámica de la solución para el caso $E_0 < V_0$, por completez iniciamos nuestro estudio con el caso $E_0 > V_0$.

A continuación analicemos el comportamiento de $|\Psi_>|^2$ considerando los siguientes parámetros: $V_0 = 1.0$ eV, y energía inicial $E_0 = 5.0$ eV. En la figura 2 se presenta la evolución espacial de $|\Psi_>|^2$ para distintos valores del tiempo, $t = 10.0$ fs, $t = 20.0$ fs y $t = 50.0$ fs. Se observa un frente principal con oscilaciones amortiguadas que se propaga de izquierda a derecha a través de la región $x > 0$. Por simple inspección de

las gráficas, podemos verificar que el frente de onda viaja aproximadamente con la velocidad semiclásica $v_{sc} = (\hbar k_0/m)$.

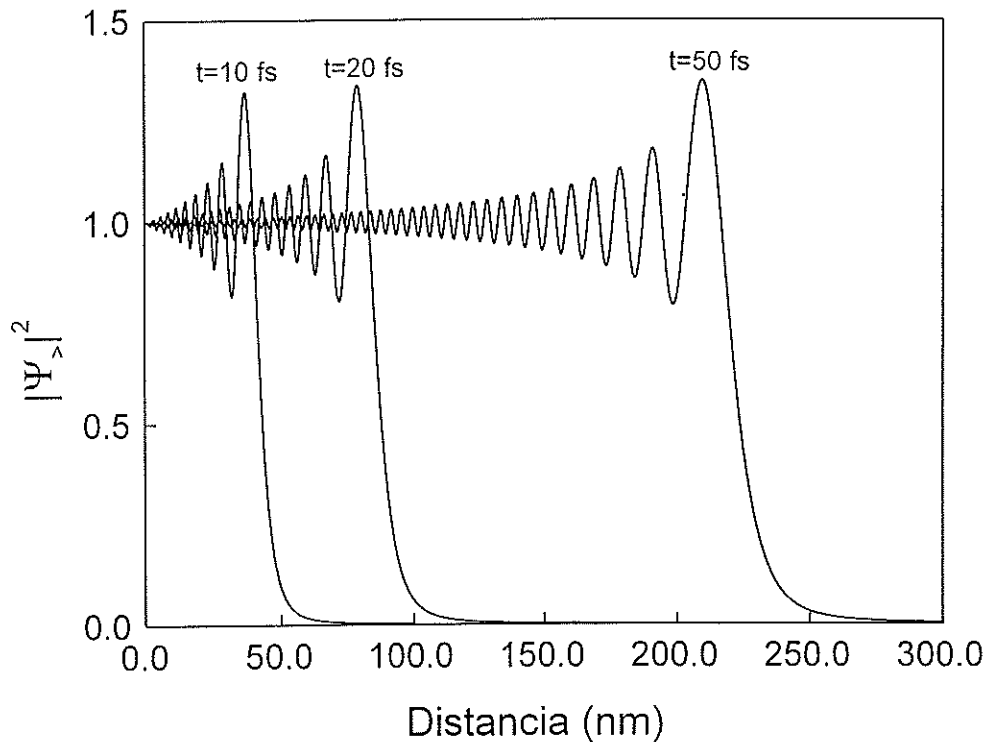


Figura 2: Comportamiento de $|\Psi\rangle^2$ como función de la posición para distintos valores del tiempo: $t = 10.0$ fs, $t = 20.0$ fs y $t = 50.0$ fs. Se observa la propagación de un frente de onda con una velocidad aproximada v_{sc} .

Para complementar nuestro análisis, en la figura 3 se muestra la densidad de probabilidad como función del tiempo para los siguientes valores de la posición: $x_1 = 10.0$ nm, $x_2 = 25.0$ nm y $x_3 = 40.0$ nm. En este caso también se ilustra la propagación del frente de onda para posiciones específicas, x_i . Nótese que la densidad de probabilidad

crece rápidamente hasta alcanzar un valor máximo a partir del cual empieza a oscilar hasta alcanzar el valor estacionario. El crecimiento repentino de la densidad de probabilidad ocurre aproximadamente a un tiempo $t_i = (x_i/v_{sc})$, el cual corresponde al *tiempo de arribo* del frente principal a la posición x_i .

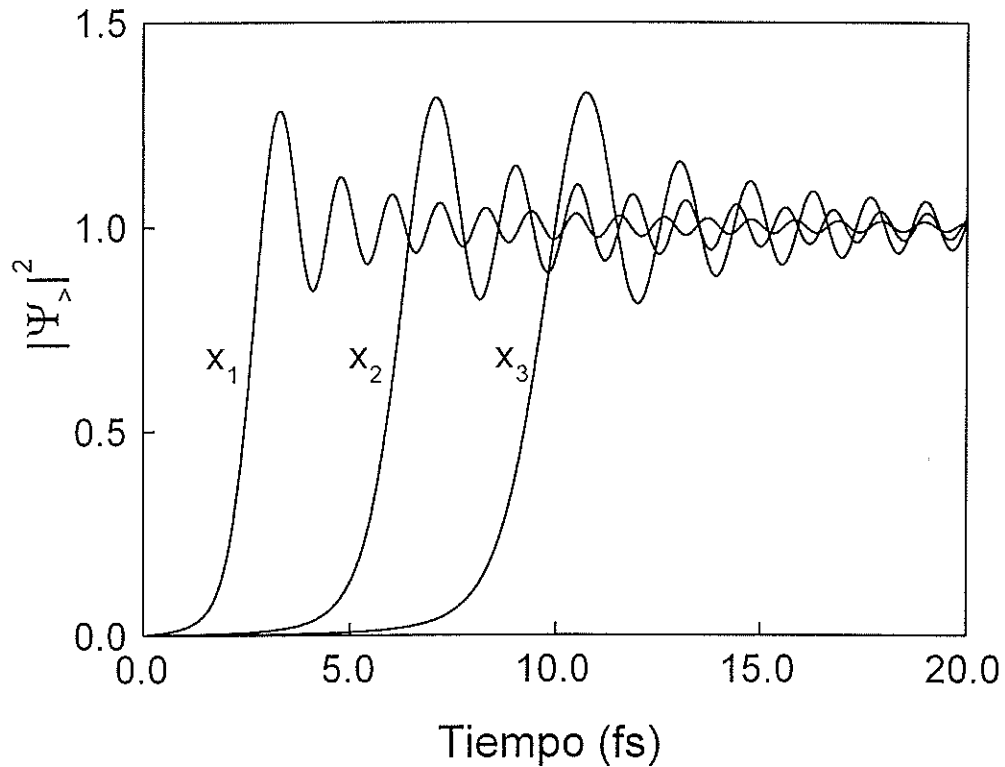


Figura 3: Evolución temporal de la densidad de probabilidad para distintos valores de la posición, $x_1 = 10.0$ nm, $x_2 = 25.0$ nm y $x_3 = 40.0$ nm.

Un hecho relevante que se desprende de nuestros resultados, es que la velocidad semiclásica v_{sc} juega un papel importante en la evolución temporal y espacial de la solución. Aunque para energías iniciales mayores que la altura del escalón ($E_0 > V_0$)

es permisible hablar de la propagación de un frente semiclásico, esta afirmación ha resultado polémica para el caso $E_0 < V_0$ (Stevens, 1983; Moretti, 1992; Büttiker y Thomas, 1998; Muga y Büttiker, 2000; Villavicencio *et al.*, 2002). Los resultados para este último caso más complicado se discuten en la siguiente subsección.

III.2 Evolución temporal y espacial de la densidad de probabilidad para el caso $E_0 < V_0$

Para explorar el comportamiento de la solución en la región interna del potencial, estudiaremos las propiedades de $|\Psi_{<}|^2$ como función del tiempo y de la posición, considerando los siguientes parámetros: $V_0 = 1.0$ eV y energía inicial de la fuente $E_0 = 0.5$ eV.

En la figura 4 se muestra la evolución espacial de $|\Psi_{<}|^2$ (línea continua) como función de la posición x para valores crecientes del tiempo, $t_1 = 0.1$ fs, $t_2 = 1.0$ fs y $t_3 = 3.0$ fs. En este caso podemos ver que la densidad de probabilidad evanesce en el interior del potencial en una distancia finita dada aproximadamente por $2x_p$, donde $x_p = (1/\chi_0)$ es la longitud de penetración de la solución estacionaria, que para este ejemplo en particular tiene un valor de $x_p = 1.067$ nm. También es posible observar que la densidad de probabilidad fluctúa alrededor de la solución estacionaria (línea discontinua). En el recuadro se muestra dicha fluctuación para un tiempo mayor, $t_4 = 5.0$ fs, donde se observa claramente que después de $2x_p$ la solución exhibe un máximo. Esto que se observa aquí es el nacimiento de una estructura, cuyas propiedades se estudiarán más adelante.

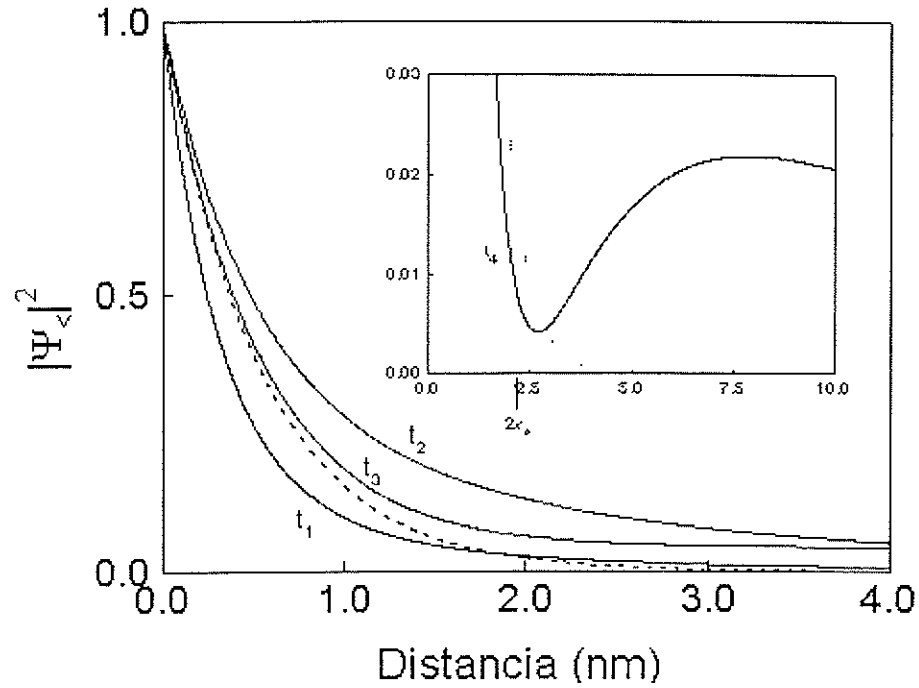


Figura 4: Evolución espacial de $|\Psi_{<}|^2$ (línea continua) para distintos valores del tiempo, $t_1 = 0.1$ fs, $t_2 = 1.0$ fs y $t_3 = 3.0$ fs. Se observa que la densidad de probabilidad fluctúa alrededor de la solución estacionaria (línea discontinua). En el recuadro se muestra que a $t_4 = 5.0$ fs la densidad decae hasta $2x_p = 2.134$ nm; después de este punto, $|\Psi_{<}|^2$ exhibe el nacimiento de un pulso.

Vemos pues, que en la región $x < 2x_p$, no podemos hablar de propagación de un frente de onda semiclásico, debido a que la solución fluctúa alrededor del valor estacionario sin propagarse a través de la región interna del potencial.

Este resultado es físicamente relevante debido que implica que no es posible asociar una velocidad de grupo semiclásica al comportamiento transitorio de la solución hacia el régimen estacionario, lo cual contradice las afirmaciones Stevens (1983) y Moretti (1992). En otras palabras, no es posible definir un frente semiclásico princi-

pal $\psi(x, t) \approx \exp(-i\omega_0 t) \exp(-\chi_0 x) \Theta(t - xv_{\chi_0})$ propagándose a lo largo de la región interna del potencial con velocidad de grupo $v_{\chi_0} = (\hbar\chi_0/m)$ y atenuado exponencialmente por $\exp(-\chi_0 x)$, tal como lo sugiere Moretti (1992).

En la figura 5 se presenta un espectrograma (ver Apéndice B) de la solución (línea continua), donde $\omega_V = (V_0/\hbar)$ es la frecuencia de corte asociada al potencial (línea discontinua). Se observa que para el máximo de la densidad de probabilidad como función del tiempo, indicado por un pequeño cuadro sólido en la figura 5, el proceso es gobernado por frecuencias menores a ω_V , lo que implica que se trata de un proceso asociado a tunelaje. Este resultado ha sido también reportado recientemente por García-Calderón *et al.* (2002).

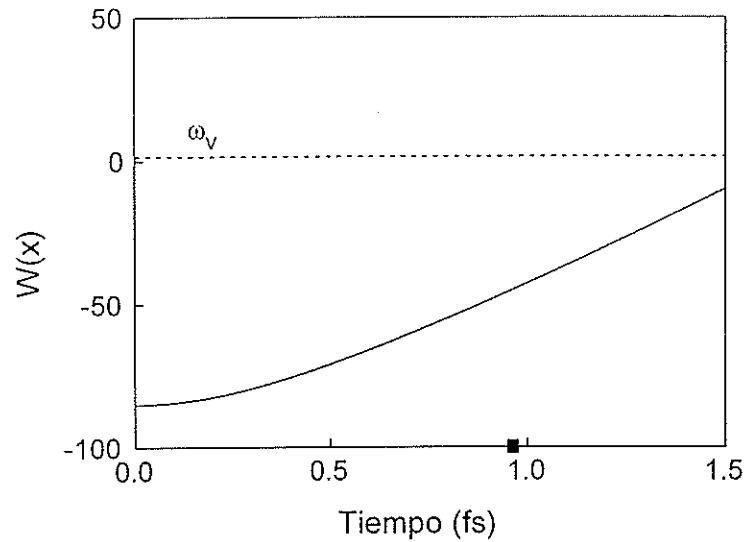


Figura 5: Espectrograma de la solución (línea continua) donde se observa que el proceso ocurre a frecuencias por debajo de la frecuencia de corte ω_V (línea discontinua).

En la figura 6 se muestra el máximo observado en la densidad de probabilidad para valores ascendentes del tiempo, $t_1 = 100.0$ fs (línea continua), $t_2 = 150.0$ fs (línea discontinua) y $t_3 = 300.0$ fs (línea punteada). Esta estructura se propaga en la región interna del potencial de manera similar a un paquete de ondas, *i.e.*, conforme el tiempo se incrementa, el máximo de $|\Psi_{<}|^2$ disminuye y la anchura del pulso se incrementa.

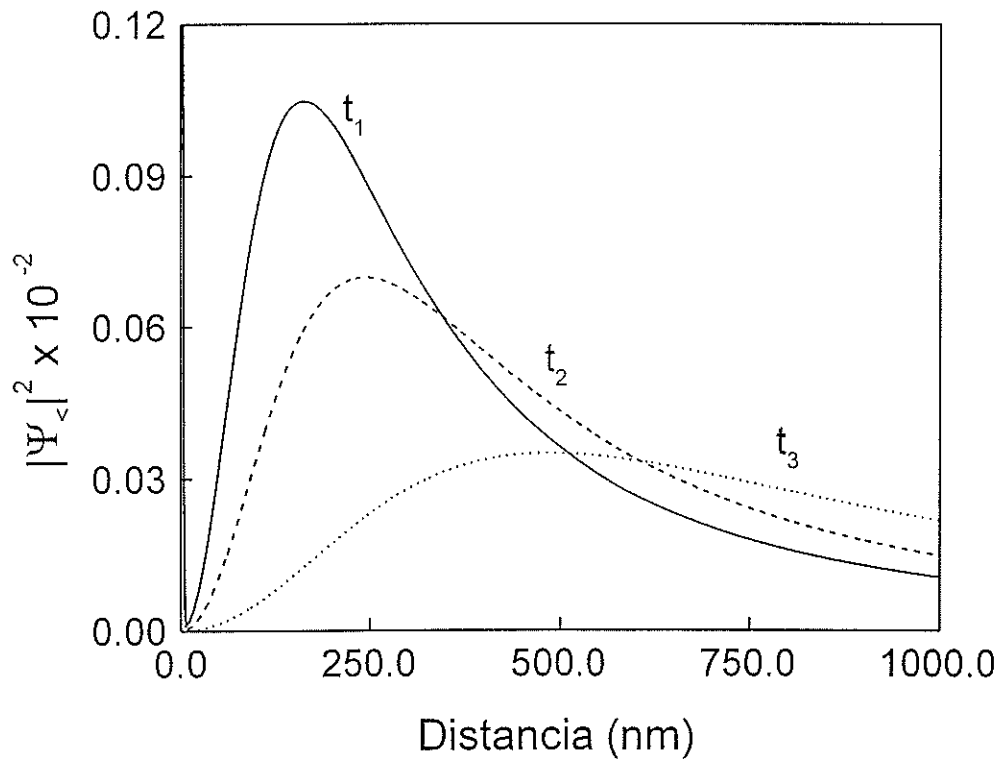


Figura 6: Comportamiento de $|\Psi_{<}|^2$ como función de la posición para valores ascendentes del tiempo, $t_1 = 100.0$ fs (línea continua), $t_2 = 150.0$ fs (línea discontinua) y $t_3 = 300.0$ fs (línea punteada). Se observa que el pulso se propaga en la región interna del potencial como un paquete de ondas.

De los resultados presentados hasta el momento es claro que existen dos regímenes claramente identificables. El primero de ellos ocurre dentro de la región $x < 2x_p$, donde x_p es la longitud de penetración de la solución estacionaria, el cual denominaremos como *régimen no-opaco* en virtud de que las frecuencias dominantes en el proceso se encuentran por debajo de la frecuencia de corte (García-Calderón, *et al.* 2002). En este régimen la densidad de probabilidad fluctúa alrededor de la solución estacionaria hasta alcanzar su valor asintótico, $|\Psi_{<}^a|^2$. El segundo régimen, el cual denominaremos como *régimen del pulso transitorio* (o *régimen opaco*), está caracterizado por la formación y propagación en $x > 2x_p$ de un pulso.

III.2.1 Dinámica del pulso transitorio y tiempos de arribo

Para describir la dinámica del pulso transitorio en términos simples, a continuación derivaremos una expresión analítica para la densidad de probabilidad (Villavicencio, *et al.*, 2002) utilizando las propiedades de las funciones M .

Para energías iniciales menores que la altura del escalón, la solución está dada por la ecuación (17) como $\Psi_{<} = \exp(-iVt) [M(y_{i\chi_0}) + M(y_{-i\chi_0})]$, donde se ha definido

$$y_{\pm i\chi_0} = \frac{(x \mp i\chi_0\hbar t/m)}{\sqrt{2\hbar t/m}} e^{-i\pi/4}. \quad (33)$$

A partir de un estudio numérico se determinó que en la región del pulso transitorio se satisface la condición $|y_{\pm i\chi_0}| \gg 1$, lo que permite utilizar los desarrollos de las funciones M dados por las ecuaciones (22) y (23). Para describir el pulso es suficiente considerar potencias inversas de y_q a primer orden en dichos desarrollos, de tal forma que esto nos permite escribir,

$$\Psi_{<} \approx \frac{1}{2} \exp(-iVt) \exp\left(\frac{im}{2\hbar t} x^2\right) \left[2 \exp(y_{i\chi_0}^2) + \frac{1}{\sqrt{\pi}y_{i\chi_0}} + \frac{1}{\sqrt{\pi}y_{-i\chi_0}} \right], \quad (34)$$

esto es,

$$\Psi_{<} \approx \Psi_{<}^a + \Psi_p, \quad (35)$$

donde $\Psi_{<}^a$ es la solución estacionaria dada por la ecuación (27), término que da lugar al decaimiento exponencial de la densidad de probabilidad dentro del potencial. Esto nos permite escribir,

$$\Psi_p \approx \frac{1}{2} \exp(-iVt) \exp\left(\frac{im}{2\hbar t} x^2\right) \left[\frac{1}{\sqrt{\pi}y_{i\chi_0}} + \frac{1}{\sqrt{\pi}y_{-i\chi_0}} \right]. \quad (36)$$

Finalmente, al tomar el módulo cuadrado de la ecuación (36) obtenemos la expresión analítica que describe la estructura del pulso

$$|\Psi_p|^2 = \frac{2}{\pi} \frac{(\hbar t/m) x^2}{[x^2 + \chi_0^2 (\hbar t/m)^2]^2}. \quad (37)$$

Con el fin de ilustrar la confiabilidad de la anterior fórmula, en la figura 7 se compara la evolución espacial de la densidad de probabilidad exacta (línea continua) con la expresión del pulso $|\Psi_p|^2$ (línea discontinua), para un valor fijo del tiempo $t = 100.0$ fs. Nótese que ambas curvas coinciden, es decir, la ecuación (37) reproduce exactamente el comportamiento de la densidad de probabilidad en la vecindad del pulso transitorio. Ahora como función del tiempo, para una posición fija, $x = 8.0$ nm, en la figura 8 se presenta la densidad de probabilidad exacta (línea continua) comparada con $|\Psi_p|^2$ (línea discontinua), para un valor fijo de la posición: $x = 8.0$ nm. Podemos ver que nuestra fórmula analítica describe satisfactoriamente el comportamiento de $|\Psi_{<}|^2$.

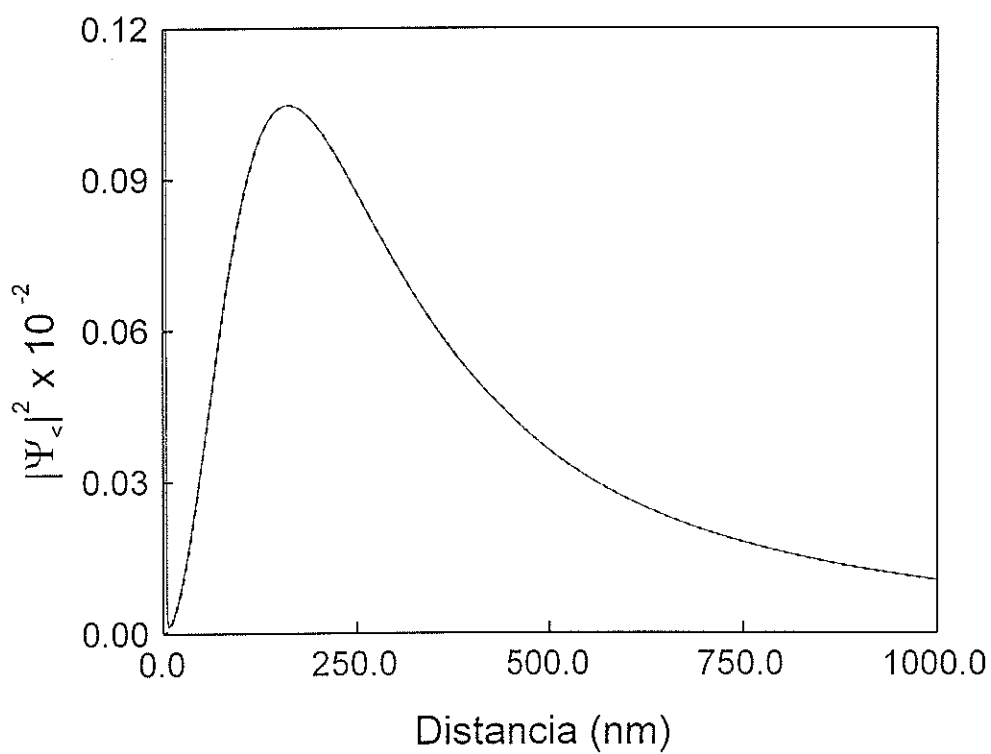


Figura 7: Se muestra que $|\Psi_p|^2$ (línea discontinua) reproduce a la densidad de probabilidad exacta (línea continua) como función de la posición, para un valor fijo del tiempo $t = 100.0$ fs.

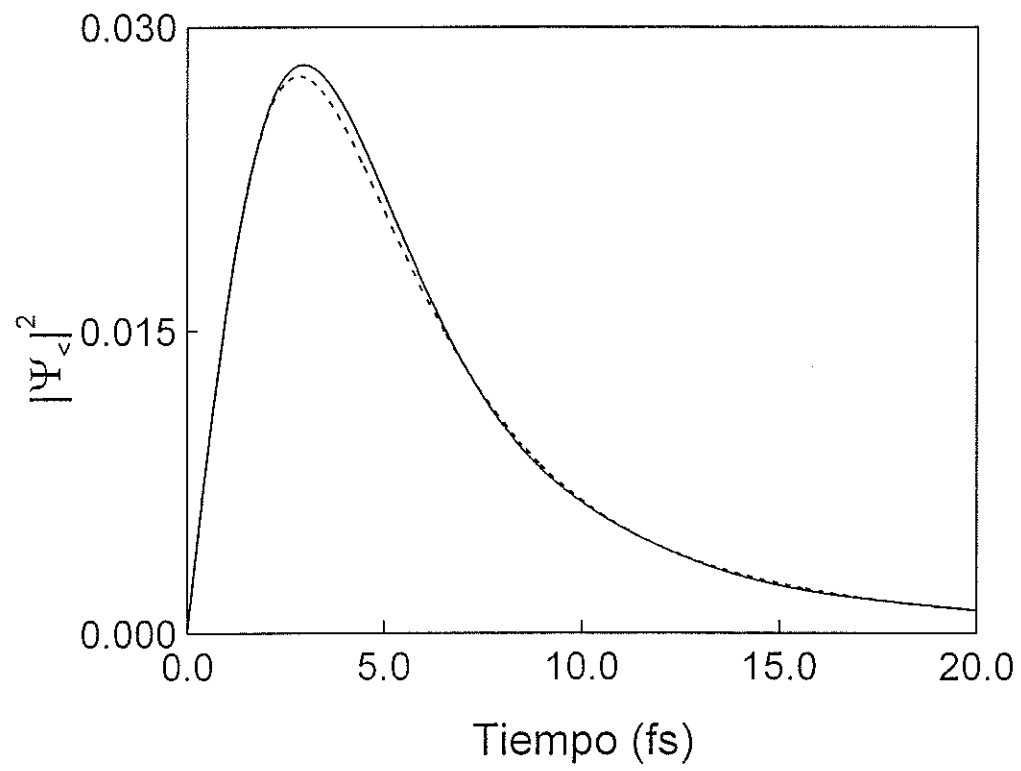


Figura 8: Evolución temporal de $|\Psi_{<}|^2$ (línea continua) comparada con $|\Psi_p|^2$ (línea discontinua) para un valor fijo de la posición, $x = 8.0$ nm.

En virtud de la confiabilidad de la fórmula del pulso transitorio, ésta puede ser utilizada para investigar las escalas de tiempo de arribo de dicha estructura. El valor máximo de $|\Psi_{<}|^2$ respecto al tiempo, para un valor fijo de la posición x_f , se obtiene derivando la ecuación (37). A partir de $(\partial/\partial t)|\Psi_{<}|^2 = 0$, se obtiene el tiempo crítico, t_m , dado por

$$t_m = \frac{\tau}{\sqrt{3}}, \quad (38)$$

donde τ es el tiempo de Büttiker-Landauer (Büttiker y Landauer, 1982) definido como $\tau = x_f/v_m$.

La escala de tiempo dada por la ecuación (38) es idéntica al tiempo de arribo propuesto por Muga y Büttiker (2000). Sin embargo, como demostraremos, el tiempo de arribo del máximo del pulso transitorio esta caracterizado por una escala de tiempo distinta. Es claro que el par (x_f, t_m) nos dará el valor máximo de la evolución temporal de $|\Psi_{<}|^2$ para la posición fija x_f ; sin embargo, como veremos enseguida el par (x_f, t_m) no corresponde a un máximo cuando la densidad de probabilidad se analiza como función de la posición a un tiempo fijo.

De $(\partial/\partial x)|\Psi_{<}|^2 = 0$, a un tiempo $t = t_f$, se obtiene que el máximo del pulso transitorio está dado por

$$x_m = v_{\chi_0} t_f. \quad (39)$$

En el caso particular en que $t_f = t_m$, el máximo del pulso x_m se encuentra retardado con respecto a x_f , esto es $x_m = 3^{-1/2}x_f$. En la figura 9 se muestra el comportamiento de los puntos x_f y x_m . Allí se ilustran gráficas de $|\Psi_p|^2$ a dos tiempos diferentes. La curva con el círculo blanco corresponde al tiempo fijo $3^{-1/2}\tau$ y la otra

corresponde a un tiempo (mayor) τ . En virtud de que $3^{-1/2}\tau$ maximiza a $|\Psi_p|^2$ en x_f el círculo blanco representa dicho máximo. Nótese que no coincide con el máximo del pulso.

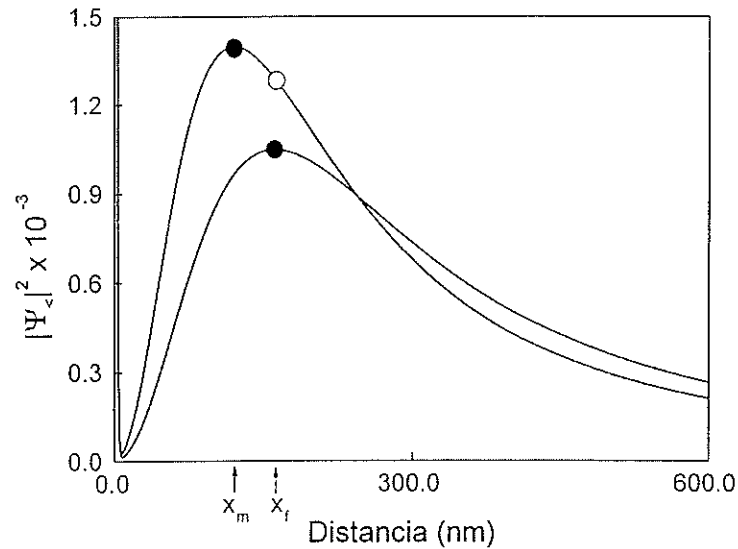


Figura 9: Evolución espacial de la densidad de probabilidad donde se muestra el comportamiento del máximo. La curva con el punto blanco corresponde al tiempo fijo $3^{-1/2}\tau$, y la otra a un tiempo mayor τ .

De nuestro análisis se desprende que la escala de tiempo $3^{-1/2}\tau$ corresponde al paso de un punto de la parte frontal del pulso (círculo blanco) a través de la posición fija x_f , mientras que el arribo del máximo del pulso ocurre a un tiempo mayor, que resulta ser exactamente el tiempo de Büttiker-Landauer. Además podemos observar que cuando el máximo del pulso (círculo negro) llega a la posición x_f (al tiempo τ), su altura se encuentra disminuida con respecto a la del círculo blanco (asociado a la

parte frontal del pulso al tiempo $3^{-1/2}\tau$). El resultado anterior puede demostrarse en general utilizando una interesante propiedad de escalamiento que posee la ecuación (37), la cual se presenta detalladamente en el estudio de Villavicencio, *et al.* (2002).

El análisis anterior ilustra claramente que al estudiar la densidad de probabilidad a t fijo ó a x fija, nos conduce a escalas de tiempo diferentes. Este es el origen de la discrepancia entre nuestros resultados y los obtenidos por Muga y Büttiker, quienes sólo estudiaron la evolución temporal.

Lo más interesante de nuestros resultados, es que el tiempo de arribo este dado exactamente por el tiempo de Büttiker-Landauer, considerado tradicionalmente como una de las posibles escalas de tiempo de tunelaje. Pero más sorprendente aún es el hecho de que el pulso transitorio no es el resultado de un proceso de tunelaje. Lo cual significa que en este problema la escala de tiempo de “tunelaje” de Büttiker-Landauer esta asociada a un proceso de *no-tunelaje*. El que esté asociado a un proceso de no-tunelaje se debe a que el pulso está principalmente compuesto por frecuencias por encima de la frecuencia de corte ω_V (frecuencias de no-tunelaje). Aunque el estudio del espectro de frecuencias fue realizado por Muga y Büttiker (2000), por completez y con fines ilustrativos presentaremos un espectrograma de la solución para un valor fijo de la posición en la vecindad del pulso transitorio. Ver figura 10.

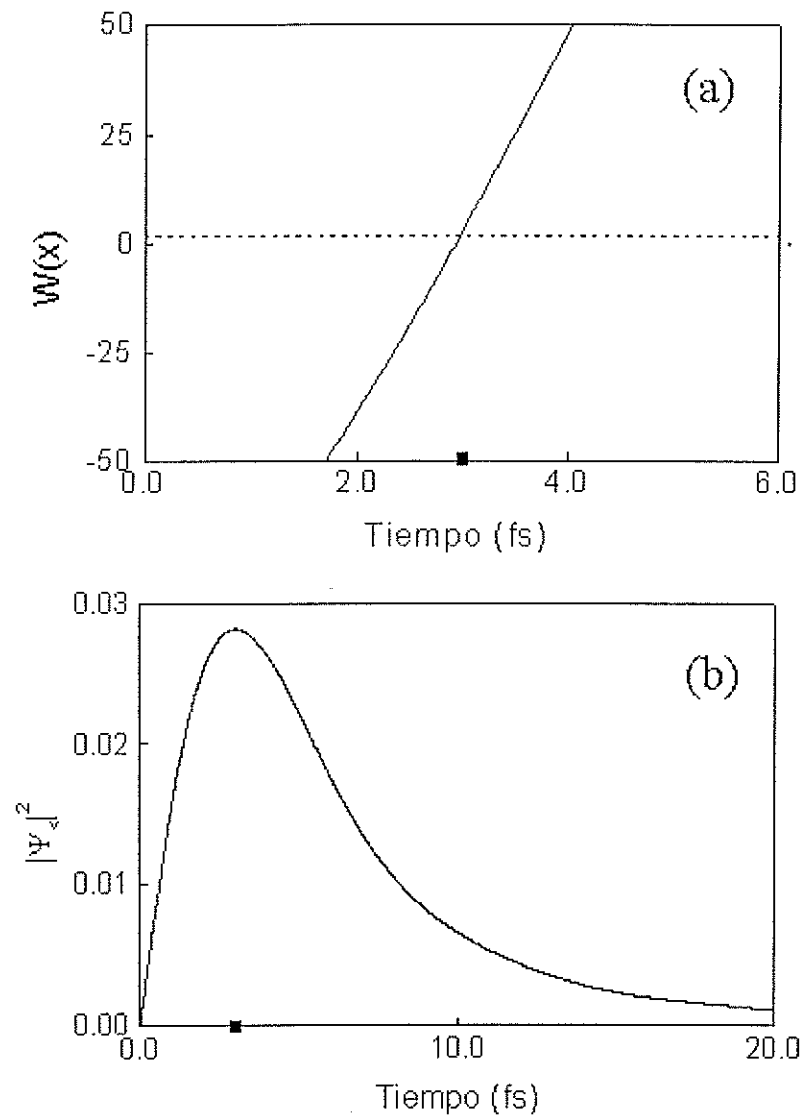


Figura 10: (a) Espectrograma de la solución para un valor fijo de la posición, $x = 8.0$ nm, donde se observa que el proceso es dominado por frecuencias por encima a la frecuencia de corte, ω_V . (b) Se muestra la evolución temporal de la densidad de probabilidad para la misma posición.

IV CONCLUSIONES

Con base en una solución analítica exacta de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo con la condición inicial de una fuente puntual, se investigó la evolución temporal y espacial de la densidad de probabilidad en un potencial escalón de intensidad V_0 .

Se encontró que para una fuente con energía inicial E_0 menor que la altura del potencial escalón V_0 , el comportamiento dinámico está caracterizado por dos regímenes claramente identificables. El primero ocurre dentro de un intervalo finito $0 < x < 2x_p$, donde x_p es la longitud de penetración de la onda estacionaria. En este régimen la densidad de probabilidad exhibe una serie de fluctuaciones alrededor de la densidad de probabilidad estacionaria antes de alcanzar su límite asintótico. Nuestro estudio revela claramente que no existe el frente monocromático de Stevens, pues en este régimen la solución fluctúa sin propagarse. El segundo régimen le hemos llamado “régimen del pulso transitorio” en virtud de que se caracteriza por el nacimiento y propagación de un pulso en la región $x > 2x_p$. Aunque ciertamente la estructura se propaga con la velocidad de grupo v_{x_0} , es preciso aclarar que esta tampoco corresponde al frente monocromático de Stevens, debido a que dicha estructura no está asociada a un proceso de tunelaje, tal como lo revela el estudio del contenido de frecuencias del pulso.

De la solución formal se obtuvo una fórmula simple para describir en forma precisa la dinámica del pulso transitorio. Se demostró que el tiempo de arribo del máximo del pulso transitorio a una posición dada por x_f es simplemente el tiempo de Büttiker-Landauer, τ , y no $3^{-1/2}\tau$ como lo afirman Muga y Büttiker (2000). Se demostró

también que, aunque $3^{-1/2}\tau$ corresponde al máximo del *pulso transitorio* cuando se analiza como función del tiempo, este corresponde a la llegada de la parte frontal del pulso, mas no el máximo.

Resulta verdaderamente sorprendente que el tiempo de Büttiker-Landauer, τ , tradicionalmente considerado como una de las posibles escalas de tiempo de tunelaje, esté asociado en este modelo a un proceso de no-tunelaje.

LITERATURA CITADA

- Abramowitz, M., I. Stegun. 1968. *Handbook of mathematical functions*. Editorial Dover. págs. 297, 1027.
- Brillouin, L. 1960. *Wave Propagation and Group Velocity*. Academic Press, New York.
- Brouard, S. y J. G. Muga. 1996. *Transient and asymptotic effects in tunneling*. Phys. Rev. A. **54**: 3055-3066
- Büttiker, M. y R. Landauer. 1982. *Traversal time for tunneling*. Phys. Rev. Lett. **82**: 1739-1742.
- Büttiker, M. y H. Thomas. 1998. *Front propagation in evanescent media*. Ann. Phys. **7**, 7-8: 602-617.
- Büttiker, M., H. Thomas. 1998. *Front propagation in evanescent media*. Superlattices Microstruc. **23**, 781: 1-18.
- Cohen, L. 1995. *Time-Frequency analysis*. Prentice Hall, New Jersey.
- Collins, S., D. Lowe y J. R. Barker. 1987. *The quantum mechanical tunneling time problem revisited*. J. Phys. C **20**: 6213-6232.
- Faddeyeva, V. N. y N. M. Terent'ev. 1961. *Tables of probability integral for complex argument*. Editorial Pergamon.
- García-Calderón, G. y A. Rubio. 1997. *Transient effects and delay time in the dynamics of resonant tunneling*. Phys. Rev. A. **55**: 3361-3370.
- García-Calderón, G., A. Rubio y J. Villavicencio. 1999. *Low-energy relativistic effects*

- and nonlocality in time-dependent tunneling.* Phys. Rev. A **59**: 1758-1761.
- García-Calderón, G. y J. Villavicencio. 2001. *Time dependence of the probability density in the transient regime foer tunneling.* Phys. Rev. A **64**: 012107.
- García-Calderón, G. y J. Villavicencio. 2002. *Delay time and tunneling transient phenomena.* Aceptado en Phys. Rev. A.
- García-Calderón, G., J. Villavicencio, F. Delgado y J. G. Muga. 2002. *Time scale of forerunners in quantum tunneling.* 2002. ArXiv: quant-ph/0206020.
- Hartman, T. E. 1962. *Tunneling of a wavepacket.* J. Appl. Phys. **33**: 3427-3433.
- Jauho, A. P. y M. Jonson. 1989. *Tunneling times in heterostructures.* Superlattices Microstruc. **6**: 303-307.
- Moretti, P. 1992. *On the problem of the quantum mechanical tunneling.* Physica Scripta. **45**: 18-21.
- Moshinsky, M. 1952. *Diffraction in time.* Phys. Rev. **88**: 625-631.
- Moshinsky, M. 1976. *Diffraction in time and the time-energy uncertainty relation.* Am. J. Phys. **44** (11): 1037-1042.
- Muga, J. G. y M. Büttiker. 2000. *Time dependence of evanescent quantum waves.* Phys. Rev. A. **62**: 023808.
- Romo, R. 2002. *Buildup dynamics of transmission resonances in superlattices.* Aceptado en Phys. Rev. B.
- Romo, R. y J. Villavicencio. 1999. *Dynamical description of the buildup process in resonant tunneling: evidence of exponential and non-exponential contributions.* Phys. Rev. B Rapid Commun. **60**: R2142-R2145.
- Romo, R. y J. Villavicencio. 2001. *Role of the buildup oscillations on the speed of*

- resonant tunneling diodes*. Appl. Phys. Lett. **78** (12): 1769-1771.
- Romo, R., J. Villavicencio y G. García-Calderón. 2002. *Transient tunneling effects of resonance doublets in triple barrier systems*. Phys. Rev. B **66** (12): 033118.
- Stevens, K. W. H. 1983. *A one dimensional barrier and time-dependent tunneling*. J. Phys. C: Solid State Phys. **16**: 3649-3661.
- Villavicencio, J. 2000. *Exact relativistic time evolution for a step potential barrier*. J. Phys. A: Math. Gen. **33**: 6061-6071.
- Villavicencio, J. y R. Romo. 2000. *Dynamical analysis of the buildup process near resonance*. Appl. Phys. Lett. **77** (3): 379-381.
- Villavicencio, J., R. Romo y S. Sosa y Silva. 2002. *Quantum wave evolution in a step potential barrier*. Aceptado en Phys. Rev. A.
- Weis, J. y O. Weis. 1999. *Misinterpretation yields supervelocities during transmission of wavepackets through a barrier*. Eur. Phys. J. B **12**: 135-146.

APÉNDICE A: La función de Moshinsky

La función de Moshinsky surge como la solución de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo para una partícula libre

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) \quad (40)$$

con la condición inicial de obturador de onda plana (Moshinsky, 1952):

$$\Psi(x, t = 0) = \begin{cases} e^{ik_0 x} ; & x \leq 0 \\ 0 ; & x > 0. \end{cases} \quad (41)$$

A continuación utilizaremos el método de transformada de Laplace para resolver la ecuación (40), el cual nos conduce a la siguiente ecuación diferencial:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \bar{\Psi}(x, s) + i\beta s \bar{\Psi}(x, s) = i\beta \Psi(x, t = 0) ; \beta = 2m/\hbar, \quad (42)$$

donde $\bar{\Psi}(x, s)$ es la transformada de Laplace de $\Psi(x, t)$.

Al sustituir la condición inicial dada por la ecuación (41) en la ecuación (42), obtenemos el siguiente sistema de ecuaciones diferenciales para las regiones I ($x \leq 0$) y II ($x > 0$):

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \bar{\Psi}(x, s) + i\beta s \bar{\Psi}(x, s) = 0 ; x > 0 \quad (43)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \bar{\Psi}(x, s) + i\beta s \bar{\Psi}(x, s) = i\beta \exp(ikx) ; x \leq 0 \quad (44)$$

La solución físicamente aceptable en la región II. ecuación (43), es

$$\bar{\Psi}^+(x, s) = c^+ \exp\left(-ix\sqrt{\frac{2mi}{\hbar}s}\right); x > 0. \quad (45)$$

En la región I ($x \leq 0$), la solución de la ecuación (44) está dada por

$$\bar{\Psi}^-(x, s) = c^- \exp\left(-ix\sqrt{\frac{2mi}{\hbar}s}\right) + \frac{2i}{\left(2is - \frac{\hbar}{m}k^2\right)} \exp(ikx); x \leq 0. \quad (46)$$

Para obtener la solución en la región $x > 0$ a $t > 0$, es necesario determinar la constante c^- que aparece en la ecuación (46). Esto se logra aplicando las condiciones de acoplamiento en $x = 0$ dadas por,

$$\bar{\Psi}^+(0, s) = \bar{\Psi}^-(0, s); \quad (47)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \bar{\Psi}^+(0, s) = \frac{\partial}{\partial x} \bar{\Psi}^-(0, s). \quad (48)$$

Una vez realizada esta tarea, podemos escribir

$$\bar{\Psi}^+(x, s) = \frac{i\beta}{2\sqrt{i\beta s}} \left(\frac{1}{\sqrt{i\beta s} - k} \right) \exp\left(ix\sqrt{i\beta s}\right). \quad (49)$$

Calculando la transformada de Laplace inversa de la expresión anterior, definida como:

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} \bar{\Psi}^+(x, s) \exp(st) ds, \quad (50)$$

obtenemos la ecuación de onda transmitida, dada por

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} \frac{i\beta \exp\left(ix\sqrt{i\beta s}\right) \exp(st) ds}{2\sqrt{i\beta s} (\sqrt{i\beta s} - k)} = M(x, k, t). \quad (51)$$

La función $M(x, k, t)$ es conocida en la literatura como la función de Moshinsky.

En términos de la función de error complementaria, las funciones de Moshinsky poseen la siguiente representación:

$$M(x, k, t) = \frac{1}{2} \exp \left[i \left(kx - \frac{\hbar}{2m} k^2 t \right) \right] \operatorname{erfc} \left\{ \frac{x - \frac{\hbar}{m} kt}{\sqrt{\frac{2i\hbar t}{m}}} \right\}. \quad (52)$$

A partir de la relación entre la función de error complementaria y la función de error compleja, $w(z)$, (Abramowitz, 1968) dada por:

$$w(z) = \exp(-z^2) \operatorname{erfc}(-iz) \quad (53)$$

podemos escribir $M(x, k, t)$ (García-Calderón y Rubio, 1997) como:

$$M(x, k, t) = \frac{1}{2} \exp \left(\frac{im}{2\hbar t} x^2 \right) w(iz) \quad (54)$$

donde $z = \frac{x - \frac{\hbar}{m} kt}{\sqrt{\frac{2i\hbar t}{m}}}$.

APÉNDICE B: Espectrogramas.

Con la finalidad de estudiar las frecuencias que dominan a la solución en la región interna del potencial, se han realizado una serie de espectrogramas de la misma. En el caso de la solución para energía innicial mayor que la latura del escalón, $\Psi_{>}(x, t)$, se prevee que ésta será dominada por la frecuencia asociada a la onda incidente, $\omega_0 = (E_0/\hbar)$. Sin embargo, por completez, en el desarrollo necesario para la evaluación de los espectrogramas se consideran ambos casos.

Consideremos la expresión:

$$\Psi(x, t) = [M(y_q) + M(y_{-q})] \exp(-iVt) \quad (55)$$

donde el argumento y_q está dada por la ecuación (19). Para obtener el espectrograma de la solución es necesario evaluar la función $W(x)$ (Cohen, 1995), definida como:

$$W(x) = -\text{Im} \left[\frac{1}{\Psi} \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} \right]. \quad (56)$$

Por lo tanto debemos calcular la derivada temporal de la ecuación (55) dada por

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -iV\Psi(x, t) + \exp(-iVt) [M'(y_q) + M'(y_{-q})] \quad (57)$$

donde $M'(y_q) = \partial M(y_q)/\partial t$. El problema se reduce a obtener la derivada de la función de Moshinsky como función del tiempo. Para ésto consideremos la representación de ésta en términos de la función de error compleja $w(z)$ dada por la ecuación (18). Utilizando la expresión para la derivada de $w(z)$ (Abramowitz, 1968)

$$w'(z) = -2zw(z) + \frac{2i}{\sqrt{\pi}}. \quad (58)$$

Tenemos que la derivada temporal de $M(y_q)$ está dada a partir de:

$$M'(y_q) = \frac{1}{2} \exp\left(\frac{im}{2\hbar t} x^2\right) w'(z) \frac{dz}{dt} - \frac{imx^2}{2\hbar t^2} M(y_q). \quad (59)$$

Sustituyendo en la expresión anterior el valor de la derivada de $w(z)$ dado por la ecuación (58), así como

$$\frac{dz}{dt} = -\frac{i}{2t} \sqrt{\frac{m}{2i\hbar t}} \left(x + \frac{\hbar}{m} qt \right), \quad (60)$$

obtenemos que:

$$M'(y_q) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar t}} \left(\frac{x}{t} - \frac{\hbar}{m} q \right) \exp\left(\frac{imx^2}{2\hbar t}\right) - M(y_q) \left(\frac{ix}{2t} q - \frac{\hbar}{2mi} q^2 \right). \quad (61)$$

En la expresión anterior es posible identificar el Propagador de la partícula libre, $U_0(x, t)$, dado por

$$U_0(x, t) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar t}} \exp\left(\frac{im}{2\hbar t} x^2\right), \quad (62)$$

por lo que finalmente podemos escribir:

$$M'(y_q) = \frac{1}{2} \left(\frac{x}{t} - \frac{\hbar}{m} q \right) U_0(x, t) - M(y_q) \left(\frac{ix}{2t} q - \frac{\hbar}{2mi} q^2 \right). \quad (63)$$

Los valores obtenidos en la expresión anterior para $q = \pm k_0, \pm i\chi_0$ nos permitirán calcular numéricamente $\partial\Psi/\partial t$, ecuación (57), y obtener así el espectrograma $W(x)$ dado por la ecuación (56).