

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE BAJA CALIFORNIA
FACULTAD DE CIENCIAS



MAESTRÍA Y DOCTORADO EN CIENCIAS E INGENIERÍA
ÁREA DE NANOTECNOLOGÍA

FORMACIÓN, DECAIMIENTO Y PROPAGACIÓN
DE ESTADOS CUASI-ESTACIONARIOS
POR DISPERSIÓN DE PAQUETES DE ONDA

TESIS

que para cubrir los requisitos necesarios para obtener el grado de

DOCTOR EN CIENCIAS

Presenta:

DANIEL EVERARDO AMADOR BARTOLINI

Ensenada, Baja California, México, junio de 2021

TESIS DE DOCTORADO PRESENTADA POR

Daniel Everardo Amador Bartolini



Dr. Jorge Alberto Villavicencio Aguilar

Presidente del Comité



Dr. Roberto Romo Martínez

Co-Director del Comité



Dr. Alberto Hernández Maldonado

Miembro del Comité



Dr. Ernesto Cota Araiza

Miembro del Comité



Dr. Jesús Alberto Maytorena Córdova


Miembro del Comité

Junio de 2021

RESUMEN de la tesis de **DANIEL EVERARDO AMADOR BARTOLINI**, presentada como requisito parcial para la obtención del grado de DOCTOR EN CIENCIAS. Ensenada, Baja California, junio de 2021.

**FORMACIÓN, DECAIMIENTO Y PROPAGACIÓN
DE ESTADOS CUASI-ESTACIONARIOS
POR DISPERSIÓN DE PAQUETES DE ONDA**

Resumen aprobado por:



Dr. Jorge Alberto Villavicencio Aguilar
Presidente del Comité



Dr. Roberto Romo Martínez
Co-Director del Comité

Se obtiene una solución analítica exacta de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo para un paquete de ondas modulado exponencialmente incidiendo en un potencial unidimensional arbitrario. La modulación de la anchura del paquete, controlada por un solo parámetro Δ , permite explorar los casos de paquetes incidentes de ondas espacialmente localizados y paquetes incidentes de ondas planas cortadas. A partir de la solución formal, que se obtiene como un desarrollo en términos los estados resonantes del sistema y las funciones Moshinsky, obtenemos una fórmula simple y confiable que describe con precisión la densidad de probabilidad tanto de la formación como del decaimiento del estado cuasi-estacionario dentro de una estructura resonante. Dicha fórmula consiste en dos términos exponenciales regidos respectivamente por el ancho de resonancia Γ_1 de la resonancia más baja del sistema y el ancho $\bar{\Gamma}$ de un estado “virtual” inducido por el paquete de ondas incidente. Durante el proceso de construcción del estado cuasi-estacionario, se demuestra que ambas contribuciones de Γ_1 y $\bar{\Gamma}$ resultan esenciales en la descripción del comportamiento dinámico, y se deriva una fórmula analítica simple en términos de Γ_1 y $\bar{\Gamma}$ para la densidad de probabilidad durante esta fase transitoria. En el proceso de decaimiento, por otro lado, encontramos que hay dos regímenes caracterizados por un valor crítico Δ_c del ancho espectral del paquete, de tal manera que para $\Delta > \Delta_c$ el decaimiento exponencial está gobernado por Γ_1 , mientras que para $\Delta < \Delta_c$ el decaimiento exponencial se rige por el ancho del estado virtual, $\bar{\Gamma}$. En el régimen asintótico de tiempos largos, aparecen comportamientos no-exponenciales en la densidad de probabilidad. Se presenta un análisis de la transición del régimen exponencial al no-exponencial y se demuestra que la parte no-exponencial obedece a una ley de potencias que va como $t^{-3/2}$, que es consistente con la ley de potencias que gobierna el decaimiento no-exponencial en sistemas tridimensionales.

Utilizando soluciones de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo, tanto para ondas planas cortadas incidentes como para paquetes Lorentzianos, se investigó la existencia de propagación de frentes de onda en la región interna de sistemas periódicos finitos de longitud $(N - 1)w$ y periodo espacial w . Para ello se realizó un estudio sistemático variando N y se mostró que no hay propagación para sistemas cortos de N 's pequeñas, mientras que para N 's grandes del orden de decenas, existen frentes

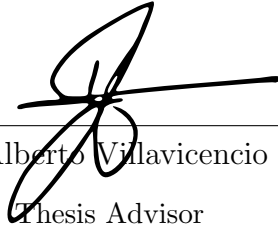
de onda propagándose claramente de un extremo a otro del sistema. La transición entre ambos regímenes no es abrupta como para establecer un valor crítico de N , pero nuestros resultados permiten afirmar que desde aproximadamente $N = 6$ u 8 periodos en adelante se puede considerar que la evolución es propagante. En una segunda fase, se estudiaron los tiempos de arribo de los frentes de onda al extremo derecho del sistema y se compararon con las predicciones existentes en la literatura de los tiempos de tunelaje en superredes finitas basadas en la noción de tiempo fase. Se encontró que dichas predicciones fallan a bajas energías pero funcionan muy bien de la tercera minibanda en adelante.

Palabras Clave: Fenómenos transitorios, paquetes lorentzianos

ABSTRACT of the thesis presented by **DANIEL EVERARDO AMADOR BARTOLINI**, as a partial requirement to obtain the DOCTOR IN SCIENCES degree. Ensenada, Baja California, june 2021.

BUILDUP, DECAY AND PROPAGATION OF QUASI-STATIONARY STATES BY WAVE PACKET SCATTERING

Approved by:



Dr. Jorge Alberto Villavicencio Aguilar
Thesis Advisor



Dr. Roberto Romo Martínez
Thesis Advisor

We derive an exact analytic solution of time-dependent Schrödinger's equation for cutoff quantum waves with exponential modulation to explore the dynamics along the internal region of a one-dimensional potential of arbitrary shape. The modulation of the wave packet is controlled by a single parameter given by its momentum distribution width, Δ , which allows to explore on the same footing the transient features of both cutoff spatially localized wave packets and extended plane waves. From the formal solution, we derive a simple and reliable formula that accurately describes both the buildup and decay of the probability density inside a resonant structure. The buildup-decay formula involves two exponential terms governed respectively by the resonance width Γ_1 of the lowest resonance of the system and the width $\bar{\Gamma}$ of a "virtual" state induced by the incident wave packet. During the buildup process, we demonstrate that the contributions of both Γ_1 and $\bar{\Gamma}$ become essential. In the decay process, on the other hand, we find that there are two regimes characterized by a critical value Δ_c , such that for $\Delta > \Delta_c$ the exponential decay is governed by Γ_1 , while for $\Delta < \Delta_c$ the exponential decay is governed by $\bar{\Gamma}$. We also derive an analytic formula for a relevant timescale for the buildup-decay process, which depends in a simple fashion on the decay rates Γ_1 and $\bar{\Gamma}$. Deviations from the exponential decay law at long times are also discussed. We demonstrate that the probability density at long times exhibits a transition from exponential to a non-exponential dominated by a $t^{-3/2}$ time-dependence, in agreement with the decaying behavior observed in tridimensional systems.

Using time-dependent solutions of the Schrödinger equation, both for incident cutoff plane waves and for lorentzian wavepackets, the existence of wave front propagation in the internal region was investigated in finite periodic systems of length $(N - 1)w$ and spatial period w . A systematic study was carried out by varying N and we found that there is no propagation for short systems of small N 's, while for systems with N of the order of tens, there are clearly propagating wavefronts traveling from one end of the system to the other. The transition between both regimenes is not abrupt as to establish a critical value of N , but our results allow us to affirm that from about $N = 6$

or 8 periods onwards that evolution can be considered as propagating. In a second phase of our study, the times of arrival of the wavefronts to the right hand side of the system were studied and compared with the existing predictions of the tunneling times in finite superlattices based on the notion of phase time. These predictions were found to fail at low energies but they work quite well from the third miniband onwards.

Keywords: Transient phenomena, lorentzian wavepackets, buildup, decay, nonexponential

Dedicada

A mis hijos Daniel y
Korban, a mis padres y
hermanos, mis cuñad@s y
sobrin@s, y a mi novia,
que juntos me regalan
la experiencia de vivir en
una gran familia.

Agradecimientos

A mis dos hijos, por ser mi fuente de motivación diaria, esa que no se puede explicar con palabras.

A mis padres y hermanos por ser mi pilar fundamental y haberme apoyado incondicionalmente, pese a las adversidades e inconvenientes que se presentaron.

A mi novia y amiga que ha sabido apoyarme, darme calma y confianza.

Al personal del departamento de la Facultad de Ciencias de la Universidad Autónoma de Baja California por el apoyo y las facilidades brindadas durante mi estancia.

A la Facultad de Ciencias de la Ingeniería y Tecnología por haberme dado la oportunidad y los medios que me permitieron llevar a cabo este plan y objetivo de vida.

De igual forma, agradezco a los miembros de mi comité de tesis, el Dr. Ernesto Cota Araiza, el Dr. Jesús Alberto Maytorena Córdova y el Dr. Alberto Hernández Maldonado, que gracias a sus consejos y observaciones en el desarrollo de mis avances hoy puedo culminar este trabajo.

De manera muy especial a mis tutores de tesis, el Dr. Jorge Alberto Villavicencio Aguilar y el Dr. Roberto Romo Martínez, por su comprensión y apoyo en momentos difíciles que se presentaron a lo largo de este camino, por haberme guiado, no solo en

la elaboración de este trabajo de titulación, sino a lo largo de mi formación académica para poder desarrollarme.

A mis amigos y compañeros de trabajo que me han visto crecer como persona, y gracias a su apoyo y confianza hoy puedo sentirme dichoso y contento.

Contenido

	Página
Resumen en español	i
Resumen en inglés	iii
Dedicatoria	v
Agradecimientos	vi
Contenido	viii
Lista de Figuras	x
I. INTRODUCCIÓN	1
I.1 Dinámica de estados cuasi-estacionarios en estructuras resonantes . . .	1
I.2 El problema de la propagación en la región interna.	6
I.3 Organización de la tesis	8
II. MARCO TEÓRICO	9
II.1 Solución dinámica para paquetes lorentzianos	9
II.2 Caso límite: la onda plana truncada	18
III. Dinámica de la formación y decaimiento de un estado cuasi-estacionario	19
III.1 Dinámica de paquetes Lorentzianos en estructuras resonantes	19
III.1.1 Comportamiento de la condición inicial en los espacios de configuración y de momentos	20
III.1.2 Formación y decaimiento de un estado cuasi-estacionario	22
III.1.3 Decaimiento no-exponencial	31
IV. Propagación en la región interna	37
IV.1 Antecedentes	37
IV.2 Régimen de evolución extendida	39
IV.3 Régimen de evolución propagante	44
IV.4 Transición del régimen de evolución extendida al régimen de propagación	53
V. Tiempos de travesía en sistemas periódicos finitos	64
V.1 Tiempo de tunelaje de la superred	64
V.2 Tiempos de travesía	69
VI. CONCLUSIONES	76
REFERENCIAS	80

Contenido (continuación)

	Página
A. Soluciones analíticas para el obturador cuántico reflejante	83
A.1 Soluciones formales.	83
A.2 Aproximación de una resonancia.	84
B. Tiempo Fase	86
B.1 Potencial delta de Dirac	87
B.2 Cadena periódica de N deltas de Dirac	88

Lista de Figuras

Figura		Página
1	Modelo del obturador cuántico para onda plana en el caso libre	3
2	Modelo obturador cuántico para un sistema con un potencial arbitrario $V(x)$	4
3	Paquete Lorentziano incidiendo sobre un potencial arbitrario	10
4	Contorno de integración en el plano complejo para evaluar la integral de los polos de $G^+(x, x'; z)$	14
5	Densidad de probabilidad del estado inicial en los espacios de la posición x y del número de onda k	21
6	Evolución temporal de la densidad de probabilidad en el centro de una estructura de doble delta de Dirac para un paquete Lorentziano incidente usando 50 polos en la solución usando diferentes valores del parámetro Δ	23
7	Evolución temporal del logaritmo natural de la densidad de probabilidad en el centro de una estructura de doble delta de Dirac para un paquete Lorentziano incidente usando 50 polos en la solución usando diferentes valores del parámetro Δ	24
8	Comparación de la evolución temporal de $\ln \rho$ para los mismos valores de Δ utilizando la solución formal (31) con la fórmula aproximada (45)	27
9	Razón $\gamma = \bar{\Gamma}/\Gamma_1$ como función de la anchura Δ	29
10	Comparación del cálculo exacto de $\ln \rho$ utilizando la ecuación (31) con los aproximados obtenidos de la ecuación (47) y de la ecuación (48)	30
11	Tiempo de construcción t_b del estado cuasi-estacionario y su dependencia con Δ	32
12	Comparación de los valores de $\ln \rho$ en la región no-exponencial utilizando la solución exacta (31) y la solución aproximada no-exponencial (57)	34
13	Condición inicial de onda plana cortada incidente en un potencial doble delta de Dirac	39
14	Comportamiento de la densidad de probabilidad a lo largo de la región interna para un sistema de doble delta de Dirac a diferentes tiempos y energía de incidencia en la primera resonancia.	40

Lista de Figuras (continuación)

Figura		Página
15	Densidad de probabilidad a lo largo de la región interna para un sistema de triple delta de Dirac a diferentes tiempos y energía de incidencia en la primera resonancia.	41
16	Comportamiento de la densidad de probabilidad tanto en la región interna como en la externa para un sistema de doble delta de Dirac a diferentes tiempos y energía de incidencia por debajo de la primera resonancia.	42
17	Coeficiente de transmisión para un sistema periódico de 50 deltas de Dirac a energías en un intervalo que incluye a las primeras tres minibandas. Los parámetros se indican en el texto	45
18	Densidad de probabilidad a lo largo de la región interna para un sistema de 50 deltas idénticas de Dirac a diferentes tiempos en el intervalo de 0 a τ_f para energías de incidencia en el centro y en la orilla izquierda de la tercera minibanda	46
19	Densidad de probabilidad a lo largo de la región interna para un sistema de 50 deltas idénticas de Dirac a diferentes tiempos en el intervalo de 0 a $2\tau_f$ para energías de incidencia en el centro y en la orilla izquierda de la tercera minibanda	48
20	Comparación de las posiciones instantáneas del máximo principal del frente de ondas con las de una partícula libre, $x = \hbar kt/m$, para incidencia en el centro de la tercera minibanda	49
21	Coeficiente de transmisión para energías alrededor de la primera minibanda para un sistema de $N = 50$ deltas de Dirac en un intervalo energías de incidencia alrededor de la primera minibanda	50
22	Densidad de probabilidad a lo largo de la región interna para un sistema de 50 deltas idénticas de Dirac a diferentes tiempos en el intervalo de 0 a $2\tau_f$ para energías de incidencia en el centro y en la orilla izquierda de la primera minibanda	50
23	Densidad de probabilidad a lo largo de la región interna para un sistema de 50 deltas idénticas de Dirac a diferentes tiempos en el intervalo de 0 a $4\tau_f$ para energías de incidencia en el centro y en la orilla izquierda de la primera minibanda	51

Lista de Figuras (continuación)

Figura		Página
24	Comparación de las posiciones instantáneas del máximo principal del frente de ondas con las de una partícula libre, $x = \hbar kt/m$, para incidencia en el centro de la primera minibanda	52
25	Evolución de la densidad de probabilidad interna usando la condición inicial de <i>onda plana cortada</i> en sistema simétrico de doble delta de Dirac a la energía de incidencia $E_0 = 0.0852$ eV para cuatro diferentes tiempos	53
26	Lo mismo que en la figura 25 para un sistema periódico de 4 deltas de Dirac	54
27	Lo mismo que en la figura 25 para un sistema periódico de 8 deltas de Dirac	55
28	Lo mismo que en la figura 25 para un sistema periódico de 12 deltas de Dirac	56
29	Lo mismo que en la figura 25 para un sistema periódico de 24 deltas de Dirac	57
30	Lo mismo que en la figura 25 para un sistema periódico de 48 deltas de Dirac. Se resalta la envolvente del frente de ondas propagándose en la región interna	57
31	Evolución de la densidad de probabilidad interna usando la condición inicial de <i>paquete Lorentziano</i> incidente en sistema simétrico de doble delta de Dirac a la energía de incidencia $E_0 = 0.0852$ eV para cuatro diferentes tiempos	59
32	Lo mismo que en la figura 31 para un sistema periódico de 8 deltas de Dirac	60
33	Lo mismo que en la figura 31 para un sistema periódico de 24 deltas de Dirac	60
34	Lo mismo que en la figura 31 para un sistema periódico de 48 deltas de Dirac	61
35	Mapa de contorno de la densidad de probabilidad para un sistema periódico de 50 deltas de Dirac con energía de incidencia en el centro de la primera minibanda utilizando una onda plana cortada	62

Lista de Figuras (continuación)

Figura		Página
36	Mapa de contorno de la densidad de probabilidad para un sistema periódico de 50 deltas de Dirac con energía de incidencia en el centro de la primera minibanda utilizando paquete Lorentziano de ancho espectral $\Delta = 0.01 \text{ \AA}^{-1}$	63
37	<i>Tiempo Fase</i> τ_2^{ph} , tiempo libre de arribo τ_f y coeficiente de transmisión $T(E)$ para un sistema de doble delta de Dirac	66
38	<i>Tiempo de tunelaje</i> τ_2^T , tiempo libre de arribo τ_f y coeficiente de transmisión $T(E)$ para un sistema de doble delta de Dirac. Se incluye para comparación el tiempo de tunelaje τ_1^T para una sola delta de Dirac . . .	68
39	Lo mismo que en la figura 38 para un sistema periódico de $N = 8$ deltas de Dirac	69
40	Mapa de contorno de la densidad de probabilidad dependiente del tiempo como función de la posición y del tiempo para una energía de incidencia en la resonancia central de la primera minibanda, $E_0 = \epsilon_4^{MB1} = 30.6 \text{ meV}$	71
41	Mapa de contorno de la densidad de probabilidad dependiente del tiempo como función de la posición y del tiempo para una energía de incidencia en la resonancia central de la segunda minibanda, $E_0 = \epsilon_4^{MB2} = 125.0 \text{ meV}$	73
42	Mapa de contorno de la densidad de probabilidad dependiente del tiempo como función de la posición y del tiempo para una energía de incidencia en la resonancia central de la tercera minibanda, $E_0 = \epsilon_4^{MB3} = 289.9 \text{ meV}$	74
43	Comparación del cálculo (estacionario) del tiempo de tunelaje en la superred τ_8^T con el cálculo dinámico del <i>tiempo de travesía</i> τ_8^D de un paquete Lorentziano en una superred periódica de $N = 8$ deltas de Dirac para tres energías de incidencia escogidas en el centro de las primeras tres minibandas	75
44	Potencial delta de Dirac	87
45	Potencial de una superred de N deltas de Dirac	88
46	Cálculo de tiempo fase para una superred para una potencial de una cadena periódica de N deltas de Dirac (código FORTRAN)	90

Capítulo I

INTRODUCCIÓN

En este trabajo de investigación se realiza un estudio dinámico de la formación, evolución, y decaimiento de estados cuasi-estacionarios en estructuras resonantes. Se trata de estados que se forman en el interior de una estructura cuántica como resultado de un proceso de dispersión, y que a diferencia de los estados ligados, tienen una duración finita ya que decaen por efecto túnel, de ahí el nombre de *cuasi-estacionarios*. En particular, nos enfocamos en dos problemas concretos. El primero tiene que ver con el estudio dinámico detallado de la evolución de un estado cuasi-estacionario en una estructura resonante simple de doble barrera, mediante una descripción analítica tanto de su construcción como de su fase de decaimiento. En la sección I.1 se plantea este problema y sus antecedentes. El segundo problema aborda el asunto de la *propagación* en la región interna de una estructura resonante. Es un estudio que se realiza de manera dinámica utilizando tanto ondas planas cortadas incidentes como paquetes de extensión finita. En la sección I.2 se hace el planteamiento del problema y se exponen sus antecedentes.

I.1 Dinámica de estados cuasi-estacionarios en estructuras resonantes

Los enfoques dependientes del tiempo en la descripción de sistemas cuánticos han sido de gran utilidad en la exploración de la física del transporte electrónico en estructuras semiconductoras unidimensionales. Particularmente, los sistemas resonantes doble barrera han sido ampliamente estudiados por sus potenciales aplicaciones en dispositivos

nanoelectrónicos, tales como los diodos de tunelaje resonantes (Tsu y Esaki, 1973). La mayoría de estos estudios dinámicos del *tunelaje resonante* han investigado la evolución temporal de los paquetes gaussianos (Collins *et al.*, 1987; Guo *et al.*, 1988; Støvneng y Hauge, 1991; Muga y Palao, 1998), y sus análisis se han basado en cálculos numéricos. La dispersión del paquete de ondas por una estructura resonante se caracteriza por un proceso de acumulación en el que un estado cuasi-estacionario se forma dentro del sistema, el cual es seguido por un proceso de decaimiento. La importancia de investigar las escalas de tiempo asociadas a los procesos de acumulación y decaimiento en el tunelaje resonante se ha enfatizado desde finales de la década de 1980, ya que ambas escalas tienen que ver con la velocidad de operación de los diodos de tunelaje resonante (Sollner *et al.*, 1984). Años antes de que los enfoques dependientes del tiempo fueran utilizados para describir los fenómenos de tunelaje resonante, algunos autores como Ricco y Azbel (1984) argumentaron que la escala de tiempo relevante que caracteriza a los procesos de acumulación y decaimiento en estos sistemas resonantes era el *tiempo de vida* del estado cuasi-estacionario, justificando con ello la frecuencia límite de operación de los dispositivos conocidos como diodos de tunelaje resonante. Sin embargo, Guo *et al.* (1988) utilizando paquetes de onda gaussianos de anchura fija, demostró que, dependiendo de los parámetros de las barreras, el tiempo de acumulación podría ser menor, igual o mayor que el *tiempo de vida*. Posteriormente, Støvneng y Hauge (1991) exploraron la formación y decaimiento de un estado cuasi-estacionario utilizando paquetes de onda gaussianos mediante un modelo de amarre-fuerte para explorar la acumulación electrónica y el decaimiento en una estructura resonante de doble barrera, con el interesante hallazgo de que el tiempo de acumulación está directamente relacionado con la anchura espacial del paquete de ondas gaussiano. Al variar la anchura del paquete de onda incidente, encontraron que el tiempo de acumulación depende linealmente de la dispersión espacial del paquete incidente. Sin embargo, ellos observaron también que

tal comportamiento deja de ser lineal para paquetes muy anchos porque la acumulación es interrumpida por el proceso de decaimiento. Es precisamente en este régimen de estados muy extendidos en donde enfoques alternativos que involucran la evolución de ondas planas cortadas (modelo de obturador cuántico) (Kleber, 1994; del Campo *et al.*, 2009), han demostrado ser herramientas útiles para explorar la dinámica en estructuras resonantes (García-Calderón, 2010). Estos enfoques están basados en el modelo de obturador cuántico (Moshinsky, 1952) para el caso de ondas plana libres, ver figura 1.

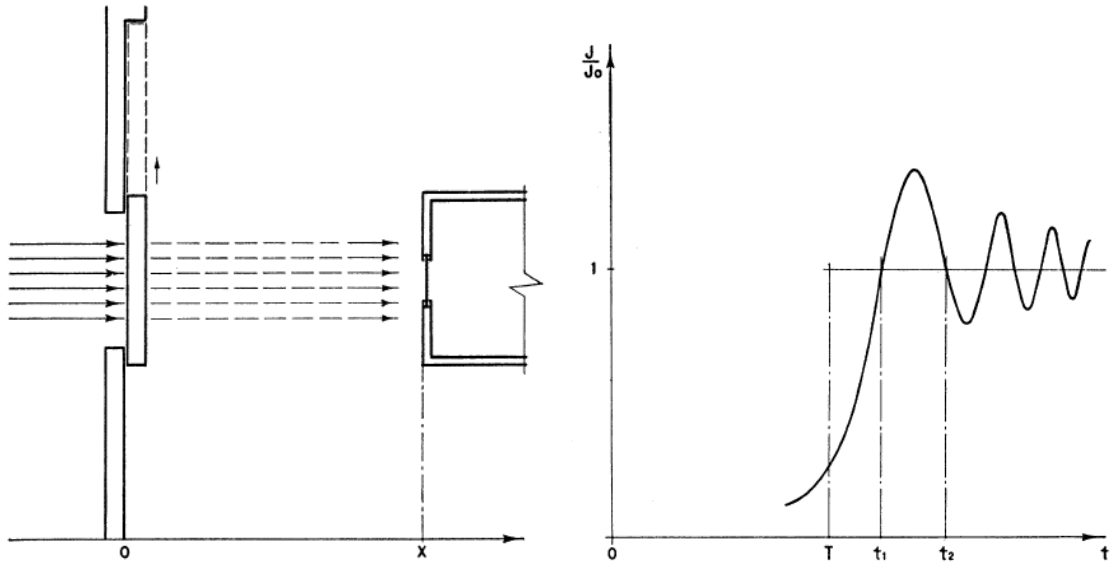


Figura 1. Modelo de obturador para el caso de propagación libre. Tomado de (Moshinsky, 1952).

El modelo de obturador se ocupa de la evolución temporal de ondas planas cortadas de momento k_0 , confinado en $t = 0$ a la izquierda de un obturador absorbente en $x = 0$. Una vez que se abre el obturador, la densidad de probabilidad asociada al paquete de ondas exhibe un patrón oscilatorio distintivo conocido como *difracción en el tiempo* (Moshinsky, 1952, 1976) en analogía con la bien conocida difracción óptica de la luz por un plano semi-infinito. El modelo de obturador cuántico fue generalizado por García-Calderón y Rubio (1997) para estudiar la evolución temporal de ondas planas truncadas

en potenciales de alcance finito en una dimensión, figura 2.

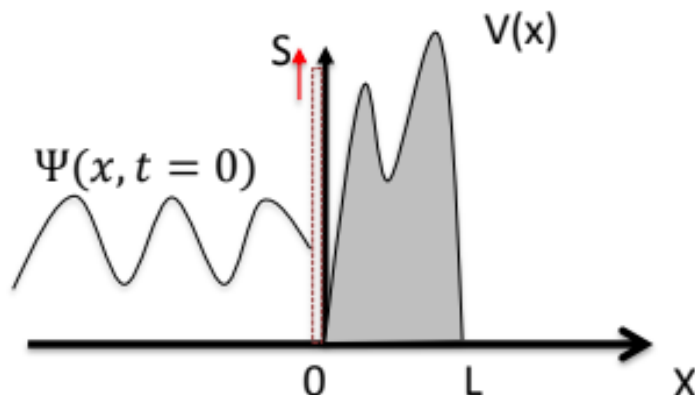


Figura 2. Modelo obturador cuántico para un sistema con un potencial arbitrario $V(x)$

Las soluciones obtenidas con este enfoque (García-Calderón, 2010) involucran desarrollos de la función de onda dependiente del tiempo en términos de cantidades importantes como los *estados resonantes*, los polos de la amplitud de transmisión, así como las funciones de Moshinsky (1952), las cuales están expresadas en términos de las funciones de error complementarias con argumentos complejos (Abramowitz y Stegun, 1964). Estos enfoques han permitido estudiar el tiempo de acumulación de carga en estructuras doble barreras (García-Calderón y Rubio, 1997; Romo y Villavicencio, 1999; Villavicencio y Romo, 2000; Delgado *et al.*, 2005), en donde se ha encontrado que la acumulación electrónica obedece a una ley de carga de capacitor caracterizado por una constante de tiempo de dos vidas medias (Romo y Villavicencio, 1999; Villavicencio y Romo, 2000) y también la escala de tiempo para la respuesta rápida de tunelaje en dispositivos resonantes (Romo y Villavicencio, 2001).

Paquetes de ondas gaussianas y de ondas planas han sido dos diferentes enfoques dinámicos mutuamente excluyentes. Mientras que este último es completamente analítico, el primero requiere cálculos numéricos en el que la visibilidad de las variables

relevantes del proceso se pierde convirtiendo la descripción en una “caja negra”. La idea de establecer un vínculo entre los enfoques ya sea con estados extendidos o localizados se debe al trabajo de Yamada *et al.* (2005), cuando una condición inicial de un paquete de ondas con una distribución de impulso Lorentziano se introduce en el espacio- k . Una característica atractiva de este enfoque es que permite establecer una conexión entre los paquetes de onda espacialmente localizados y los problemas del obturador cuántico de onda planas, simplemente variando un solo parámetro, el ancho del paquete incidente.

En el presente trabajo, se desarrolla una fórmula analítica para describir la dinámica de las funciones de onda electrónica a lo largo de la región interna de un rango finito potencial unidimensional al considerar una sola condición inicial que implica la dispersión de un paquete de ondas con una distribución Lorentziana de momentos en el espacio- k . Nuestro objetivo es construir un estado cuasi-estacionario a lo largo de la región interna del potencial a partir de un proceso de dispersión, para explorar dinámicamente tanto su construcción como su eventual decaimiento, todo bajo un marco teórico común. Explorando de una manera unificada la interacción entre la acumulación y los procesos de decaimiento en una estructura cuántica, podemos investigar de que manera estos procesos afectan a las escalas de tiempo de acumulación y de decaimiento en el sistema. El paquete de ondas inicial utilizado en este trabajo tiene una versatilidad interesante, pues además de describir estados espacialmente localizados, también permite describir, en el límite apropiado, estados espacialmente extendidos, tal como el caso de ondas planas cortadas.

I.2 El problema de la propagación en la región interna.

Desde el trabajo original de García-Calderón y Rubio (1997) sobre el estudio de los transitorios del tunelaje cuántico en estructuras resonantes de un sistema de doble barrera, basado en el modelo de obturador cuántico, y varios otros estudios subsecuentes realizados por el mismo grupo (Romo y Villavicencio, 1999; Villavicencio y Romo, 2000; Romo y Villavicencio, 2001), se ha enfatizado el resultado, aparentemente irrefutable, de que *no existe propagación en la región interna del sistema*. Por otra parte, en simulaciones numéricas de dispersión de paquetes gaussianos, Jauho y Jonson sostienen categóricamente que no existen frentes de onda viajando en el interior del sistema (Jauho y Jonson, 1989). Støvneng y Hauge por su parte, aseguran también que no tiene sentido asociar una velocidad de tunelaje a un electrón a través de una barrera de entrada al pozo cuántico del sistema (Støvneng y Hauge, 1991). Todos estos trabajos son de la postura de que en la región interna no se puede hablar de propagación electrónica de un extremo a otro de la estructura cuántica evocando el desplazamiento de una partícula clásica.

Sin embargo, existen también estudios que apuntan en sentido opuesto a esta postura. Pereyra (2000), por ejemplo, realiza un estudio en un sistema periódico de 8 barreras, calculando escalas de tiempo asociadas al transporte a través del sistema. En particular, basado en el concepto de *tiempo fase*, Pereyra define el *tiempo de tunelaje de la superred* como una escala que, como su nombre lo sugiere, la propone como el tiempo que le lleva a los electrones de tunelaje en atravesar el sistema. Esto, aunque basado en un enfoque estacionario, lleva implícita la idea de una propagación efectiva a través del sistema. Sobre esta misma línea, Pacher *et al.* (2005) realizan un estudio en sistemas periódicos finitos, en los cuales definen una velocidad a la cual llaman

velocidad de tunelaje resonante de la superred, como el cociente de la longitud L del sistema y el tiempo fase τ^{ph} . De nuevo, estas definiciones se sustentan en la idea subyacente de una propagación real en el interior del sistema, de otra manera no tendría sentido hablar de velocidades. Al ser estos, tratamientos de naturaleza estacionaria intentando describir un problema que es eminentemente dinámico, podríamos pensar que sus predicciones carecen de sentido. Sin embargo, hay también trabajos dinámicos que muestran evidencia de la propagación en la región interna. Peisakhovich y Shtygashev (2008b) realizaron un estudio dinámico de dispersión de paquetes de onda gaussianos en un sistema periódico de 50 deltas de Dirac, y sus simulaciones numéricas presentan una dinámica en la que se exhibe una propagación de un paquete distorsionado a lo largo de la región interna de la superred finita, yendo de un lado a otro del sistema, e incluso reflejándose en los extremos de manera parecida a una partícula clásica rebotando en una cavidad.

Esta diferencia de posturas entre autores, por un lado los que sostienen que no hay propagación y por lo tanto no tiene sentido la idea de hablar de velocidades en estructuras cuánticas resonantes, y los que, por el contrario, afirman que si la hay e incluso definen velocidades de propagación, no necesariamente significa que un grupo esté incorrecto y el otro no. Nosotros consideramos (y eso fue lo que nos motivó a realizar este estudio) que ambos grupos están en lo correcto, pero que se trata de estudios realizados en diferentes regímenes, y que la diferencia de resultados se debe a lo que conoce como “efectos cuánticos del tamaño” (quantum size effects). Mientras que los sistemas extensos de largas cadenas de potenciales periódicos, considerados infinitos, adoptan comportamientos colectivos análogos a los de los cristales (siendo el modelo *Kronig Penney* el ejemplo emblemático para una cadena infinita unidimensional), los sistemas periódicos finitos, de algunas cuantas decenas de pozos y barreras, se encuentran en el llamado *régimen mesoscópico*, en el cual los comportamientos no son ni como en átomos

individuales ni tampoco como en los cristales, sino que se encuentran en una fase intermedia en la que son altamente sensibles a la extensión espacial o tamaño del sistema, o equivalentemente a su número de pozos y barreras. Resulta pertinente entonces realizar un estudio sistemático variando la longitud del sistema, desde las estructuras resonantes más sencillas (como sistemas de doble o triple barrera), hasta sistemas periódicos finitos de varias decenas de pozos y barreras, en el contexto de la pregunta de si existe o no la propagación en la región interna del sistema y si se puede o no asociar una velocidad a la propagación.

I.3 Organización de la tesis

La distribución del material por capítulos es la siguiente: En el capítulo II se presenta el marco teórico, el cual consiste en la propuesta de una condición inicial de paquete de onda Lorentziano, y la solución analítica completa de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo para un potencial arbitrario. En el capítulo III se realiza el estudio de la formación y decaimiento de un estado cuasi-estacionario en estructuras resonantes de doble delta de Dirac. El capítulo IV está dedicado a un estudio sistemático donde se varía la longitud $L = (N - 1)w$ de sistemas periódicos finitos de periodo espacial w para responder a la pregunta de si existe o no la propagación en el interior del sistema y en qué situaciones se presenta. El capítulo V hace un análisis comparativo de los tiempos de travesía de paquetes a través de sistemas periódicos finitos, con los tiempos de tunelaje predichos por métodos estacionarios. Finalmente, en el capítulo VI se presentan las conclusiones.

Capítulo II

MARCO TEÓRICO

A continuación se presenta la derivación de la solución en la región interna de un potencial de alcance finito para estudiar la evolución temporal de un paquete lorentziano truncado. Una de las ventajas que ofrece esta solución dinámica, que es una de las principales aportaciones de nuestro trabajo (Amador-Bartolini *et al.*, 2020), es que no solo nos permite describir estados iniciales truncados en el espacio, sino que también es posible reproducir la dinámica de estados iniciales extendidos como lo es el caso de la onda plana. El problema involucra la solución de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo con condiciones iniciales mediante el método de la transformada de Laplace, así como el desarrollo de la función de onda en términos de estados resonantes. En la sección II.1 se presentan los detalles de la derivación y en la sección II.2 se obtienen los casos límite correspondientes al estado inicial de onda plana.

II.1 Solución dinámica para paquetes lorentzianos

Consideremos la situación física en donde partículas con una energía $E_0 = \hbar^2 k_0^2 / 2m$ inciden desde la izquierda sobre un estructura resonante representada por un potencial $V(x)$ de forma arbitraria que se extiende sobre un intervalo espacial finito $0 \leq x \leq L$, y se anula fuera de este, esto es, el potencial es de alcance finito. Ver la figura 3.

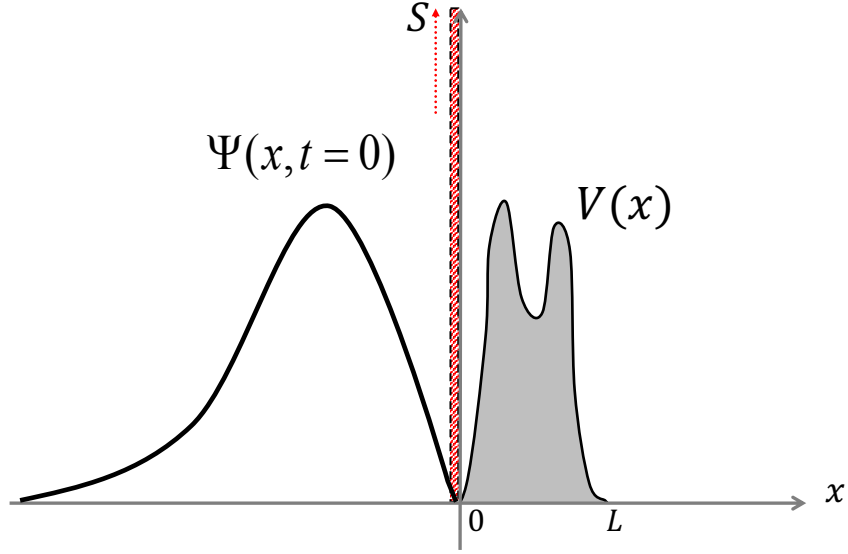


Figura 3. Modelo de obturador cuántico S que involucra a un estado inicial a $t = 0$ $\Psi(x, t = 0)$ que representa a un paquete de onda localizado a la izquierda de un potencial arbitrario de alcance finito $V(x)$ definido en el intervalo $x \in [0, L]$.

El problema que nos ocupa involucra la solución de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo

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

con la condición inicial introducida por Yamada *et al.* (2005), que consiste en un paquete Lorentziano truncado al tiempo $t = 0$, construido a partir de una superposición continua de ondas planas. Esto es, partimos de

$$\Psi(x, 0) = A \int_{-\infty}^{\infty} dk \left(\frac{e^{ikx}}{k - k_0 + i\Delta} + c.c. \right), \quad (2)$$

en donde $A = \sqrt{\Delta[1 + (\Delta/k_0)^2]}/2\pi$ con $\Delta > 0$ y “c.c.” representa el “complejo conjugado”. Una característica importante de $\Psi(x, 0)$ es que esta se anula automáticamente para $x > 0$, lo que puede verificarse inmediatamente al analizar el factor de integración

de la ecuación (2). Observe que el factor $e^{ikx}/(k - k_0 + i\Delta)$, corresponde a una distribución Lorentziana en el espacio de momentos centrada en $\hbar k_0$, con una anchura $\hbar\Delta$, y que exhibe un polo simple en la mitad inferior del plano k complejo. Una forma explícita para $\Psi(x, 0)$ puede obtenerse mediante la evaluación de la integral (2), lo que nos conduce a,

$$\Psi(x, 0) = \begin{cases} 4\pi A e^{x\Delta} \sin k_0 x, & x < 0, \\ 0, & x \geq 0. \end{cases} \quad (3)$$

Para obtener una solución analítica dependiente del tiempo, seguimos el procedimiento del trabajo de García-Calderón y Rubio (1997) el cual involucra la transformada de Laplace de las ecuaciones (1) y (3) utilizando la definición estándar,

$$\tilde{\Psi}(x, s) = \int_0^\infty \Psi(x, t) e^{-st} dt. \quad (4)$$

Las ecuaciones diferenciales para la función de onda transformada $\tilde{\Psi}(x, s)$ para la región de incidencia, que llamaremos región I ($x \leq 0$), y la de transmisión, que llamaremos región III ($x \geq L$), son:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, p) + p^2 \Psi(x, p) = \alpha i \begin{cases} 4\pi A e^{\Delta x} \sin k_0 x, & x \leq 0; \\ 0, & x \geq L, \end{cases} \quad (5)$$

en donde hemos realizado el cambio de variable $p = \sqrt{2\alpha i}$ y definido $\alpha = 2m/\hbar$. La soluciones físicamente aceptables de las ecuaciones (5) para las regiones I y III están dadas respectivamente por $\tilde{\Psi}_I(x, p)$ y $\tilde{\Psi}_{III}(x, p)$, que se muestran a continuación:

$$\tilde{\Psi}(x, p) = \begin{cases} D^- e^{\Delta x} \sin k_0 x + E^- e^{\Delta x} \cos k_0 x \\ + C^- e^{-ipx}; & x \leq 0; \\ C^+ e^{ipx}; & x > L, \end{cases} \quad (6)$$

con las constantes D^- y E^- definidas como

$$D^- = \frac{i\alpha\gamma(p^2 + \Delta^2 - k_0^2)}{(p^2 - k_+^2)(p^2 - k_-^2)}; \quad (7)$$

$$E^- = \frac{-2i\alpha\gamma k_0 \Delta}{(p^2 - k_+^2)(p^2 - k_-^2)}, \quad (8)$$

en donde además hemos definido $\gamma = 4\pi A$ y $k_{\pm} = \pm k_0 - i\Delta$.

Una vez que hemos determinado las soluciones en las regiones externas al potencial, procedemos a calcular la solución en la región interna, que llamaremos región II ($0 \leq x \leq L$), mediante el siguiente procedimiento que involucra el cálculo de la función de Green del sistema. Para esto consideremos la ecuación de Schrödinger transformada

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \tilde{\Psi}(x, p) + [p^2 - \tilde{V}(x)] \tilde{\Psi}(x, p) = 0, \quad (9)$$

con $\tilde{V}(x) = 2mV(x)/\hbar^2$, así como la ecuación para la función de Green $G^+(x, x'; p)$ correspondiente,

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} G^+(x, x'; p) + [p^2 - \tilde{V}(x)] G^+(x, x'; p) = \delta(x - x'), \quad (10)$$

que satisface las siguientes condiciones de frontera de onda saliente,

$$\frac{\partial}{\partial x} G^+(x, x'; p) \Big|_{x=0} = -ip G^+(0, x'; p), \quad (11)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} G^+(x, x'; p) \Big|_{x=L} = ip G^+(L, x'; p). \quad (12)$$

Multiplicando la ecuación (9) por $G^+(x, x'; p)$ y la ecuación (12) por $\tilde{\Psi}(x, p)$, y restando las ecuaciones resultantes, obtenemos la expresión,

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \tilde{\Psi}(x, p) G^+(x, x'; p) - \frac{\partial^2}{\partial x^2} G^+(x, x'; p) \tilde{\Psi}(x, p) = -\delta(x - x') \tilde{\Psi}(x, p), \quad (13)$$

en donde los términos correspondientes al potencial $\tilde{V}(x)$ se anulan. Integramos ambos lados de la ecuación (13) con respecto a la variable x en el intervalo $0 \leq x \leq L$,

$$\int_0^L \left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} \tilde{\Psi}(x, p) G^+(x, x'; p) - \frac{\partial^2}{\partial x^2} G^+(x, x'; p) \tilde{\Psi}(x, p) \right] dx = - \int_0^L [\delta(x - x') \tilde{\Psi}(x, p)] dx, \quad (14)$$

obteniendo como resultado:

$$\left[\frac{\partial}{\partial x} \tilde{\Psi}(x, p) G^+(x, x'; p) - \frac{\partial}{\partial x} G^+(x, x'; p) \tilde{\Psi}(x, p) \right]_0^L = -\tilde{\Psi}(x', p). \quad (15)$$

Evaluando la expresión anterior en los límites indicados tenemos que,

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial x} \tilde{\Psi}(L, p) G^+(L, x', p) - \frac{\partial}{\partial x} G^+(L, x', p) \tilde{\Psi}(L, p) - \\ & \frac{\partial}{\partial x} \tilde{\Psi}(0, p) G^+(0, x', p) + \frac{\partial}{\partial x} G^+(0, x', p) \tilde{\Psi}(0, p) = -\tilde{\Psi}(x', p). \end{aligned} \quad (16)$$

A continuación obtenemos una expresión simplificada para $\tilde{\Psi}(x', p)$ con ayuda de las soluciones (6) y de sus derivadas, así como las condiciones de frontera de onda saliente (11) y (12). Esto es, al evaluar en la ecuación (16) todos los términos $\tilde{\Psi}$, $\partial_x \tilde{\Psi}$, G^+ y $\partial_x G^+$ con ayuda de la ecuaciones antes mencionadas, obtenemos

$$\tilde{\Psi}(x, p) = \frac{i\gamma\alpha}{2} G^+(0, x; p) \left[\frac{1}{k_- - p} - \frac{1}{k_+ - p} \right]. \quad (17)$$

Podemos manipular (17) mediante la evaluación de la siguiente integral compleja en el plano- z mediante el teorema de Cauchy,

$$I = \frac{1}{2\pi i} \int_C \frac{z C(z, k_+, k_-)}{z - p} dz = 0, \quad (18)$$

donde definimos $C(z, k_+, k_-) \equiv \tilde{\Psi}(x, z)$ y hemos considerado el contorno de integración $C = \Gamma + C_{k_+} + C_{k_-} + C_p + \sum_n C_n$. Ver la figura 4. Los contornos C_n encierran a los polos complejos k_n de $G^+(x, x'; z)$ la cual es una función meromórfica *i.e.* la función de Green tiene polos simples.

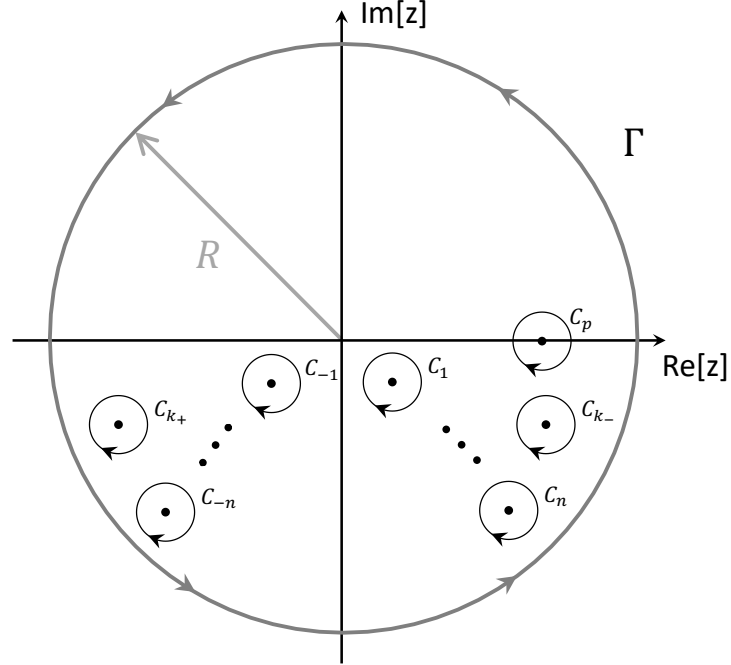


Figura 4. Contorno en el plano complejo z para evaluar la integral dado por la ecuación (18). El contorno excluye todos los polos complejos del integrando de la ecuación (18), los cuales están encerrados por los siguientes contornos: Γ de radio R centrado en el origen con orientación contraria al de las manecillas del reloj, C_p que encierra a un polo en z_p , $C_{k_{\pm}}$ que encierra polos en $z_{k_{\pm}}$, y todas las C_n que rodean a los polos complejos simples k_n de $G^+(x, x'; z)$, recorridos en el sentido de las manecillas del reloj.

La integración compleja nos conduce a,

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi i} \left[\int_{C_p} \frac{z \tilde{\Psi}(x, z)}{z - p} dz + \int_{C_{k_+}} \frac{(i\gamma\alpha/2)z G^+(0, x; z)}{(z - p)(k_+ - z)} dz \right. \\ \left. + \int_{C_{k_-}} \frac{(i\gamma\alpha/2)z G^+(0, x; z)}{(z - p)(k_- - z)} dz \right. \\ \left. + \sum_n \int_{C_n} \frac{(i\gamma\alpha/2)z G^+(0, x; z)}{(z - p)(k_n - z)} dz \right] = 0. \end{aligned}$$

(19)

A continuación, en la última integral de la ecuación (19) utilizamos el desarrollo de la función de Green en términos de los polos complejos k_n y de los *estados de resonantes*

$u_n(x)$ (García-Calderón, 2010),

$$G^+(x, x'; z) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{u_n(x)u_n(x')}{2k_n(z - k_n)}, \quad (20)$$

en donde las u_n 's son los *estados resonantes* en una dimensión, los cuales son eigenfunciones de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo

$$\frac{d^2 u_n(x)}{dx^2} + [k_n^2 - \tilde{V}(x)] u_n(x) = 0, \quad (21)$$

con condiciones de frontera de onda saliente:

$$\begin{aligned} \left. \frac{du_n(x)}{dx} \right|_{x=L} &= +ik_n u_n(L); \\ \left. \frac{du_n(x)}{dx} \right|_{x=0} &= -ik_n u_n(0). \end{aligned} \quad (22)$$

El índice n ($n = 1, 2, 3, \dots$) recorre los polos complejos del tercer y cuarto cuadrante en el plano complejo- k , dados respectivamente por k_{-n} y k_n . Estos polos se encuentran relacionados mediante $k_{-n} = -k_n^*$, que es una consecuencia de la simetría ante la inversión temporal. Las energías complejas asociadas a los k_n están dadas por $E_n = \hbar^2 k_n^2 / 2m = \varepsilon_n - i\Gamma_n/2$, en donde ε_n y Γ_n son la energía y la anchura de resonancia, respectivamente. Los estados resonantes también satisfacen una relación de simetría ante inversión temporal, esto es, $u_{-n}(x) = u_n^*(x)$, y no obedecen las típicas reglas de ortonormalidad y de normalización (García-Calderón, 2010). Las funciones u_n 's satisfacen la condición de ortonormalidad,

$$\int_0^L u_n(x)u_m(x) dx + i \frac{u_n(0)u_m(0) + u_n(L)u_m(L)}{k_n + k_m} = \delta_{nm}. \quad (23)$$

Observe que en el caso $n = m$ la ecuación (23) nos conduce a la siguiente condición de *normalización* de los estados resonantes

$$\int_0^L u_n^2(x) dx + i \frac{u_n^2(0) + u_n^2(L)}{2k_n} = 1. \quad (24)$$

La expresión para la función de onda $\tilde{\Psi}(x, p)$ en términos de los *estados resonantes* se obtiene utilizando el desarrollo (20) en (19), lo que nos permite escribir,

$$\begin{aligned} \tilde{\Psi}(x, p) = & \frac{i\gamma\alpha}{2} \left[\frac{k_-}{p(k_- - p)} G^+(0, x; k_-) \right. \\ & - \frac{k_+}{p(k_+ - p)} G^+(0, x; k_+) - \frac{1}{2} \sum_n \frac{u_n(0)u_n(x)}{k_n - p} \\ & \left. \times \left(\frac{1}{k_- - k_n} - \frac{1}{k_+ - k_n} \right) \right]. \end{aligned} \quad (25)$$

A continuación reescribimos los primeros dos términos de la ecuación (25) utilizando la relación fundamental entre la función de onda estacionaria $\phi(x, k)$ y la función de Green del sistema (García-Calderón, 2010)

$$\phi(x, k) = ik \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{u_n(0)u_n(x)}{k_n(k - k_n)}. \quad (26)$$

Una vez realizada la sustitución anterior procedemos a calcular la transformada de Laplace inversa de $\tilde{\Psi}(x, p)$ (ecuación (25)) para calcular la función de onda $\Psi(x, t)$ mediante la evaluación de la siguiente integral de Bromwich

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{2i\pi} \int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} \tilde{\Psi}(x; s) e^{st} ds. \quad (27)$$

En el cálculo de la transformada de Laplace inversa (27) utilizamos la definición general de la función de Moshinsky,

$$M[y(x, q, t)] = \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} \frac{(i\alpha/2)}{\sqrt{2\alpha i s}} \left[\frac{e^{\sqrt{2\alpha i s} x}}{\sqrt{2\alpha i s - q}} \right] e^{st} ds, \quad (28)$$

con,

$$y(x, q, t) = e^{-i\pi/4} \frac{(x - 2\alpha_0^2 q t)}{2\alpha_0 \sqrt{t}}, \quad (29)$$

en donde q es k_{\pm} , k_0 or $k_{\pm n}$, y $\alpha_0 = (\hbar/2m)^{1/2}$. Las funciones de Moshinsky también pueden expresarse en término de la función de error compleja (Abramowitz y Stegun, 1964) $w(z) = e^{-z^2} \operatorname{erfc}(-iz)$,

$$M[y(x, q, t)] = \frac{1}{2} e^{ix^2/4\alpha_0^2 t} w[iy(x, q, t)]. \quad (30)$$

Utilizando las definiciones dadas por las ecuaciones (27) y (28), obtenemos finalmente la función de onda dependiente del tiempo $\Psi(x, t)$ para *paquetes Lorentzianos truncados* en la región interna del potencial,

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) = & A_0 \left[\phi(x, k_+) M[y(k_+, t)] - \phi(x, k_-) M[y(k_-, t)] \right] \\ & + \sum_{n=-\infty}^{\infty} D_n(x) M[y(k_n, t)]. \end{aligned} \quad (31)$$

El coeficiente $D_n(x)$ en la ecuación (31) está definido como,

$$D_n(x) = -\frac{2}{i} k_0 A_0 \left[\frac{u_n(0) u_n(x)}{(k_+ - k_n)(k_- - k_n)} \right]. \quad (32)$$

Observe que la dependencia temporal de las solución está contenida en las funciones de Moshinsky, las cuales podemos simplificar de la siguiente forma:

$$M[y(0, q, t)] \equiv M[y(q, t)] = \frac{1}{2} w[iy(q, t)], \quad (33)$$

con,

$$y(q, t) = -e^{-i\pi/4} \alpha_0 q t^{1/2}. \quad (34)$$

La solución dinámica (31) para paquetes Lorentzianos truncados en la región interna de un potencial arbitrario de alcance finito, es una de las aportaciones principales del presente trabajo de tesis (Amador-Bartolini *et al.*, 2020). Con esta fórmula analítica podremos explorar, con base en fórmulas analíticas exactas, la dinámica de estados iniciales truncados muy localizados en el espacio. Asimismo, podremos explorar las principales diferencias con el resultados obtenidos mediante el uso de estados iniciales extendidos espacialmente, como lo es el caso de la onda plana truncada. En la siguiente sección discutiremos el procedimiento que tendremos que aplicar en la solución dada por la ecuación (31) para reproducir las fórmulas analíticas correspondientes a ondas planas truncadas.

II.2 Caso límite: la onda plana truncada

Como lo mencionamos en la sección anterior, podemos obtener la solución dinámica para la dispersión de ondas planas truncadas a partir de la función de onda dependiente del tiempo (31). El procedimiento se basa en multiplicar a esta última por $i/\sqrt{\Delta}$ y tomar el límite cuando $\Delta \rightarrow 0$. Lo anterior nos conduce a la solución $\Psi_r(x, t)$ en la región interna del potencial (Romo y Villavicencio, 1999)

$$\Psi_r(x, t) = \Psi_a(x, k_0, t) - \Psi_a(x, -k_0, t), \quad (35)$$

que corresponde a la condición inicial de *obturador reflejante* de onda plana descrita por

$$\Psi_r(x, t = 0) = \begin{cases} e^{ik_0x} - e^{-ik_0x}, & x \leq 0; \\ 0, & x > 0. \end{cases} \quad (36)$$

La solución reflejante (35) está dada en términos de la solución dependiente del tiempo $\Psi_a(x, k_0, t)$ (García-Calderón y Rubio, 1997) dada por

$$\Psi_a(x, k_0, t) = \phi(x, k_0)M(0, k_0, t) - i \sum_n \frac{u_n(0)u_n(x)}{k_0 - k_n} M(0, k_n, t), \quad (37)$$

correspondiente a la condición inicial a $t = 0$ de un *obturador absorbente* de onda plana

$$\Psi_a(x, t = 0) = \begin{cases} e^{ik_0x}, & x \leq 0; \\ 0, & x > 0. \end{cases} \quad (38)$$

Capítulo III

Dinámica de la formación y decaimiento de un estado cuasi-estacionario

III.1 Dinámica de paquetes Lorentzianos en estructuras resonantes

Utilizamos la solución dependiente del tiempo, $\Psi(x, t)$ [ecuación (31)], basada en un desarrollo de estados resonantes, para explorar los fenómenos transitorios en la dinámica de un paquete de onda Lorentziano truncado, en la región interna de un potencial. Nuestro propósito es investigar los efectos en la dinámica de la densidad de probabilidad debido a variaciones en la anchura Δ del paquete de ondas en el espacio de momentos. En particular, estamos interesados en la construcción del estado cuasi-estacionario en la región interna, así como el subsecuente proceso de decaimiento de la densidad de probabilidad en la región interna del sistema.

En la sección III.1.1, exploraremos las características espaciales generales del paquete de onda Lorentziano incidente $\Psi(x, 0)$ [ecuación (3)] así como la correspondiente función de onda en el espacio k , $\Phi(k)$. El objetivo de este análisis es caracterizar el estado inicial en términos del momento del paquete de onda incidente, k_0 , y su correspondiente anchura Δ en el espacio del momento. En la sección III.1.2 estudiaremos la evolución espacial y temporal de paquetes de ondas de Lorentzianos en un sistema resonante dado por un potencial doble delta simétrico para explorar los procesos de formación y decaimiento de la densidad de probabilidad. En particular, estudiamos el comportamiento del tiempo de construcción del estado cuasi-estacionario, las escalas

de tiempo de decaimiento, así como las contribuciones no-exponenciales en la densidad de probabilidad.

III.1.1 Comportamiento de la condición inicial en los espacios de configuración y de momentos

En esta sección analizaremos el comportamiento del paquete de onda incidente $\Psi(x, t = 0)$ dado por la ecuación (3) y su correspondiente función de onda en el espacio k , obtenida mediante la transformada de Fourier de $\Psi(x, 0)$, la cual es de la forma,

$$\Phi(k) = \frac{2k_0\sqrt{2\pi}A}{[k - k_+][k - k_-]}. \quad (39)$$

Un aspecto interesante de la función de onda inicial, $\Psi(x, 0)$, es que mediante una simple variación del parámetro Δ podemos controlar toda una variedad de estados iniciales truncados, esto es, desde un paquete de onda localizado, hasta al caso de una onda de plana extendida en el espacio semi-infinito $(-\infty, 0)$. Lo anterior se ilustra en la figura 5, en donde presenta la densidad de probabilidad de la función de onda inicial, $\rho_0 \equiv |\Psi(x, 0)|^2$ vs x (panel izquierdo), y su correspondiente densidad de probabilidad en el espacio k , $\rho_k \equiv |\Phi(k)|^2$ vs k (panel derecho), para diferentes valores del parámetro Δ . Se muestra que a medida que el parámetro Δ disminuye, el paquete incidente ρ_0 deja de estar localizado y empieza a extenderse en el espacio x . Observe que en la secuencia de gráficas (d)-(f) de la figura 5, la densidad de probabilidad ρ_0 , en el límite $\Delta \rightarrow 0$, empieza a manifestar el comportamiento típico de la condición inicial de una onda plana cortada $|\Psi_r(x, 0)|^2 \propto \text{sen}^2 k_0 x$, dada por la ecuación (36). En el espacio k , la densidad de probabilidad $|\Phi(k)|^2$ exhibe un comportamiento peculiar cuando se varía el parámetro Δ . Para los valores de Δ que se muestran en las figuras 5 (g)-(i), ρ_k se caracteriza por un pulso centrado en k_0 . Aunque la anchura Δ de este pulso solitario disminuye conforme Δ decrece, observamos que hay un valor crítico de dicho parámetro

a partir del cual ρ_k exhibe dos picos simétricos, como podemos apreciar en la secuencia de gráficas de las figuras 5 (j)-(l). Dicho valor crítico de la anchura es $\Delta = k_0$, lo que define de manera natural a dos regímenes en la densidad de probabilidad en el espacio k : (i) el régimen $\Delta > k_0$ en donde solo observamos un pico y (ii) el régimen $\Delta < k_0$ caracterizado por dos picos.

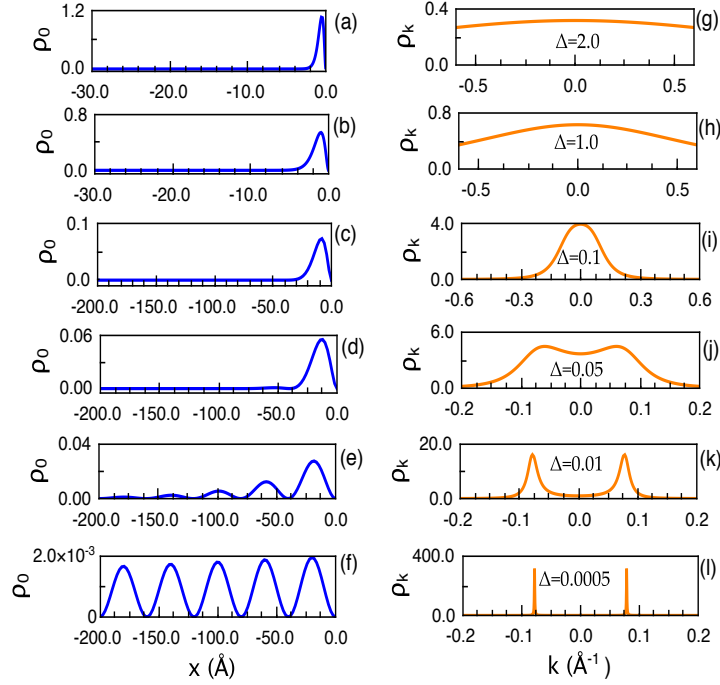


Figura 5. Densidad de probabilidad del estado inicial ρ_0 (línea azul sólida) dada por la ecuación (3), como función de la posición x , para la energía de incidencia $E_0 = 0.3493$ eV ($k_0 = 0.0783 \text{ \AA}^{-1}$), para valores decrecientes del parámetro Δ que se muestra en el panel izquierdo. La correspondiente transformada de Fourier ρ_k (línea naranja sólida) dada por la ecuación (39) en función del momento k , se presenta en el panel derecho, (g)(l), respectivamente. Observe que hay un único pico para $\Delta > k_0$ y dos picos para $\Delta < k_0$.

Las posiciones de estos picos están dadas por $k_p^\pm = \pm\sqrt{k_0^2 - \Delta^2}$ ($\Delta < k_0$), a los cuales podemos asociarles las energías $E_p = \hbar^2 k_p^{\pm 2} / 2m \equiv E_0 - \bar{\varepsilon}$. Lo anterior es importante para estudiar la dinámica de los paquetes Lorentzianos dispersados por una estructura resonante, ya que nos permite definir la condición de incidencia en resonancia como la alineación del pico E_p del paquete de onda con la energía de resonancia ε_n del sistema *i.e.* $E_p = \varepsilon_n$. Por lo tanto, el momento k_0 del del paquete de onda ini-

cial (3) debe elegirse como $k_0 = \sqrt{2m(\varepsilon_n + \bar{\varepsilon})}/\hbar$ para que satisfaga la condición antes mencionada. Observe que para el caso de ondas planas cortadas $\bar{\varepsilon} \rightarrow 0$, por lo que la incidencia en la condición de resonancia se reduce simplemente a $E_0 = \varepsilon_n$.

III.1.2 Formación y decaimiento de un estado cuasi-estacionario

Una de las principales limitaciones técnicas de los estudios dinámicos de la formación y decaimiento de un estado cuasi-estacionario en estructuras resonantes, ha sido la falta de expresiones analíticas para la densidad de probabilidad y de las cantidades relevantes relacionadas, tales como la escalas de tiempo asociadas a los procesos de formación y decaimiento. En virtud de que nuestro enfoque proporciona un marco completamente analítico, este permite la exploración de una manera más transparente de las principales características del proceso dinámico desde la etapa transitoria hasta el régimen estacionario asintótico de tiempos largos. Como ejemplo, consideremos el caso de una onda plana cortada $\Psi(x, 0)$, dada por la ecuación (3), incidente desde la izquierda ($x < 0$) en un potencial doble delta simétrico $V(x) = \lambda[\delta(x) + \delta(x - L)]$ de intensidad λ . Para evaluar la densidad de probabilidad, $\rho \equiv |\Psi(x, t)|^2$, utilizando la solución dinámica dada por la ecuación (31), es necesario calcular los polos complejos k_n y los estados resonantes del sistema, $u_n(x)$, los cuales pueden ser calculados mediante conocidas técnicas analíticas y numéricas (García-Calderón, 2010).

Con el fin de simplificar la discusión de las gráficas, introducimos las unidades unidimensionales de posición, $X = x/L$, y tiempo, $\tau = t/\tau_1$, en donde $\tau_1 = \hbar/\Gamma_1$ es la vida media más baja del sistema resonante, cuya energía es ε_1 con una anchura de resonancia, Γ_1 . En la figura 6, graficamos ρ como función del tiempo τ utilizando la ecuación (31), en una posición fija $X = 1/2$ para diferentes valores de Δ . Para poner en

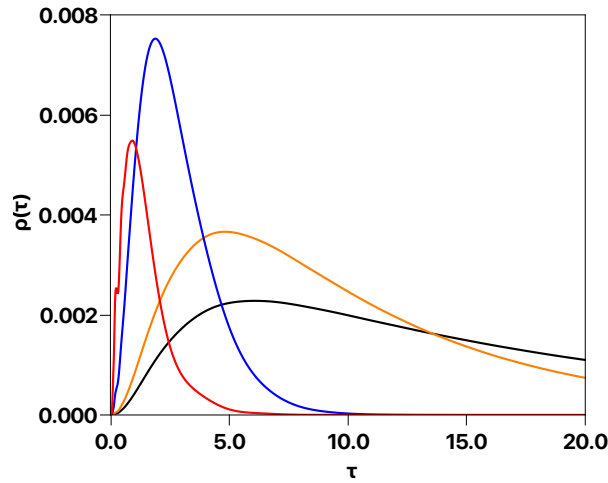


Figura 6. Evolución temporal de ρ utilizando la ecuación (31), con $N = 50$ polos, como función de τ para una posición fija $X = 1/2$ para diferentes valores del parámetro Δ : 0.0005 (línea negra sólida), 0.001 (línea naranja sólida), 0.01 (línea azul sólida), y 0.05 (línea roja sólida) (el parámetro Δ está dado en unidades de \AA^{-1}). La energía de incidencia se elige como $E_0 = \varepsilon_1 + \bar{\varepsilon}$. En esta y todas las figuras restantes de este capítulo, consideramos un sistema resonante dado por un potencial doble delta de Dirac simétrico con parámetros $\lambda = 10.0 \text{ eV \AA}$, $L = 30.0 \text{ \AA}$. La energía de resonancia más baja y su anchura correspondiente están dadas por $\varepsilon_1 = 0.349 \text{ eV}$ y $\Gamma_1 = 0.145 \text{ eV}$, respectivamente. El tiempo de vida de dicho estado es $\tau_1 \equiv \hbar/\Gamma_1 = 4.520 \text{ fs}$. Además, utilizaremos una masa efectiva típica de una heteroestructura semiconductor, $m = 0.067 m_e$, en donde m_e es la masa del electrón.

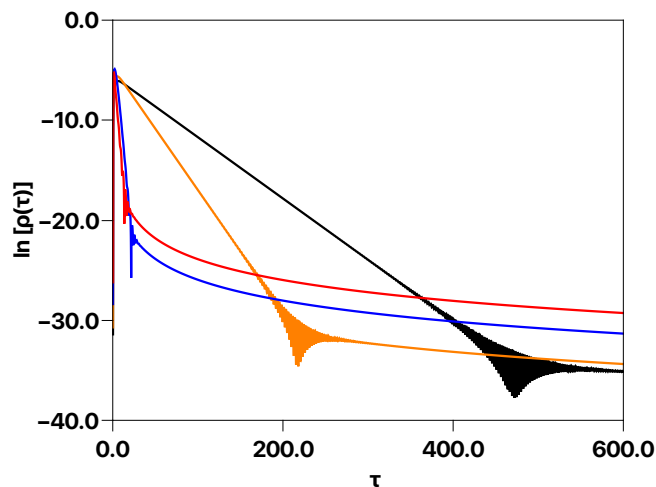


Figura 7. Evolución temporal de $\ln \rho$ como función de τ en un intervalo más amplio de tiempo, considerando los mismos parámetros utilizados en la figura 6. En esta gráfica, las diferentes curvas corresponden a los siguientes valores de Δ : 0.0005 (línea sólida negra), 0.001 (línea sólida naranja), 0.01 (línea sólida azul), y 0.05 (línea sólida roja). Observe en cada uno de los casos el comportamiento exponencial, seguido de una transición al régimen no-exponencial.

contexto la importancia de nuestros resultados, destacamos que en estudios numéricos previos (Collins *et al.*, 1987; Guo *et al.*, 1988) acerca de la formación y el decaimiento de un estado cuasi-estacionario dentro de una estructura resonante de doble barrera, lo más que se logró en el terreno analítico fue el ajustarle una función exponencial de la forma e^{-t/τ_1} a la densidad de probabilidad dependiente del tiempo. Esto es, sólo se logró caracterizar la parte de la curva asociada al decaimiento del estado cuasi-estacionario, pero no dentro del proceso de formación del estado. Mediante una simple inspección visual de la figura 6, la diversidad de curvas que presentamos, muestra que el decaimiento no se ajusta a una sola curva exponencial e^{-t/τ_1} . Si esto fuera cierto, al graficar el logaritmo natural de ρ resultarían líneas rectas con la misma pendiente (todas de valor -1) para los cuatro casos mostrados. Con el propósito de explorar más a fondo la dinámica de la razón de decaimiento de la densidad de probabilidad, graficamos en

la figura 7, para un intervalo de tiempo más amplio, el logaritmo natural $\rho(t)$ para los mismos valores de Δ utilizados en la figura 6. Es evidente (de la parte lineal de las curvas) que, en todos los casos, el decaimiento es exponencial hasta una transición a un régimen no-exponencial que se produce en el punto de inflexión inmerso en la parte oscilatoria de la curva. A partir de este punto en adelante, el decaimiento sigue un comportamiento no-exponencial, que como veremos posteriormente, obedece a una ley de potencia inversa en el tiempo. Además, en la figura 7 mostramos que las pendientes de la parte lineal de las curvas son muy diferente entre ellas, excepto en los casos de $\Delta = 0.01$ y 0.05 , donde las pendientes son esencialmente las mismas, aparentemente alcanzando un valor de “saturación”. Por inspección ón numérica de las curvas, el valor de saturación de estas pendientes es aproximadamente -1 , lo que implica que para estos valores de Δ , el decaimiento se comporta como e^{-t/τ_1} de acuerdo con (Collins *et al.*, 1987; Guo *et al.*, 1988). Es decir, nuestros resultados, en lugar de contradecir a estos autores, están de acuerdo con ellos en un régimen en donde los paquetes de ondas son relativamente extendidos en el espacio k . Por otro lado, el decaimiento exponencial para los paquetes espectralmente estrechos, claramente no se rige por la anchura Γ_1 . Con el fin de explorar la razón de decaimiento para cualquier valor de Δ , es conveniente separar las contribuciones puramente exponenciales de las puramente no-exponenciales en la solución formal, ecuación (31). Podemos utilizar el cambio de la notación de suma $\sum_{n=-\infty}^{\infty} S_n = \sum_{n=1}^{\infty} [S_n + S_{-n}]$ y reescribirlo de la forma $\Psi(x, t)$.

$$\begin{aligned}
\Psi(x, t) &= A_0 \\
&\times \left[\phi(x, k_+) M [y(k_+, t)] - \phi(x, k_-) M [y(k_-, t)] \right] \\
&+ \sum_{n=1}^{\infty} (D_n(x) M [y(k_n, t)] + D_{-n}(x) M [y(k_{-n}, t)]).
\end{aligned}
\tag{40}$$

Sabemos que, para $\pi/2 < \arg [y(-q, t)] < 3\pi/2$, las funciones Moshinsky contienen contribuciones tanto exponenciales como no-exponenciales, que se pueden separar utilizando la relación de simetría,

$$M[y(q, t)] = e^{-iq^2\alpha_0^2 t} - M[y(-q, t)], \quad (41)$$

donde $M[y(-q, t)]$ son funciones puramente no-exponenciales. El argumento de $y(q, t)$ cumple con el requisito anterior para $q = k_+$ y k_n , mientras que todas las funciones de Moshinsky con $q = k_-$ and k_{-n} implicadas en la ecuación (40) son puramente no-exponenciales. Esto permite separar explícitamente las contribuciones exponenciales de las contribuciones no-exponenciales de la solución formal, y podemos reescribir la solución como,

$$\Psi(x, t) = \Psi_e + \Psi_{ne}, \quad (42)$$

donde la contribución exponencial, Ψ_e , es dada por,

$$\Psi_e = A_0 \phi(x, k_+) e^{-ik_+^2\alpha_0^2 t} + \sum_{n=1}^{\infty} D_n(x) e^{-ik_n^2\alpha_0^2 t}, \quad (43)$$

y la contribución no-exponencial, Ψ_{ne} , es dada por ,

$$\begin{aligned} \Psi_{ne} &= -A_0 [\phi(x, k_+)M[y(-k_+, t)] + \phi(x, k_-)M[y(k_-, t)]] \\ &- \sum_{n=1}^{\infty} (D_n(x)M[y(-k_n, t)] - D_{-n}(x)M[y(k_{-n}, t)]). \end{aligned} \quad (44)$$

El último término puede evaluarse fácilmente en términos de k_n y u_n utilizando la relación $k_{-n} = -k_n^*$ and $u_{-n} = u_n^*$, respectivamente, que resultan de la invariancia ante inversión temporal. Dado que la energía de incidencia se elige cerca de la primera resonancia *i.e.*, $E_0 = \varepsilon_1 + \bar{\varepsilon}$, podemos elegir un solo término de la suma en Ψ_e . Por lo tanto, podemos demostrar que dicha aproximación de un solo término ($n = 1$) en la ecuación (43) nos conduce a la siguiente fórmula aproximada para la densidad de

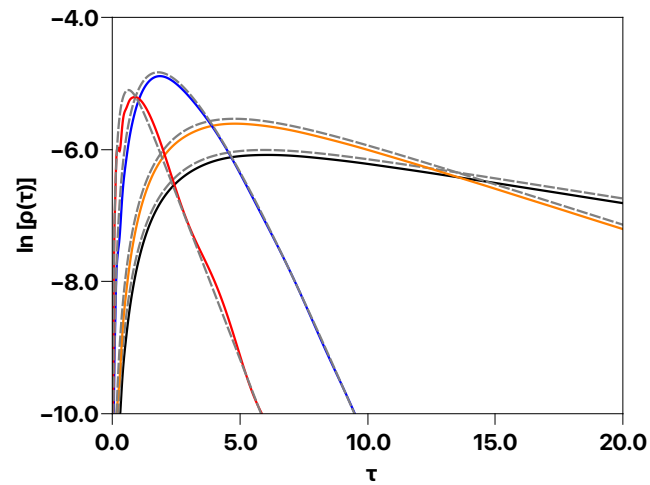


Figura 8. Evolución temporal de $\ln \rho$ para los mismos valores de Δ utilizados en las dos figuras anteriores: 0.0005 (línea sólida negra), 0.001 (línea sólida naranja), 0.01 (línea sólida azul), y 0.05 (línea sólida roja). Aquí se comparan dos procesos en la dinámica de la función de onda, el de formación (o crecimiento) y el del inicio del decaimiento cuántico. Para ello, se contrastan las curvas calculadas con la solución formal (31) (líneas sólidas de color) así como con la fórmula aproximada (45) (líneas punteadas de color gris). Se puede apreciar una excelente concordancia entre los resultados obtenidos con la fórmula exacta y la aproximada en cada uno de los casos analizados.

probabilidad,

$$|\Psi_e|^2 = |\Lambda(x)|^2 \left[e^{-\bar{\Gamma}t/2\hbar} - e^{-\Gamma_1 t/2\hbar} \right]^2, \quad (45)$$

donde $\Lambda(x) = 2\pi A u_n(0) u_n(x) / (k_+ - k_1)$, y

$$\bar{\Gamma} = 4 R_0 (\varepsilon_1 + \bar{\varepsilon}), \quad (46)$$

con $R_0 = \Delta/k_0$. En la figura 8 se muestra que la fórmula simple de un término dada por la ecuación (45) resulta una excelente aproximación, no sólo en la región exponencial de decaimiento, sino también en la región de crecimiento de la densidad de probabilidad. Es notable que el comportamiento dependiente del tiempo del paquete de ondas en la región interna pueda ser descrito por una fórmula analítica tan simple como la ecuación (45), y que sólo involucra la diferencia entre dos funciones exponenciales en decaimiento.

Puede parecer algo extraño que el crecimiento de la densidad de probabilidad (**buildup**) se describa por funciones exponenciales decrecientes. Sin embargo, es fácil ver que esta expresión tiene un máximo para un cierto tiempo $t = t_b$, que definiremos a continuación como el *tiempo de acumulación* (buildup). Es precisamente la competencia entre estas dos funciones exponenciales la que origina la acumulación de la densidad de probabilidad como función del tiempo. De lo anterior, resulta claro que tendremos regímenes en donde la contribución de ambas exponenciales puede ser del mismo orden, mientras que en otros pudiese dominar alguna de ellas. Esto es, las contribuciones de los dos términos exponenciales en la ecuación (45) son cruciales para la describir el buildup electrónico, mientras que para describir el proceso de decaimiento sólo una de estas exponenciales es importante. Este último depende de los valores relativos de la anchura de resonancia $\bar{\Gamma}$ y Γ_1 , cuya razón, $\gamma \equiv \bar{\Gamma}/\Gamma_1$, tiene una dependencia lineal con Δ , como se muestra en la figura 9. El cruce de la curva γ vs Δ con la unidad (línea discontinua gris horizontal) ocurre en $\Delta = \Delta_c$, que corresponde al valor crítico que determina cuál

de los dos exponenciales en la fórmula (45) dicta la tasa de decaimiento. Para $\Delta < \Delta_c$, el decaimiento exponencial se rige por una simple exponencial,

$$|\Psi_e|^2 \simeq |\Lambda(x)|^2 e^{-\bar{\Gamma}t/\hbar}. \quad (47)$$

Por otro lado, si $\Delta > \Delta_c$, el decaimiento exponencial es descrito por

$$|\Psi_e|^2 \simeq |\Lambda(x)|^2 e^{-\Gamma_1 t/\hbar}. \quad (48)$$

De hecho, podemos derivar una fórmula analítica para Δ_c utilizando la ecuación (46).

Después de algunos pasos algebraicos obtenemos que

$$\Delta_c = \sqrt{\frac{m}{\hbar^2}} \left[-\varepsilon_1 + \sqrt{\varepsilon_1^2 + \frac{\Gamma_1^2}{4}} \right]^{1/2}. \quad (49)$$

Observe que Δ_c depende sólo de la energía de resonancia ε_1 y de la anchura de resonancia Γ_1 del primer polo de energía, y por lo tanto es una característica del sistema. La figura 10 verifica la validez de las aproximaciones (47) y (48) según el valor de Δ en comparación con Δ_c . En la figura 10(a) mostramos que la función simple dada por la ecuación (47) concuerda con la parte lineal de la curva de decaimiento calculado a partir de la solución exacta cuando $\Delta < \Delta_c$. Además, en el caso $\Delta > \Delta_c$, podemos apreciar en la figura 10(b) un excelente acuerdo de la ecuación (48) con la parte lineal de la curva de decaimiento exacta.

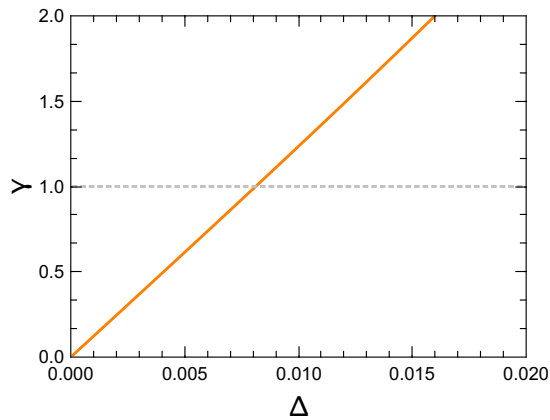


Figura 9. Razón $\gamma = \bar{\Gamma}/\Gamma_1$ como función de la anchura Δ . La intersección en la unidad (línea horizontal punteada) determina el valor crítico $\Delta_c = 0.0081 \text{ \AA}^{-1}$ para este sistema.

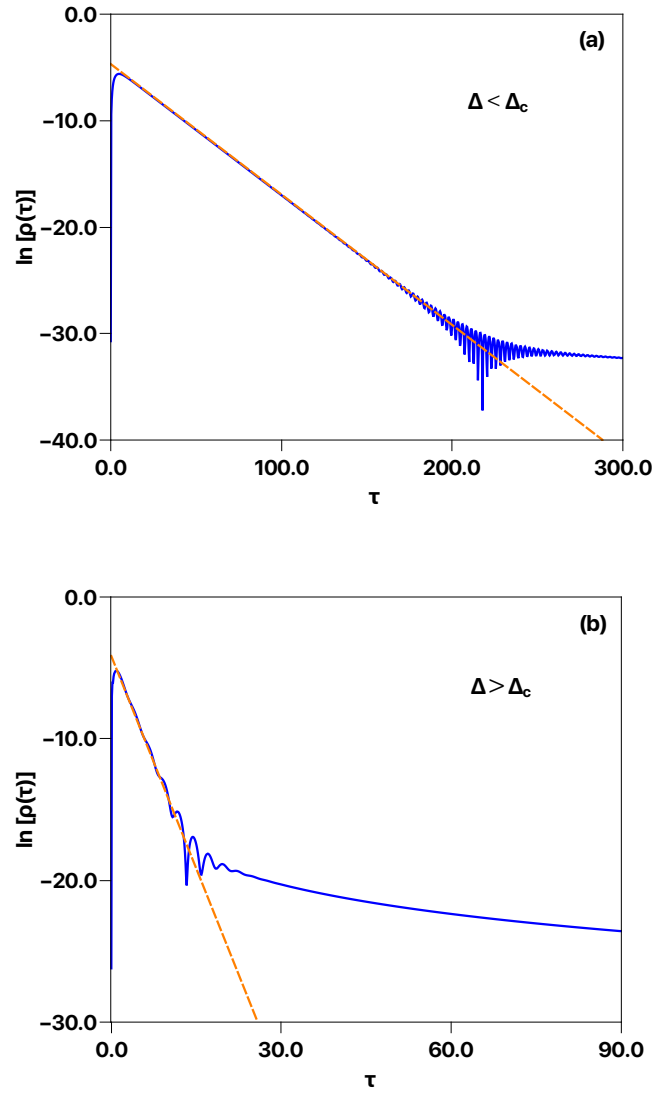


Figura 10. Comparación del cálculo exacto de $\ln \rho$ utilizando la ecuación (31) (línea sólida azul) con (a) los cálculos obtenidos de la ecuación (47) (línea punteada naranja) para el caso $\Delta < \Delta_c$ ($\Delta = 0.001$), y (b) los cálculos obtenidos con (48) (línea punteada naranja) para el caso $\Delta > \Delta_c$ ($\Delta = 0.01$).

De la ecuación (45), podemos derivar una expresión para la escala de tiempo relevante que rige la transición de la **acumulación-decaimiento** en el régimen exponencial, que corresponde al máximo de $\ln \rho_e$ calculado a partir de (45),

$$t_b = \left[\frac{2\bar{\tau}\tau_1}{\tau_1 - \bar{\tau}} \right] \ln \left(\frac{\tau_1}{\bar{\tau}} \right), \quad (50)$$

donde hemos definido $\bar{\tau} = \hbar/\bar{\Gamma}$ asociado a un estado “virtual” formado en el sistema. Støvneng y Hauge (1991) definieron numéricamente el tiempo de acumulación como el tiempo necesario para que $|\Psi(x, t)|^2$ alcance su valor máximo. El máximo de las curvas de la figura 6 obtenidas por inspección numérica se trazan en la figura 11 (símbolos), y se comparan con los valores calculados utilizando nuestra fórmula analítica para t_b , ecuación (50) (línea de puntos grises), donde se observa un excelente concordancia entre los resultados.

Observe el interesante paralelismo en la forma en que las cantidades Γ_1 y $\bar{\Gamma}$ contribuyen a la densidad de probabilidad en la ecuación (45), y la forma en que el tiempo de vida τ_1 y $\bar{\tau}$ participan en la ecuación (50). Lo hacen al mismo nivel que si fueran cantidades físicamente equivalentes. Sabemos que Γ_1 y τ_1 son, respectivamente, la anchura de resonancia y el tiempo de vida de un verdadero estado cuántico que es una solución de la ecuación de Schrödinger’s [ecuación (21)]. Aún cuando no obtuvimos $\bar{\Gamma}$ y $\bar{\tau}$ a partir de la solución de la ecuación de Schrödinger como un problema de eigenvalores, estas cantidades se comportan como si fueran respectivamente la anchura y el tiempo de vida de un estado cuántico real. Es por esto que asociamos a estas últimas cantidades como la anchura de resonancia y el tiempo de vida de un estado “virtual” que se forma debido al paquete incidente. Aunque la idea del estado virtual surgió de la similitud matemática con un estado cuántico real, aquí se convierte en clave para explicar las principales características del proceso de **acumulación-decaimiento**.

III.1.3 Decaimiento no-exponencial

En la sección anterior nos concentramos en estudiar las propiedades dinámicas de la función de onda en el régimen exponencial. Sin embargo, una vez que dicho régimen deja de dominar la dinámica en el dominio temporal, como puede apreciarse en la figura 7, ocurre una clara transición a otro tipo de decaimiento que se manifiesta a

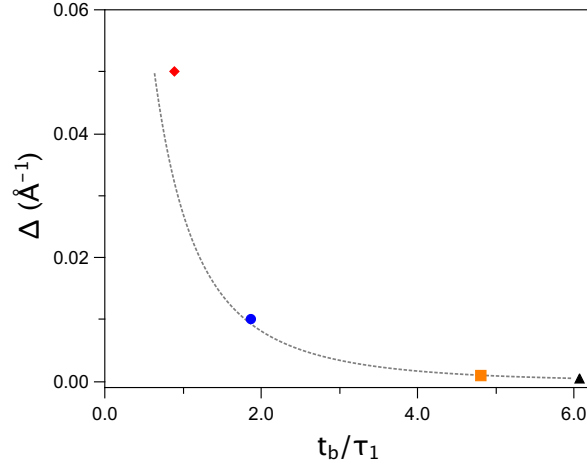


Figura 11. Tiempo de formación t_b (normalizado a τ_1) obtenido a partir del máximo de la figura 8 para diferentes valores de Δ : 0.0005 (triángulo negro) 0.001 (cuadro naranja), 0.01 (punto azul), and 0.05 (rombo rojo). Comparamos estos valores con aquellos obtenidos mediante la ecuación (50) (línea punteada gris).

un ritmo diferente (no-exponencial). Como es bien conocido, en los problemas de decaimiento existen distintos tipos de comportamiento de la función de onda en el régimen post-exponencial de tiempos muy largos (García-Calderón, 2010; Martorell *et al.*, 2008; Cordero y García-Calderón, 2010). Por ejemplo, en el caso de un paquete de ondas (gaussiano) dispersado por un potencial unidimensional, Miyamoto (2004) demostró que el comportamiento a tiempos largos de la función de onda obedece distintas leyes de potencia en el tiempo, las cuales dependen a su vez del momento asociado al estado inicial (a $t = 0$) dispersado. Con el propósito de elucidar acerca de la ley de potencia en el decaimiento de paquetes Lorentzianos truncados discutido en nuestro trabajo, exploraremos analíticamente la dependencia temporal de la función de onda en el régimen asintótico ($t \rightarrow \infty$). Específicamente, analizaremos el comportamiento en el régimen de tiempos largos de la contribución no-exponencial Ψ_{ne} dada por la ecuación (44), inspirados en las técnicas matemáticas del trabajo de García-Calderón (2010) que involucran los desarrollos asintóticos de las funciones de Moshinsky $M[y(q, t)]$. Se puede verificar que en el límite $t \rightarrow \infty$ tenemos $|y(q, t)| \gg 1$, y que el argumento de la función

de Moshinsky $M[y(q, t)]$ satisface que $-\pi/2 \leq \arg[y(q, t)] \leq \pi/2$, lo que nos permite utilizar el siguiente desarrollo en serie:

$$M[y(q, t)] \simeq -i\eta \left[\frac{1}{\alpha_0 q t^{1/2}} - \frac{i}{2} \frac{1}{\alpha_0^3 q^3 t^{3/2}} + \dots \right], \quad (51)$$

con $\eta = (4\pi i)^{-1/2}$. Sustituimos la ecuación (51) en (44) por $q = -k_+, k_-, -k_n, -k_n^*$, después de algunas manipulaciones algebraicas obtenemos,

$$\Psi_{ne} \simeq -i\eta \left[\frac{1}{\alpha_0} \Lambda_{-1/2}(x) \frac{1}{t^{1/2}} + \frac{i}{2\alpha_0^3} \Lambda_{-3/2}(x) \frac{1}{t^{3/2}} + \dots \right], \quad (52)$$

con

$$\Lambda_{-1/2}(x) = A_0 \left[\frac{\phi(x, k_-)}{k_-} - \frac{\phi(x, k_+)}{k_+} \right] - \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{D_n(x)}{k_n}, \quad (53)$$

$$\Lambda_{-3/2}(x) = A_0 \left[\frac{\phi(x, k_+)}{k_+^3} - \frac{\phi(x, k_-)}{k_-^3} \right] + \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{D_n(x)}{k_n^3}, \quad (54)$$

en donde enfatizamos la dependencia temporal de la función de onda $\Psi_{ne} \simeq a_1 \Lambda_1(x) t^{-1/2} + a_2 \Lambda_2(x) t^{-3/2} + \dots$, con coeficientes constantes, a_i . A continuación demostramos que la función $\Lambda_{-1/2}(x)$, la cual involucra la dependencia $t^{-1/2}$, se cancela exactamente en la solución Ψ_{ne} . Procedemos con la sustitución de los coeficientes $D_n(x)$ dados por (32) en la ecuación (53), en donde la descomposición en fracciones parciales nos lleva a

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{D_n(x)}{k_n} = \frac{A_0}{i} \left[\sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{u_n(0)u_n(x)}{k_n(k_+ - k_n)} - \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{u_n(0)u_n(x)}{k_n(k_- - k_n)} \right]. \quad (55)$$

Luego reescribimos (55) en términos de la función de onda estacionaria $\phi(x, k_{\pm})$, con ayuda de la ecuación (26), que nos permite obtener

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{D_n(x)}{k_n} = -A_0 \left[\frac{\phi(k_+, x)}{k_+} - \frac{\phi(k_-, x)}{k_-} \right], \quad (56)$$

lo cual nos conduce al resultado exacto: $\Lambda_{-1/2}(x) = 0$. Por lo tanto,

$$\begin{aligned} \Psi_{ne} &\simeq \frac{\eta}{2\alpha_0^3} \\ &\times \left(A_0 \left[\frac{\phi(x, k_+)}{k_+^3} - \frac{\phi(x, k_-)}{k_-^3} \right] + \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{D_n(x)}{k_n^3} \right) \times \frac{1}{t^{3/2}} + \dots, \end{aligned} \quad (57)$$

Es decir, la contribución de la función de onda en el régimen de tiempos largos es gobernada por $\Psi_{ne} \sim t^{-3/2}$. En la figura 12 comparamos la solución exacta dada por la ecuación (31) con el desarrollo asintótico (57), y se observa un excelente acuerdo en el régimen no-exponencial.

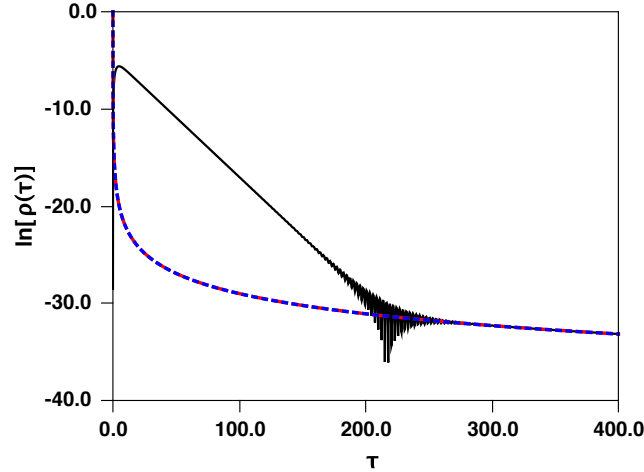


Figura 12. Evolución temporal de $\ln \rho$ utilizando la ecuación (31) (línea sólida negra) para un sistema con $\Delta = 0.001$. El comportamiento en el régimen no-exponencial es descrito exactamente por dos soluciones aproximadas: la solución asintótica basada en el desarrollo de estados del continuo (57) (línea punteada roja), así como la solución basada en un desarrollo en estados del continuo (65) (línea punteada azul).

Es importante destacar que nuestra descripción de la dinámica de la función de onda está basada en un formalismo no-hermitiano que involucra estados resonantes con energías complejas. Sin embargo, también es posible describir la dinámica utilizando un enfoque ortodoxo de mecánica cuántica (hermitiano) basado en un desarrollo de la función de onda en estados del continuo. A continuación describimos la dinámica de la evolución de paquetes Lorentzianos truncados en la región interna del potencial utilizando estados del continuo. Para esto hemos adaptado el procedimiento desarrollado en el trabajo de Brouard y Muga (1996), que nos permite escribir la solución del problema como:

$$\Psi_{ce}(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} \phi(x, k) C(k_0, k) e^{-i\alpha_0^2 k^2}. \quad (58)$$

En la ecuación (58) la función $\phi(x, k)$ representa la solución estacionaria a lo largo de la región interna, con coeficientes del desarrollo $C(k_0, k)$ definidos como,

$$C(k_0, k) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx'}{\sqrt{2\pi}} e^{-ikx'} \Psi(x', k_0, 0). \quad (59)$$

Al sustituir la condición inicial (3) en (59) obtenemos

$$C(k_0, k) = \sqrt{2\pi} A \left[\frac{2k_0}{(k + i\Delta)^2 - k_0^2} \right]. \quad (60)$$

La solución dependiente del tiempo se obtiene de sustituir la ecuación (60) en (58),

$$\begin{aligned} \Psi_{ce}(x, t) &= 2k_0 A \int_{-\infty}^{\infty} dk \phi(x, k) \\ &\quad \times \left[\frac{e^{-i\alpha_0^2 k^2 t}}{(k + i\Delta)^2 - k_0^2} \right]. \end{aligned} \quad (61)$$

Procedemos a obtener el comportamiento de la densidad de probabilidad en el régimen de tiempos largos de ecuación (61) mediante la aplicación del método de la fase estacionaria (Erdélyi, 1956). Para ello, primero sustituimos en (61) la solución estacionaria $\phi(x, k)$ para la región interna ($0 \leq x \leq L$) del potencial doble delta de Dirac dada por

$$\phi(x, k) = k \left[\frac{(k + i\kappa) e^{ik(x-L)} - i\kappa e^{-ik(x-L)}}{(k + i\kappa)^2 e^{-ikL} - (i\kappa)^2 e^{ikL}} \right], \quad (62)$$

y reescribimos (61) como

$$\Psi_C(x, k_0; t) = 2k_0 A \int_{-\infty}^{\infty} dk \mathcal{H}(x, k) k e^{-i\alpha_0^2 k^2 t}, \quad (63)$$

con

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(x, k) &= \left[\frac{(k + i\kappa) e^{ik(x-L)} - i\kappa e^{-ik(x-L)}}{(k + i\kappa)^2 e^{-ikL} - (i\kappa)^2 e^{ikL}} \right] \\ &\quad \times \left[\frac{1}{(k + i\Delta)^2 - k_0^2} \right]. \end{aligned} \quad (64)$$

Para obtener las contribuciones principales a la integral (63), desarrollamos en serie de Taylor $\mathcal{H}(x, k)$ alrededor de $k = 0$ *i.e.* $\mathcal{H}(x, k) = \sum_{n=0}^{\infty} [n!]^{-1} \mathcal{H}^{(n)}(x, 0) k^n$, en donde

$\mathcal{H}^{(n)} = \partial_k^n \mathcal{H}(x, k)|_{k=0}$. De la ecuación (63) podemos observar que las integrales gaussianas pueden ser evaluadas fácilmente, y como consecuencia el término $t^{-1/2}$ se cancela exactamente, dando como resultado

$$\begin{aligned} \Psi_{ce} \simeq & 2k_0 A(\pi)^{1/2} \\ & \times \left[\mathcal{H}^{(1)}(x, 0) \frac{1}{2(i\alpha_0^2)^{3/2}} \left(\frac{1}{t^{3/2}} \right) \right. \\ & \left. + \frac{1}{3!} \mathcal{H}^{(3)}(x, 0) \frac{3}{4(i\alpha_0^2)^{5/2}} \left(\frac{1}{t^{5/2}} \right) + \dots \right], \end{aligned} \tag{65}$$

en donde vemos que el término dominante de Ψ_{ce} en el régimen de tiempo largos muestra una dependencia de $t^{-3/2}$, tal como ocurre en el caso no-hermitiano Ψ_{ne} dado por (57). En la figura 12 se muestra una excelente concordancia en el régimen no-exponencial de los resultados obtenidos con la ecuación (65), basada en un enfoque hermitiano, con aquellos obtenidos con el desarrollo en estados resonantes (enfoque no-hermitiano).

Capítulo IV

Propagación en la región interna

IV.1 Antecedentes

En este capítulo abordaremos el problema de la propagación de frentes de onda y de paquetes de onda en la región interna de estructuras de tunelaje resonantes, desde sistemas simples de unas cuantas barreras de potencial hasta sistemas periódicos finitos de mayor extensión. La sola cuestión de la existencia o no de frentes de onda en el interior del sistema surgió como un tema de discusión desde hace décadas en el contexto de las investigaciones sobre los tiempos de tunelaje en estructuras resonantes. Jauho y Jonson, por ejemplo, en un estudio dinámico de dispersión de paquetes de onda, sostienen categóricamente que dichos frentes no existen (Jauho y Jonson, 1989), por otro lado, los estudios dinámicos basados en el modelo de obturador cuántico para diversas estructuras resonantes (García-Calderón y Rubio, 1997; Romo y Villavicencio, 1999; Villavicencio y Romo, 2000; García-Calderón *et al.*, 2009) han mostrado, invariablemente, la ausencia de propagación en la región interna. En lugar de propagación, lo que se ha observado en estos estudios es una dinámica en la cual la densidad de probabilidad evoluciona en el tiempo manteniéndose a todo tiempo espacialmente extendida a lo largo de toda la estructura cuántica. Incluso, analíticamente ha sido posible separar la dependencia espacial y temporal en la densidad de probabilidad, explicando con ello esta forma extendida de evolucionar. Ante estas evidencias, se ha dado por descontado que, simplemente no hay propagación en la región interna de una estructura resonante. Sin embargo, simulaciones numéricas de dispersión de paquetes gaussianos en sistemas

periódicos finitos exhiben una dinámica en la que se alcanza a apreciar algo parecido a una propagación de un paquete a lo largo de la región interna de una superred finita de 50 deltas de Dirac (Peisakhovich y Shtygashev, 2008b). Estos resultados parecen contradecir la postura de la no existencia de frentes de onda en el interior de estos sistemas.

Con el propósito de esclarecer bajo qué condiciones se presenta una evolución temporal sin propagación, a la cual nos referiremos en este capítulo como *régimen de evolución extendida* (en virtud de su extensión espacial a cualquier tiempo), y en qué situaciones se presenta una evolución con signos de propagación, a lo que llamaremos *régimen de evolución propagante*, dedicaremos este capítulo exclusivamente a presentar un estudio muy visual del comportamiento dinámico de soluciones de la ecuación de Schrödinger en el interior de diversas estructuras resonantes. Empezaremos, en la Sección IV.2, mostrando algunos casos de sistemas simples de unas cuantas barreras que ejemplifican la dinámica de evolución extendida. Posteriormente, utilizando ondas planas cortadas incidentes, en la Sección IV.3 mostraremos las etapas de evolución de la densidad de probabilidad en un sistema de 50 deltas de Dirac, similar al utilizado por Peisakhovich y Shtygashev (Peisakhovich y Shtygashev, 2008b). Finalmente, en la Sección IV.4, realizaremos un estudio sistemático que nos conduzca gradualmente desde el régimen de evolución extendida al régimen de evolución propagante, utilizando tanto ondas planas cortadas incidentes como paquetes de extensión finita.

IV.2 Régimen de evolución extendida

En esta sección ilustraremos a través de algunos ejemplos simples la evolución dinámica de la densidad de probabilidad tanto interna como externa, en un régimen en el cual dicha cantidad se encuentra distribuida a lo largo de toda la región interna a cualquier tiempo. Consideremos el caso simple de una estructura resonante de doble delta de Dirac simétrica con la condición inicial de onda plana cortada (ver figura 13). La solución analítica de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo para la región interna, $\Psi^i(x, k, t)$, está dada por la ecuación (67) del apéndice A.

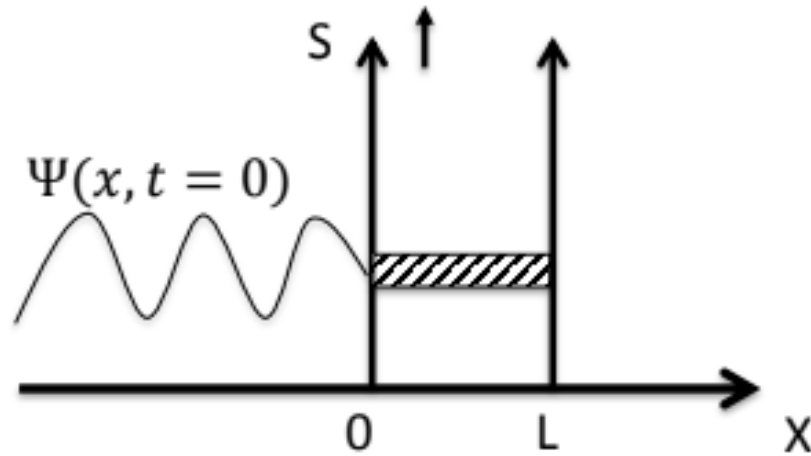


Figura 13. Condición inicial de onda plana cortada incidente en un potencial doble delta de Dirac.

Los parámetros del sistema son: intensidad, $\lambda = 7.2 \text{ eV \AA}$, y separación entre deltas, $w = 65 \text{ \AA}$, energía y ancho de la primera resonancia, $\epsilon_1 = 85.306 \text{ eV}$ y $\Gamma_1 = 16.544 \text{ meV}$, respectivamente. Para una energía de incidencia en la primera resonancia, $E_0 = 85.306 \text{ meV}$, en la figura 14 se presentan gráficas de densidad de probabilidad a diferentes tiempos cuyos valores se indican en la figura.

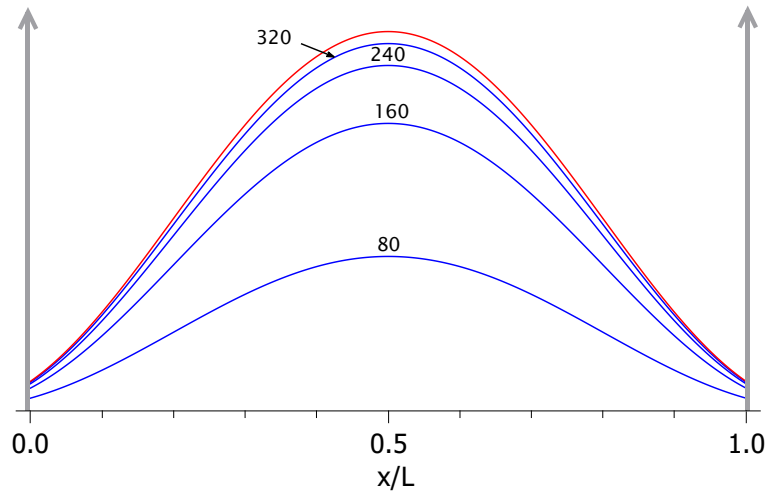


Figura 14. Comportamiento de la densidad de probabilidad a lo largo de la región interna para un sistema de doble delta de Dirac a diferentes tiempos (líneas azules) y energía de incidencia en la primera resonancia. Los valores de los tiempos se indican en la figura y están dados en fs. Se puede apreciar un proceso de crecimiento uniforme que tiende al valor estacionario (línea roja) al aumentar el tiempo. Los parámetros del potencial, así como la energía de incidencia se dan en el texto.

Como puede apreciarse claramente, las curvas aparecen extendidas en toda la región interna a cualquier tiempo, es decir, la dinámica consiste en que $|\Psi^i(x, k, t)|^2$ se incrementa uniformemente durante el régimen transitorio hasta alcanzar a la situación estacionaria. Es evidente que no existe el menor indicio de un frente de ondas propagándose de izquierda a derecha en el interior de esta estructura cuántica. Esta ausencia de propagación se puede sustentar analíticamente, pues en la aproximación de una resonancia aislada, $|\Psi^i(x, k, t)|^2$ se puede expresar como un producto de la parte espacial, $|\phi(x, k)|^2$, por la parte temporal $\eta_1(t)$, tal y como se expresa en la ecuación (72) del apéndice A. Esta separabilidad de la parte espacial y temporal explica claramente el crecimiento uniforme de la densidad de probabilidad exhibida en la figura 14, donde la forma de cada curva es siempre la de la densidad de probabilidad estacionaria, $|\phi(x, k)|^2$ vs x , modulada por el factor temporal, $\eta_1(t) = (1 - e^{\Gamma_1 t/2\hbar})^2$. Como se muestra en la ecuación (77), el comportamiento temporal de la densidad de probabilidad sigue, de

hecho, una ley de crecimiento análoga a la ley de carga de un capacitor en un circuito- RC : $Q(t)/Q_\infty = 1 - e^{-t/\tau_0}$. Con base en esta analogía, el sistema resonante de doble barrera es una especie de “capacitor cuántico” (Romo y Villavicencio, 1999).

Como segundo ejemplo, consideremos un sistema de triple delta de Dirac, con las mismas intensidades λ y separaciones w que en el ejemplo anterior. Para incidencia en la primera resonancia, en la figura 15 se presentan curvas de $|\Psi^i(x, k, t)|^2$ vs x a diferentes tiempos, los cuales se indican en la figura en unidades de fs.

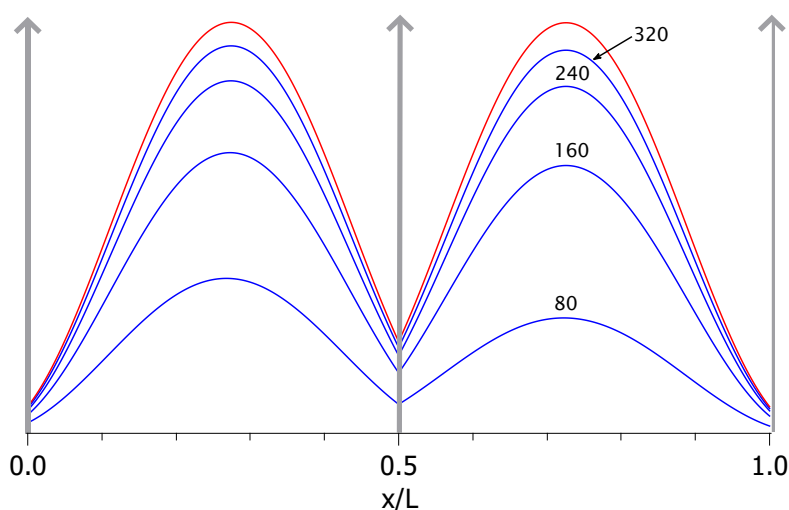


Figura 15. Lo mismo que en la figura 14 para un sistema de triple delta de Dirac con energía de incidencia en la primera resonancia. Se aprecia también un crecimiento uniforme de la densidad de probabilidad en cada pozo tendiendo al valor estacionario (línea roja) conforme el tiempo aumenta.

Al igual que en el ejemplo anterior de doble delta, en este sistema también la dinámica consiste en un crecimiento gradual extendido en toda la región interna. La densidad de probabilidad interna, $|\Psi^i(x, k, t)|^2$, crece simultáneamente en ambos pozos en forma gradual, tendiendo al valor estacionario, $|\phi(x, k)|^2$ (línea roja) cuando $t \rightarrow \infty$. Es importante mencionar que en este caso las resonancias aparecen distribuidas como “dobletes”, es decir, el espectro de resonancias se encuentra distribuido por pares. Por lo tanto, en el desarrollo que aparece en la solución formal, ecuación (67), deben usarse

dos términos, los asociados a las dos primeras resonancias.

Con el propósito de mostrar en una misma figura los comportamientos sincronizados de las densidades de probabilidad interna y externa, en la figura 16 se muestran gráficas tanto de $|\Psi^i(x, k, t)|^2$ vs x (panel izquierdo) como de $|\Psi^e(x, k, t)|^2$ vs x (panel derecho) a los mismos tiempos, para la estructura cuántica de doble delta de Dirac del primer ejemplo de esta sección, pero a una energía ligeramente por debajo de la resonancia, $E_0 = \epsilon_1 - 2\Gamma_1 = 52.218$ meV.

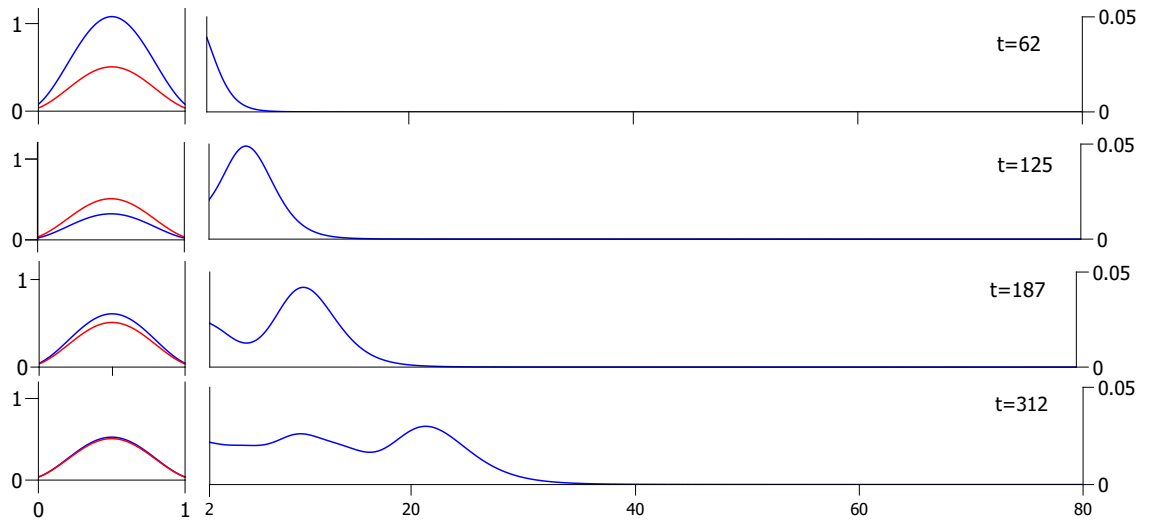


Figura 16. Comportamiento de la densidad de probabilidad en la región interna $|\Psi^i(x, k, t)|^2$ (panel izquierdo, líneas azules), sincronizado con la evolución de la densidad de probabilidad en la región externa $|\Psi^e(x, k, t)|^2$ (panel derecho, líneas azules) a cuatro diferentes tiempos (indicados a la derecha en fs), para una energía de incidencia fuera de resonancia. Las densidad de probabilidad estacionaria en la región interna se incluye para comparación (líneas rojas).

A diferencia de lo que ocurre en la región interna, en la región externa de transmisión, la solución externa, dada por la ecuación (68), da como resultado una densidad de probabilidad con un claro frente de ondas que se propaga con una velocidad similar a la de una partícula clásica con la misma energía. En la región interna la densidad de probabilidad varía de manera extendida como en los dos ejemplos anteriores, aunque en este caso realiza unas oscilaciones en “modo de respiración” (“breathing mode”, como

se le llamó en (García-Calderón *et al.*, 2009) a esta manera de oscilar de $|\Psi^i(x, k, t)|^2$. Como se menciona en el apéndice A después de la ecuación (74), la frecuencia de estas oscilaciones depende de la diferencia entre la energía de incidencia y la de la resonancia, $\omega = |E_0 - \epsilon_1|/\hbar$.

En la región externa, en cambio, vemos en la figura 16 que hay un frente de ondas con un máximo principal propagándose de izquierda a derecha. Esta propagación no es de sorprender ya que en este caso, en $|\Psi^e(x, k, t)|^2$ no es separable la dependencia espacial de la temporal. Además de esta no-separabilidad, los argumentos de las funciones de Moshinsky dados en la ecuación (69), involucran el factor $(x - vt)$, el cual es característico de una onda viajera a velocidad v (en este caso a una velocidad $v = \hbar k/m$). La figura 16 muestra con claridad el contraste entre la dinámica en la región interna comparada con la de la región externa. Estos comportamientos dinámicos en estas estructuras resonantes simples ya han sido extensivamente estudiados en los trabajos de Romo y Villavicencio (Villavicencio y Romo, 2000; Romo y Villavicencio, 2001). Se incluyen aquí como ejemplos típicos de lo que hemos llamado en esta sección “evolución extendida”, caracterizada por una ausencia total de propagación en la región interna. Como se mencionó anteriormente, esta ausencia de propagación, exhibida en estructuras resonantes de unas cuantas barreras de potencial, ha contribuido a creer que en la región interna, en general no existe propagación. Sin embargo, de acuerdo con la hipótesis que formulamos para este proyecto de tesis, esperamos que en sistemas con un número N de barreras de potencial suficientemente grande, las interferencias entre los distintos estados resonantes del sistema podrían dar lugar a una densidad de probabilidad con una estructura propagante. En la siguiente sección calcularemos $|\Psi^i(x, k, t)|^2$ vs x en sistemas periódicos finitos de mayor longitud y cantidad N de deltas de Dirac.

IV.3 Régimen de evolución propagante

En el trabajo de Peisakhovich y Shtygashev (Peisakhovich y Shtygashev, 2008b) se consideran sistemas que consisten en una cadena periódica de $N = 50$ Deltas de Dirac sobre la cual hacen incidir paquetes de ondas gaussianos de distintas anchuras y energías. En algunas de sus gráficas es posible apreciar un pulso deformado de estructura compleja propagándose en el interior del sistema, que se refleja parcialmente al llegar al extremo derecho como si rebotara, parecido a una partícula clásica. Una pregunta natural es ¿por qué razón se observa propagación en el interior del sistema utilizado por estos autores y no se observa signo alguno de propagación en la región interna en los sistemas que utilizamos como ejemplos en la sección anterior? Podría pensarse que esto se debe quizá a que usamos una condición inicial diferente (onda plana cortada en vez de paquete gaussiano).

Con el propósito de clarificar esta aparente contradicción, en esta sección realizaremos cálculos de densidad de probabilidad en la *aproximación de una minibanda* para una cadena periódica de 50 Deltas de Dirac utilizando parámetros similares a los de los autores mencionados, y la misma condición inicial que en la sección previa. La aproximación de una minibanda consiste en tomar un subconjunto de términos de los desarrollos en serie dados en las soluciones formales (67) y (68), igual al número de estados de la minibanda que contiene a la energía de incidencia. Consideremos la cadena periódica de $N = 50$ deltas de Dirac de intensidad $\lambda = 1.8 \text{ eV \AA}$, con una separación de $w = 10 \text{ \AA}$ entre cada par de deltas vecinas. El factor de masa efectiva en este caso se usa como $m^*/m = 1.0$, o sea, se usa la masa del electrón tal cual ¹. Como las minibandas contienen $N - 1$ resonancias, en nuestro ejemplo tomaremos 49 términos

¹La razón por la cual estaremos cambiando la masa efectiva y los parámetros del sistema en los diversos ejemplos de este y el siguiente capítulo, es simplemente para ser consistente con los parámetros de los diferentes autores a los cuales nos estemos apegando en nuestros cálculos.

de las series en las soluciones formales dadas en las ecuaciones (67) y (68). Al igual que en el trabajo de Peisakhovich y Shtygashev (Peisakhovich y Shtygashev, 2008b), utilizaremos energías de incidencia en la tercera minibanda del sistema. En particular, consideraremos una energía aproximadamente en el centro y otra energía de incidencia en la orilla izquierda de la minibanda mencionada, tal como se ilustra con flechas de color en la gráfica de coeficiente de transmisión en la figura 17.

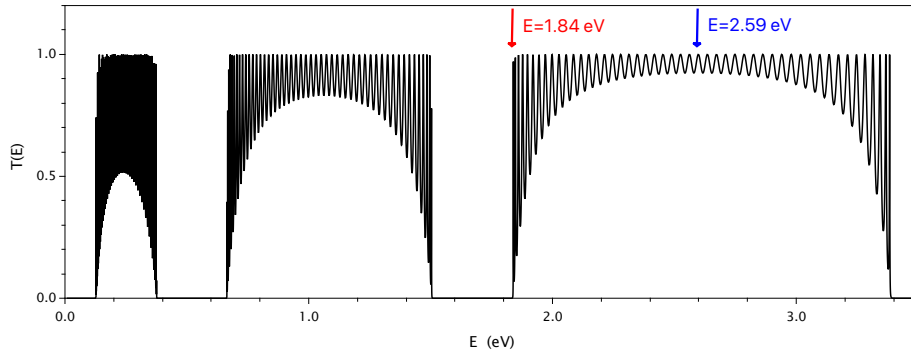


Figura 17. Coeficiente de transmisión para un sistema periódico de 50 deltas de Dirac a energías en un intervalo que incluye a las primeras tres minibandas. Las flechas de color rojo y azul indican respectivamente las energías de incidencia en la orilla izquierda y en el centro de la minibanda 3 que se van a utilizar en los cálculos dinámicos de la densidad de probabilidad. Los parámetros se indican en el texto.

Tanto para el caso de la energía de incidencia en el centro de la minibanda, $E_0 = 2.598$ eV, como para incidencia en la orilla izquierda de la minibanda $E_0 = 1.839$ eV, en la figura 18 se presentan los resultados del cálculo de la densidad de probabilidad dependiente del tiempo, $|\Psi^i(x, k, t)|^2$ vs x , para cuatro diferentes tiempos cuyos valores se indican en cada gráfica en unidades de *tiempos libres*. Estas unidades de tiempo las estaremos utilizando en los cálculos del resto de este capítulo y el siguiente, las cuales equivalen al tiempo que tarda una partícula libre en recorrer la longitud L del sistema a la velocidad $v = \hbar k/m$. Denotaremos por τ_f a este tiempo libre, el cual obviamente cambia cada vez que modifiquemos la energía de incidencia y la longitud del sistema.

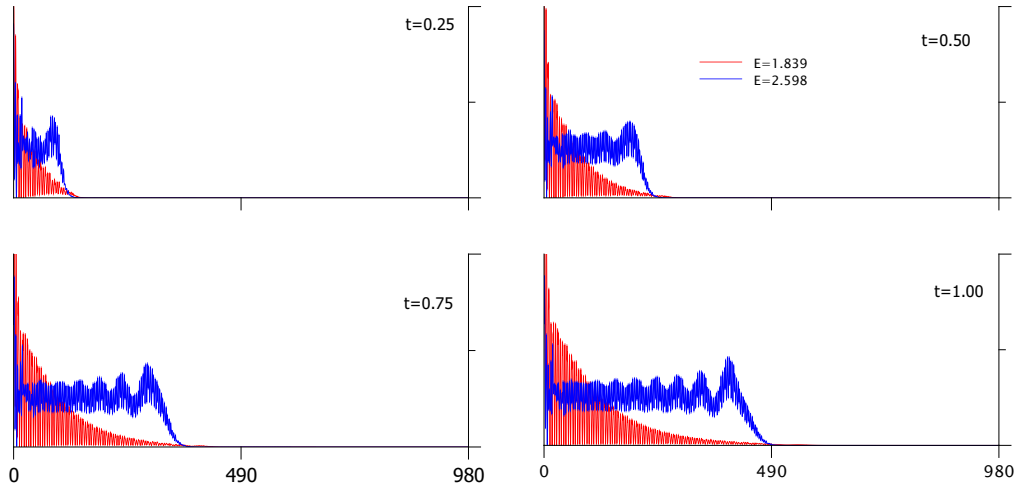


Figura 18. Evolución temporal de la densidad de probabilidad en la región interna para un sistema periódico de 50 deltas de Dirac a dos diferentes energías de incidencia: una en el centro de la tercera minibanda, $E_0 = 2.598$ eV (línea azul), y otra en la orilla izquierda de dicha minibanda, $E_0 = 1.839$ eV (línea roja). Los valores de los tiempos se indican en la figura en unidades de tiempos libres, τ_f . Los parámetros del potencial se dan en el texto. Para incidencia en el centro de la minibanda se aprecia un claro frente de ondas propagándose de izquierda a derecha, no así para incidencia en la orilla de la minibanda.

En el caso de incidencia en el centro de la minibanda se puede identificar claramente un frente de ondas viajando de izquierda a derecha en el interior de la estructura cuántica (líneas azules). Esto contrasta dramáticamente con los resultados que obtuvimos en la sección previa para sistemas cortos en los que no se pudo apreciar signo alguno de propagación. Nótese que no hemos cambiado nada en el cálculo de este caso con respecto a los de la sección anterior, sólo el número N de deltas y por lo tanto el número $N - 1$ de términos en la solución $\Psi^i(x, k, t)$. Nótese también que esta estructura viajera ocurre a pesar de que las funciones de Moshinsky en la solución interna utilizada no tienen dependencia explícita de la posición. La dependencia en la posición se encuentra en las funciones de onda estacionarias que aparecen en la solución formal (67) multiplicando a cada función de Moshinsky, funciones estacionarias que tienen una forma fija a lo largo de toda la estructura. Dado que estas últimas son de naturaleza estacionaria ¿cómo puede haber una estructura viajera si la dependencia espacial

aparece sólo en funciones fijas que no varían con el tiempo? El punto crucial aquí está en las interferencias cruzadas que ocurren entre los diferentes términos del desarrollo en (67) correspondientes a las distintas resonancias de la minibanda, los cuales al interferir entre ellas logran “moldear” una estructura propagante en la región interna.

Es importante que la energía de incidencia se encuentre centrada en la minibanda para asegurar que las diferentes componentes del paquete incidente sean transmitidos de manera efectiva través del sistema. Cuando la energía de incidencia, en lugar de estar centrada se encuentra en una orilla de la minibanda, ocurre la reflexión de una importante cantidad de componentes del paquete de ondas incidente, las cuales se reflejan hacia la parte izquierda del potencial y no alcanzan ni siquiera a ingresar al interior del sistema, dando como resultado una densidad de probabilidad con una estructura “enrarecida” como la que aparece en la figura 18 (línea roja). Como puede apreciarse, en este último caso no se produce un frente de ondas nítido como en el caso de incidencia en el centro de la minibanda, en lugar de ello aparece una estructura oscilatoria con una cola que se extiende a lo largo de la región interna a una aparente velocidad similar a la del frente de ondas del caso de incidencia en el centro de la minibanda.

Resulta interesante notar que el tiempo que le tomó al frente de ondas en llegar a la orilla derecha del sistema, $x = L = 490 \text{ \AA}$, es aproximadamente el tiempo que tardaría una partícula libre con esa energía en recorrer la longitud del sistema, a la cual le tomaría un tiempo de $t_f = L/v$, donde $v = \hbar k/m$. Parecería que la onda transmitida prácticamente se propagó sin retraso a través del sistema. Sin embargo, veremos más adelante que éste no es siempre el caso.

Con el propósito de ver también lo que pasa en la región externa, extendemos ahora el cálculo a un tiempo igual al doble del tiempo libre. En la figura 19 se muestran los cálculos correspondientes a cuatro diferentes tiempos mayores que el tiempo libre.

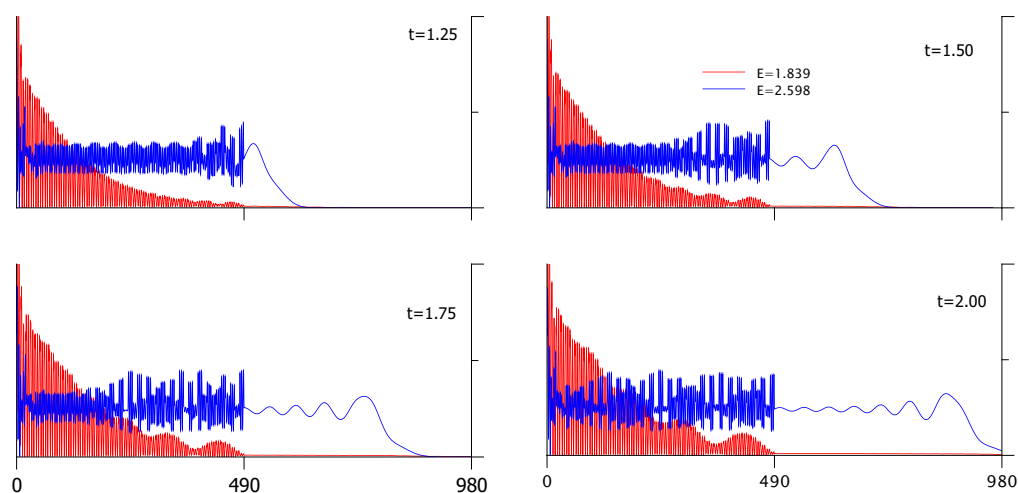


Figura 19. Continuación de la evolución de la figura 18 para otros cuatro tiempos (mayores que τ_f e indicados en la figura). Se aprecia el nacimiento del frente de ondas de la región externa y una estructura compleja que se refleja al mismo tiempo en la parte interna.

Podemos ver que por el lado derecho del sistema emerge un claro frente de ondas con oscilaciones suaves, libre de las interferencias complicadas que se producen en la región interna, similar al del doble delta de la parte derecha de la figura 16. La velocidad del frente de ondas externo prácticamente coincide con la velocidad de una partícula libre a esa energía. En la región interna se alcanza a apreciar una estructura que viaja de regreso como si hubiera ocurrido un “rebote” en la orilla derecha del sistema.

Con el fin de comparar las posiciones instantáneas del frente de ondas (tanto en la región interna como en la región externa) con las posiciones de una partícula libre moviéndose con la misma energía, en la figura 20 mostramos las posiciones del máximo principal del frente de ondas a diferentes tiempos (rectángulos rojos), comparadas con las posiciones de la partícula libre a los mismos tiempos (círculos negros). Las líneas continuas que unen los puntos en cada curva se incluyen sólo para ayuda visual en las gráficas. La curva correspondiente a los frentes de onda resultó ser una línea recta, similar a la del caso libre, incluso con aproximadamente la misma pendiente. Esto nos indica que el frente de ondas se propaga con velocidad similar a una partícula libre.

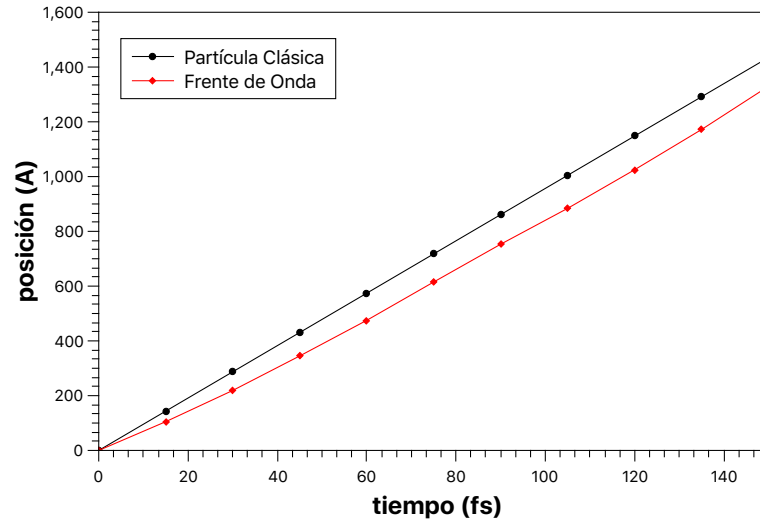


Figura 20. Comparación de las posiciones instantáneas (rombos rojos) del máximo principal del frente de ondas, medidas directamente en las gráficas de $|\Psi^i(x, k, t)|^2$ vs x para la energía de incidencia $E_0 = 2.598$ eV, con las correspondientes posiciones de una partícula libre, $x = \hbar kt/m$, a los mismos tiempos (círculos negros). El frente de ondas se mueve en el interior de la estructura a una velocidad similar a la de una partícula libre de la misma energía.

Como segundo ejemplo, consideremos de nuevo el mismo sistema periódico de $N = 50$ deltas de Dirac, pero a diferencia del trabajo de Peisakhovich y Shtygashev (2008b), ahora utilizaremos energías de incidencia en la primera minibanda del sistema. Una energía se elige aproximadamente en el centro de la minibanda, $E = 0.2119$ eV, y otra en la orilla izquierda de la minibanda, $E = 0.1272$ eV, tal como se ilustra con flechas de color en la gráfica de coeficiente de transmisión en la figura 21.

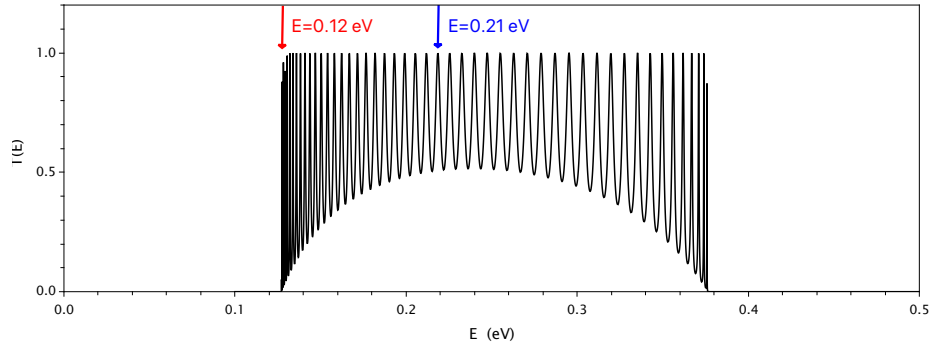


Figura 21. Lo mismo que en la figura 17, pero en un intervalo de energías centrado en la primera minibanda. Las flechas de color indican las energías de incidencia a utilizar en el cálculo de la densidad de probabilidad dependiente del tiempo en las dos figuras siguientes.

Las gráficas que se presentan en las figuras 22 y 23 son totalmente análogas a las que se presentaron en las figuras 18 y 19, pero para energías de incidencia en la primera minibanda como se indica en la gráfica de coeficiente de transmisión de la figura 21. La descripción es exactamente la misma, con la diferencia de que ahora hay un retraso considerable de las ondas transmitidas con respecto al caso libre. Podemos notar que prácticamente se requiere el doble del tiempo (en unidades de tiempos libres) para que el frente de ondas llegue al lado derecho del sistema.

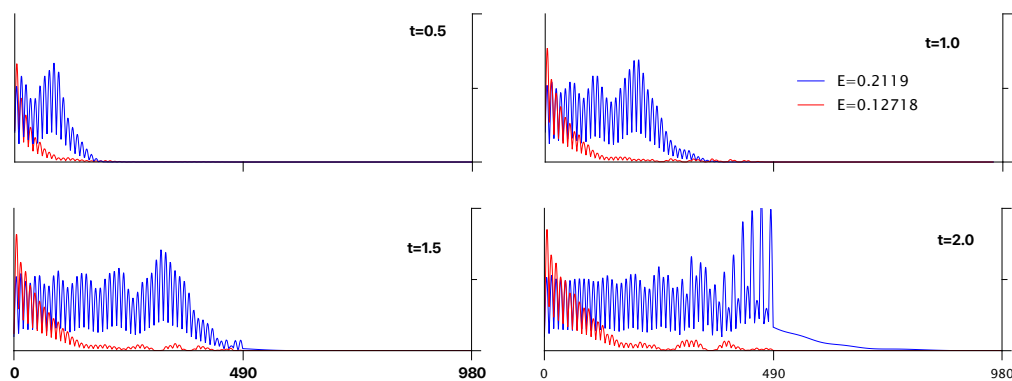


Figura 22. Evolución temporal de la densidad de probabilidad en la región interna para un sistema periódico de 50 deltas de Dirac a dos diferentes energías de incidencia: una en el centro de la primera minibanda, $E = 0.2119$ eV (línea azul), y otra en la orilla izquierda de dicha minibanda, $E = 0.1272$ eV (línea roja). Los valores de los tiempos se indican en la figura en unidades de tiempos libres, τ_f .

$$E = 0.1272 \text{ eV}$$

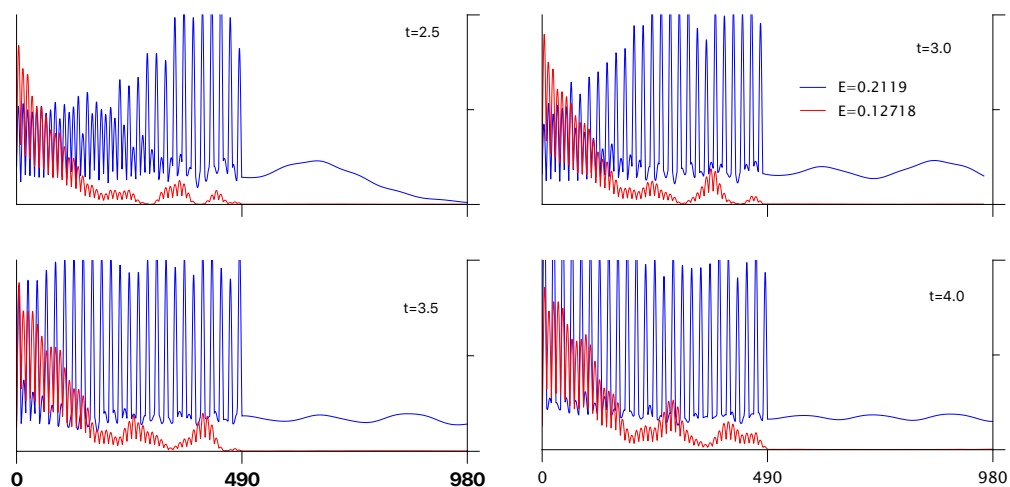


Figura 23. Continuación de la evolución de la figura 22 para otros cuatro tiempos (mayores que $2\tau_f$ e indicados en la figura).

Con el fin de comparar la velocidad del frente de ondas tanto en la región interna como en la región externa con la posición de una partícula libre moviéndose con la misma energía, en la figura 24 mostramos la relación entre posición y tiempo para el máximo principal del frente de ondas (rectángulos rojos), comparadas con las posiciones de la partícula libre a los mismos tiempos (círculos negros). Las líneas continuas que unen los puntos en cada curva se incluyen para ayuda visual en las gráficas.

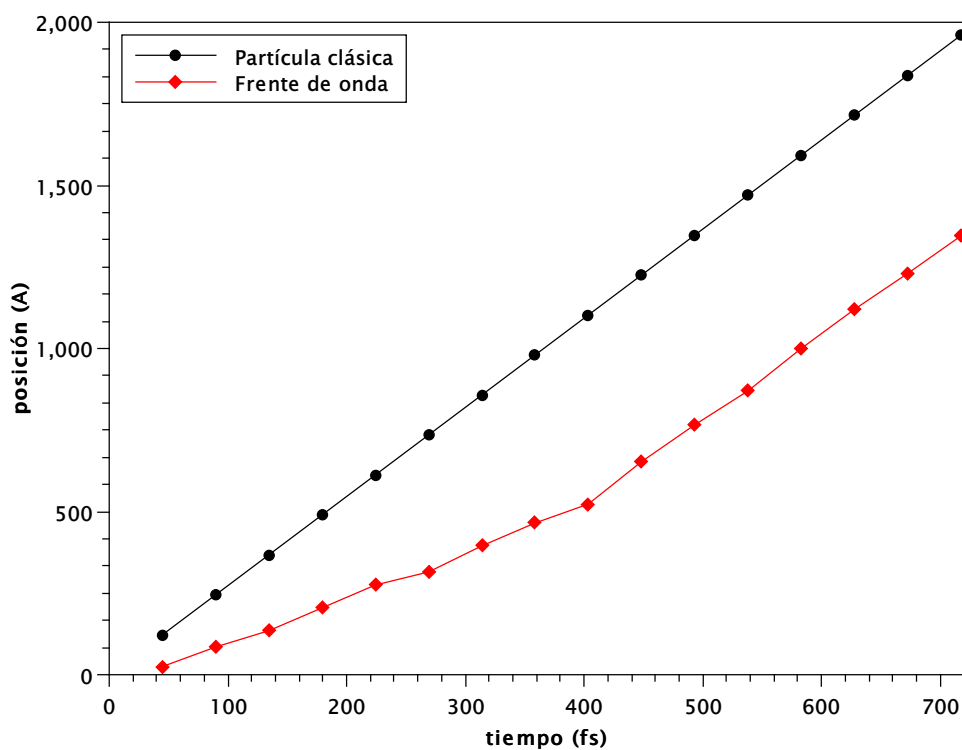


Figura 24. Comparación de las posiciones instantáneas (rombos rojos) del máximo principal del frente de ondas, medidas directamente en las gráficas de $|\Psi^i(x, k, t)|^2$ vs x y de $|\Psi^e(x, k, t)|^2$ vs x , para la energía de incidencia en el centro de la primera minibanda, $E = 0.2119$ eV, con las correspondientes posiciones de una partícula libre, $x = \hbar kt/m$, a los mismos tiempos (círculos negros). Se aprecia un retraso considerable entre las posiciones instantáneas del frente de onda con respecto a las de la partícula libre.

IV.4 Transición del régimen de evolución extendida al régimen de propagación

En esta sección investigaremos la dependencia de la evolución de la densidad de probabilidad interna respecto al número total N de deltas, o bien de la longitud $L = Nw$ del sistema, mediante un estudio sistemático que nos permita visualizar la transición del régimen de evolución extendida al régimen de propagación.

En las figuras 25, 26, 27, 28, 29, y 30, se presenta la evolución de la densidad de probabilidad a cuatro distintos tiempos, para $N = 2, 4, 8, 12, 24$ y 48 deltas, respectivamente. Para el caso $N = 2$, podemos ver que la densidad de probabilidad se encuentra a todo momento extendida a lo largo de todo el sistema y se incrementa monótonamente con el tiempo. Se trata de un caso con ausencia total de propagación como el que mostramos en la sección IV.2.

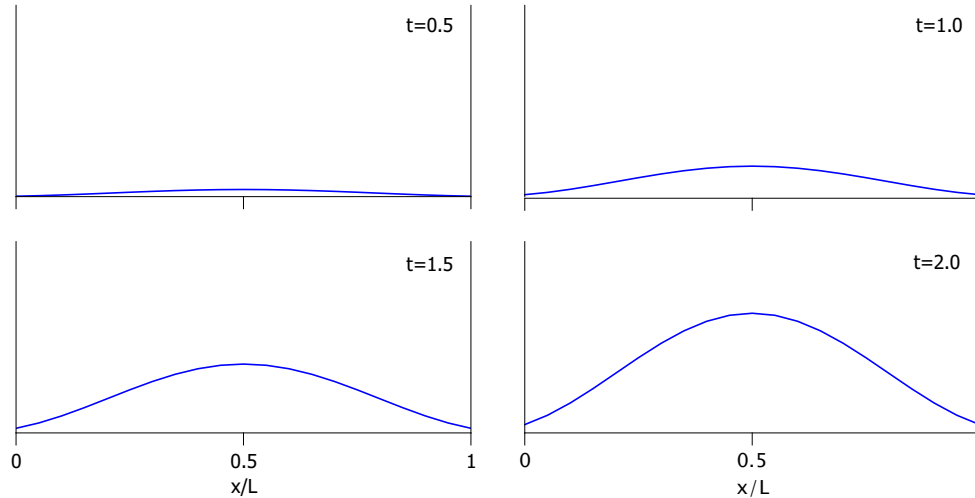


Figura 25. Evolución temporal de la densidad de probabilidad a lo largo de la región interna para un sistema simétrico de 2 deltas de Dirac usando la condición inicial de onda plana cortada, para energía de incidencia en la primera resonancia, $E = 0.0852$ eV. Se muestra un crecimiento uniforme de la densidad de probabilidad a lo largo de la región interna a los diferentes tiempos indicados en la figura en (unidades de τ_f). Los parámetros del potencial son: intensidad de las deltas, $\lambda = 7.0$ eV Å, separación entre las deltas, $w = 10.0$ Å, masa efectiva, $m^* = 1.0 m$.

Esto no es de sorprender si se toma en cuenta que en la aproximación de una resonancia la solución analítica formal es separable la parte espacial de la parte temporal de tal forma que la densidad de probabilidad se puede escribir como el producto (72).

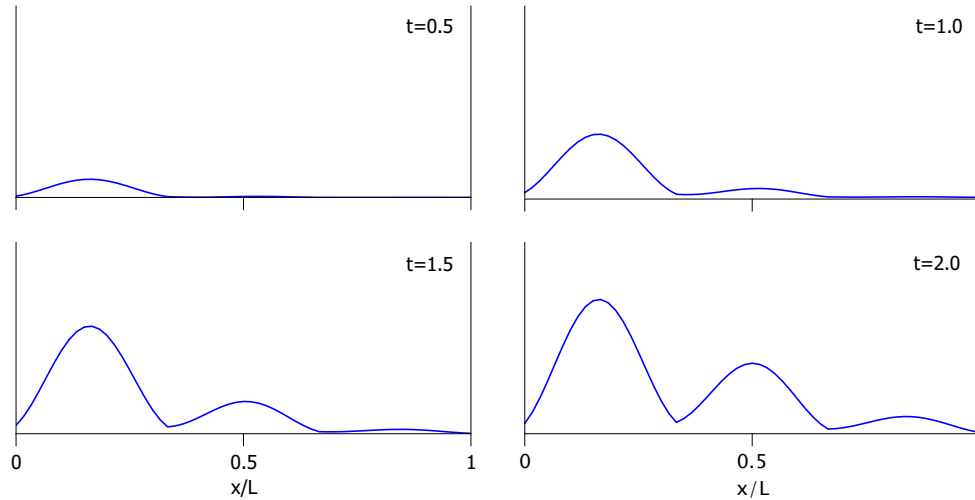


Figura 26. Lo mismo que en la figura anterior para un sistema periódico de 4 deltas de Dirac de la misma intensidad λ y separación w y misma energía de incidencia. Notamos que el llenado es asimétrico con un mayor crecimiento en el lado izquierdo del sistema

Duplicando el número de deltas, en la figura 26 se grafica la densidad de probabilidad para un sistema de cuatro deltas de Dirac con las mismas intensidades λ y separaciones w . A diferencia del caso anterior, se puede apreciar que la densidad de probabilidad crece en el interior del sistema de manera asimétrica, con un llenado preferencial de los pozos a la izquierda del sistema y en menor medida a la derecha. Sin embargo, la dinámica es similar a la del caso anterior de dos deltas de Dirac en el sentido de que en cada punto x la densidad de probabilidad experimenta un crecimiento monótono, aunque ciertamente sesgado hacia el lado izquierdo del sistema. En este caso las minibandas constan de tres resonancias, y al incluir tres términos resonantes en la suma de la solución formal (67), no se tiene la separabilidad en la densidad de probabilidad del caso anterior sino que los tres estados mencionados interfieren entre sí originando la asimetría exhibida por las curvas en la figura 26. Nótese que en la función de onda la

parte espacial se encuentra factorizada o separada de la parte temporal en cada término individual, sin embargo, al calcular la densidad de probabilidad aparecen términos de interferencia que mezclan las dependencias espacial y temporal.

Duplicando de nuevo el número de deltas, en la figura 27 se muestra la evolución de la densidad de probabilidad para $N = 8$ deltas. En este caso se aprecia ya una dinámica de llenado gradual de izquierda a derecha, que parece sugerir, aunque de manera burda, un desplazamiento de izquierda a derecha del “bulto” de la densidad de probabilidad. Podríamos decir que se trata ya de un incipiente signo de propagación, pues más que un crecimiento vertical de la densidad de probabilidad en cada pozo como ocurre en los dos casos previos, visualmente se aprecia más bien un movimiento lateral de un lado a otro del sistema.

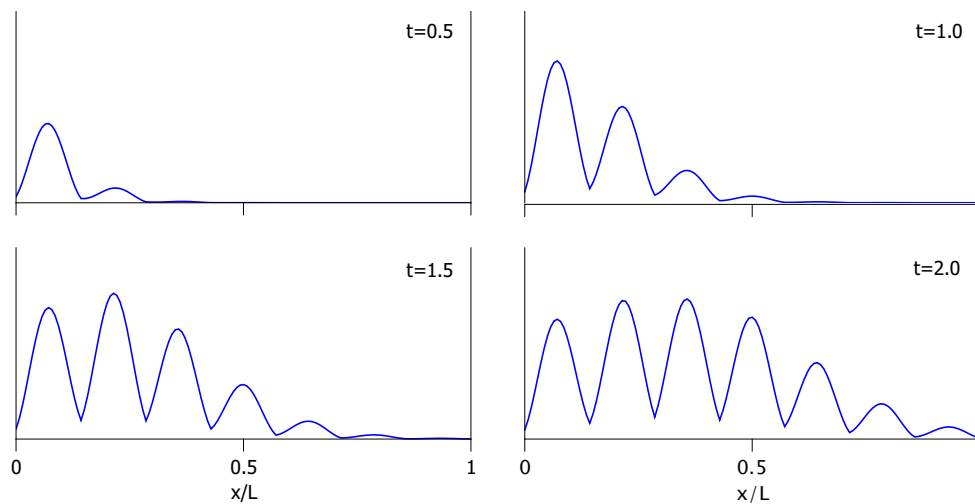


Figura 27. Lo mismo que en la figura anterior para un sistema periódico de 8 deltas de Dirac de la misma intensidad λ y separación w y misma energía de incidencia. Aquí ya se manifiestan los primeros signos de propagación.

Este efecto se aprecia mejor en la figura 28 para $N = 12$ deltas, donde en cada una de las cuatro gráficas mostradas en la figura se puede ubicar visualmente un punto en cada gráfica que divide la región interna en una parte llena a la izquierda y una parte totalmente vacía a la derecha. Conforme aumenta el tiempo, dicho punto imaginario

se desplaza de izquierda a derecha hasta llegar al extremo derecho del sistema en el tiempo $t = 2.0 \tau_f$.

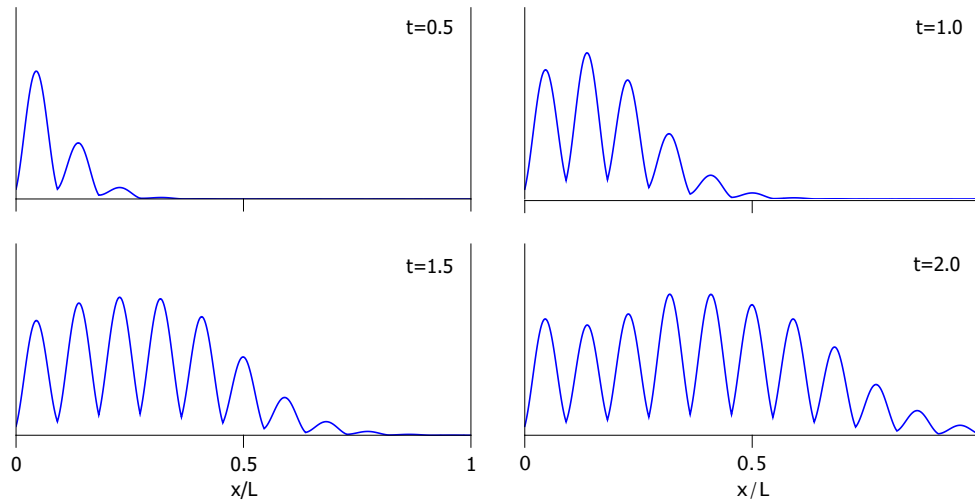


Figura 28. Lo mismo que en la figura anterior para un sistema periódico de 12 deltas de Dirac de la misma intensidad λ y separación w y misma energía de incidencia.

Finalmente, para $N = 24$ y 48 deltas, se presentan los resultados en las figuras 29 y 30, respectivamente. En estos últimos casos se aprecia una franca propagación, no solamente del punto imaginario antes referido, sino también se aprecia una envolvente oscilatoria con la formación de un máximo principal que modula a varias oscilaciones secundarias. Con el fin de apreciar más claramente la envolvente oscilatoria de la figura 30, se trazó una línea gruesa discontinua color naranja que pasa por todos los máximos locales. Nótese que la estructura de esta envolvente es similar a la del frente de ondas de la región externa.

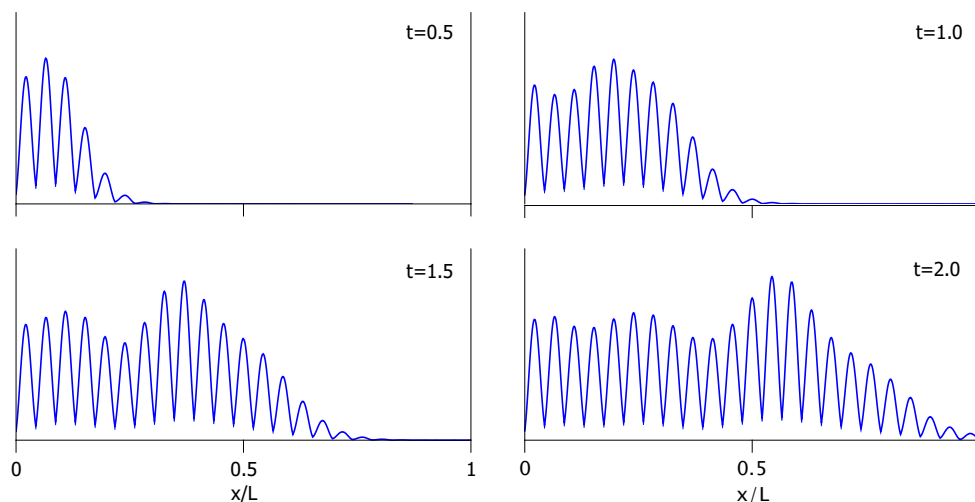


Figura 29. Lo mismo que en la figura anterior para un sistema periódico de 24 deltas de Dirac de la misma intensidad λ y separación w y misma energía de incidencia. La propagación de un frente de onda se aprecia claramente.

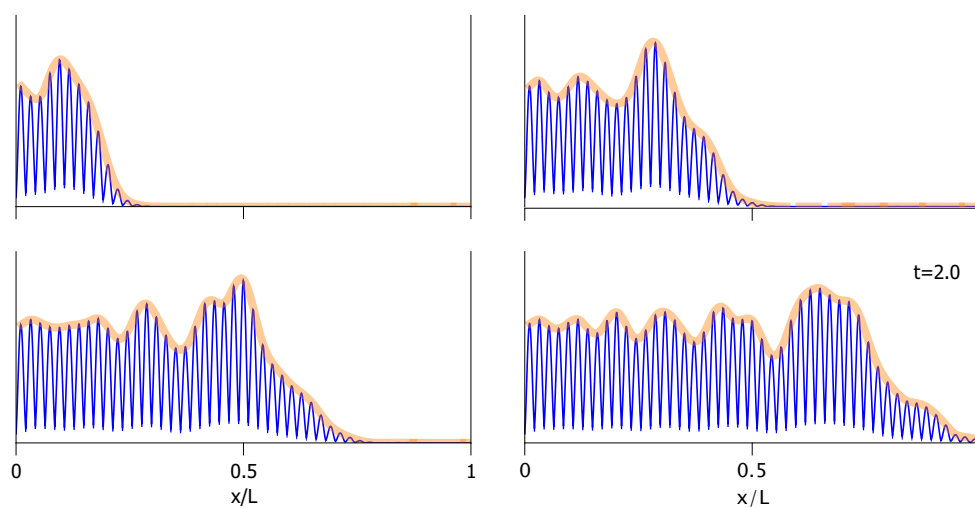


Figura 30. Lo mismo que en la figura anterior para un sistema periódico de 48 deltas de Dirac de la misma intensidad λ y separación w y misma energía de incidencia. Para apreciar mejor la propagación de un frente de onda con un máximo principal, se trazó la envolvente de las cuatro gráficas con la línea gruesa color naranja.

Es de destacar el hecho de que la propagación espacial, siendo un proceso de naturaleza dinámica, no aparece la variable de la posición en la parte dinámica en la solución analítica de la región interna, sino que esta aparece en cantidades estacionarias como

$\phi(x, k)$ y $u_n(x)$, las cuales figuran como coeficientes de las funciones temporales (funciones de Moshinsky). Es por eso que en la región interna no resulta tan obvia la propagación como en el caso de la solución externa, la cual no solo exhibe la dependencia espacial en las funciones de Moshinsky, sino que además la forma $(x - vt)$ está explícita en el argumento de dichas funciones.

La propagación que observamos en la región interna es más bien un fenómeno colectivo en el que participan varios estados resonantes que se suman e interfieren de manera tal que la superposición “moldea” a un frente de ondas que se mueve recorriendo el sistema de izquierda a derecha. Para enfatizar más esto último, la propagación en la región interna no se observa si no se suma una cantidad suficiente de estados resonantes. En cambio, en la región externa una sola función de Moshinsky puede describir perfectamente la propagación de un frente de ondas (García-Calderón y Rubio, 1997).

Después de esta exhibición de casos variando N , es natural hacerse la pregunta de ¿Cuál es la cantidad de deltas que debe tener el sistema para exhibir propagación? La respuesta es que no se puede hablar en forma precisa de una cantidad específica mínima, lo que observamos en nuestro estudio sistemático es que es un proceso gradual en el cual aproximadamente de una decena de deltas en adelante la densidad de probabilidad ya exhibe claros signos de propagación. En el sistema de doble delta la solución sólo involucró un estado resonante, mientras que en la de 48 deltas involucró 47 estados resonantes, asegurando una mejor convergencia.

Con el propósito de comparar los cálculos basados en ondas planas cortadas incidentes con el caso de incidencia de paquetes espacialmente localizados, a continuación se muestran los resultados de utilizar un paquete de ondas en lugar de una onda plana cortada. Utilizando la solución analítica para paquetes modulados exponencialmente, dado por la ecuación (31), y escogiendo $\Delta = 0.01$, en las figuras 31, 32, 33 y 34 se presentan, respectivamente, los cálculos correspondiente densidad de probabilidad para $N = 2, 8, 24$ y 48 deltas, usando los mismos parámetros que en la figura 25. Los valores de Δ se expresan en unidades de \AA^{-1} en estas figuras y en las restantes de la tesis en las que se utilicen paquetes Lorentzianos.

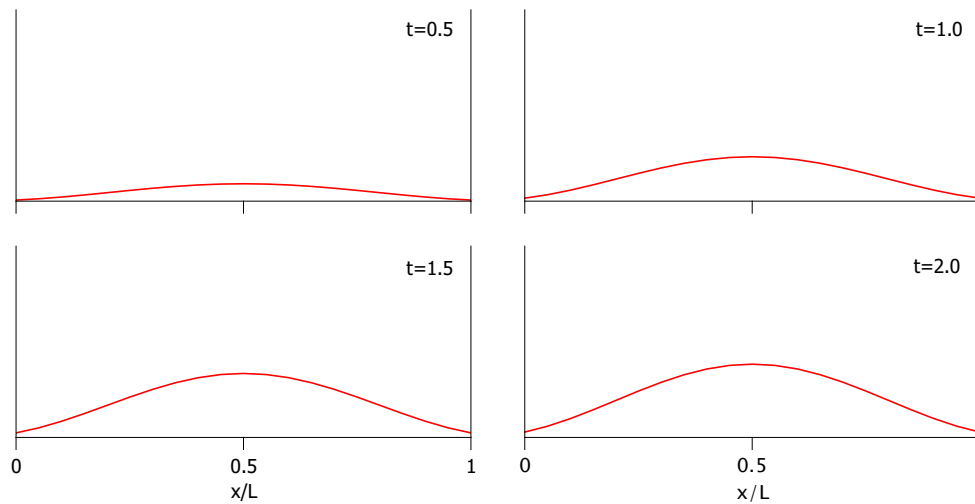


Figura 31. Evolución temporal de la densidad de probabilidad en la región interna para un paquete Lorentziano incidente en un sistema simétrico de 2 deltas de Dirac con los mismos parámetros que los usados en la figura 25, y misma energía de incidencia. Al igual que en el caso de onda plana cortada, la evolución temporal no presenta propagación en la región interna. Se muestra también un crecimiento uniforme de la densidad de probabilidad a lo largo de la región interna.

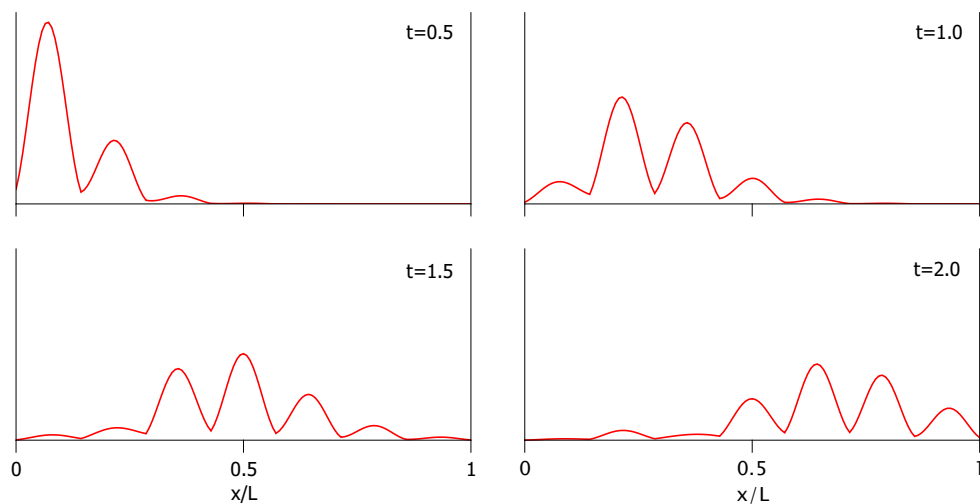


Figura 32. Lo mismo que en la figura anterior para un sistema periódico de 8 deltas de Dirac.

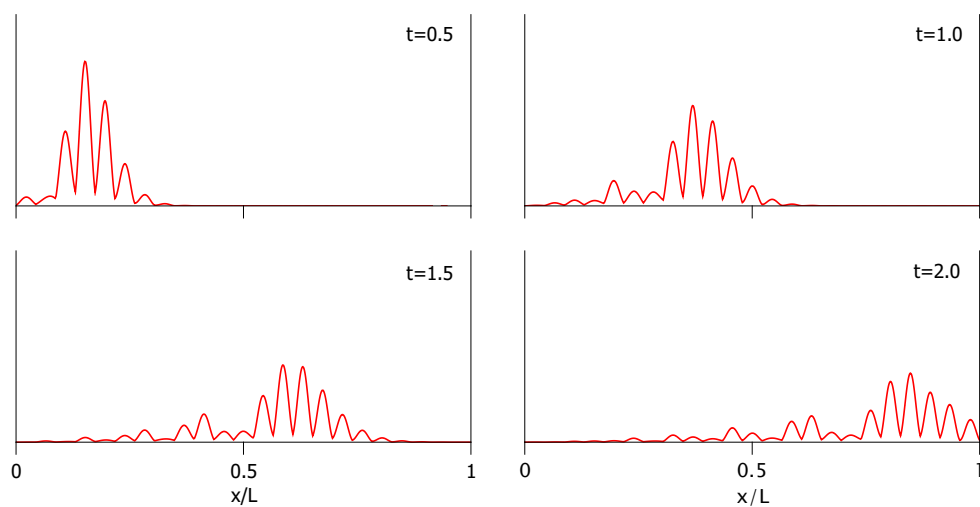


Figura 33. Lo mismo que en la figura anterior para un sistema periódico de 24 deltas de Dirac.

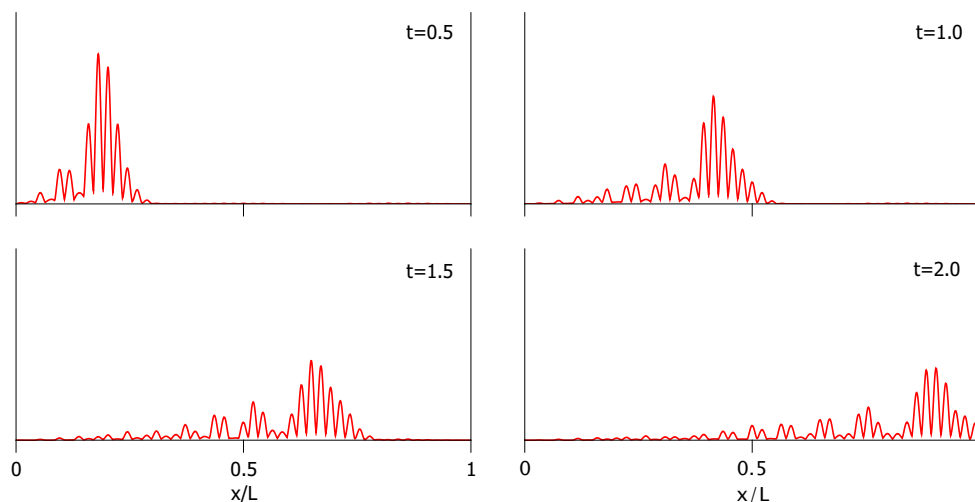


Figura 34. Lo mismo que en la figura anterior para un sistema periódico de 48 deltas de Dirac.

Con excepción del caso de doble delta, en el cual no se presenta propagación, en los otros tres casos se aprecia con claridad la propagación de un paquete localizado con una velocidad similar a la del frente de ondas observado en los casos de onda plana cortada. Estos resultados muestran una clara coincidencia entre los cálculos basados en onda plana cortada con los cálculos basados en dispersión de paquetes de extensión finita en lo que se refiere a propagación en la región interna.

Para tener una representación visual más clara de la propagación con ambas especies de condiciones iniciales, en las figuras 35 y 36 se presentan mapas de contorno de la densidad de probabilidad para un sistema de 50 deltas utilizando ondas planas cortadas y paquetes finitos, respectivamente. En ambos casos se aprecia una propagación clara con una velocidad constante y un tiempo de arribo de aproximadamente el doble del tiempo libre, τ_f .

Notamos en la figura 36 que la manera en que se propaga el paquete en el interior de la estructura cuántica, con aparentes rebotes en las orillas del sistema, evoca el comportamiento de una partícula clásica rebotando entre las paredes de una cavidad.

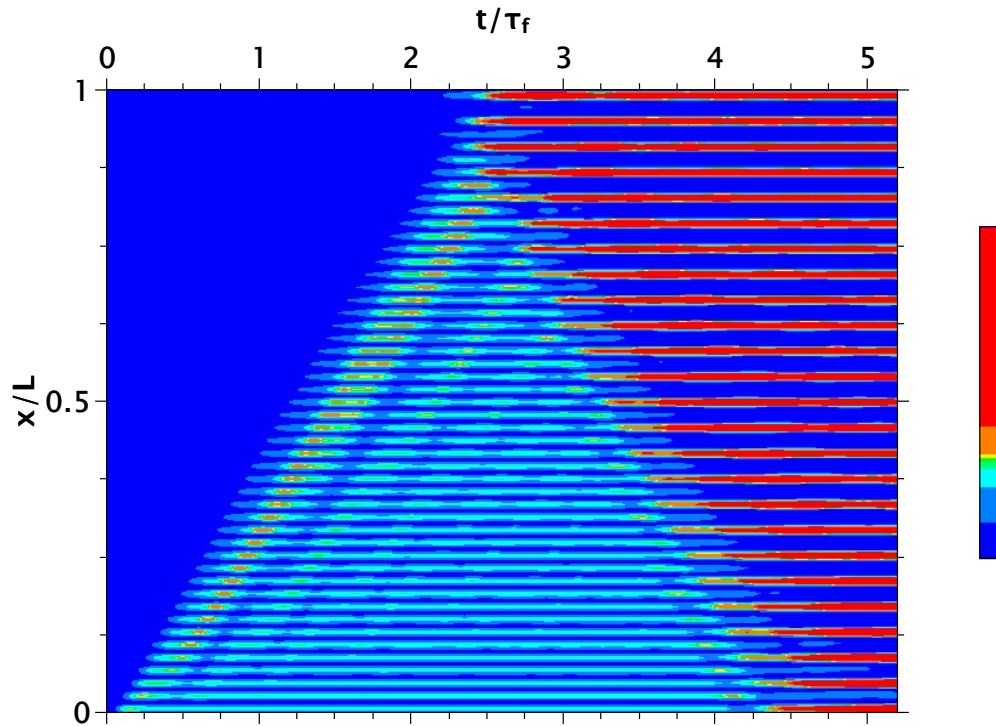


Figura 35. Mapa de contorno de la densidad de probabilidad para un sistema periódico de 50 deltas de Dirac de la misma intensidad λ y separación w que en la figura 25, utilizando una onda plana cortada con energía de incidencia en el centro de la primera minibanda.

Sin embargo, la naturaleza ondulatoria se impone sobre los aspectos corpusculares en la evolución que observamos en este mapa de contorno, ya que más que rebotes, lo que se aprecia es algo parecido a un patrón de difracción, con reflexiones a diferentes ángulos en el plano $x - t$ de la figura.

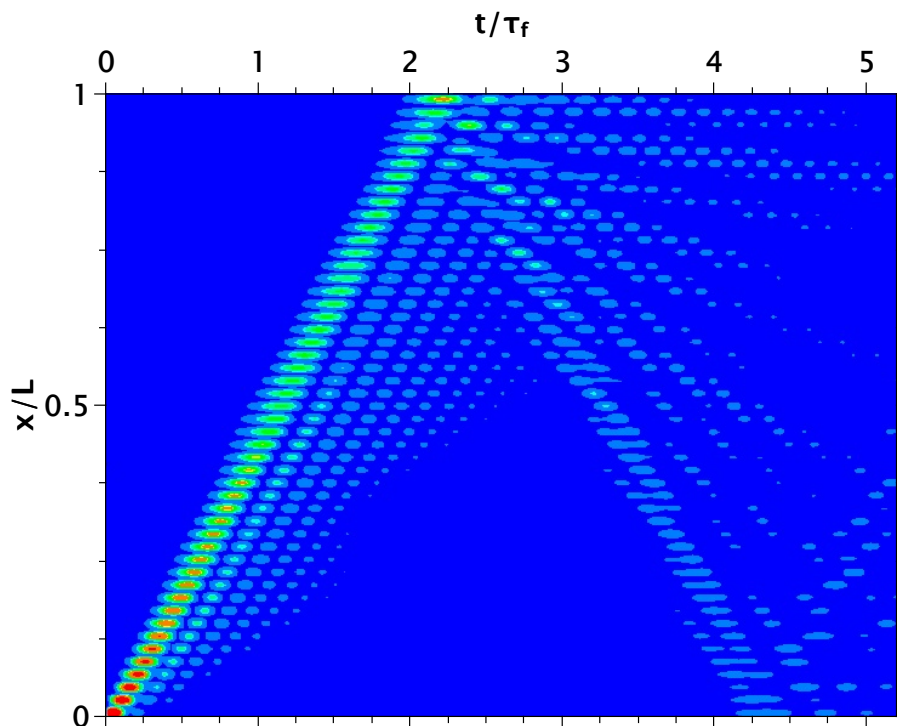


Figura 36. Mapa de contorno de la densidad de probabilidad para un sistema periódico de 50 deltas de Dirac de la misma intensidad λ y separación w utilizando un paquete de ondas con ancho espectral $\Delta = 0.01 \text{ \AA}^{-1}$, y con energía de incidencia en el centro de la primera minibanda.

Lo que nos interesa de este peculiar patrón de propagación con reflexión es el tiempo de arribo al lado derecho del sistema, el cual vemos que es aproximadamente $2.2\tau_f$ y prácticamente coincide con el tiempo de arribo del frente al lado derecho del sistema, del caso de ondas del caso de onda plana cortada de la figura 35, mostrando la concordancia de dos condiciones iniciales distintas en lo que se refiere al tiempo de propagación en la región interna del sistema.

Capítulo V

Tiempos de travesía en sistemas periódicos finitos

V.1 Tiempo de tunelaje de la superred

En el capítulo anterior, el estudio sistemático realizado se centró en determinar si existe o no propagación en la región interna e investigar las condiciones bajo las cuales esta se presenta. Para complementar este estudio necesitamos ser más precisos investigando también las escalas de tiempo relevantes en el proceso dinámico de propagación en la región interna del sistema, tales como los tiempos travesía o de arribo del paquete u onda propagante al otro extremo del sistema. Es importante mencionar que las predicciones realizadas acerca de los tiempos de tunelaje (Pereyra, 2000) y la velocidad en la superredes (Pacher *et al.*, 2005), se han basado en cálculos estacionarios utilizando soluciones de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, en particular, recurriendo a la noción de *tiempo fase*. Nuestros cálculos en cambio, se basan en soluciones analíticas de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo, y por lo tanto eso nos da la oportunidad de verificar de manera fehaciente estas hipótesis planteadas hace ya un par de décadas. En particular, tenemos la posibilidad de verificar la validez del llamado *tiempo de tunelaje en la superred* definida por Pereyra (Pereyra, 2000) y utilizada por Pacher y colaboradores (Pacher *et al.*, 2005) para definir lo que ellos llaman *velocidad de tunelaje resonante*, y aplicarlas a estructuras resonantes de unos cuantos pozos y barreras, así como a sistemas periódicos finitos. Consideramos que someter estas escalas de tiempo estacionarias a la prueba de los cálculos dinámicos es una veri-

ficación obligada, sobre todo si se tienen a la mano las funciones de onda dependientes del tiempo, como ciertamente es el caso. En las propias palabras de Pacher *et al.* (2005): “*Las soluciones de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo podrían ser también estudiadas... a la luz de nuestros resultados, sugerimos el análisis de paquetes de onda periódicos compuestos de un conjunto discreto de estados resonantes*”. Pues precisamente, esa es la característica del formalismo dinámico que utilizamos, y eso es parte de los objetivos planeados en esta tesis.

Empezaremos por analizar qué es lo que realmente calculan en los trabajos de Pereyra y Pacher arriba mencionados. Pereyra afirma que calcula el tiempo fase para superredes finitas y lo llama *tiempo de tunelaje de la superred*. Sin embargo, como veremos más adelante, sus cálculos no coinciden con el tiempo fase. En general, el tiempo fase (Wigner, 1955; Bohm, 1951) se define como la derivada de la fase de transmisión con respecto a la frecuencia (o la energía), y está dado por la ecuación (78) del apéndice B. Para sistemas simples, como una delta de Dirac o un potencial doble delta simétrico, el tiempo fase se puede calcular analíticamente con relativa facilidad. En el Apéndice B se derivan expresiones analíticas del tiempo fase para casos particulares simples, y se esboza el procedimiento numérico para calcularlo en sistemas periódicos finitos. El cálculo analítico de esta cantidad se vuelve sumamente laborioso para sistemas de muchas barreras. Una manera de obtener fórmulas explícitas para el tiempo fase para sistemas periódicos finitos, es expresar la amplitud de transmisión en términos de los polinomios de Chebyshev, como lo hacen Pereyra (2000), Pacher *et al.* (2005) y otros autores (Peisakhovich y Shtygashev, 2008a,b). Nosotros lo que haremos será utilizar las propiedades de la matriz de transferencia y sus derivadas. La expresión resultante para tiempo fase, τ_N^{ph} para un sistema periódico de N deltas de Dirac está dada por la ecuación (89) del apéndice B.

Consideremos un sistema simétrico de dos deltas de Dirac, de intensidades, $\lambda = 7.0$

eV \AA y separación $w = 120 \text{\AA}$, con masa efectiva $m^* = 0.067m$. En la figura 37 presentamos el cálculo del tiempo fase, τ_2^{ph} como función de la energía de incidencia, así como el tiempo libre τ_f . Se incluye también el coeficiente de transmisión con el propósito de enfatizar la estructura pronunciada que presenta el tiempo fase en las energías de cada una de las resonancias del sistema.

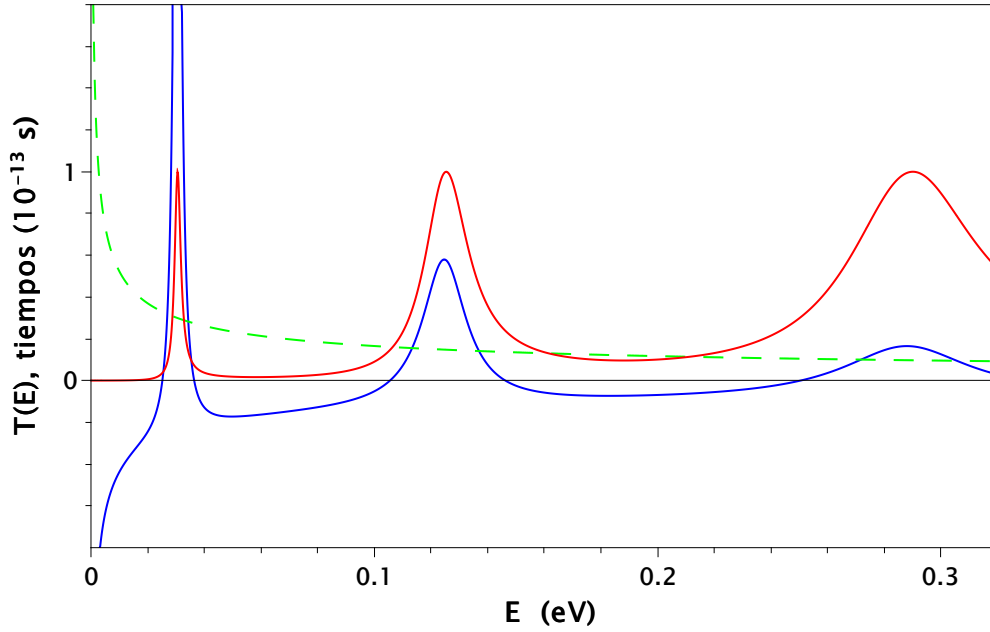


Figura 37. Tiempo fase τ_2^{ph} como función de la energía de incidencia para un sistema de doble delta de Dirac (línea azul). Se incluyen para comparación el tiempo de arribo de una partícula libre τ_f (línea verde a trazos), y el coeficiente de transmisión (línea roja) para indicar la posición de las resonancias del sistema. Nótese las regiones de tiempo fase negativo (avance temporal) en el caso de la estructura resonante. Los parámetros del sistema se dan en el texto

Si comparamos la figura 37 con la figura 2 del trabajo de Pereyra (2000), notamos que hay una importante diferencia en el comportamiento del tiempo fase τ_2^{ph} de la estructura resonante de doble barrera. Mientras que en el trabajo de Pereyra, τ_2^{ph} es siempre positivo y acotado inferiormente por τ_1^{ph} , nuestros cálculos muestran τ_2^{ph} exhibe regiones con valores negativos (avance temporal) entre una resonancia y otra y cuando la energía tiende a cero. Hay una evidente discrepancia de nuestro cálculo

con el de Pereyra. Sin embargo, al comparar nuestro calculo con una gráfica de tiempo fase de un sistema doble delta de Dirac presentado en el libro de Galindo y Pascual (1989) (ver figura 4.13 de la página 165), observamos que hay una notable coincidencia. es pertinente mencionar que las regiones de avance temporal son ya conocidas en la literatura, y por tanto no resulta sorprendente que aparezcan en los cálculos de tiempo fase en este tipo de sistemas. Lo anterior nos sugiere que lo que Pereyra calcula y presenta en las gráficas de las figuras 2 y 3 de su artículo no es en realidad un tiempo fase como lo afirma, lo cual nos motiva a investigar qué es realmente lo que está calculando. Primero debemos recordar que el tiempo fase, desde su definición original (Wigner, 1955; Bohm, 1951), se interpreta como un *retraso temporal*, y entonces no hay razón para considerarlo un tiempo de tunelaje. En lugar de esto, algo más razonable sería tomarlo como *la diferencia* entre el supuesto tiempo de tunelaje (al que denotaremos de aquí en adelante como τ_N^T) y el tiempo libre, es decir $\tau_N^{ph} = \tau_N^T - \tau_f$, con lo cual τ_N^T sería en realidad *la suma* del tiempo fase más el tiempo libre, esto es

$$\tau_N^T = \tau_N^{ph} + \tau_f. \quad (66)$$

Después de hacer esta modificación, al graficar τ_1^T y τ_2^T como función de la energía de incidencia, obtenemos las gráficas de la figura 38, las cuales ahora coinciden con la estructura exhibida por las gráficas de Pereyra de su figura 3.

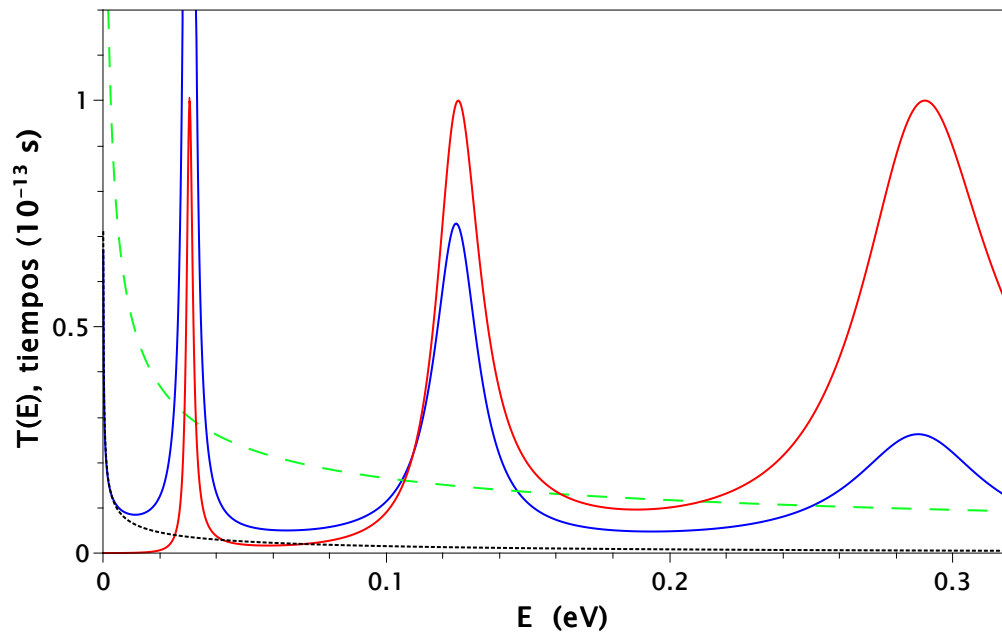


Figura 38. Tiempo de tunelaje τ_2^T como función de la energía de incidencia para un sistema de doble delta de Dirac (línea azul). Se incluye para comparación el tiempo de tunelaje τ_1^T para una sola delta de Dirac (línea negra punteada), el tiempo de arribo de una partícula libre τ_f (línea verde discontinua), así como el coeficiente de transmisión $T(E)$ (línea roja) para indicar la posición de las resonancias del sistema. Los parámetros son idénticos a los de la figura 37.

Repetiendo el cálculo para $N = 8$ deltas de Dirac, se obtienen los resultados de la figura 39, donde el parecido con la figura 2 de Pereyra es aún más claro y evidente.

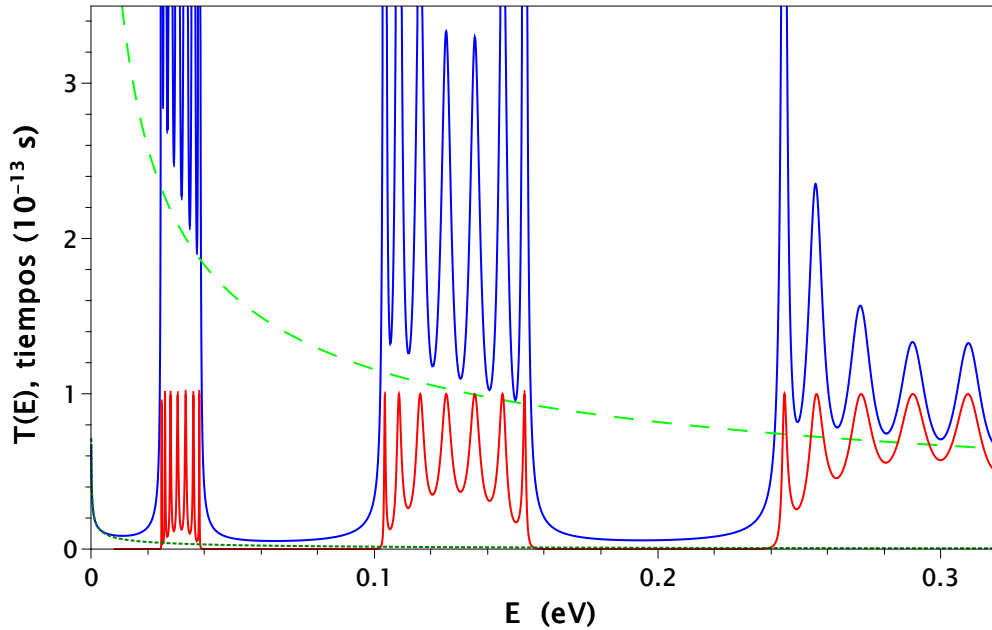


Figura 39. Lo mismo que en la figura 38 para un sistema periódico de $N = 8$ deltas de Dirac. La intensidad de las deltas y la separación entre ellas son iguales que en el sistema de doble delta usado en la figura 37

De este análisis comparativo que hemos presentado en las figuras 37, 38, y 39, podemos concluir que el tiempo de tunelaje en la superred τ_N^T (de Pereyra), es en realidad la suma del tiempo libre τ_f y el tiempo fase τ_N^{ph} , y no únicamente el tiempo fase como afirma Pereyra. Esto no le resta méritos al trabajo de Pereyra, pues su escala de tiempo τ_N^T es, a nuestro juicio, interesante y útil en el rango apropiado de energías, como lo veremos en la siguiente sección.

V.2 Tiempos de travesía

En esta sección haremos una comparación directa del tiempo de tunelaje en la superred (Pereyra, 2000), con el tiempo de propagación del paquete en su travesía a través de la región interna del sistema, al cual llamaremos *tiempo de travesía*. Este último lo obtendremos mediante cálculos dinámicos basados en soluciones analíticas de la ecuación

de Schrödinger dependiente del tiempo, y lo denotaremos por τ_N^D , distinguiéndolo con el superíndice D por ser de naturaleza dinámica.

Como vimos en las secciones previas, el elegir la energía de incidencia en el centro de la minibanda permite que el paquete se propague de manera más efectiva a lo largo de la región interna, es por ello que en todos los cálculos de esta sección elijeremos energías de incidencia en el centro de las minibandas. Consideremos el mismo sistema periódico de $N = 8$ deltas de Dirac del ejemplo de la figura 39. Si elegimos la energía de incidencia en la cuarta resonancia de la minibanda 1, esto es, $E_0 = \epsilon_4^{MB1} = 30.6$ meV, el tiempo de tunelaje de la superred a esa energía resulta ser $\tau_8^T = 2,100.0$ fs, y el tiempo de propagación libre, $\tau_f = 209.3$ fs. Tenemos entonces que el tiempo de tunelaje en la superred es del orden de diez veces el tiempo de propagación libre, para ser más precisos, $\tau_8^T = 10.03\tau_f$.

Veamos ahora los resultados que arroja un cálculo dinámico basado en la solución analítica de la ecuación de Schrodinger dependiente del tiempo. Consideremos un paquete incidente de anchura espectral $\Delta = 0.01$ y la misma energía de incidencia usada en el anterior cálculo estacionario, $E_0 = 30.6$ meV. Los valores de la densidad de probabilidad en la región interna como función de la posición y del tiempo, se presentan en la figura 40 como un mapa de contorno en tres dimensiones. En esta figura se grafican los valores de la densidad de probabilidad $|\Psi_i(x, t)|^2$ vs x y t , en unidades de L y τ_f , respectivamente. Los valores más bajos de $|\Psi_i(x, t)|^2$ se representan por el color azul y los más altos por el color rojo, mientras que valores intermedios se indican de manera relativa por la barra de colores a la derecha.

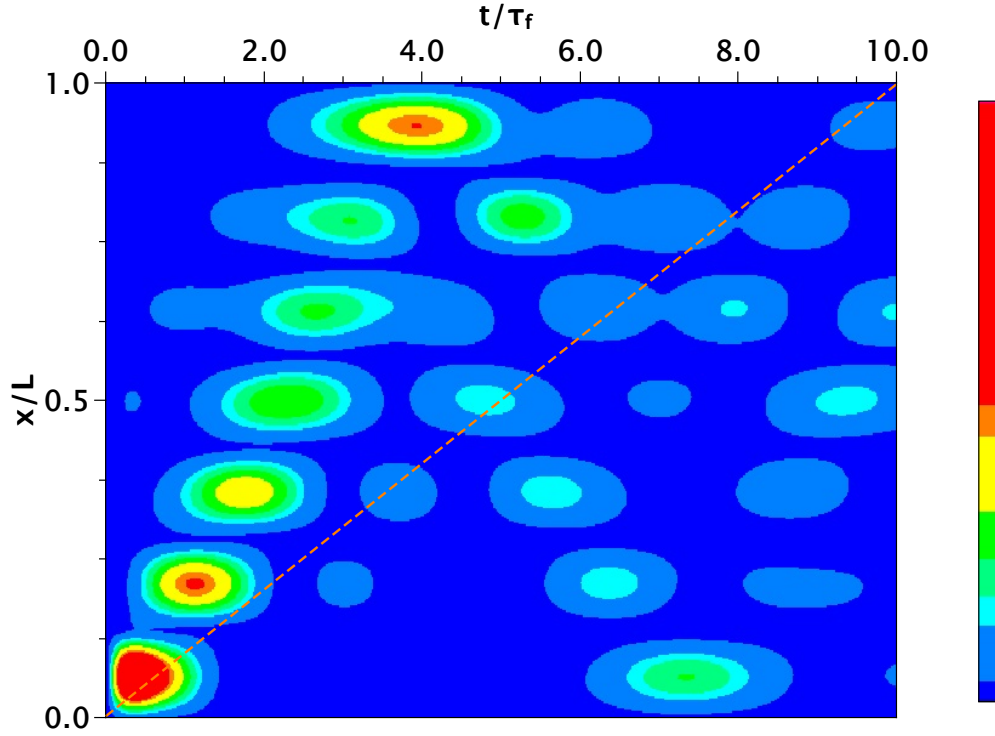


Figura 40. Mapa de contorno de la densidad de probabilidad dependiente del tiempo como función de la posición y del tiempo para una energía de incidencia en la resonancia central de la primera minibanda, $E_0 = \epsilon_4^{MB1} = 30.6$ meV. La línea discontinua naranja indica la predicción estacionaria basada en el tiempo de tunelaje en la superred. Podemos apreciar que la propagación es un proceso más rápido que lo que predice el modelo estacionario de Pereyra.

Podemos apreciar en el mapa de contorno la traza que deja el paquete en su travesía a través del sistema, que aproximadamente sigue una línea recta en el plano $x - t$, cuya pendiente nos da un valor estimado de su velocidad de propagación en la región interna. Por inspección visual del mapa mostrado en la figura, la primera evidencia de que la densidad de probabilidad electrónica se propagó y llegó al lado derecho del sistema, observamos que ocurre a un tiempo de aproximadamente cuatro veces el tiempo libre τ_f . Una medición más precisa nos da $\tau_8^D \approx 3.92 \tau_f$. Esto nos muestra que en realidad la propagación del paquete en la región interna es un proceso más rápido que lo que sugiere la predicción estacionaria de Pereyra, ya que el paquete llega al lado derecho del sistema

en un tiempo mucho menor al llamado tiempo de tunelaje de la superred, τ_8^T . Si el arribo ocurriera al tiempo τ_8^T , el paquete en lugar de seguir la traza mostrada en el mapa de contorno de la figura 40, seguiría la trayectoria señalada por la recta discontinua color naranja superpuesta sobre el mapa de la figura, en la cual evidentemente no sucede nada relevante.

Aunque la discrepancia entre la predicción estacionaria y lo que arrojó el cálculo dinámico en el ejemplo de la figura 40 es grande, no hay que olvidar que esto es sólo el resultado a una energía particular. Consideremos, para el mismo sistema de $N = 8$ deltas, una energía de incidencia en la cuarta resonancia de la minibanda 2, esto es, $E_0 = \epsilon_4^{MB2} = 125.0$ meV. El cálculo del tiempo de tunelaje de la superred a esta energía resulta ser $\tau_8^T = 333.14$ fs, y el cálculo del tiempo libre da $\tau_f = 103.46$. En unidades de tiempos libres, tenemos que $\tau_8^T = 3.22 \tau_f$.

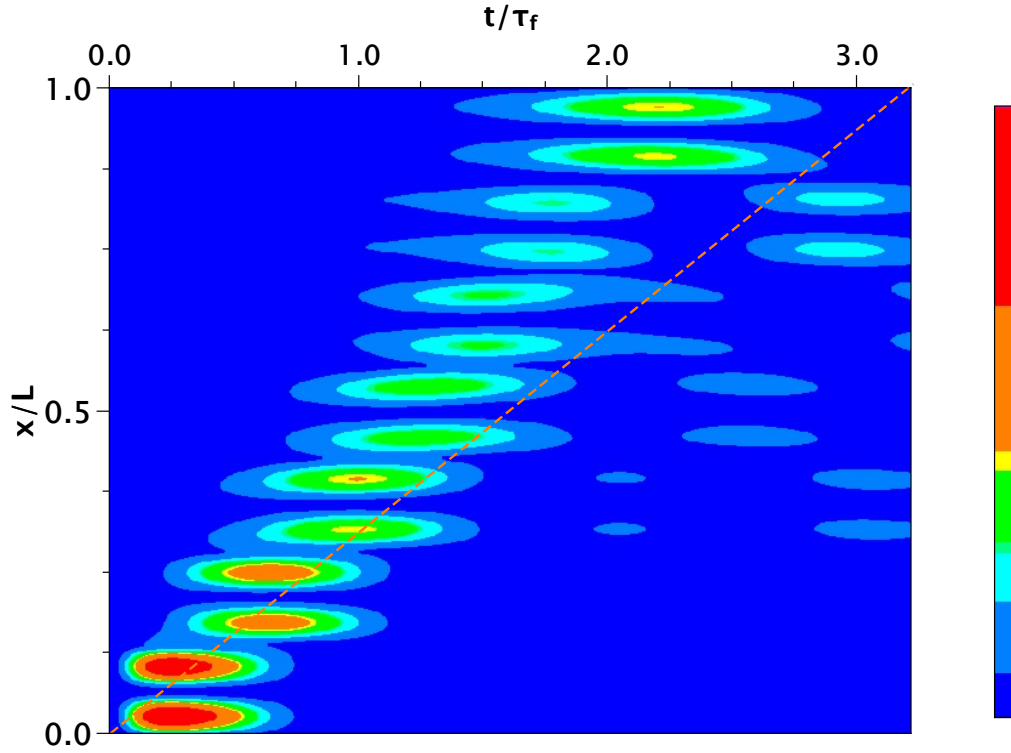


Figura 41. Lo mismo que en la figura 40 para energía de incidencia en la resonancia central de la segunda minibanda, $E_0 = \epsilon_4^{MB2} = 125.0$ meV.

Por otro lado, el cálculo dinámico se presenta en el mapa de contorno de la figura 41, en la cual podemos apreciar que el arribo del paquete a la orilla derecha del sistema ocurre en aproximadamente poco más de dos tiempos libres, para ser más precisos, ocurre a un tiempo de $\tau_8^T \approx 2.20 \tau_f$. Comparando con τ_8^{ph} , vemos que aún hay discrepancia entre la predicción estacionaria y lo que da el cálculo dinámico, pero en esta ocasión la diferencia resultó mucho menor que en el caso de incidencia en la primera minibanda.

Repitiendo lo mismo en la minibanda 3, con $E_0 = \epsilon_4^{MB3} = 289.9$ meV, el tiempo de tunelaje en la superred resulta ser $\tau_8^T = 1.9 \tau_f$. Mientras que, de acuerdo a lo que vemos en el mapa de la figura 42, el arribo del paquete a la orilla derecha del sistema se puede apreciar que ocurre a un tiempo de aproximadamente $1.7 \tau_f$.

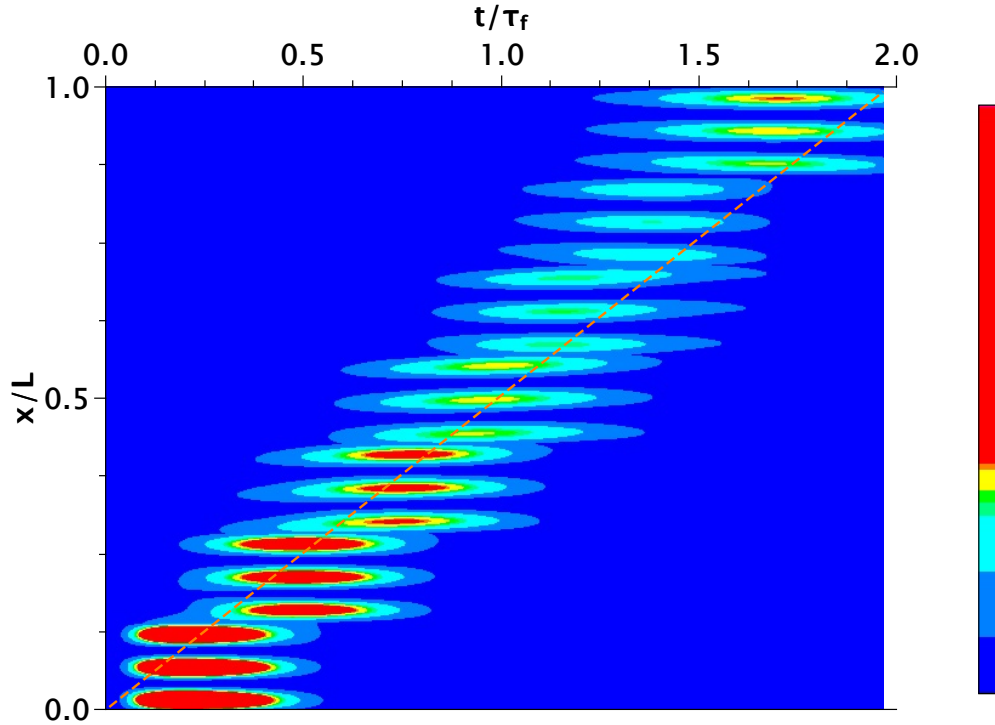


Figura 42. Lo mismo que en la figura 40 para energía de incidencia en en la resonancia central de la tercera minibanda, $E_0 = \epsilon_4^{MB3} = 289.9$ meV.

En este caso, no solamente podemos decir que la discrepancia es menor que en las dos energías de incidencia anteriores, sino que la concordancia entre la predicción estacionaria y el cálculo dinámico es excelente.

Para ilustrar de manera resumida los resultados de estas tres comparaciones, en la figura 43 mostramos los valores de las predicciones estacionarias (rombos rojos) y los cálculos dinámicos obtenidos por inspección visual de los mapas de contorno de las tres figuras previas (círculos azules). Se aprecia con claridad que a pesar de ser grande la discrepancia a bajas energías, hay una concordancia notable en minibandas superiores. Esto se puede apreciar mejor en la minibanda 3, donde los valores obtenidos de los cálculos estacionario y dinámico prácticamente son indistinguibles entre sí. Este es un resultado interesante ya que se trata de una verificación directa basada en un cálculo dinámico de esta escala de tiempo (de Pereyra), basada en el tiempo fase y predicha

por métodos estacionarios.

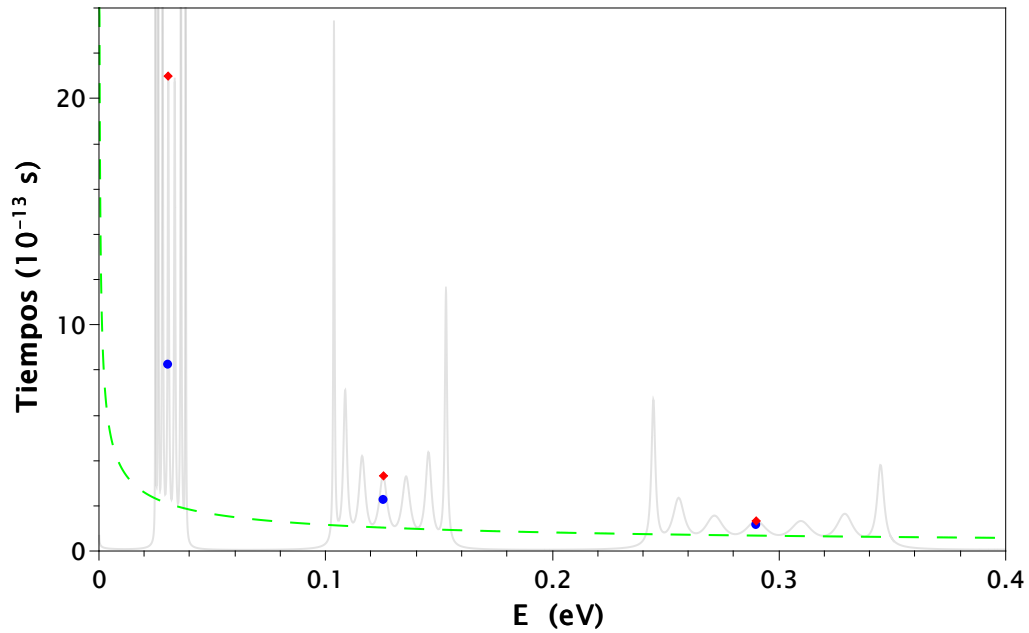


Figura 43. Comparación del cálculo estacionario del tiempo de tunelaje en la superred τ_8^T (rombos rojos) con el cálculo dinámico del tiempo de travesía τ_8^D del paquete (círculos azules) en una superred periódica de $N = 8$ deltas de Dirac (ver parámetros en el texto), para tres energías de incidencia escogidas en el centro de las primeras minibandas. Se incluye la gráfica del coeficiente de transmisión (en color gris semitransparente) para indicar la ubicación de las minibandas y sus resonancias. La línea verde discontinua corresponde al tiempo libre τ_f .

De todo lo anterior, podemos concluir que el tiempo de tunelaje en la superred, τ_N^T , propuesta por Pereyra (2000), es una buena aproximación siempre y cuando no estemos a bajas energías. En cambio, es una escala que funciona excelentemente bien para minibandas superiores.

Capítulo VI

CONCLUSIONES

Se resolvió analíticamente la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo para ondas planas cortadas con modulación exponencial (paquete Lorentziano), incidiendo sobre una estructura resonante descrita por un potencial arbitrario de extensión finita. El paquete incidente cortado de anchura variable nos permitió obtener soluciones analíticas a lo largo de la región interna de estructuras resonantes, que conducen a fórmulas simples que describen de manera transparente el proceso de formación y decaimiento de estados cuasi-estacionarios durante la dispersión del paquete de onda, así como las escalas de tiempo relevantes asociadas a este proceso transitorio. Aplicamos este modelo analítico simple a un problema antiguo relacionado con la caracterización de la curva de formación y decaimiento de la densidad de probabilidad electrónica en el interior de una estructura resonante de doble barrera, que ha sido de gran interés para varios autores (Collins *et al.*, 1987; Guo *et al.*, 1988; Støvneng y Hauge, 1991) desde la década de 80, quienes exploraron y caracterizaron numéricamente parte del decaimiento ajustando una exponencial decreciente a un ritmo dictado por el ancho de la resonancia más baja del sistema.

En este trabajo, hemos caracterizado completamente la curva de formación y decaimiento del estado cuasi-estacionario que se construye durante el proceso de dispersión, encontrando que tanto la formación como el decaimiento de dicho estado se rigen por una interacción entre el ancho de la resonancia Γ_1 del estado inicial, y un ancho $\bar{\Gamma}$ asociado a un estado “virtual” inducido por el estado inicial. Utilizando las propiedades de las soluciones del problema, pudimos caracterizar este pro-

ceso analíticamente en términos de la ecuación simple (45) (la cual constituye uno de nuestros principales resultados), y mostramos que el decaimiento exponencial se rige por la anchura $\bar{\Gamma}$ cuando $\bar{\Gamma} < \Gamma_1$, y por la anchura Γ_1 cuando $\bar{\Gamma} > \Gamma_1$. Demostramos también que la transición entre la fase de construcción y la de decaimiento se caracteriza por una escala de tiempo t_b (tiempo de formación), que depende de la vida media del sistema, τ_1 , y la vida media, $\bar{\tau}$, asociada al estado “virtual”. También se derivó una expresión analítica simple para el tiempo de construcción, véase la ecuación (50).

Mostramos que la contribución de nuestro enfoque analítico para describir la dinámica en sistemas resonantes es doble. En primer lugar, establecemos un vínculo entre la dispersión de dos tipos diferentes estados cuánticos incidentes: ondas planas cortadas (espacialmente extendidas) y paquetes de ondas cortados (espacialmente localizados), ambos bajo un marco de referencia teórico unificado. En segundo lugar, nos permite comprender las características relevantes de los procesos de formación y decaimiento de un estado cuasi-estacionario, su transición, y sus escalas de tiempo relevantes en términos de fórmulas bastante simples. Demostramos que la densidad de probabilidad a tiempos largos presenta una transición de un comportamiento exponencial a un comportamiento no exponencial caracterizado por una dependencia temporal que va como $t^{-3/2}$, y que el término $t^{-1/2}$ se cancela exactamente en el dinámica del paquete de onda.

Los resultados arriba descritos constituyen en su conjunto la primera fase de la investigación propuesta en el desarrollo de esta tesis, la cual culminó con la reciente publicación de un artículo en una revista internacional (Amador-Bartolini *et al.*, 2020).

En una segunda fase de la investigación planteada en este proyecto de tesis, se realizó un estudio sistemático de la densidad de probabilidad en la región interna de sistemas periódicos finitos de N deltas de Dirac, para investigar si existe o no la propagación en el interior del sistema de manera similar a como sucede con el desplazamiento de una partícula clásica, así como la realización de un estudio de las escalas de tiempo

relevantes en los procesos dinámicos y su comparación con predicciones existentes en la literatura basadas en soluciones estacionarias de la ecuación de Schrödinger (Pereyra, 2000).

Utilizando ondas planas cortadas incidentes, encontramos que hay un régimen de evolución sin propagación, el cual ocurre en sistemas cortos de unos cuantos periodos, y un régimen con propagación el cual ocurre en sistemas de mayor número de periodos y por ende mayor extensión espacial. Para estos últimos, se encuentra que se forma un claro frente de ondas que se propaga a lo largo de la región interna a velocidad constante. La estructura propagante que se forma en la densidad de probabilidad dependiente del tiempo, se construye a partir de la interferencia entre las resonancias pertenecientes a una minibanda, la cual posee una cantidad $N - 1$ de estados resonantes que interactúan entre sí en cada tiempo, creando un perfil instantáneo de la densidad de probabilidad, cuya forma varía de manera continua en un proceso de cambio de forma (“reshaping”) que da la apariencia de un frente de ondas en movimiento. Los mismos resultados se verifican al utilizar paquetes de onda en lugar de ondas planas cortadas, lo cual nos permite afirmar que la existencia de estos dos regímenes y su dependencia con el número de periodos del sistema es independiente de si utilizamos paquetes u ondas planas incidentes. Aunque es difícil establecer un valor de N al cual ocurre la transición mencionada, ya que se trata de una transición gradual (la cual en nuestros cálculos la mostramos en forma visual con un amplio desplegado de gráficas variando el número N), el punto relevante es que la cantidad $N - 1$ de estados resonantes de cada minibanda es el parámetro importante para que se construya exitosamente el frente de ondas, mediante un proceso de interferencia múltiple que se da entre las diferentes resonancias.

Se realizó también un estudio de los tiempos y velocidades asociados a la propagación de paquetes en la región interna en una cadena periódica de N deltas de Dirac. Esto

nos permitió llevar a cabo una verificación de predicciones realizadas sobre el tiempo de tunelaje y la velocidad en superredes finitas basadas en enfoques estacionarios. En particular, de una escala de tiempo y una velocidad basadas en la noción de tiempo fase (Pereyra, 2000; Pacher *et al.*, 2005). Encontramos que los cálculos estacionarios no funcionan a bajas energías. Sin embargo, se encuentra una excelente concordancia entre la predicción estacionaria y el cálculo dinámico a energías correspondientes a minibandas superiores. De la tercera minibanda en adelante la predicción estacionaria funciona muy bien. A bajas energías en cambio, el tiempo de travesía del paquete es notablemente menor que el tiempo predicho por el cálculo estacionario basado en el tiempo fase. Es decir, el cálculo estacionario sobrestima el tiempo de travesía, lo cual nos revela que la propagación es un fenómeno más rápido que lo que predice el cálculo estacionario.

Referencias

- Abramowitz, M. y Stegun, I. A. (1964). *Handbook of Mathematical Functions*. Dover, New York.
- Amador-Bartolini, D., Villavicencio, J., Romo, R., y Hernández-Maldonado, A. (2020). Buildup and decay dynamics of exponentially modulated quantum waves in resonant structures. *Physica Scripta*, **96**(1): 015403.
- Bohm, D. (1951). *Quantum Theory*. Prentice-Hall, New York.
- Brouard, S. y Muga, J. G. (1996). Transient and asymptotic effects in tunneling. *Phys. Rev. A*, **54**: 3055–3066.
- Collins, S., Lowe, D., y Barker, J. R. (1987). A dynamic analysis of resonant tunnelling. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, **20**(36): 6233–6243.
- Cordero, S. y García-Calderón, G. (2010). Transient effects and reconstruction of the energy spectra in the time evolution of transmitted gaussian wave packets. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, **43**(18): 185301.
- del Campo, A., García-Calderón, G., y Muga, J. (2009). Quantum transients. *Physics Reports*, **476**(1): 1 – 50.
- Delgado, F., Muga, J. G., Austing, D. G., y García-Calderón, G. (2005). Resonant tunneling transients and decay for a one-dimensional double barrier potential. *Journal of Applied Physics*, **97**(1): 013705.
- Erdélyi, E. (1956). *Asymptotic Expansions*. Dover, New York.
- Galindo, A. y Pascual, P. (1989). *Mecánica Cuántica*, **2**: 165.
- García-Calderón, G. (2010). Chapter 7 - theory of resonant states: An exact analytical approach for open quantum systems. En C. A. Nicolaides y E. Brändas, editores, *Unstable States in the Continuous Spectra, Part I: Analysis, Concepts, Methods, and Results*, Vol. 60 de *Advances in Quantum Chemistry*, páginas 407 – 455. Academic Press.
- García-Calderón, G. y Rubio, A. (1997). Transient effects and delay time in the dynamics of resonant tunneling. *Phys. Rev. A*, **55**: 3361–3370.
- García-Calderón, G., Romo, R., y Villavicencio, J. (2009). Internal dynamics of multi-barrier systems for pulsed quantum decay. *Physical Review A*, **79**.
- Guo, H., Diff, K., Neofotistos, G., y Gunton, J. D. (1988). Time-dependent investigation of the resonant tunneling in a double-barrier quantum well. *Applied Physics Letters*, **53**(2): 131–133.

- Jauho, A. y Jonson, M. (1989). Tunneling times in heterostructures. *Superlattices and Microstructures*, **6**(3): 303–307.
- Kleber, M. (1994). Exact solutions for time-dependent phenomena in quantum mechanics. *Physics Reports*, **236**(6): 331 – 393.
- Martorell, J., Muga, J. G., y Sprung, D. W. L. (2008). Long-time deviations from exponential decay for inverse-square potentials. *Phys. Rev. A*, **77**: 042719.
- Miyamoto, M. (2004). Initial wave packets and the various power-law decreases of scattered wave packets at long times. *Phys. Rev. A*, **69**: 042704.
- Moshinsky, M. (1952). Diffraction in time. *Phys. Rev.*, **88**: 625–631.
- Moshinsky, M. (1976). Diffraction in time and the time–energy uncertainty relation. *American Journal of Physics*, **44**(11): 1037–1042.
- Muga, J. G. y Palao, J. P. (1998). Solvable model for quantum wavepacket scattering in one dimension. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, **31**(47): 9519–9534.
- Pacher, C., Boxleitner, W., y Gornik, E. (2005). Coherent resonant tunneling time and velocity in finite periodic systems. *Phys. Rev. B*, **71**: 125317.
- Peisakhovich, Y. G. y Shtygashev, A. A. (2008a). Formation of a quasistationary state by scattering of wave packets on a finite lattice. *Phys. Rev. B*, **77**: 075326.
- Peisakhovich, Y. G. y Shtygashev, A. A. (2008b). Formation of a quasistationary state by gaussian wave packet scattering on a lattice of n identical delta potentials. *Phys. Rev. B*, **77**: 075327.
- Pereyra, P. (2000). *Phys. Rev. L*, **84**: 1772.
- Ricco, B. y Azbel, M. Y. (1984). Physics of resonant tunneling. the one-dimensional double-barrier case. *Phys. Rev. B*, **29**: 1970–1981.
- Romo, R. y Villavicencio, J. (1999). Dynamical description of the buildup process in resonant tunneling: Evidence of exponential and nonexponential contributions. *Phys. Rev. B*, **60**: R2142–R2145.
- Romo, R. y Villavicencio, J. (2001). Role of the buildup oscillations on the speed of resonant tunneling diodes. *Applied Physics Letters*, **78**(12): 1769–1771.
- Sollner, T. C. L. G., Tannenwald, P. E., Peck, D. D., y Goodhue, W. D. (1984). Quantum well oscillators. *Applied Physics Letters*, **45**(12): 1319–1321.
- Støvneng, J. A. y Hauge, E. H. (1991). Time-dependent resonant tunneling of wave packets in the tight-binding model. *Phys. Rev. B*, **44**: 13582–13594.
- Tsu, R. y Esaki, L. (1973). Tunneling in a finite superlattice. *Applied Physics Letters*, **22**(11): 562–564.

- Villavicencio, J. (2000). Tesis de doctorado, CICESE, México.
- Villavicencio, J. y Romo, R. (2000). Dynamical analysis of the buildup process near resonance. *Applied Physics Letters*, **77**(3): 379–381.
- Wigner, E. P. (1955). Lower limit for the energy derivative of the scattering phase shift. *Phys. Rev.*, **98**: 145–147.
- Yamada, N., García-Calderón, G., y Villavicencio, J. (2005). Quantum-shutter approach to tunneling time scales with wave packets. *Phys. Rev. A*, **72**: 012106.

Apéndice A

Soluciones analíticas para el obturador cuántico reflejante

A.1 Soluciones formales.

En el caso de obturador cuántico reflejante, las soluciones analíticas de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo, tanto en la región interna como en la región externa de transmisión, están dadas respectivamente por,¹

$$\Psi^i(x, k, t) = \phi(x, k)M(y_k^i) - \phi(x, -k)M(y_{-k}^i) - i \sum_{n=-\infty}^{\infty} \phi_n(x)M(y_{k_n}^i), \quad (67)$$

y

$$\Psi^e(x, k, t) = t(k)M(y_k^e) - t(-k)M(y_{-k}^e) - i \sum_{n=-\infty}^{\infty} t_n M(y_{k_n}^e), \quad (68)$$

donde los argumentos de las funciones de Moshinsky están dadas por

$$y_q^e(x, t) = e^{-i\frac{\pi}{4}} \left(\frac{m}{2\hbar t} \right)^{1/2} \left(x - \frac{\hbar q t}{m} \right), \quad (69)$$

$$y_q^i(t) \equiv y_q^e(0, t) = e^{-i\frac{\pi}{4}} \left(\frac{\hbar}{2m} \right)^{1/2} q t^{1/2}. \quad (70)$$

donde $q = k, -k, k_n, k_{-n}$, según el caso.

¹El formalismo fue originalmente desarrollado por García Calderón y Rubio para el *obturador absorbente* (García-Calderón y Rubio (1997)). Las soluciones (67) y (68) fueron obtenidas por Villavicencio para una condición inicial modificada llamada *obturador reflejante* (Villavicencio (2000)).

A.2 Aproximación de una resonancia.

Es posible demostrar que para energías de incidencia E_0 cercanas a una resonancia aislada, digamos

$$E_0 = \epsilon_n \pm \Delta E, \quad (71)$$

donde ΔE es del orden de unas cuantas Γ_n 's, con $\Gamma_n \ll |\epsilon_n - \epsilon_{n\pm 1}|$, las correspondientes densidades de probabilidad se pueden escribir de forma aproximada como (Villavicencio y Romo (2000), Romo y Villavicencio (2001)):

$$|\Psi^i(x, k, t)|^2 \approx |\phi(x, k)|^2 \eta_n(t), \quad (72)$$

y

$$|\Psi^e(x, k, t)|^2 \approx |t(k)|^2 \chi_n(x, t). \quad (73)$$

En estas expresiones, $\phi(x, k)$ es la solución de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo en la región interna y $t(k)$ es la correspondiente amplitud de transmisión. Las formas explícitas de las funciones $\eta_n(t)$ y $\chi_n(x, t)$ son, respectivamente,

$$\eta_n(t) = 1 + e^{-\Gamma_n t/\hbar} - 2e^{-\Gamma_n t/2\hbar} \cos[\omega_n t], \quad (74)$$

y

$$\chi_n(x, t) = 1 + e^{-\Gamma_n t/\hbar} e^{b_n(x-L)} - 2e^{b_n(x-L)} e^{\Gamma_n t/2\hbar} \cos[(a_n - k)(x - L) + \omega_n t], \quad (75)$$

donde $k_n = a_n - ib_n$, $x \leq \hbar kt/m$, y $w_n = |E - \epsilon_n|/\hbar$. Podemos apreciar que en la solución interna, las partes espacial y temporal se han factorizado. En particular, para energías de incidencia en resonancia, $E = \epsilon_n$, la parte temporal $\eta_n(t)$ se reduce a

$$\eta_n(t) = (1 - e^{-\Gamma_n t/2\hbar})^2, \quad (76)$$

y por lo tanto

$$\left| \frac{\Psi^i}{\phi} \right| \approx 1 - e^{-t/\tau_n}. \quad (77)$$

donde $\tau_n = \hbar/\Gamma_n$ es el tiempo de vida del estado resonante. Nótese que (77) sólo depende del tiempo, y la dependencia es similar a la ley de carga de un capacitor en un circuito- RC (Romo y Villavicencio (1999)).

En la solución externa, las partes espacial y temporal se mantienen acopladas en la función $\chi_n(x, t)$, pero se puede observar que en $x = L$, $\chi_n(L, t) = \eta(t)$.

Apéndice B

Tiempo Fase

El tiempo fase es se define como:

$$t_{ph} = \hbar \frac{\partial \theta_t}{\partial E}, \quad (78)$$

en donde θ_t es la fase de la amplitud de transmisión del sistema

$$t = |t| e^{i\theta_t}. \quad (79)$$

La expresión para θ_t es

$$\theta = \arctan \left(\frac{t_i}{t_r} \right), \quad (80)$$

en donde t_r y t_i son la parte real e imaginaria de la amplitud de transmisión, *i.e.*

$$t = t_r + i t_i. \quad (81)$$

B.1 Potencial delta de Dirac

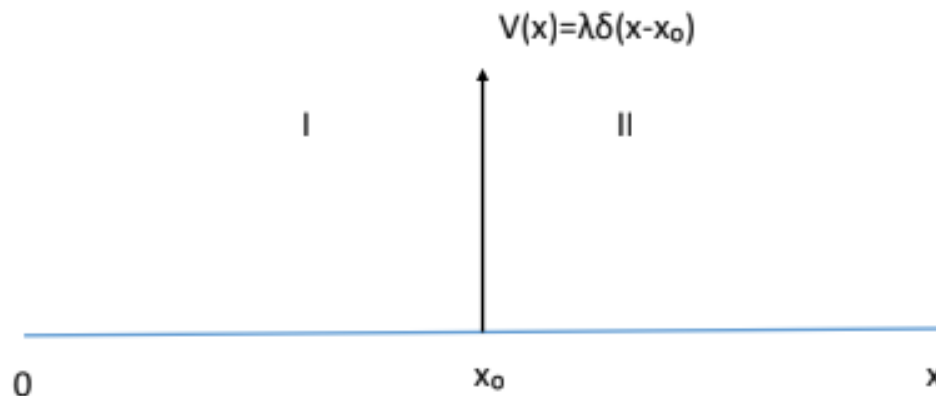


Figura 44. Potencial delta de Dirac.

Para una delta de Dirac en la posición x_0 , como se ilustra en la figura 44, sabemos que la matriz de transferencia es de la forma:

$$M = \begin{bmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{bmatrix}, \quad (82)$$

en donde los elementos de matriz están dados por:

$$\begin{aligned} m_{11} &= 1 + \left(\frac{m\lambda}{ik\hbar^2} \right); \\ m_{12} &= \left(\frac{m\lambda}{ik\hbar^2} \right) e^{-2ikx_0}; \\ m_{21} &= - \left(\frac{m\lambda}{ik\hbar^2} \right) e^{2ikx_0}; \\ m_{22} &= 1 - \left(\frac{m\lambda}{ik\hbar^2} \right). \end{aligned} \quad (83)$$

Además, sabemos que la amplitud de transmisión del sistema puede ser expresada en términos del elemento m_{22} de la matriz de transferencia mediante la relación

$$t = \frac{1}{m_{22}}, \quad (84)$$

que nos conduce al coeficiente de transmisión del sistema, $T(k) = 1/|m_{22}|^2$. Las partes real e imaginaria de la amplitud de transmisión pueden expresarse como,

$$\begin{aligned} t_r &= \frac{m_{22}^r}{|m_{22}|^2}; \\ t_i &= -\frac{m_{22}^i}{|m_{22}|^2}, \end{aligned} \quad (85)$$

por lo que la fase θ_t puede escribirse como:

$$\theta_t = \arctan\left(-\frac{m_{22}^i}{m_{22}^r}\right). \quad (86)$$

Con ayuda de la expresión (86) calculamos $\partial_E \theta_t$ para obtener una expresión para el tiempo fase (78) como función de los elementos de matriz del sistema,

$$\tau_{ph} = \hbar T(k) (m_{22}^i \partial_E m_{22}^r - \partial_E m_{22}^i m_{22}^r). \quad (87)$$

Utilizamos (83) para evaluar explícitamente las derivadas en (87) y obtener finalmente,

$$\tau_{ph} = \left[\frac{m^2 \lambda}{\hbar^3 k^3} \right] T(k). \quad (88)$$

B.2 Cadena periódica de N deltas de Dirac

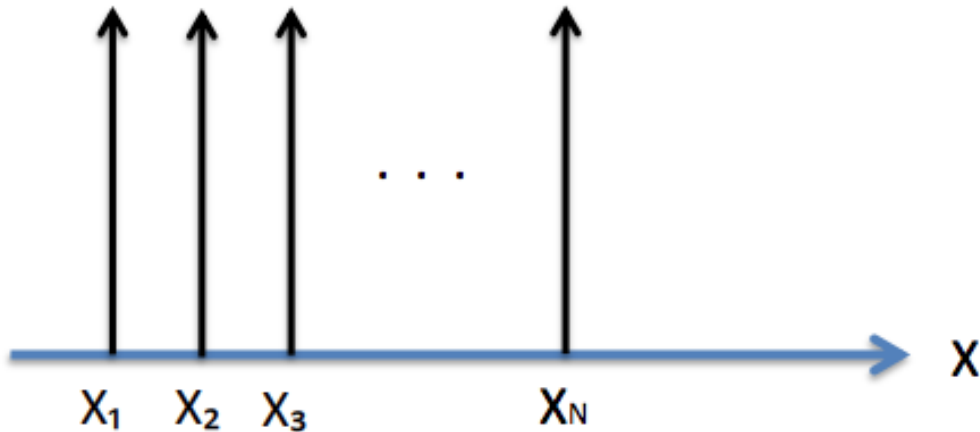


Figura 45. Potencial de una superred de N deltas de Dirac.

Para una cadena de N deltas de Dirac periódicas, como la que se muestra en la figura 45, el tiempo fase es también de la forma de la ecuación (87), en donde los elementos denotados por letras mayúsculas corresponden a la matriz de transferencia total del sistema de N deltas,

$$\tau_{ph} = \hbar T(k) \left(M_{22}^i \partial_E M_{22}^r - \partial_E M_{22}^i M_{22}^r \right), \quad (89)$$

en donde las matrices involucradas son de la forma

$$M_T = M^{(N-1)} M^{(N-2)} M^{(N-3)} \dots M^{(1)}. \quad (90)$$

Cada matriz M^n es de la forma de la ecuación (82), con elementos de matriz

$$\begin{aligned} M_{11}^n &= 1 + \left(\frac{m\lambda}{ik\hbar^2} \right); \\ M_{12}^n &= \left(\frac{m\lambda}{ik\hbar^2} \right) e^{-2ikx_n}; \\ M_{21}^n &= - \left(\frac{m\lambda}{ik\hbar^2} \right) e^{2ikx_n}; \\ M_{22}^n &= 1 - \left(\frac{m\lambda}{ik\hbar^2} \right). \end{aligned} \quad (91)$$

Los elementos $\partial_E M_{22}^r$ y $\partial_E M_{22}^i$ en (89) corresponden a las derivadas con respecto a la energía E de la parte real e imaginaria, respectivamente del elemento M_{22} . Dichos elementos pueden obtenerse de la derivada del producto de matrices de la ecuación (90), la cual se obtiene aplicando la regla de la cadena en forma sucesiva. Para la resolución de este procedimiento complejo, se elaboró un algoritmo en el lenguaje de programación *Fortran* que se muestra en la figura 46.

```

do n=1, Npt+1
x=0
E=Eini+(n-1)*DE

k=sqrt(E/xhb2_2m)
kp=1/(2.0*xhb2_2m*k)
n11=(1,0)
n12=(0,0)
n21=(0,0)
n22=(1,0)

np11=(0,0)
np12=(0,0)
np21=(0,0)
np22=(0,0)

alp=i*0.5*B/xhb2_2m

do ll=1, NDel
x=(ll-1)*w

m11=1+B/(2*i*k*xhb2_2m)
m12=B/(2*i*k*xhb2_2m)*EXP(-2*i*k*x)
m21=-B/(2*i*k*xhb2_2m)*EXP(2*i*k*x)
m22=1-B/(2*i*k*xhb2_2m)

mp11=(alp/k**2)*kp
mp12=EXP(-2*i*k*x)*kp*(alp/k**2+2*i*x*alp/k)
mp21=EXP(2*i*k*x)*kp*(-alp/k**2+2*i*x*alp/k)
mp22=(-alp/k**2)*kp

mtp11=mp11*n11+m11*np11+mp12*n21+m12*np21
mtp12=mp11*n12+m11*np12+mp12*n22+m12*np22
mtp21=mp21*n11+m21*np11+mp22*n21+m22*np21
mtp22=mp21*n12+m21*np12+mp22*n22+m22*np22

mt11=m11*n11+m12*n21
mt12=m11*n12+m12*n22
mt21=m21*n11+m22*n21
mt22=m21*n12+m22*n22

n11=mt11
n12=mt12
n21=mt21
n22=mt22

np11=mtp11
np12=mtp12
np21=mtp21
np22=mtp22

enddo
print*,mtp22

t=1/mt22
r=-mt21/mt22
tp=-mtp22/mt22**2

tpr=0.5*(tp+conjg(tp))
tpt=imag(tp)
tr=0.5*(t+conjg(t))
ti=imag(t)

Tran=t*CONJG(t)
Ref=r*CONJG(r)

tph=xhbar*(tr*tpt-ti*tpr)/Tran

!
write(10,*)E,Tran
write(11,*)E,Ref
write(12,*)E,Tran+Ref
write(13,*)E,tph/100

enddo

```

Figura 46. Cálculo de tiempo fase para una superred para una potencial de una cadena periódica de N deltas de Dirac (código FORTRAN).