

Curso 2006/07
CIENCIAS Y TECNOLOGÍAS/24
I.S.B.N.: 978-84-7756-771-4

ÁNGEL LUIS PÉREZ PRIETO

**Estudio de fenómenos colisionales transitorios
en la evolución de la distribución
de momentos cuántica**

Director
SANTIAGO BROUARD MARTÍN



SOPORTES AUDIOVISUALES E INFORMÁTICOS
Serie Tesis Doctorales

La Naturaleza es un templo cuyos vivientes pilares
dejan salir a veces confusas palabras;
el hombre pasa a través de bosques de símbolos
que lo observan con miradas familiares.

Charles Baudelaire

A mi madre, y a la memoria de mi padre.

Agradecimientos

Gracias a todos los miembros del Departamento de Física Fundamental II por la excelente disposición que en todo momento han mostrado hacia mi trabajo.

A mi director, D. Santiago Brouard Martín agradecerle el haberme guiado adecuadamente durante el desarrollo de este trabajo. Su juicio certero fue, en todo momento, fuente de confianza. Mi mayor gratitud por las discusiones científicas mantenidas, un gran regalo. Gracias por el empeño de clarificar y hacerte entender, tu actitud no ha sido en vano.

Gracias a D. Juan Gonzalo Muga Francisco por participar en este trabajo, su experiencia y criterio han sido fundamentales para su desarrollo.

A ambos, debo agradecer la confianza depositada en mí, el haberme dado la oportunidad de que una gran inquietud personal se desarrollase, y permitir que haya sido “a mi manera”. Gracias por respetar el ritmo impuesto por mí, y acompañarme durante estos años.

Durante el desarrollo de este trabajo han sido innumerables las ocasiones en las que la ayuda, la experiencia, los consejos, la compañía y el apoyo brindados por mis compañeros han sido de vital importancia. A ellos: Toñi, Jose Pascual, Eva, Andrés, Susana, Enrique, María José, Ana, Omaira, Antonio, Inés, Javi, Briesta, Ethel e Irene, gracias por sus muestras de amistad.

A mi familia y amigos, y en especial a Techí, gracias por estos años de vigilancia y comprensión, han evitado que me desubicase al hacerme tener siempre presente qué es lo accesorio y qué es lo fundamental.

Por último, a todos quiero hacer partícipes de la satisfacción que siento al poder terminar este trabajo con la convicción de haber dado lo mejor de mí, sin su ayuda no hubiera sido posible.

Índice general

Introducción	1
1. Interferencia en representación de momentos: Formalismo	19
2. Colisión de un paquete de ondas Gausiano con un barrera cuadrada: solución analítica	23
2.1. Obtención de la solución explícita	24
2.1.1. Ejemplos	33
3. Interferencia cuántica transitoria entre incidencia y transmisión	37
3.1. Descripción de la interferencia	37
3.2. Descripción de la interferencia en el espacio de fases	53
3.2.1. Representación de Wigner	55
3.2.2. Representación de Husimi	58
3.3. Influencia de la gravedad sobre el efecto de interferencia	62
3.4. Interferencia entre componentes incidente y transmitida inducida por un láser resonante	64
4. Colisión cuántica de un paquete de ondas con una doble barrera cuadrada	71
4.1. Solución Analítica	75
4.2. Discusión y conclusiones	84
5. Experimento de la doble rendija: Un nuevo escenario	87
5.1. Introducción	87
5.2. Solución semi-analítica	92

5.3. Resultados y discusión	105
6. Resumen y conclusiones	111
6.1. Conclusiones	111
Apéndices	114
A. Descripción del método numérico de propagación SOM (Split Operator Method)	115
B. Intervalos utilizados para los valores de los parámetros en las colisiones	121
C. Cálculo de los polos resonantes de una barrera cuadrada de potencial	123
D. Método de aproximación de integrales de la “máxima pendiente de descenso”	125
E. Cónicas	129
F. Funciones w	133
G. Selección de la frecuencia de Rabi en láseres resonantes para ciclos π y 2π	135
Bibliografía	136

Introducción

Tradicionalmente, la teoría cuántica de colisiones se ha formulado bajo la premisa de que existe una separación clara entre las escalas de tiempos y distancias de la interacción y de la observación. Se supone que pueden observarse los *resultados* de la colisión a distancias y tiempos “asintóticos”, pero que no puede observarse directamente la colisión. Este enfoque está justificado por los experimentos de haces moleculares o atómicos convencionales. En ellos se suceden tres etapas: Primero se preparan las partículas, por ejemplo seleccionando su velocidad o estado interno en condiciones de alto vacío; en un segundo paso se produce la interacción; y por último se estudian los productos mediante detectores situados a distancias macroscópicas de la zona de colisión. La teoría que se emplea para analizar dichos experimentos se basa en el operador de colisión o matriz S . Esta matriz relaciona el primer paso y el tercero, es decir, los regímenes asintóticos de entrada y salida, pero ignora los detalles del segundo. Por ello, la matriz S es insuficiente para dar cuenta de numerosos experimentos en los que es precisamente el segundo paso el que se examina directamente, gracias a láseres pulsados en la escala del femtosegundo y a las técnicas que se engloban dentro de las “espectroscopías del estado de transición” [1]. Además, en la teoría cinética cuántica de gases, los tratamientos más precisos deben abandonar la aproximación de la “colisión completa” y tener en cuenta toda la colisión, utilizando los operadores de onda de Möller como en la ecuación de Waldman-Snyder y en su generalización para gases moderadamente densos [2]. En cualquier caso, nos interesa conocer el *mecanismo* de la colisión y no sólo sus productos, puesto que tal conocimiento detallado puede servir para modificar o controlar los resultados de la colisión.

En este contexto S. Brouard y J.G. Muga describieron [3, 4] un fenómeno cuántico colisional y transitorio que consiste en un aumento de la probabilidad de detectar

partículas con un momento lineal superior a uno dado, con respecto al valor permitido dentro del marco de la Mecánica Clásica de acuerdo con la ley de conservación de la energía. Este fenómeno será denominado *efecto BM* de ahora en adelante.

Conceptos tales como el efecto túnel, las interferencias, o la discretización de los valores propios de ciertos observables son elementos comunes en las ecuaciones ondulatorias, ya sean clásicas o cuánticas. El carácter peculiar de estos fenómenos dentro del contexto de la Mecánica Cuántica surge debido a que, a pesar de que ésta es formalmente una teoría ondulatoria, la función de onda describe el estado de *partículas materiales*, de acuerdo con el postulado probabilista de Born. El efecto BM pertenece a una familia de fenómenos en los que parece violarse la ley clásica de conservación de la energía.

Posteriormente, hemos encontrado que en determinadas condiciones la cantidad de norma más allá del umbral permitido clásicamente adquiere valores numéricos anormalmente grandes [5]. Estos valores se explican por un nuevo efecto, tan llamativo o más que el original, por el que determinados valores del momento lineal, y en particular el momento central del paquete de ondas inicial, se convierten transitoriamente en “momentos prohibidos” de la distribución cuántica debido a un proceso de interferencia destructiva. El “hueco” así formado en el centro de la distribución de momentos produce un desplazamiento de la norma, que da lugar a la formación de unos máximos en torno al cero del momento central. El máximo correspondiente a los momentos más altos es el causante de que se produzca una notable acumulación de norma en la zona prohibida clásicamente.

El estudio y descripción de este fenómeno, así como de sus posibles realizaciones experimentales, y de variantes que permitan ampliar o controlar sus aplicaciones potenciales, etc., constituirá el objetivo principal de esta tesis.

El núcleo central de este capítulo introductorio está dedicado a describir el efecto BM, así como a caracterizar algunas de sus propiedades.

Efecto BM

Sea un colectivo clásico de partículas con masa m moviéndose en una dimensión, el eje x , descrito por la función de distribución en el espacio de fases $f(x, p; t)$. Se supone que estas partículas interactúan por ejemplo con un potencial $V(x)$ que es no nulo únicamente entre los puntos $x = 0$ y $x = d$, y que inicialmente ($t = 0$) el

colectivo se prepara a la izquierda del potencial con una probabilidad despreciable de encontrar partículas con momentos negativos. En este caso, el momento de cada partícula a lo largo de su trayectoria, $p(t)$, sólo puede ser menor o igual que la cantidad $p(0) + p_v$, donde $p(0)$ es el valor del momento lineal inicial y el momento adicional, p_v , describe la posible conversión de energía potencial en cinética¹,

$$p_v \equiv \begin{cases} (-2mV_{\min})^{1/2} & \text{si } V_{\min} < 0 \\ 0 & \text{en otro caso.} \end{cases} \quad (1)$$

Como consecuencia de la ley de conservación de la energía, la probabilidad de encontrar al sistema físico con un momento lineal superior a un valor $p + p_v$ en $t > 0$ no puede ser mayor que la probabilidad inicial de encontrar un momento lineal superior a p , esto es,

$$G^{\text{cl}}(p, t) \equiv \int_p^\infty \{P(p' + p_v, t) - P(p', 0)\} dp' \leq 0, \quad (2)$$

donde $P(p', t) \equiv \int_{-\infty}^\infty f(x, p'; t) dx$.

La Teoría Cuántica, sin embargo, no permite establecer una cota similar. De hecho, S. Brouard y J.G. Muga ([3],[4]) han estudiado diversos ejemplos en los que la cantidad adimensional

$$G^{\text{q}}(p, t) \equiv \int_p^\infty \{|\psi(p' + p_v, t)|^2 - |\psi(p', 0)|^2\} dp' \quad (3)$$

toma valores positivos, en contradicción con los resultados esperados para un colectivo clásico de partículas. En la definición de $G^{\text{q}}(p, t)$, $\psi(p, t)$ es la función de onda en representación de momentos, y describe un estado puro del sistema cuántico correspondiente.

En la figura 1 se muestra un caso típico para el que $G^{\text{q}}(p, t)$ es positivo. En la figura se representa la distribución de momentos en dos instantes de tiempo diferentes: el instante en que se prepara la colisión y el instante “central” de la colisión. Los parámetros que describen el estado del sistema y la barrera de potencial se detallan en el pie de la figura. El efecto BM se manifiesta en un ensanchamiento de la función de onda en representación de momentos con respecto a la distribución inicial. Es interesante observar que este ensanchamiento no está conectado directamente con un estrechamiento del paquete de ondas en la representación de posiciones por

¹Las variaciones en la energía cinética, $E_c = p^2/2m$, serán iguales pero de signo opuesto a las de la energía potencial.

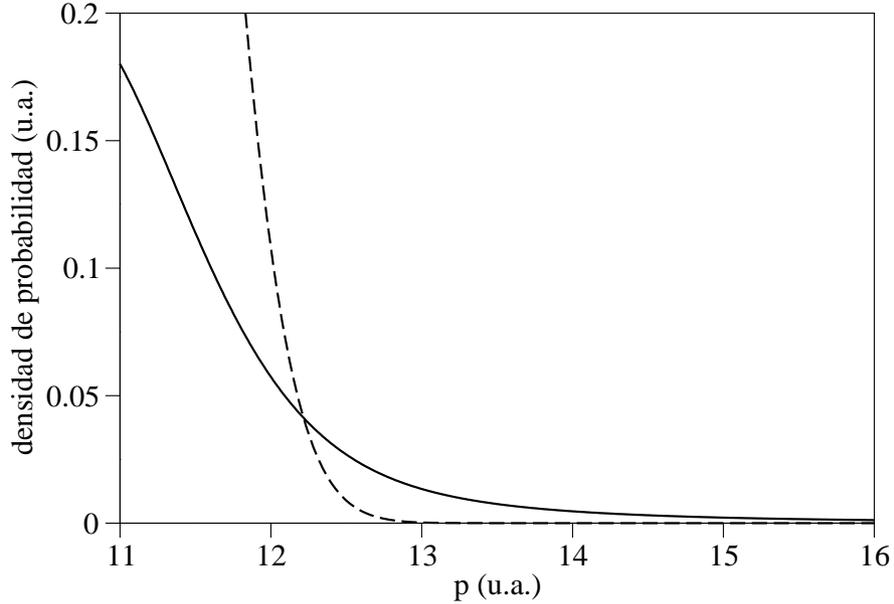


Figura 1: Módulo al cuadrado de la función de onda en representación de momentos evaluada durante la colisión de un paquete de ondas con un potencial tipo escalón de altura $V_0 = 400$ u.a. (línea continua). La línea discontinua representa la distribución de momentos en el instante inicial, a modo de referencia. Se ha tomado $m = 0.5$ u.a. y $\hbar = 1$ u.a. El momento central del paquete incidente es $p_c = 11$ u.a., inicialmente preparado con anchura en coordenadas $\sigma_x = 1$ u.a., a una distancia $x_c = -10$ u.a. del potencial escalón. El estado inicial corresponde a una Gaussiana de mínimo producto de incertidumbres [véase la ecuación (23)]. El instante para el que ha sido calculada la probabilidad representada en la figura es $t = 0.46$ u.a.

medio de ninguna relación de incertidumbre porque, de hecho, el paquete de ondas en posiciones no está siendo restringido por su dinámica a una región determinada del espacio.

Carácter transitorio

Un aspecto importante del efecto BM es su carácter *transitorio*. Asintóticamente, antes y después de producirse la colisión, se cumplen las desigualdades $G^a(p, t \rightarrow \pm\infty) \leq 0$, en correspondencia con el caso clásico. Para justificar este resultado se pueden utilizar los *operadores de Möller*,

$$\Omega_+ = \lim_{t \rightarrow -\infty} e^{iHt/\hbar} e^{-iH_0t/\hbar} \quad (4)$$

$$\Omega_- = \lim_{t \rightarrow \infty} e^{iHt/\hbar} e^{-iH_0t/\hbar}, \quad (5)$$

que relacionan el estado de colisión, $|\psi(t)\rangle$, con los estados asintóticos de *entrada* ($|\psi_{ent}\rangle$) y de *salida* ($|\psi_{sal}\rangle$), que describen el estado del sistema antes y después de la interacción respectivamente:

$$|\psi(t)\rangle = \Omega_+ |\psi_{ent}(t)\rangle \quad (6)$$

$$|\psi(t)\rangle = \Omega_- |\psi_{sal}(t)\rangle. \quad (7)$$

H_0 es el Hamiltoniano para el movimiento libre y $H = H_0 + V$ es el Hamiltoniano completo, que incorpora el potencial de interacción. Teniendo en cuenta la propiedad de isometría

$$\Omega_{\pm}^{\dagger} \Omega_{\pm} = 1, \quad (8)$$

se puede escribir $|\psi_{sal}(t)\rangle = \Omega_-^{\dagger} |\psi(t)\rangle$, y utilizando la relación (6) se obtiene

$$|\psi_{sal}(t)\rangle = S |\psi_{ent}(t)\rangle, \quad (9)$$

donde S es el *operador de colisión*, que conecta las asíntotas de entrada y de salida,

$$S \equiv \Omega_-^{\dagger} \Omega_+. \quad (10)$$

Por otra parte, los operadores de Möller y los Hamiltonianos H y H_0 satisfacen las *relaciones de entrelazado*,

$$H \Omega_{\pm} = \Omega_{\pm} H_0, \quad (11)$$

o, equivalentemente,

$$\Omega_{\pm}^{\dagger} H = H_0 \Omega_{\pm}^{\dagger}, \quad (12)$$

lo que permite demostrar que los operadores S y H_0 conmutan,

$$S H_0 = \Omega_-^{\dagger} \Omega_+ H_0 = \Omega_-^{\dagger} H \Omega_+ = H_0 \Omega_-^{\dagger} \Omega_+ = H_0 S. \quad (13)$$

Finalmente, debido a que el operador S conmuta con el operador energía cinética (H_0), la probabilidad de encontrar momentos p ó $-p$ ($p > 0$) se puede decir que es una *constante asintótica*, esto es, conserva el mismo valor para los estados asintóticos de entrada y de salida,

$$|\psi(p, t \rightarrow \infty)|^2 + |\psi(-p, t \rightarrow \infty)|^2 = |\psi(p, t = 0)|^2 \quad (p > 0). \quad (14)$$

de manera que para $t \rightarrow \infty$ se verifica

$$|\psi(p, t \rightarrow \infty)|^2 \leq |\psi(p, t = 0)|^2 \quad (p > 0), \quad (15)$$

lo que implica a su vez que $G^q(p, t)$ tiende a valores no positivos cuando $t \rightarrow \infty$, y demuestra el carácter transitorio del efecto.

Carácter genérico

Además de ser transitorio, el efecto es *genérico* ([3], [4]), esto es, puede presentarse en cualquier proceso de colisión, independientemente de la forma detallada del potencial de interacción: Los estados estacionarios del sistema decaen lentamente en la representación de momentos debido a una parte principal, siempre presente en la ecuación de Lippmann-Schwinger, que va más allá del máximo valor permitido clásicamente por la conservación de la energía².

Para ilustrar esta propiedad se consideró el caso de un sistema físico cuya dinámica, en una única dimensión espacial, venga gobernada por el Hamiltoniano $H = H_0 + V(x)$, donde el potencial $V(x)$ tome valores no nulos únicamente entre los puntos $x = 0$ y $x = d > 0$. La función de onda correspondiente a un estado estacionario $|\phi_{p'}\rangle$, asociado con una onda plana incidente con momento $p' > 0$ a la izquierda del potencial, tiene como expresión en la representación de momentos [3]

$$\begin{aligned} \langle p | \phi_{p'} \rangle &= \frac{1}{2} \left[1 + T(p') e^{i(p-p')d/\hbar} \right] \delta(p - p') + \\ &+ \frac{i}{2\pi} \left[1 - T(p') e^{i(p-p')d/\hbar} \right] \mathcal{P} \left(\frac{1}{p - p'} \right) + \\ &+ \frac{1}{2} R(p') \left[\delta(p + p') + \frac{i}{\pi} \mathcal{P} \left(\frac{1}{p + p'} \right) \right] + \tilde{\chi}(p; p'), \end{aligned} \quad (16)$$

donde $R(p')$ y $T(p')$ son respectivamente las amplitudes de reflexión y de transmisión; $\tilde{\chi}(p; p')$ es la transformada de Fourier de la parte del estado estacionario que ocupa la región de interacción, $\chi(x; p')$; y \mathcal{P} denota el valor principal de Cauchy. El término $\mathcal{P}[1/(p' - p)]$, asociado con la amplitud de transmisión, se extiende desde el punto crítico $p = p'$ hasta infinito. Este decaimiento lento, que en general no es cancelado por ningún otro término, conduce a amplitudes no nulas para valores de p clásicamente prohibidos, puesto que según lo visto anteriormente, para

²Una consecuencia macroscópica de este fenómeno es la desviación de la distribución Maxwelliana de velocidades observada en [6].

un colectivo clásico de partículas con momento incidente p' no pueden existir valores del momento superiores a $p = p' + p_v$. El único término que puede interferir significativamente con la parte principal en la región de momentos altos sería $\tilde{\chi}(p; p') \equiv h^{-1/2} \int_0^d \chi(x; p') e^{-ipx/\hbar} dx$, pero su contribución tiende a cero para valores grandes de p , al comportarse como p^{-1} cuando $p \rightarrow \infty$.

El trabajo de tesis comienza en este punto con un estudio más sistemático de algunas de las características y dependencias más relevantes del efecto BM. En este contexto, hemos determinado una cota superior para el valor de $G^q(p, t)$; hemos estudiado la dependencia del efecto BM con el carácter más o menos abrupto de la forma funcional que tiene la barrera de potencial; hemos analizado asimismo la dependencia del efecto con parámetros como las alturas de barrera o la anchura espacial del paquete de ondas; finalmente, hemos planteado sistemas físicos realistas sobre los que observar experimentalmente las consecuencias del efecto.

Se ha optado por incluir estos estudios en un capítulo introductorio, que se dedica principalmente al efecto BM, dejando para el resto de esta memoria la descripción de otros fenómenos de interferencia que involucran sólo a un número reducido de contribuciones, y que constituyen el bloque de resultados principales de este trabajo de tesis.

Cota superior para $G^q(p, t)$

Otro de los puntos que se ha discutido en este contexto es la existencia de una cota máxima para el efecto BM, aparte de la trivial que conduce a $G^q(p, t) \leq 1$. Para esto, se considera el producto de $Q(p, t)$,

$$Q(p, t) \equiv \int_p^\infty |\psi(p', t)|^2 dp', \quad (17)$$

por la energía cinética, $E_p = p^2/2m$,

$$\begin{aligned} E_p Q(p, t) &\equiv E_p \int_p^\infty dp' |\psi(p', t)|^2 < \frac{1}{2m} \int_p^\infty dp' p'^2 |\psi(p', t)|^2 \\ &\leq \frac{1}{2m} \int_{-\infty}^\infty dp' p'^2 |\psi(p', t)|^2 = \langle H_0 \rangle(t) \leq \langle H_0 \rangle(t=0) = \langle H \rangle. \end{aligned} \quad (18)$$

En la última inecuación se ha usado la conservación cuántica del valor promedio de la energía total del sistema,

$$\langle H \rangle = \langle H_0 \rangle + \langle V \rangle, \quad (19)$$

que en $t = 0$, cuando el sistema no se encuentra sometido a la acción del potencial, queda como $\langle H \rangle = \langle H_0 \rangle(t = 0)$, implicando, según (19), que $\langle H_0 \rangle(t = 0) \geq \langle H_0 \rangle(t)$ para cualquier instante de tiempo t . Despejando $Q(t)$ en (18), se tiene

$$Q(p, t) < \frac{\langle H \rangle}{E_p}. \quad (20)$$

Restando ahora $Q(p, 0)$ y teniendo en cuenta la definición de $G^q(p, t)$, queda

$$G^q(p, t) < \frac{\langle H \rangle}{E_p} - Q(p, 0). \quad (21)$$

Este resultado implica, en el caso de una distribución inicial en momentos simétrica por ejemplo, que para el momento central p_c , $G^q(p_c, t)$ está acotado por el valor 0.5.

Dependencia de $G^q(p, t)$ con el carácter más o menos abrupto del potencial

Para un paquete de onda Gaussiano en colisión con una pared infinita, se obtienen valores máximos para $G^q(p, t)$ de aproximadamente 0.05 [3]. Sin embargo, este modelo no permite estudiar colisiones con una componente transmitida de la onda.

La colisión de un estado inicial Lorentziano en representación de momentos con un potencial tipo delta de Dirac se resolvió analíticamente en [4], donde se examina la variación del efecto con la opacidad del potencial y con el momento medio del paquete incidente. De los cálculos realizados en [4] se concluye que la magnitud del efecto aumenta con la opacidad del potencial, por lo que sus autores sugieren que para observarlo experimentalmente puede ser conveniente aumentar la opacidad del potencial efectivo.

En los dos modelos estudiados con detalle en las referencias [3] y [4] el potencial es siempre discontinuo. En [3] se menciona la realización de cálculos con potenciales continuos para los que el efecto se mantiene, pero no se efectúa un estudio sistemático sobre la importancia que pueda tener la dependencia espacial precisa del potencial, y en particular su variación más o menos brusca.

Para caracterizar esta dependencia de $G^q(p, t)$, hemos estudiado [5] el movimiento de una partícula de masa m , en una dimensión, en presencia de un potencial del

tipo³

$$V(x) = \frac{V_0}{2} \{1 + \tanh [b(x - x_0)]\}, \quad (22)$$

donde V_0 es la “altura” máxima del potencial, b es un parámetro que permite cuantificar la rapidez de cambio desde $V = 0$ hasta $V = V_0$, y x_0 el punto en el que está centrado. El valor del parámetro b permite estudiar el comportamiento del efecto desde el caso $b \rightarrow 0$ (potencial suave), hasta el caso $b \rightarrow \infty$ (potencial tipo escalón).

La función de onda en representación de momentos durante la colisión, $\psi(p, t)$, se calculó utilizando el método numérico de propagación SOM (“Split Operator Method”), que se describe brevemente en el Apéndice A. Inicialmente, en $t = 0$, se asume que el estado del sistema es preparado de acuerdo con una función de onda Gausiana de mínimo producto de incertidumbres a la izquierda del potencial, con una probabilidad despreciable de tener momentos negativos, y sin que solape apreciablemente con el potencial⁴,

$$\psi(p, t = 0) = \left(\frac{2\sigma_x^2}{\pi\hbar^2} \right)^{1/4} \exp \left[-\frac{\sigma_x^2 (p - p_c)^2}{\hbar^2} - \frac{ipx_c}{\hbar} \right], \quad (23)$$

donde σ_x es la raíz cuadrada de la varianza en posiciones, p_c es el valor medio del momento incidente, y x_c el valor medio de la posición en el instante inicial.

Las figuras 2, 3 y 4 muestran mapas de contorno de $G^q(p, t)$ en función del momento lineal p y del tiempo para la colisión descrita anteriormente y para tres valores de b representativos de la variación que se observa en G^q . Se observa un aumento del valor máximo de G^q a medida que se incrementa b , y también cómo el máximo valor de G^q ocurre en instantes de tiempo posteriores, esto último debido a que al ser más abrupto el potencial, centrado siempre en la misma posición, la partícula incidente “siente” el efecto del potencial más tarde cuanto mayor es el valor de b . La figura 5, por otra parte, muestra el valor máximo de G^q frente al parámetro b . El aumento de G^q es monótono con b . Sin embargo, el efecto es bastante robusto y se mantiene para potenciales suaves, como se observa en la sección siguiente, donde

³Para esta barrera de potencial $p_v = 0$ [véase las ecuaciones (1) y (3)].

⁴Inicialmente se exige que la norma de la función de onda que solapa con el potencial sea inferior a 10^{-5} .

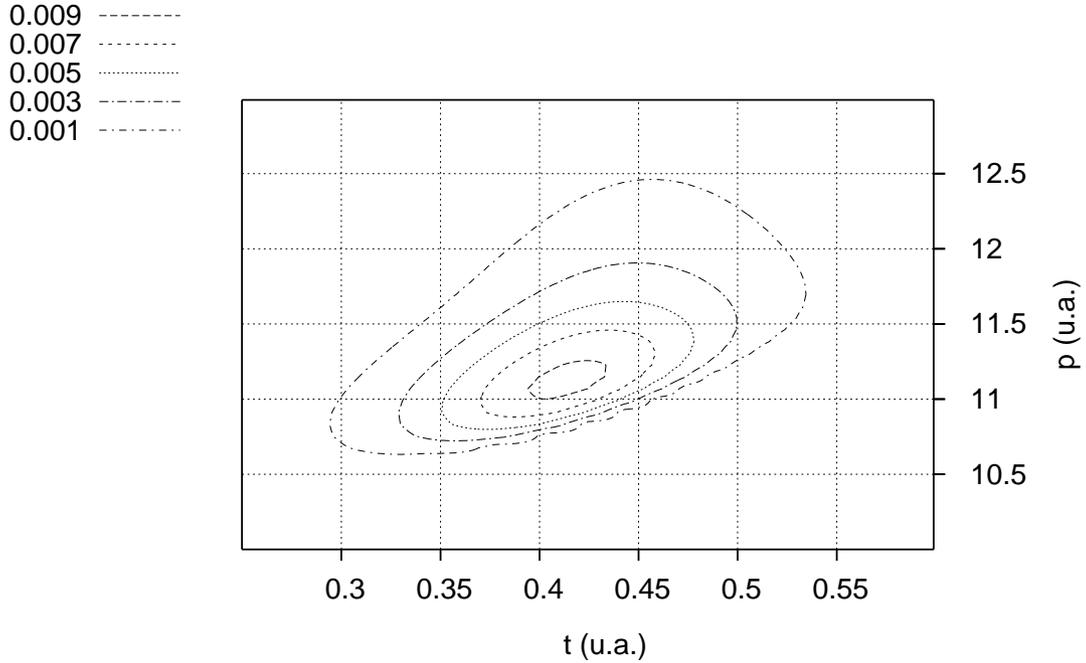


Figura 2: Mapa de contorno de $G^q(p, t)$ (adimensional) en función de p y de t (ambas variables expresadas en unidades atómicas, u.a.). El estado inicial del sistema y la barrera de potencial se describen en el texto. Se ha tomado $b = 2.5$ u.a., $m = 0.5$ u.a., $\hbar = 1$ u.a., $x_c = 10$ u.a., $p_c = 10$ u.a., $x_0 = 20$ u.a., $\sigma_x = 1$ u.a., y $V_0 = 400$ u.a.

se describe el efecto BM para el caso de una colisión con una barrera Gaussiana.

Dependencia con la altura de la barrera y con la anchura espacial del paquete de ondas

En [5] hicimos un estudio sistemático de la variación del efecto BM con diferentes parámetros, tales como la altura de la barrera de potencial o la anchura de la función de onda incidente en representación de posiciones. Para dar un carácter más general al resultado, este análisis se realizó utilizando dos formas funcionales diferentes de la barrera de potencial: una Gaussiana,

$$V_G(x) = V_0 \exp \left[-\frac{(x - x_0)^2}{2\sigma_v^2} \right], \quad (24)$$

centrada en x_0 y con anchura σ_v , y una barrera cuadrada, $V_C(x)$, definida con la misma altura, V_0 , y con una anchura δ_C tal que las “áreas” bajo ambas curvas fueran

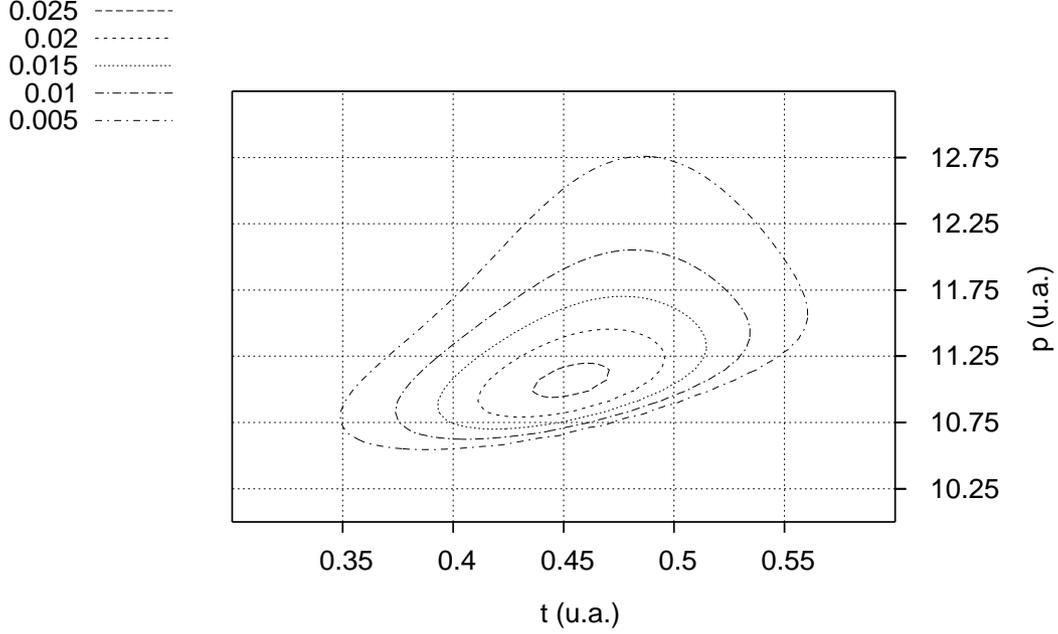


Figura 3: Mapa de contorno de $G^q(p, t)$ (adimensional) en función de p y de t (u.a.) para $b = 10$ u.a. (el resto de datos toman valores iguales que en la figura 2).

iguales, con objeto de hacer más directas las comparaciones entre ambos resultados,

$$V_C(x) = \begin{cases} V_0 & \text{si } -\delta_C/2 \leq x - x_0 \leq \delta_C/2 \\ 0 & \text{en otro caso.} \end{cases} \quad (25)$$

Teniendo en cuenta que $\int_{-\infty}^{\infty} V_G(x) dx = \sqrt{2\pi} V_0 \sigma_v$, el valor de δ_C queda fijado en $\delta_C = \sqrt{2\pi} \sigma_v$.

En la figura 6 se representa el valor máximo de G^q , G_{max}^q , en función de σ_x y de V_0 para el caso de la barrera cuadrada. Los valores numéricos que describen el sistema están asociados con experimentos realistas propuestos para realizarse con átomos de Rubidio en interacción con una haz láser (véase la siguiente sección).

La elaboración de los cálculos presentados en esta figura requiere un considerable esfuerzo computacional, puesto que la red de puntos debe ser muy densa, para conseguir una buena resolución en momentos, y amplia, para poder tratar estados muy extendidos espacialmente. De hecho, la figura es más un muestreo que un mapa de contorno detallado. La figura 6 permite concluir que, a diferencia de lo que se había supuesto tras el estudio numérico del potencial delta, el efecto BM puede resultar más importante para condiciones en las que la barrera no es en absoluto opaca, en particular, para energías netamente superiores a la altura de la barrera,

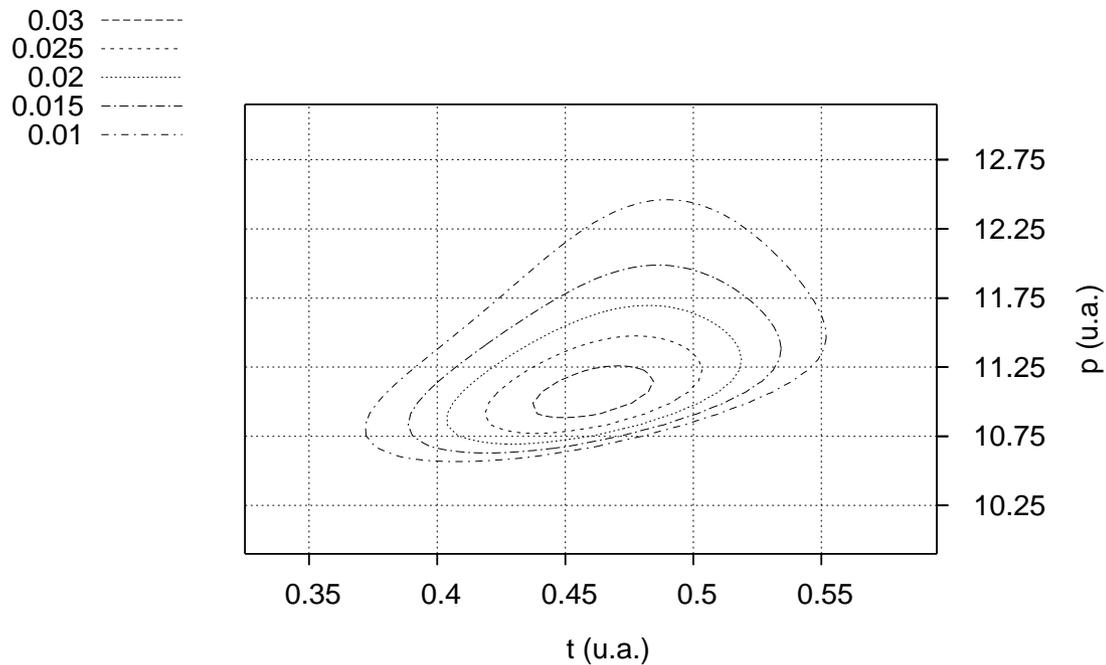


Figura 4: Mapa de contorno de $G^q(p, t)$ (adimensional) en función de p y de t (u.a.) para $b = 30$ u.a. (el resto de datos toman valores iguales que en la figura 2).

en las que prácticamente todo el paquete de ondas resulta finalmente transmitido.

De hecho, el valor que alcanza G_{max}^q , 0.24, es muy superior (hasta cinco veces mayor) que los máximos valores alcanzados en los estudios previos con la pared infinita y el potencial delta, lo que sugiere que pueda existir algún mecanismo que justifique estos valores tan altos, como efectivamente se describirá en el Capítulo 3. Este valor se explica porque determinados valores del momento lineal, y en particular el momento central del paquete de ondas inicial, se convierten transitoriamente en momentos prohibidos de la distribución cuántica debido a un proceso de interferencia destructiva. Consecuentemente, el mínimo formado en el centro de la distribución de momentos produce un desplazamiento de la norma, que da lugar a la formación de dos máximos en torno al cero del momento central. El máximo correspondiente a los momentos más altos es el causante de que se produzca una notable acumulación de norma en la zona prohibida clásicamente.

El efecto se amortigua algo para una barrera Gaussiana, como se puede apreciar en la figura 7, pero sigue teniendo un valor numérico muy importante.

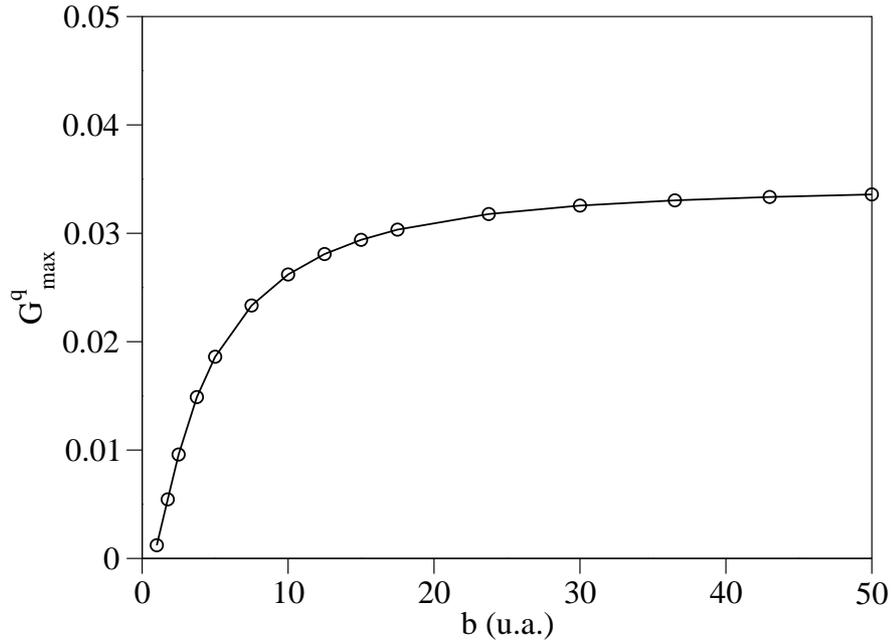


Figura 5: Valor máximo de $G^q(p, t)$ (adimensional) en función del parámetro b , que describe el carácter más o menos abrupto del potencial (22). El resto de datos toman valores iguales que en la figura 2.

Realización experimental

Los cálculos recogidos en esta memoria se han realizado utilizando dos “juegos de parámetros” principalmente. El primero de ellos, expresado en unidades atómicas, empleado por ejemplo en las figuras 1 a 4, tiene como objeto ilustrar las diferentes características de los efectos observados.

Por otra parte, es necesario considerar situaciones experimentales realistas que permitan comprobar las predicciones, controlar el efecto y aplicarlo. En [7] se propuso utilizar átomos ultrafríos en interacción con un haz láser que acople dos de sus niveles de energía para comprobar experimentalmente el fenómeno cuántico descrito (véase un esquema en la figura 8). Cuando la frecuencia del láser no está bien sintonizada con la diferencia de energía entre los niveles atómicos considerados, el efecto del láser sobre la dinámica de un átomo que incide en su estado de menor energía es equivalente al de una barrera de potencial real de la forma $V(x) \simeq \hbar\Omega^2(x)/4\Delta$ [8]-

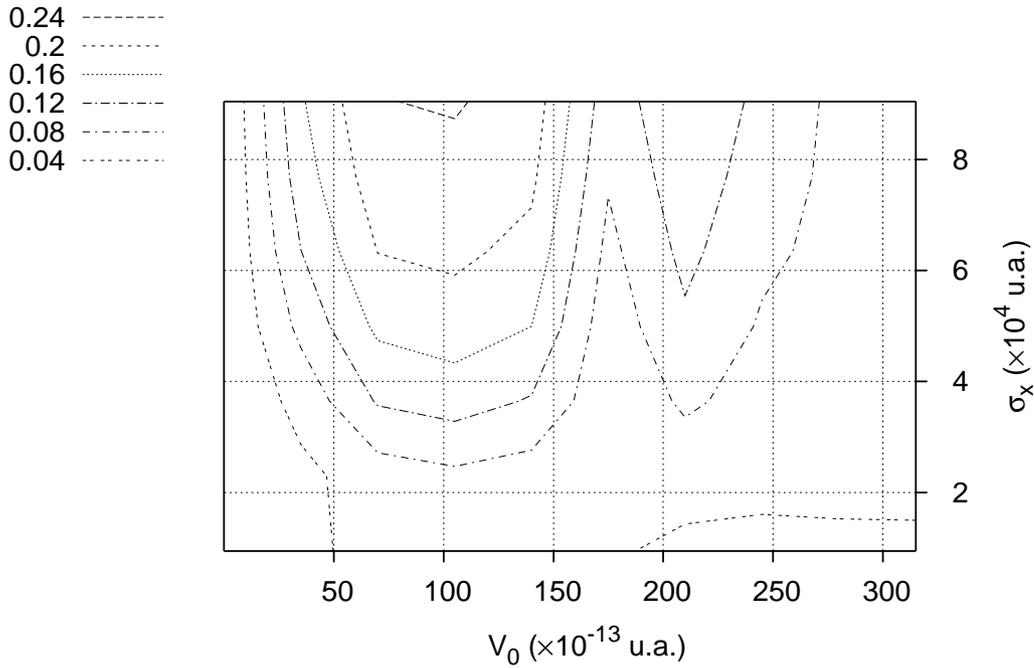


Figura 6: G_{max}^q (adimensional) frente a σ_x y V_0 evaluado para la colisión de un paquete de ondas Gaussiano inicial (23) contra la barrera cuadrada (25). Se ha tomado $m = 1.558 \times 10^5$ u.a., $\hbar = 1$ u.a., $p_c = 2.85 \times 10^{-3}$ u.a., $x_c = 7 \times 10^5$ u.a. La barrera de potencial está centrada en la posición $x_0 = 1.2 \times 10^6$ u.a., con $\delta_C = 2.5 \times 10^4$ u.a.

[10], donde $\Omega(x)$ es la frecuencia de Rabi, y Δ es el *desintonizado* (diferencia entre las frecuencias del láser y de la transición atómica)⁵. En los sistemas analizados en esta memoria se ha supuesto que los “ritmos de decaimiento” de los niveles atómicos relevantes (inversos del tiempo de vida o coeficientes de Einstein), γ , son despreciables o pueden inhibirse. Un estudio más realista de estos mecanismos de interferencia debería incluir posibles pérdidas asociadas con un valor de γ no nulo, pero los resultados no variarían mucho cualitativamente siempre que los niveles

⁵En estos casos debe verificarse $|\Delta + i\gamma| \gg E/\hbar$, donde γ es el ritmo de emisión espontánea del átomo, y E es la energía asociada con la componente central del momento del paquete de ondas incidente [10].

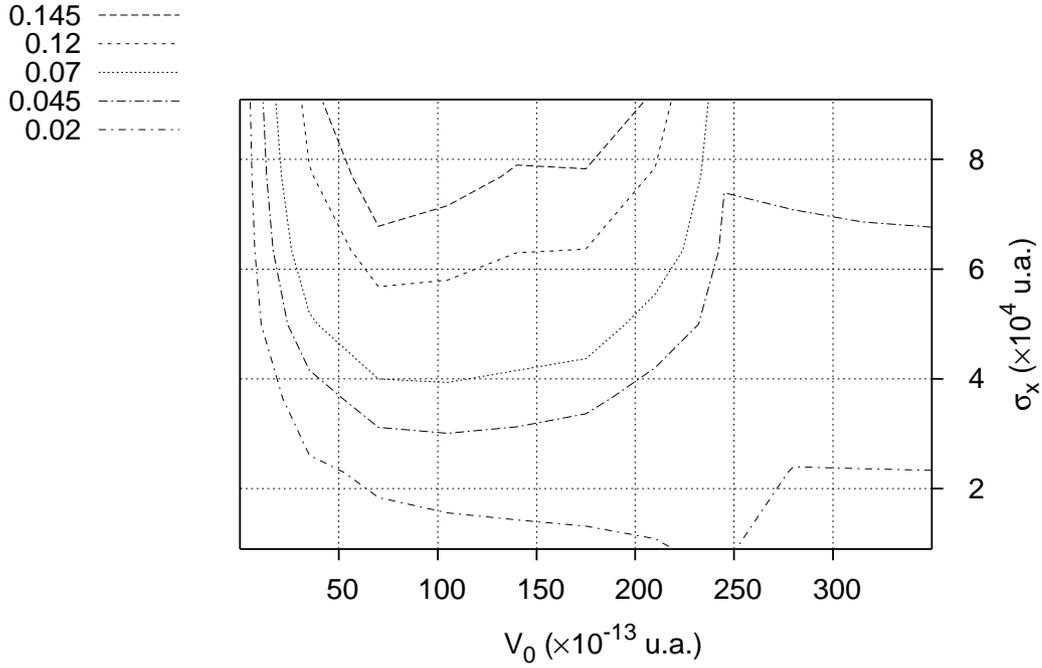


Figura 7: G_{max}^q (adimensional) frente a σ_x y V_0 evaluado para la colisión de un paquete de ondas Gaussiano inicial (23) contra la barrera Gaussiana (24) de anchura $\sigma_v = 10^4$ u.a. (el resto de datos toman los mismos valores que para la figura 6).

atómicos no fueran tan inestables como para tener que considerar una población apreciable en niveles atómicos que, ahora sí, serían relevantes para el estudio de la dinámica.

Para observar experimentalmente los efectos cuánticos descritos en esta memoria es necesario medir la distribución de momentos *durante la colisión*, lo que se puede conseguir “apagando” súbitamente el potencial en el instante t_c (durante la colisión), de manera que la distribución de momentos quede “congelada” a partir de ese instante como $|\psi(p, t_c)|^2$, ya que la evolución libre posterior no produciría modificaciones en ella (salvo por una fase irrelevante). Esta distribución puede en principio medirse utilizando alguna técnica de *tiempo de vuelo*. Idealmente, el “apagado” del

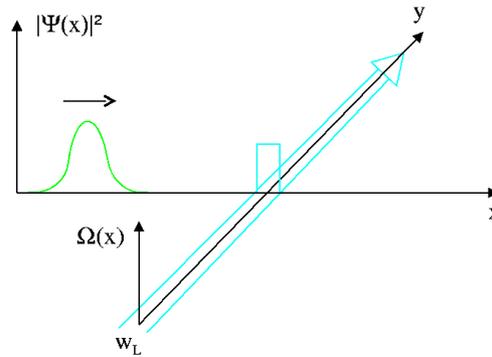


Figura 8: Esquema del experimento: Una paquete de ondas que describe un haz de átomos se desplaza a lo largo del eje x en dirección hacia una región por donde se propaga perpendicularmente el haz de un láser con frecuencia ω_L . La frecuencia de Rabi, $\Omega(x)$, es una función de x cuyo cuadrado es proporcional a la intensidad del láser, y que se supone que tiene aproximadamente perfil cuadrado.

potencial tendría que realizarse de forma instantánea puesto que en caso contrario la distribución sufriría alguna distorsión.

De hecho, el movimiento de los átomos ultrafríos es tan lento, del orden de milímetros por segundo⁶, que el potencial puede desconectarse en una escala de tiempos súbita con respecto al movimiento atómico. Además, se puede dar al potencial una forma casi arbitraria con grosores mínimos del orden de las longitudes de de Broglie de los átomos ultrafríos, que, a estas temperaturas, son del orden de la micra (10^{-6} m). Las distintas formas funcionales para $V(x)$ se consiguen desplazando rápidamente (con respecto a las velocidades del movimiento atómico) el haz láser, de manera que el átomo se vea sometido a un potencial promediado temporalmente. Aunque los efectos analizados en esta memoria se observan independientemente de la forma detallada del potencial, desde un punto de vista experimentalmente más práctico resulta conveniente considerar formas funcionales de tipo Gaussiano para la barrera.

Los valores que se eligieron para el segundo juego de parámetros de las simulaciones corresponden a colisiones de átomos de Rubidio y Cesio ultrafríos [11]. Se

⁶Los átomos de Rubidio, por ejemplo, se han conseguido enfriar hasta temperaturas de 700 nanoKelvin mediante técnicas de enfriamiento por láser [11].

supone que los átomos son preparados en un estado puro representado por una función de onda Gausiana de mínimo producto de incertidumbres (23). Los valores concretos de los parámetros que describen la colisión se especifican en las secciones correspondientes, aunque en el Apéndice B se presenta una tabla con los intervalos de valores utilizados en nuestros estudios.

Objetivos del trabajo

El objetivo general de este trabajo es continuar y completar el estudio de la distribución de momentos durante la colisión cuántica, y el desarrollo en su estructura de fenómenos interferenciales análogos a los descritos en la Introducción. En particular, los objetivos concretos fueron:

- Desarrollar una solución analítica de la colisión de un paquete Gausiano con una barrera cuadrada. Con ello se pretende superar las dificultades que conlleva el estudio puramente numérico del efecto y de sus dependencias, en primer lugar; y poder entender y predecir su importancia, en segundo lugar.
- Estudiar el origen del mecanismo que magnifica el efecto BM observado en las figuras 6 y 7.
- Tratar de simular numéricamente de manera más realista situaciones experimentales susceptibles de permitir la observación y el estudio de estos fenómenos. En particular, incluir el efecto de la gravedad en la dinámica del sistema.
- Estudiar la viabilidad de la observación experimental del efecto mediante colisiones de átomos de Rubidio o Cesio con potenciales efectivos creados por campos láser que pueden “encenderse” y “apagarse” a voluntad.
- Buscar condiciones que aumenten la magnitud o la duración del fenómeno de interferencia. En particular, se analizará el caso de una colisión con una doble barrera cuadrada, que previsiblemente pueda permitir una mejor observación y medida del efecto.

Organización de la memoria

En el Capítulo 1 de esta memoria se presenta el formalismo que permite describir de forma compacta los distintos efectos de interferencia que se discuten en esta

memoria. En el Capítulo 2 se presenta la solución analítica para la colisión de un paquete de ondas Gausiano con una barrera cuadrada, lo que permite, por un lado, realizar cálculos con un pequeño esfuerzo computacional y, por otro, desarrollar expresiones aproximadas. En el Capítulo 3 se estudia el fenómeno de interferencia que tiene lugar en el espacio de momentos entre partes de la función de onda que ocupan regiones diferentes en el espacio de coordenadas. En el Capítulo 4 se presenta el fenómeno de interferencia para un sistema de barreras que permite extender el efecto en el tiempo y hacerlo más robusto con vistas a una posible observación experimental y control. En el Capítulo 5 se plantea una analogía entre la observación de este fenómeno de interferencia y el que presenta un experimento paradigmático para la Teoría Cuántica como es el de la doble rendija. En el Capítulo 6 se presentan de manera resumida las principales conclusiones de este trabajo. La memoria presenta finalmente 7 apéndices, que extienden algunos de los desarrollos presentados en los capítulos anteriores, y una sección que recopila la bibliografía más relevante utilizada para este trabajo.

Capítulo 1

Interferencia en representación de momentos: Formalismo

Todos los estudios descritos en esta memoria se basan en diversos efectos cuánticos de interferencia que se ponen de manifiesto más directamente en la representación de momentos y, como se verá más adelante, en algunas representaciones de la mecánica cuántica en el espacio de fases. Para llevar a cabo este análisis de forma detallada y ordenada, es conveniente presentar en primer lugar el formalismo que hemos desarrollado y que nos permite englobar varios de estos efectos bajo el mismo esquema y notación.

Para esto, consideremos la solución formal a la ecuación de Schrödinger en representación de momentos,

$$\psi(p, t) = \langle p | e^{-iHt/\hbar} | \psi(t=0) \rangle, \quad (1.1)$$

que describe el movimiento en una dimensión¹ de partículas de masa m sometidas a la acción de un operador Hamiltoniano H , independiente del tiempo, y que incluye un término de energía cinética y uno de interacción con una barrera de potencial.

La base de estados estacionarios de colisión para este sistema físico, con valores propios $E' \equiv p'^2/2m$, $\{|\phi_{p'}\rangle, p' \in (-\infty, \infty)\}$, se construye imponiendo condiciones

¹El estudio se puede generalizar fácilmente al caso de dos o tres dimensiones espaciales. En los siguientes capítulos se estudian sistemas físicos realistas, donde átomos moviéndose en dos dimensiones espaciales interactúan con un haz láser que se propaga en la dirección perpendicular a la que inicialmente siguen las partículas. En los casos analizados el estudio del sistema se puede reducir al de una propagación en una única dimensión espacial, de manera que las ecuaciones obtenidas en este capítulo pueden aplicarse directamente, sin ninguna extensión al caso de más dimensiones espaciales.

de contorno (fuera de la región del potencial) asociadas con una onda plana incidente con momento p' (positivo a la izquierda de la barrera y negativo a la derecha).

Introduciendo la relación de cierre $\int_{-\infty}^{+\infty} |\phi_{p'}\rangle \langle \phi_{p'}| dp' = \mathbf{1}$ en la ecuación (1.1), se tiene

$$\psi(p, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle p|\phi_{p'}\rangle e^{-iE't/\hbar} \langle \phi_{p'}|\psi(t=0)\rangle dp', \quad (1.2)$$

que representa una combinación lineal de estados estacionarios, pesados con el término $\langle \phi_{p'}|\psi(t=0)\rangle e^{-iE't/\hbar}$. Utilizando la ecuación (6) del capítulo anterior, que en este caso se escribe

$$|\phi_{p'}\rangle = \Omega_+ |p'\rangle, \quad (1.3)$$

se tiene

$$\langle \phi_{p'}|\psi(t=0)\rangle = \langle p'|\Omega_+^\dagger |\psi(t=0)\rangle. \quad (1.4)$$

Si el estado inicial, definido a tiempo $t = 0$, se encuentra alejado de la zona de colisión, la acción de H y H_0 será equivalente, por lo que se verificará que $|\psi(t=0)\rangle = \Omega_+ |\psi(t=0)\rangle$, y por lo tanto, teniendo en cuenta la propiedad (8),

$$\langle \phi_{p'}|\psi(t=0)\rangle = \langle p'|\Omega_+^\dagger \Omega_+ |\psi(t=0)\rangle = \langle p'|\psi(t=0)\rangle. \quad (1.5)$$

Este resultado permite concluir que $\psi(p, t)$ se puede escribir como

$$\psi(p, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle p|\phi_{p'}\rangle e^{-iE't/\hbar} \langle p'|\psi(t=0)\rangle dp'. \quad (1.6)$$

Supondremos también que la contribución inicial de los momentos negativos en el paquete de ondas es despreciable. Esto permitirá en su momento modificar el contorno de integración para resolver la integral en el plano complejo: El elemento de matriz $\langle p|\phi_{p'}\rangle$ se interpretará fuera del semieje positivo como la continuación analítica de su expresión en la semirrecta $p' > 0$.

La expresión (1.6) explica el aumento en la probabilidad de encontrar momentos altos en la distribución cuántica con respecto a la distribución inicial (efecto BM) en función de un proceso de interferencia (superposición) de distintas componentes de $\psi(p', t=0)$, pesadas con los términos $\langle p|\phi_{p'}\rangle e^{-iE't/\hbar}$, que se “refuerzan” transitoriamente en la región de momentos más altos, en contra de lo que clásicamente sería de esperar. Esta interferencia es un proceso en general muy complicado, ya que implica a una infinidad de componentes que se suman (integran) para producir ese aumento

de norma. En algunos casos, sin embargo, la integral (1.6) se puede expresar como una suma discreta de términos que de forma aproximada puede escribirse, a su vez, como un sumatorio finito de contribuciones. En estos casos, el origen de ciertos fenómenos de interferencia puede explicarse de manera clara, como se pondrá de manifiesto en los próximos capítulos, y este conocimiento permite utilizarlos para reproducir y controlar diversos patrones en la representación de momentos de la función de onda.

Consideremos ahora la siguiente descomposición de los estados $|\phi_{p'}\rangle$ en su representación de posiciones, $\langle x|\phi_{p'}\rangle = \sum_{i=1}^N g_i(x; p')$. En el caso particular en que el potencial consista en una asociación de regiones de potencial constante (barrera cuadrada, por ejemplo), esta descomposición puede interesar que se corresponda con estas regiones, pero no es necesario. En representación de momentos se tiene

$$\langle p|\phi_{p'}\rangle = \sum_{i=1}^N \tilde{g}_i(p; p'), \quad (1.7)$$

donde $\tilde{g}_i(p; p') \equiv \text{TF} [g_i(x; p')]$ y TF denota la transformada de Fourier. Sustituyendo la ecuación (1.7) en la expresión (1.6), la función de onda total se puede escribir como

$$\psi(p, t) = \sum_{i=1}^N \varphi_i(p, t), \quad (1.8)$$

donde

$$\varphi_i(p, t) \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{g}_i(p; p') e^{-iE't/\hbar} \langle p'|\psi(t=0)\rangle dp', \quad i = 1, \dots, N. \quad (1.9)$$

Cada sumando en (1.8) está asociado con una región espacial bien definida, lo que permitirá poner de manifiesto procesos de interferencia entre partes de la función de onda en coordenadas que contribuyen de forma muy diferente en una misma región del espacio de momentos.

En los siguientes capítulos se utilizará esta expresión aplicada a distintos casos particulares. Estudiaremos situaciones para los que sólo algunos de los sumandos en (1.8) tienen valores apreciables y las principales características de la evolución temporal pueden estudiarse de forma sencilla en función de unos pocos sumandos que interfieren constructiva o destructivamente. Además, se presentarán técnicas que permiten evaluar expresiones analíticas para los sumandos más relevantes en (1.8) y, por tanto, evitar cálculos numéricos pesados, así como obtener expresiones aproximadas con las que “comprender” el origen de algunos de los efectos más significativos que se observan en la colisión en representación de momentos.

Capítulo 2

Colisión de un paquete de ondas Gausiano con un barrera cuadrada: solución analítica

Como ya se comentó en el capítulo introductorio, los recursos computacionales necesarios para efectuar algunos de los cálculos de propagaciones descritos son un factor limitante importante para el estudio.

De hecho, el análisis de la dinámica de paquetes de onda espacialmente más anchos que los utilizados para construir la figura 6, por ejemplo, se hace difícil mediante el método numérico empleado. Además, la mera contemplación de los resultados numéricos no permite comprender el fenómeno. Estas dificultades pueden superarse si se dispone de una expresión analítica que describa la evolución, y cuya obtención será el objetivo de este capítulo [12].

Un ejemplo paradigmático de las colisiones cuánticas es una partícula de masa m , representada inicialmente por una función Gausiana de mínimo producto de incertidumbres, que incide sobre una barrera cuadrada de potencial. A pesar de su simplicidad, este modelo permite observar y estudiar un elevado número de problemas y efectos cuánticos de gran interés, tales como el de tunelaje [13]-[19], las resonancias [20], el efecto Hartman [15],[21]-[25], y el tiempo de retraso o de reflexión debido a pozos cuánticos, donde la altura del potencial es negativa [26]. Por otro lado, también ha sido empleado como sistema físico de referencia sobre el que comprobar la validez y calidad de diferentes métodos numéricos aproximados de propagación [27, 28], para ilustrar y verificar teorías del estado cuántico de

transición [29], o para contrastar definiciones y propiedades de distintas magnitudes introducidas para caracterizar duraciones de procesos cuánticos o, alternativamente, instantes en que éstos ocurren: el tiempo de llegada, los tiempos de permanencia o decaimiento, y el comportamiento asintótico para tiempos grandes [30]-[32].

Excepto para tratamientos analíticos aproximados [21], la solución de este modelo de colisión dependiente del tiempo siempre ha sido obtenido por métodos numéricos, usando normalmente transformadas rápidas de Fourier, sistemas tridiagonales, o combinaciones lineales de las soluciones de la ecuación de Schrödinger estacionaria. Goldberg, Schey, y Schwartz fueron los primeros en resolver el modelo a través de ecuaciones diferenciales [26]. Mientras que en algunos casos estos métodos pueden ser adecuados, para otras aplicaciones las aproximaciones numéricas pueden consumir un tiempo desmesurado o incluso resultar inútiles. Es por esto que una solución analítica, en términos de funciones conocidas, tiene un gran interés práctico. En general una solución analítica no sólo se usa para calcular más rápidamente; también tiene el valor de proporcionarnos conocimiento físico sobre el sistema, frecuentemente al realizar aproximaciones que extraen la contribución dominante en diferentes límites, rangos de parámetros y regímenes. Existen algunos otros modelos físicos de colisiones dependientes del tiempo resolubles: un estado Lorentziano en colisión con (1) un potencial tipo función delta [33]-[35], o con (2) un potencial exponencial separable [35, 36]; y (3) una onda plana “truncada” que incide sobre una barrera cuadrada [37, 38]. Aunque todos sirven para calcular e ilustrar propiedades particulares de las colisiones, el presente modelo es el único que combina simultáneamente un potencial local, la presencia de resonancias, y un estado físico inicial del espacio de Hilbert con momentos finitos.

2.1. Obtención de la solución explícita

Estados de colisión

Para una barrera de potencial cuadrada de altura V_0 centrada en el origen de coordenadas y con anchura d , los estados de colisión $|\phi_{p'}\rangle$ con $p' > 0$ se escriben en

representación de posiciones como

$$\langle x|\phi_{p'}\rangle = \frac{1}{h^{1/2}} \begin{cases} e^{ip'x/\hbar} + R(p')e^{-ip'x/\hbar} & x < -d/2 \\ C(p')e^{ip''x/\hbar} + D(p')e^{-ip''x/\hbar} & -d/2 \leq x \leq d/2 \\ T(p')e^{ip'x/\hbar} & x > d/2, \end{cases} \quad (2.1)$$

donde $p'' = \sqrt{p'^2 - 2mV_0}$, y se ha dado el valor $h^{-1/2}$ al coeficiente de la onda plana incidente, lo que equivale a suponer la normalización de una delta de Dirac para los autovectores del Hamiltoniano. Para determinar el valor de los restantes coeficientes, $R(p')$ (amplitud de reflexión), $C(p')$, $D(p')$ y $T(p')$ (amplitud de transmisión), se imponen condiciones de continuidad de la función de onda y de su derivada en los puntos $-d/2$ y $d/2$ para cada valor de p' , y se obtiene un sistema algebraico de cuatro ecuaciones con cuatro incógnitas,

$$e^{-ip'd/2\hbar} + Re^{ip'd/2\hbar} = Ce^{-ip''d/2\hbar} + De^{ip''d/2\hbar} \quad (2.2)$$

$$ip'e^{-ip'd/2\hbar} - ip'Re^{ip'd/2\hbar} = ip''Ce^{-ip''d/2\hbar} - ip''De^{ip''d/2\hbar} \quad (2.3)$$

$$Ce^{ip'd/2\hbar} + De^{-ip'd/2\hbar} = Te^{ip'd/2\hbar} \quad (2.4)$$

$$ip''Ce^{ip'd/2\hbar} - ip''De^{-ip'd/2\hbar} = ip'Te^{ip'd/2\hbar}. \quad (2.5)$$

La resolución del sistema conduce a

$$\begin{aligned} R(p') &= \frac{i \left(\frac{p''}{p'} - \frac{p'}{p''} \right) \text{sen}(p'd/\hbar) e^{-ip'd/\hbar}}{2\Omega(p')} \\ C(p') &= \frac{\left(1 + \frac{p'}{p''} \right) e^{-i(p'+p'')d/2\hbar}}{2\Omega(p')} \\ D(p') &= \frac{\left(1 - \frac{p'}{p''} \right) e^{-i(p'-p'')d/2\hbar}}{2\Omega(p')} \\ T(p') &= \frac{e^{-ip'd/\hbar}}{\Omega(p')}, \end{aligned} \quad (2.6)$$

donde

$$\Omega(p') \equiv \cos(p''d/\hbar) - \frac{i}{2} \left(\frac{p''}{p'} + \frac{p'}{p''} \right) \text{sen}(p''d/\hbar). \quad (2.7)$$

El estado $|\phi_{p'}\rangle$ en representación de momentos se obtiene a través de una transformación de Fourier de la expresión (2.1),

$$\langle p|\phi_{p'}\rangle = \frac{1}{h^{1/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ipx/\hbar} \langle x|\phi_{p'}\rangle dx. \quad (2.8)$$

Descomponiendo la integración en regiones se tiene en primer lugar (para el intervalo con $x < -d/2$),

$$\begin{aligned} \frac{1}{\hbar^{1/2}} \int_{-\infty}^{-d/2} e^{-ipx/\hbar} \langle x | \phi_{p'} \rangle dx &= \frac{1}{\hbar} \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_{d/2}^{\infty} e^{i(p-p')x/\hbar} e^{-\epsilon x} dx \\ &+ \frac{1}{\hbar} R(p') \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_{d/2}^{\infty} e^{i(p+p')x/\hbar} e^{-\epsilon x} dx \\ &= \frac{i}{2\pi} \left[\frac{e^{i(p-p')d/2\hbar}}{p-p'+i\hbar 0^+} + \frac{R(p') e^{i(p+p')d/2\hbar}}{p+p'+i\hbar 0^+} \right], \end{aligned} \quad (2.9)$$

donde se ha introducido la exponencial $e^{-\epsilon x}$, con $\epsilon > 0$, y a continuación se ha tomado el límite $\epsilon \rightarrow 0^+$, para garantizar la convergencia en la integral.

Los dos sumandos en la última línea de la ecuación anterior se identificarán a partir de ahora con las funciones

$$\tilde{g}_I(p; p') \equiv \frac{i}{2\pi} \frac{e^{i(p-p')d/2\hbar}}{p-p'+i\hbar 0^+} \quad (2.10)$$

$$\tilde{g}_R(p; p') \equiv \frac{i}{2\pi} \frac{R(p') e^{i(p+p')d/2\hbar}}{p+p'+i\hbar 0^+}. \quad (2.11)$$

De acuerdo con la notación introducida en el capítulo 1, $g_I(x; p')$ y $g_R(x; p')$ se definen como $h^{-1/2} e^{ip'x/\hbar}$ y $h^{-1/2} R(p') e^{-ip'x/\hbar}$ respectivamente, para $x < -d/2$, y son nulas para $x \geq -d/2$.

Para la integración en el intervalo $-d/2 \leq x \leq d/2$ se tiene

$$\begin{aligned} \frac{1}{\hbar^{1/2}} \int_{-d/2}^{d/2} e^{-ipx/\hbar} \langle x | \phi_{p'} \rangle dx &= \frac{i}{2\pi} \frac{C(p')}{p-p''} \left(e^{-i(p-p'')d/2\hbar} - e^{i(p-p'')d/2\hbar} \right) \\ &+ \frac{i}{2\pi} \frac{D(p')}{p+p''} \left(e^{-i(p+p'')d/2\hbar} - e^{i(p+p'')d/2\hbar} \right) \\ &= -\frac{i}{\pi} \frac{C(p')}{p-p''} \text{sen}[(p-p'')d/2\hbar] \\ &- \frac{i}{\pi} \frac{D(p')}{p+p''} \text{sen}[(p+p'')d/2\hbar], \end{aligned} \quad (2.12)$$

donde ahora los dos últimos sumandos se denotan como

$$\tilde{g}_C(p; p') \equiv -\frac{i}{\pi} \frac{C(p')}{p-p''} \text{sen}[(p-p'')d/2\hbar] \quad (2.13)$$

$$\tilde{g}_D(p; p') \equiv -\frac{i}{\pi} \frac{D(p')}{p+p''} \text{sen}[(p+p'')d/2\hbar], \quad (2.14)$$

que son transformadas de Fourier de las funciones $g_C(x; p') \equiv h^{-1/2} C(p') e^{ip'x/\hbar} \Theta(-d/2, d/2)$ y $g_D(x; p') \equiv h^{-1/2} D(p') e^{-ip'x/\hbar} \Theta(-d/2, d/2)$, respectivamente, donde $\Theta(-d/2, d/2)$ es una función que vale 1 en el intervalo $(-d/2, d/2)$ y cero fuera de él.

Para $x > d/2$

$$\begin{aligned} \frac{1}{h^{1/2}} \int_{d/2}^{+\infty} e^{-ipx/\hbar} \langle x | \phi_{p'} \rangle dx &= -\frac{i}{2\pi} \frac{T(p')}{p - p' - i\hbar 0^+} e^{-i(p-p')d/2\hbar} \\ &\equiv \tilde{g}_T(p; p'), \end{aligned} \quad (2.15)$$

que es la transformada de Fourier de $g_T(x; p') \equiv h^{-1/2} T(p') e^{ip'x/\hbar} \Theta(d/2)$, donde $\Theta(d/2)$ representa una función escalón, que es nula para $x < d/2$ y vale 1 para $x > d/2$.

Las distintas funciones obtenidas se han denotado utilizando el subíndice correspondiente al coeficiente I (*incidencia*, al que se ha dado el valor $h^{-1/2}$), R , C , D ó T que la origina. Así se puede tener una expresión compacta para los estados de colisión en representación de momentos

$$\langle p | \phi_{p'} \rangle = \tilde{g}_I(p; p') + \tilde{g}_R(p; p') + \tilde{g}_C(p; p') + \tilde{g}_D(p; p') + \tilde{g}_T(p; p'), \quad (2.16)$$

que representa un caso particular de la ecuación (1.7).

Estado inicial

El estado inicial del sistema se supone que tiene la forma de un paquete de ondas Gausiano de mínimo producto de incertidumbres que se encuentra a la izquierda del potencial, siendo despreciable el solapamiento con éste. En la representación de momentos vendrá dado por (23)

$$\langle p | \psi(t=0) \rangle = \left(\frac{2\delta_x}{\pi\hbar^2} \right)^{1/4} \exp \left[\frac{-\delta_x (p - p_c)^2}{\hbar^2} - \frac{ipx_c}{\hbar} \right], \quad (2.17)$$

donde $\delta_x \equiv \sigma_x^2$ es la varianza en posiciones, p_c es el valor medio del momento incidente y x_c el valor medio de la posición en el instante inicial ($x_c < 0$).

Expresión analítica para $\psi(p, t)$

Sustituyendo las expresiones del estado de colisión (2.16) y del estado inicial anterior en la ecuación (1.6),

$$\psi(p, t) = \frac{i\tau'}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ e^{\phi(p')} [\tilde{g}'_I(p; p') + \tilde{g}'_R(p; p')] \right. \quad (2.18)$$

$$+ \tilde{g}'_C(p; p') + \tilde{g}'_D(p; p') + \tilde{g}'_T(p; p')\} dp',$$

con

$$\tau' \equiv \left(\frac{2\delta_x}{\pi\hbar^2} \right)^{1/4}. \quad (2.19)$$

El término $\phi(p')$ en la exponencial viene dado por

$$\phi(p') = \frac{-ip'^2 t}{2m\hbar} - \frac{\delta_x (p' - p_c)^2}{\hbar^2} - \frac{ip' x_c}{\hbar} - \frac{ip' d}{2\hbar}, \quad (2.20)$$

y las magnitudes “primadas” $\tilde{g}'_i(p; p')$ están definidas a partir de la correspondiente $\tilde{g}_i(p; p')$ de acuerdo con la relación $\tilde{g}'_i(p; p') \equiv -2\pi i e^{ip'd/2\hbar} \tilde{g}_i(p; p')$, por conveniencia de notación.

Los términos $\tilde{g}'_I(p; p')$, $\tilde{g}'_R(p; p')$ y $\tilde{g}'_T(p; p')$ presentan polos “estructurales”¹ de primer orden [39] en los puntos

$$\begin{aligned} p'_I &= p + i\hbar 0^+ \\ p'_R &= -p - i\hbar 0^+ \\ p'_T &= p - i\hbar 0^+, \end{aligned} \quad (2.21)$$

mientras que $\tilde{g}'_C(p; p')$ y $\tilde{g}'_D(p; p')$ únicamente presentan singularidades evitables en los puntos $p' = \pm\sqrt{p^2 + 2mV_0}$. Todas estas funciones, salvo $\tilde{g}'_I(p; p')$, presentan una sucesión infinita de polos resonantes y anti-resonantes en el cuarto y tercer cuadrantes respectivamente, p'_j ($j = 1, \dots, \infty$), que son ceros del término $\Omega(p')$, ecuación (2.7), que entra dividiendo en la expresión para los coeficientes R , C , D y T (véase el Apéndice C). Consecuentemente, todos los polos, a excepción del “polo incidente” p'_I , se encuentran en el semiplano complejo negativo.

Para resolver la integral (2.18), se considera el integrando como función de la variable compleja p' y se deforma el contorno de integración a lo largo del camino de máxima pendiente de descenso (véase el Apéndice D). El punto estacionario $z_{p'}$ de $\phi(p')$ en el plano complejo es solución de la ecuación $\left. \frac{d\phi(p')}{dp'} \right|_{z_{p'}} = 0$,

$$z_{p'} \equiv \frac{m \left[4mp_c \delta_x^2 - (x_c + d/2) \hbar^2 t \right] - i2m\hbar \left[m\delta_x (x_c + d/2) + p_c \delta_x t \right]}{4m^2 \delta_x^2 + t^2 \hbar^2}. \quad (2.22)$$

¹Los polos “estructurales” no se asocian con resonancias, y aparecen como consecuencia de la representación elegida.

Por otra parte, $\left. \frac{d^2\phi(p')}{dp'^2} \right|_{z_{p'}} \neq 0$, de manera que $z_{p'}$ es un punto de silla sencillo ($n = 2$). Las ecuaciones de los caminos de máxima pendiente de descenso que parten de $z_{p'}$ vendrán dadas por

$$-(p_r'^2 - p_i'^2) \left(\frac{2tp_c^2\hbar}{m\delta_x} \right) - p_r'p_i' \left(\frac{2}{\hbar^2} \right) + p_r' \left(\frac{d/2 - x_c}{\delta_x\hbar} \right) + p_i' \left(\frac{2p_c}{\hbar^2} \right) - \text{Im}[\phi(p')] = 0, \quad (2.23)$$

donde p_r' y p_i' son las partes real e imaginaria de la variable compleja p' , respectivamente. La ecuación (2.23) corresponde a una cónica. Utilizando los resultados descritos en el Apéndice E, la ecuación anterior en coordenadas homogéneas tiene la forma

$$(p_i'^2 - p_r'^2) \left(\frac{2tp_c^2\hbar}{m\delta_x} \right) - p_r'p_i' \left(\frac{2}{\hbar^2} \right) + p_r'Z \left(\frac{d/2 - x_c}{\delta_x\hbar} \right) + p_i'Z \left(\frac{2p_c}{\hbar^2} \right) - Z^2\text{Im}[\phi(p')] = 0, \quad (2.24)$$

donde la matriz asociada es

$$L \equiv \begin{pmatrix} -\frac{2tp_c^2\hbar}{m\delta_x} & -\frac{1}{\hbar^2} & \frac{d/2-x_c}{2\delta_x\hbar} \\ -\frac{1}{\hbar^2} & \frac{2tp_c^2\hbar}{m\delta_x} & \frac{p_c}{\hbar^2} \\ \frac{d/2-x_c}{2\delta_x\hbar} & \frac{p_c}{\hbar^2} & -\text{Im}[\phi(p')] \end{pmatrix}. \quad (2.25)$$

Como su determinante es cero, $\det(L) = 0$, la cónica se dice que es degenerada y describe dos rectas. Tomando el menor L_{33} y calculando el determinante,

$$\det(L_{33}) = -\frac{p_c^2 t^2 \hbar^4 + 4m^2 p_c^2 \delta_x^2 \hbar^2}{4m^2 p_c^2 \delta_x^2 \hbar^6} < 0, \quad (2.26)$$

se comprueba que las dos rectas son reales (p_r' y p_i' son reales), que tienen un punto común, el punto de silla $z_{p'}$, y que sus direcciones, que corresponden a las de máxima pendiente de descenso y ascenso, se obtienen utilizando el teorema 1 del Apéndice D.

Para determinar las direcciones de máxima pendiente de descenso primero se evalúa

$$\left. \frac{d^2\phi(p')}{dp'^2} \right|_{z_{p'}} = -\frac{2\delta_x}{\hbar^2} - i\frac{t}{m\hbar} = \rho e^{i\gamma}, \quad (2.27)$$

donde

$$\rho = \sqrt{\frac{4m^2\delta_x^2 + t^2\hbar^2}{m^2\hbar^4}}, \quad (2.28)$$

$$\gamma = \text{arctg} \left(\frac{t\hbar}{2m\delta_x} \right) + \pi. \quad (2.29)$$

Los ángulos que definen los caminos de máxima pendiente de descenso son

$$\theta_0 = \frac{-\gamma + \pi}{2} = \frac{-\operatorname{arctg}\left(\frac{t\hbar}{2m\delta_x}\right)}{2}, \quad (2.30)$$

$$\theta_1 = \frac{-\gamma + 3\pi}{2} = \frac{-\operatorname{arctg}\left(\frac{t\hbar}{2m\delta_x}\right)}{2} + \pi. \quad (2.31)$$

A continuación se deforma el contorno de integración en (2.18), el eje real, para obtener la recta en el plano complejo p' , $\Gamma_{p'}$, que sigue el camino de máxima pendiente de descenso, incluyendo un círculo alrededor de los polos que hayan sido cruzados al deformar el contorno de integración.

Se completa ahora el cuadrado en $\phi(p')$ [ecuación (2.20)] y se realiza el siguiente cambio de variable

$$u \equiv \frac{p' - z_{p'}}{f}, \quad (2.32)$$

donde

$$f \equiv \left(\frac{\delta_x}{\hbar^2} + i \frac{t}{2m\hbar} \right)^{-1/2}, \quad (2.33)$$

de manera que la integral (2.18) queda expresada en el plano complejo u como

$$\begin{aligned} \psi(p, t) &= \frac{i\tau' f}{2\pi} e^{-(\delta_x p_c^2/\hbar^2) + \eta^2} \int_{\Gamma_u} [\tilde{g}'_I(p; u) + \tilde{g}'_R(p; u) \\ &+ \tilde{g}'_C(p; u) + \tilde{g}'_D(p; u) + \tilde{g}'_T(p; u)] e^{-u^2} du, \end{aligned} \quad (2.34)$$

donde

$$\eta \equiv \frac{f}{2} \left(\frac{2p_c \delta_x}{\hbar^2} - i \frac{(x_c + d/2)}{\hbar} \right), \quad (2.35)$$

$\tilde{g}'_A(p; u) \equiv \tilde{g}'_A(p; p' = fu + z_{p'})$, y Γ_u será la transformación del contorno $\Gamma_{p'}$ de acuerdo con el cambio de variable (2.32). En el plano complejo u , el punto de silla se encuentra en $z_u = 0$, y el camino de máxima pendiente de descenso verifica $\operatorname{Im}[-u^2] = 0$ y coincide con el eje real en el plano u (véase el teorema 1, Apéndice D). Así, el cambio de variable anterior transforma el camino de máxima pendiente de descenso en el plano complejo p' , en la recta real del plano complejo u , yendo Γ_u desde $-\infty$ a $+\infty$ e incluyendo un círculo alrededor de los polos cruzados al deformar el contorno de integración en el plano complejo p' . El cambio de variable (2.32) produce una traslación del origen de coordenadas que lleva el punto $z_{p'}$ a $z_u = 0$, y realiza una rotación, cuantificada por el parámetro f , de un ángulo de $-\frac{1}{2} \operatorname{arctg}\left(\frac{t\hbar}{2m\delta_x}\right)$, además de un cambio de escala.

Puesto que $\tilde{g}'_I, \tilde{g}'_R, \tilde{g}'_T$ y $\tilde{g}'_{CD} \equiv \tilde{g}'_C + \tilde{g}'_D$ son funciones meromórficas con polos simples, en cada una de ellas es útil extraer explícitamente la contribución de las singularidades. Las contribuciones de los términos de las singularidades dan lugar a integrales que se identifican con funciones w de diferentes argumentos (véase el Apéndice F). Las integrales resultantes, una vez sustraídos los términos que conducen a funciones w , no presentan divergencias y se resuelven desarrollando en serie los integrandos, *restos*, que denotamos por $h_R(u)$, $h_{CD}(u)$ y $h_T(u)$. Así,

$$\begin{aligned}\tilde{g}'_I(p; u) &= \frac{\mathcal{R}_I}{u - u_I} \\ \tilde{g}'_R(p; u) &= \frac{\mathcal{R}_R}{u - u_R} + \sum_{j=1}^{\infty} \frac{\mathcal{R}_{Rj}}{u - u_j} + h_R(u) \\ \tilde{g}'_{CD}(p; u) &= \sum_{j=1}^{\infty} \frac{\mathcal{R}_{Cj} + \mathcal{R}_{Dj}}{u - u_j} + h_{CD}(u) \\ \tilde{g}'_T(p; u) &= \frac{\mathcal{R}_T}{u - u_T} + \sum_{j=1}^{\infty} \frac{\mathcal{R}_{Tj}}{u - u_j} + h_T(u),\end{aligned}\tag{2.36}$$

donde

$$\begin{aligned}u_I &= f^{-1}(p + i\hbar 0^+ - z_{p'}) \\ u_R &= f^{-1}(-p - i\hbar 0^+ - z_{p'}) \\ u_T &= f^{-1}(p - i\hbar 0^+ - z_{p'})\end{aligned}\tag{2.37}$$

son los polos “estructurales” [39] expresados en el plano complejo u ;

$$u_j = f^{-1}(p'_j - z_{p'}) \quad j = 1, \dots, \infty\tag{2.38}$$

son los polos “resonantes” (véase el Apéndice C), también expresados en el plano complejo u ; $\mathcal{R}_I, \mathcal{R}_R$ y \mathcal{R}_T son los residuos de las funciones $\tilde{g}'_I(p; u)$, $\tilde{g}'_R(p; u)$ y $\tilde{g}'_T(p; u)$ respectivamente, en los puntos $u = u_I$, $u = u_R$ y $u = u_T$. Finalmente, \mathcal{R}_{Rj} , \mathcal{R}_{Cj} , \mathcal{R}_{Dj} y \mathcal{R}_{Tj} son los residuos de las funciones $\tilde{g}'_R(p; u)$, $\tilde{g}'_C(p; u)$, $\tilde{g}'_D(p; u)$ y $\tilde{g}'_T(p; u)$ respectivamente, en los puntos $u = u_j$ ($j = 1, \dots, \infty$). Los residuos \mathcal{R} vienen dados por

$$\begin{aligned}\mathcal{R}_I &= -f^{-1} e^{ipd/2\hbar} \\ \mathcal{R}_R &= f^{-1} R(p'_R) e^{ip'_R d/\hbar} e^{ipd/2\hbar}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \mathcal{R}_{Rj} &= \frac{R(p'_j)e^{ip'_j d/\hbar} e^{ipd/2\hbar} F_j}{(p + p'_j + i\hbar 0^+) f} \\
 \mathcal{R}_{Cj} &= \frac{-2iC(p'_j)e^{ip'_j d/2\hbar} \text{sen}[(p - p'_j)d/2\hbar] F_j}{(p - p'_j) f} \\
 \mathcal{R}_{Dj} &= \frac{-2iD(p'_j)e^{ip'_j d/2\hbar} \text{sen}[(p + p'_j)d/2\hbar] F_j}{(p + p'_j) f} \\
 \mathcal{R}_T &= f^{-1} T(p'_T)e^{ip'_T d/\hbar} e^{-ipd/2\hbar} \\
 \mathcal{R}_{Tj} &= -\frac{T(p'_j)e^{ip'_j d/\hbar} e^{-ipd/2\hbar} F_j}{(p - p'_j - i\hbar 0^+) f}, \tag{2.39}
 \end{aligned}$$

donde

$$F_j \equiv \left. \frac{\Omega(p')}{d\Omega(p')/dp'} \right|_{p'=p'_j}. \tag{2.40}$$

Sustituyendo (2.36) en (2.34) e introduciendo la expresión integral de la función w , ecuación (F.2), la función de onda se puede escribir como

$$\begin{aligned}
 \psi(p, t) &= \frac{i\tau' f}{2\pi} e^{-(\delta_x p_c^2/\hbar^2) + \eta^2} \left\{ i\pi \mathcal{R}_I w(u_I) - i\pi \mathcal{R}_R w(-u_R) \right. \\
 &\quad - i\pi \mathcal{R}_T w(-u_T) - i\pi \sum_{j=1}^{\infty} [\mathcal{R}_{Rj} + \mathcal{R}_{Cj} + \mathcal{R}_{Dj} + \mathcal{R}_{Tj}] w(-u_j) \\
 &\quad \left. + \int_{-\infty}^{\infty} [h_R(u) + h_C(u) + h_D(u) + h_T(u)] e^{-u^2} du \right\}. \tag{2.41}
 \end{aligned}$$

Las funciones h_R , h_C , h_D y h_T no presentan divergencias en torno al punto de silla ($u = 0$) de sus correspondientes integrales. Para evaluar estas últimas, por tanto, se desarrollan las primeras en serie de potencias de u en torno al origen. De esta forma las integrales pueden expresarse en función de su único punto crítico,

$$h(u) = h(0) + h'(0)u + \dots + h^{(n)}(0) \frac{u^n}{n!} + \dots = \sum_{k=0}^{\infty} h^{(k)}(0) \frac{u^k}{k!}. \tag{2.42}$$

Este desarrollo converge uniformemente en torno al punto $u = 0$. Sustituido en la integral de cualquiera de los restos, el sumatorio puede sacarse de la integral, quedando una integral resoluble por los métodos ordinarios

$$\begin{aligned}
 \int_{-\infty}^{\infty} h(u) e^{-u^2} du &= \sqrt{\pi} h(u=0) + \sum_{k=1}^{\infty} h^{(k)}(u=0) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{u^k}{k!} e^{-u^2} du \\
 &= \sqrt{\pi} \left[h(u=0) + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1 \times 3 \times \dots \times (2k-1)}{2^k (2k)!} h^{(2k)}(u=0) \right]. \tag{2.43}
 \end{aligned}$$

Al considerar en este desarrollo un número finito de términos se está obteniendo una aproximación asintótica de la integral. Deshaciendo el cambio de variable, y expresando la integral anterior en la variable p' , se tiene

$$\int_{\Gamma_{p'}} h(p') e^{\lambda W(p')} du, \quad (2.44)$$

donde $W(p') \equiv \phi(p')/\lambda$. Para obtener $W(p')$ se expresa $\phi(p')$ [ecuación (2.20)] de forma que se pueda sacar factor común a alguno de los parámetros t, δ_x, p_c, x_c , ó d , y que se denotan, de forma genérica, por λ . Este parámetro será el que dará el comportamiento asintótico de la integral dependiendo del régimen en el que se produzca el proceso de colisión: para tiempos grandes será t , para anchuras grandes del paquete incidente en posiciones, δ_x , para momentos incidentes grandes, p_c , para paquetes inicialmente muy alejados del potencial, x_c , y para anchuras del potencial grandes, d (véase el Apéndice D). Así, cuanto mayor sea el valor del parámetro λ tanto mayor será la contribución del punto de silla a la integral, que en la variable u vendrá dada por el término de orden cero de la ecuación (2.43). Al disminuir el valor del parámetro λ , la aproximación de considerar únicamente la contribución del punto de silla puede no ser suficientemente buena, y se hace necesario incluir correcciones de órdenes superiores en el desarrollo de la ecuación (2.43).

2.1.1. Ejemplos

En muchos casos bastan unos pocos términos de la ecuación (2.41) para proporcionar una muy buena aproximación al resultado exacto. Si únicamente interesa el comportamiento asintótico para tiempos en los que la colisión ya se ha producido, sólo es necesario considerar los términos estructurales R y T , asociados con la reflexión y la transmisión, respectivamente, más unas pocas contribuciones de los polos resonantes (de nuevo para la reflexión y la transmisión). El número de polos resonantes que es necesario incluir depende de la energía de la colisión. Por ejemplo, en la figura 2.1 se muestra un caso donde tan solo se han usado tres polos resonantes en los términos R y T , y no se han incluido las contribuciones de los restos correspondientes, $h_R(u)$ y $h_T(u)$.

Hay circunstancias en las que *durante* la colisión únicamente es necesario tener en cuenta dos términos. Éste es el caso de la colisión con una barrera muy opaca, que puede describirse utilizando los términos estructurales R e I (véase la figura 2.2),

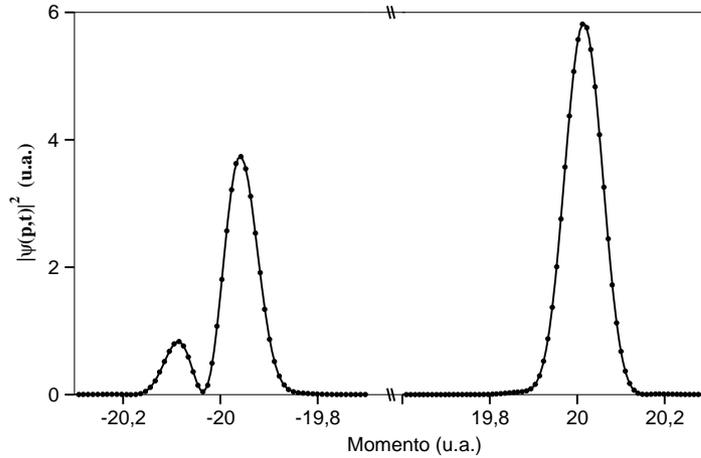


Figura 2.1: $|\psi(p, t)|^2$ (en unidades atómicas) en función del momento para $t = 5$ u.a., cuando la colisión (contra una barrera de potencial centrada en el origen de coordenadas) se ha completado. Con trazo continuo se representa la solución exacta, mientras que con línea de puntos se representa la contribución conjunta de los términos estructurales de reflexión y transmisión y de tres de sus polos resonantes en (2.41). Se ha tomado $m = 1$, $p_c = 20$, $d = 2.5$, $V_0 = 188$, $\delta_x = 100$, y $x_c = -50$ (todas las magnitudes están expresadas en unidades atómicas).

o el de colisiones de paquetes muy anchos y energéticos, donde basta considerar los términos I y T . Este último caso se ha utilizado para explicar el incremento transitorio, y clásicamente prohibido, de componentes altas del momento lineal como un efecto de interferencia entre los términos de incidencia y transmisión, como se describirá en el próximo capítulo.

En la figura 2.3 se muestra la distribución de momentos durante la colisión para un caso muy general (típico). Los términos estructurales de incidencia, reflexión y transmisión, junto con contribuciones asociadas con tres polos resonantes en la ecuación (2.41), proporcionan una aproximación bastante buena para la función de onda durante la colisión, aunque la solución aproximada claramente sobrestima el valor exacto de los paquetes reflejado y transmitido, y de la región de valores de momento lineal comprendidos entre 20.3 y 21.0 u.a. La inclusión en la solución aproximada del primer término de corrección de la integral de los restos, ecuación (2.43), conduce a la obtención de una curva que en la escala de la figura es indistinguible del resultado exacto.

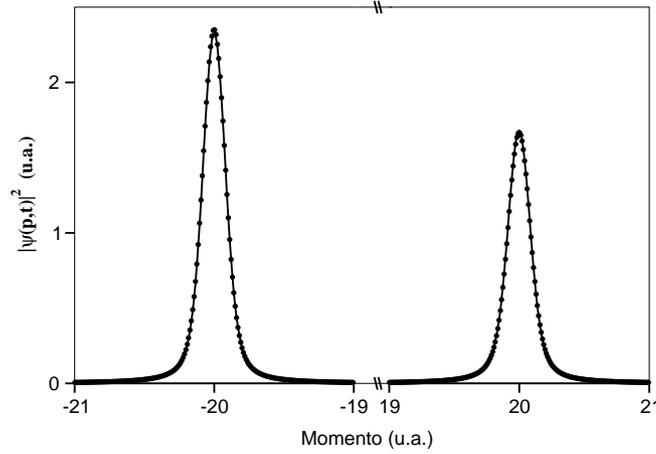


Figura 2.2: $|\psi(p, t)|^2$ (en unidades atómicas) en función del momento, para $t = 2.5$ u.a., durante el proceso de colisión. En trazo continuo se representa la solución exacta, mientras que con una línea de puntos se representa la contribución de los términos estructurales de incidencia y transmisión en (2.41). En unidades atómicas, $p_c = 20$, $d = 3$, $V_0 = 400$, $\delta_x = 100$, y el paquete de ondas inicial está centrado 50 unidades atómicas a la izquierda del centro de la barrera de potencial.

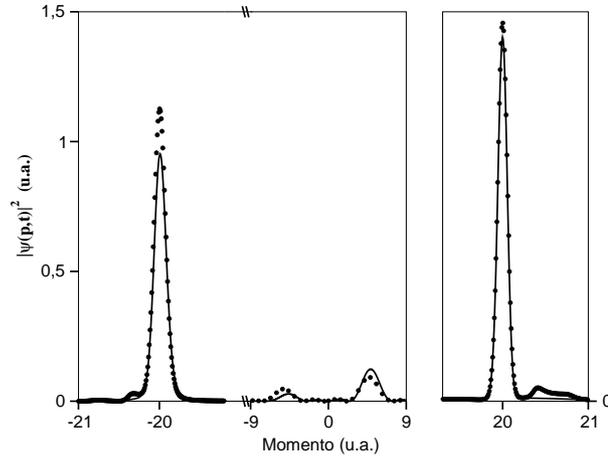


Figura 2.3: $|\psi(p, t)|^2$ (en unidades atómicas) en función del momento, para $t = 2.7$ u.a., durante el proceso de colisión. Con trazo continuo se representa la solución exacta, mientras que con línea de puntos se representa la contribución en la expresión (2.41) de los términos de incidencia, reflexión, transmisión, considerando la contribución de tres polos resonantes. Cuando se considera un término de corrección en (2.43), el resultado aproximado es indistinguible del exacto. Para la barrera y el paquete de ondas se usan los mismos parámetros que en la figura 2.1.

Capítulo 3

Interferencia cuántica transitoria entre incidencia y transmisión

3.1. Descripción de la interferencia

Como ya se comentó en el capítulo introductorio, un estudio numérico sistemático de la magnitud del efecto BM en una colisión contra una barrera cuadrada en función de la altura de la barrera de potencial y de la anchura espacial del paquete de ondas incidente reveló en [5] valores de G_{max}^q muy superiores a los máximos valores alcanzados en los estudios previos con la pared infinita y el potencial tipo delta. Los mayores valores se observaron para paquetes de ondas cuya energía cinética incidente era muy superior a la altura de la barrera, y con una anchura espacial σ_x mucho mayor que la de la barrera. En estas condiciones, la barrera de potencial es prácticamente “transparente”, y casi la totalidad de la onda resulta transmitida. En este capítulo se describirá este régimen, analizando el origen físico del aumento espectacular que se observa en la magnitud del fenómeno en términos de una interferencia transitoria entre las componentes incidente y transmitida del paquete de ondas. Para ello se hará uso de la expresión analítica (2.41),

$$\begin{aligned}\psi(p, t) &= \frac{i\tau' f}{2\pi} e^{-(\delta_x p_c^2/\hbar^2) + \eta^2} \left\{ i\pi \mathcal{R}_I w(u_I) - i\pi \mathcal{R}_R w(-u_R) \right. \\ &- i\pi \mathcal{R}_T w(-u_T) - i\pi \sum_{j=1}^{\infty} [\mathcal{R}_{Rj} + \mathcal{R}_{Cj} + \mathcal{R}_{Dj} + \mathcal{R}_{Tj}] w(-u_j) \\ &+ \left. \int_{-\infty}^{\infty} [h_R(u) + h_C(u) + h_D(u) + h_T(u)] e^{-u^2} du \right\},\end{aligned}\quad (3.1)$$

obtenida en el capítulo anterior. Esta ecuación proporciona una solución dependiente del tiempo en representación de momentos para la colisión de un paquete de ondas Gaussiano con una barrera cuadrada.

Aproximación de dos términos

El camino de máxima pendiente de descenso utilizado para escribir la solución (3.1) consiste en una línea recta que forma un ángulo $-\frac{1}{2}\arctg(\hbar t/2m\delta_x)$ con el eje real p' y que pasa por el punto de silla $z_{p'}$ (2.22).

En los casos que se discuten en este capítulo, el punto de silla se encuentra próximo al momento central, p_c , durante la colisión, cuando el paquete de ondas está aproximadamente en el centro de la región del potencial ($t \simeq \frac{m|x_c|}{p_c}$). Para colisiones de paquetes de onda muy anchos y energéticos, la pendiente de la recta será lo suficientemente pequeña como para que al deformar el contorno de integración a lo largo del camino de máxima pendiente de descenso el corte de los polos resonantes del cuarto cuadrante se produzca lejos del eje real, de manera que las resonancias no jugarán un papel significativo y se podrá despreciar el valor de sus residuos (condiciones denominadas de “colisión directa”). Análogamente, al estudiar casos en los que la función de onda es mucho más extensa que la barrera, se puede despreciar la contribución de los términos C y D . Con las consideraciones anteriores, la solución (3.1) se puede aproximar por

$$\begin{aligned} \psi(p, t) \simeq & \frac{i\tau' f}{2\pi} e^{-(\delta_x p_c^2/\hbar^2) + \eta^2} \left\{ i\pi \mathcal{R}_I w(u_I) - i\pi \mathcal{R}_R w(-u_R) \right. \\ & \left. - i\pi \mathcal{R}_T w(-u_T) + \int_{-\infty}^{\infty} [h_R(u) + h_T(u)] e^{-u^2} du \right\}. \end{aligned} \quad (3.2)$$

Esta función permite calcular G^q para valores suficientemente grandes de δ_x con un esfuerzo computacional reducido. Además, (3.2) permitirá comprender la razón por la que el efecto es tan importante para energías por encima de la barrera.

Considerando únicamente dos términos en cada uno de los desarrollos de los “restos” [véase la ecuación (2.43)], en la figura 3.1 se muestra G_{max}^q frente a σ_x ($\delta_x = \sigma_x^2$) para distintos valores de V_0 . El valor numérico máximo del efecto es aproximadamente independiente de la posición inicial del paquete de ondas (x_c), aunque el instante en el que ocurre sí varía con ésta. Esto permite obtener la figura a partir de cuatro cálculos independientes, para diferentes intervalos de valores de σ_x . En

cada caso se ha utilizado el valor de x_c necesario para que la función de onda en la representación de posiciones no solape inicialmente con el potencial en una cantidad mayor a 10^{-3} . Al coincidir prácticamente el instante de efecto máximo con el tiempo clásico para el cual el centro del paquete llega al potencial, la distancia recorrida para obtener el efecto máximo es aproximadamente x_c . De esta forma, el realizar cuatro cálculos permite que en cada uno de ellos la relación entre los valores de σ_x y x_c sea tal que conduzca a un valor de la pendiente del camino de integración suficientemente pequeño y aproximadamente constante, lo que asegura la validez de la solución asintótica.

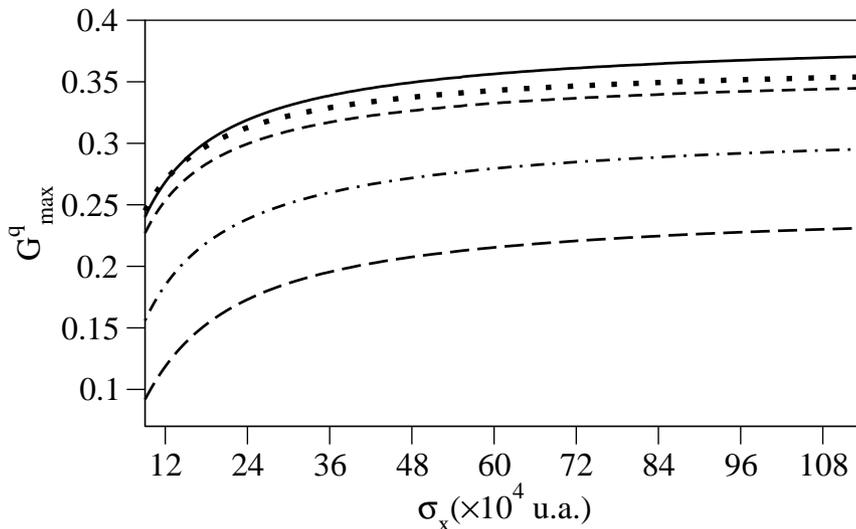


Figura 3.1: G_{\max}^q frente a σ_x para: $V_0 = 3.5 \times 10^{-12}$ u.a. (línea de puntos y rayas), $V_0 = 7 \times 10^{-12}$ u.a. (línea de trazo continuo), $V_0 = 1.05 \times 10^{-11}$ u.a. (línea de puntos), $V_0 = 1.4 \times 10^{-11}$ u.a. (línea de trazo discontinuo corto), $V_0 = 1.75 \times 10^{-11}$ u.a. (línea de trazo discontinuo largo). $m = 1.558 \times 10^5$ u.a., $p_c = 2.85 \times 10^{-3}$ u.a. y la barrera, con anchura $d = 2.5 \times 10^4$ u.a., está centrada en el origen de coordenadas. Para valores de σ_x desde 9×10^4 u.a. hasta 2.6×10^5 u.a. se ha tomado $x_c = -1.08 \times 10^6$ u.a.; para valores de σ_x entre 2.6×10^5 u.a. y 5.5×10^5 u.a. se ha tomado $x_c = -2.25 \times 10^6$ u.a.; para valores de σ_x entre 5.5×10^5 u.a. y 8.4×10^5 u.a. se ha tomado $x_c = -3.35 \times 10^6$ u.a. y para valores de σ_x comprendidos en el intervalo entre 8.4×10^5 u.a. y 1.14×10^6 u.a. se ha tomado $x_c = -4.4 \times 10^6$ u.a.

La figura 3.2 muestra la distribución de momentos $|\psi(p, t)|^2$ “exacta”, calculada con el método de propagación numérico descrito en el Apéndice A para distintos instantes de tiempo, en el caso de un potencial cuadrado con $V_0 = 1.025 \times 10^{-11}$ u.a., y $\sigma_x = 1.04 \times 10^5$ u.a., pasando por el instante en el que el efecto es máximo ($G^q = 0.27$).

Todas las figuras corresponden a situaciones físicas que describen átomos ultrafríos de Rubidio que colisionan con barreras de potencial producidas por campos láser no sintonizados con respecto a la transición atómica relevante (véase la Introducción).

El comportamiento observado no tiene explicación clásica. Se trata de un paquete de ondas considerablemente más ancho que la barrera. En un colectivo de partículas clásicas con la misma distribución inicial de momentos y coordenadas, la distribución de momentos se deformaría sólo ligeramente debido a las pocas partículas que pudieran estar en la región de la barrera, y mantendría el máximo en el momento medio inicial p_c . Además, no podría producirse la espectacular aceleración o deceleración asociada con los dos máximos de la distribución cuántica. Como se verá, el mínimo central de la distribución cuántica se debe a una interferencia destructiva, mientras que los dos máximos corresponden a una interferencia constructiva entre términos de incidencia y transmisión.

En la figura 3.3 se muestra la distribución de momentos para la colisión representada en la figura 3.2 en el instante de máximo efecto, en comparación con el resultado aproximado obtenido al despreciar todos los términos en (3.2) excepto el primero, asociado con la onda incidente, y el tercero, asociado con la transmitida, de manera que queda

$$\psi(p, t) \simeq \frac{\tau'}{2} e^{-(\delta_x p_c^2 / \hbar^2) + \eta^2} e^{ipd/2\hbar} [w(u_I) + T(p)w(-u_T)] \equiv \psi_{(IT)}^0. \quad (3.3)$$

Para obtener la expresión anterior se ha sustituido el valor de p'_T por p en el residuo \mathcal{R}_T [véase la ecuación (2.39)]. Esto constituye una muy buena aproximación para describir la parte más relevante de la distribución de momentos.

El hecho de que la colisión se produzca a energías muy superiores a las de la barrera justifica el poder despreciar el término de reflexión. También los términos de los restos pueden despreciarse pues sólo suponen una pequeña corrección a los de incidencia y transmisión.

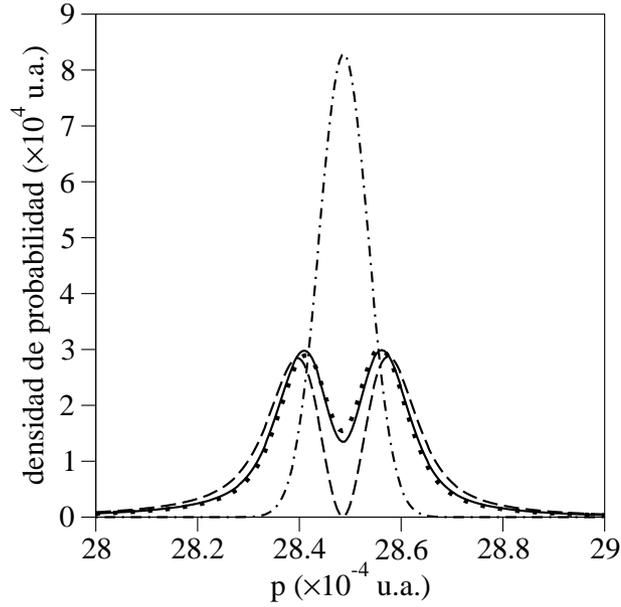


Figura 3.2: $|\langle p|\psi(t)\rangle|^2$ para distintos tiempos: $t = 0$ (línea de puntos y líneas; función de onda libre), $t = 2.33 \times 10^{13}$ u.a. (línea continua), $t = 2.73 \times 10^{13}$ u.a. (línea a trazos; instante de la colisión), $t = 3.23 \times 10^{13}$ u.a. (línea de puntos), con $m = 1.558 \times 10^5$ u.a., $p_c = 2.85 \times 10^{-3}$ u.a., $\sigma_x = 1.04 \times 10^5$ u.a., $x_c = -5.0 \times 10^5$ u.a., $V_0 = 1.025 \times 10^{-11}$ u.a. y $d = 2.5 \times 10^4$ u.a.

Como test de consistencia para este resultado, se puede tomar el límite $d \rightarrow 0$ de la función de onda en momentos, con objeto de tratar de recuperar el caso de propagación libre. Para ello, tendremos en cuenta que cuando $d \rightarrow 0$, $T(p) \rightarrow 1$, y que, como $u_I \simeq u_T$ [véase la ecuación (2.37)], la relación entre las funciones w de argumento de distinto signo queda como [véase la ecuación (F.3)]

$$w(u_I) = 2e^{-u_I^2} - w(-u_T). \quad (3.4)$$

Sustituyendo los resultados anteriores en la expresión de la función de onda (3.3), ésta se puede expresar de la forma

$$\langle p|\psi(t)\rangle_{d \rightarrow 0} \simeq \tau' e^{-(\delta_x p_c^2/\hbar^2) + \eta^2} e^{-u^2}, \quad (3.5)$$

donde se ha calculado el límite en $p'_I = p + i\hbar 0^+$, con lo que $u_I = f^{-1}(p'_I - z_{p'}) \rightarrow u$ [véase la ecuación (2.32)]. Deshaciendo el cambio de variable de u a p y sustituyendo

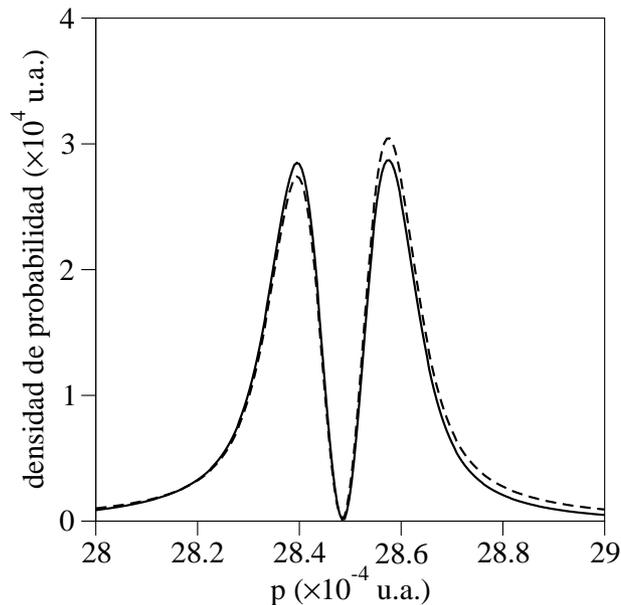


Figura 3.3: $|\langle p|\psi(t)\rangle|^2$ (línea continua) y $|\psi_{(IT)}^0|^2$ (línea discontinua) para el instante de tiempo en que se produce el efecto máximo, $t = 2.73 \times 10^{13}$ u.a. (Los parámetros que describen la colisión son los mismos que para la figura 3.2.)

el valor de τ' [ecuación (2.19)], se obtiene

$$\langle p|\psi(t)\rangle_{d \rightarrow 0} \simeq \left(\frac{2\delta_x}{\pi\hbar^2}\right)^{1/4} \exp\left[\frac{-ip^2t}{2m\hbar} - \frac{\delta_x(p-p_c)^2}{\hbar^2} - \frac{ipx_c}{\hbar}\right]. \quad (3.6)$$

Su módulo es

$$|\langle p|\psi(t)\rangle_{d \rightarrow 0}| \simeq \left(\frac{2\delta_x}{\pi\hbar^2}\right)^{1/4} \exp\left[-\frac{\delta_x(p-p_c)^2}{\hbar^2}\right], \quad (3.7)$$

que coincide con el módulo de la función de onda inicial, ecuación (2.17), tal y como era de esperar.

En la figura 3.4 se representan los *diagramas de Argand* de los dos sumandos en la expresión (3.3). Los diagramas de Argand muestran la parte imaginaria de una cantidad frente a su parte real a medida que se varía un parámetro, en este caso el momento lineal p , a intervalos regulares. Cada lóbulo corresponde a uno de los sumandos, de manera que lo más relevante en la figura no es tanto el valor representado sino las variaciones relativas mostradas por cada lóbulo, que se van a sumar. El “movimiento” para p creciente comienza cerca del origen hacia abajo

en ambos diagramas. El máximo de la izquierda en la distribución de momentos de la figura 3.3 corresponde a la zona en la que los módulos de los lóbulos aumentan y están aproximadamente en fase en la parte inferior del diagrama. Después del movimiento descendente se produce un movimiento aproximadamente circular muy rápido en el que las dos fases se oponen aproximadamente, y que da lugar al mínimo central. Tras esta interferencia destructiva las dos curvas vuelven a encontrarse en fase ahora en la zona superior, lo que corresponde al máximo de la derecha en la distribución de momentos.

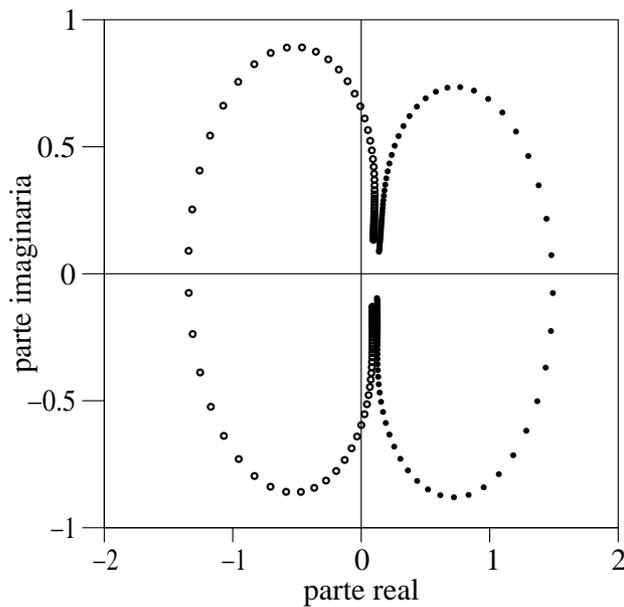


Figura 3.4: Diagramas de Argand del sumando proporcional a $w(u_I)$ en la ecuación (3.3) (círculos), y del sumando proporcional a $w(-u_T)$ (línea de puntos), para el instante en que se produce el máximo del efecto. (Los parámetros de la colisión son los de la figura 3.2.)

Este comportamiento se debe esencialmente a las dos funciones w involucradas, $w(u_I)$ y $-w(-u_T)$ (se considera la segunda función w con un signo menos por conveniencia para la discusión), como se ve en la figura 3.5, donde se representan los diagramas de Argand de las dos funciones w por un lado, y de los prefactores correspondientes, por otro, para valores del momento lineal cercanos al mínimo

central de $|\psi(p, t)|^2$ (figura 3.3). Se observa que el efecto de los factores, cuyas fases

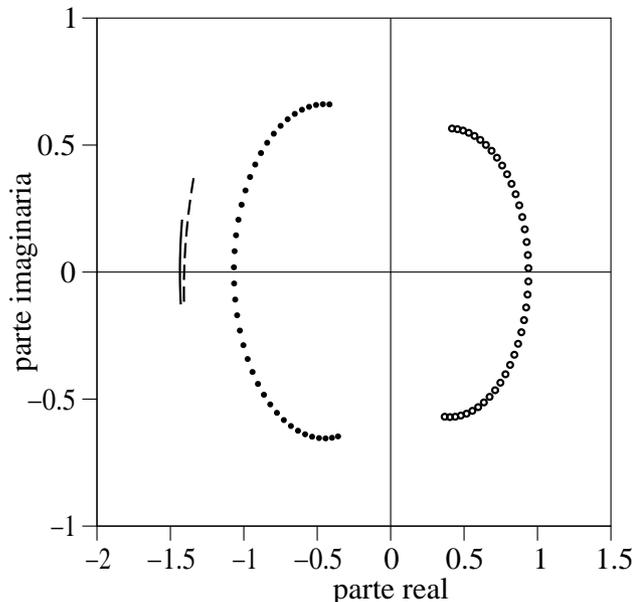


Figura 3.5: Diagramas de Argand de $w(u_I)$ (círculos), $-w(-u_T)$ (puntos), del factor que multiplica a $w(u_I)$ en la ecuación (3.3) (línea continua) y del factor que multiplica a $-w(-u_T)$ en la ecuación (3.3) (línea discontinua). La representación de estas magnitudes se hace para el instante de tiempo $t = 2.73 \times 10^{13}$ u.a. para el que el efecto es máximo (el resto de datos igual que en la figura 3.2).

permanecen esencialmente constantes en torno a π , es simplemente el de invertir los dos lóbulos de las funciones w , que proporcionan el movimiento rápido. Este movimiento se debe al paso de los dos polos estructurales, $u_I = \frac{p+i\hbar 0^+ - z_{p'}}{f}$ y $u_T = \frac{p-i\hbar 0^+ - z_{p'}}{f}$ (que sólo se distinguen por un infinitésimo), cerca del punto de silla $z_u = 0$. El barrido en p , a medida que su valor aumenta, corresponde al movimiento de esta pareja de polos por el eje real p' de izquierda a derecha como muestran las figuras 3.6 y 3.7. Por el contrario, el punto de silla y el camino de descenso más rápido no dependen de p . Teniendo en cuenta que u_I y u_T son prácticamente coincidentes ($u_I \simeq u_T$), la ecuación (F.3) se puede escribir como

$$w(u_I) = 2e^{-u_I^2} - w(-u_T), \tag{3.8}$$

donde $u_I = (p'_I - z_{p'})/f$. Esta expresión, junto con los diagramas de Argand mos-

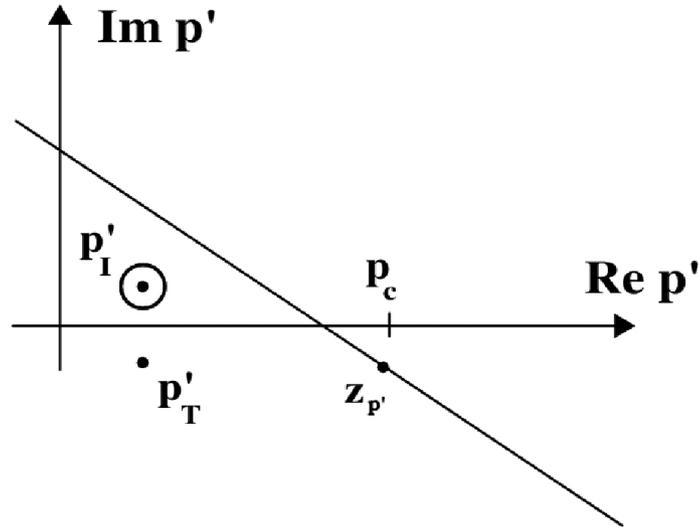


Figura 3.6: Contorno de integración en la variable p' cuando $(p < p_c)$.

trados, permiten entender el origen de las características más relevantes de la distribución de probabilidad en momentos descrita por la ecuación (3.3) y, en definitiva, el modo cómo las interferencias destructivas y constructivas se desarrollan y desaparecen a medida que progresa la colisión.

La figura 3.8 representa el movimiento del punto de silla en el plano complejo p' a lo largo del tiempo. El instante “central” de la colisión coincide con el cruce del punto de silla por el eje real p' : de acuerdo con la definición (2.22),

$$z_{p'} \equiv \frac{m \left[4mp_c \delta_x^2 - (x_c + d/2) \hbar^2 t \right] - i2m\hbar \left[m\delta_x (x_c + d/2) + p_c \delta_x t \right]}{4m^2 \delta_x^2 + t^2 \hbar^2}, \quad (3.9)$$

la parte imaginaria de $z_{p'}$ se anula cuando $t = \frac{|x_c| - (d/2)}{(p_c/m)}$ (donde se ha considerado $x_c < 0$), es decir, cuando el centro de un hipotético paquete libre se encuentra aproximadamente en el borde izquierdo de la barrera, comenzando el proceso de colisión. Para este instante de tiempo, y en las condiciones que consideramos (paquetes de onda muy energéticos y anchos en coordenadas), se tiene $z_{p'} \simeq p_c$.

Al encontrarse el punto de silla prácticamente en el eje real del plano complejo

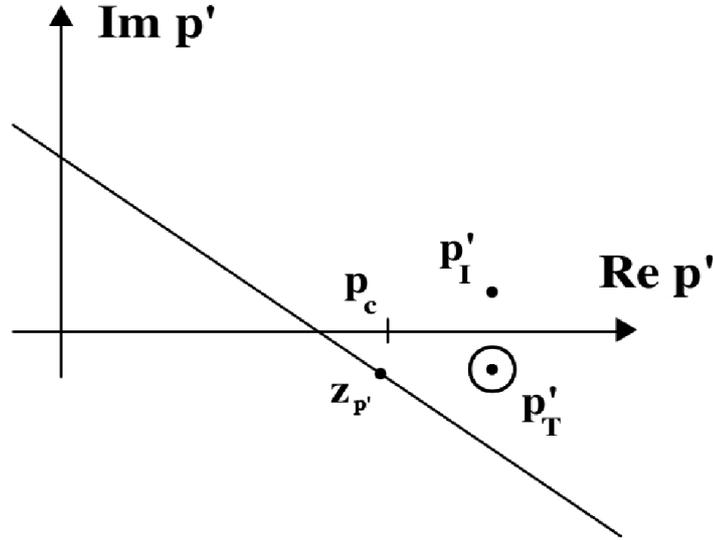


Figura 3.7: Contorno de integración en la variable p' cuando $(p > p_c)$.

p' , la cantidad $p'_I - z_{p'} = p + i\hbar 0^+ - z_{p'}$ será prácticamente real para todo p . El ángulo $-\frac{1}{2}\arctg\left(\frac{\hbar}{2m\delta_x}\right)$, que define al camino de máxima pendiente de descenso, es muy pequeño, por lo que al dividir entre f apenas aumentará la parte imaginaria de $p'_I - z_{p'}$, y por tanto $u_I = \frac{p+i\hbar 0^+ - z_{p'}}{f}$ es prácticamente real. Esto implica que la diferencia entre las dos funciones $w(u_I)$ y $-w(-u_T)$ es esencialmente una exponencial real negativa [véase la ecuación (3.8)], lo que explica el movimiento concertado de las dos curvas en el diagrama de Argand de la figura 3.4, así como el hecho de que antes y después del paso de los polos cerca del punto de silla ($z_u = 0$) las dos funciones w sean iguales. Las funciones w correspondientes a un mismo valor de p sólo difieren en una cantidad real, el valor de la mencionada exponencial, una línea horizontal entre puntos en el diagrama de Argand. Cuando se inicia el movimiento desde el origen hacia zonas imaginarias negativas del diagrama, los lóbulos son coincidentes debido a que la exponencial en esta zona tiende a cero. Para estos valores de p , lejos del punto p_c , en torno al que se encuentra el punto de silla $z_{p'}$, el argumento de la exponencial, $-u_I^2 = -\left(\frac{p+i\hbar 0^+ - z_{p'}}{f}\right)^2$, toma valores negativos grandes al encontrarse $p'_I = p + i\hbar 0^+$ lejos de $z_{p'} \simeq p_c$. Esta región de interferencia constructiva se corresponde con el

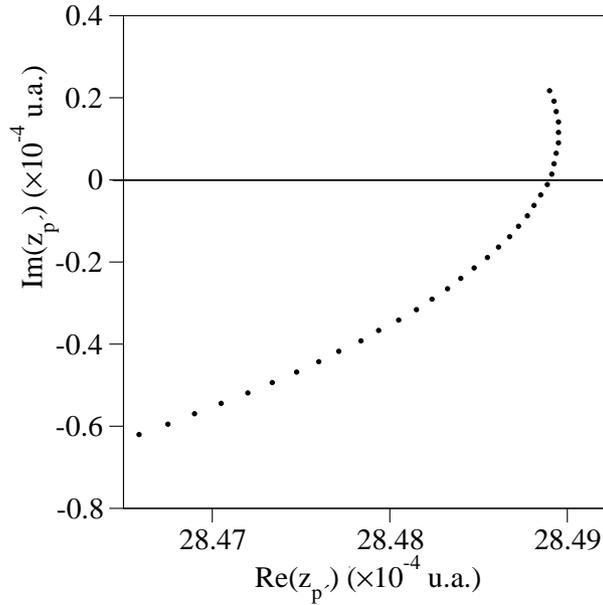


Figura 3.8: Movimiento del punto de silla en el plano p' , en función del tiempo; $m = 1.558 \times 10^5$ u.a., $p_c = 2.85 \times 10^{-3}$ u.a., $x_c = -5.0 \times 10^5$ u.a. y $d = 2.5 \times 10^4$ u.a. La línea de puntos describe una trayectoria descendente a medida que el tiempo transcurre.

máximo que se encuentra a la izquierda de p_c en la distribución de momentos. A medida que los valores de p se acercan a los de p_c , $p'_I = p + i\hbar 0^+$ se acerca a $z_{p'} \simeq p_c$, tendiendo el argumento de la exponencial a cero y ésta al valor unidad. En esta región la distancia entre los lóbulos aumenta hasta su valor máximo, a partir de la cual empieza nuevamente a disminuir al alejarse p de p_c . Este movimiento curvilíneo de separación y nueva unión en los diagramas da lugar a una interferencia destructiva que se corresponde con el mínimo central de la distribución de momentos. Para valores en los que p se aleja mucho de p_c se repite el comportamiento descrito para el inicio del movimiento, produciéndose de nuevo una coincidencia entre los lóbulos (ahora en la zona superior del diagrama) que da lugar, en este caso, al máximo que se encuentra a la derecha de p_c en la distribución de momentos.

La variación rápida de la fase de las funciones w al pasar cerca del punto de silla se sigue de su definición, ecuación (F.2). Al pasar u_I cerca de $u = 0$ (debido al movimiento de p'_I en $u_I = \frac{p'_I - z_{p'}}{f}$) y cruzar el eje imaginario del plano u , el denominador es

esencialmente real y cambia de signo rápidamente, es decir, la fase de las funciones w varía en π en un breve intervalo de momentos, tal y como se ilustra en la figura 3.9. La oposición de fase por sí sola no explica la interferencia destructiva total.

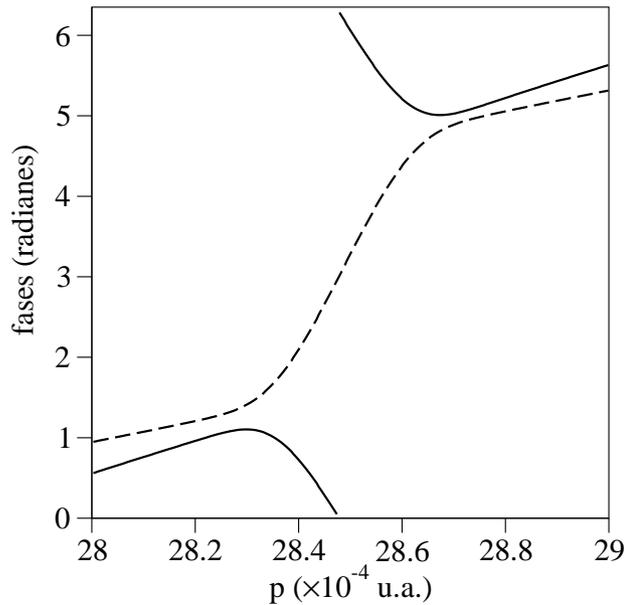


Figura 3.9: Fases del término asociado con la onda incidente [línea discontinua; primer sumando en la ecuación (3.3)], y del término asociado con la onda transmitida [línea continua; segundo sumando en la ecuación (3.3)], para $V_0 = 1.025 \times 10^{-11}$ u.a., $\sigma_x = 1.04 \times 10^5$ u.a. y $t = 2.73 \times 10^{13}$ u.a. (instante de máximo efecto). El resto de datos son los mismos que en la figura 3.2.

También es necesario que los módulos de los términos de incidencia y transmisión de (3.3) sean iguales. Esta igualdad sólo se consigue transitoriamente, puesto que antes y después de la colisión sólo existe uno de los lóbulos, el de incidencia primero, y el de transmisión después. A medida que transcurre la colisión, el lóbulo incidente decrece y el de transmisión crece, hasta que, durante un cierto intervalo de tiempo, se equilibran, dando lugar a la cancelación entre los sumandos con distintos signos, y a las dos zonas de interferencia constructiva que se observan en la figura 3.2.

Una variación en la altura de la barrera lleva consigo el giro de los factores de fase que acompañan a las funciones w y, por consiguiente, a rotaciones relativas de los dos lóbulos, de manera que una de las dos regiones en fase aumenta mientras

que la otra disminuye, dando lugar a picos asimétricos. Para ilustrar esto, en la figura 3.10 se muestran las distribuciones de momentos para el valor del potencial que produce picos simétricos $V_0 = 1.025 \times 10^{-11}$ u.a., para un potencial menor, $V_0 = 1.0 \times 10^{-11}$ u.a. y para otro mayor $V_0 = 1.05 \times 10^{-11}$ u.a. En las figuras 3.11 y 3.12 se muestran los lóbulos de los diagramas de Argand para el caso $V_0 = 1.0 \times 10^{-11}$ u.a. y $V_0 = 1.05 \times 10^{-11}$ u.a., respectivamente. Nótese que los factores de fase que

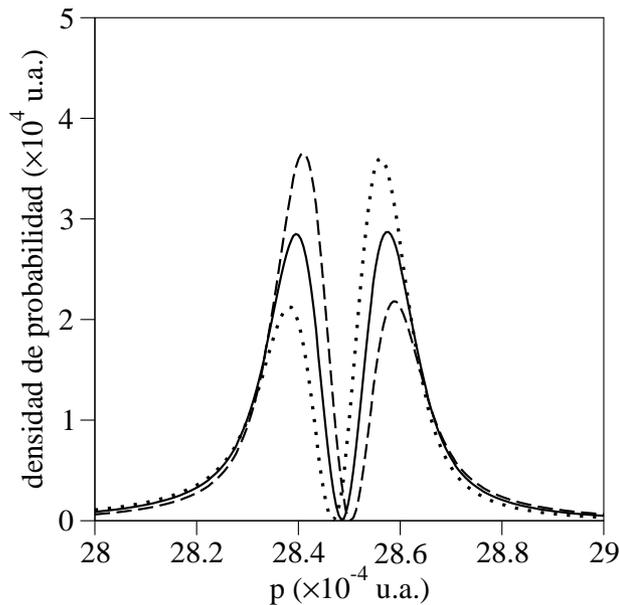


Figura 3.10: $|\langle p|\psi(t)\rangle|^2$ para tres valores del potencial: $V_0 = 1.0 \times 10^{-11}$ u.a. (línea a trazos), $V_0 = 1.025 \times 10^{-11}$ u.a. (línea continua) y $V_0 = 1.05 \times 10^{-11}$ u.a. (línea de puntos); $t = 2.73 \times 10^{13}$ u.a., y el resto de datos son los mismos que en la figura 3.2.

acompañan a las funciones w no dependen del tiempo por lo que la relación de fase entre los lóbulos es constante para cada elección de parámetros. Por ello, para una colisión dada las posiciones de los máximos y mínimos no varían significativamente durante el régimen transitorio.

Por último, en la figura 3.13 se muestran los lóbulos de incidencia y transmisión en el diagrama de Argand cuando se toma $V_0 = 1.4 \times 10^{-11}$ u.a., para dos instantes distintos de tiempo, antes y durante la colisión. Obsérvese la variación de los tamaños de los lóbulos durante la colisión. Por otra parte, antes de que se obtenga el efecto

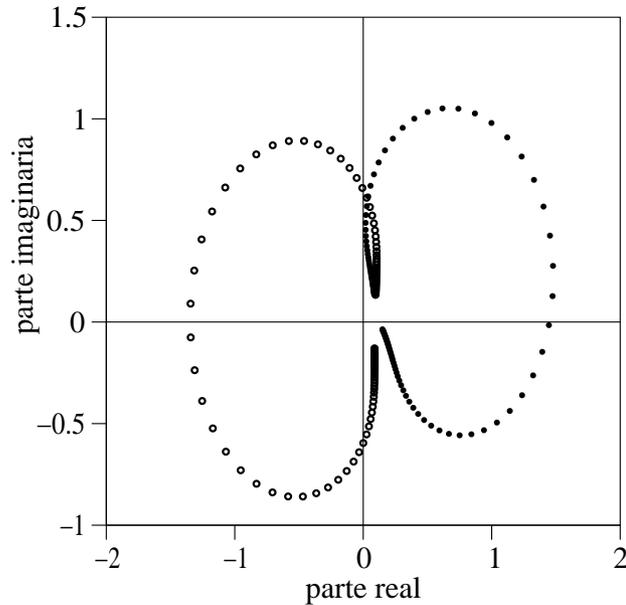


Figura 3.11: Lóbulos de los diagramas de Argand para el caso $V_0 = 1.0 \times 10^{-11}$ u.a. El término asociado con la onda incidente se representa con círculos [primer sumando en la ecuación (3.3)], y el asociado con la onda transmitida con puntos [segundo sumando en la ecuación (3.3)]. $t = 2.73 \times 10^{13}$ u.a., y el resto de datos son los mismos que en la figura 3.2.

máximo, y como consecuencia de aumentar el potencial con respecto al caso más simétrico (con $V_0 = 1.025 \times 10^{-11}$ u.a.), se observa que el lóbulo de transmisión está girado con respecto al de incidencia. El lóbulo de incidencia es mucho mayor que el de transmisión, como corresponde a este instante en el que aún el grueso de la colisión no ha tenido lugar. Como consecuencia se tiene que la interferencia destructiva no será total y el valor mínimo no estará tan próximo a cero. Para el instante de efecto máximo, se observa cómo el lóbulo de transmisión sigue girado con respecto al de incidencia, aunque ahora se han invertido las posiciones de los lóbulos al producirse un cambio de fase. Este cambio de fase global afecta a los dos lóbulos por igual y es debido al término común que multiplica a las funciones w en la ecuación (3.3). En este caso, los módulos sí se igualan para un determinado ángulo, dando lugar a una interferencia destructiva total.

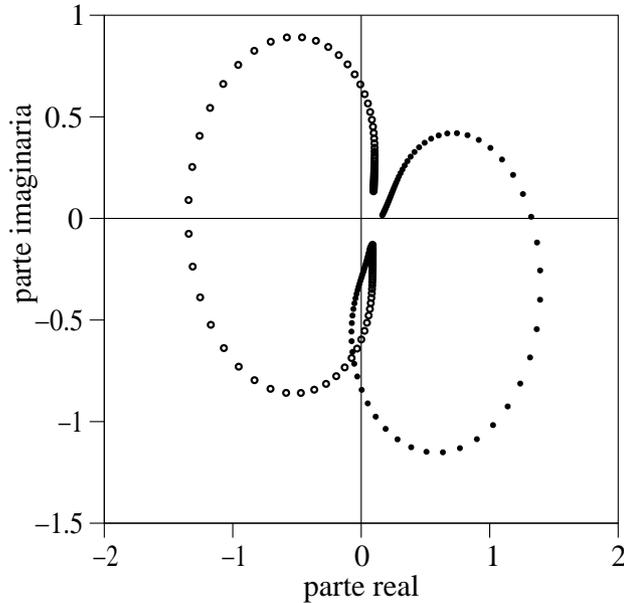


Figura 3.12: Lóbulos de los diagramas de Argand para el caso $V_0 = 1.05 \times 10^{-11}$ u.a. El término asociado con la onda incidente se representa con círculos [primer sumando en la ecuación (3.3)], y el asociado con la onda transmitida con puntos [segundo sumando en la ecuación (3.3)]. $t = 2.73 \times 10^{13}$ u.a., y el resto de datos son los mismos que en la figura 3.2.

En definitiva, para que se produzca una interferencia destructiva completa en el momento incidente, y de acuerdo con la discusión anterior, es suficiente que se cumplan una serie de condiciones una vez que se han elegido los parámetros del paquete de ondas inicial:

1. La barrera de potencial debe ser mucho más estrecha que la anchura del paquete de ondas inicial, con objeto de que la mayor parte posible de la norma se asigne a las componentes incidente o transmitida y la interferencia sea más pronunciada. Asimismo, la altura del potencial debe ser lo suficientemente pequeña para que el valor de la probabilidad de transmisión $|T(p)|^2$ esté próximo a la unidad; y
2. La altura de la barrera se debe seleccionar de forma que para el momento p_c

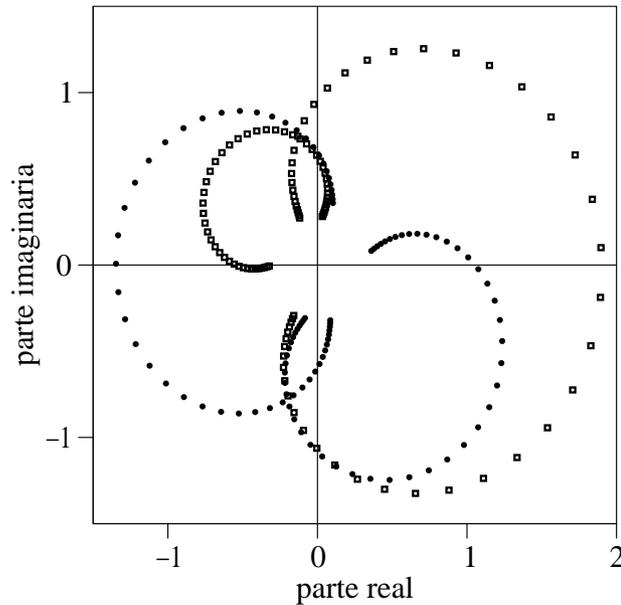


Figura 3.13: Lóbulos de incidencia y transmisión en diagramas de Argand para el caso $V_0 = 1.4 \times 10^{-11}$ u.a. Con cuadrados se representan los lóbulos en el instante $t = 2.33 \times 10^{13}$ u.a., siendo el de la izquierda el correspondiente a la transmisión. Con puntos se representan los lóbulos en el instante $t = 2.73 \times 10^{13}$ u.a. (instante de efecto máximo), siendo el de la izquierda el correspondiente a la incidencia. El resto de datos son los mismos que en la figura 3.2.

la fase del coeficiente de transmisión sea un múltiplo impar de π .

Con respecto a la observación de este efecto con átomos de Rubidio ultrafríos, ésta depende de la posibilidad experimental de preparar los estados iniciales apropiados. Desconectando el campo láser durante la colisión aparecerán dos picos en la distribución de momentos que para tiempos posteriores, y al desplazarse uno más rápido que otro, implicarán una separación visible entre las dos componentes espaciales correspondientes de la función de onda.

Finalmente, el desarrollo de la aproximación (3.3) se ha realizado para una barrera cuadrada, por simplicidad, pero su validez es mucho más amplia, siempre que se suponga que el potencial sólo toma valores apreciables entre los puntos $-d/2$ y $d/2$. En particular, también se ha observado el efecto para una barrera Gaussiana,

eligiéndola de manera que al truncarla en $\pm d/2$ no se altere la colisión. Esto se ilustra en la figura 3.14, donde para una barrera de potencial Gaussiana, y en función del momento, se comparan la distribución exacta de momentos $|\langle p|\psi(t)\rangle|^2$, y la aproximada $|\psi_{(TT)}^0|^2$, dada por la ecuación (3.3).

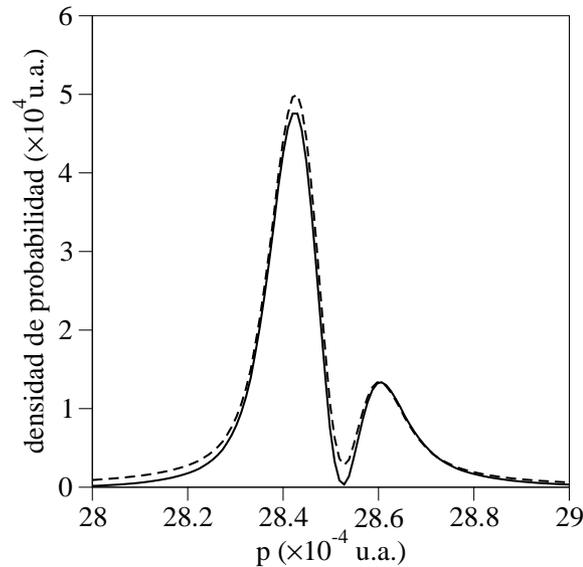


Figura 3.14: Distribución de momentos para una colisión con una barrera de potencial Gaussiana. La función de onda incidente está definida como en la figura 3.2. La altura de la barrera Gaussiana vale $V_0 = 1.0 \times 10^{-11}$ u.a. y su anchura es $\sigma = 1.0 \times 10^4$ u.a. Para el cálculo se ha truncado la Gaussiana en $\pm d/2$, con $d = 9.6 \times 10^4$ u.a., valor para el cuál la convergencia se ha comprobado. La curva en trazo continuo representa la solución exacta, mientras que en trazo discontinuo se muestra la solución aproximada.

3.2. Descripción de la interferencia en el espacio de fases

La interferencia estudiada es fruto de una adecuada preparación de la colisión en la representación de posiciones, aunque sus efectos se manifiestan más notablemente en la distribución de momentos. Así, mientras que para analizar los efectos de la interferencia es suficiente analizar la distribución de momentos, para tener una visión clara de las causas que la producen, y de su evolución, es necesario estudiar la información suministrada por la distribución de posiciones. Hasta ahora, la descripción

en cada instante se ha realizado recurriendo a las informaciones parciales suministradas por cada una de las distribuciones. Para obtener una descripción más global, se utilizan frecuentemente representaciones de la Mecánica Cuántica que contengan información combinada de las representaciones de posiciones y de momentos. Para ello, se recurre a la descripción complementaria que proporciona el espacio de fases cuántico acerca del efecto de interferencia descrito en esta memoria.

La evolución mecánico-clásica de las variables de posición y de momento de un determinado sistema físico¹ puede ser descrita por medio de la distribución de probabilidad en el espacio de fases, $f(x, p)$. Una descripción análoga del sistema cuántico equivalente vendría dada a través de distribuciones $\rho_q(x, p)$, que sería deseable que cumpliesen las siguientes propiedades:

- Sus distribuciones marginales deberían proporcionar las distribuciones de probabilidad en posiciones y momentos, esto es,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho_q(x, p) dp = P(x) = \langle x | \rho | x \rangle, \quad (3.10)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho_q(x, p) dx = P(p) = \langle p | \rho | p \rangle, \quad (3.11)$$

donde ρ es el operador densidad cuántico, y

- la distribución no podría ser negativa,

$$\rho_q(x, p) \geq 0. \quad (3.12)$$

El Principio de Incertidumbre cuántico pone de manifiesto una dificultad intrínseca para la mera introducción en el contexto de la Mecánica Cuántica de un espacio de fases. Debido a que el estado de una partícula no puede tener simultáneamente una posición y un momento bien definidos no es posible definir la probabilidad de que una partícula se encuentre en la posición x con momento p . Sin embargo, sí se han definido cuasidistribuciones de probabilidad que han resultado ser de gran utilidad al proporcionar una descripción más intuitiva de los sistemas cuánticos.

En esta sección se representa el fenómeno de interferencia que nos ocupa a través de dos de estas cuasidistribuciones: una de ellas será la proporcionada por la función

¹La descripción que se realiza en este capítulo se refiere a sistemas extendidos espacialmente a lo largo de una única dimensión, el eje x , por simplicidad, pero sin que esto suponga una pérdida de generalidad en las conclusiones.

de Wigner, que satisface las condiciones (3.10) y (3.11), pero no así la (3.12), y la otra será la proporcionada por la función de Husimi, que si bien cumple la condición (3.12), no cumple las condiciones (3.10) y (3.11).

3.2.1. Representación de Wigner

Para una partícula en una dimensión, la cuasidistribución de Wigner se define a partir del operador densidad cuántico, ρ , como

$$\rho_W(x, p) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \left\langle x - \frac{y}{2} \left| \rho \right| x + \frac{y}{2} \right\rangle e^{ipy/\hbar} dy. \quad (3.13)$$

Para un estado puro, $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$, $\rho_w(x, p)$ se puede expresar como

$$\rho_W(x, p) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \psi\left(x - \frac{y}{2}\right) \psi^*\left(x + \frac{y}{2}\right) e^{ipy/\hbar} dy, \quad (3.14)$$

donde $\psi(x) = \langle x|\psi\rangle$ es la función de onda que describe al sistema físico en representación de posiciones.

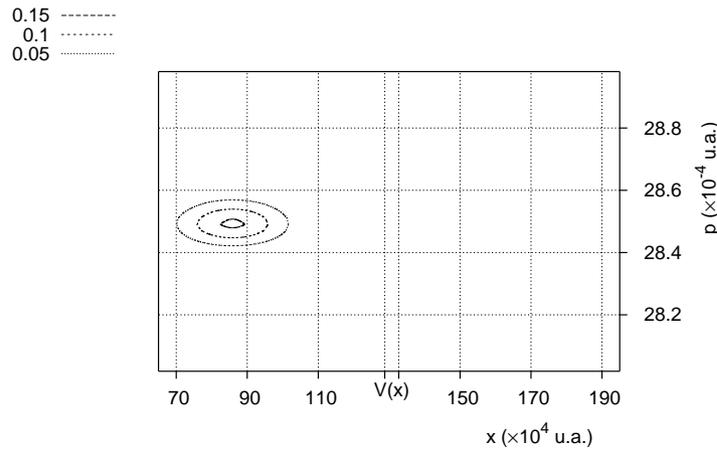


Figura 3.15: Cuasidistribución de Wigner, $\rho_W(x, p)$, en función de x y de p , evaluada en el instante $t = 0.5 \times 10^{13}$ u.a., anterior a la colisión con una barrera cuadrada de potencial, $V(x)$. El estado inicial ($t = 0$) consiste en una Gaussiana de mínimo producto de incertidumbres centrada en $x_c = 8.0 \times 10^5$ u.a. y con anchura en coordenadas $\sigma_x = 1.04 \times 10^5$ u.a. El momento inicial promedio vale $p_c = 2.85 \times 10^{-3}$ u.a. La altura de la barrera es $V_0 = 5.84 \times 10^{-12}$ u.a. y su posición y anchura se representan en la figura por medio de dos líneas verticales paralelas.

Las figuras 3.15 hasta 3.19 representan la cuasidistribución de Wigner que describe distintos instantes de la colisión de un átomo de Cesio ($m = 2.423 \times 10^5$ u.a.)

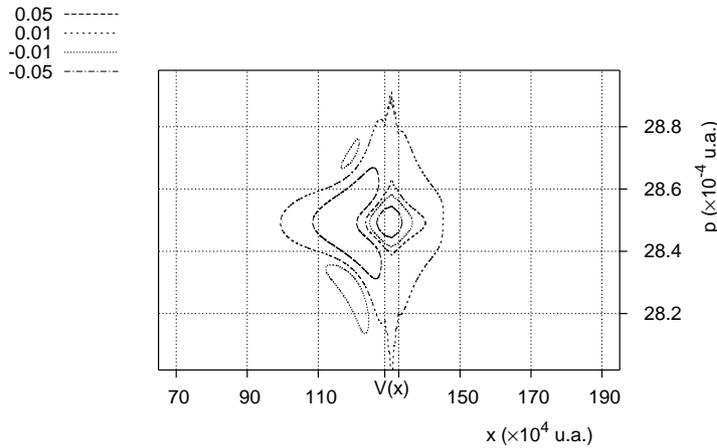


Figura 3.16: Cuasidistribución de Wigner, $\rho_W(x, p)$, evaluada para el instante $t = 3.7 \times 10^{13}$ u.a., cuando empieza a deformarse por su interacción con el potencial. Los parámetros que describen el sistema y la colisión son los mismos que para la figura 3.15.

moviéndose en una dimensión en presencia de una barrera cuadrada de potencial. El estado inicial ($t = 0$) consiste en una Gaussiana de mínimo producto de incertidumbres centrada en $x_c = 8.0 \times 10^5$ u.a. y con anchura en coordenadas $\sigma_x = 1.04 \times 10^5$ u.a. El momento inicial promedio vale $p_c = 2.85 \times 10^{-3}$ u.a. La altura de la barrera es $V_0 = 5.84 \times 10^{-12}$ u.a. y su posición y anchura se representan en la figura por medio de dos líneas verticales paralelas.

Las figuras 3.15 y 3.19 describen situaciones asintóticas, antes y después de la colisión respectivamente. En este caso, la probabilidad de transmisión es cercana al 100 %, por lo que la distribución de Wigner una vez que se ha producido la colisión aparece simplemente desplazada en posiciones hacia la derecha de la barrera.

La figura 3.16 muestra la cuasidistribución de Wigner evaluada en un instante en el que ya ha comenzado la colisión, aunque todavía el grueso del paquete de ondas en la representación de posiciones se encuentra a la izquierda de la barrera. En este instante, en la representación de momentos, la interferencia destructiva en el momento incidente no es total. La distribución de Wigner presenta dos características fundamentales: (1) una región con valores positivos grandes en la zona central izquierda, y (2) una zona central en la que toma valores negativos. Esta zona central negativa es responsable de que la distribución de momentos empiece a desarrollar un mínimo local en torno a $p_c \simeq 2.85 \times 10^{-3}$ u.a. De hecho, el efecto de

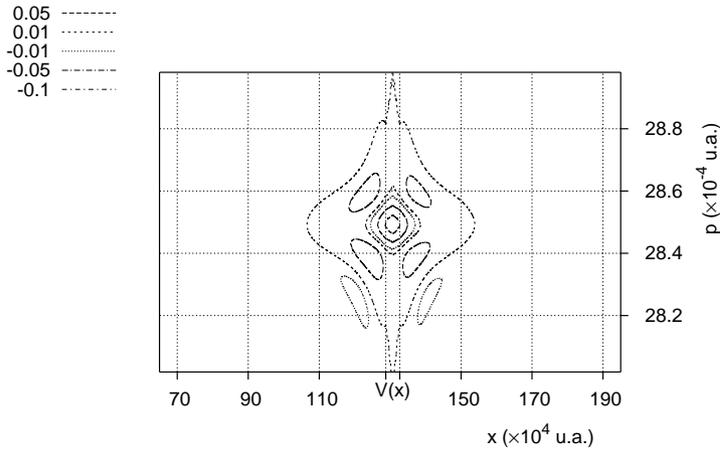


Figura 3.17: Cuasidistribución de Wigner, $\rho_W(x, p)$, evaluada para el instante $t = 4.3 \times 10^{13}$ u.a., en el que la colisión está en su máxima intensidad. Los parámetros que describen el sistema y la colisión son los mismos que para la figura 3.15.

interferencia destructiva se manifiesta en valores negativos para la cuasidistribución de Wigner en la zona de la barrera. Para un valor fijo del momento, alrededor de p_c , en la integral de ρ_w a lo largo del eje x [véase la ecuación (3.11)], que proporciona la distribución de momentos, se compensan valores positivos y negativos de ρ_w , de manera que en el centro de la distribución de momentos se desarrolla un mínimo local de probabilidad.

La distribución de Wigner en el instante en el que la interferencia destructiva es más clara se muestra en la figura 3.17. En este caso la distribución muestra sus máximos valores (positivos) en regiones ligeramente a la izquierda y a la derecha de la barrera de potencial, y para momentos ligeramente superiores e inferiores al momento central incidente, donde se producen los máximos de la distribución de momentos fruto de la interferencia constructiva. En la región del espacio ocupada por la barrera cuadrada, y para los momentos principales del paquete incidente, la distribución toma valores negativos (y tienen la máxima amplitud). Para el momento central, $p_c \simeq 2.85 \times 10^{-3}$ u.a., la integral de la distribución en x produce un mínimo central en la distribución de momentos. Para que la integral sea nula, los valores que toma la distribución de Wigner a la izquierda y a la derecha de la barrera cuadrada son compensados por los valores negativos que alcanza en la región de la barrera, produciendo la interferencia destructiva el mínimo en la dis-

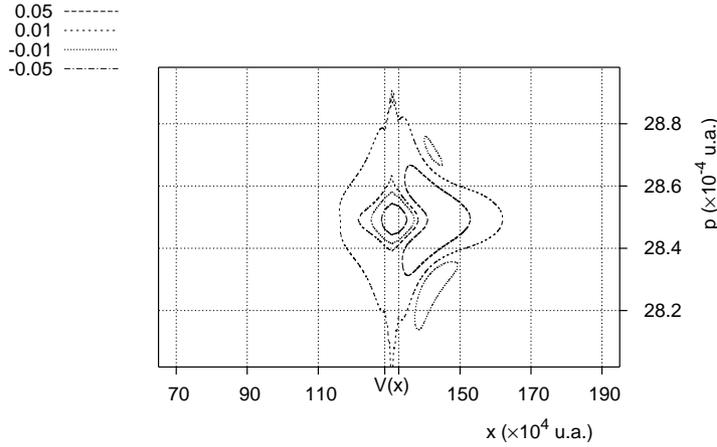


Figura 3.18: Cuasidistribución de Wigner, $\rho_W(x, p)$, evaluada para el instante $t = 5.0 \times 10^{13}$ u.a., cuando la colisión con la barrera de potencial está finalizando. Los parámetros que describen el sistema y la colisión son los mismos que para la figura 3.15.

tribución de momentos característica de este efecto. Por otra parte, la distribución de momentos para valores ligeramente inferiores y superiores al momento central, en los que están localizados los picos de la interferencia constructiva, se manifiesta en valores positivos en la cuasidistribución de Wigner, que no son cancelados por ninguna contribución negativa.

Finalmente, la figura 3.18 muestra la distribución de Wigner para un instante en el que la colisión está finalizando. Ésta presenta características muy similares a las que presenta en la figura 3.16, salvo que ahora la región de valores máximos de la distribución se encuentra a la derecha de la barrera cuadrada.

3.2.2. Representación de Husimi

Para el estado de una partícula descrito en una dimensión por el operador densidad ρ , la representación de Husimi se define como

$$\rho_H(x, p) = \frac{1}{2\pi\hbar} \langle x, p | \rho | x, p \rangle, \quad (3.15)$$

donde $|x, p\rangle$ son estados de mínimo producto de incertidumbres en el espacio de fase, que, en la representación de posiciones, se expresan como

$$\langle x' | x, p \rangle = \frac{1}{(2\pi s^2)^{1/4}} e^{-(x'-x)^2/4s^2} e^{ipx'/\hbar}. \quad (3.16)$$

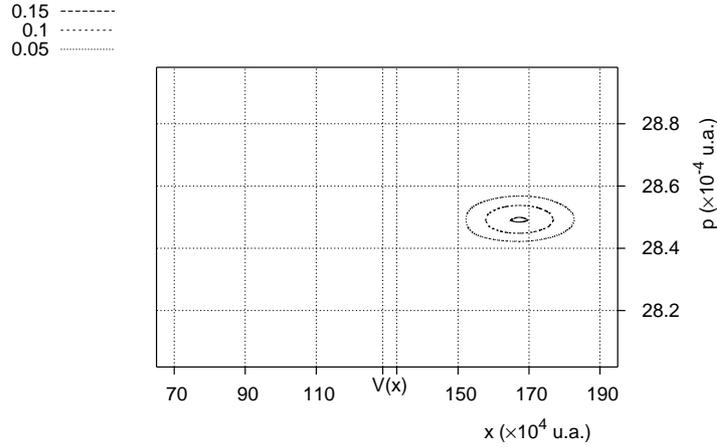


Figura 3.19: Cuasidistribución de Wigner, $\rho_W(x, p)$, evaluada para el instante $t = 7.5 \times 10^{13}$ u.a., cuando el paquete de ondas ya ha abandonado la zona de colisión y evoluciona de nuevo libremente. Los parámetros que describen el sistema y la colisión son los mismos que para la figura 3.15.

Las funciones que conforman esta familia, parametrizadas por medio de s , están centradas en el punto (x, p) del espacio de fases, y son distribuciones Gaussianas tanto en posiciones como en momentos, con anchuras a mitad de altura $\delta x = s$ y $\delta p = \hbar/2s$, respectivamente. Cada elección del parámetro s conduce a un conjunto diferente de funciones de la base $\{|x, p\rangle\}$. En el límite $s \rightarrow 0$ la función (3.16) se hace muy estrecha en posiciones, aproximándose la distribución de Husimi a la función de onda en posiciones. Alternativamente, haciendo $s \rightarrow \infty$, $\rho_H(x, p)$ se aproximará a la función de onda en momentos.

Para un estado puro, $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$, la definición (3.15) queda como

$$\rho_H(x, p) = \frac{1}{2\pi\hbar} |\langle x, p | \psi \rangle|^2, \quad (3.17)$$

que, al introducir la relación de cierre en posiciones, se transforma en

$$\rho_H(x, p) = \frac{1}{2\pi\hbar} \left| \int_{-\infty}^{\infty} \langle x, p | x' \rangle \langle x' | \psi \rangle dx' \right|^2. \quad (3.18)$$

A efectos de ilustración se ha tomado en esta memoria el valor $s = \sqrt{\hbar/2}$, de manera que las incertidumbres en posición y momentos de los estados de mínima incertidumbre $|x, p\rangle$ sean iguales, $\delta x = \delta p = \sqrt{\hbar/2}$.

Las figuras 3.20 hasta 3.24 representan la cuasidistribución de Husimi que describe distintos instantes de la colisión de un átomo de Cesio ($m = 2.423 \times 10^5$ u.a.)

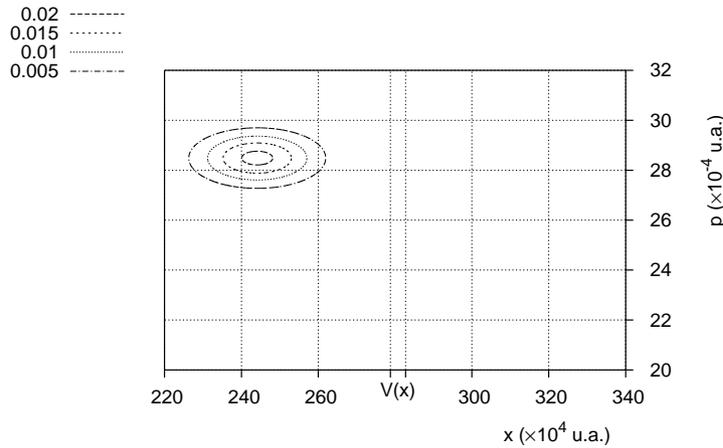


Figura 3.20: Cuasidistribución de Husimi, $\rho_H(x, p)$, (con $s = \sqrt{\hbar/2}$) en función de x y de p , evaluada en un instante $t = 1.2 \times 10^{13}$ u.a., anterior a la colisión con una barrera cuadrada de potencial, $V(x)$. La posición inicial promedio del paquete incidente es $x_c = 2.3 \times 10^6$ u.a. Los demás parámetros que describen el sistema y la colisión son los mismos que para la figura 3.15.

moviéndose en una dimensión en presencia de una barrera cuadrada de potencial. El estado inicial ($t = 0$) consiste en una Gaussiana de mínimo producto de incertidumbres centrada en $x_c = 2.3 \times 10^6$ u.a. y con anchura en coordenadas $\sigma_x = 1.04 \times 10^5$ u.a. El momento inicial promedio vale $p_c = 2.85 \times 10^{-3}$ u.a. La altura de la barrera es $V_0 = 5.84 \times 10^{-12}$ u.a. y su posición y anchura se representan en la figura por medio de dos líneas verticales paralelas.

Las figuras 3.20 y 3.24 describen situaciones asintóticas, antes y después de la colisión respectivamente. En este caso, la probabilidad de transmisión es cercana al 100 %, por lo que la distribución de Husimi una vez que se ha producido la colisión aparece simplemente desplazada en posiciones hacia la derecha de la barrera.

La figura 3.21 muestra la cuasidistribución de Husimi evaluada en un instante en el que ya ha comenzado la colisión, aunque todavía el grueso del paquete de ondas en la representación de posiciones se encuentra a la izquierda de la barrera. En este instante, en la representación de momentos, la interferencia destructiva en el momento incidente no es total. En la figura se observa la aparición de valores significativos de la distribución de Husimi en la zona de la barrera, en la región de momentos entre 2.2×10^{-3} y 2.4×10^{-3} u.a., desplazada hacia zonas inferiores en el eje de momentos con respecto al paquete incidente. Ésto corresponde a la imagen

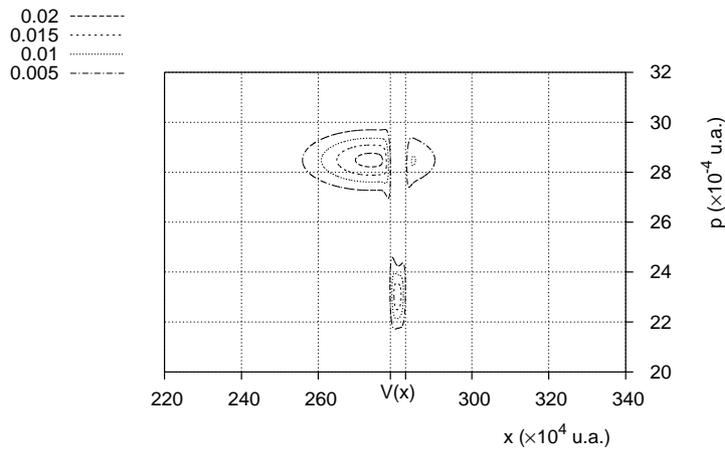


Figura 3.21: Cuasidistribución de Husimi, $\rho_H(x, p)$, (con $s = \sqrt{\hbar/2}$) evaluada para el instante $t = 3.7 \times 10^{13}$ u.a., cuando empieza a deformarse por su interacción con el potencial. Los parámetros que describen el sistema y la colisión son los mismos que para la figura 3.20.

clásica del frenado que sufren las partículas al llegar a la zona de la barrera.

La distribución de Husimi en el instante en el que la interferencia destructiva es más clara se muestra en la figura 3.22. La imagen se corresponde con lo que clásicamente es de esperar. La norma a izquierda y derecha de la barrera está repartida aproximadamente por igual, mientras que la componente que se encuentra en la zona de la barrera tiene momentos ligeramente inferiores y así se refleja en el gráfico.

La figura 3.23 muestra la distribución para un instante en el que la colisión está finalizando. Ésta muestra características muy similares a las de la figura 3.21, salvo que ahora la región de valores máximos de la distribución se encuentra a la derecha de la barrera cuadrada.

En todas estas figuras, y al contrario que en la distribución de Wigner, hay que destacar que no se pone de manifiesto la interferencia destructiva que origina el cero en la distribución de momentos. Aunque ambas distribuciones son, por supuesto, igualmente válidas para representar el estado del sistema en el espacio de fases cuántico, la distribución de Wigner se muestra útil para representar la interferencia destructiva, mientras que para la de Husimi, ésta pasa desapercibida.

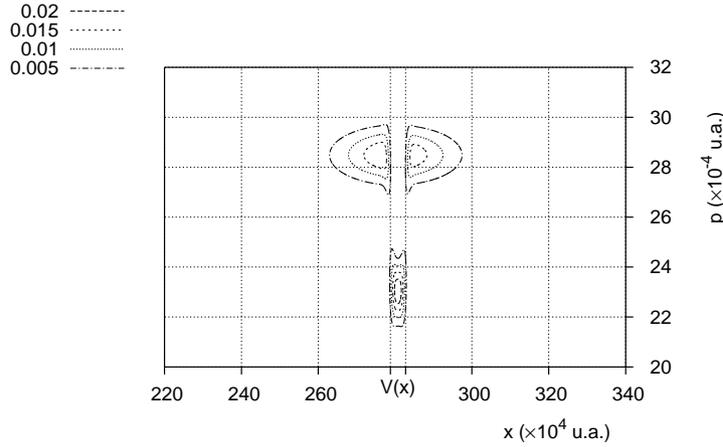


Figura 3.22: Cuasidistribución de Husimi, $\rho_H(x, p)$, (con $s = \sqrt{\hbar/2}$) evaluada para el instante $t = 4.3 \times 10^{13}$ u.a., en el que la colisión está en su máxima intensidad. Los parámetros que describen el sistema y la colisión son los mismos que para la figura 3.20.

3.3. Influencia de la gravedad sobre el efecto de interferencia

Tal y como se describió en la Introducción, la observación experimental del efecto de interferencia se podría plantear a partir de colisiones de átomos ultrafríos con barreras de potencial producidas por haces láser no sintonizados con respecto a ninguna de las transiciones atómicas relevantes.

En las técnicas experimentales más extendidas, los átomos se dejan caer bajo los efectos de la gravedad sobre el haz láser, por lo que es necesario analizar el efecto que pueda tener el campo gravitatorio sobre el desarrollo de la interferencia que se está considerando.

La diferencia fundamental respecto a lo ya descrito es que al desplazarse el paquete de ondas que describe al átomo en la misma dirección en la que actúa la gravedad (eje x), éste estará sometido a una aceleración (véase la figura 3.25). De esta manera, el momento promedio del paquete deja de ser constante, y aumenta según evoluciona la propagación. El nuevo Hamiltoniano, incluyendo un término de energía potencial gravitatoria, queda como sigue

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x) - mg(x - x_c), \tag{3.19}$$

donde g es la aceleración de la gravedad, y x_c es la posición inicial promedio del

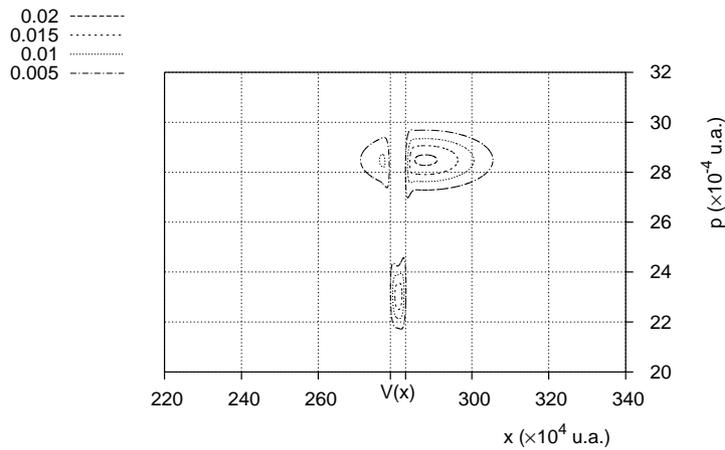


Figura 3.23: Cuasidistribución de Husimi, $\rho_H(x, p)$, (con $s = \sqrt{\hbar/2}$) evaluada para el instante $t = 5.0 \times 10^{13}$ u.a., cuando la colisión con la barrera de potencial está finalizando. Los parámetros que describen el sistema y la colisión son los mismos que para la figura 3.20.

paquete de ondas, que se ha tomado como “origen” de energía potencial gravitatoria, por convenio.

Para que se produzca el efecto de interferencia destructiva responsable del mínimo en la distribución de momentos, es necesario que la fase del coeficiente de transmisión valga π para $p \simeq p_c(t_c)$, donde t_c es el instante central de la colisión y p_c es el momento promedio del paquete en ese instante. Sin la influencia de la gravedad, p_c es aproximadamente constante para este sistema, de manera que si la condición anterior se cumple al prepararse el paquete inicial, también se cumplirá en cualquier otro instante de tiempo, y en particular, para $t \simeq t_c$. La acción de la gravedad produce una variación lineal con el tiempo en el momento central del paquete por lo que para que se produzca el efecto de interferencia estudiado es necesario preparar el estado inicial de manera que, teniendo en cuenta la aceleración que se produce, ajustando por ejemplo la distancia entre el paquete de ondas y la barrera de potencial, el momento central del paquete en el instante t_c coincida aproximadamente con uno de los valores para los que el coeficiente de transmisión tome el valor de π .

En la figura 3.26 se representa la fase del coeficiente de transmisión de la barrera de potencial cuadrada con $V_0 = 1.025 \times 10^{-11}$ u.a. en función del momento incidente. Para un paquete inicial con momento central $p_c \simeq 2.85 \times 10^{-3}$ u.a., situado a la distancia adecuada del centro de colisión, el efecto de la gravedad será el necesario

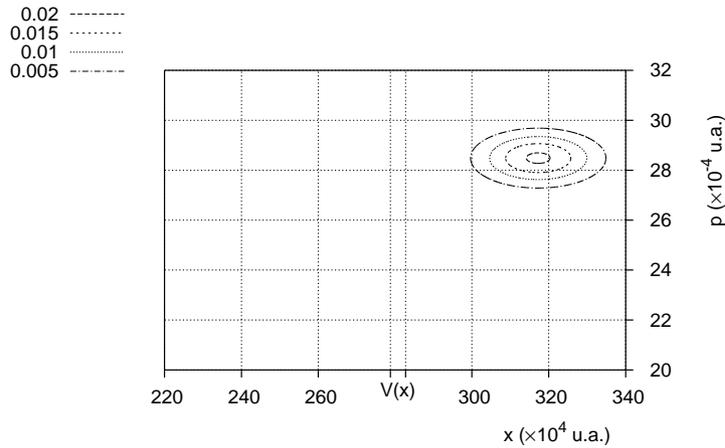


Figura 3.24: Cuasidistribución de Husimi, $\rho_H(x, p)$, (con $s = \sqrt{\hbar/2}$) evaluada para el instante $t = 7.5 \times 10^{13}$ u.a., cuando el paquete de ondas ya ha abandonado la zona de colisión y evoluciona de nuevo libremente. Los parámetros que describen el sistema y la colisión son los mismos que para la figura 3.20.

para desplazar el centro de paquete en momentos hasta el valor de $p \simeq 3.81 \times 10^{-3}$ u.a. que, como se aprecia en la figura, también tiene un valor próximo a π para la fase asociada. Este resultado haría esperar que en estas condiciones el efecto de interferencia se produjese como anteriormente, y eso es de hecho lo que se observa en la figura 3.27.

3.4. Interferencia entre componentes incidente y transmitida inducida por un láser resonante

A lo largo de este capítulo se han descrito las condiciones que dan lugar al fenómeno de interferencia entre los términos de incidencia y transmisión en la representación de momentos, en colisiones con láseres no resonantes, que actúan de forma efectiva sobre el átomo en su estado fundamental como una barrera de potencial. También es posible diseñar experimentos que permiten observar este efecto de interferencia haciendo uso de láseres en condiciones de resonancia.

Para ilustrar este fenómeno se considera un sistema atómico de dos niveles, $|1\rangle$ y $|2\rangle$, en interacción con un láser sintonizado con la transición entre los dos niveles. Igual que en los casos descritos anteriormente, el átomo suponemos que se desplaza perpendicularmente a la dirección de propagación del láser.

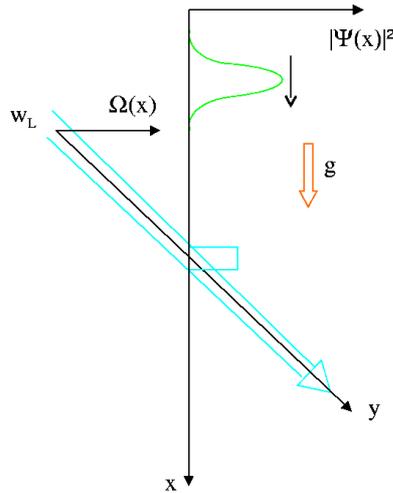


Figura 3.25: Esquema del experimento teniendo en cuenta el efecto de la fuerza de la gravedad.

La descripción detallada de la interacción de un sistema atómico de dos niveles con un campo de radiación láser se hace en el capítulo 5. En esta sección únicamente vamos a utilizar algunos resultados que avanzamos para describir brevemente el efecto de interferencia en condiciones de resonancia.

Hemos observado teóricamente que el efecto de interferencia destructiva se produce en el estado fundamental, $|1\rangle$, para lo que es necesario que si el paquete incidente se prepara en el estado fundamental, la evolución del sistema a través del láser deje al átomo en ese mismo estado con la mayor probabilidad posible. Para ello, una vez elegida la anchura del perfil cuadrado de intensidad del láser resonante (que, como en ocasiones anteriores, es necesario que sea mucho menor que la del paquete de ondas incidente), se buscan los valores apropiados de la frecuencia de Rabi, Ω , (véase el Apéndice G) y, por tanto, de la amplitud del láser. De todos los posibles valores de Ω se ha escogido uno para el que la fase del coeficiente de transmisión tenga un valor próximo a π , siempre que se verifique que la probabilidad de transmisión, $|T_1(p)|^2$, esté próxima a la unidad para los momentos representativos del paquete de ondas incidente. Al tratarse de un láser resonante, esto último estará garantizado para valores de la frecuencia de Rabi no demasiado altos (un laser muy intenso

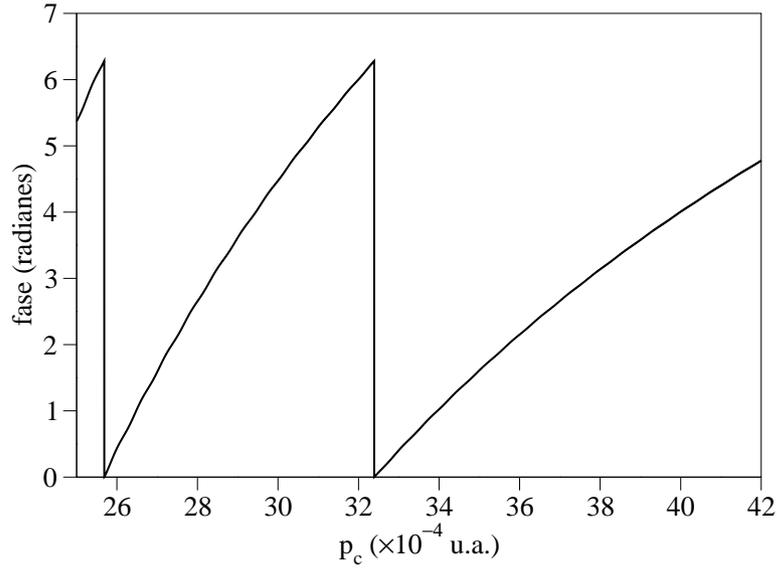


Figura 3.26: Fase del coeficiente de transmisión estacionario de una barrera cuadrada de potencial con altura $V_0 = 1.025 \times 10^{-11}$ u.a. en función del momento incidente p_c .

aumentaría la probabilidad de reflexión para el átomo en su estado fundamental).

En la figura 3.28 se muestra la distribución de momentos asociada a la componente fundamental, $|\psi^{(1)}(p, t)|^2$, durante la colisión, calculada tanto de forma exacta [utilizando la ecuación (5.109) del capítulo 5], como en la aproximación que considera únicamente los términos incidente y de transmisión,

$$\psi_{(IT)}^{(1)}(p, t) \equiv \frac{1}{h^{1/2}} \text{TF} \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} [\phi_{I(I)}^{(1)}(x; p') + \phi_V^{(1)}(x; p')] e^{-iE't/\hbar} \psi^{(1)}(p', t=0) dp' \right\}, \quad (3.20)$$

donde TF representa una transformación de Fourier,

$$\phi_{I(I)}^{(1)}(x; p') \equiv \frac{1}{h^{1/2}} e^{ip'x/\hbar}, \quad (3.21)$$

y

$$\phi_V^{(1)}(x; p') \equiv \frac{1}{h^{1/2}} T_1(p') e^{ip'x/\hbar}. \quad (3.22)$$

Los términos de incidencia y transmisión capturan el comportamiento esencial y son suficientes para describir la interferencia con muy buena aproximación, y la expresión (3.20) se reduce a la ecuación (3.3), deducida en la sección 3.1,

$$\psi_{(IT)}^0 = \langle p | \psi(t) \rangle \simeq \frac{\mathcal{T}}{2} e^{-(\delta_x p_c^2 / \hbar^2) + \eta^2} e^{ipd/2\hbar} [w(u_I) + T(p)w(-u_T)], \quad (3.23)$$

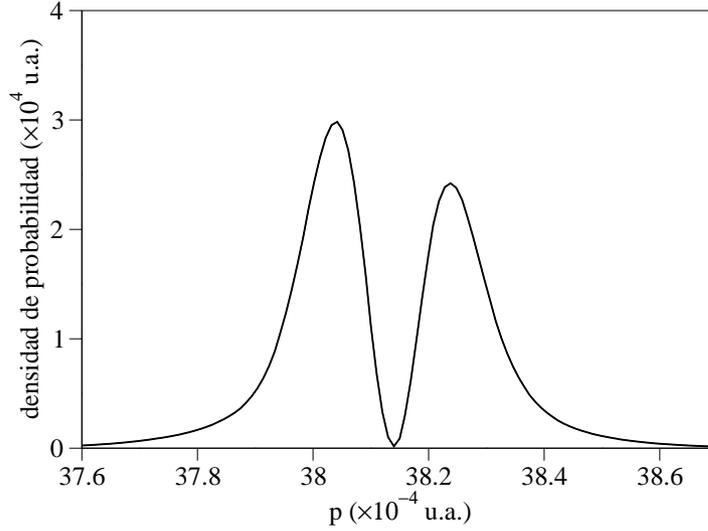


Figura 3.27: Distribución de momentos para una colisión de un paquete de ondas con una barrera cuadrada bajo la acción de la gravedad, evaluada en el instante t_c “central” del proceso. Los parámetros que describen el sistema se describen en el texto.

en la que se sustituye el coeficiente de transmisión $T(p)$ por la correspondiente amplitud para la transmisión en el estado $|1\rangle$, $T_1(p)$. $|\psi_{(IT)}^0|^2$ se muestra en la figura 3.28 y describe el efecto de interferencia teniendo en cuenta únicamente la contribución de los polos estructurales presentes en los términos de incidencia y transmisión. Como se observa en la gráfica, la aproximación proporcionada por esta expresión es extremadamente buena y permite trasladar a esta sección las conclusiones alcanzadas en la sección 3.1.

En la figura 3.29 se representa la fase del coeficiente de transmisión para el sistema en su estado fundamental, $T_1(p)$, en función del momento, para el valor de la frecuencia de Rabi seleccionada $\Omega = 4.214 \times 10^{-12} \text{ u.a.}$ Aunque en la escala de la figura las variaciones que se observan alrededor de $4.5 \times 10^{-3} \text{ u.a.}$ y de $1.3 \times 10^{-2} \text{ u.a.}$ aparecen como discontinuidades, una imagen con mayor resolución de los entornos muestra una variación rápida, continua, de la fase para esos valores del momento. Sorprende también el amplio intervalo de valores del momento para los cuales la fase permanece prácticamente constante en torno al valor de π necesario para la interferencia. En los casos estudiados en esta memoria la fase del coeficiente de transmisión asociado con láseres utilizados en condición no resonante siempre

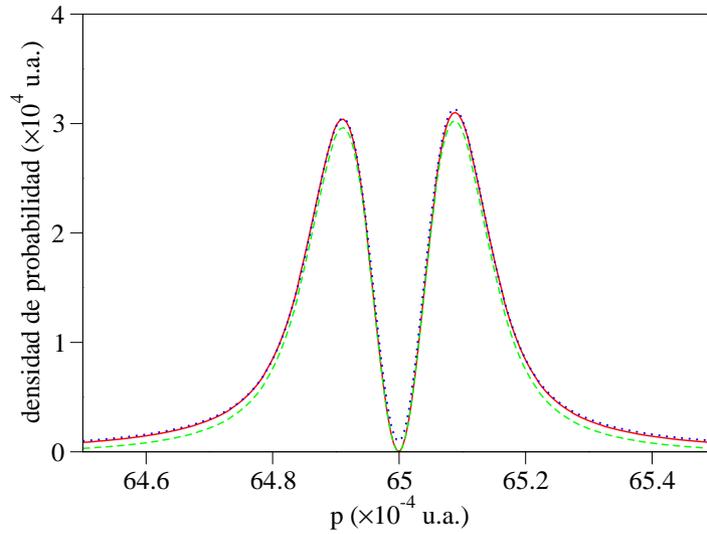


Figura 3.28: Densidad de probabilidad en el espacio de momentos para el átomo en su estado fundamental, $|\psi^{(1)}(p)|^2$ (línea continua), componentes de incidencia y transmisión, $|\psi_{(IT)}^{(1)}(p)|^2$ (línea discontinua), y aproximación para las componentes de incidencia y transmisión $|\psi_{(IT)}^0(p)|^2$ (línea de puntos). En el texto se describen las expresiones utilizadas para estas funciones, que han sido evaluadas para el instante $t = 1.89 \times 10^{13}$ u.a., con $m = 2.423 \times 10^5$ u.a., $p_c = 6.5 \times 10^{-3}$ u.a., $\sigma_x = 1.04 \times 10^5$ u.a., $x_c = 2.3 \times 10^6$ u.a., $a = 2.79 \times 10^6$ u.a., $b = 2.83 \times 10^6$ u.a., $\Omega = 4.214 \times 10^{-12}$ u.a.

presenta un rápido crecimiento respecto al momento. El análisis del comportamiento de la fase del coeficiente de transmisión en los láseres resonantes se plantea como objetivo para futuros trabajos.

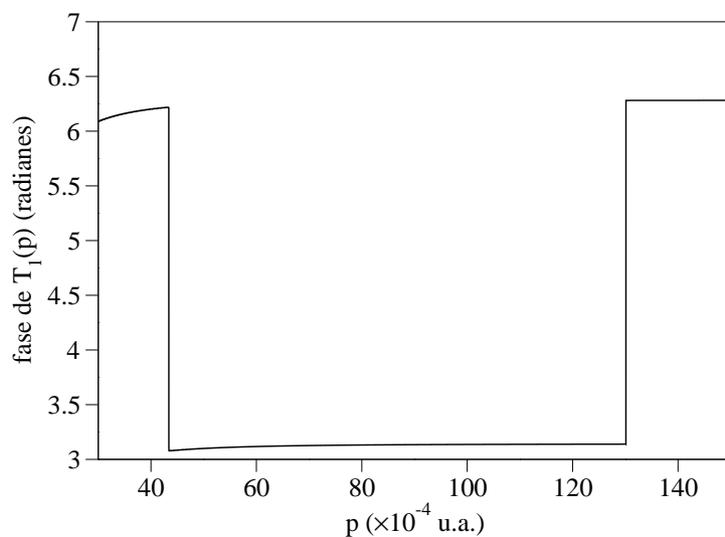


Figura 3.29: Fase del coeficiente de transmisión para el estado fundamental, $T_1(p)$, en función del momento. Los parámetros que definen la colisión son los mismos que los utilizados en la figura anterior.

Capítulo 4

Colisión cuántica de un paquete de ondas con una doble barrera cuadrada

Si se hace colisionar un paquete de ondas con una barrera de potencial apropiada, de acuerdo con las condiciones descritas en el capítulo anterior, y a continuación se apaga el potencial en el instante en el que la interferencia es máxima, la supresión transitoria de la componente central del momento incidente puede ser usada, por ejemplo, para convertir un paquete de ondas bien definido en momentos, en uno con una estructura de doble pico, puesto que la evolución libre posterior no modifica la distribución de momentos. No obstante, el carácter transitorio del efecto puede dificultar su observación, su uso como dispositivo de control del estado de movimiento atómico en aplicaciones de óptica cuántica, o sus posibles aplicaciones en teoría cuántica de la información.

Para remediar esta dificultad se ha propuesto añadir una barrera de potencial extra. Aunque el efecto de interferencia se vuelve más complejo, de esta forma es posible incrementar significativamente su duración, haciéndolo más robusto y fácil de observar.

Consideremos la colisión con dos barreras cuadradas de alturas V_1 y V_2 , localizadas entre $x = -d/2$ y $x = d/2$ la primera, y entre $x = a$ y $x = b$ la segunda (se

asume que $b > a > d/2 > 0$),

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < -d/2 \\ V_1 & \text{si } -d/2 \leq x \leq d/2 \\ 0 & \text{si } d/2 < x < a \\ V_2 & \text{si } a \leq x \leq b \\ 0 & \text{si } x > b. \end{cases} \quad (4.1)$$

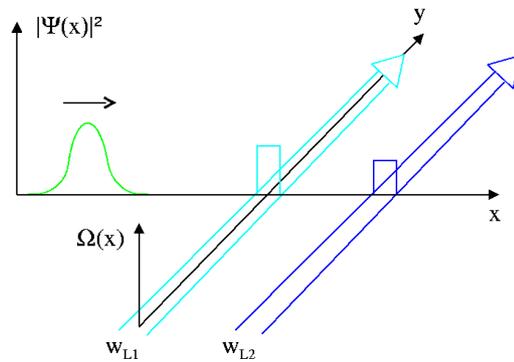


Figura 4.1: Esquema del experimento que describe la colisión con dos barreras de potencial.

La colisión se puede llevar a cabo disponiendo para cada barrera del haz de un láser perpendicularmente a la dirección de propagación de los átomos (véase la figura 4.1). Para los ejemplos numéricos se han elegido valores de los diferentes parámetros que corresponden a situaciones experimentales realistas. De hecho, experimentos de este tipo con átomos de Rubidio están siendo realizados en Canadá bajo la dirección del profesor A. Steinberg [11]. En nuestro caso, hemos considerado átomos de Rubidio, con alturas de las barreras correspondientes a las velocidades $v_1 = 1.25$ cm/s y $v_2 = 0.92$ cm/s, $d = 2.65\mu\text{m}$, $a = 20.11\mu\text{m}$, y $b = 21.17\mu\text{m}$.

La figura 4.2 muestra la distribución de momentos para diferentes instantes de tiempo, antes, durante, y después de la colisión. La función de onda inicial consiste

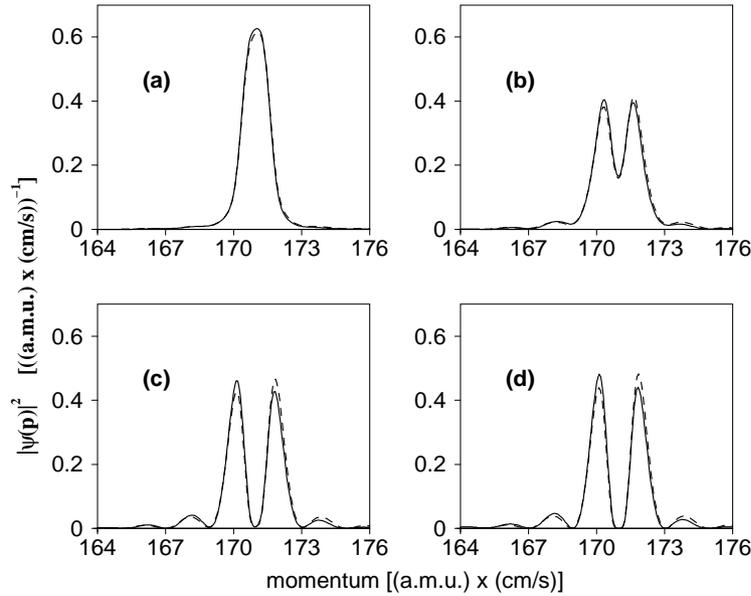


Figura 4.2: Distribución de momentos (línea continua) para diferentes instantes de tiempo: (a) $t = 19.35$ ms, (b) $t = 24.19$ ms, (c) $t = 29.03$ ms, y (d) $t = 31.93$ ms, durante la colisión de un átomo de Rb con la estructura de doble barrera descrita en el texto. El paquete de ondas inicial es una Gaussiana de mínimo producto de incertidumbres (ecuación (4.2)). También se muestra la distribución aproximada de momentos obtenida a partir de la ecuación (4.28) (línea discontinua) para cada uno de los valores de t .

en una Gaussiana de mínimo producto de incertidumbres

$$\psi(p, t = 0) = \left(\frac{2\delta_x}{\pi\hbar^2} \right)^{1/4} \exp \left[-\frac{\delta_x(p - p_c)^2}{\hbar^2} - \frac{ipx_c}{\hbar} \right], \quad (4.2)$$

con valor medio de la posición $x_c = -52.92\mu\text{m}$, velocidad media $v_c = 2$ cm/s, y raíz de la varianza $\delta_x^{1/2} = 11\mu\text{m}$. Los parámetros del potencial y la energía cinética media de las partículas incidentes son tales que finalmente la probabilidad de transmisión del paquete de ondas está próxima a la unidad. El comportamiento más destacable que se observa en el conjunto de figuras es, de nuevo, la fuerte supresión, observada durante la colisión cuántica, de una gran cantidad de norma en el centro de la distribución inicial, la cual tiene una energía bastante superior a la de la barrera. Al igual que se comentó en el capítulo anterior, esta distribución no debería distorsionarse

significativamente durante la colisión de un colectivo de partículas clásicas que se corresponda con el colectivo cuántico anterior.

Para esta colisión, con una estructura de potencial de doble barrera, el máximo valor obtenido para $G^q(p, t)$ fue de 0.32 .

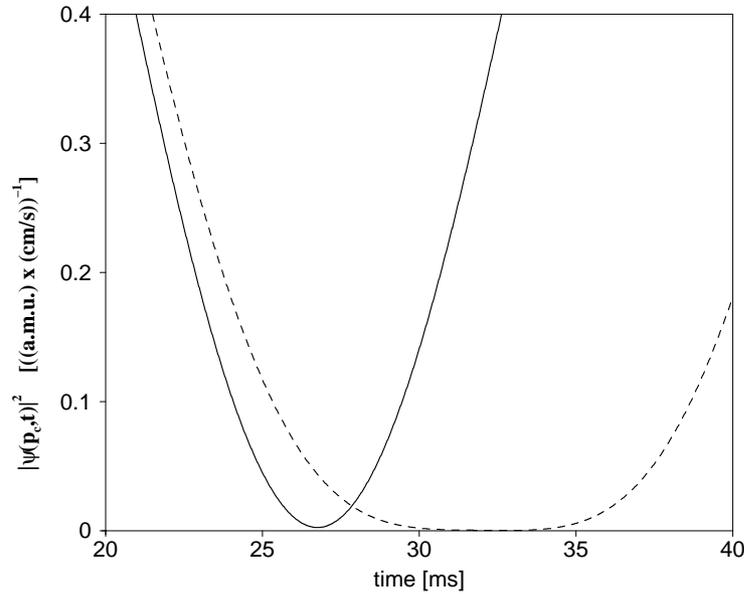


Figura 4.3: Valor de la distribución de momentos para $p = p_c$ en función del tiempo para la misma colisión que en la figura 4.2 (línea discontinua), y para la colisión del mismo paquete de ondas inicial en presencia de la primera barrera de la izquierda únicamente (línea continua).

El intervalo temporal durante el cual el momento central incidente es suprimido por la colisión se incrementa sustancialmente con respecto al caso simple en el que sólo se tiene una barrera cuadrada. Esto se observa claramente en la figura 4.3, donde se representa en función del tiempo el valor de $|\psi(p, t)|^2$ para el momento central p_c en los casos de una doble barrera, y de una única barrera. Para el caso de las dos barreras cuadradas se gana un orden de magnitud en la duración temporal, teniéndose también que la supresión es mucho más acusada.

Los resultados anteriores han sido obtenidos por medio del método de propa-

gación numérico descrito en el Apéndice A. Para entender la supresión central en la distribución de momentos, se recurrirá a una solución analítica aproximada, que refleje lo esencial del proceso.

4.1. Solución Analítica

La solución general de la ecuación diferencial

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k'^2\psi(x) = 0, \quad k'^2 = \frac{2m}{\hbar^2}[E' - V(x)] \quad (4.3)$$

se puede construir a partir de los estados estacionarios del sistema, con energía $E' = p'^2/2m$, que se pueden escribir de la forma

$$\langle x|\phi_{p'}\rangle = \frac{1}{\hbar^{1/2}} \begin{cases} Ie^{ip'x/\hbar} + R_1e^{-ip'x/\hbar}, & x < -d/2 \\ C_1e^{ip_1x/\hbar} + D_1e^{-ip_1x/\hbar}, & -d/2 \leq x \leq d/2 \\ T_1e^{ip'x/\hbar} + R_2e^{-ip'x/\hbar}, & d/2 < x < a \\ C_2e^{ip_2x/\hbar} + D_2e^{-ip_2x/\hbar}, & a \leq x \leq b \\ T_2e^{ip'x/\hbar}, & x > b, \end{cases} \quad (4.4)$$

donde $p_1 = \hbar k_1 \equiv \sqrt{p'^2 - 2mV_1}$, $p_2 = \hbar k_2 \equiv \sqrt{p'^2 - 2mV_2}$, y se tomará $I = 1$ para que los autovectores estén normalizados de acuerdo con una delta de Dirac.

La determinación de los coeficientes se realizará a través del cálculo de matrices de transferencia. Se comienza construyendo un vector general¹ \mathbf{l} , en cada una de las regiones del espacio en que se ha dividido el potencial, constituido por la función $\langle x|\phi_{p'}\rangle$ en una componente, y su derivada con respecto a x en la segunda componente. Este vector puede expresarse en la región I ($x < -d/2$) como el producto de una matriz de exponenciales $\Theta_{\mathbf{I}}(x)$ por un vector $\mathbf{q}_{\mathbf{I}}$ de coeficientes

$$\mathbf{l}_{\mathbf{I}} = \begin{pmatrix} e^{ip'x/\hbar} & e^{-ip'x/\hbar} \\ \frac{ip'}{\hbar}e^{ip'x/\hbar} & -\frac{ip'}{\hbar}e^{-ip'x/\hbar} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ R_1 \end{pmatrix}, \quad (4.5)$$

o, de forma más compacta, $\mathbf{l}_{\mathbf{I}} = \Theta_{\mathbf{I}}(x) \mathbf{q}_{\mathbf{I}}$. Análogamente, para el resto de las regiones se tiene:

- región II ($-d/2 \leq x \leq d/2$)

$$\mathbf{l}_{\mathbf{II}} = \begin{pmatrix} e^{ip_1x/\hbar} & e^{-ip_1x/\hbar} \\ \frac{ip_1}{\hbar}e^{ip_1x/\hbar} & -\frac{ip_1}{\hbar}e^{-ip_1x/\hbar} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1 \\ D_1 \end{pmatrix} = \Theta_{\mathbf{II}}(x) \mathbf{q}_{\mathbf{II}}; \quad (4.6)$$

¹Las letras \mathbf{l} y \mathbf{q} , en negrita, denotan vectores bidimensionales, mientras que el símbolo Θ denota una matriz de dimensión 2×2 .

- región III ($d/2 < x < a$)

$$\mathbf{l}_{\text{III}} = \begin{pmatrix} e^{ip'x/\hbar} & e^{-ip'x/\hbar} \\ \frac{ip'}{\hbar}e^{ip'x/\hbar} & -\frac{ip'}{\hbar}e^{-ip'x/\hbar} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T_1 \\ R_2 \end{pmatrix} = \Theta_{\text{III}}(x) \mathbf{q}_{\text{III}}; \quad (4.7)$$

- región IV ($a \leq x \leq b$)

$$\mathbf{l}_{\text{IV}} = \begin{pmatrix} e^{ip_2x/\hbar} & e^{-ip_2x/\hbar} \\ \frac{ip_2}{\hbar}e^{ip_2x/\hbar} & -\frac{ip_2}{\hbar}e^{-ip_2x/\hbar} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_2 \\ D_2 \end{pmatrix} = \Theta_{\text{IV}}(x) \mathbf{q}_{\text{IV}}; \quad (4.8)$$

- región V ($x > b$)

$$\mathbf{l}_{\text{V}} = \begin{pmatrix} e^{ip'x/\hbar} & e^{-ip'x/\hbar} \\ \frac{ip'}{\hbar}e^{ip'x/\hbar} & -\frac{ip'}{\hbar}e^{-ip'x/\hbar} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T_2 \\ 0 \end{pmatrix} = \Theta_{\text{V}}(x) \mathbf{q}_{\text{V}}. \quad (4.9)$$

Teniendo en cuenta que $\Theta_{\text{I}}(x) = \Theta_{\text{III}}(x) = \Theta_{\text{V}}(x) \equiv \Theta(x)$, las condiciones de continuidad de la función de onda y de su derivada primera en los puntos $-d/2$, $d/2$, a y b , se expresan como

$$\Theta(-d/2) \mathbf{q}_{\text{I}} = \Theta_{\text{II}}(-d/2) \mathbf{q}_{\text{II}} \quad (4.10)$$

$$\Theta_{\text{II}}(d/2) \mathbf{q}_{\text{II}} = \Theta(d/2) \mathbf{q}_{\text{III}} \quad (4.11)$$

$$\Theta(a) \mathbf{q}_{\text{III}} = \Theta_{\text{IV}}(a) \mathbf{q}_{\text{IV}} \quad (4.12)$$

$$\Theta_{\text{IV}}(b) \mathbf{q}_{\text{IV}} = \Theta(b) \mathbf{q}_{\text{V}}. \quad (4.13)$$

Eliminando ahora \mathbf{q}_{II} , \mathbf{q}_{III} y \mathbf{q}_{IV} de las ecuaciones anteriores, los coeficientes asociados con la primera y la última región se pueden relacionar a través de una matriz de transferencia \mathbf{T}^1 ,

$$\mathbf{q}_{\text{I}} = \mathbf{T}^1 \mathbf{q}_{\text{V}}, \quad (4.14)$$

donde

$$\begin{aligned} \mathbf{T}^1 &= \Theta^{-1}(-d/2) \Theta_{\text{II}}(-d/2) \Theta_{\text{II}}^{-1}(d/2) \Theta(d/2) \\ &\times \Theta^{-1}(a) \Theta_{\text{IV}}(a) \Theta_{\text{IV}}^{-1}(b) \Theta(b) \\ &= \begin{pmatrix} T_{11}^1 & T_{12}^1 \\ T_{21}^1 & T_{22}^1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (4.15)$$

Sustituyendo la ecuación anterior, y las expresiones de \mathbf{q}_{I} y \mathbf{q}_{V} en (4.14) se obtiene

$$T_2 = \frac{1}{T_{11}^1} \quad (4.16)$$

$$R_1 = \frac{T_{21}^1}{T_{11}^1}. \quad (4.17)$$

Una vez obtenido el vector \mathbf{q}_V , que viene determinado por T_2 (4.16), se puede calcular el vector \mathbf{q}_{IV} despejándolo en la ecuación (4.13),

$$\mathbf{q}_{IV} = \Theta_{IV}^{-1}(b) \Theta(b) \mathbf{q}_V = \begin{pmatrix} T_{11}^2 & T_{12}^2 \\ T_{21}^2 & T_{22}^2 \end{pmatrix} \mathbf{q}_V, \quad (4.18)$$

y resolviendo el sistema,

$$C_2 = \frac{T_{11}^2}{T_{11}^1} \quad (4.19)$$

$$D_2 = \frac{T_{21}^2}{T_{11}^1}. \quad (4.20)$$

Igualmente, despejando \mathbf{q}_{III} en la ecuación (4.12) y sustituyendo la expresión (4.18) se tiene el sistema

$$\mathbf{q}_{III} = \Theta^{-1}(a) \Theta_{IV}(a) \Theta_{IV}^{-1}(b) \Theta(b) \mathbf{q}_V = \begin{pmatrix} T_{11}^3 & T_{12}^3 \\ T_{21}^3 & T_{22}^3 \end{pmatrix} \mathbf{q}_V, \quad (4.21)$$

de cuya solución se obtiene

$$T_1 = \frac{T_{11}^3}{T_{11}^1} \quad (4.22)$$

$$R_2 = \frac{T_{21}^3}{T_{11}^1}. \quad (4.23)$$

Por último, despejando \mathbf{q}_{II} en la ecuación (4.11) y sustituyendo (4.21) se obtiene el sistema

$$\begin{aligned} \mathbf{q}_{II} &= \Theta_{II}^{-1}(d/2) \Theta(d/2) \Theta^{-1}(a) \Theta_{IV}(a) \Theta_{II}^{-1}(b) \Theta(b) \mathbf{q}_V \\ &= \begin{pmatrix} T_{11}^4 & T_{12}^4 \\ T_{21}^4 & T_{22}^4 \end{pmatrix} \mathbf{q}_V, \end{aligned} \quad (4.24)$$

cuya solución es

$$C_1 = \frac{T_{11}^4}{T_{11}^1} \quad (4.25)$$

$$D_1 = \frac{T_{21}^4}{T_{11}^1}. \quad (4.26)$$

Una vez obtenidos los valores de los coeficientes, las funciones $g_i(x; p')$, introducidas en el Capítulo 1, se pueden identificar con cada uno de los nueve términos de

$\langle x | \phi_{p'} \rangle$, para lo que se etiquetan con el subíndice de la amplitud correspondiente. Introduciendo estos términos en la ecuación (1.6), la función de onda en representación de momentos, para cualquier instante $t > 0$, vendrá dada por

$$\psi(p, t) = \sum_i \varphi_i(p, t) = \sum_i \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{g}_i(p; p') e^{-iE't/\hbar} \psi(p', t=0) dp', \quad (4.27)$$

donde $\tilde{g}_i(p; p')$ es la Transformada de Fourier de $g_i(x; p')$. Para las barreras y el paquete de ondas incidente usado en este capítulo, tres de los términos (el de incidencia, el de transmisión total, denotado con el subíndice T_2 , y el “transmitido” en la región entre las barreras, denotado con el subíndice T_1) son suficientes para describir aproximadamente la colisión,

$$\psi(p, t) \simeq \varphi_I(p, t) + \varphi_{T_1}(p, t) + \varphi_{T_2}(p, t). \quad (4.28)$$

Los términos de reflexión, denotados con subíndices R_1 y R_2 , pueden ser despreciados debido a que las energías del paquete incidente son muy superiores a las de las barreras. La contribución de los términos que ocupan la región de las barreras también puede ser despreciada debido a que la función de onda tiene una extensión espacial mucho mayor que la anchura de cada una de las barreras. La validez de estas aproximaciones se confirma con cálculos numéricos realizados con el método de propagación descrito en el Apéndice A.

Para dar una expresión aproximada de las integrales $\varphi_i(p, t)$ anteriores, y de manera análoga a como que se hizo en el Capítulo 2, las expresaremos de la forma

$$\varphi_i(p, t) = \frac{i}{2\pi} \left(\frac{2\delta_x}{\pi\hbar^2} \right)^{1/4} \sum_i \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{g}'_i(p; p') e^{\phi(p')} dp', \quad (4.29)$$

donde $\phi(p')$ se elige igual que en la ecuación (2.20),

$$\phi(p') = \frac{-ip'^2 t}{2m\hbar} - \frac{\delta_x (p' - p_c)^2}{\hbar^2} - \frac{ip' x_c}{\hbar} - \frac{ip' d}{2\hbar}, \quad (4.30)$$

y $\tilde{g}'_i(p; p') \equiv -2\pi i e^{ip'd/2\hbar} \tilde{g}_i(p; p')$. El camino de máxima pendiente de descenso será una línea recta que forma un ángulo $-\frac{1}{2}\arctg(\hbar t/2m\delta_x)$ con el eje real en el plano p' , y el punto de silla ($z_{p'}$) vendrá dado por la ecuación (2.22)

$$z_{p'} \equiv \frac{m \left[4mp_c \delta_x^2 - (x_c + d/2) \hbar^2 t \right] - i2m\hbar \left[m\delta_x (x_c + d/2) + p_c \delta_x t \right]}{4m^2 \delta_x^2 + t^2 \hbar^2}. \quad (4.31)$$

Las funciones $\tilde{g}_I(p; p')$ y $\tilde{g}_{T_2}(p; p')$, transformadas de Fourier de $g_I(x; p')$ y $g_{T_2}(x; p')$ respectivamente, presentan cada una un polo *estructural* [39], en $p'_I \equiv p + i\hbar 0^+$ el término incidente, y en $p'_{T_2} \equiv p - i\hbar 0^+$ el transmitido, mientras que $\tilde{g}_{T_1}(p; p')$ y $\tilde{g}_{T_2}(p; p')$ tienen polos *resonantes y anti-resonantes*, dependientes del potencial, en el semiplano inferior. Para las condiciones descritas en este capítulo siempre se verifica que la pendiente de la recta en p' que corresponde al camino de máxima pendiente de descenso es lo suficientemente pequeña como para que al deformar el contorno de integración a lo largo de este camino, se “corte” a los polos resonantes del cuarto cuadrante lejos del eje real, pudiéndose despreciar la contribución de sus residuos. En otras palabras estamos en las condiciones de “colisión directa”, donde las contribuciones resonantes de la colisión no son significativas. No obstante, la importancia de las resonancias en el resultado final depende del método usado en la expansión de la función de onda. En la descomposición usada en este trabajo, y para las condiciones físicas para las que ocurre el efecto, la contribución central está asociada a polos estructurales más que a polos resonantes, pero en descomposiciones alternativas, como las series de polos resonantes en el espacio de coordenadas de García-Calderón y colaboradores [40], el desarrollo se lleva a cabo enteramente en términos de contribuciones resonantes. Ambos tratamientos tienen en común el hecho de que en la colisión dominan claramente las energías superiores a las de las barreras, y por tanto las resonancias de tuneleo no representan ningún papel en el efecto.

A continuación se deforma el contorno de integración a lo largo del camino de máxima pendiente de descenso ($\Gamma_{p'}$), y se realizan los cambios de variable oportunos para identificar las integrales con funciones w . Para el término de incidencia, la ecuación (4.29) queda como

$$\varphi_I(p, t) = \frac{i\tau'}{2\pi} \int_{\Gamma_{p'}} \tilde{g}'_I(p; p') e^{\phi(p')} dp', \quad (4.32)$$

donde $\tau' \equiv \left(\frac{2\delta_x}{\pi\hbar^2}\right)^{1/4}$, y

$$\tilde{g}'_I(p; p') \equiv \frac{e^{ipd/2\hbar}}{p - p' + i\hbar 0^+}. \quad (4.33)$$

El cálculo de este término ya se efectuó en el Capítulo 2, obteniéndose el resultado

exacto [véase la ecuación (2.41)]

$$\varphi_I(p, t) = \frac{\tau' \chi}{2} e^{ipd/2\hbar} w(u_I), \quad (4.34)$$

donde

$$\chi \equiv \exp [-(\delta_x p_c^2 / \hbar^2) + \eta^2], \quad (4.35)$$

$$\eta \equiv \frac{f}{2} \left[\frac{2p_c \delta_x}{\hbar^2} - i \frac{(x_c + d/2)}{\hbar} \right], \quad (4.36)$$

y

$$u_I = \frac{p'_I - z_{p'}}{f}. \quad (4.37)$$

Para el término T_2 , la ecuación (4.29) conduce a

$$\varphi_{T_2}(p, t) = \tau' \int_{\Gamma_{p'}} \tilde{g}_{T_2}(p; p') e^{ip'd/2\hbar} e^{\phi(p')} dp', \quad (4.38)$$

donde

$$\begin{aligned} \tilde{g}_{T_2}(p; p') &= \text{TF} [g_{T_2}(x'; p')] = h^{-1} T_2(p') \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_b^{+\infty} e^{-ipx'/\hbar} e^{ip'x'/\hbar} e^{-\epsilon x'} dx' \\ &= \frac{-i T_2(p') e^{-i(p-p')b/\hbar}}{2\pi (p - p' - i\hbar 0^+)}. \end{aligned} \quad (4.39)$$

La integral (4.38) se puede calcular aproximadamente sacando el término $T_2(p')$ fuera de la integral con el valor que toma en el punto de silla ($z_{p'} \simeq p_c$), $T_2(p_c)$, puesto que la amplitud de transmisión es prácticamente independiente de p' en el intervalo en torno al punto de silla, en el que la integral toma valores significativos. Expresando la integral en la variable u ,

$$u \equiv \frac{p' - z_{p'}}{f} \quad \text{y} \quad f \equiv \left(\frac{\delta_x}{\hbar^2} + i \frac{t}{2m\hbar} \right)^{-1/2}, \quad (4.40)$$

se tiene

$$\varphi_{T_2}(p, t) = \frac{i\tau' \chi}{2\pi} e^{-ipb/\hbar} T_2(p_c) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-u^2 + i(fu + z_{p'})(b+d/2)\hbar}}{u - u_{T_2}} du, \quad (4.41)$$

donde

$$u_{T_2} = \frac{p'_{T_2} - z_{p'}}{f}. \quad (4.42)$$

Haciendo ahora el cambio de variable

$$y \equiv u - \beta(b)/2, \quad (4.43)$$

con

$$\beta(l) \equiv if(l + d/2)/\hbar, \quad (4.44)$$

se completa el cuadrado de la exponencial del integrando

$$\varphi_{T_2}(p, t) = \frac{i\tau'\chi}{2\pi} e^{-ipb/\hbar} e^{[\alpha(b)+\beta^2(b)/4]} T_2(p_c) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-y^2}}{y - y_{T_2}} dy, \quad (4.45)$$

donde

$$\alpha(l) \equiv iz_{p'}(l + d/2)/\hbar, \quad (4.46)$$

$$y_{T_2} = u_{T_2} - \beta(b)/2. \quad (4.47)$$

En la nueva variable el punto de silla se corresponde con $y = 0$, y el camino de máxima pendiente de descenso se corresponde con la recta real del plano complejo y (véase el Apéndice D). Esta integral se identifica de forma exacta con una función w (véase el Apéndice F), de manera que

$$\varphi_{T_2}(p, t) = \frac{\tau'\chi}{2\pi} e^{-ipb/\hbar} e^{[\alpha(b)+\beta^2(b)/4]} T_2(p_c) w(-y_{T_2}). \quad (4.48)$$

Por otra parte, la ecuación (4.29) para el término T_1 queda como

$$\varphi_{T_1}(p, t) = \tau' \int_{\Gamma_{p'}} \tilde{g}_{T_1}(p; p') e^{ip'd/2\hbar} e^{\phi(p')} dp', \quad (4.49)$$

donde $\tilde{g}_{T_1}(p; p')$ viene dada por

$$\begin{aligned} \tilde{g}_{T_1}(p; p') &= \text{TF}[g_{T_1}(x'; p')] = h^{-1} T_1(p') \int_{d/2}^a e^{-ipx'/\hbar} e^{ip'x'/\hbar} dx' \\ &= -\frac{i}{2\pi} T_1(p') \left(\frac{e^{ia(p'-p)/\hbar} - e^{id(p'-p)/2\hbar}}{p' - p} \right). \end{aligned} \quad (4.50)$$

A pesar de la ausencia de polos estructurales en el término $\tilde{g}_{T_1}(p; p')$, es útil escribirlo utilizando funciones w , lo que puede hacerse cambiando p infinitesimalmente a $p - i\hbar 0^+ \equiv p'_{T_1}$, y considerando independientemente la contribución de cada una

de las dos exponenciales. De esta manera, para cada uno de los términos, p'_{T_1} se comportará como un polo estructural. Expresando la integral en la variable u , y aproximando nuevamente $T_1(p)$ por su valor evaluado en p_c ,

$$\begin{aligned} \varphi_{T_1}(p, t) = & -\frac{i\tau'\chi}{2\pi} T_1(p_c) \left[e^{-iap/\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-u^2+i(fu+z_{p'})^{(a+d/2)\hbar}}}{u - u_{T_1}} du \right. \\ & \left. - e^{-idp/2\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-u^2+i(fu+z_{p'})d/\hbar}}{u - u_{T_1}} du \right], \end{aligned} \quad (4.51)$$

donde

$$u_{T_1} = \frac{p'_{T_1} - z_{p'}}{f}. \quad (4.52)$$

Para completar los cuadrados en las exponenciales de los integrandos se realizan los siguientes cambios de variable,

$$r \equiv u - \beta(a)/2, \quad (4.53)$$

$$s \equiv u - \beta(d/2)/2, \quad (4.54)$$

obteniéndose

$$\begin{aligned} \varphi_{T_1}(p, t) = & -\frac{i\tau'\chi}{2\pi} T_1(p_c) \left(e^{-ipa/\hbar} e^{[\alpha(a)+\beta^2(a)/4]} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-r^2}}{r - r_{T_1}} dr - \right. \\ & \left. e^{-ipd/2\hbar} e^{[\alpha(d/2)+\beta^2(d/2)/4]} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-s^2}}{s - s_{T_1}} ds \right), \end{aligned} \quad (4.55)$$

donde

$$r_{T_1} = u_{T_1} - \beta(a)/2, \quad (4.56)$$

$$s_{T_1} = u_{T_1} - \beta(d/2)/2. \quad (4.57)$$

Los puntos de silla en las nuevas variables se encuentran en $r = 0$ y $s = 0$, siendo en ambos casos los caminos de máxima pendiente de descenso los ejes reales correspondientes en los planos r y s respectivamente (véase el Apéndice D). Introduciendo ahora las funciones w (véase el Apéndice F), la componente T_1 se podrá escribir finalmente como

$$\begin{aligned} \varphi_{T_1}(p, t) = & \frac{\tau'\chi}{2\pi} T_1(p_c) \left[-e^{-ipa/\hbar} e^{[\alpha(a)+\beta^2(a)/4]} w(-r_{T_1}) \right. \\ & \left. + e^{-ipd/2\hbar} e^{[\alpha(d/2)+\beta^2(d/2)/4]} w(-s_{T_1}) \right]. \end{aligned} \quad (4.58)$$

La figura 4.2 muestra $|\psi(p, t)|^2$ dado por la suma de los términos de las ecuaciones (4.34), (4.48) y (4.58), comparándolo con el resultado exacto, calculado según el método de propagación descrito en el Apéndice A. El acuerdo entre ambos resultados es excelente para un amplio rango de parámetros.

Esta descomposición permite interpretar la supresión del momento central como una interferencia destructiva entre el término correspondiente a la componente T_1 , procedente de la región entre las barreras, y un término resultado, a su vez, de la interferencia constructiva entre las componentes incidente (I) y transmitida (T_2). Durante la colisión, la fase relativa entre las contribuciones de incidencia y transmisión es un múltiplo de 2π , mientras que la fase relativa de estos dos términos respecto al tercero, el término que ocupa la región entre las barreras, es un múltiplo impar de π . Estas diferencias de fases vienen dadas por las amplitudes I , $T_1(p_c)$, y $T_2(p_c)$, ya que el resto de factores mantienen la misma fase durante la colisión para $p \simeq p_c$. Puesto que para las condiciones de la colisión, f es aproximadamente real, $\beta(l)$ con argumento real es una cantidad imaginaria pura, y como además $z_{p'} \simeq p_c$ [véase la ecuación (4.31)], se tiene que los argumentos de las funciones w , u_I , y_{T_2} , r_{T_1} , y s_{T_1} (ecuaciones (4.37), (4.47), (4.56) y (4.57) respectivamente) son prácticamente imaginarios puros. Por tanto, y expresándolo de manera genérica, estos argumentos verificarán que $z^* = -z$. Teniendo en cuenta la propiedad (F.4), se tiene la expresión $w(z^*) = w(-z) = [w(-z)]^*$, que implica que $w(-z)$ es real. Como $w(-z) = 2e^{-z^2} - w(z)$ (ecuación (F.3)), siendo los términos $w(-z)$ y $2e^{-z^2}$ reales, $w(z)$ también será real. Además, estas funciones w también son positivas [41]. Así, todas las contribuciones de las funciones w están en fase al ser los valores de las funciones w para argumentos imaginarios, reales y positivos.

En cuanto a los factores exponenciales que acompañan a cada función w , se puede comprobar que éstos tienen la misma fase cuando $p \simeq p_c$. Para ello se hará uso de que $Re(z_{p'}) \simeq p_c$, y de que, como $\beta(l)$ es prácticamente imaginaria pura, $\beta(l)^2$ es aproximadamente real. De esta manera, se tiene

$$\begin{aligned} \text{fase} \left[e^{ipd/2\hbar} \right]_{p=p_c} &= \frac{p_c d}{2\hbar} \\ \text{fase} \left[e^{-ipb/\hbar + \alpha(b) + \beta^2(b)/4} \right]_{p=p_c} &= Im \left[\alpha(b) - \frac{ip_c b}{\hbar} \right] = Re(z_{p'}) \left(\frac{b + \frac{d}{2}}{\hbar} \right) - \frac{p_c b}{\hbar} \simeq \frac{p_c d}{2\hbar} \\ \text{fase} \left[e^{-ipa/\hbar + \alpha(a) + \beta^2(a)/4} \right]_{p=p_c} &= Im \left[\alpha(a) - \frac{ip_c a}{\hbar} \right] = Re(z_{p'}) \left(\frac{a + \frac{d}{2}}{\hbar} \right) - \frac{p_c a}{\hbar} \simeq \frac{p_c d}{2\hbar} \end{aligned}$$

$$\text{fase} \left[e^{-ipd/2\hbar + \alpha(d/2) + \beta^2(d/2)/4} \right]_{p=p_c} = \text{Im} \left[\alpha \left(\frac{d}{2} \right) - \frac{ip_c a}{\hbar} \right] = \text{Re}(z_{p'}) \left(\frac{d}{\hbar} \right) - \frac{p_c d}{2\hbar} \simeq \frac{p_c d}{2\hbar}.$$

Nótese que aunque el término T_1 en la ecuación (4.58) tiene dos contribuciones con signos opuestos, la primera de ellas, que es proporcional a $w(-r_{T_1})$, es menor que la segunda contribución. Así, el resultado neto es positivo y el efecto de interferencia destructiva vendrá determinado por el valor de la amplitud $T_1(p_c)$.

Durante la colisión, la norma entre las dos barreras crece inicialmente y después disminuye. La componente incidente decrece cuando la función de onda entra en la región de las barreras, mientras que la parte transmitida, en fase con la incidente, aumenta al mismo ritmo. El resultado neto es un máximo en la probabilidad de presencia en la región entre las barreras que mantiene valores altos durante un intervalo de tiempo considerable. En la figura 4.4 se muestran frente al tiempo las partes de la función de onda que interfieren: la que se encuentra a la izquierda de las barreras, la que está entre éstas, y la de su derecha. Como se describió anteriormente, las diferentes partes de la función de onda proporcionan la oposición de fase que construye la interferencia durante un cierto intervalo de tiempo, y la separación espacial entre las barreras es la que conduce a una perfecta cancelación entre las componentes incidente-transmitida y la de la zona de entre las barreras, al igualarse las normas de las dos partes que interfieren. Nótese que el intervalo temporal para el cual ocurre la cancelación casi total se extiende sólo los cinco milisegundos centrales de la figura 4.4 (véase también la figura 4.3).

4.2. Discusión y conclusiones

La selección de los parámetros del paquete de ondas incidente y de la barrera es crucial para producir el efecto de interferencia descrito en este capítulo. No obstante, una vez se hayan elegido arbitrariamente los parámetros del paquete de ondas inicial, es posible encontrar un conjunto válido para los parámetros del potencial siguiendo un proceso simple:

1. La barrera de la izquierda tiene que ser mucho más estrecha que el paquete de ondas inicial, y su altura debe de ser lo suficientemente pequeña como para que la probabilidad de transmisión esté próxima a la unidad;

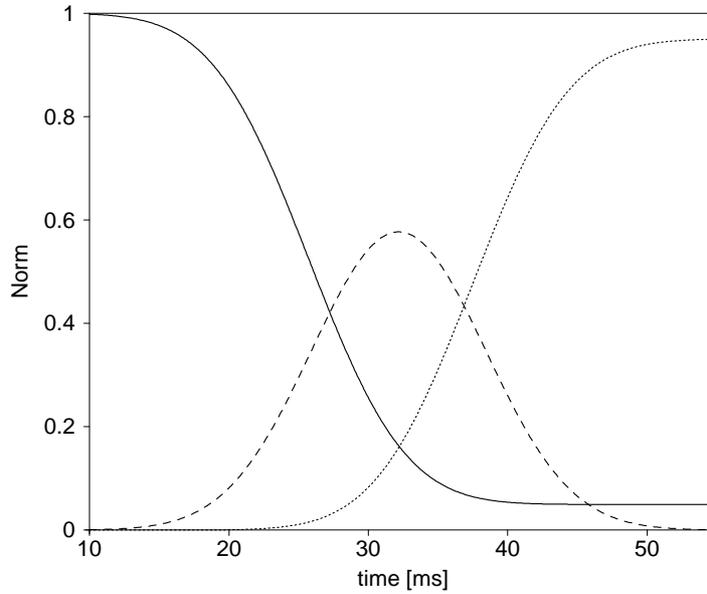


Figura 4.4: Norma de la función de onda a la izquierda de la primera barrera (línea continua), en la región entre las dos barreras (línea discontinua), y a la derecha de la segunda barrera (línea de puntos). Los parámetros de la barrera y los del paquete de ondas inicial son los mismos que para la figura 4.2.

2. La altura de la barrera se debe seleccionar de forma que para el momento p_c , la fase del coeficiente de transmisión sea un múltiplo impar de π . Este proceso conduce al efecto de interferencia destructiva descrito en el capítulo anterior;
3. A una distancia Δx de la primera barrera se sitúa una segunda barrera, que deberá ser lo suficientemente pequeña y estrecha para que al final de la colisión se tenga una probabilidad de transmisión alta. La distancia Δx deberá ser del orden de o menor que la anchura del paquete de ondas inicial, siempre que además sea lo suficientemente grande como para que el valor de T_1 apenas sea modificado por la presencia de la segunda barrera;
4. Fijado un valor para la anchura de la segunda barrera, se modificará su altura hasta que la fase del coeficiente de transmisión, $T_2(p_c)$, sea un múltiplo de 2π ;

5. Finalmente, se ajusta la distancia Δx hasta obtener una interferencia destructiva perfecta.

Resumiendo, se ha examinado la interferencia entre tres componentes de un paquete de ondas cuántico, que describe una colisión monodimensional de una partícula de masa m con una doble barrera cuadrada. Se observa que transitoriamente se produce una supresión significativa de la componente central del momento del paquete de ondas incidente, durante un intervalo temporal que es mayor en un orden de magnitud que la duración de la supresión similar encontrada para una sola barrera. Esta estructura de barreras más compleja ayuda a controlar el comportamiento principal del efecto y hace plausible su observación experimental. Medidas de la distribución de momentos similares a las propuestas en [42, 43, 44] hacen esto posible desconectando la interacción láser.

Capítulo 5

Experimento de la doble rendija: Un nuevo escenario

5.1. Introducción

Uno de los experimentos paradigmáticos que ponen de manifiesto algunas de las peculiaridades de la Teoría Cuántica es el de la *doble rendija*. Brevemente, este experimento consiste en enviar una onda de materia a través de una estructura de doble rendija tras la cual es medida la probabilidad de presencia de las partículas descritas por la mencionada onda. Como la probabilidad de encontrar a las partículas es proporcional al módulo al cuadrado de la amplitud de la onda, la pantalla muestra una estructura de interferencia entre las contribuciones que proceden de las dos rendijas, que no puede nunca explicarse en función de la propagación de partículas que atraviesan una u otra rendija de forma excluyente.

De acuerdo con lo presentado y discutido en los capítulos anteriores, la colisión de un átomo, supuesto sin estructura interna, con una barrera cuadrada en una dimensión puede describirse, en determinadas circunstancias¹, mediante los términos de incidencia y de transmisión de la función de onda, que ya capturan el comportamiento esencial de la distribución de momentos cuántica

$$|\psi(p, t)|^2 \simeq |\psi_I(p, t) + \psi_T(p, t)|^2, \quad (5.1)$$

¹Circunstancias bastante genéricas por otra parte, y que pueden ser extendidas para sistemas atómicos con un número arbitrario de niveles de energía, a barreras y funciones de onda incidentes con diferentes formas, etc. (véase el capítulo introductorio).

donde

$$\psi_I(p, t) = \xi w(u_I), \quad (5.2)$$

$$\psi_T(p, t) = \xi T(p) w(-u_T), \quad (5.3)$$

y

$$\xi = \frac{\tau'}{2} e^{-(\delta_x p_c^2 / \hbar^2) + \eta^2} e^{ipd/2\hbar}. \quad (5.4)$$

$T(p)$ es el coeficiente de transmisión, y

$$u_I = \frac{p + i\hbar 0^+ - z_{p'}}{f}, \quad (5.5)$$

$$u_T = \frac{p - i\hbar 0^+ - z_{p'}}{f}. \quad (5.6)$$

En las condiciones estudiadas de paquetes de onda mucho más energéticos que la barrera de potencial,

$$|T(p)| \simeq 1, \quad (5.7)$$

de manera que el coeficiente de transmisión se puede escribir como

$$T(p) \simeq e^{i\delta(p)}. \quad (5.8)$$

La diferencia de fase entre los términos incidente, $\psi_I(p, t)$, y transmitido, $\psi_T(p, t)$, viene únicamente determinada por la fase del coeficiente de transmisión, $\delta(p)$. Así, eligiendo adecuadamente la barrera cuadrada de potencial de manera que $\delta(p_c) = \pi$, las principales contribuciones de los términos incidente y transmitido se encuentran en oposición de fase, y originan una interferencia destructiva entre ellos. Para un instante de tiempo determinado, t_c , la interferencia destructiva da lugar en $|\psi(p, t)|^2$ a la aparición de un cero que “prohíbe” el momento dominante inicialmente, p_c .

Simultáneamente, en las cercanías del momento central, un efecto de interferencia constructiva da lugar a la aparición de dos máximos, que pueden interpretarse como asociados con aceleración y deceleración observables en la distribución $|\psi(p, t)|^2$ en torno a su momento central p_c . En el instante de la colisión, t_c , en el que la interferencia destructiva es prácticamente total, el centro del paquete de ondas en coordenadas se encuentra aproximadamente en el centro de la barrera de potencial. En este instante, el término de incidencia, $\psi_I(x, t_c) = \text{TF}^{-1}[\psi_I(p, t_c)]$, que se encuentra a la

izquierda de la barrera, y el de transmisión, $\psi_T(x, t_c) = \text{TF}^{-1}[\psi_T(p, t_c)]$, que se encuentra a su derecha, tienen aproximadamente la misma norma. Esta configuración, con dos términos de igual norma, oposición de fase, y separados espacialmente por la barrera cuadrada, da lugar en la distribución de momentos $|\psi(p, t)|^2$ al fenómeno de interferencia destructiva total en el momento incidente p_c .

Desarrollando la expresión de $|\psi(p, t)|^2$ dada por la ecuación (5.1), en el instante $t = t_c$,

$$P^q(p, t_c) \equiv |\psi(p, t_c)|^2 \simeq |\psi_I(p, t_c)|^2 + |\psi_T(p, t_c)|^2 + 2|\psi_I(p, t_c)||\psi_T(p, t_c)|\cos \delta, \quad (5.9)$$

donde el último término es el denominado término de interferencia. δ es la diferencia de fase entre los términos $\psi_I(p, t_c)$ y $\psi_T(p, t_c)$, esto es, la fase del coeficiente de transmisión, que es aproximadamente igual a π para $p \simeq p_c$. Así, se obtiene el mínimo en la distribución de momentos característico de este efecto cuántico,

$$P^q(p_c, t_c) \simeq |\psi_I(p_c, t_c)|^2 + |\psi_T(p_c, t_c)|^2 - 2|\psi_I(p_c, t_c)||\psi_T(p_c, t_c)| \simeq 0, \quad (5.10)$$

ya que $|\psi_I(p_c, t_c)| \simeq |\psi_T(p_c, t_c)|$ en los casos discutidos en esta memoria.

El comportamiento observado no tiene explicación clásica: un colectivo de partículas clásicas con la misma distribución inicial de momentos y coordenadas que la del colectivo cuántico analizado, en colisión con una barrera de potencial equivalente, evoluciona de tal manera que su distribución de momentos, $P^{\text{cl}}(p, t)$, se deforma sólo ligeramente debido a las pocas partículas que pudieran estar en la región de la barrera, y mantiene el máximo en el momento medio inicial, p_c . El reducido porcentaje de partículas que se encuentra en la zona de la barrera, permite despreciar su contribución.

Como ya se ha comentado, el origen de la interferencia observada en la ecuación (5.10) se encuentra en la fase π que introduce la barrera sobre la función de onda cuando ésta atraviesa la zona del potencial. Durante la colisión, la función de onda se puede descomponer en dos contribuciones, una a la izquierda y otra a la derecha de la barrera, con momentos centrados, en ambos casos en torno al valor p_c , pero que contribuyen a la amplitud de momentos total en p_c con una diferencia de fase relativa de π , interfiriendo destructivamente. El efecto de atravesar la barrera es lo que distingue dos componentes, desfasadas, pero que contribuyen en la misma región de momentos. De manera análoga, en el experimento de la doble rendija las

dos componentes interfieren en una misma región del espacio. A diferencia del caso del experimento de la doble rendija, en esta ocasión el máximo central se traduce en un mínimo.

Nótese que, como en el experimento de la doble rendija, cualquier intento de determinar si las partículas que contribuyen al mínimo central se encuentran a la izquierda o a la derecha del potencial, es de esperar que destruya la interferencia y conduzca a recuperar una distribución de momentos proporcional a la suma

$$|\psi_I(p, t_c)|^2 + |\psi_T(p, t_c)|^2, \tag{5.11}$$

más de acuerdo con la intuición clásica.

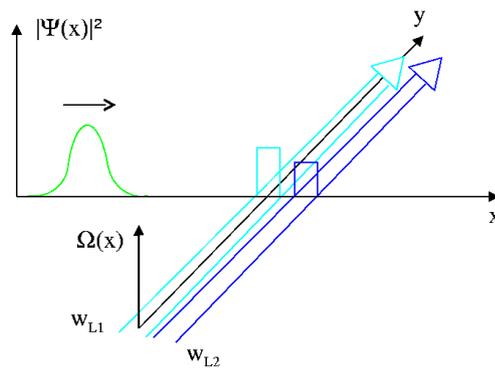


Figura 5.1: Esquema del experimento describiendo la colisión de un sistema atómico de dos niveles con dos haces láser perpendiculares a la trayectoria de los átomos.

Para poner esto de manifiesto, así como para estudiar la analogía que existe con el experimento de la doble rendija en un contexto más próximo al de un laboratorio, se puede diseñar el siguiente experimento: al dispositivo propuesto en el capítulo introductorio (véase figura 8) se le añade un nuevo haz láser, paralelo al primero y asimismo perpendicular a la trayectoria de la partícula. Supondremos que el movimiento de los átomos lleva a encontrarse con este láser después de haber sufrido la colisión con el primero. Se considera ahora un sistema atómico con estructura interna de la que sólo son relevantes, por estar acoplados a través del nuevo haz láser, dos de sus niveles de energía, que se denotan por $|1\rangle$ y $|2\rangle$ (véase la figura 5.1).

El objetivo que tiene añadir un haz láser es el de *marcar* a las partículas que han atravesado la región del potencial, generado éste por el primer láser: supondremos que los átomos inciden en el estado fundamental, $|1\rangle$, sobre la región barrida por el primer láser y que tras atravesar la barrera de potencial efectiva, el segundo láser los bombea hasta su estado excitado con gran eficiencia.

Se considera un primer haz no resonante con la transición atómica, con un perfil de intensidad correspondiente a una barrera cuadrada, de manera que cumpla las condiciones necesarias para que se produzca la interferencia destructiva: el desfase entre el término de transmisión en la representación de momentos, $\psi_T^{(1)}(p, t)$, y el de incidencia, $\psi_I^{(1)}(p, t)$, vale π , y durante la colisión la probabilidad de transmisión es prácticamente la unidad². El segundo láser se sintoniza perfectamente con la transición atómica y se dispone de manera que a la salida de él, el sistema atómico se encuentra en el estado excitado $|2\rangle$ con una probabilidad muy alta (véase el Apéndice G).

La colisión con el primero de los haces, suponiendo que el átomo se encuentra en el estado fundamental, produce el efecto de interferencia en la representación de momentos. El segundo haz actúa excitando los átomos que atraviesan la región de la barrera hasta el nivel $|2\rangle$. Esto permite marcar o diferenciar a las partículas que se encuentran a la derecha de la barrera, en el estado excitado, de las que se encuentran a su izquierda, en el estado atómico fundamental. La función de onda en posiciones queda como sigue,

$$|\psi(x, t)\rangle = \psi^{(1)}(x, t) |1\rangle + \psi^{(2)}(x, t) |2\rangle . \quad (5.12)$$

En la representación de momentos se tiene

$$|\psi(p, t)\rangle = \psi^{(1)}(p, t) |1\rangle + \psi^{(2)}(p, t) |2\rangle , \quad (5.13)$$

donde

$$\psi^{(i)}(p, t) = \text{TF} \left[\psi^{(i)}(x, t) \right] , \quad (i = 1, 2) . \quad (5.14)$$

Este proceso destruye la interferencia, como ya se había avanzado, debido a que ahora se tiene información sobre la localización espacial de las partículas que contribuyan a la probabilidad de encontrar cada valor del momento lineal. Para

²Todo esto para el átomo en su estado fundamental, que es donde se está analizando el proceso y que es el estado en el que el sistema se mantiene con una mayor probabilidad durante la colisión.

calcular $P^q(p, t)$ es necesario sumar las contribuciones del estado que corresponden a los dos niveles de energía internos (traza), lo que conduce a

$$\begin{aligned} P^q(p, t) &= |\psi^{(1)}(p, t)|^2 \langle 1|1\rangle + |\psi^{(2)}(p, t)|^2 \langle 2|2\rangle + 2\text{Re} \left\{ \psi^{(1)}(p, t) [\psi^{(2)}(p, t)]^* \langle 2|1\rangle \right\} \\ &= |\psi^{(1)}(p, t)|^2 + |\psi^{(2)}(p, t)|^2, \end{aligned} \quad (5.15)$$

donde en el último paso se ha eliminado el término de interferencia debido a la ortogonalidad (distinguibilidad) de los estados $|1\rangle$ y $|2\rangle$.

En resumen, este fenómeno de interferencia se puede describir de manera similar a como se discute un experimento de la doble rendija, en el que la interacción con el sistema en estudio, fruto de la búsqueda adicional de información, destruye la interferencia. La particularidad de este caso es que la interferencia se produce en la distribución de momentos en vez de la de posiciones.

Para que la discusión anterior sea rigurosa, en (5.13) el término $\psi^{(1)}(p, t)$ debe corresponderse con el de incidencia total de la colisión, y el $\psi^{(2)}(p, t)$ con el de transmisión total. Por esto, y para poder realizar la discusión en detalle, es necesario obtener una solución para la función de onda (5.13). En ésta, $\psi^{(1)}(p, t)$ y $\psi^{(2)}(p, t)$ deben estar expresadas como la suma de las contribuciones provenientes de las distintas componentes espaciales, para poder realizar la correspondencia anterior. Esto se estudiará en el siguiente apartado.

5.2. Solución semi-analítica

Para fijar conceptos, consideramos átomos de masa m con dos niveles de energía relevantes, $|1\rangle$ y $|2\rangle$, y cuya dinámica se describe inicialmente en las tres dimensiones, aunque posteriormente se simplificará el tratamiento teniendo en cuenta un paquete inicial y frecuencias de los láseres y de la transición atómica apropiados (véase la figura 5.1).

Supondremos que el estado excitado, $|2\rangle$, no decae espontáneamente con una probabilidad apreciable. Como se muestra en la figura, el átomo se desplaza según la dirección del eje x , incidiendo sobre la región barrida por los haces de dos láseres independientes entre sí, y que se encuentran dispuestos perpendicularmente a la dirección de propagación, de forma que el efecto Doppler no desempeña ningún papel.

El Hamiltoniano semiclásico³ que describe el sistema tiene la forma

$$H_{3D} = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} + H_A - \mathbf{d} \cdot [\mathbf{E}_{L1}(\mathbf{r}, t) + \mathbf{E}_{L2}(\mathbf{r}, t)] , \quad (5.16)$$

donde H_A es el Hamiltoniano atómico interno, \mathbf{d} el operador momento dipolar atómico, y $\mathbf{E}_{L1}(\mathbf{r}; t)$ y $\mathbf{E}_{L2}(\mathbf{r}; t)$ las amplitudes de los láser. Tal y como se demuestra en [45, 46], considerando paquetes de ondas atómicas anchos en la componente perpendicular a la del desplazamiento, y con una elección adecuada de parámetros, este Hamiltoniano se puede aproximar por

$$H = \frac{p^2}{2m} + H_A - \mathbf{d} \cdot [\mathbf{E}_{L1}(x, t) + \mathbf{E}_{L2}(x, t)] , \quad (5.17)$$

donde a partir de ahora se denota por p el operador momento lineal atómico en la dirección x de propagación del paquete de ondas. En los casos presentados en esta memoria, el primer láser con el que incide el paquete de ondas resulta ser de manera efectiva una barrera de potencial, que apenas excita población atómica desde el nivel fundamental (en el que se prepara) al nivel excitado. Este potencial tiene la forma $V(x) = \hbar\Omega_{L1}^2(x)/4\Delta_{L1}$ [8, 9, 10]. En concreto, debe verificarse que $|\Delta_{L1}| \gg E/\hbar$ [10], donde $\Omega_{L1}(x)$ es la frecuencia de Rabi asociada con el primer láser, Δ_{L1} es su desintonizado con respecto de la transición atómica, E es la energía que tiene la componente central del momento del paquete de ondas, y se ha tomado como nulo el ritmo de emisión espontánea del átomo. Además, en esta memoria, en los casos en los que actúen conjuntamente la barrera cuadrada y el láser, este último se supone en resonancia. Esto, junto a una adecuada elección del resto de parámetros de la colisión, hacen que para estos casos la reflexión producida por el láser en el estado excitado sea despreciable. De este modo se justifica la aproximación de sustituir el primer láser por una barrera cuadrada que actúa únicamente en el estado fundamental:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < -d/2 \\ V_0 & \text{si } -d/2 \leq x \leq d/2 \\ 0 & \text{si } x > d/2 . \end{cases} \quad (5.18)$$

Si se toma como origen de energías la del estado fundamental $|1\rangle$, el Hamiltoniano atómico interno se escribe

$$H_A = \hbar\omega_2 |2\rangle \langle 2| , \quad (5.19)$$

³El sistema atómico se describe cuánticamente, mientras que el láser se describe clásicamente. Esta descripción es válida siempre que el número de fotones del láser sea muy elevado.

donde w_2 es la frecuencia de la transición $|1\rangle \rightarrow |2\rangle$.

El operador momento dipolar tendrá la forma

$$\mathbf{d} = |1\rangle \langle 1| \mathbf{r}_{e1} |2\rangle \langle 2| + |2\rangle \langle 2| \mathbf{r}_{e1} |1\rangle \langle 1| = \mathbf{d}_{12} (|1\rangle \langle 2| + |2\rangle \langle 1|), \quad (5.20)$$

donde \mathbf{r}_{e1} es el vector de posición de un electrón de valencia ópticamente activo de carga e con respecto al centro de masas del átomo, y se ha tenido en cuenta que $\mathbf{d}_{12} = \mathbf{d}_{21}$ al considerar como reales los elementos de matriz $\mathbf{d}_{12} = \langle 1|\mathbf{d}|2\rangle$ y $\mathbf{d}_{21} = \langle 2|\mathbf{d}|1\rangle$. En general estos elementos de matriz son complejos, pero sin pérdida de generalidad se pueden tomar como reales ajustando los factores de fase de los estados internos. Los elementos diagonales de \mathbf{d} son nulos debido a que los estados propios de H_A ($|1\rangle$ y $|2\rangle$), se supone que tienen paridad bien definida.

Considerando que el perfil del láser resonante es cuadrado y que está localizado entre $x = a$ y $x = b$, se tendrá

$$\mathbf{E}_{L2}(x, t) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < a \\ \mathbf{E}(t) & \text{si } a \leq x \leq b \\ 0 & \text{si } x > b, \end{cases} \quad (5.21)$$

donde

$$\mathbf{E}(t) = \mathbf{E}^{(0)} \cos(w_L t) = \mathbf{E}^{(0)} \frac{e^{iw_L t} + e^{-iw_L t}}{2}, \quad (5.22)$$

$\mathbf{E}^{(0)}$ es el vector que representa la amplitud del láser en la dirección de polarización del mismo, y w_L es su frecuencia.

La forma que se supone para los elementos de matriz del operador \mathbf{d} permite escribir el término de interacción con el campo externo como

$$-\mathbf{d} \cdot \mathbf{E}_{L2}(x, t) = \frac{\hbar\Omega(x)}{2} [|1\rangle \langle 2| e^{iw_L t} + |2\rangle \langle 1| e^{iw_L t} + |1\rangle \langle 2| e^{-iw_L t} + |2\rangle \langle 1| e^{-iw_L t}], \quad (5.23)$$

donde

$$\hbar\Omega(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < a \\ \hbar\Omega_L = -\mathbf{E}^{(0)} \cdot \mathbf{d}_{12} & \text{si } a \leq x \leq b \\ 0 & \text{si } x > b. \end{cases} \quad (5.24)$$

La *frecuencia de Rabi*, Ω_L , caracteriza la fuerza del acoplamiento entre el átomo y el láser. Teniendo en cuenta que las exponenciales $e^{iw_L t}$ y $e^{-iw_L t}$ están asociadas respectivamente con la absorción y emisión de fotones, la *aproximación de onda rotante* permite despreciar aquellos términos en la ecuación (5.23) que impliquen la absorción de un fotón de energía $\hbar w_L$, acompañada de una transición del sistema

atómico del estado $|2\rangle$ al $|1\rangle$; o la emisión de un fotón $\hbar\omega_L$, acompañada de una transición atómica desde $|1\rangle$ a $|2\rangle$. De acuerdo con esta aproximación el término de interacción con el campo externo se expresa como

$$-\mathbf{d} \cdot \mathbf{E}_L(x, t) = \frac{\hbar\Omega(x)}{2} [|2\rangle\langle 1| e^{i\omega_L t} + |1\rangle\langle 2| e^{-i\omega_L t}]. \quad (5.25)$$

En notación matricial y utilizando la base de estados propios de H_A , $|1\rangle \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ y $|2\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$, el Hamiltoniano del sistema se puede expresar como

$$H = \frac{p^2}{2m} + P_1 V(x) P_1 + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \hbar\omega_2 \end{pmatrix} + \frac{\hbar\Omega(x)}{2} \begin{pmatrix} 0 & e^{i\omega_L t} \\ e^{-i\omega_L t} & 0 \end{pmatrix}, \quad (5.26)$$

donde P_1 denota el proyector sobre el subespacio asociado con el estado $|1\rangle$, y tiene la forma $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$ en la base utilizada. El término $P_1 V(x) P_1$ queda de la forma $\begin{pmatrix} V(x) & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$, y representa la acción efectiva del primer láser restringida al estado atómico fundamental.

Con objeto de eliminar la dependencia temporal del Hamiltoniano en la ecuación de Schrödinger, se realiza una transformación unitaria sobre los vectores de estado del sistema $|\Psi\rangle$,

$$|\tilde{\Psi}\rangle = \mathbf{M} |\Psi\rangle. \quad (5.27)$$

La matriz unitaria \mathbf{M} de la transformación tiene la forma

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\omega_L t} \end{pmatrix}. \quad (5.28)$$

Para aplicar la transformación, se multiplican por la izquierda ambos lados de la ecuación de Schrödinger por la matriz \mathbf{M}

$$i\hbar \mathbf{M} \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle = \mathbf{M} H |\Psi\rangle, \quad (5.29)$$

y teniendo en cuenta

$$\frac{\partial}{\partial t} (\mathbf{M} |\Psi\rangle) = \frac{\partial \mathbf{M}}{\partial t} |\Psi\rangle + \mathbf{M} \frac{\partial |\Psi\rangle}{\partial t}, \quad (5.30)$$

se obtiene

$$\mathbf{M} H |\Psi\rangle = i\hbar \left[\frac{\partial}{\partial t} (\mathbf{M} |\Psi\rangle) - \frac{\partial \mathbf{M}}{\partial t} |\Psi\rangle \right], \quad (5.31)$$

esto es,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\mathbf{M}|\Psi\rangle) = \mathbf{M}H|\Psi\rangle + i\hbar \frac{\partial \mathbf{M}}{\partial t} |\Psi\rangle. \quad (5.32)$$

Teniendo en cuenta la ecuación (5.27) se tiene

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\tilde{\Psi}\rangle = \tilde{H}|\tilde{\Psi}\rangle, \quad (5.33)$$

donde

$$\tilde{H} = \mathbf{M}H\mathbf{M}^{-1} + i\hbar \frac{\partial \mathbf{M}}{\partial t} \mathbf{M}^{-1} = \frac{p^2}{2m} + P_1 V(x) P_1 + \frac{\hbar \Omega(x)}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \hbar \Delta \end{pmatrix}, \quad (5.34)$$

que no dependen explícitamente del tiempo. $\Delta \equiv w_2 - w_L$ es la diferencia entre la frecuencia de la transición atómica entre los estados fundamental, $|1\rangle$, y excitado $|2\rangle$, y la frecuencia del láser w_L , y se supondrá nulo (condiciones de resonancia) en este caso.

El estado del sistema en cualquier instante de tiempo puede describirse por medio de

$$\langle x | \Psi(t) \rangle = \psi^{(1)}(x, t) |1\rangle + \psi^{(2)}(x, t) e^{-i w_L t} |2\rangle, \quad (5.35)$$

de manera que

$$\langle x | \tilde{\Psi}(t) \rangle = \psi^{(1)}(x, t) |1\rangle + \psi^{(2)}(x, t) |2\rangle. \quad (5.36)$$

Una solución formal para la ecuación de Schrödinger (5.33) en la representación de posiciones tiene la expresión

$$\langle x | \tilde{\Psi}(t) \rangle = \langle x | e^{-i\tilde{H}t/\hbar} | \tilde{\Psi}(t=0) \rangle, \quad (5.37)$$

donde el estado inicial se escoge con componente nula en el estado atómico excitado,

$$\langle x | \tilde{\Psi}(t=0) \rangle = \psi^{(1)}(x, t=0) |1\rangle = \psi^{(1)}(x, t=0) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (5.38)$$

Los estados estacionarios de colisión, que vamos a denotar por $|\phi(p'), -\rangle$ y $|\phi(p'), +\rangle$, son estados propios de \tilde{H} y forman una base. Asintóticamente, en la representación de coordenadas, lejos de las zonas de interacción, tienden respectivamente a $h^{-1/2} e^{ip'x/\hbar} |1\rangle$ y $h^{-1/2} e^{ip'x/\hbar} |2\rangle$, ondas planas con momento bien definido, p' . Introduciendo la relación de cierre $\int_{-\infty}^{+\infty} \{ |\phi(p'), -\rangle \langle \phi(p'), -| + |\phi(p'), +\rangle \langle \phi(p'), +| \} dp' =$

1 en la ecuación (5.37), se tiene

$$\begin{aligned} \langle x | \tilde{\Psi}(t) \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \langle x | e^{-i\tilde{H}t/\hbar} \{ |\phi(p'), -\rangle \langle \phi(p'), - | \tilde{\Psi}(t=0) \rangle \\ &+ |\phi(p'), +\rangle \langle \phi(p'), + | \tilde{\Psi}(t=0) \rangle \} dp'. \end{aligned} \quad (5.39)$$

Suponiendo que inicialmente nos encontramos en condiciones asintóticas, y que el estado inicial no solapa significativamente con la barrera cuadrada, siguiendo el mismo razonamiento que condujo a la obtención de la ecuación (1.6), los términos del estado inicial expresado en la base de los estados estacionarios de colisión, $\langle \phi(p'), - | \tilde{\Psi}(t=0) \rangle$ y $\langle \phi(p'), + | \tilde{\Psi}(t=0) \rangle$, se pueden aproximar respectivamente por $\langle p', 1 | \tilde{\Psi}(t=0) \rangle$ y $\langle p', 2 | \tilde{\Psi}(t=0) \rangle$. Este último término será nulo puesto que según la ecuación (5.38), $\langle 2 | \tilde{\Psi}(t=0) \rangle = 0$. Teniendo en cuenta estos resultados en la ecuación (5.39)

$$\begin{aligned} \langle x | \tilde{\Psi}(t) \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \langle x | e^{-i\tilde{H}t/\hbar} | \phi(p'), - \rangle \langle p', 1 | \tilde{\Psi}(t=0) \rangle dp' \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \langle x | \phi(p'), - \rangle e^{-iE't/\hbar} \langle p', 1 | \tilde{\Psi}(t=0) \rangle dp' \end{aligned} \quad (5.40)$$

donde $\tilde{H} | \phi(p'), - \rangle = E' | \phi(p'), - \rangle$, con $E' = p'^2/2m$. Por último, para obtener las funciones de onda de los estados fundamental y excitado en la representación de posiciones, se proyecta la ecuación anterior sobre los estados $|1\rangle$ y $|2\rangle$,

$$\langle x, 1 | \tilde{\Psi}(t) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle x, 1 | \phi(p'), - \rangle e^{-iE't/\hbar} \langle p' | \psi^{(1)}(t=0), 1 \rangle dp', \quad (5.41)$$

$$\langle x, 2 | \tilde{\Psi}(t) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle x, 2 | \phi(p'), - \rangle e^{-iE't/\hbar} \langle p' | \psi^{(1)}(t=0), 1 \rangle dp', \quad (5.42)$$

donde

$$\langle x, 1 | \phi(p'), - \rangle \equiv \begin{pmatrix} \phi^{(1)}(x; p') \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (5.43)$$

$$\langle x, 2 | \phi(p'), - \rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ \phi^{(2)}(x; p') \end{pmatrix}, \quad (5.44)$$

son los estados estacionarios fundamental y excitado respectivamente. Para $\langle p' | \psi^{(1)}(t=0), 1 \rangle$ se elige un paquete de ondas Gausiano de mínimo producto de incertidumbres (2.17).

La ecuación de Schrödinger estacionaria se escribe como $\tilde{H}\Phi_{p'}(x) = E'\Phi_{p'}(x)$, donde \tilde{H} viene dado por la ecuación (5.34), y $\Phi_{p'}(x)$ por

$$\Phi_{p'}(x) \equiv \begin{pmatrix} \phi^{(1)}(x; p') \\ \phi^{(2)}(x; p') \end{pmatrix}. \quad (5.45)$$

Se obtiene un sistema de dos ecuaciones diferenciales acopladas de los estados fundamental, $\phi^{(1)}(x; p')$, y excitado, $\phi^{(2)}(x; p')$,

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \phi^{(1)}(x; p')}{\partial x^2} + V(x) \phi^{(1)}(x; p') + \frac{\hbar\Omega(x)}{2} \phi^{(2)}(x; p') = E' \phi^{(1)}(x; p'), \quad (5.46)$$

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \phi^{(2)}(x; p')}{\partial x^2} + \frac{\hbar\Omega(x)}{2} \phi^{(1)}(x; p') + \hbar\Delta \phi^{(2)}(x; p') = E' \phi^{(2)}(x; p'), \quad (5.47)$$

que haciendo uso de

$$g(x) \equiv \frac{2m}{\hbar^2} [E' - V(x)], \quad (5.48)$$

$$k_L'^2 \equiv \frac{2m}{\hbar^2} [E' - \hbar\Delta], \quad (5.49)$$

se puede expresar como

$$\frac{\partial^2 \phi^{(1)}(x; p')}{\partial x^2} - \frac{m\Omega(x)}{\hbar} \phi^{(2)}(x; p') + g(x) \phi^{(1)}(x; p') = 0, \quad (5.50)$$

$$\frac{\partial^2 \phi^{(2)}(x; p')}{\partial x^2} - \frac{m\Omega(x)}{\hbar} \phi^{(1)}(x; p') + k_L'^2 \phi^{(2)}(x; p') = 0. \quad (5.51)$$

En las regiones en las que no actúa ninguno de los haces láser, que denotaremos por: región *I* ($x < -d/2$), región *III* ($d/2 < x < a$) y región *V* ($x > b$), las ecuaciones se desacoplan al ser $\Omega(x) = 0$, obteniéndose

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi^{(1)}(x; p') + k'^2 \phi^{(1)}(x; p') = 0, \quad (5.52)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi^{(2)}(x; p') + k_L'^2 \phi^{(2)}(x; p') = 0, \quad (5.53)$$

donde $\hbar^2 k'^2 \equiv 2mE' = p'^2$.

Para átomos que inciden desde la izquierda en el estado fundamental, las soluciones de las ecuaciones anteriores en las regiones *I*, *III* y *V* serán

$$\phi_I^{(1)}(x; p') = \frac{1}{h^{1/2}} \left(e^{ip'x/\hbar} + R_1 e^{-ip'x/\hbar} \right), \quad (5.54)$$

$$\phi_I^{(2)}(x; p') = \frac{1}{h^{1/2}} F_2 e^{-ip'_L x/\hbar}, \quad (5.55)$$

$$\phi_{III}^{(1)}(x; p') = \frac{1}{\hbar^{1/2}} \left(D_1 e^{ip'x/\hbar} + F_1 e^{-ip'x/\hbar} \right), \quad (5.56)$$

$$\phi_{III}^{(2)}(x; p') = \frac{1}{\hbar^{1/2}} F_2 e^{-ip'_L x/\hbar}, \quad (5.57)$$

$$\phi_V^{(1)}(x; p') = \frac{1}{\hbar^{1/2}} T_1 e^{ip'x/\hbar}, \quad (5.58)$$

$$\phi_V^{(2)}(x; p') = \frac{1}{\hbar^{1/2}} T_2 e^{ip'_L x/\hbar}, \quad (5.59)$$

donde $p'_L = \hbar k'_L$. Los coeficientes R_1 , D_1 , F_1 , F_2 , T_1 y T_2 son funciones de p' y representan las amplitudes de los términos correspondientes con subíndice 1 ó 2 según se trate de los estados atómicos fundamental ó excitado respectivamente. Nótese que las expresiones (5.55) y (5.57) tienen la misma forma, debido a que la barrera de potencial $V(x)$ se supone que no actúa sobre el átomo en su estado excitado.

En la región de la barrera cuadrada ($-d/2 \leq x \leq d/2$), que denotaremos como la región II , el sistema de ecuaciones compuesto por (5.50) y (5.51) también se desacopla

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi_{II}^{(1)}(x; p') + k_V'^2 \phi_{II}^{(1)}(x; p') = 0, \quad (5.60)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi_{II}^{(2)}(x; p') + k_L'^2 \phi_{II}^{(2)}(x; p') = 0, \quad (5.61)$$

con $k_V'^2 \equiv 2m[E' - V_0]/\hbar^2$, y tiene por solución

$$\phi_{II}^{(1)}(x; p') = \frac{1}{\hbar^{1/2}} \left(A_1 e^{ip'_V x/\hbar} + B_1 e^{-ip'_V x/\hbar} \right), \quad (5.62)$$

$$\phi_{II}^{(2)}(x; p') = \frac{1}{\hbar^{1/2}} F_2 e^{-ip'_L x/\hbar}, \quad (5.63)$$

donde $p'_V \equiv \sqrt{2m[E' - V_0]}$.

En la región del láser, que denotaremos por región IV ($a \leq x \leq b$), para resolver el sistema de ecuaciones se despeja $\phi_{IV}^{(2)}(x; p')$ en (5.50),

$$\phi_{IV}^{(2)}(x; p') = \frac{\hbar}{m\Omega_L} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi_{IV}^{(1)}(x; p') + k'^2 \phi_{IV}^{(1)}(x; p') \right), \quad (5.64)$$

y se sustituye en (5.51),

$$\begin{aligned} & \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left[\frac{\hbar}{m\Omega_L} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi_{IV}^{(1)}(x; p') + k'^2 \phi_{IV}^{(1)}(x; p') \right) \right] \\ & + \frac{\hbar k_L'^2}{m\Omega_L} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi_{IV}^{(1)}(x; p') + k'^2 \phi_{IV}^{(1)}(x; p') \right) - \frac{m\Omega_L}{\hbar} \phi_{IV}^{(1)}(x; p') = 0. \end{aligned} \quad (5.65)$$

Operando y reagrupando términos se obtiene una ecuación diferencial de cuarto orden,

$$\frac{\partial^4}{\partial x^4} \phi_{IV}^{(1)}(x; p') + (k'^2 + k_L'^2) \frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi_{IV}^{(1)}(x; p') + \left(k_L'^2 k'^2 - \frac{m^2 \Omega_L^2}{\hbar^2} \right) \phi_{IV}^{(1)}(x; p'), \quad (5.66)$$

cuyo polinomio característico es

$$r^4 + (k'^2 + k_L'^2) r^2 + \left(k_L'^2 k'^2 - \frac{m^2 \Omega_L^2}{\hbar^2} \right) = 0. \quad (5.67)$$

Realizando el cambio de variable

$$r^4 = \mu_{\pm}^2, \quad (5.68)$$

la solución del polinomio característico será

$$\mu_{\pm} = \frac{1}{2} \left\{ -(k'^2 + k_L'^2) \pm \sqrt{(k'^2 + k_L'^2)^2 - 4 \left(k_L'^2 k'^2 - \frac{m^2 \Omega_L^2}{\hbar^2} \right)} \right\}. \quad (5.69)$$

Sustituyendo los valores de k'^2 y $k_L'^2$, y operando se llega a

$$\mu_{\pm} = \frac{m}{\hbar^2} \left[-(2E' - \hbar\Delta) \pm \hbar\sqrt{\Delta^2 + \Omega_L^2} \right]. \quad (5.70)$$

Sea \tilde{V} el potencial efectivo del sistema en la región del láser, dado por la expresión

$$\tilde{V} = \frac{\hbar\Omega_L}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \hbar\Delta \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (5.71)$$

la forma de μ_{\pm} se puede simplificar teniendo en cuenta que los valores propios de \tilde{V} son

$$\lambda_{\pm} = \frac{1}{2} \left[\hbar\Delta \pm \hbar\sqrt{\Delta^2 + \Omega_L^2} \right], \quad (5.72)$$

lo que permite escribir (5.70) como

$$\mu_{\pm} = \frac{m}{\hbar^2} (-2E' + 2\lambda_{\pm}) = -\frac{2m}{\hbar^2} (E' - \lambda_{\pm}), \quad (5.73)$$

donde los autovalores λ_{\pm} representan la energía que intercambia el láser con el átomo. Deshaciendo el cambio de variable (5.68), $r = \mu_{\pm}^{1/2}$, se tiene finalmente que

$$r = \pm i q_{\pm}, \quad (5.74)$$

con

$$q_{\pm} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E' - \lambda_{\pm})}. \quad (5.75)$$

La solución en la región del láser tiene la forma

$$\phi_{IV}^{(1)}(x; p') = \frac{1}{\hbar^{1/2}} \left(C^{(1)} e^{iq_+x} + C^{(2)} e^{iq_-x} + C^{(3)} e^{-iq_+x} + C^{(4)} e^{-iq_-x} \right). \quad (5.76)$$

Sustituyendo la expresión de $\phi_{IV}^{(1)}(x; p')$ en la ecuación (5.64), y operando, se obtiene

$$\phi_{IV}^{(2)}(x; p') = \frac{2}{\hbar^{1/2} \hbar \Omega_L} \left(C^{(1)} \lambda_+ e^{iq_+x} + C^{(2)} \lambda_- e^{iq_-x} + C^{(3)} \lambda_+ e^{-iq_+x} + C^{(4)} \lambda_- e^{-iq_-x} \right). \quad (5.77)$$

Para obtener los coeficientes del estado fundamental y excitado se plantea el cálculo de las correspondientes matrices de transferencia. Se considera un vector general⁴ \mathbf{l} que contenga las componentes de $\phi^{(1)}(x; p')$, $\phi^{(2)}(x; p')$ y sus derivadas con respecto a x . Este vector puede expresarse en la región I ($x < -d/2$) como el producto de una matriz de exponenciales $\Theta_{\mathbf{I}}$ por un vector $\mathbf{y}_{\mathbf{I}}$ de coeficientes

$$\mathbf{l}_{\mathbf{I}} = \begin{pmatrix} e^{ik'x} & e^{-ik'x} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{ik'_Lx} & e^{-ik'_Lx} \\ ik' e^{ik'x} & -ik' e^{-ik'x} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & ik'_L e^{ik'_Lx} & -ik'_L e^{-ik'_Lx} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ R_1 \\ 0 \\ F_2 \end{pmatrix} \quad (5.78)$$

o, de forma más compacta, $\mathbf{l}_{\mathbf{I}} = \Theta_{\mathbf{I}}(x) \mathbf{y}_{\mathbf{I}}$. Análogamente para el resto de las regiones se obtiene:

- región II ($-d/2 \leq x \leq d/2$)

$$\mathbf{l}_{\mathbf{II}} = \begin{pmatrix} e^{ik'_Vx} & e^{-ik'_Vx} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{ik'_Lx} & e^{-ik'_Lx} \\ ik'_V e^{ik'_Vx} & -ik'_V e^{-ik'_Vx} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & ik'_L e^{ik'_Lx} & -ik'_L e^{-ik'_Lx} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \\ 0 \\ F_2 \end{pmatrix} = \Theta_{\mathbf{II}}(x) \mathbf{y}_{\mathbf{II}}; \quad (5.79)$$

- región III ($d/2 < x < a$)

$$\mathbf{l}_{\mathbf{III}} = \begin{pmatrix} e^{ik'x} & e^{-ik'x} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{ik'_Lx} & e^{-ik'_Lx} \\ ik' e^{ik'x} & -ik' e^{-ik'x} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & ik'_L e^{ik'_Lx} & -ik'_L e^{-ik'_Lx} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} D_1 \\ F_1 \\ 0 \\ F_2 \end{pmatrix} = \Theta_{\mathbf{III}}(x) \mathbf{y}_{\mathbf{III}}; \quad (5.80)$$

⁴Las letras \mathbf{l} e \mathbf{y} denotan vectores de cuatro dimensiones, mientras que Θ denota una matriz de dimensión 4×4 .

- región IV ($a \leq x \leq b$)

$$\begin{aligned} \mathbf{l}_{\text{IV}} &= \begin{pmatrix} e^{iq_+x} & e^{iq_-x} & e^{-iq_+x} & e^{-iq_-x} \\ \frac{2\lambda_+}{\hbar\Omega} e^{iq_+x} & \frac{2\lambda_-}{\hbar\Omega} e^{iq_-x} & \frac{2\lambda_+}{\hbar\Omega} e^{-iq_+x} & \frac{2\lambda_-}{\hbar\Omega} e^{-iq_-x} \\ iq_+ e^{iq_+x} & iq_- e^{iq_-x} & -iq_+ e^{-iq_+x} & -iq_- e^{-iq_-x} \\ \frac{2i\lambda_+q_+}{\hbar\Omega} e^{iq_+x} & \frac{2i\lambda_-q_-}{\hbar\Omega} e^{iq_-x} & -\frac{2i\lambda_+q_+}{\hbar\Omega} e^{-iq_+x} & -\frac{2i\lambda_-q_-}{\hbar\Omega} e^{-iq_-x} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C^{(1)} \\ C^{(2)} \\ C^{(3)} \\ C^{(4)} \end{pmatrix} \\ &= \Theta_{\text{IV}}(x) \mathbf{y}_{\text{IV}}; \end{aligned} \quad (5.81)$$

- región V ($x > b$)

$$\mathbf{l}_{\text{V}} = \begin{pmatrix} e^{ik'_Lx} & e^{-ik'_Lx} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{ik'_Lx} & e^{-ik'_Lx} \\ ik'_L e^{ik'_Lx} & -ik'_L e^{-ik'_Lx} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & ik'_L e^{ik'_Lx} & -ik'_L e^{-ik'_Lx} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T_1 \\ 0 \\ T_2 \\ 0 \end{pmatrix} = \Theta_{\text{V}}(x) \mathbf{y}_{\text{V}}. \quad (5.82)$$

Teniendo en cuenta que $\Theta_{\text{I}}(x) = \Theta_{\text{III}}(x) = \Theta_{\text{V}}(x) \equiv \Theta(x)$, las condiciones de continuidad de la función de onda y de su derivada primera en los puntos $-d/2$, $d/2$, a y b se expresarán como

$$\Theta(-d/2) \mathbf{y}_{\text{I}} = \Theta_{\text{II}}(-d/2) \mathbf{y}_{\text{II}} \quad (5.83)$$

$$\Theta_{\text{II}}(d/2) \mathbf{y}_{\text{II}} = \Theta(d/2) \mathbf{y}_{\text{III}} \quad (5.84)$$

$$\Theta(a) \mathbf{y}_{\text{III}} = \Theta_{\text{IV}}(a) \mathbf{y}_{\text{IV}} \quad (5.85)$$

$$\Theta_{\text{IV}}(b) \mathbf{y}_{\text{IV}} = \Theta(b) \mathbf{y}_{\text{V}}. \quad (5.86)$$

Eliminando \mathbf{y}_{II} , \mathbf{y}_{III} e \mathbf{y}_{IV} de las ecuaciones anteriores, los coeficientes de la primera y última región se pueden relacionar por una matriz de transferencia \mathbf{T}^1 ,

$$\mathbf{y}_{\text{I}} = \mathbf{T}^1 \mathbf{y}_{\text{V}}, \quad (5.87)$$

donde

$$\begin{aligned} \mathbf{T}^1 &= \Theta^{-1}(-d/2) \Theta_{\text{II}}(-d/2) \Theta_{\text{II}}^{-1}(d/2) \Theta(d/2) \\ &\times \Theta^{-1}(a) \Theta_{\text{IV}}(a) \Theta_{\text{IV}}^{-1}(b) \Theta(b) \\ &= \begin{pmatrix} T_{11}^1 & T_{12}^1 & T_{13}^1 & T_{14}^1 \\ T_{21}^1 & T_{22}^1 & T_{23}^1 & T_{24}^1 \\ T_{31}^1 & T_{32}^1 & T_{33}^1 & T_{34}^1 \\ T_{41}^1 & T_{42}^1 & T_{43}^1 & T_{44}^1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (5.88)$$

Sustituyendo la ecuación anterior y las expresiones de \mathbf{y}_I e \mathbf{y}_V en (5.87) se obtiene un sistema algebraico de ecuaciones, que al resolverlo conduce a

$$T_1 = \left(\frac{-T_{33}^1}{T_{13}^1 T_{31}^1 - T_{11}^1 T_{33}^1} \right), \quad (5.89)$$

$$T_2 = \left(\frac{T_{31}^1}{T_{13}^1 T_{31}^1 - T_{11}^1 T_{33}^1} \right), \quad (5.90)$$

$$R_1 = \left(\frac{T_{23}^1 T_{31}^1 - T_{21}^1 T_{33}^1}{T_{13}^1 T_{31}^1 - T_{11}^1 T_{33}^1} \right), \quad (5.91)$$

$$F_2 = \left(\frac{T_{43}^1 T_{31}^1 - T_{41}^1 T_{33}^1}{T_{13}^1 T_{31}^1 - T_{11}^1 T_{33}^1} \right). \quad (5.92)$$

Una vez conocido el vector \mathbf{y}_V , obtenemos \mathbf{y}_{IV} despejando en la ecuación (5.86)

$$\mathbf{y}_{IV} = \Theta_{IV}^{-1}(b) \Theta(b) \mathbf{y}_V = \begin{pmatrix} T_{11}^2 & T_{12}^2 & T_{13}^2 & T_{14}^2 \\ T_{21}^2 & T_{22}^2 & T_{23}^2 & T_{24}^2 \\ T_{31}^2 & T_{32}^2 & T_{33}^2 & T_{34}^2 \\ T_{41}^2 & T_{42}^2 & T_{43}^2 & T_{44}^2 \end{pmatrix} \mathbf{y}_V, \quad (5.93)$$

y resolviendo el sistema

$$C^{(1)} = T_{11}^2 T_1 + T_{13}^2 T_2, \quad (5.94)$$

$$C^{(2)} = T_{21}^2 T_1 + T_{23}^2 T_2, \quad (5.95)$$

$$C^{(3)} = T_{31}^2 T_1 + T_{33}^2 T_2, \quad (5.96)$$

$$C^{(4)} = T_{41}^2 T_1 + T_{43}^2 T_2. \quad (5.97)$$

Despejando \mathbf{y}_{III} en la ecuación (5.85) y sustituyendo la ecuación (5.93) se tiene el sistema

$$\mathbf{y}_{III} = \Theta^{-1}(a) \Theta_{IV}(a) \Theta_{IV}^{-1}(b) \Theta(b) \mathbf{y}_V = \begin{pmatrix} T_{11}^3 & T_{12}^3 & T_{13}^3 & T_{14}^3 \\ T_{21}^3 & T_{22}^3 & T_{23}^3 & T_{24}^3 \\ T_{31}^3 & T_{32}^3 & T_{33}^3 & T_{34}^3 \\ T_{41}^3 & T_{42}^3 & T_{43}^3 & T_{44}^3 \end{pmatrix} \mathbf{y}_V. \quad (5.98)$$

Solucionándolo se tendrá

$$D_1 = T_{11}^3 T_1 + T_{13}^3 T_2, \quad (5.99)$$

$$F_1 = T_{21}^3 T_1 + T_{23}^3 T_2. \quad (5.100)$$

$$(5.101)$$

Y por último, despejando \mathbf{q}_{II} en la ecuación (5.84) y sustituyendo la ecuación (5.98) se obtiene el sistema

$$\begin{aligned} \mathbf{y}_{II} &= \Theta_{II}^{-1}(d/2) \Theta(d/2) \Theta^{-1}(a) \Theta_{IV}(a) \Theta_{II}^{-1}(b) \Theta(b) \mathbf{y}_{V} \\ &= \begin{pmatrix} T_{11}^4 & T_{12}^4 & T_{13}^4 & T_{14}^4 \\ T_{21}^4 & T_{22}^4 & T_{23}^4 & T_{24}^4 \\ T_{31}^4 & T_{32}^4 & T_{33}^4 & T_{34}^4 \\ T_{41}^4 & T_{42}^4 & T_{43}^4 & T_{44}^4 \end{pmatrix} \mathbf{y}_{V}, \end{aligned} \quad (5.102)$$

cuya solución es

$$A_1 = T_{11}^4 T_1 + T_{13}^4 T_2, \quad (5.103)$$

$$B_1 = T_{21}^4 T_1 + T_{23}^4 T_2. \quad (5.104)$$

Así, como expresión compacta para los estados estacionarios en la representación de posiciones se tiene

$$\begin{aligned} \phi^{(1)}(x; p') &= \frac{1}{h^{1/2}} \left(\phi_I^{(1)}(x; p') + \phi_{II}^{(1)}(x; p') \right. \\ &\quad \left. + \phi_{III}^{(1)}(x; p') + \phi_{IV}^{(1)}(x; p') + \phi_V^{(1)}(x; p') \right), \end{aligned} \quad (5.105)$$

$$\begin{aligned} \phi^{(2)}(x; p') &\simeq \frac{1}{h^{1/2}} \left(\phi_I^{(2)}(x; p') + \phi_{II}^{(2)}(x; p') \right. \\ &\quad \left. + \phi_{III}^{(2)}(x; p') + \phi_{IV}^{(2)}(x; p') + \phi_V^{(2)}(x; p') \right). \end{aligned} \quad (5.106)$$

Sustituyendo estas ecuaciones de los estados de colisión en las expresiones (5.41) y (5.42), obtendremos las funciones de onda en posiciones de los estados fundamental y excitado en función de los términos de las distintas regiones

$$\begin{aligned} \psi^{(1)}(x, t) &= \frac{1}{h^{1/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\phi_I^{(1)}(x; p') + \phi_{II}^{(1)}(x; p') + \phi_{III}^{(1)}(x; p') + \phi_{IV}^{(1)}(x; p') + \phi_V^{(1)}(x; p') \right) \\ &\quad e^{-iE't/\hbar} \psi^{(1)}(p', t = 0) dp', \end{aligned} \quad (5.107)$$

$$\begin{aligned} \psi^{(2)}(x, t) &= \frac{1}{h^{1/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\phi_I^{(2)}(x; p') + \phi_{II}^{(2)}(x; p') + \phi_{III}^{(2)}(x; p') + \phi_{IV}^{(2)}(x; p') + \phi_V^{(2)}(x; p') \right) \\ &\quad e^{-iE't/\hbar} \psi^{(1)}(p', t = 0) dp'. \end{aligned} \quad (5.108)$$

Las funciones de onda en la representación de momentos se obtienen calculando la transformada de Fourier de las anteriores

$$\begin{aligned} \psi^{(1)}(p, t) &= \frac{1}{h^{1/2}} \text{TF} \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\phi_I^{(1)}(x; p') + \phi_{II}^{(1)}(x; p') + \phi_{III}^{(1)}(x; p') + \phi_{IV}^{(1)}(x; p') + \phi_V^{(1)}(x; p') \right) \right. \\ &\quad \left. e^{-iE't/\hbar} \psi^{(1)}(p', t = 0) dp' \right\}, \end{aligned} \quad (5.109)$$

$$\psi^{(2)}(p, t) = \frac{1}{h^{1/2}} \text{TF} \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\phi_I^{(2)}(x; p') + \phi_{II}^{(2)}(x; p') + \phi_{III}^{(2)}(x; p') + \phi_{IV}^{(2)}(x; p') + \phi_V^{(2)}(x; p') \right) e^{-iE't/\hbar} \psi^{(1)}(p', t=0) dp' \right\}. \quad (5.110)$$

Las ecuaciones (5.109) y (5.110) describen las componentes $\psi^{(1)}(p, t)$ y $\psi^{(2)}(p, t)$ de la función de onda del sistema en (5.13).

5.3. Resultados y discusión

Para los casos descritos en esta memoria, el comportamiento esencial de la función de onda durante el proceso de interferencia se describe correctamente considerando únicamente los términos de incidencia y de transmisión.

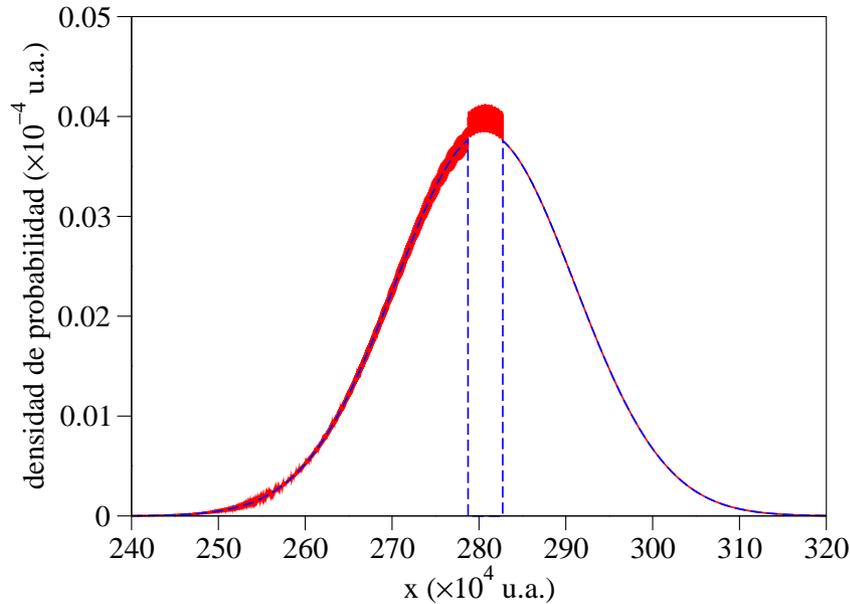


Figura 5.2: $|\psi^{(1)}(x, t)|^2$ (línea continua) y $|\psi_{(ID_1)}^{(1)}(x, t)|^2$ (línea discontinua) frente a x , evaluadas en $t = 1.89 \times 10^{13}$ u.a., con $m = 2.423 \times 10^5$ u.a., $p_c = 6.5 \times 10^{-3}$ u.a., $\sigma_x = 1.04 \times 10^5$ u.a., $x_c = 2.3 \times 10^6$ u.a. Para este cálculo, se ha utilizado una barrera de potencial con anchura $d = 4.0 \times 10^4$ u.a., centrada en la posición $x_0 = 2.81 \times 10^6$ u.a. y con altura $V_0 = 6.21 \times 10^{-12}$ u.a.

La figura 5.2 muestra la distribución de posiciones para el caso en que $\Omega_L = 0$ (el

segundo láser se encuentra desconectado), en el instante para el que la interferencia es máxima. Nótese que la norma a la izquierda y a la derecha de la barrera es aproximadamente la misma. A su vez, la norma en la región de la barrera es despreciable, así como la interferencia que produce el término reflejado con la parte incidente de la función de onda. Todo esto justifica describir la interferencia utilizando sólo términos asociados con incidencia y transmisión. La figura 5.3 representa la distribución de momentos correspondiente a la función de onda representada en la figura anterior. Muestra un cero justo en el valor del momento dominante inicialmente, y a ambos lados de éste, se observan unos picos que corresponden a componentes aceleradas y deceleradas de la distribución de momentos, respecto del caso libre. Este comportamiento, como ya se describió, es fruto de la interferencia entre los términos de incidencia y transmisión.

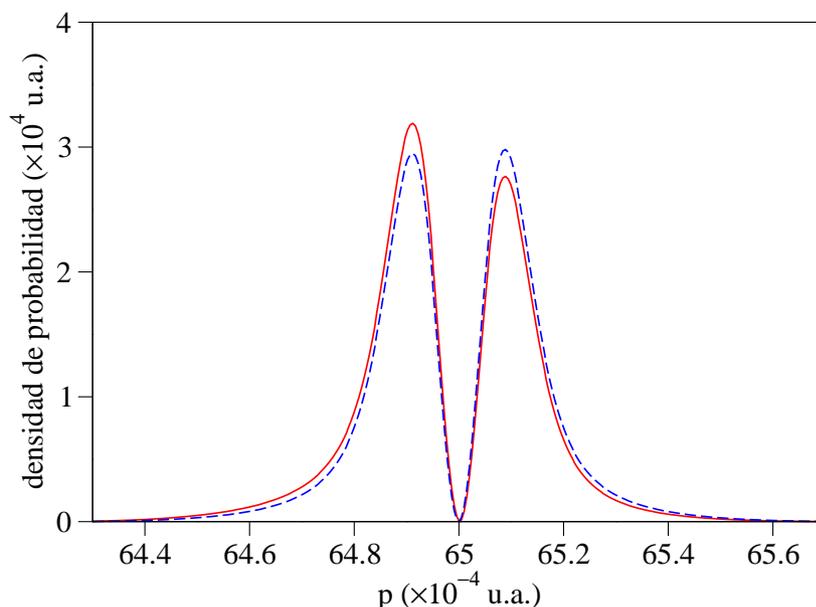


Figura 5.3: $|\psi^{(1)}(p, t)|^2$ (línea continua) y $|\psi_{(ID_1)}^{(1)}(p, t)|^2$ (línea discontinua) frente a p , con el resto de datos igual que en la figura 5.2.

Las figuras 5.4 y 5.5 muestran las distribuciones de probabilidad en posiciones para el caso en que se incluye el láser para marcar la componente transmitida cau-

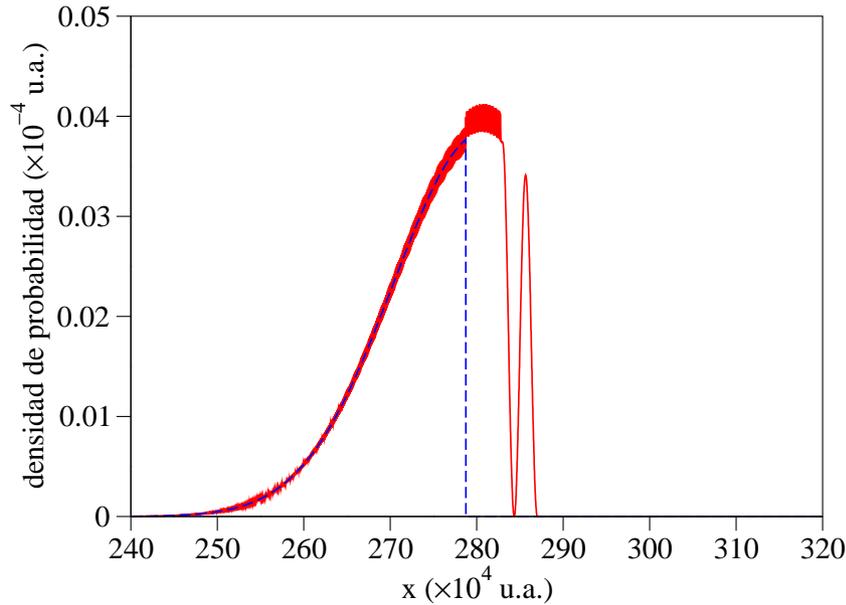


Figura 5.4: $|\psi^{(1)}(x, t)|^2$ (línea continua) y $|\psi_{(I)}^{(1)}(x, t)|^2$ (línea discontinua) frente a x , para $a = 2.83 \times 10^6$ u.a., $b = 2.87 \times 10^6$ u.a., $\Omega_L = 6.32 \times 10^{-12}$ u.a., $\Delta = 0$, y con el resto de datos igual que en la gráfica 5.2.

sante de la interferencia, pasándola al estado excitado. La figura 5.4 muestra el estado fundamental, y en él se observa que después del láser no existe componente transmitida. Una buena aproximación para este estado es considerar únicamente la contribución del término de incidencia, como también se muestra en la gráfica. La figura 5.5 muestra el estado excitado, observándose que sólo hay probabilidad de presencia a partir del láser. Como aproximación para este estado podemos considerar únicamente el término de transmisión. Las distribuciones de momentos correspondientes, se muestran en las figuras 5.6 y 5.7. En las dos se observa que ha desaparecido la interferencia, mostrando ambas un único pico centrado en el momento dominante inicialmente. Para obtener la distribución de probabilidad debemos sumar los resultados de las figuras 5.6 y 5.7. Obviamente, la suma nos dará que la distribución presentará un pico en el momento central, sin presencia de interferencia.

En la figura 5.8 se muestra la distribución de momentos del estado excitado para un tiempo asintótico tras la colisión. En el instante en el que la interferencia

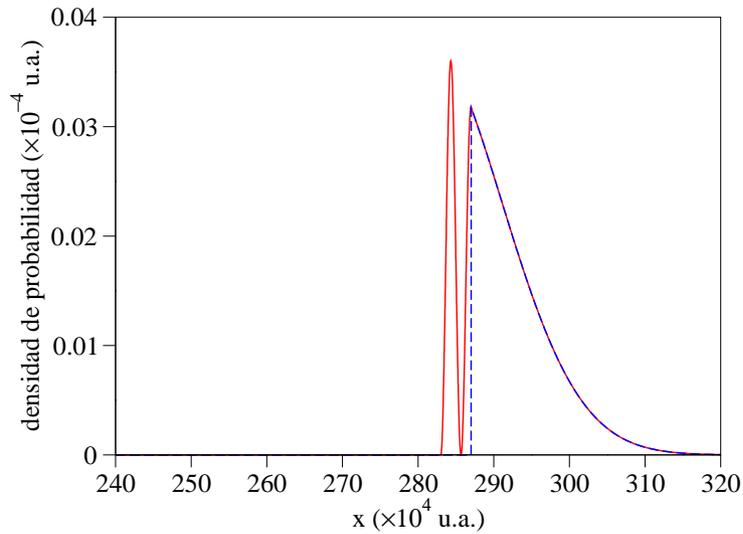


Figura 5.5: $|\psi^{(2)}(x, t)|^2$ (línea continua) y $|\psi_{(T_2)}^{(2)}(x, t)|^2$ (línea discontinua) frente a x , para $a = 2.83 \times 10^6$ u.a., $b = 2.87 \times 10^6$ u.a., $\Omega_L = 6.32 \times 10^{-12}$ u.a., $\Delta = 0$, y con el resto de datos igual que en la gráfica 5.2.

destruccion es máxima se desconecta la barrera cuadrada, continuando la colisión con el segundo láser. Este cálculo se realiza con el método numérico de propagación que se describe en el Apéndice A. Tras la desconexión, y al transcurrir el tiempo suficiente, todo el paquete de ondas atraviesa la región del láser, pasando al estado excitado. De esta forma se pierde la información que permite distinguir entre las partículas que se encontraban a la izquierda de la barrera cuadrada en el estado fundamental, y las que se encontraban a la derecha de la barrera cuadrada en el estado excitado. En resumen, la desaparición o no de la interferencia está asociada con que el experimento permita o no respectivamente extraer información acerca de los términos que se superponen.

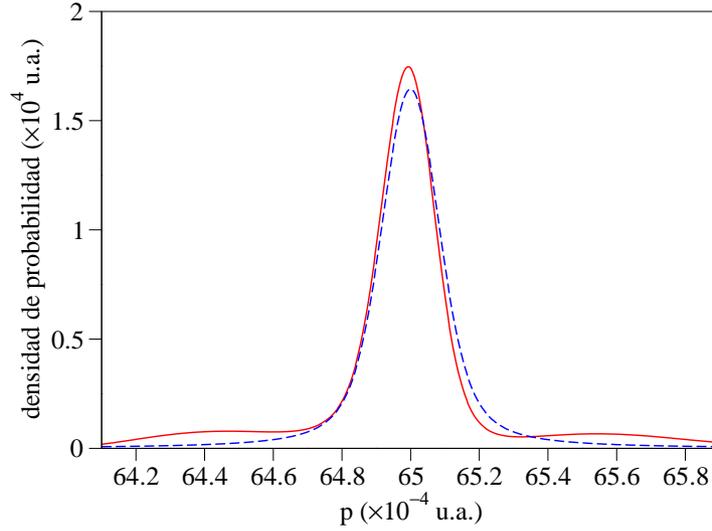


Figura 5.6: $|\psi^{(1)}(p, t)|^2$ (línea continua) y $|\psi_{(I)}^{(1)}(p, t)|^2$ (línea discontinua) frente a p , para $a = 2.83 \times 10^6$ u.a., $b = 2.87 \times 10^6$ u.a., $\Omega_L = 6.32 \times 10^{-12}$ u.a., $\Delta = 0$, y con el resto de datos igual que en la gráfica 5.2.

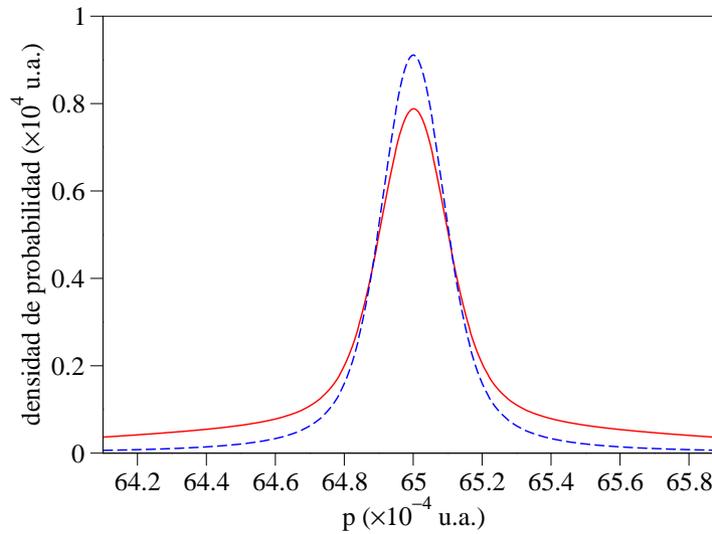


Figura 5.7: $|\psi^{(2)}(p, t)|^2$ (línea continua) y $|\psi_{(T_2)}^{(2)}(p, t)|^2$ (línea discontinua) frente a p , para $a = 2.83 \times 10^6$ u.a., $b = 2.87 \times 10^6$ u.a., $\Omega_L = 6.32 \times 10^{-12}$ u.a., $\Delta = 0$, y con el resto de datos igual que en la gráfica 5.2.

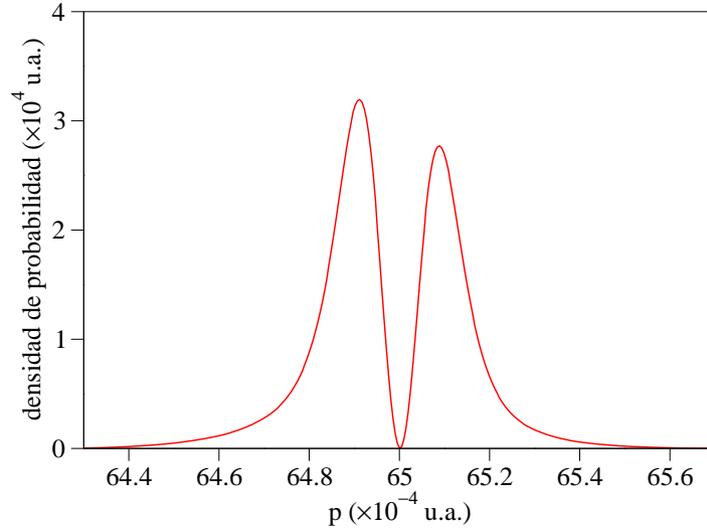


Figura 5.8: $|\psi^{(2)}(p, t)|^2$ para $t = 4.0 \times 10^{13}$ u.a., desconectando la barrera cuadrada en el tiempo $t_c = 1.89 \times 10^{13}$ u.a., y con $a = 2.83 \times 10^6$ u.a., $b = 2.87 \times 10^6$ u.a., $\Omega_L = 6.32 \times 10^{-12}$ u.a., $\Delta = 0$, y con el resto de datos igual que en la gráfica 5.2.

Capítulo 6

Resumen y conclusiones

6.1. Conclusiones

- Se ha estudiado la dependencia del efecto BM con el carácter más o menos abrupto del potencial, y con parámetros como la altura de barrera y anchura espacial del paquete de ondas incidente. Se ha observado que el efecto es muy robusto, y se manifiesta independientemente de la forma detallada del potencial.
- Se ha obtenido una solución analítica para la colisión de un paquete Gaussiano con una barrera cuadrada. Ésta ha permitido superar las dificultades que conlleva el estudio puramente numérico del efecto y de sus dependencias.
- Esta solución describe un sistema paradigmático en el estudio de los procesos cuánticos de colisión y posibilita la observación y el estudio en detalle de otro elevado número de problemas y efectos cuánticos de gran interés.
- La solución analítica ha permitido comprender la razón por la que el valor de G^q puede aumentar de forma importante para energías por encima de la barrera. Básicamente, se ha encontrado que se debe a una interferencia destructiva y constructiva entre términos de incidencia y transmisión. El cero de la distribución cuántica, que prohíbe el momento dominante inicialmente, se debe a una interferencia destructiva mientras que los dos nuevos picos corresponden a una interferencia constructiva.
- Para que la interferencia destructiva sea total, se obtuvo que la norma de las

componentes incidente y transmitida involucradas deben ser iguales, y la fase del coeficiente de transmisión debe estar próxima a π .

- A pesar de que la descripción del efecto de interferencia ha sido realizada para una barrera cuadrada, su validez es general siempre que se suponga que el potencial sólo toma valores apreciables en la región en la que lo hace la barrera cuadrada. En particular también se observó el efecto para una barrera Gaussiana.
- Una vez fijados los parámetros del paquete de ondas inicial, se dio un criterio de elección de los parámetros del potencial para que se produzca una interferencia destructiva completa en el momento incidente.
- Se realizó un estudio de la interferencia en el espacio de fases cuántico, obteniéndose una descripción más global que proporciona información conjunta de las representaciones de posiciones, en la que se prepara la colisión, y la de momentos en la que se manifiestan más notablemente los efectos de la interferencia.
- Se ha representado el estado del sistema en el espacio de fases cuántico mediante las cuasidistribuciones de Wigner y Husimi. Mientras que la de Wigner se mostró útil para representar la interferencia destructiva, en la de Husimi ésta no se manifiesta.
- También se obtuvo el efecto de interferencia haciendo uso de láseres en condiciones de resonancia, en vez de láseres no resonantes que actúan de forma efectiva sobre el átomo como una barrera de potencial. Esto se ilustró considerando un sistema atómico de dos niveles, $|1\rangle$ y $|2\rangle$, en interacción con un láser sintonizado con la transición entre los dos niveles.
- Para estos sistemas se observó un amplio intervalo de valores del momento para los cuales la fase permanece prácticamente constante en torno al valor de π necesario para la interferencia. Por el contrario, la fase del coeficiente de transmisión asociado con láseres utilizados en condición no resonante siempre presenta un rápido crecimiento respecto al momento.

- Puesto que en las técnicas experimentales más extendidas, los átomos se dejan caer bajo los efectos de la gravedad sobre el haz láser, se incluyó el efecto de la gravedad en la dinámica del sistema.

La acción de la gravedad produce una variación lineal con el tiempo en el momento central del paquete. Así, para que se produzca el efecto de interferencia estudiado, es necesario preparar el estado inicial de manera que, teniendo en cuenta la aceleración que se produce, el momento central del paquete en el instante de la colisión coincida aproximadamente con uno de los valores para los que el coeficiente de transmisión tome el valor de π .

- Se analiza el caso de una colisión con una doble barrera cuadrada, que incrementa en un orden de magnitud la duración del efecto de interferencia, haciéndolo más robusto y fácil de observar.

Para las condiciones de colisión directa que nos ocupan en este trabajo, se ha obtenido una solución analítica aproximada de la colisión de un paquete Gaussiano con una doble barrera cuadrada.

- La solución anterior permite interpretar el fenómeno de interferencia en la colisión con una doble barrera cuadrada, como una interferencia destructiva entre el término correspondiente a la componente incidente de la región entre las barreras, y un término resultado, a su vez, de la interferencia constructiva entre las componentes incidente y transmitida.
- Para que la interferencia destructiva sea total en el sistema de la doble barrera cuadrada, la fase relativa entre las contribuciones de incidencia y transmisión debe ser un múltiplo de 2π , mientras que la fase relativa de estos dos términos respecto al tercero, el término que ocupa la región entre las barreras, debe ser un múltiplo impar de π . Asimismo, las normas de las dos partes que interfieren deben ser iguales.
- Una vez fijados los parámetros del paquete de ondas inicial, se da un criterio de elección de los parámetros de la doble barrera cuadrada, para que se produzca una interferencia destructiva completa en el momento incidente.

- Se ha descrito el fenómeno de interferencia de manera similar a como se discute un experimento de la doble rendija, en el que la interacción con el sistema en estudio, fruto de la búsqueda adicional de información, destruye la interferencia. La particularidad de este caso es que la interferencia se produce en la distribución de momentos en vez de en la de posiciones.
- Para las condiciones de colisión directa que nos ocupan en este trabajo, se ha obtenido una solución semi-analítica aproximada de la colisión con una barrera cuadrada, seguida de un haz láser perpendicular a la trayectoria de la partícula. El sistema atómico se considera con estructura interna de la que sólo son relevantes, por estar acoplados a través del haz láser, dos de sus niveles de energía, teniéndose como estado inicial un paquete Gaussiano en el estado de menor energía.
- La solución anterior permite expresar la función de onda como la suma de las contribuciones provenientes de las distintas componentes espaciales, permitiéndonos describir el fenómeno de interferencia de forma similar a como se describe el de la doble rendija.
- De manera equivalente a lo producido por la doble rendija, en el fenómeno de interferencia, el efecto de atravesar la barrera es lo que distingue dos componentes que están desfasadas pero contribuyen en la misma región de momentos dando lugar a la interferencia. A diferencia del máximo central que se tiene en la distribución de posiciones en el experimento de la doble rendija, en este caso tendremos un mínimo en la distribución de momentos.
- Como en el experimento de la doble rendija, en el fenómeno de interferencia, cualquier intento de determinar si las partículas que contribuyen al mínimo central se encuentran a la izquierda o a la derecha del potencial, destruye la interferencia desapareciendo el mínimo y recuperándose una distribución de momentos que está más de acuerdo con la intuición clásica.

Apéndice A

Descripción del método numérico de propagación SOM (Split Operator Method)

La dificultad para obtener soluciones analíticas de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo para la gran mayoría de los procesos de colisión ha impulsado el desarrollo de algoritmos numéricos para resolverla con un mínimo esfuerzo computacional.

El método numérico de propagación utilizado en el trabajo que se recoge en esta memoria se fundamenta en una descripción de la función de onda a partir de sus valores en una red de puntos dentro de una “caja finita”. Las dimensiones de la caja deben permitir representar el estado inicial y la colisión sin que la función de onda llegue a los límites de la red.

El método SOM (Split Operator Method [50]) permite obtener una solución aproximada para la ecuación

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle \quad (\text{A.1})$$

en función del tiempo, construyendo, a partir de $|\psi(t)\rangle$, la función de ondas para un tiempo posterior, $|\psi(t + \Delta t)\rangle$, en pasos sucesivos.

En el caso de Hamiltonianos independientes del tiempo, la solución formal se podrá escribir como

$$|\psi(t + \Delta t)\rangle = e^{-iH\Delta t/\hbar} |\psi(t)\rangle, \quad (\text{A.2})$$

que, en representación de momentos, queda

$$\langle p|\psi(t + \Delta t)\rangle = \langle p|e^{-iH\Delta t/\hbar}|\psi(t)\rangle. \quad (\text{A.3})$$

Para operadores Hamiltonianos que se puedan escribir como la suma de un operador energía cinética, T , y un operador de energía potencial, $V(x)$, el cálculo de $e^{-iH\Delta t/\hbar}|\psi(t)\rangle$ se basa en la descomposición [47],

$$e^{-iH\Delta t/\hbar} \simeq e^{-iT\Delta t/2\hbar} e^{-iV\Delta t/\hbar} e^{-iT\Delta t/2\hbar}. \quad (\text{A.4})$$

El error que se comete al aproximar el operador de evolución temporal por la expresión anterior es del orden $O(\Delta t^3)$. Para minimizar el error se fragmenta la evolución en n pasos, de manera que $Ht = H(\Delta t)_1 + H(\Delta t)_2 + \dots + H(\Delta t)_n$ y el intervalo $\Delta t = t/n$ sea suficientemente pequeño,

$$e^{-iHt/\hbar} = e^{-iH\Delta t/\hbar} e^{-iH\Delta t/\hbar} \dots = \prod_{j=1}^n e^{-iH(t_j - t_{j-1})/\hbar}. \quad (\text{A.5})$$

Para cada paso,

$$\psi(p, t + \Delta t) \simeq \langle p|e^{-iT\Delta t/2\hbar} e^{-iV\Delta t/\hbar} e^{-iT\Delta t/2\hbar}|\psi(t)\rangle. \quad (\text{A.6})$$

Introduciendo las relaciones de cierre en la representación de posiciones, $\int_{-\infty}^{+\infty} |x\rangle \langle x| dx = \mathbf{1}$, y de momentos, $\int_{-\infty}^{+\infty} |p'\rangle \langle p'| dp' = \mathbf{1}$,

$$\begin{aligned} \psi(p, t + \Delta t) &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{+\infty} \langle p|e^{-iT\Delta t/2\hbar}|x\rangle \langle x|e^{-iV\Delta t/\hbar}|p'\rangle \langle p'|e^{-iT\Delta t/2\hbar}|\psi(t)\rangle dp' \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ip^2\Delta t/4m\hbar} \langle p|x\rangle e^{-iV(x)\Delta t/\hbar} dx \int_{-\infty}^{+\infty} \langle x|p'\rangle \phi(p', t) dp', \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

donde $\phi(p', t) = e^{-ip'^2\Delta t/4m\hbar}\psi(p', t)$. La integral en p' es la transformada de Fourier de $\phi(p', t)$, $\Phi(x, t) \equiv \text{TF}[\phi(p', t)]$, de manera que

$$\psi(p, t + \Delta t) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ip^2\Delta t/4m\hbar} \langle p|x\rangle \Lambda(x, t) dx, \quad (\text{A.8})$$

donde $\Lambda(x, t) \equiv e^{-iV(x)\Delta t/\hbar}\Phi(x, t)$. Sacando fuera de la integral la exponencial que depende de la variable p obtenemos nuevamente que la integral resultante en x es la transformada de Fourier de $\Lambda(x, t)$, $\Gamma(p, t) \equiv \text{TF}[\Lambda(x, t)]$. Finalmente, como resultado del primer paso de la evolución se tiene

$$\psi(p, t + \Delta t) = e^{-ip^2\Delta t/4m\hbar}\Gamma(p, t). \quad (\text{A.9})$$

Una vez obtenido $\psi(p, t + \Delta t)$, se procederá iterativamente para calcular $\psi(p, t + 2\Delta t)$, $\psi(p, t + 3\Delta t)$, etc., hasta completar la evolución temporal.

Las posiciones se discretizan mediante una red de n_x puntos que abarca una longitud L_x . La distancia entre puntos será

$$\Delta x = \frac{L_x}{n_x}. \quad (\text{A.10})$$

Para los cambios de representación de posiciones a momentos se utiliza la transformada rápida de Fourier [48]. A la red de posiciones anterior corresponde una red discreta de momentos que cubre el intervalo

$$L_p = 2\pi\hbar \frac{n_x}{L_x}, \quad (\text{A.11})$$

donde la resolución viene dada por

$$\Delta p = \frac{2\pi\hbar}{L_x}. \quad (\text{A.12})$$

La antitransformada de esta representación devolverá la representación original.

El algoritmo para el cálculo de la transformada rápida de Fourier es más eficiente cuando n_x es el producto de factores primos pequeños. En nuestro caso se toma $n_x = 2^k$, $k \in \mathbb{N}$. Si n_x satisface la ecuación anterior, entonces el tiempo de cálculo es proporcional a $n_x \log(n_x)$ [48].

Puesto que las longitudes y densidades de puntos en las redes de posiciones y momentos están determinados por los parámetros L_x y n_x , es necesario elegir adecuadamente su valor. En particular para tratar estados muy extendidos espacialmente, se precisa una red amplia en posiciones (valor de L_x grande). Puesto que el estado conjugado en momentos es estrecho, para representarlo la red de puntos debe ser densa en momentos (Δp pequeño), como efectivamente sucede al tener un L_x grande [ecuación (A.12)], y de no ser así, bastaría con aumentar L_x . Al tratarse de un estado ancho en posiciones, no es necesaria una gran densidad de puntos para representarlo (Δx grande), con lo que no se necesitan valores altos de n_x [ecuación (A.10)], pudiéndosele dar a éste el mínimo valor necesario para que L_p contenga el estado en representación de momentos.

El tratamiento anterior es válido siempre que no se tenga un potencial poco extendido espacialmente que requiera una densidad de puntos alta para ser representado. En tal caso, en las condiciones anteriores, se aumentaría n_x de forma que

Δx disminuya [ecuación (A.10)], L_p aumentará su valor [ecuación (A.11)] y Δp permanecerá constante [ecuación (A.12)], quedando totalmente determinados estado y potencial, a costa de un mayor esfuerzo computacional debido al aumento de n_x .

Generalización para el caso de átomos con estructura interna

En particular, estamos interesados en estudiar la evolución de un sistema de dos niveles, $|1\rangle$ y $|2\rangle$, que se mueve sometido a la acción del Hamiltoniano (5.34), $\tilde{H} = H_0 + H_I$, siendo

$$H_0 \equiv (|1\rangle\langle 1| + |2\rangle\langle 2|) \frac{p^2}{2m}, \quad (\text{A.13})$$

y en donde se ha hecho explícita la actuación del operador Hamiltoniano sobre los dos subespacios en que se describe el estado del sistema, el *interno* y el de *translación*. Para el término de interacción, utilizando la base $\{|1\rangle, |2\rangle\}$ se tiene

$$H_I \equiv P_1 V(x) P_1 + \frac{\hbar\Omega(x)}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \hbar(w_2 - w_L) \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.14})$$

donde se ha hecho la aproximación de considerar la actuación del potencial $V(x)$ únicamente sobre el átomo en el estado fundamental. El razonamiento que hay detrás de esta consideración es que en la región donde $V(x)$ es apreciable nunca habrá una probabilidad significativa de encontrar a la partícula en el estado excitado. Nótese que el potencial $V(x)$ representa el efecto de un haz láser desintonizado sobre el sistema atómico en su estado fundamental, pero el mismo láser también actúa sobre el estado atómico excitado. Los cálculos numéricos realizados concluyen que para las propagaciones descritas en esta memoria es válido el tratamiento simplificado que se hace de la interacción entre el primer láser y el átomo.

En este caso, la ecuación (A.6) se escribe como

$$\Psi(p, t + \Delta t) \simeq \langle p | e^{-iH_0\Delta t/2\hbar} e^{-iH_I\Delta t/\hbar} e^{-iH_0\Delta t/2\hbar} | \Psi(t) \rangle, \quad (\text{A.15})$$

donde $|\Psi(t)\rangle = |\psi^{(1)}(t)\rangle |1\rangle + |\psi^{(2)}(t)\rangle |2\rangle$. Introduciendo las relaciones de cierre correspondientes a los vectores propios de H_A , H_I , y H_0 respectivamente:

$$(|1\rangle\langle 1| + |2\rangle\langle 2|) = \mathbf{1}, \quad (\text{A.16})$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} (|x, g\rangle\langle x, g| + |x, e\rangle\langle x, e|) dx = \mathbf{1}, \quad (\text{A.17})$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} (|p', 1\rangle\langle p', 1| + |p', 2\rangle\langle p', 2|) dp' = \mathbf{1}, \quad (\text{A.18})$$

y teniendo en cuenta que el átomo se encuentra inicialmente en el estado fundamental, $\langle p', 2 | \Psi(t=0) \rangle = 0$,

$$\begin{aligned}
\Psi(p, \Delta t) &\simeq \langle p | (|1\rangle\langle 1| + |2\rangle\langle 2|) e^{-iH_o\Delta t/2\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} (|x, g\rangle\langle x, g| + |x, e\rangle\langle x, e|) e^{-iH_I\Delta t/\hbar} dx \\
&\quad \times \int_{-\infty}^{+\infty} (|p', 1\rangle\langle p', 1| + |p', 2\rangle\langle p', 2|) e^{-iH_o\Delta t/2\hbar} |\Psi(t=0)\rangle dp' \\
&= (|1\rangle\langle p, 1| + |2\rangle\langle p, 2|) e^{-iH_o\Delta t/2\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} [|x, g\rangle e^{-iE_g(x)\Delta t/\hbar} \langle g|1\rangle \\
&\quad \times \int_{-\infty}^{+\infty} \langle x|p'\rangle \phi_g(p') dp' + |x, e\rangle e^{-iE_e(x)\Delta t/\hbar} \langle e|1\rangle \int_{-\infty}^{+\infty} \langle x|p'\rangle \phi_e(p') dp'] dx
\end{aligned} \tag{A.19}$$

donde

$$\begin{aligned}
\phi_g(p') &\equiv e^{-ip'^2\Delta t/4m\hbar} \langle 1 | \Psi(p', 0) \rangle, \\
\phi_e(p') &\equiv e^{-ip'^2\Delta t/4m\hbar} \langle 1 | \Psi(p', 0) \rangle,
\end{aligned} \tag{A.20}$$

$$\begin{aligned}
E_g(x) &= \begin{cases} V_o & \text{(en la región del potencial)} \\ \frac{\hbar}{2} [(w_2 - w_L) - \sqrt{(w_2 - w_L)^2 + \Omega^2}] & \text{(en la región del láser)} \\ 0 & \text{(en otro caso),} \end{cases} \\
E_e(x) &= \begin{cases} \frac{\hbar}{2} [(w_2 - w_L) + \sqrt{(w_2 - w_L)^2 + \Omega^2}] & \text{(en la región del láser)} \\ \hbar(w_2 - w_L) & \text{(en otro caso),} \end{cases}
\end{aligned}$$

siendo $\langle g|1\rangle$ y $\langle e|1\rangle$ los coeficientes del cambio de base,

$$\begin{aligned}
\langle g|1\rangle &= \begin{cases} \frac{E_e \sqrt{(\hbar\Omega)^2 + 4E_g^2}}{\hbar\Omega(E_e - E_g)} & \text{(en la región del láser)} \\ 1 & \text{(en otro caso),} \end{cases} \\
\langle e|1\rangle &= \begin{cases} \frac{E_g \sqrt{(\hbar\Omega)^2 + 4E_e^2}}{\hbar\Omega(E_g - E_e)} & \text{(en la región del láser)} \\ 1 & \text{(en otro caso).} \end{cases}
\end{aligned}$$

Las integrales anteriores sobre p' son transformaciones de Fourier de $\phi_g(p')$ y de $\phi_e(p')$, $\Phi_g(x) \equiv \text{TF}^{-1}[\phi_g(p')]$, $\Phi_e(x) \equiv \text{TF}^{-1}[\phi_e(p')]$, con lo que

$$\begin{aligned}
\psi(p, \Delta t) &\simeq (|1\rangle\langle p, 1| + |2\rangle\langle p, 2|) e^{-iH_o\Delta t/2\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} [|x, g\rangle e^{-iE_g(x)\Delta t/\hbar} \langle g|1\rangle \Phi_g(p') \\
&\quad + |x, e\rangle e^{-iE_e(x)\Delta t/\hbar} \langle e|1\rangle \Phi_e(p')] dx \\
&= |1\rangle e^{-ip^2\Delta t/4m\hbar} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} \langle p|x\rangle \Lambda_{1g}(x) dx + \int_{-\infty}^{+\infty} \langle p|x\rangle \Lambda_{1e}(x) dx \right] \\
&\quad + |2\rangle e^{-ip^2\Delta t/4m\hbar} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} \langle p|x\rangle \Lambda_{2g}(x) dx + \int_{-\infty}^{+\infty} \langle p|x\rangle \Lambda_{2e}(x) dx \right],
\end{aligned} \tag{A.21}$$

donde

$$\begin{aligned}\Lambda_{1g}(x) &\equiv \langle 1|g\rangle e^{-iE_g(x)\Delta t/\hbar} \langle g|1\rangle \Phi_g(x), \\ \Lambda_{1e}(x) &\equiv \langle 1|e\rangle e^{-iE_e(x)\Delta t/\hbar} \langle e|1\rangle \Phi_e(x), \\ \Lambda_{2g}(x) &\equiv \langle 2|g\rangle e^{-iE_g(x)\Delta t/\hbar} \langle g|1\rangle \Phi_g(x), \\ \Lambda_{2e}(x) &\equiv \langle 2|e\rangle e^{-iE_e(x)\Delta t/\hbar} \langle e|1\rangle \Phi_e(x),\end{aligned}$$

siendo los coeficientes del cambio de base

$$\begin{aligned}\langle 1|g\rangle &= \begin{cases} \frac{\hbar\Omega}{\sqrt{(\hbar\Omega)^2+4E_g^2}} & \text{(en la región del láser)} \\ 1 & \text{(en otro caso),} \end{cases} \\ \langle 1|e\rangle &= \begin{cases} \frac{\hbar\Omega}{\sqrt{(\hbar\Omega)^2+4E_e^2}} & \text{(en la región del láser)} \\ 1 & \text{(en otro caso),} \end{cases} \\ \langle 2|g\rangle &= \begin{cases} \frac{2E_g}{\sqrt{(\hbar\Omega)^2+4E_g^2}} & \text{(en la región del láser)} \\ 1 & \text{(en otro caso),} \end{cases} \\ \langle 2|e\rangle &= \begin{cases} \frac{2E_e}{\sqrt{(\hbar\Omega)^2+4E_e^2}} & \text{(en la región del láser)} \\ 1 & \text{(en otro caso).} \end{cases}\end{aligned}$$

Las integrales resultantes en x son las transformadas de Fourier de $\Lambda_{1g}(x)$, $\Lambda_{1e}(x)$, $\Lambda_{2g}(x)$, y $\Lambda_{2e}(x)$. Así, denotando $\Gamma_{1g}(p) \equiv \text{TF} [\Lambda_{1g}(x)]$, $\Gamma_{1e}(p) \equiv \text{TF} [\Lambda_{1e}(x)]$, $\Gamma_{2g}(p) \equiv \text{TF} [\Lambda_{2g}(x)]$ y $\Gamma_{2e}(p) \equiv \text{TF} [\Lambda_{2e}(x)]$ tendremos para el primer paso de la evolución

$$\begin{aligned}\Psi(p, \Delta t) &\simeq e^{-ip^2\Delta t/4m\hbar} [\Gamma_{1g}(p) + \Gamma_{1e}(p)] |1\rangle + e^{-ip^2\Delta t/4m\hbar} [\Gamma_{2g}(p) + \Gamma_{2e}(p)] |2\rangle \\ &= \psi^{(1)}(p, \Delta t) |1\rangle + \psi^{(2)}(p, \Delta t) |2\rangle.\end{aligned}\tag{A.22}$$

La función de onda tras el siguiente paso temporal, $\Psi(p, 2\Delta t)$, se obtiene tomando $\Psi(p, \Delta t)$ como función de onda inicial. De esta manera se reiterará el proceso hasta completar la evolución, de manera análoga a como se describió en el apartado anterior.

Apéndice B

Intervalos utilizados para los valores de los parámetros en las colisiones

Los valores numéricos de los distintos parámetros que describen las colisiones analizadas en esta memoria varían dentro de los siguientes intervalos aproximadamente.

- Raíz de la varianza en posiciones de los paquetes de ondas que describen a los átomos ultrafríos: $(5\mu m, 12\mu m)$
- Velocidades promedio de los paquetes de onda: $(2cm/s, 6cm/s)$
- Anchuras de las barreras de potencial y de los láseres: $(1\mu m, 6\mu m)$
- Energías de las barreras de potencial: $(0\mu K, 4\mu K)$
- Frecuencias de Rabi en los sistemas átomo-láser: $(25KHz, 42KHz)$
- Tiempos de colisión: $(0 - 35ms)$

Apéndice C

Cálculo de los polos resonantes de una barrera cuadrada de potencial

Los polos resonantes se obtienen resolviendo la ecuación trascendental $\Omega(p') = 0$, donde $\Omega(p')$ viene definida por la expresión (2.7). Una forma de hacerlo es considerar explícitamente la dependencia de Ω con la anchura de la barrera, l . Así, dividiendo entre $\text{sen}(p''l/\hbar)$, se tiene

$$\Omega(p', l) \equiv \cotg(p''l/\hbar) - \frac{i}{2} \left(\frac{p''}{p'} + \frac{p'}{p''} \right) = 0. \quad (\text{C.1})$$

Derivando respecto de l

$$\frac{d\Omega(p', l)}{dl} = \frac{\partial\Omega(p', l)}{\partial p'} \frac{dp'}{dl} + \frac{\partial\Omega(p', l)}{\partial l}, \quad (\text{C.2})$$

donde, imponiendo $\frac{d\Omega(p', l)}{dl} = 0$ se llega a que

$$\frac{dp'}{dl} = -\frac{\partial\Omega(p', l)}{\partial l} \left[\frac{\partial\Omega(p', l)}{\partial p'} \right]^{-1}. \quad (\text{C.3})$$

La idea es encontrar soluciones para $\Omega(p', l) = 0$ (véase la ecuación (C.6) más adelante) que se utilicen como condiciones iniciales para la ecuación diferencial anterior. La resolución de la ecuación diferencial a medida que l varía hasta el valor que se haya elegido para la anchura de la barrera de potencial conserva el valor nulo para $\Omega(p', l)$, debido a la condición impuesta en su derivada con respecto a la variable l .

Sustituyendo el valor de las derivadas parciales anteriores

$$\frac{dp'}{dl} = \frac{-2p'^2 (p'^2 - 2mV_0)^2}{2lp'^3 (p'^2 - 2mV_0) - i\hbar (2mV_0)^2 \text{sen}^2(p''l/\hbar)}, \quad (\text{C.4})$$

donde, al tener en cuenta la expresión $\text{sen}^2(p'l/\hbar) = \frac{-4p'^2(p'^2-2mV_0)}{(2mV_0)^2}$ que se deduce de la ecuación (C.1), finalmente tendremos la ecuación diferencial

$$\frac{dp'}{dl} = \frac{-(p'^2 - 2mV_0)}{lp' + i2\hbar}. \quad (\text{C.5})$$

Para buscar condiciones iniciales para la integración se considera que $p' = 0$ en la ecuación (C.1), obteniéndose que

$$l_n(p' = 0) = -\frac{in\pi\hbar}{(2mV_0)^{1/2}}; \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (\text{C.6})$$

La integración de (C.5) tiene que realizarse desde los valores iniciales complejos l_n , hasta el valor $l = d$ de la anchura de la barrera que se quiera examinar. Como caminos de integración se toman líneas rectas en el plano complejo l , para todas las condiciones iniciales, salvo para el caso $n = 0$. Para este caso, la recta estaría contenida en el eje real, y nos conduciría a la obtención de una solución imaginaria pura que no se corresponde con un polo resonante. Para obtener una solución válida, se debe elegir un camino de integración en el que l tome valores imaginarios. En particular hemos elegido una circunferencia de radio d , que corta al eje real del plano complejo l , en el origen y en el punto $l = d$, y al imaginario en sus valores negativos.

Apéndice D

Método de aproximación de integrales de la “máxima pendiente de descenso”

El análisis asintótico es la rama de la matemática que estudia el comportamiento de funciones cerca o en determinados puntos de sus dominios de definición [49].

En particular nos interesa aproximar integrales de la forma

$$I(\lambda) = \int_C g(z)e^{\lambda W(z)} dz, \quad (\text{D.1})$$

donde C es un contorno en el plano complejo z , siendo $g(z)$ y $W(z)$ funciones analíticas en una región D que incluye a C . Se busca aproximar $I(\lambda)$ cuando $\lambda \rightarrow \infty$.

La teoría de funciones complejas y en particular el Teorema Integral de Cauchy nos permite deformar el contorno de integración C siempre que no se pase sobre una singularidad. En este método se reemplaza C convenientemente por un contorno o suma de contornos sobre los cuales es factible aproximar (D.1).

Supongamos que $W \neq cte.$, porque de no ser así el análisis asintótico de (D.1) es trivial; además separaremos W en partes real e imaginaria, $W(z) = u(x, y) + iv(x, y)$, con $u(x, y)$ y $v(x, y)$ reales.

Se verá que es importante buscar las curvas en la región D , a lo largo de las cuales $u(x, y)$ y por tanto $|\exp[\lambda W(z)]|$ son monótonas. Para ello efectuaremos varias definiciones.

DEFINICION 1. Sea $z_0 = x_0 + iy_0$ un punto en D . Una dirección que parta de z_0 a lo largo de la cual u aumenta con respecto a $u(x_0, y_0)$ se llama *dirección de*

ascenso. Una dirección para la cual u disminuye con respecto a su valor en $u(x_0, y_0)$ se llama *dirección de descenso*.

Estas definiciones conducen de forma natural a las siguientes:

DEFINICION 2. Si C es una curva con dirección de $z = z_0$ al punto $z = z_1$ (no necesariamente finito) tal que su tangente corresponde siempre a una dirección de ascenso, entonces la curva se llama *camino de ascenso*. Una curva para la que su tangente corresponda siempre a una dirección de descenso, se llamará *camino de descenso*.

Será útil identificar de entre todos los caminos, aquellos de máxima pendiente de ascenso y de descenso. Si se elige un camino C arbitrario tendremos en general contribución a la integral en todos los puntos del camino de integración. Mientras que si elegimos el camino que partiendo de un punto $z = z_0$ sea el de máxima pendiente de descenso para $u(x, y)$, se concentran todos los valores de la integral en una región limitada. El valor máximo de $W(z)$ vendrá dado por $W(z_0)$, y a partir de este tendremos un decrecimiento monótono de la función. Cualitativamente $\exp[\lambda W(z)]$ tendrá el mismo comportamiento, haciéndose más patente a medida que aumenta λ . Como $g(z)$ no depende de λ el comportamiento descrito también será válido para el producto $g(z) \exp[\lambda W(z)]$. Se observa la evidencia del carácter crítico del punto $z = z_0$. Al final sólo importa el valor de la función $W(z)$ en el entorno del punto $W(z_0)$.

Se puede probar que para algún punto en D que verifica que $\nabla u \neq 0$, la dirección de máxima pendiente de descenso es única y coincide con $-\nabla u$. De igual manera la dirección de máxima pendiente de ascenso coincide con ∇u .

DEFINICION 3. Una curva cuya tangente en cada punto tiene una dirección de máxima pendiente de descenso, se llama *camino de máxima pendiente de descenso*. Si la tangente a la curva en cada punto tiene dirección de máxima pendiente de ascenso, la curva se llama *camino de máxima pendiente de ascenso*.

DEFINICION 4. Un punto $z_1 = x_1 + iy_1$ está en un *valle* de $W(z)$ con respecto a $z_0 = x_0 + iy_0$ si $u(x_1, y_1) < u(x_0, y_0)$. Análogamente z_1 está en una *colina* de $W(z)$ con respecto a z_0 si $u(x_1, y_1) > u(x_0, y_0)$. Si ocurre que $u(x_1, y_1) = u(x_0, y_0)$, z_1 está en la frontera entre una colina y un valle de $W(z)$ con respecto a z_0 .

De esta forma, si desde z_0 nos movemos por un camino de descenso estaremos en un valle, y si lo hacemos por un camino de ascenso estaremos en una colina.

Para identificar las curvas de máxima pendiente de ascenso y de descenso se tiene el siguiente lema:

LEMA 1. Las curvas de máxima pendiente de ascenso o descenso a partir de un punto $z_0 = x_0 + iy_0$ son las curvas definidas por la ecuación

$$\operatorname{Im}[W(z)] = \operatorname{Im}[W(z_0)]. \quad (\text{D.2})$$

Para determinar las direcciones de ascenso o descenso tenemos el siguiente teorema

TEOREMA 1. Supongamos que

$$\left[\frac{d^q W}{dz^q} \right]_{z=z_0} = 0, \quad q = 1, 2, \dots, n-1, \quad (\text{D.3})$$

y la primera derivada no nula

$$\left[\frac{d^n W}{dz^n} \right]_{z=z_0} = \rho e^{i\gamma}, \quad \rho > 0. \quad (\text{D.4})$$

Si tenemos que $z - z_0 = \zeta e^{i\theta}$ entonces,

- Las direcciones de máxima pendiente de descenso son:

$$\theta = -\frac{\gamma}{n} + (2p+1)\frac{\pi}{n} \quad p = 0, 1, \dots, n-1. \quad (\text{D.5})$$

- Las direcciones de máxima pendiente de ascenso son:

$$\theta = -\frac{\gamma}{n} + \frac{2p\pi}{n} \quad p = 0, 1, \dots, n-1. \quad (\text{D.6})$$

- Las direcciones de u constante son

$$\theta = -\frac{\gamma}{n} + \left(p + \frac{1}{2}\right)\frac{\pi}{n} \quad p = 0, 1, \dots, n-1. \quad (\text{D.7})$$

Al punto estacionario en el plano complejo, en el cual $dW/dz = 0$, se le llama *punto de silla*. $(n-1)$ es el *orden del punto de silla*. Para el caso de $n = 2$ tendremos un punto de silla “sencillo”.

Para efectuar un estudio detallado del comportamiento de la integral (D.1) cuando $\lambda \rightarrow \infty$, los pasos a seguir son los siguientes:

1. Identificar los puntos críticos del integrando. Estos son los puntos inicial y final del contorno de integración, los puntos singulares de $g(z)$ o $W(z)$ y los puntos de silla de $W(z)$.
2. Determinar los caminos de máxima pendiente de descenso para cada uno de los puntos críticos.
3. Justificar mediante el teorema integral de Cauchy la deformación del contorno original a uno o más de los caminos de máxima pendiente de descenso.
4. Determinar los desarrollos asintóticos de las integrales que aparecen como resultado de la deformación del contorno original vista en el punto anterior.
5. Sumar los desarrollos asintóticos del punto anterior para obtener el desarrollo asintótico de $I(\lambda)$.

Apéndice E

Cónicas

En el plano euclídeo, diremos que dos rectas siempre se cortan: si no son paralelas, en un punto finito (punto propio); o si son paralelas, en un punto del infinito (punto impropio). Todas las rectas paralelas entre sí se cortan en el mismo punto del infinito, por lo que este punto puede servir para definir las direcciones de dichas rectas.

Sea un punto P cuyas coordenadas cartesianas en el plano son (x, y) . Por definición, se llaman *coordenadas homogéneas* de dicho punto a toda terna (X, Y, Z) , tal que: $x = \frac{X}{Z}$, $y = \frac{Y}{Z}$. En estas coordenadas todos los puntos de la forma $(X, Y, 0)$, a excepción del $(0, 0, 0)$, son puntos del infinito, que nos indicarán las diferentes direcciones de las rectas paralelas. El punto genérico $P(x_o, y_o)$ vendrá expresado por cualquiera de las infinitas ternas $P(x_o k, y_o k, k)$, donde $k \neq 0$.

Se llama *cónica* al lugar geométrico de puntos $P(x, y)$ reales o imaginarios cuyas coordenadas satisfacen la ecuación de segundo grado

$$a_{11}x^2 + a_{22}y^2 + 2a_{12}xy + 2a_{13}x + 2a_{23}y + a_{33} = 0 \quad (a_{ij} \in \mathfrak{R}), \quad (\text{E.1})$$

a la que llamaremos, *ecuación general de la cónica*. Ecuación que en coordenadas homogéneas vendrá dada por

$$a_{11}X^2 + a_{22}Y^2 + a_{33}Z^2 + 2a_{12}XY + 2a_{13}XZ + 2a_{23}YZ = 0, \quad (\text{E.2})$$

y matricialmente por

$$[r] A \{r\} = 0, \quad (\text{E.3})$$

donde, $[r]$ es el vector fila y $\{r\}$ el columna de las coordenadas homogéneas, y A la matriz asociada a los coeficientes a_{ij} ($i, j = 1, 2, 3$). Esta ecuación es una forma cuadrática de tercer orden.

Para obtener la composición de las cónicas, de la ecuación anterior se extrae el sistema

$$\begin{aligned} a_{11}X + a_{12}Y + a_{13}Z &= 0 \\ a_{12}X + a_{22}Y + a_{23}Z &= 0 \\ a_{13}X + a_{23}Y + a_{33}Z &= 0 \end{aligned} \tag{E.4}$$

o abreviadamente $A\{r\} = \{0\}$.

Definiremos como punto singular de la cónica C a todo punto $P \neq (0, 0, 0)$, que sea solución del sistema (E.4). Para que exista solución distinta de la $(0, 0, 0)$ deberá suceder que $|A| = 0$. Se dice que la cónica $[r]A\{r\} = 0$ es *degenerada* si tiene algún punto singular; o lo que es lo mismo, si el determinante de la forma cuadrática correspondiente $|A|$ es igual a cero. En el caso de que la cónica no tenga ningún punto singular, o sea $|A| \neq 0$, diremos que dicha cónica es no degenerada.

Evidentemente, al verificar los puntos P el sistema $A\{r\} = \{0\}$, pertenecerán a la cónica, pues también satisfacen la ecuación de ésta, $[r]A\{r\} = 0$.

En particular nos ocuparemos de la clasificación de las cónicas degeneradas, que son las que nos interesan. En estas $|A| = 0$, por lo que podrán presentarse dos casos:

1. Rango de A igual a 2.- En el sistema (E.4) habrá dos ecuaciones independientes, cuya solución nos dará un punto singular Q de coordenadas reales. En este caso la cónica $C \equiv [r]A\{r\} = 0$ se compone de dos rectas, s_1 y s_2 , que satisfacen su ecuación y además se cortan en el punto Q , es decir: $C \equiv [r]A\{r\} = s_1s_2 = 0$.
2. Rango de A igual a 1.- En el sistema (E.4) hay una sola ecuación independiente (recta), existiendo en la cónica, por tanto, infinitos puntos singulares (todos los de dicha recta). En este caso la cónica $C \equiv [r]A\{r\} = 0$ se compone del producto de dos rectas coincidentes y reales.

Luego, se tiene que cuando $|A| = 0$, la cónica degenerada correspondiente se compone sólo de rectas; dos diferentes si el rango de A es dos (paralelas cuando $A_{33} = 0$), y una recta doble si el rango de A es uno.

Una vez obtenida la composición de las cónicas degeneradas, hallando la intersección de éstas con la recta del infinito ($Z = 0$), las clasificamos según los puntos

que tengan en común. Para ello se debe resolver el sistema:

$$\begin{aligned} a_{11}X^2 + a_{22}Y^2 + a_{33}Z^2 + 2a_{12}XY + 2a_{13}XZ + 2a_{23}YZ &= 0 \\ Z &= 0 \end{aligned} \quad (\text{E.5})$$

equivalente al

$$\begin{aligned} a_{11}X^2 + a_{22}Y^2 + 2a_{12}XY &= 0 \\ Z &= 0. \end{aligned} \quad (\text{E.6})$$

Dividiendo la primera ecuación por Y^2 :

$$a_{11}\left(\frac{X}{Y}\right)^2 + 2a_{12}\frac{X}{Y} + a_{22} = 0, \quad (\text{E.7})$$

de donde resolviendo la ecuación cuadrática en $\left(\frac{X}{Y}\right)$

$$\frac{X}{Y} = \frac{-2a_{12} \pm \sqrt{4a_{12}^2 - 4a_{11}a_{22}}}{2a_{11}} = \frac{-a_{12} \pm \sqrt{-A_{33}}}{a_{11}}. \quad (\text{E.8})$$

Siendo, por tanto, los puntos de corte

$$(X, Y, Z) = \left(-a_{12} \pm \sqrt{-A_{33}}, a_{11}, 0\right) \quad (\text{E.9})$$

Con lo cual:

- Si $A_{33} > 0$, no hay ninguna solución real.
- Si $A_{33} < 0$, existen dos soluciones reales.
- Si $A_{33} = 0$, hay una solución real.

De los resultados anteriores, se puede concluir que la clasificación general de las cónicas degeneradas ($|A| = 0$) queda como:

$$\text{rango 2} \begin{cases} A_{33} > 0 : \text{Tendremos dos rectas imaginarias.} \\ A_{33} < 0 : \text{Tendremos dos rectas reales.} \\ A_{33} = 0 : \text{Tendremos dos rectas reales paralelas.} \end{cases} \quad (\text{E.10})$$

$$\text{rango 1} : \text{Tendremos una recta real.} \quad (\text{E.11})$$

Apéndice F

Funciones w

La función $w(z)$ puede definirse mediante la expresión integral [41]

$$w(z) = \frac{1}{i\pi} \int_{\gamma_-} \frac{e^{-u^2}}{u-z} du \quad (\text{F.1})$$

siempre que el camino de integración γ_- vaya de $-\infty$ a ∞ y pase por debajo del polo z . Para cuando se tenga que $\text{Im}z > 0$ se puede tomar como contorno de integración el eje real. Si por el contrario $\text{Im}z < 0$ se puede seguir considerando como contorno al eje real siendo además necesario añadir la contribución del residuo. Para $\text{Im}z = 0$ la integral se convierte en la parte principal más la mitad del residuo. De acuerdo a estas consideraciones, se puede demostrar que para (F.1) se puede obtener la siguiente expresión conjunta

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-u^2}}{u-z} du = i\pi \text{sign}[\text{Im}(z)] w\{z \text{sign}[\text{Im}(z)]\}. \quad (\text{F.2})$$

Algunas otras propiedades básicas que se deducen de (F.1) son

$$w(-z) = 2e^{-z^2} - w(z), \quad (\text{F.3})$$

$$w(z^*) = [w(-z)]^*. \quad (\text{F.4})$$

$w(z)$ tiene el siguiente desarrollo en serie

$$w(z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(iz)^n}{\Gamma\left(\frac{n}{2} + 1\right)}, \quad (\text{F.5})$$

mientras que, asintóticamente, ($z \rightarrow \infty$),

$$w(z) \approx \frac{i}{\sqrt{\pi} z} \left[1 + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1 \times 3 \times \cdots \times (2m-1)}{(2z^2)^m} \right] \quad (\text{F.6})$$

$$|\arg[z]| < \frac{3\pi}{4}. \quad (\text{F.7})$$

Apéndice G

Selección de la frecuencia de Rabi en láseres resonantes para ciclos π y 2π

Consideremos el caso en que el átomo descrito por el paquete de ondas incide en su estado fundamental, $|1\rangle$, sobre la región barrida por el haz láser. Si a la salida del láser, el átomo se encuentra en su estado excitado, $|2\rangle$, se dice que ha experimentado ciclo π (o un valor de un múltiplo impar de π). Igualmente, si el átomo resulta de nuevo en el estado fundamental, habrá experimentado un ciclo 2π (o de un valor igual a un múltiplo par de π).

Para el caso de un láser resonante, la frecuencia de Rabi, Ω , puede elegirse de manera que al recorrer el átomo la anchura d barrida por el láser, el tiempo clásico empleado sea múltiplo entero del período del movimiento cíclico que lleva al sistema atómico desde el nivel fundamental al excitado y de éste nuevamente al fundamental, $(2\pi/|\Omega|)$. La velocidad promedio del paquete de ondas vale p_c/m (nótese que en los casos discutidos en esta memoria el paquete de ondas es suficientemente estrecho en representación de momentos), de manera que

$$d = \frac{p_c}{m} \frac{2\pi}{|\Omega_f|} j \quad (j = 1, 2, 3, \dots, n), \quad (\text{G.1})$$

y, despejando,

$$|\Omega_f| = \frac{2\pi p_c}{md} j \quad (j = 1, 2, 3, \dots, n). \quad (\text{G.2})$$

Si, por el contrario, cuando el átomo sale de la región del láser se espera que éste pase al estado excitado, el tiempo que emplee en recorrer la anchura del láser

deberá ser igual a un número impar de semiperiodos

$$d = \frac{p_c}{m} \frac{\pi}{|\Omega_e|} (2j - 1) \quad (j = 1, 2, 3, \dots, n), \quad (\text{G.3})$$

donde, despejando, se tendrá

$$|\Omega_e| = \frac{\pi p_c}{md} (2j - 1) \quad (j = 1, 2, 3, \dots, n). \quad (\text{G.4})$$

Bibliografía

- [1] A.H. Zewail, Femtochemistry, World Scientific, Singapore (1994).
- [2] R.F. Snider, J. Stat. Phys. **61**, 443 (1990).
- [3] S. Brouard y J.G. Muga, Phys. Rev. Lett. **81**, 2621 (1998).
- [4] S. Brouard y J.G. Muga, Ann. Phys. (Leipzig) **7**, 679 (1998).
- [5] A.L. Pérez Prieto, Tesis de licenciatura, Universidad de La Laguna (2000).
- [6] D. H. Berman and R. F. Snider, J. Chem. Phys. **71**, 1740 (1979).
- [7] A.L. Pérez Prieto, S. Brouard y J.G. Muga, Phys. Rev. A **64**, 012710 (2001).
- [8] J. P. Gordon and A. Ashkin, Phys. Rev. A **21**, 1606 (1980).
- [9] J. Dalibard and C. Cohen-Tannoudji, J. Opt. Soc. Am. B **2**, 1707 (1985).
- [10] A. Ruschhaupt, J. A. Damborenea, B. Navarro, J.G. Muga y G.C. Hegerfeldt, Europhysics Letters **67**, 1 (2004).
- [11] A. Steinberg. Departamento de Física de la Universidad de Toronto. Comunicación privada.
- [12] A.L. Pérez Prieto, S. Brouard y J.G. Muga, J. Phys. A **36**, 2371 (2003).
- [13] Z.H. Huang y colaboradores IEEE Transactions on Elec. Dev. **36**, 2665 (1989).
- [14] C.R. Leavens, Solid State Comm. **76**, 253 (1990).
- [15] S. Brouard, R. Sala y J.G. Muga, Phys. Rev. A **49**, 4312 (1994).
- [16] H.M. Krenzlin, Budczies y K.W. Kehr, Phys. Rev. A **53** 3749 (1996).

-
- [17] A.L. Xavier y M.A.M. Aguiar, Phys. Rev. Lett. **97** 3323 (1997).
- [18] V.M. Aquino, V.C. Aguilera-Navarro, M. Goto y H. Iwamoto, Phys. Rev. A **58**, 4359 (1998).
- [19] M. Abolhasani y M. Golshani, Phys. Rev. A **62**, 012106 (2000).
- [20] M.H. Bramhall y B.M. Casper, Am. J. Phys. **38**, 1136 (1970).
- [21] T.E. Hartman, J. Appl. Phys. **33**, 3427 (1962).
- [22] V. Delgado y J.G. Muga, Annals of Physics (NY) **248**, 122 (1996).
- [23] J.P. Palao, J.G. Muga, S. Brouard y A. Jadczyk, Phys. Lett. A **233**, 227 (1997).
- [24] A. Ruschhaupt, Phys. Lett. A **250**, 249 (1998).
- [25] A. Ruschhaupt, en *Decoherence: Theoretical, Experimental and Conceptual Problems*, edited by Ph. Blanchard et al. (Berlin: Springer) (2000).
- [26] A. Goldberg, H.M. Schey y J.L. Schwartz, Am. J. Phys. **35**, 177 (1967).
- [27] R.E. Turner y R.F. Snider, J. Chem. Phys. **87**, 910 (1987).
- [28] J.G. Muga, J. Phys. A **24**, 2003 (1991).
- [29] J.G. Muga, V. Delgado, R. Sala y R.F. Snider, J. Chem. Phys. **104**, 7015 (1996).
- [30] J. Leon, J. Julve, P. Pitanga y F.J. Urrías, Phys. Rev. A **61**, 062101 (2000).
- [31] A.D. Baute, I.L. Egusquiza y J.G. Muga, Phys. Rev. A **64** 012501, (2001).
- [32] J.G. Muga, R. Sala Mayato e I.L. Egusquiza (eds.) *Time in Quantum Mechanics* (Berlín: Springer) (2002).
- [33] W. Eberfeldt y M. Kleber, Am. J. Phys. **56**, 154 (1988).
- [34] J.G. Muga, S. Brouard y R.F. Snider, Phys. Rev. A **46**, 6075 (1992).
- [35] J.G. Muga, V. Delgado y R.F. Snider, Phys. Rev. B **52**, 16381 (1995).
- [36] J.G. Muga y J.P. Palao, J. Phys. A **31**, 9519 (1998).

- [37] S. Brouard y J.G. Muga, *Phys. Rev. A* **54**, 3055 (1996).
- [38] G. García-Calderón y J. Villavicencio, *Phys. Rev. A* **64**, 012107 (2001).
- [39] G.W. Wei y R.F. Snider, *Phys. Rev. A* **52**, 2925 (1995).
- [40] G. García-Calderón en *Symmetries in Physics* editado por A. Frank y K.B. Wolf, (Springer-Verlag, Berlín) (1992).
- [41] *Handbook of Mathematical Functions*, editado por M. Abramowitz y I.A. Stegun (Dover, New York) (1972).
- [42] M. Raizen, C. Salomon y Q. Niu, *Phys. Today* **30**, No. 7, 30 (1997).
- [43] M. Morinaga, I. Bouchoule, J. C. Karam y C. Salomon, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 4037 (1999).
- [44] S.H. Myrskog, J.K. Fox, H.S. Moon, J.B. Kim y A.M. Steinberg, *Phys. Rev. A* **61**, 053412 (2000).
- [45] B. Navarro Torres, Tesis. Universidad del País Vasco (2005).
- [46] V. Hannstein, G.C. Hegerfeldt y J.G. Muga, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **38**, 409 (2005).
- [47] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu y F. Laloë, *Quantum Mechanics (Volumen I)*, (Wiley-Intersciencie, París) (1977).
- [48] *Maht/Library. Fortran Subroutines for Mathematical Applications* (IMSL, Houston) (1989).
- [49] N. Bleistein y R. A. Handelsman, *Asymptotic expansions of integrals*, (Dover, Nueva York) (1986).
- [50] M.D. Fleit, J. Fleck y A. Steiger, *J. Comput. Phys.* **47**, 412 (1982).