

UNIVERSIDAD DE LA LAGUNA

**«Teoría cuántica de colisiones con potenciales
complejos en una dimensión»**

**Autor: José Pascual Palao González
Director: Dr. Juan Gonzalo Muga Francisco**

Departamento de Física Fundamental II

A mi familia

Agradecimientos

Quiero mostrar mi agradecimiento a Gonzalo Muga por su atenta dirección y, sobre todo, por su paciencia en la enseñanza de esa actividad tan peculiar que es “hacer ciencia”; sin su optimismo en los malos momentos este trabajo no hubiera sido posible. A Santi Brouard y Rafa Sala por su constante ayuda durante estos años. A Rick Leavens y Arkadiusz Jadczyk con los que se ha elaborado parte del trabajo presentado. A los miembros del Departamento por su interés y apoyo. Por último, a los estudiantes de tercer ciclo con los que he tenido la oportunidad de compartir estos años, David, Javi, Migue, Enrique, Javier, Moisés, Susana, Toñi, Eva, Andrés y Ángel, porque con ellos el camino ha sido mucho más fácil y divertido.

Este trabajo ha sido realizado durante el periodo de disfrute de una beca FPI del MEC.

ÍNDICE

Introducción	1
--------------------	---

Capítulo 1: Teoría formal

1.1 INTRODUCCIÓN	3
1.1.1 Conceptos y notación básicos	4
1.2 OPERADORES DE MÓLLER	7
1.3 TEORÍA DE COLISIONES ESTACIONARIA	11
1.4 AMPLITUDES DE COLISIÓN	14
1.4.1 Representaciones del operador de colisión	14
1.4.2 Propiedades	16
1.4.3 Singularidades de $S_j(p)$: Estados ligados, resonancias	17
1.5 SIMETRÍAS Y SUS CONSECUENCIAS	18
1.5.1 Inversión temporal	18
1.5.2 Paridad	20
1.6 TEOREMA DE LEVINSON	22
1.6.1 Relaciones de cierre	23
1.6.2 Caso general ($T_l = T_r$)	24
1.6.3 Caso simétrico	27
1.7 DEPENDENCIA TEMPORAL	29
1.8 TIEMPOS DE RETARDO	30
1.9 POTENCIALES ABSORBENTES	32

Capítulo 2: Modelo analítico

2.1 INTRODUCCIÓN	35
2.2 COLISIONES ESTACIONARIAS	36
2.2.1 Resonancias y estados ligados	38
2.2.2 Tiempos de retardo	41
2.3 RÉGIMEN DEPENDIENTE DEL TIEMPO	44
2.4 APLICACIONES	50
2.4.1 Tiempos de retardo en paquetes de ondas	50
2.4.2 Decaimiento exponencial en colisiones resonante	52
2.4.3 Efectos de la resonancia en paquetes arbitrarios	53

2.4.4 Colisiones de baja energía	54
2.4.5 Comportamiento asintótico a tiempos muy grandes	55
2.4.6 Comportamiento asintótico a tiempos muy cortos	56

Capítulo 3: Potenciales absorbentes

3.1 POTENCIALES COMPLEJOS EN COLISIONES MOLECULARES	57
3.1.1 Absorbentes en la «zona asintótica lejana»	57
3.1.2 Otros métodos dependientes del tiempo	60
3.1.3 Métodos estacionarios	62
3.2 FORMAS FUNCIONALES	63
3.2.1 Propiedades generales	63
3.2.2 Potenciales factorizables: monomios	65
3.2.3 Potenciales propuestos por S. Brouard y colaboradores	67
3.2.4 Potenciales compuestos	70
3.3 COMPARACIÓN	78
3.3.1 Absorción estacionaria	79
3.3.2 Anchuras de absorción	80
3.3.3 Robustez	81
3.4 RESUMEN Y CONCLUSIONES DE LA COMPARACIÓN	83
3.5 EJEMPLO DE APLICACIÓN: COLISIÓN COLINEAL $H + H_2$	85

Capítulo 4: Tiempos de llegada y tránsito

4.1 INTRODUCCIÓN	89
4.2 TIEMPO DE LLEGADA	91
4.2.1 Operadores tiempo de llegada	91
4.2.2 Distribuciones operacionales de tiempos de llegada	105
4.2.3 Resultados	111
4.2.4 Discusión	113
4.3 TIEMPOS DE TRÁNSITO	115
4.3.1 Descripción del modelo	117
4.3.2 Resultados	121
DISCUSIÓN Y CONCLUSIONES	125

Apéndices

A.- PRODUCTO DE LAS AUTOFUNCIONES DE COLISIÓN	127
B.- POTENCIAL COMPUESTO OPTIMIZADO	129
C.- COMPORTAMIENTO ASINTÓTICO DE $\Pi(T)$	131
D.- REPRESENTACIÓN DE LOS ESTADOS GRT	133
E.- ESTADOS DEL TIEMPO DE LLEGADA «PRECISOS»	135
PUBLICACIONES	137
REFERENCIAS	139

Introducción

Introducción

El hamiltoniano es el operador central en la descripción mecano cuántica de un sistema. Determina tanto la evolución temporal como las energías permitidas. En general se supone hermítico, para obtener valores propios reales y una evolución temporal unitaria que conserve la norma del estado cuántico. Sin embargo, existen muchos procesos en los que la norma asociada con una especie, o con un estado, no se conserva: en las reacciones químicas las partículas se reordenan creándose y destruyéndose distintas combinaciones atómicas estables; en algunos detectores la partícula incidente desaparece como tal al ser (por ejemplo) ionizada; en general las colisiones inelásticas modifican las poblaciones de los distintos niveles internos de las partículas compuestas; en sistemas “abiertos” las fuentes inyectan y los sumideros absorben probabilidad. En todos estos casos, la descripción de la dinámica puede en principio realizarse mediante hamiltonianos hermíticos apropiados, que consideren explícitamente todos los grados de libertad o todos los estados internos involucrados. Pero esta descripción completa y exhaustiva puede ser muy engorrosa y a menudo inviable por complicada, o simplemente demasiado detallada para nuestros propósitos. Los hamiltonianos con potenciales no hermíticos (complejos), absorbentes o creadores, y las correspondientes ecuaciones de Schrödinger efectivas ofrecen una descripción reducida, más sencilla, en la que retenemos explícitamente lo esencial, la amplitud para el estado, o el tipo de partícula de interés, y consideramos la complejidad del sistema real sólo a través de una interacción efectiva, el potencial complejo. En ocasiones el potencial complejo puede obtenerse a partir de primeros principios, pero con frecuencia se emplea fenomenológicamente, de forma que se reproduzca algún resultado conocido.

El campo tradicional en el que se han desarrollado la mayoría de las aplicaciones de los potenciales complejos es el del cálculo aproximado de secciones eficaces en física nuclear mediante el formalismo de “potenciales ópticos” de H. Feshbach [1]. Pero recientemente se han empleado también en otros ámbitos: en particular, hoy está muy extendido su uso como absorbentes y “desacopladores” en una serie de métodos numéricos dependientes e independientes del tiempo para investigar la dinámica de las reacciones químicas; también se han empleado como modelos de detectores, y por tanto para dilucidar cuestiones fundamentales de mecánica cuántica

relacionadas con la medida y definición de tiempos característicos.

Los potenciales complejos cumplen en suma una función importante y complementaria a la de los hermíticos en la teoría cuántica. Sin embargo, sus propiedades no se han estudiado con la misma extensión ni profundidad. Una lectura de cualquiera de las monografías sobre la teoría de colisiones revela que apenas se les ha prestado atención desde un punto de vista formal, y mucho menos riguroso.

Esta Tesis se dedica a estudiar diversos aspectos de los potenciales complejos. En el capítulo 1, tratamos de llenar la laguna del formalismo de colisiones para potenciales no hermíticos. Como complemento a este formalismo hemos desarrollado un modelo analítico en el capítulo 2; el capítulo 3 se dedica a la optimización de potenciales absorbentes; y el capítulo 4 a las aplicaciones de los mismos en la definición y modelado de tiempos de llegada y tránsito en mecánica cuántica.

Todo el trabajo se orienta hacia sistemas en una dimensión (1D). Los modelos en 1D son suficientes para tratar de forma efectiva algunos sistemas físicos (por ejemplo, ciertos problemas de difusión, las reacciones químicas en determinados límites y condiciones, y sobre todo últimamente el transporte electrónico en estructuras semiconductoras artificiales) y, por su sencillez, constituyen el marco ideal para poner a punto métodos numéricos o aproximados que luego habrán de aplicarse en un número mayor de dimensiones. También hay que tener en cuenta que muchos aspectos fundamentales de la física no requieren mayor complicación. En particular gran parte de los misterios de la mecánica cuántica se presentan con toda su fuerza ya en 1D, por lo que estos modelos sirven también para examinar cuestiones básicas, tales como la incorporación del tiempo al formalismo de la teoría de colisiones.

Capítulo 1

Teoría formal

Capítulo 1

Teoría formal

1.1 Introducción

En este capítulo expondremos la teoría cuántica formal de colisiones para potenciales no hermíticos en una dimensión. Se entiende por “teoría formal de colisiones” el entramado de operadores y funciones (junto con sus relaciones y propiedades) empleados para describir cuantitativamente la colisión. En la teoría formal no se especifica el potencial concreto (todo lo más ciertas propiedades genéricas), por lo que algunas de las relaciones que se suponen válidas, en particular la *completitud asintótica*, han de ser comprobadas posteriormente para cada potencial o familia de potenciales. Trabajaremos en los capítulos siguientes con potenciales (de soporte finito, o separables) en los que la mayoría de estas relaciones formales pueden verificarse explícitamente sin dificultad.

A pesar de que existen muchas monografías sobre la teoría de colisiones, ninguna de ellas presta apenas atención a las peculiaridades de los potenciales no hermíticos. Algunos aspectos particulares se tratan de forma aislada y dispersa en un número de artículos (véase por ejemplo [2,3]), pero no existía hasta el momento un tratamiento global y sistemático como el que presentamos aquí. Incluimos elementos novedosos como por ejemplo el teorema de Levinson, la propuesta de una notación consistente, las relaciones entre operadores y amplitudes de transmisión y reflexión, o el análisis de la dependencia temporal. La teoría de colisiones con potenciales no hermíticos generaliza los conceptos y operadores de la teoría ordinaria, que trata potenciales reales y evolución temporal unitaria. Remitimos al lector interesado a la excelente monografía sobre el tema de J. R. Taylor [4], donde se abordan muchos de los puntos que por similitud con el caso unitario no tratamos en profundidad.

1.1.1 Conceptos y notación básicos

Supondremos que el hamiltoniano de la partícula (no relativista) de masa m puede escribirse como suma del operador energía cinética que corresponde a la evolución “libre” del sistema, H_0 , y del operador potencial V ,

$$H = H_0 + V. \quad (1.1)$$

Los estados propios de H_0 son las ondas planas con momento definido $|p\rangle$,

$$H_0|p\rangle = E_p|p\rangle = \frac{p^2}{2m}|p\rangle. \quad (1.2)$$

Es conveniente utilizar la normalización “delta de Dirac”, $\langle p|p'\rangle = \delta(p - p')$, que corresponde a la siguiente representación de posiciones de la onda plana,

$$\langle x|p\rangle = h^{-1/2} e^{ipx/\hbar}. \quad (1.3)$$

Las relaciones de cierre (o resoluciones de la identidad) en las representaciones de coordenadas y momentos son por tanto

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |x\rangle\langle x| = \int_{-\infty}^{\infty} dp |p\rangle\langle p| = 1_{op}. \quad (1.4)$$

(Aunque en general los operadores no se distinguen en este trabajo por ningún símbolo o tipo de letra especial, usaremos el subíndice “op” cuando pueda haber confusión entre una función, o un número, y un operador, como en este caso para el operador unidad 1_{op} .) Consideraremos V como un operador, en general no hermítico ($V^\dagger \neq V$), para el que se puedan definir todos los operadores de la teoría de colisiones, en particular los *operadores de Möller*, y tal que verifique la relación de *completitud asintótica* descrita en la siguiente sección.

Al caso de potenciales hermíticos nos referiremos usualmente como el caso “hermítico” o “unitario” (ya que el correspondiente operador de evolución temporal y el operador S son unitarios). Es por un lado un caso particular de todo el tratamiento, pero también una importante referencia puesto que la teoría general se inspira constantemente en la teoría mejor conocida del caso hermítico. Serán objeto de nuestro estudio principalmente potenciales *locales*,

$$\langle x|V|x'\rangle = \delta(x - x')V(x), \quad (1.5)$$

y potenciales no locales *separables*,

$$V = |\chi\rangle v \langle \chi|, \quad (1.6)$$

para los que v o $V(x)$ toman en general valores complejos, a diferencia del caso hermítico, donde deben ser reales.

La evolución de un estado $|\psi(t)\rangle$ con el tiempo viene dada por la ecuación de Schrödinger,

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle, \quad (1.7)$$

que en representación de posiciones toma la forma,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t) + \langle x|V|\psi(t)\rangle. \quad (1.8)$$

Para hamiltonianos independientes del tiempo la solución formal de la ecuación (1.7) es $|\psi(t)\rangle = \exp(-iHt/\hbar)|\psi(0)\rangle$.

Por otro lado, la ecuación de autovalores de H viene dada por

$$H|E\rangle = E|E\rangle, \quad (1.9)$$

donde $|E\rangle$ es el autovector correspondiente al autovalor E . En representación de posiciones esta ecuación no es más que la ecuación estacionaria de Schrödinger,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \langle x|E\rangle + \langle x|V|E\rangle = E \langle x|E\rangle. \quad (1.10)$$

Para los potenciales que trata la teoría de colisiones el término $\langle x|V|E\rangle$ tiende a cero cuando $x \rightarrow \pm\infty$, de tal forma que el comportamiento de los estados en esas regiones es esencialmente libre. Las soluciones de (1.10) no normalizables correspondientes a estados estacionarios de colisión se obtienen imponiendo condiciones de contorno asintóticas de onda plana *saliente* o *entrante*. Interpretaremos una onda plana $\exp(ipx/\hbar)$ en la región asintótica de la izquierda como una onda *entrante* ($p > 0$) o *saliente* ($p < 0$) de la región del potencial. En la región asintótica de la derecha la interpretación es la inversa. Es importante fijar la convención que seguiremos para las amplitudes. Supongamos primero que p es positivo. Podemos construir dos funciones propias de H linealmente independientes imponiendo las condiciones asintóticas siguientes,

$$\frac{1}{\hbar^{1/2}} \begin{cases} \exp(ipx/\hbar) + R^l(p) \exp(-ipx/\hbar), & \text{si } x \rightarrow -\infty \\ T^l(p) \exp(ipx/\hbar), & \text{si } x \rightarrow \infty, \end{cases} \quad (1.11)$$

$$\frac{1}{\hbar^{1/2}} \begin{cases} T^r(p) \exp(-ipx/\hbar), & \text{si } x \rightarrow -\infty \\ \exp(-ipx/\hbar) + R^r(p) \exp(ipx/\hbar), & \text{si } x \rightarrow \infty. \end{cases} \quad (1.12)$$

Para $p > 0$ llamaremos a estos estados $\langle x|p+\rangle$ y $\langle x|(-p)+\rangle$, respectivamente. Corresponden a una onda plana *entrante* por la izquierda, $\langle x|p\rangle$, o por la derecha, $\langle x|-p\rangle$. $R^{l,r}(p)$ y $T^{l,r}(p)$ son las *amplitudes de reflexión y transmisión*. Los superíndices l y r hacen referencia a incidencia desde la región asintótica de la izquierda (l) y de la derecha (r). Un paquete de ondas “concentrado” en torno a un estado $|p+\rangle$ estaría dominado por la onda plana $|p\rangle$ antes de la colisión, y después constaría de dos paquetes, uno reflejado y el otro transmitido, con probabilidades $|R^{l,r}|^2$ y $|T^{l,r}|^2$.

Para $p < 0$, sin embargo, los estados con comportamiento asintótico dado por (1.11) y (1.12) corresponden, respectivamente, a $\langle x|\widehat{p}-\rangle$, con onda plana *saliente* $\langle x|p\rangle$, y $\langle x|-\widehat{p}-\rangle$, con onda plana *saliente* $\langle x|-p\rangle$. (La notación “ $\widehat{}$ ” se discutirá en secciones posteriores de este capítulo.) En estos casos el paquete de ondas incidente estaría formado por una superposición de ondas entrantes desde los dos lados. Por supuesto, llevar a cabo tal superposición puede ser complicado, pero ello no impide que estos estados sean muy útiles como funciones base, y en general en situaciones físicas en las que se controlan o seleccionan los estados de salida, en lugar de los de entrada.

Obsérvese que $T^{r,l}(p < 0)$ no es una amplitud de transmisión convencional (puesto que es un factor que acompaña a una onda *entrante*). Sin embargo, continúa analíticamente la amplitud estándar $T^{r,l}(p > 0)$ en el dominio de momentos negativos, $p < 0$, y por tanto mantendremos la misma denominación “amplitud de transmisión”, independientemente del signo de p . De acuerdo con esta convención notacional los argumentos positivos de las amplitudes corresponden a estados $|p+\rangle$ (con $p > 0$ o $p < 0$), con onda *entrante* $\langle x|p\rangle$, mientras que argumentos negativos corresponden a estados $|\widehat{p}-\rangle$ (de nuevo $p > 0$ o $p < 0$), con onda *saliente* $\langle x|p\rangle$.

En cuanto a las soluciones normalizables del espectro puntual de H , supondremos por simplicidad que no hay degeneración. De la ecuación de autovalores,

$$H|E_j\rangle = E_j|E_j\rangle, \quad (1.13)$$

se obtiene la expresión conjugada

$$\langle E_j|H^\dagger = \langle E_j|E_j^*. \quad (1.14)$$

Denotemos ahora por $|\widehat{E}_k\rangle$ los vectores propios “derechos” de H^\dagger con valor propio E_k . Como en el caso anterior,

$$H^\dagger|\widehat{E}_k\rangle = E_k|\widehat{E}_k\rangle, \quad (1.15)$$

$$\langle \widehat{E}_k|H = \langle \widehat{E}_k|E_k^*. \quad (1.16)$$

En realidad los valores propios E_j y E_k no son independientes. Para verlo, basta con evaluar los elementos de matriz $\langle E_j|H^\dagger|\widehat{E}_k\rangle$ usando (1.14) y (1.15),

$$E_k\langle E_j|\widehat{E}_k\rangle = E_j^*\langle E_j|\widehat{E}_k\rangle. \quad (1.17)$$

La relación $E_k = E_j^*$ tendría que satisfacerse siempre que $\langle E_j|\widehat{E}_k\rangle \neq 0$, pero esto sólo puede ocurrir para un valor de j (digamos para $j = j'$), puesto que de lo contrario E_k tendría varios valores, lo cual es imposible. De esta forma asociamos un índice j' a cada índice k . Podemos finalmente reordenar los índices de tal forma que $j' = k$. Concluimos que cada estado propio

“derecho” de H , $|E_k\rangle$, tiene un compañero “biortogonal” izquierdo $\langle\hat{E}_k|$, que normalizaremos de acuerdo con

$$\langle\hat{E}_k|E_k\rangle = 1. \quad (1.18)$$

Podemos entonces escribir la componente discreta de H como

$$H_{dis} = \sum_k |E_k\rangle E_k \langle\hat{E}_k|. \quad (1.19)$$

De forma similar,

$$H_{dis}^\dagger = \sum_k |\hat{E}_k\rangle E_k^* \langle E_k|. \quad (1.20)$$

1.2 Operadores de Möller

Denotemos por $U(t_2, t_1)$ el operador de evolución con el hamiltoniano H del instante t_1 al instante t_2 ,

$$U(t_2, t_1) = e^{-iH(t_2-t_1)/\hbar}. \quad (1.21)$$

A diferencia del caso hermítico, $U^\dagger(t_2, t_1)$ no es igual a $U(t_1, t_2)$. La no unitariedad en la evolución implica una serie de modificaciones de la teoría ordinaria. Sin embargo, mostraremos que la teoría general puede reformularse de manera que la dependencia del *operador de colisión* S con los operadores de Möller sea igual formalmente al caso unitario. Para ello se introduce el operador de evolución con H^\dagger , \hat{U} , como [5]

$$\hat{U}(t_2, t_1) = e^{-iH^\dagger(t_2-t_1)/\hbar}. \quad (1.22)$$

En este punto es conveniente resaltar que la elección de H o H^\dagger es puramente convencional, ya que se supone válida la relación $(H^\dagger)^\dagger = H$. Luego las expresiones con o sin acento “^” son intercambiables, sin más que sustituir H por H^\dagger y viceversa. Esto simplifica mucho la exposición de la teoría, ya que a menudo mostraremos sólo la mitad de las relaciones posibles, obteniéndose las relaciones conjugadas de forma inmediata mediante los cambios

$$\begin{aligned} A &\rightarrow \hat{A}, \\ H &\rightarrow H^\dagger, \\ V &\rightarrow V^\dagger, \end{aligned} \quad (1.23)$$

y sus cambios inversos. Aquí A es un operador genérico que presente la versión con y sin acento “^”.

De las definiciones anteriores (1.21,1.22), se obtienen las relaciones

$$\begin{aligned}\widehat{U}^\dagger(t_2, t_1) &= e^{iH(t_2-t_1)/\hbar} = U(t_1, t_2), \\ U^\dagger(t_2, t_1) &= e^{iH^\dagger(t_2-t_1)/\hbar} = \widehat{U}(t_1, t_2).\end{aligned}\quad (1.24)$$

Supongamos, por ejemplo, que $t_2 > t_1$, y que V es un potencial absorbente (que destruye norma) cuando el sistema evoluciona de t_1 a t_2 , mientras que V^\dagger tiene el efecto contrario (crea norma). El operador $U(t_2, t_1)$ describe por tanto una evolución con H hacia adelante (de t_1 a t_2) en la que se destruye norma, mientras que el operador $\widehat{U}^\dagger(t_2, t_1) = U(t_1, t_2)$ describe la evolución inversa, de t_2 a t_1 , en la que se crea la norma perdida (Se entiende entonces que H destruye norma al evolucionar hacia el futuro pero que la crea al evolucionar hacia el pasado.) La relación que generaliza la unitariedad del operador de evolución es por tanto,

$$\widehat{U}^\dagger(t_2, t_1)U(t_2, t_1) = 1_{op}. \quad (1.25)$$

Por supuesto, existe también la posibilidad de una evolución con H^\dagger tanto hacia el futuro como hacia el pasado, lo que lleva a la relación paralela,

$$U^\dagger(t_2, t_1)\widehat{U}(t_2, t_1) = 1_{op}. \quad (1.26)$$

Podemos ahora definir los **operadores de Möller**, Ω_\pm , como

$$\begin{aligned}\Omega_+ &= \lim_{t \rightarrow -\infty} e^{iHt/\hbar} e^{-iH_0t/\hbar}, \\ \Omega_- &= \lim_{t \rightarrow \infty} e^{iH^\dagger t/\hbar} e^{-iH_0t/\hbar}.\end{aligned}\quad (1.27)$$

donde el límite debe entenderse en el sentido fuerte. Ω_+ se interpreta como en el caso hermítico: relaciona las asíntotas de entrada, que denotaremos de forma genérica como $|\phi_{ent}\rangle$, con los estados de colisión que evolucionan con H , $|\psi_+\rangle$,

$$|\psi_+\rangle = \Omega_+|\phi_{ent}\rangle. \quad (1.28)$$

Sin embargo, la interpretación de Ω_- es diferente. La exponencial de la izquierda en este caso corresponde a una evolución hacia atrás en el tiempo con H^\dagger , por lo que Ω_- relaciona las asíntotas de salida, $|\phi_{sal}\rangle$, con los estados de colisión del "hamiltoniano" H^\dagger , $|\psi_-\rangle$,

$$|\psi_-\rangle = \Omega_-|\phi_{sal}\rangle. \quad (1.29)$$

Para recuperar relaciones similares al caso hermítico entre los operadores de Möller y el operador de colisión es necesario introducir los operadores de Möller complementarios, $\widehat{\Omega}_\pm$,

$$\begin{aligned}\widehat{\Omega}_+ &= \lim_{t \rightarrow -\infty} e^{iH^\dagger t/\hbar} e^{-iH_0t/\hbar}, \\ \widehat{\Omega}_- &= \lim_{t \rightarrow \infty} e^{iHt/\hbar} e^{-iH_0t/\hbar}.\end{aligned}\quad (1.30)$$

El primero relaciona las asíntotas de entrada $|\phi_{ent}\rangle$ con los estados de colisión $|\widehat{\psi}_+\rangle$ de H^\dagger , y el segundo conecta las asíntota de salida, $|\phi_{sal}\rangle$, con los estados de colisión de H , $|\widehat{\psi}_-\rangle$.

Con estas definiciones de los operadores de Möller se pueden generalizar las relaciones de isometría y completitud asintótica del caso hermitico. La generalización de la isometría será

$$\widehat{\Omega}_\pm^\dagger \Omega_\pm = 1_{op}. \quad (1.31)$$

Recuérdese que la relación resultante del intercambio de operadores con y sin acento también es válida (1.23).

La relación (1.31) puede entenderse de forma intuitiva. Por ejemplo, en el caso $\widehat{\Omega}_+^\dagger \Omega_+$, el operador de la derecha, Ω_+ , actúa sobre una asíntota de entrada dando lugar a un estado de colisión de H . La actuación del segundo operador, $\widehat{\Omega}_+^\dagger$, llevará ese estado de colisión hacia atrás en el tiempo (evolucionando con H) hasta la asíntota en el pasado remoto, tras lo cual evolucionará libremente, hacia adelante, volviendo al estado de partida.

Supondremos como premisa básica que es posible la separación del espacio de Hilbert en un subespacio correspondiente a autovalores discretos (de H o H^\dagger), en general complejos, y en otro subespacio asociado al continuo de energías reales y estados de colisión [6,7]. Las relaciones de completitud asintótica se generalizan entonces de la siguiente manera

$$\begin{aligned} \Lambda(H) + \Omega_+ \widehat{\Omega}_+^\dagger &= 1_{op}, \\ \Lambda(H) + \widehat{\Omega}_- \Omega_-^\dagger &= 1_{op}, \\ \Lambda(H^\dagger) + \widehat{\Omega}_+ \Omega_+^\dagger &= 1_{op}, \\ \Lambda(H^\dagger) + \Omega_- \Omega_-^\dagger &= 1_{op}, \end{aligned} \quad (1.32)$$

donde $\Lambda(H)$ y $\Lambda(H^\dagger)$ son, de acuerdo con la discusión final de la sección previa, proyectores sobre los estados del espectro puntual de H y H^\dagger ,

$$\begin{aligned} \Lambda(H) &= \sum_k |E_k\rangle \langle \widehat{E}_k|, \\ \Lambda(H^\dagger) &= \sum_k |\widehat{E}_k\rangle \langle E_k|. \end{aligned} \quad (1.33)$$

En el caso hermitico corresponderían a la proyección sobre los estados ligados del sistema, de energía real negativa. Por otra parte, los productos de operadores de Möller presentes en el primer sumando de (1.32) son proyectores sobre los subespacios de estados de colisión, \mathcal{R}_H o \mathcal{R}_{H^\dagger} , de H o H^\dagger , con asíntotas de salida y entrada. Para los potenciales que satisfacen la “condición asintótica” se supone que los rangos de los operadores de Möller verifican $\mathcal{R}(\Omega_+) = \mathcal{R}(\widehat{\Omega}_-) = \mathcal{R}_H$, y $\mathcal{R}(\widehat{\Omega}_+) = \mathcal{R}(\Omega_-) = \mathcal{R}_{H^\dagger}$.

La ortogonalidad entre $\Lambda(H)$ y \mathcal{R}_H , es decir entre los estados de colisión de H , $|\psi\rangle$, y el espacio de los vectores propios genuinos (normalizables) de H puede justificarse mediante la relación

$$\langle \widehat{E}_k | \psi \rangle = \langle \widehat{E}_k | e^{iHt/\hbar} e^{-iHt/\hbar} | \psi \rangle = 0, \quad (1.34)$$

ya que la integral es independiente del tiempo y podemos tomar los límites $t \rightarrow \infty$ o $t \rightarrow -\infty$ de tal forma que el estado de la izquierda permanezca localizado en la zona de interacción, mientras que el derecho evolucione libremente como un estado asintótico lejos de la misma.

Otro grupo de relaciones importantes son las ecuaciones de “entrelazado”, que ligan los productos de los operadores de Möller con los hamiltonianos H y H_0 ,

$$\begin{aligned} H\Omega_+ &= \Omega_+H_0, \\ H^\dagger\Omega_- &= \Omega_-H_0. \end{aligned} \quad (1.35)$$

Su obtención se basa en el mismo procedimiento empleado en el caso unitario [4].

El **operador de colisión**, S , relacionará las asíntotas de entrada con las de salida, $S|\phi_{ent}\rangle = |\phi_{sal}\rangle$. La definición de los operadores de Möller utilizada permite expresar S como en el caso unitario,

$$S = \Omega_-^\dagger \Omega_+. \quad (1.36)$$

En el caso no hermítico ya no es válida la relación de unitariedad $S^\dagger S = 1_{op}$. Sin embargo si introducimos el operador \widehat{S} ,

$$\widehat{S} = \widehat{\Omega}_-^\dagger \widehat{\Omega}_+, \quad (1.37)$$

que no es más que el operador de colisión que relaciona las asíntotas de entrada y salida de H^\dagger , encontramos, usando (1.32), (1.34), (1.36) y (1.37), la siguiente generalización,

$$\widehat{S}^\dagger S = S\widehat{S}^\dagger = 1_{op}. \quad (1.38)$$

Utilizando las relaciones de entrelazado se comprueba que

$$[S, H_0] = [\widehat{S}, H_0] = 0, \quad (1.39)$$

pero la conmutación con H_0 no puede interpretarse como una conservación asintótica de energía cinética excepto en el caso hermítico, ya que S no es unitario,

$$\langle \phi_{sal} | H_0 | \phi_{sal} \rangle = \langle \phi_{ent} | S^\dagger S H_0 | \phi_{ent} \rangle. \quad (1.40)$$

La razón física es que en general el potencial complejo puede crear o absorber preferentemente determinados momentos por lo que la energía final no tiene que coincidir con la inicial.

1.3 Teoría de colisiones estacionaria

Con la introducción de los operadores (1.27,1.30,1.36,1.37) es posible desarrollar la teoría estacionaria de colisiones de forma paralela al caso hermitico. Con este fin se introducirán los operadores de Green (o resolvente) y de transición, para finalmente obtener la versión parametrizada de los operadores de Möller y los estados estacionarios de colisión.

Operadores de Green parametrizados

Se definen los operadores de Green parametrizados $G(z)$ y $\hat{G}(z)$, para H y H^\dagger respectivamente, como

$$\begin{aligned} G(z) &= \frac{1}{z - H}, \\ \hat{G}(z) &= \frac{1}{z - H^\dagger}. \end{aligned} \quad (1.41)$$

Las relaciones de Lippmann-Schwinger son formalmente idénticas al caso hermitico,

$$G(z) = G^0(z) + G^0(z)G(z) = G^0(z) + G(z)VG^0(z), \quad (1.42)$$

donde $G^0(z) = (z - H_0)^{-1}$ es la resolvente del caso libre. Las relaciones paralelas para $\hat{G}(z)$ se obtienen mediante (1.23).

A partir de la definición de los operadores de Green (1.41) se puede demostrar la siguiente relación entre G y \hat{G}

$$G^\dagger(z) = \hat{G}(z^*). \quad (1.43)$$

Operadores de transición parametrizados

Los operadores de transición parametrizados para H y H^\dagger , que denotaremos como $T_{op}(z)$ y $\hat{T}_{op}(z)$ respectivamente, se definen como

$$\begin{aligned} T_{op}(z) &= V + VG(z)V, \\ \hat{T}_{op}(z) &= V^\dagger + V^\dagger\hat{G}(z)V^\dagger. \end{aligned} \quad (1.44)$$

A partir de (1.42) se obtiene una relación más entre el operador transición y el operador potencial,

$$G^0(z)T(z) = G(z)V. \quad (1.45)$$

Además, de la definición (1.44) y la propiedad (1.43) se obtiene una relación entre los operadores de transición de H y H^\dagger ,

$$T^\dagger(z) = \hat{T}(z^*). \quad (1.46)$$

Operadores de Möller parametrizados

Con estos elementos podemos introducir los operadores de Möller parametrizados $\Omega_{\pm}(z)$. El proceso es completamente paralelo al caso unitario. Por simplicidad lo examinaremos detenidamente sólo para Ω_- y daremos el resultado final para el resto.

El operador Ω_- puede expresarse en forma integral,

$$\Omega_- = 1_{op} + \frac{i}{\hbar} \int_0^{\infty} dt e^{iH^\dagger t/\hbar} V^\dagger e^{-iH_0 t/\hbar}. \quad (1.47)$$

Si actuamos con este operador sobre una asíntota $|\phi\rangle$ se obtiene

$$\Omega_-|\phi\rangle = |\phi\rangle + \frac{i}{\hbar} \int_0^{\infty} dt e^{iH^\dagger t/\hbar} V^\dagger e^{-iH_0 t/\hbar} |\phi\rangle. \quad (1.48)$$

Introduciendo un factor de convergencia¹ $e^{-\epsilon t}$, la relación de cierre para las ondas planas (1.4) y considerando que estas últimas son autoestados de H_0 , la integral toma la forma

$$\Omega_-|\phi\rangle = |\phi\rangle + \int_{-\infty}^{\infty} dp \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{i}{\hbar} \int_0^{\infty} dt e^{-i(E_p - i\epsilon - H^\dagger)t/\hbar} V^\dagger |p\rangle \langle p|\phi\rangle. \quad (1.49)$$

Integrando en tiempos (el límite superior de integración no contribuye debido al factor de convergencia), e identificando el operador de Green parametrizado (1.41) se obtiene finalmente

$$\Omega_-|\phi\rangle = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{\infty} dp [1_{op} + \widehat{G}(E_p - i\epsilon) V^\dagger] |p\rangle \langle p|\phi\rangle. \quad (1.50)$$

Esta expresión (y las equivalentes para el resto de operadores) induce a introducir los operadores de Möller parametrizados $\Omega(z)$ y $\widehat{\Omega}(z)$,

$$\begin{aligned} \Omega(z) &= 1_{op} + G(z)V, \\ \widehat{\Omega}(z) &= 1_{op} + \widehat{G}(z)V^\dagger. \end{aligned} \quad (1.51)$$

Estados estacionarios de colisión

Los estados estacionarios de colisión se definen como los resultantes de la actuación de los operadores de Möller parametrizados sobre las ondas planas. Son vectores propios no normalizables, cuya relación con las ondas planas es similar a las de los estados de colisión con las asíntotas dadas por la expresión (1.50) y las análogas para el resto de operadores. Así,

$$\begin{aligned} |p+\rangle &= \Omega(+)|p\rangle = |p\rangle + \frac{1}{E_p + i0 - H} V |p\rangle \\ |p-\rangle &= \Omega(-)|p\rangle = |p\rangle + \frac{1}{E_p - i0 - H^\dagger} V^\dagger |p\rangle, \end{aligned} \quad (1.52)$$

¹El factor, como en el caso hermítico, no modifica el resultado de la integral (1.48), que es en principio absolutamente convergente, y permite en cambio definir la actuación de los operadores de Möller sobre vectores improprios como las ondas planas.

donde se ha usado una notación abreviada para los argumentos: (\pm) denotan a $(E_p \pm i\epsilon)$ en el límite $\epsilon \rightarrow 0^+$.

Las relaciones para los estados resultantes de la acción de los operadores $\hat{\Omega}(\pm)$, que denotaremos por $|\hat{p}\pm\rangle$, se obtienen cambiando H y V por H^\dagger y V^\dagger , y viceversa, según (1.23).

La relación de entrelazado (1.35) permite interpretar estos estados: $|p+\rangle$ y $|\hat{p}-\rangle$ son autovectores (derechos) de H con autovalor E_p , mientras que $|\hat{p}+\rangle$ y $|p-\rangle$ son autovectores de H^\dagger con el mismo valor propio.

Introduciendo la resolución de la unidad en ondas planas (1.4) en las relaciones de completitud asintótica (1.32) se puede obtener nuevas expresiones para la resolución de la unidad en términos de los estados estacionarios de colisión,

$$\begin{aligned}\Lambda(H) + \int_{-\infty}^{\infty} dp |p+\rangle \langle \hat{p}+| &= 1_{op}, \\ \Lambda(H) + \int_{-\infty}^{\infty} dp |\hat{p}-\rangle \langle p-| &= 1_{op}.\end{aligned}\quad (1.53)$$

La forma asintótica de los estados de H , $|p+\rangle$ y $|\hat{p}-\rangle$, para valores grandes de $|x|$ se obtiene de la relación entre el operador de Green y el operador de transición (1.45), considerando que la resolvente libre se comporta como

$$\langle x|G^0(\pm)|x'\rangle = \mp \frac{im}{\hbar|p|} e^{\pm i|p||x-x'|/\hbar}.\quad (1.54)$$

Si tomamos $p > 0$, el resultado es el siguiente,

$$\langle x|p+\rangle = \begin{cases} (1 - \frac{2\pi im}{p} \langle p|T_{op}(+)|p\rangle) \langle x|p\rangle, & x \rightarrow \infty \\ \langle x|p\rangle - \frac{2\pi im}{p} \langle -p|T_{op}(+)|p\rangle \langle x|-p\rangle, & x \rightarrow -\infty. \end{cases}\quad (1.55)$$

$$\langle x|-p+\rangle = \begin{cases} \langle x|-p\rangle - \frac{2\pi im}{p} \langle p|T_{op}(+)|-p\rangle \langle x|p\rangle, & x \rightarrow \infty \\ (1 - \frac{2\pi im}{p} \langle -p|T_{op}(+)|-p\rangle) \langle x|-p\rangle, & x \rightarrow -\infty. \end{cases}\quad (1.56)$$

$$\langle x|\hat{p}-\rangle = \begin{cases} \langle x|p\rangle + \frac{2\pi im}{p} \langle -p|T_{op}(-)|p\rangle \langle x|-p\rangle, & x \rightarrow \infty \\ (1 + \frac{2\pi im}{p} \langle p|T_{op}(-)|p\rangle) \langle x|p\rangle, & x \rightarrow -\infty. \end{cases}\quad (1.57)$$

$$\langle x|-\hat{p}-\rangle = \begin{cases} (1 + \frac{2\pi im}{p} \langle -p|T_{op}(-)|-p\rangle) \langle x|-p\rangle, & x \rightarrow \infty \\ \langle x|-p\rangle + \frac{2\pi im}{p} \langle p|T_{op}(-)|-p\rangle \langle x|p\rangle, & x \rightarrow -\infty. \end{cases}\quad (1.58)$$

Unas relaciones similares se obtendrían para los estados de colisión de H^\dagger , $|\hat{p}+\rangle$ y $|p-\rangle$.

El estado $|p+\rangle$ corresponde a una onda plana de amplitud unidad *entrante* por la región asintótica de la izquierda más dos ondas *salientes*, una en la región asintótica de la izquierda y otra en la de la derecha. $|-p+\rangle$ tiene una interpretación similar para una onda plana de amplitud unidad *entrante* por la derecha. El estado $|\hat{p}-\rangle$ corresponde a dos ondas planas *entrantes*, una

por la izquierda y otra por la derecha, más una onda plana *saliente* de amplitud unidad por la derecha. El caso $|- \hat{p}-\rangle$ es similar, con la onda *saliente* por la izquierda. Las funciones $\langle x | \pm p+\rangle$ y $\langle x | \pm \hat{p}-\rangle$ serán por tanto soluciones de la ecuación estacionaria de Schrödinger (1.10) con condiciones de contorno de la forma (1.58). Esta interpretación permite identificar las amplitudes de reflexión, $R^{l,r}$, y transmisión, $T^{l,r}$ introducidas en la sección 1.1.1,

$$\begin{aligned} R^l(p) &= -\frac{2\pi im}{p} \langle -p | T_{op}(\text{sign}(p)) | p \rangle, \\ T^l(p) &= 1 - \frac{2\pi im}{p} \langle p | T_{op}(\text{sign}(p)) | p \rangle, \\ R^r(p) &= -\frac{2\pi im}{p} \langle p | T_{op}(\text{sign}(p)) | -p \rangle, \\ T^r(p) &= 1 - \frac{2\pi im}{p} \langle -p | T_{op}(\text{sign}(p)) | -p \rangle. \end{aligned} \quad (1.59)$$

En las expresiones anteriores p es de nuevo arbitrario. Para valores positivos del momento corresponderán a las amplitudes de los estados $|p+\rangle$, mientras que para valores negativos a las de los estados $|\hat{p}-\rangle$. Sustituyendo T_{op} por \hat{T}_{op} en los miembros derechos de (1.59), se obtendrían las amplitudes $\hat{R}^{l,r}$ y $\hat{T}^{l,r}$ de los estados $|\hat{p}+\rangle$ y $|p-\rangle$ de H^\dagger .

1.4 Amplitudes de colisión

1.4.1 Representaciones del operador de colisión

El operador de colisión “en la capa de energía” en una dimensión es una matriz dos por dos que depende de la representación seleccionada. En esta sección nos centraremos en las representaciones del operador S , pero el análisis para \hat{S} es análogo.

La representación de momentos del operador S toma la forma²

$$\langle p | S | p' \rangle = \delta(p - p') - 2i\pi \delta(E_p - E_{p'}) \langle p | T_{op}(+) | p' \rangle. \quad (1.60)$$

Si trabajamos en la capa de energía es conveniente eliminar la función delta de energía. Para ello se usa la relación

$$\delta(p - p') = \frac{|p|}{m} \delta(E_p - E_{p'}) \delta_{pp'}, \quad (1.61)$$

y se define la matriz S mediante

$$\langle p | S | p' \rangle = \frac{|p|}{m} \delta(E_p - E_{p'}) \langle p | S | p' \rangle, \quad (1.62)$$

²La deducción de esta expresión es de nuevo análoga al caso unitario. Se utiliza la relación entre S y los operadores de Möller, cuyos elementos de matriz en la base de ondas planas pueden ser escritos de forma integral para identificar finalmente la delta de Dirac en energías y el operador transición.

Usando (1.62) y (1.60),

$$\langle p|S|p'\rangle = \delta_{pp'} - \frac{2i\pi m}{|p|} \langle p|T_{op}(+)|p'\rangle, \quad p' = \pm p, \quad (1.63)$$

de forma que la matriz resultante tiene por elementos las amplitudes de reflexión y transmisión (1.59),

$$S = \begin{pmatrix} \langle p|S|p\rangle & \langle p|S| -p\rangle \\ \langle -p|S|p\rangle & \langle -p|S| -p\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T^l(p) & R^r(p) \\ R^l(p) & T^r(p) \end{pmatrix}. \quad (1.64)$$

Otra representación importante es aquella en la que la matriz de colisión es diagonal,

$$S_d = \begin{pmatrix} S_0(p) & 0 \\ 0 & S_1(p) \end{pmatrix}. \quad (1.65)$$

Las amplitudes $S_j(p)$, $j = 1, 2$, corresponden a los autovalores de la matriz (1.64), que se obtienen resolviendo la ecuación secular,

$$S_j = \frac{(T^l + T^r) + (-1)^j [(T^l - T^r)^2 + 4R^l R^r]^{\frac{1}{2}}}{2}. \quad (1.66)$$

La dependencia en p no se hace explícita para simplificar la notación. Es importante ser cuidadoso con la interpretación de la raíz ya que el radicando $(T^l - T^r)^2 + 4R^l R^r$ es un número complejo. En principio podríamos elegir un corte de rama y mantener el mismo criterio en todos los cálculos y aplicaciones. Pero la fase del radicando puede saltar de un lado al otro del corte de rama para ciertos valores de p , lo que implicaría discontinuidades en los valores propios S_j , y en una serie de fases y cantidades relacionadas; en definitiva, un tratamiento matemático engorroso. Para evitar este problema y mantener la continuidad entendemos la raíz $z^{1/2}$ en (1.66) como la función $|z|^{1/2} \exp[i \arg(z)/2]$ definida en una superficie de Riemann con dos hojas H_1 y H_2 ,

$$-\pi \leq \arg(z) \leq \pi, \quad (H_1) \quad (1.67)$$

$$\pi \leq \arg(z) \leq 3\pi, \quad (H_2) \quad (1.68)$$

Los estados propios correspondientes a estos autovalores en la base de ondas planas serán

$$\begin{aligned} |u_0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} (|p\rangle + \alpha_0 | -p\rangle), \\ |u_1\rangle &= \frac{-1}{\sqrt{2\hbar}} \left(\frac{1}{\alpha_1} |p\rangle + | -p\rangle \right), \end{aligned} \quad (1.69)$$

donde

$$\alpha_j = \frac{(-T^l + T^r) + (-1)^j [(T^l - T^r)^2 + 4R^l R^r]^{\frac{1}{2}}}{2R^r}. \quad (1.70)$$

La representación del operador de colisión en la base de ondas planas S (1.64), y la diagonal S_d (1.65) están relacionadas por la matriz C ,

$$C = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & \alpha_0^* \\ \frac{-1}{\alpha_1^*} & -1 \end{pmatrix}, \quad (1.71)$$

según

$$S_d = CSC^\dagger. \quad (1.72)$$

C es la matriz unitaria correspondiente al cambio de base entre la base de ondas planas y la base de autovectores de S (1.69).

1.4.2 Propiedades

A continuación estudiaremos las relaciones entre las amplitudes, ya sean $T^{l,r}$, $R^{r,l}$, $\hat{T}^{l,r}$ y $\hat{R}^{l,r}$ o S_j y \hat{S}_j , que se deducen de las relaciones entre los operadores de transición para H y H^\dagger (1.46), y de la generalización de la relación de unitariedad (1.38). A lo largo de esta subsección trataremos p como una variable compleja. Las amplitudes serán por tanto las continuaciones analíticas de las amplitudes de argumento real (1.59) y (1.66). Las regiones del plano p complejo donde exista la continuación analítica dependerán del potencial particular estudiado. En este punto simplemente supondremos su existencia y exploraremos las consecuencias de las relaciones (1.38) y (1.46).

De la relación (1.46) entre los operadores T_{op} y \hat{T}_{op} , considerando la definición de las amplitudes en términos del operador transición (1.59), se obtiene

$$\begin{aligned} (R^{l,r}(p))^* &= \hat{R}^{l,r}(-p^*), \\ (T^{l,r}(p))^* &= \hat{T}^{r,l}(-p^*), \end{aligned} \quad (1.73)$$

que para las amplitudes S_j , teniendo en cuenta la relación (1.66), queda de la forma

$$S_j(p) = \hat{S}_j^*(-p^*). \quad (1.74)$$

La generalización de la relación de unitariedad (1.38) en las distintas representaciones del operador colisión (1.64,1.65) proporciona otra serie de relaciones entre las amplitudes: para la representación en ondas planas,³

$$\begin{aligned} \hat{T}^{l*}(p^*)T^l(p) + \hat{R}^{l*}(p^*)R^l(p) &= 1, \\ \hat{T}^{l*}(p^*)R^r(p) + \hat{R}^{l*}(p^*)T^r(p) &= 0, \\ \hat{R}^{r*}(p^*)T^l(p) + \hat{T}^{r*}(p^*)R^l(p) &= 0, \\ \hat{R}^{r*}(p^*)R^r(p) + \hat{T}^{r*}(p^*)T^r(p) &= 1, \end{aligned} \quad (1.75)$$

y para la representación diagonal

$$\hat{S}_j^*(p^*)S_j(p) = 1. \quad (1.76)$$

³Recuérdese que si $f(z)$ es analítica en una región \mathcal{D} , $f^*(z^*)$ también lo será en \mathcal{D}^* .

Combinando (1.74) y (1.76),

$$S_j(p) = S_j^{-1}(-p). \quad (1.77)$$

Estas relaciones merecen un comentario especial. En el caso hermítico $\widehat{S}_j = S_j$, y de la expresión (1.76) se deduce que las amplitudes S_j tienen módulo 1 para valores reales del momento. En el caso no hermítico esto ya no es cierto, por lo que es conveniente introducir la siguiente notación para las amplitudes [8],

$$S_j(p) = \eta_j(p)e^{2i\delta_j(p)}. \quad (1.78)$$

A $\eta_j(p)$ se le denomina *parámetro de inelasticidad*, y $\delta_j(p)$ es el *desfasaje*. Ambas funciones son reales. El caso hermítico se recupera tomando $\eta_j = 1$. Por otro lado, la relación (1.77) en $p = 0$ toma la forma

$$S_j(0) = S_j^{-1}(0). \quad (1.79)$$

La igualdad anterior implica que $S_j(0) = \pm 1$, y por tanto, $\eta_j(0) = 1$, lo que tendrá importantes repercusiones en el comportamiento de los potenciales absorbentes para momentos en torno al origen, como se detalla en la última sección de este capítulo.

1.4.3 Singularidades de $S_j(p)$: Estados ligados, resonancias

Uno de los aspectos más estudiados de las colisiones con potenciales no hermíticos es el significado de los polos de $S_j(p)$ en el plano p de momentos complejos y, en particular, sus desplazamientos cuando a un potencial real se le añade una parte imaginaria [9,10,11]. En el caso unitario los polos de las amplitudes $S_j(p)$ pueden clasificarse según su posición en el plano: los polos en el eje imaginario positivo corresponden a estados ligados, aquellos situados en el cuarto cuadrante a resonancias, y los situados en el tercer cuadrante a antirresonancias. El caso no unitario presenta nuevas posibilidades: polos en el primer cuadrante, que corresponden a estados cuya norma crece exponencialmente con el tiempo, y polos en el segundo cuadrante, que corresponden a estados cuya norma decrece con el tiempo [9]. Los polos en el semiplano imaginario positivo están a la primera hoja de Riemann de la energía y por tanto al espectro puntual de H . Eso permite identificar el polo como el momento correspondiente a una de las energías de los estados $|E_k\rangle$.

1.5 Simetrías y sus consecuencias

La invarianza del sistema ante las operaciones de simetría permite obtener relaciones adicionales entre las amplitudes que, aunque no son generales, simplifican el análisis de casos tan comunes como el de potenciales simétricos. En particular, analizaremos las consecuencias de la

invarianza ante transformaciones de paridad y ante el equivalente a la invarianza temporal para el caso no unitario. En esta sección nos centraremos en los operadores correspondientes a H . Para H^\dagger las relaciones se obtienen utilizando (1.23).

1.5.1 Inversión temporal

Denotemos por Θ el **operador de inversión temporal**. Se trata de un operador *antilineal* y *antiunitario*,

$$\Theta c|\psi\rangle = c^*\Theta|\psi\rangle, \quad (1.80)$$

$$\Theta\Theta^\dagger = \Theta^\dagger\Theta = 1_{op}, \quad (1.81)$$

y su actuación sobre los vectores propios $|x\rangle$ y $|p\rangle$ viene dada por

$$\begin{aligned} \Theta|x\rangle &= |x\rangle, \\ \Theta|p\rangle &= |-p\rangle. \end{aligned} \quad (1.82)$$

Al ser antilineal, la acción del adjunto será

$$\langle\phi, \Theta^\dagger\psi\rangle = \langle\Theta\phi, \psi\rangle^*. \quad (1.83)$$

(Con operadores antilineales es conveniente, para evitar errores, usar la notación matemática de los elementos de matriz en vez de la de Dirac.)

En el caso unitario el hamiltoniano del sistema conmuta con el operador de inversión temporal. Esto permite relacionar los operadores de Möller Ω_\pm entre ellos y el operador colisión con su conjugado hermítico [4]. Para hamiltonianos del tipo (1.1), la conmutación entre Θ y H implica la siguiente igualdad entre los elementos de matriz del potencial ($[H_0, \Theta] = 0$),

$$\langle x'|V|x\rangle = \langle x|V^\dagger|x'\rangle. \quad (1.84)$$

Esta relación no se cumple para ninguno de los potenciales bajo estudio (1.5,1.6) salvo en el caso hermítico $V = V^\dagger$. Luego en general los sistemas considerados no serán invariantes bajo transformaciones de inversión temporal. Sin embargo, para obtener una relación similar a la del caso unitario entre S y S^\dagger , es suficiente exigir que

$$\Theta H = H^\dagger \Theta. \quad (1.85)$$

Utilizando esta relación y la definición de los operadores de Möller se encuentra

$$\Theta\Omega_\pm = \Omega_\mp\Theta, \quad (1.86)$$

que permite mostrar, utilizando la relación entre el operador colisión y los operadores de Möller (1.36), la siguiente igualdad

$$S = \Theta^\dagger S^\dagger \Theta. \quad (1.87)$$

Si en la expresión anterior tomamos elementos de matriz en la base de las ondas planas, se obtiene

$$\langle p|S|p'\rangle = \langle -p'|S|-p\rangle. \quad (1.88)$$

Teniendo en cuenta que $p' = \pm p$, esto implica

$$T^l = T^r. \quad (1.89)$$

En los sistemas que verifiquen la condición (1.85) la amplitud de transmisión se denotará simplemente T . Si la estructura del hamiltoniano es (1.1), (1.85) es equivalente a exigir

$$\langle x|V|x'\rangle = \langle x'|V|x\rangle, \quad (1.90)$$

que se verificará en particular para potenciales locales (1.5) y potenciales separables (1.6) en los que $\chi(x) = \langle x|\chi\rangle$ sea una función real. La mayoría de potenciales estudiados en este trabajo serán locales, por lo que la propiedad (1.89) permite simplificar notablemente muchas de las expresiones presentadas en secciones anteriores. En este caso, α_j , definido en (1.70), será simplemente

$$\alpha_j = (-1)^j \frac{(R^r R^l)^{1/2}}{R^r}. \quad (1.91)$$

De la relación $C^\dagger C = 1$ se deduce que *los módulos de R^r y R^l son iguales*. Es conveniente definir

$$e^{2i\gamma(p)} = \frac{R^r}{[R^r R^l]^{1/2}}, \quad (1.92)$$

donde $\gamma(p)$ es una función real. La matriz C tendrá por tanto la estructura

$$C = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & e^{2i\gamma} \\ e^{-2i\gamma} & -1 \end{pmatrix}. \quad (1.93)$$

Con ello la relación entre las amplitudes de la representación en ondas planas y las de la representación diagonal del operador colisión será

$$\begin{aligned} T &= \frac{S_0 + S_1}{2} = \frac{\eta_0 e^{2i\delta_0} + \eta_1 e^{2i\delta_1}}{2}, \\ R^l &= e^{-2i\gamma} \frac{S_0 - S_1}{2} = e^{-2i\gamma} \frac{\eta_0 e^{2i\delta_0} - \eta_1 e^{2i\delta_1}}{2}, \\ R^r &= e^{2i\gamma} \frac{S_0 - S_1}{2} = e^{2i\gamma} \frac{\eta_0 e^{2i\delta_0} - \eta_1 e^{2i\delta_1}}{2}. \end{aligned} \quad (1.94)$$

Por último, los estados propios de S , (1.69), tendrán la siguiente dependencia con las ondas planas

$$\begin{aligned} |u_0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|p\rangle + e^{-2i\gamma}|-p\rangle), \\ |u_1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(e^{2i\gamma}|p\rangle - |-p\rangle). \end{aligned} \quad (1.95)$$

Se puede mostrar que los vectores correspondientes a \widehat{S} , $|\widehat{u}_j\rangle$, son iguales a los definidos anteriormente. La relación entre las amplitudes de reflexión con y sin acento que se deducen de la unitariedad generalizada (1.75),

$$\widehat{R}^{r*} R^r = \widehat{R}^{l*} R^l, \quad (1.96)$$

permite siempre elegir las fases de las amplitudes de reflexión de modo que

$$\phi_r - \phi_l = \widehat{\phi}_r - \widehat{\phi}_l, \quad (1.97)$$

o de forma equivalente, $2\phi_r - \phi_r - \phi_l = 2\widehat{\phi}_r - \widehat{\phi}_r - \widehat{\phi}_l$. El término de la izquierda es 4γ (módulo 2π) y el término de la derecha $4\widehat{\gamma}$ (módulo 2π) lo que implica que podemos siempre elegir la relación sencilla⁴

$$\gamma(p) = \widehat{\gamma}(p). \quad (1.102)$$

1.5.2 Paridad

La actuación del **operador paridad**, Π , sobre los vectores impropios $|x\rangle$ y $|p\rangle$ viene dada por

$$\begin{aligned} \Pi|x\rangle &= |-x\rangle \\ \Pi|p\rangle &= |-p\rangle. \end{aligned} \quad (1.103)$$

El sistema será invariante ante transformaciones de paridad si el hamiltoniano, H , y Π conmutan. Si esto sucede, los operadores de Möller y el operador de colisión también conmutarán con Π , lo

⁴Otras propiedades de γ serán necesarias posteriormente para generalizar el teorema de Levinson. Puede mostrarse, usando (1.73), y para p real, que

$$2\gamma(-p) = -2\gamma(p) + 2n\pi, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (1.98)$$

y por tanto

$$\cos[2\gamma(-p)] = \cos[2\gamma(p)] \quad (1.99)$$

Los posibles valores de γ en el origen son,

$$\gamma(0) = n\pi/2, \quad (1.100)$$

lo que implica que

$$\cos[2\gamma(0)] = \pm 1. \quad (1.101)$$

En nuestro formalismo no aparece el caso $\cos[2\gamma(0)] = 0$, que considera en principio M. Sassoli de Bianchi, y que tiene que descartar a posteriori por llevar a una contradicción [14].

que se comprueba inmediatamente sin más que considerar la dependencia de los primeros con el hamiltoniano (1.27,1.36). Luego en un sistema invariante ante la transformación de paridad,

$$[\Pi, H] = [\Pi, \Omega_+] = [\Pi, \Omega_-^\dagger] = [\Pi, S] = 0. \quad (1.104)$$

Una consecuencia inmediata de la conmutación entre Π y S es la siguiente relación,

$$\langle -p|S|p' \rangle = \langle p|S| -p' \rangle, \quad (1.105)$$

donde $p' = \pm p$, o de forma equivalente

$$\begin{aligned} T^l(p) &= T^r(p) \\ R^r(p) &= R^l(p). \end{aligned} \quad (1.106)$$

En este caso los superíndices r y l son superfluos y denotaremos las amplitudes de reflexión y transmisión simplemente por R y T .

Si el hamiltoniano tiene la estructura $H_0 + V$ (1.1), el sistema será invariante bajo transformaciones de paridad si $[\Pi, V] = 0$. (Téngase en cuenta que $[H_0, \Pi] = 0$.) Esta condición implica la siguiente igualdad

$$\langle -x|V|x' \rangle = \langle x|V| -x' \rangle, \quad (1.107)$$

que se verificará para potenciales locales simétricos ($\langle x'|V|x \rangle = V(x)\delta(x-x') = V(-x)\delta(x-x')$), independientemente de si son hermíticos o no, y para potenciales separables (1.6) para los que $\chi(x) = \langle x|\chi \rangle$ sea una función de x simétrica o antisimétrica real. Para los potenciales de este tipo las expresiones de las secciones anteriores se simplifican enormemente. La matriz C , las relaciones de T y R con S_0 y S_1 y los vectores propios de S se obtienen tomando $\gamma = 0$ en las expresiones (1.93,1.94,1.95). Así,

$$C = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}, \quad (1.108)$$

mientras que la relación entre las amplitudes queda

$$\begin{aligned} T &= \frac{S_0 + S_1}{2} = \frac{\eta_0 e^{2i\delta_0} + \eta_1 e^{2i\delta_1}}{2}, \\ R &= \frac{S_0 - S_1}{2} = \frac{\eta_0 e^{2i\delta_0} - \eta_1 e^{2i\delta_1}}{2}. \end{aligned} \quad (1.109)$$

Por último, los estados propios de S (1.69) tendrán la siguiente dependencia con las ondas planas

$$\begin{aligned} |u_0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|p\rangle + |-p\rangle), \\ |u_1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|p\rangle - |-p\rangle). \end{aligned} \quad (1.110)$$

Obsérvese que en este caso los estados $|u_j\rangle$ no son más que las combinaciones simétrica ($j = 0$) y antisimétrica ($j = 1$) de las ondas planas [12].

1.6 Teorema de Levinson

El teorema de Levinson en el caso unitario establece una relación entre el desfase (1.78) en el origen de momentos, $\delta_j(0)$, y el número de estados ligados del sistema. A pesar de ser uno de los asuntos más estudiados en colisiones unitarias, pocos trabajos analizan el caso de potenciales no hermíticos. Por ejemplo, en la ref. [11] se analiza el caso de colisiones en el espacio (3D), y en la ref. [13] el caso de colisiones en una dimensión pero para un tipo particular de potenciales que dependen linealmente del momento. En esta sección generalizaremos el teorema para potenciales no hermíticos en una dimensión siguiendo la deducción realizada por M. Sassoli de Bianchi [14] para potenciales unitarios.⁵

Nos restringiremos al caso de potenciales para los que al menos se verifique la condición $T^r = T^l$, es decir, potenciales que cumplan la condición (1.90) o sean simétricos (1.107). Será conveniente exigir dos condiciones adicionales. La primera, que el potencial tenga *soporte finito*, es decir,

$$\langle x|V|x' \rangle = \begin{cases} 0, & \text{si } x < x_- \text{ ó } x' < x_- \\ 0, & \text{si } x > x_+ \text{ ó } x' > x_+. \end{cases} \quad (1.111)$$

La segunda condición es que el comportamiento de las amplitudes para $p \rightarrow \infty$ sea

$$S_k = 1 + O\left(\frac{1}{p}\right), \quad k = 0, 1. \quad (1.112)$$

(Para energías altas (p grandes), el potencial apenas afectará la dinámica del sistema, y el comportamiento será igual al del caso libre.)

De hecho, es de esperar que la primera condición pueda relajarse, y hemos comprobado con modelos concretos (por ejemplo, el potencial separable del capítulo 2) que no es estrictamente necesaria, aunque la mantendremos por simplicidad.

La condición (1.112) exige que las amplitudes diagonales para $p \rightarrow \infty$ sean iguales a la unidad, y por tanto, $\eta_j = 1$, $j = 0, 1$ (1.78). El valor de la fase quedará sin embargo indeterminado en una cantidad $2n\pi$, con n entero. Convencionalmente se tomará

$$\lim_{p \rightarrow \infty} \delta(p) = 0. \quad (1.113)$$

En la primera parte de esta sección introduciremos las resoluciones del operador unidad en términos de los estados $|u_j\rangle$ (1.95, 1.110), y en términos de sus estados de colisión que se definirán posteriormente. A continuación se presentará el teorema de Levinson para potenciales que cumplan (1.90), y por último se particularizará para potenciales simétricos (1.107).

⁵En los últimos años existe un interés especial en el teorema de Levinson para colisiones en una dimensión (véase el artículo [15] y las referencias citadas en él).

1.6.1 Relaciones de cierre

Los estados $|u_j\rangle$, $j = 0, 1$ (1.95, 1.110) son combinaciones lineales de ondas planas $|p\rangle$, $|-p\rangle$, con $p > 0$, linealmente independientes entre sí. Por lo tanto forman una base completa,

$$\sum_{j=0,1} \int_0^\infty dp |u_j\rangle \langle u_j| = 1_{op}. \quad (1.114)$$

Para potenciales simétricos la relación no será más que la suma sobre las combinaciones pares e impares de las ondas planas. En ese caso denotaremos los vectores (1.110) como $|u_j^0\rangle$, de forma que

$$\sum_{j=0,1} \int_0^\infty dp |u_j^0\rangle \langle u_j^0| = 1_{op}. \quad (1.115)$$

Si introducimos la expresión (1.114) en la relación de completitud asintótica (1.32), denotando por $|u_{j+}\rangle$ y $|\hat{u}_{j+}\rangle$ los estados de colisión resultantes de la actuación de los operadores de Möller Ω_+ y $\hat{\Omega}_+$ sobre los estados $|u_j\rangle$ (acción que queda definida por la relación de éstos con las ondas planas y la actuación de los operadores de Möller sobre estas últimas), y utilizado la forma del proyector sobre los estados del espectro puntual de H (1.33), obtenemos

$$\sum_{k=1}^N |E_k\rangle \langle \hat{E}_k| + \sum_{j=0,1} \int_0^\infty dp |u_{j+}\rangle \langle \hat{u}_{j+}| = 1_{op}, \quad (1.116)$$

donde N es el número total de estados discretos. Las resoluciones de la unidad (1.115) y (1.116) serán el punto de partida para la demostración del teorema de Levinson. Además, haremos uso de la forma asintótica de los estados $|u_{j+}\rangle$, que se obtiene fácilmente a partir de las expresiones de los estados $|u_j\rangle$ multiplicando en cada zona asintótica (derecha o izquierda) la onda plana saliente ($|p\rangle$ a la derecha y $|-p\rangle$ a la izquierda) por la amplitud S_j , y dejando inalterada la onda entrante con su correspondiente factor,

$$u_{j+}(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} [S_j e^{i(px/\hbar + \beta + \gamma)} + (-1)^j e^{-i(px/\hbar + \beta - \gamma)}], & x \geq x_+ \\ \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} [e^{i(px/\hbar + \beta + \gamma)} + (-1)^j S_j e^{-i(px/\hbar + \beta - \gamma)}], & x \leq x_-, \end{cases} \quad (1.117)$$

donde denotamos $u_{j+}(x) = \langle x | u_{j+} \rangle$ y

$$\beta_\pm = 1 \pm (-1)^{j+1}. \quad (1.118)$$

En el caso de potenciales simétricos, la dependencia asintótica se obtiene tomando $\gamma = 0$, mientras que la dependencia asintótica de las funciones $u_j^0(x) = \langle x | u_j^0 \rangle$ se obtiene tomando $S_j = \gamma = 0$ en las fórmulas anteriores.

1.6.2 Caso general ($T^l = T^r$)

Si restamos las expresiones (1.116)-(1.115), se obtiene

$$\sum_{j=0,1}^{\infty} \int_0^{\infty} dp (|u_{j+}\rangle\langle\hat{u}_{j+}| - |u_j^0\rangle\langle u_j^0|) = - \sum_{k=1}^N |E_k\rangle\langle\hat{E}_k|. \quad (1.119)$$

Si los elementos de matriz diagonales en posiciones de la expresión anterior se integran entre $x = -r$ y $x = r$, donde $\pm r$ son dos puntos en las regiones asintóticas de la derecha y la izquierda respectivamente (finalmente tomaremos el límite $r \rightarrow \infty$),

$$\int_0^{\infty} dp \frac{p}{m} \text{Tr} \tau(p, r) = - \sum_{k=1}^N \int_{-r}^r dx \langle x|E_k\rangle\langle\hat{E}_k|x\rangle. \quad (1.120)$$

$\text{Tr} \tau$ denota la traza del operador τ ,

$$\text{Tr} \tau(p, r) = \frac{m}{p} \sum_{j=0,1} \int_{-r}^r dx [u_{j+}(x)\hat{u}_{j+}^*(x) - u_j^{0*}(x)u_j^0(x)]. \quad (1.121)$$

Para el caso unitario τ es el *operador tiempo de retardo* [14].

Considerando que los estados $|E_k\rangle$ están normalizados, la integral del miembro izquierdo de (1.120), cuando $r \rightarrow \infty$, será igual a menos el número de estados ligados, $-N$. En el caso de potenciales locales, para resolver la integral en posiciones del primer miembro se utilizará la siguiente relación entre las funciones u y \hat{u} ,

$$u_{j+}(x)\hat{u}_{j+}^*(x) = \frac{\hbar^2}{2p} \frac{\partial}{\partial x} f_j(x), \quad (1.122)$$

donde

$$f_j(x) = \frac{\partial}{\partial x} \hat{u}_{j+}^*(x) \frac{\partial}{\partial p} u_{j+}(x) - \hat{u}_{j+}^* \frac{\partial}{\partial p} \frac{\partial}{\partial x} u_{j+}(x). \quad (1.123)$$

Esta relación se obtiene considerando que las funciones u y \hat{u} son soluciones de la ecuación estacionaria de Schrödinger (1.10) para V y V^\dagger respectivamente. Diferenciando la ecuación de Schrödinger para u_{j+} con respecto al momento, multiplicando por \hat{u}_{j+}^* , y usando la ecuación de Schrödinger para esta última función, se obtiene el resultado (1.122). Para $u^0(x)$ se verifican relaciones similares a (1.122,1.123), que se obtienen simplemente sustituyendo u_{j+} y \hat{u}_{j+} por u_j^0 . Para potenciales no locales aparece un término adicional en la ecuación (1.122). Sin embargo, este término no contribuye a la integral (véase el apéndice A), por lo que podemos usar el mismo tratamiento también en este caso. En lo sucesivo para simplificar la notación denotaremos mediante una prima ($'$) la derivada parcial respecto al momento.

El resultado de la integración en (1.121) para cada j será por tanto proporcional a

$$\begin{aligned} f_j|_{-r}^r - f_j^0|_{-r}^r &= \frac{1}{2\pi\hbar^2} \left\{ 4p\delta_j' - \frac{2ip\eta_j'}{\eta_j} + (-1)^{j+1} 2 \text{sen}(2pr/\hbar) \right. \\ &\quad \left. + i \cos(2\gamma) [(-1)^{j+1} S_j e^{2ipr/\hbar} + (-1)^j S_j^{-1} e^{-2ipr/\hbar}] \right\}, \end{aligned} \quad (1.124)$$

que se obtiene, después de un cálculo muy laborioso aunque directo, haciendo uso de las relaciones entre las amplitudes S_j y \hat{S}_j (1.76), y entre γ y $\hat{\gamma}$ (1.102).

Por tanto (1.121) tendrá la forma,

$$\begin{aligned} \text{Tr } \tau(p, r) = & \frac{m}{p} \left\{ \frac{\delta'_0 + \delta'_1}{\pi} - \frac{i}{2\pi} \left(\frac{\eta'_0}{\eta_0} + \frac{\eta'_1}{\eta_1} \right) \right. \\ & + \frac{\cos(2\gamma)}{\pi p} \text{sen} \left(\frac{2pr}{\hbar} \right) \frac{S_0 + S_0^{-1} - S_1 - S_1^{-1}}{4} \\ & \left. + \frac{\cos(2\gamma)}{\pi p} \cos \left(\frac{2pr}{\hbar} \right) \frac{S_0 - S_0^{-1} - S_1 + S_1^{-1}}{4i} \right\}. \end{aligned} \quad (1.125)$$

Discutamos separadamente las integrales en momentos (1.120) de los cuatro términos del miembro derecho de (1.125). La integral del primer término, con el convenio (1.113), será

$$-\frac{\delta_0(0) + \delta_1(0)}{\pi}. \quad (1.126)$$

La integral del segundo término dará lugar a funciones del tipo $\ln \eta_j(p)$ evaluadas en el origen e infinito. De la propiedad (1.77) se deduce la nulidad en el origen de estas funciones y de la condición (1.112) la nulidad en el infinito; por tanto la integral del segundo sumando será nula.

En la integral del tercer término aprovecharemos que la función $\frac{\text{sen}(2pr/\hbar)}{\pi p}$ se comporta, en el límite $r \rightarrow \infty$, como una delta de Dirac. Para ello es necesario extender los límites de la integral al intervalo $(-\infty, \infty)$. Esto es posible debido a que el integrando es par, lo que se comprueba fácilmente sin más que hacer uso de (1.77) y (1.99). Con estas consideraciones, teniendo en cuenta la condición (1.112) más la propiedad $\eta_j(0) = 1$, y la relación entre S_j y la fase δ_j (1.78), el resultado será⁶

$$\frac{\cos[2\gamma(0)]}{2} \left(\text{sen}^2 \delta_1(0) - \text{sen}^2 \delta_0(0) \right). \quad (1.127)$$

Como la traza de τ y las integrales que acabamos de discutir son finitas, la integral del cuarto término debe también existir. La integrabilidad de ese término en el origen implica, debido a la presencia del término p^{-1} del integrando, la nulidad del numerador en $p = 0$,

$$\cos[2\gamma(0)] \{ \text{sen}[\delta_0(0) - \delta_1(0)] \cos[\delta_0(0) + \delta_1(0)] \} = 0. \quad (1.128)$$

Como la función que multiplica al coseno oscilante $\cos(2pr/\hbar)$ decae más rápido que $1/|p|$ cuando $p \rightarrow \infty$, puede aplicarse el lema de Riemann-Lebesgue, lo que permite mostrar que la integral tiende a cero cuando $r \rightarrow \infty$.

Reuniendo todos los resultados, la ecuación (1.120) queda de la forma,

$$\delta_0(0) + \delta_1(0) = \pi N + \frac{\pi \cos[2\gamma(0)]}{2} \left(\text{sen}^2 \delta_1(0) - \text{sen}^2 \delta_0(0) \right), \quad (1.129)$$

⁶La relación trigonométrica $\text{sen}^2(\theta) = 4^{-1}[2 - \exp(2i\theta) - \exp(-2i\theta)]$ facilita el cálculo.

que, junto con la condición (1.128), permite una discusión similar a la del caso unitario [14]. Debemos considerar el comportamiento de las soluciones de la ecuación estacionaria de Schrödinger (1.10) cuando $p = 0$. Para un momento no nulo, la ecuación estacionaria admite dos soluciones linealmente independientes (por ejemplo, $\langle x|p+\rangle$ y $\langle x|-p+\rangle$, con $p > 0$). En el límite de $p \rightarrow 0$, estas soluciones, en el caso de existir, son constantes en las regiones asintóticas, pero no son linealmente independientes. Por tanto existen unas relaciones entre las amplitudes de reflexión y transmisión para $p = 0$: los coeficientes $R^l(0)$ y $R^r(0)$ deben ser iguales (los denotaremos simplemente como $R(0)$), y además debe verificarse

$$\pm T(0) = 1 + R(0). \quad (1.130)$$

Si incluimos la relación entre los coeficientes (1.75) para $p = 0$, $2R(0)T(0) = 0$, las posibilidades compatibles con la expresión anterior son:

- $T(0) = 0$ y $R(0) = -1$, que corresponde a la solución trivial de la homogénea (no existiría estado de energía cero) y a probabilidad de reflexión unidad en el umbral ($p = 0$).
- $T(0) = \pm 1$ y $R(0) = 0$, que corresponde a la existencia de un estado de energía cero (que se comporta asintóticamente como una constante) y probabilidad de reflexión nula en el umbral.

El comportamiento de estas soluciones permite desechar algunas de las posibilidades de (1.129) compatibles con (1.128). Recordemos que el $\cos[2\gamma(0)]$ sólo puede tomar los valores ± 1 (1.101). Para que se cumpla (1.128) una de las posibilidades es que $\cos[\delta_0(0) + \delta_1(0)] = 0$, y para que sea compatible con (1.129) los valores del desfase deben ser:⁷

- Si $\cos[2\gamma(0)] = 1$,

$$\begin{aligned} \delta_0(0) &= (m - 1/2)\pi, \\ \delta_1(0) &= n\pi. \end{aligned} \quad (1.131)$$

- Si $\cos[2\gamma(0)] = -1$,

$$\begin{aligned} \delta_0(0) &= m\pi, \\ \delta_1(0) &= (n - 1/2)\pi. \end{aligned} \quad (1.132)$$

⁷En principio existen dos posibilidades más, pero se descartan ya que dan lugar a dos estados de energía cero linealmente independientes.

En ambos casos n y m son números enteros sujetos a la restricción $n + m = N$. De las relaciones (1.94) se encuentra que corresponden a probabilidad reflexión unidad para $p = 0$. La otra posibilidad⁸ es que $\text{sen}^2 \delta_1(0) - \text{sen}^2 \delta_0(0) = 0$. En ese caso⁹ (1.129) tiene la forma $\delta_0(0) + \delta_1(0) = N\pi$ y son compatibles los siguientes valores del desfase,

$$\begin{aligned}\delta_0(0) &= m\pi, \\ \delta_1(0) &= n\pi,\end{aligned}\tag{1.133}$$

y

$$\begin{aligned}\delta_0(0) &= (m \pm 1/2)\pi, \\ \delta_1(0) &= (n \pm 1/2)\pi.\end{aligned}\tag{1.134}$$

De nuevo n y m son enteros con la restricción $n + m = N$. De las relaciones con las amplitudes de reflexión y transmisión (1.94) se encuentra que corresponden a casos de probabilidad de reflexión nula para $p = 0$.

1.6.3 Caso simétrico

El teorema de Levinson para potenciales simétricos es más sencillo al permitir discutir separadamente el caso par e impar. Denotemos por P_j el proyector sobre el espacio par, $j = 0$, o impar, $j = 1$. La paridad bien definida de los estados $|u_j+\rangle$ y $|E_k\rangle$ permite desarrollar estos proyectores como

$$P_j = \sum_{k=1}^{N_j} |E_{j,k}\rangle \langle \widehat{E}_{j,k}| + \int_0^\infty dp |u_j+\rangle \langle \widehat{u}_j+| \tag{1.135}$$

En esta expresión denotamos por $|E_{j,k}\rangle$ los N_j estados del espectro puntual de simetría par, $j = 0$, o impar, $j = 1$.

Para el caso libre,

$$P_j^0 = \int_0^\infty dp |u_j^0\rangle \langle u_j^0|. \tag{1.136}$$

Restando (1.135)-(1.136), obtendremos dos relaciones independientes, una para los estados pares y otra para los impares, de la forma,

$$\int_0^\infty dp (|u_j+\rangle \langle \widehat{u}_j+| - |u_j^0\rangle \langle u_j^0|) = - \sum_{k=1}^{N_j} |E_{j,k}\rangle \langle \widehat{E}_{j,k}| \tag{1.137}$$

⁸La posibilidad de que ambos términos sean nulos (sen y cos) no es compatible con (1.129).

⁹Se usa la relación $\text{sen}^2 \alpha - \text{sen}^2 \beta = \text{sen}(\alpha - \beta) \text{sen}(\alpha + \beta)$.

Si procedemos como en la sección anterior, tomando elementos diagonales de matriz e integrando,

$$\int_0^\infty dp \frac{p}{m} \text{Tr } \tau_j(p, r) = - \sum_{k=1}^{N_j} \int_{-r}^r dx \langle x | E_{j,k} \rangle \langle \hat{E}_{j,k} | x \rangle, \quad (1.138)$$

donde

$$\text{Tr } \tau_j(p, r) = \frac{m}{p} \int_{-r}^r dx [u_{j+}(x) \hat{u}_{j+}^*(x) - u_j^{0*}(x) u_j^{0*}(x)], \quad (1.139)$$

Siguiendo un procedimiento completamente análogo al de la sección anterior se obtiene

$$\begin{aligned} \text{Tr } \tau_j(p, r) &= \frac{m}{p} \left[\frac{\delta_j'}{\pi} - \frac{i}{2\pi} \frac{\eta_j'}{\eta_j} \right. \\ &+ \frac{(-1)^{j+1}}{\pi p} \text{sen} \left(\frac{2pr}{\hbar} \right) \frac{2 - S_j - S_j^{-1}}{4} \\ &\left. + \frac{(-1)^j}{\pi p} \cos \left(\frac{2pr}{\hbar} \right) \frac{S_j - S_j^{-1}}{4i} \right], \end{aligned} \quad (1.140)$$

por lo que el resultado de las integrales (1.138) en el límite $r \rightarrow \infty$ será

$$\delta_j(0) = \pi N_j + (-1)^{j+1} \frac{\pi}{2} \text{sen}^2 \delta_j(0), \quad (1.141)$$

para $j = 0, 1$. El equivalente a la condición (1.128) será en este caso

$$\text{sen} 2\delta_j(0) = 0. \quad (1.142)$$

La ecuación (1.141) y la condición (1.142) permiten una discusión del comportamiento del desfase en el origen análoga de nuevo al caso unitario. Ahora las posibilidades compatibles con las soluciones en el umbral de la ecuación estacionaria de Schrödinger son:

- $\delta_0(0) = (N_0 - 1/2)\pi$ y $\delta_1(0) = N_1\pi$, que por la relación (1.109) entre los desfases y las amplitudes de reflexión y transmisión corresponde a $T(0) = 0$ y $R(0) = -1$ (probabilidad de reflexión unidad en el umbral).
- $\delta_0(0) = N_0\pi$ y $\delta_1(0) = N_1\pi$, que corresponde a $T(0) = 1$ y $R(0) = 0$ (estado de energía cero par).
- $\delta_0(0) = (N_0 - 1/2)\pi$ y $\delta_1(0) = (N_1 + 1/2)\pi$, que corresponde a $T(0) = -1$ y $R(0) = 0$ (estado de energía cero impar).

1.7 Dependencia temporal

La evolución temporal de un estado arbitrario, $|\psi(0)\rangle$, vendrá dada por la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo (1.7), que tiene como solución formal

$$|\psi(t)\rangle = U(t)|\psi(0)\rangle, \quad (1.143)$$

donde $U(t)$ es el operador de evolución (1.21) y $|\psi(0)\rangle$ es el estado en el instante inicial, que se elige convencionalmente como $t = 0$. Puede corresponder al instante de preparación en un experimento, o al instante en el que se comienza el cálculo en simulaciones numéricas. La teoría de colisiones expuesta en secciones anteriores permite relacionar la evolución de ψ con los estados estacionarios de H (1.52), y reducir $\langle x|\psi(t)\rangle$ al cálculo de una integral simple. Si introducimos la resolución de la unidad (1.53) en la ecuación (1.143), suponiendo que $|\psi\rangle$ pertenece al subespacio de estados de colisión, obtenemos

$$\langle x|\psi(t)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dp \langle x|p+\rangle e^{-iE_p t/\hbar} \langle \hat{p} + |\psi(0)\rangle. \quad (1.144)$$

Supongamos además que el estado inicial se encuentra *a la izquierda* del potencial, sin solapar significativamente con él. Si utilizamos la relación de isometría (1.31), el solapamiento entre el estado de colisión y ψ puede escribirse como

$$\langle \hat{p} + |\psi(0)\rangle = \langle p|\hat{\Omega}_+^\dagger \Omega_+ |\phi_{ent}(0)\rangle = \langle p|\phi_{ent}(0)\rangle, \quad (1.145)$$

donde $|\phi_{ent}(t)\rangle$ es la asíntota de entrada del estado de colisión $|\psi(t)\rangle$. Como $\psi(0)$ se encuentra en la zona asíntótica, la tentación es identificar $\langle p|\phi_{ent}(0)\rangle$ con $\langle p|\psi(0)\rangle$. Sin embargo, J. G. Muga, S. Brouard y R. F. Snider [16] demostraron que, aunque el estado se encuentre en una zona asíntótica, esta identificación es en general errónea debido a la presencia de momentos negativos. Para analizar correctamente el factor $\langle \hat{p} + |\psi(0)\rangle$ debemos tener en cuenta el comportamiento del estado $\langle \hat{p} + |$ para $x \rightarrow -\infty$,

$$\langle \hat{p} + |\psi(0)\rangle = \begin{cases} \langle p|\psi(0)\rangle + \hat{R}^l(p)^* \langle -p|\psi(0)\rangle, & p > 0 \\ \hat{T}^r(-p)^* \langle p|\psi(0)\rangle, & p < 0. \end{cases} \quad (1.146)$$

Usando las relaciones entre amplitudes (1.73) en (1.146), y separando la integral (1.144) en contribuciones de momentos positivos y negativos, se encuentra que

$$\begin{aligned} \langle x|\psi(t)\rangle &= \int_0^{\infty} dp \langle x|p+\rangle e^{-iE_p t/\hbar} \langle p|\psi(0)\rangle \\ &+ \int_{-\infty}^0 dp e^{-iE_p t/\hbar} \langle p|\psi(0)\rangle [T^l(p)\langle x|p+\rangle + R^l(p)\langle x|-p+\rangle]. \end{aligned} \quad (1.147)$$

La cantidad entre corchetes, [...], debe ser la amplitud de un estado propio del hamiltoniano H , puesto que es una combinación lineal de dos estados propios. Podemos identificarlo examinando su comportamiento asintótico a derecha e izquierda,

$$[...] \rightarrow \begin{cases} \langle x|p\rangle + R^l(p)\langle x|-p\rangle, & x \rightarrow -\infty \\ T^l(p)\langle x|p\rangle, & x \rightarrow \infty. \end{cases} \quad (1.148)$$

Recuérdese que en estas expresiones p es negativo. El estado propio puede por tanto identificarse con $|\widehat{p}-\rangle$, ($p < 0$), que constituye la continuación analítica de $|p+\rangle$, ($p > 0$) (obsérvese que la dependencia asintótica tiene la misma *forma* para ambos estados, pero su significado físico es diferente puesto que los términos *entrantes* de un caso son *salientes* en el otro). Esta identificación nos permite escribir expresiones sencillas para la función de onda en las zonas asintóticas.

En particular, para $x \rightarrow \infty$,

$$\langle x|\psi(t)\rangle \sim \int_{-\infty}^{\infty} dp T^l(p)\langle x|p\rangle e^{-iE_p t/\hbar} \langle p|\psi(0)\rangle. \quad (1.149)$$

En contra de la intuición clásica, ha de incluirse en la integral la contribución de momentos negativos, que formalmente se obtiene mediante la continuación analítica de la amplitud de reflexión. De forma similar, para $x \rightarrow -\infty$,

$$\langle x|\psi(t)\rangle \sim \int_{-\infty}^{\infty} dp [\langle x|p\rangle + \langle x|-p\rangle R^l(p)] e^{-iE_p t/\hbar} \langle p|\psi(0)\rangle. \quad (1.150)$$

En esta expresión se considera la contribución tanto de la parte incidente como de la reflejada a la función de ondas. Si $\langle p|\psi(0)\rangle$ es nula para momentos negativos, para tiempos suficientemente grandes sólo permanecerá a la izquierda del potencial la parte reflejada del estado, que vendrá dada por el término $[\langle x|-p\rangle R^l(p)]$. Bajo las condiciones anteriores se puede expresar de forma sencilla las probabilidades de reflexión (\mathcal{R}) y transmisión (\mathcal{T}) para ψ . Intercambiando el orden de integración se muestra que

$$\begin{aligned} \mathcal{R} &= \int_{-\infty}^0 dx |\psi_R(x,t)|^2 = \int_0^{\infty} dp |R^l(p)\langle p|\psi(0)\rangle|^2, \\ \mathcal{T} &= \int_0^{\infty} dx |\psi_T(x,t)|^2 = \int_0^{\infty} dp |T^l(p)\langle p|\psi(0)\rangle|^2. \end{aligned} \quad (1.151)$$

1.8 Tiempos de retardo

El tiempo de retardo es una de las cantidades básicas para caracterizar procesos de colisión cuánticos. Para el caso unitario, F. T. Smith definió una matriz de tiempo de retardo en términos de la matriz de colisión S y su derivada respecto a la energía, $Q = iSdS^\dagger/dE$, [17]. Los elementos diagonales pueden interpretarse como la suma sobre contribuciones de diferentes canales de salida para el canal de entrada, que denotaremos por α , $Q_{\alpha\alpha} = \sum_{\beta} |S_{\alpha\beta}|^2 \Delta t_{\alpha\beta}$. Cada

uno de los retardos parciales $\Delta t_{\alpha\beta}$ da el tiempo de retardo de un paquete saliente en el canal β con respecto a un paquete incidente cuya representación de momentos toma valores apreciables en un entorno pequeño de E en el canal de entrada α .

Análogamente al caso unitario, se pueden definir varios retardos (parciales) en el caso no hermítico. Para la representación diagonal (1.65), los retardos son

$$\begin{aligned}\tau_0 &= \frac{2\hbar m}{p} \frac{\partial \delta_0}{\partial p}, \\ \tau_1 &= \frac{2\hbar m}{p} \frac{\partial \delta_1}{\partial p},\end{aligned}\quad (1.152)$$

donde $\delta_{0,1}$ son los desfases correspondientes (1.78). Para la representación en la base de ondas planas (1.64) los retardos parciales de transmisión y reflexión serán

$$\begin{aligned}\tau_{R^{r,l}} &= \frac{\hbar m}{p} \frac{\partial \phi_{R^{r,l}}}{\partial p}, \\ \tau_{T^{r,l}} &= \frac{\hbar m}{p} \frac{\partial \phi_{T^{r,l}}}{\partial p},\end{aligned}\quad (1.153)$$

donde $\phi_{R^{r,l}}$ y $\phi_{T^{r,l}}$ son, respectivamente, las fases de $R^{r,l}$ y $T^{r,l}$, $R^{r,l} = |R^{r,l}| \exp(i\phi_{R^{r,l}})$ y $T^{r,l} = |T^{r,l}| \exp(i\phi_{T^{r,l}})$.

Como en el caso unitario [18], bajo determinadas condiciones los tiempos de retardo (1.153) pueden relacionarse con la diferencia entre la evolución libre y con potencial de un estado arbitrario ψ . Supongamos que ψ se prepara a la izquierda del potencial y que $\langle p|\psi(0)\rangle$ es no nula sólo para momentos positivos. Para tiempos (asintóticos) posteriores a la colisión se pueden definir las posiciones promedio de los paquetes reflejados y transmitidos como

$$\langle x \rangle_{R,T} = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} dx x |\psi_{R,T}(x,t)|^2}{\int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi_{R,T}(x,t)|^2}, \quad (1.154)$$

donde $\psi_{R,T}$ se calculan con las expresiones (1.149,1.150). Evaluando en primer lugar la integral en x , se encuentra

$$\begin{aligned}\langle x \rangle_R &= \frac{1}{\mathcal{R}} \int_0^{\infty} dp |\langle p|\psi(0)\rangle|^2 |R^l|^2 \left[+\hbar \frac{\partial}{\partial p} \phi_0 - \frac{p}{m} t + \hbar \frac{\partial}{\partial p} \phi_{R^l} \right], \\ \langle x \rangle_T &= \frac{1}{\mathcal{T}} \int_0^{\infty} dp |\langle p|\psi(0)\rangle|^2 |T^l|^2 \left[-\hbar \frac{\partial}{\partial p} \phi_0 + \frac{p}{m} t - \hbar \frac{\partial}{\partial p} \phi_{T^l} \right],\end{aligned}\quad (1.155)$$

donde ϕ_0 es la fase de $\langle p|\psi(0)\rangle$. Para el estado que evoluciona libremente, la posición promedio se obtiene a partir de $\langle x \rangle_T$ tomando $\mathcal{T} = 1$, $T^l = 1$ y $\phi_{T^l} = 0$. Si la función $\langle p|\psi(0)\rangle$ está muy “concentrada” en torno a un momento p_c y los módulos de las amplitudes de reflexión y transmisión varían suavemente en ese entorno, las expresiones anteriores pueden aproximarse

por

$$\begin{aligned}\langle x \rangle_R &\approx \left[-x_c - \frac{p}{m}t + \hbar \frac{\partial}{\partial p} \phi_{R'} \right]_{p=p_c}, \\ \langle x \rangle_T &\approx \left[x_c + \frac{p}{m}t - \hbar \frac{\partial}{\partial p} \phi_{T'} \right]_{p=p_c},\end{aligned}\quad (1.156)$$

donde x_c es la posición promedio inicial. Para la parte transmitida del estado, el término que depende de la derivada de la fase es el retraso (adelanto) respecto a la posición promedio del paquete libre. El tiempo de retardo (avance) vendrá entonces dado por el tiempo de retardo estacionario de transmisión (1.153). Para la parte reflejada la interpretación es ligeramente diferente. El término entre corchetes en la expresión de $\langle x \rangle_R$ para $\phi_{R'} = 0$ es el movimiento de la posición promedio de un estado que evoluciona libremente en sentido opuesto al original, con valor inicial $-x_c$. El tiempo de retardo estacionario de reflexión no es más que el retardo (avance) de $\langle x \rangle_R$ respecto a la posición promedio de ese segundo estado.

1.9 Potenciales absorbentes

Los potenciales considerados en esta Tesis (1.5,1.6) se pueden descomponer de la forma $V = V_R + iV_I$, donde V_R y V_I corresponderán a la parte real e imaginaria del potencial.¹⁰ Supongamos la colisión de un estado normalizable arbitrario con un potencial complejo de la forma anterior. La no unitariedad implica que la norma puede variar durante este proceso y por tanto, para tiempos asintóticos posteriores, no será en general igual a la norma previa a la colisión. Si la norma es menor el potencial actúa como *absorbente*, mientras que si es mayor actúa como *creador*.

A partir de la ecuación de continuidad para la evolución de un estado genérico ψ puede encontrarse una interesante relación entre el potencial y el ritmo de absorción (creación) [19],

$$\frac{dN}{dt} = \langle \psi | V_I | \psi \rangle, \quad (1.157)$$

donde N es la norma del estado en un instante t ,

$$N = \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x, t)|^2, \quad (1.158)$$

Para que el potencial sea absorbente basta con que el miembro derecho de la ecuación (1.157) sea siempre negativo. Esto se asegura si la parte imaginaria del potencial es negativa. Debido a este hecho a menudo se confunden los términos “potencial absorbente” con “potencial

¹⁰Para potenciales locales la descomposición corresponde a la separación de la función $V(x)$ en parte real e imaginaria, mientras que para potenciales separables a la parte real e imaginaria del coeficiente v .

con parte imaginaria negativa". Lo segundo implica lo primero, pero no por ello es la única posibilidad, y como veremos a lo largo del capítulo 3, ni siquiera la óptima. En general un potencial absorbente para un estado determinado podría no serlo para otro estado diferente. Por lo tanto, sería necesario precisar el conjunto de estados para los que el comportamiento es absorbente.

Supongamos que la partícula incide contra el potencial desde la izquierda e inicialmente sólo tiene momentos positivos. Si está normalizado a la unidad, la absorción, entendida como la fracción de norma que es absorbida durante todo el proceso y que denotaremos por \mathcal{A} , puede escribirse como

$$\mathcal{A} = 1 - \int_0^{\infty} dp \left(|R^l(p)|^2 + |T^l(p)|^2 \right) |\langle p|\psi(0)\rangle|^2, \quad (1.159)$$

donde hemos utilizado las expresiones asintóticas (1.151). En la expresión anterior se puede identificar la probabilidad estacionaria de supervivencia, $P_s(p)$,

$$P_s(p) = |R^l(p)|^2 + |T^l(p)|^2, \quad (1.160)$$

y la probabilidad de absorción estacionaria, $1 - P_s(p)$. Diremos que un potencial es absorbente *en un intervalo de momentos determinado*, Δ_p , si $P_s(p) < 1$ para todos los momentos del intervalo Δ_p . El absorbente ideal sería tal que $P_s(p) = 0$ para todo momento $p > 0$. Sin embargo, a partir de consideraciones generales, se puede mostrar que este comportamiento no es posible. La expresión (1.79) muestra que la absorción para $p = 0$ debe ser nula y por continuidad, también lo debe ser en un pequeño entorno del origen. Aparte de esta dificultad intrínseca, tampoco se han encontrado potenciales que sean estrictamente absorbentes salvo en un conjunto de momentos discretos. Además, las aplicaciones prácticas con potenciales absorbentes suelen conllevar algunas exigencias adicionales, que dificultan aún más la labor de encontrar uno adecuado. En el capítulo 3 profundizaremos en aspectos concretos de este problema.

Capítulo 2

Modelo analítico

Capítulo 2

Modelo analítico

2.1 Introducción

El objetivo de este capítulo es ilustrar algunas de las relaciones formales del capítulo anterior utilizando un potencial específico, siguiendo los resultados expuestos en las referencias [20] y [21]. En el estudio estacionario de las colisiones prestaremos especial atención al cálculo de las amplitudes, tanto de reflexión y transmisión como diagonales, y al significado de las singularidades (polos) de estas últimas. También trataremos los tiempos de retardo asociados a cada una de las amplitudes, aspecto especialmente interesante ya que presenta posibilidades que no ocurren en el caso unitario, como tiempos de retardo de reflexión y transmisión asimétricos. Además, obtendremos una expresión analítica para la dependencia temporal de la colisión de un paquete particular con el potencial. Ésta ilustra el efecto de la asimetría de los tiempos de retardo en el caso no hermítico, así como diferentes aspectos de las colisiones unitarias, algunos bien conocidos, como el decaimiento exponencial, y otros no tanto, como por ejemplo el régimen previo al decaimiento exponencial, las deformaciones debidas a resonancias, el comportamiento a tiempos cortos o muy largos, las interferencias entre componentes libre y de colisión, el efecto de polos “espúreos”¹ y otras singularidades en el plano de momentos complejos.

El potencial modelo es un potencial separable,

$$\tilde{V} = |\chi\rangle\tilde{v}\langle\chi|, \quad (2.1)$$

que queda especificado por la representación en momentos o de posiciones de $|\chi\rangle$,

$$\langle\tilde{p}|\chi\rangle = \left(\frac{2a^3}{\pi}\right)^{1/2} \frac{1}{a^2 + \tilde{p}^2}, \quad \langle\tilde{x}|\chi\rangle = \left(\frac{a}{\hbar}\right)^{1/2} e^{-\frac{|\tilde{x}|}{\hbar}}. \quad (2.2)$$

La naturaleza no unitaria del potencial vendrá dada por valores complejos del coeficiente \tilde{v} . \tilde{p} y \tilde{x} denotan aquí el momento y la posición dimensionales, y a es un momento característico

¹Los polos “espúreos” son polos de la matriz S que no aparecen en los elementos de matriz de la resolvente. La denominación puede llevar a error, puesto que, como veremos, tienen consecuencias físicas [25].

del sistema (anchura a mitad de altura de $|\langle \tilde{p} | \chi \rangle|^2$). A lo largo de este capítulo reservaremos la notación sin tilde para variables adimensionales que permiten una presentación más compacta de los resultados.

El potencial separable definido por (2.2) ha sido utilizado en un gran número de trabajos previos con diferentes propósitos [22-29], aunque siempre en el caso hermítico (\tilde{v} real).

Si introducimos el momento (p), posición (x), tiempo (t), y energía del potencial (v) adimensionales, que estarán relacionados con las cantidades dimensionales por $p = \tilde{p}/a$, $x = a\tilde{x}/\hbar$, $t = a^2\tilde{t}/(m\hbar)$ y $v = m\tilde{v}/a^2$, (2.2) queda de la forma

$$\langle p | \chi \rangle = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2} \frac{1}{1+p^2}, \quad \langle x | \chi \rangle = e^{-|x|}. \quad (2.3)$$

2.2 Colisiones estacionarias

El operador transición parametrizado (1.44) para un potencial separable arbitrario² y para una energía compleja z puede expresarse como

$$T_{op}(z) = \frac{|\chi\rangle v \langle \chi|}{1 - v \langle \chi | G^0(z) | \chi \rangle}, \quad (2.4)$$

donde $G^0(z) = (z - H_0)^{-1}$ es la resolvente del caso libre. Esta expresión se puede obtener a partir de las relaciones de Lippmann-Schwinger para el operador de Green (1.42) mediante simples manipulaciones algebraicas.

El término $\langle \chi | G^0(z) | \chi \rangle$ de (2.4) puede evaluarse fácilmente introduciendo la relación de cierre en momentos (1.4) dos veces e integrando en el plano complejo,

$$\langle \chi | G^0(z) | \chi \rangle = \frac{2(q + 2i)}{q(q + i)^2}, \quad \text{Im} q > 0, \quad (2.5)$$

donde se ha definido $q \equiv +\sqrt{2mz}$ como la raíz con parte imaginaria positiva (corresponde a la hoja de Riemann de la energía $0 \leq \arg(z) < 2\pi$). q tiende a $|p|$ cuando z tiende al valor real $p^2/2m$ desde arriba en el plano complejo, y a $-|p|$ desde abajo. Si introducimos (2.5) en (2.4) se obtiene la expresión del operador de transición parametrizado para el potencial separable

$$T_{op}(z) = |\chi\rangle \frac{q(q + i)^2 v}{C(q, v)} \langle \chi|, \quad (2.6)$$

donde $C(q, v)$ es el polinomio

$$C(q, v) \equiv q(q + i)^2 - 2v(q + 2i). \quad (2.7)$$

²Las propiedades generales de un potencial separable han sido examinadas con detalle por G. C. Ghirardi y A. Rimini [30]

Es habitual y conveniente continuar analíticamente estas expresiones en el semiplano inferior q (correspondiente a la hoja de Riemann de la energía $2\pi \leq \arg(z) < 4\pi$.) q es en definitiva un momento complejo y también usaremos la notación p cuando ello no se preste a confusión. Mantendremos la notación q en integrales o elementos de matriz en los que conviene subrayar la forma en la que se ha de obtener la expresión final.

Como $\langle x|\chi\rangle$ es una función simétrica de x , el potencial es simétrico (véase la sección de simetrías del capítulo 1), por lo que no es necesario distinguir entre incidencia desde la izquierda o desde la derecha en las amplitudes de reflexión y transmisión. Las amplitudes se obtienen de su relación con el operador de transición (1.59),

$$\begin{aligned} R &= \frac{-iY}{X + iY}, \\ T &= \frac{X}{X + iY}, \end{aligned} \quad (2.8)$$

donde X e Y son los polinomios,

$$X = p[p^4 + 2(1 - v)p^2 + (1 - 6v)], \quad Y = 4v. \quad (2.9)$$

(Tanto para incidencia por la derecha como por la izquierda p debe ser una cantidad positiva en esta expresión.)

Utilizando la relación (1.109) se obtienen las amplitudes de la representación diagonal de la matriz de colisión (1.65), S_j ,

$$\begin{aligned} S_0 &= \eta_0 e^{2i\delta_0} = T + R = \frac{(p + i)^2 C^*(p^*, v^*)}{(p - i)^2 C(p, v)}, \\ S_1 &= \eta_1 e^{2i\delta_1} = T - R = 1. \end{aligned} \quad (2.10)$$

Recordemos que los estados propios correspondientes no son más que las combinaciones simétrica (para S_0) y antisimétrica (para S_1) de las ondas planas.

Una peculiaridad de este potencial es su transparencia para las ondas antisimétricas ($S_1 = 1$), por lo que el parámetro de inelasticidad y el desfase serán independientes del momento e iguales a $\eta_1 = 1$, $\delta_1 = 0$.

Las probabilidades estacionarias de reflexión, transmisión y absorción pueden escribirse en términos de los desfases y de los factores de inelasticidad, véase (2.10),

$$\begin{aligned} \mathcal{R} &\equiv |R|^2 = \left(\frac{\eta_0 - 1}{2}\right)^2 + \eta_0 \sin^2(\delta_0) \\ \mathcal{T} &\equiv |T|^2 = \left(\frac{\eta_0 - 1}{2}\right)^2 + \eta_0 \cos^2(\delta_0) \\ \mathcal{A} &\equiv 1 - \mathcal{T} - \mathcal{R} = 1 - \frac{1}{2}(\eta_0^2 + 1). \end{aligned}$$

En particular, la absorción máxima ocurre cuando $S_0 = \eta_0 = 0$.

2.2.1 Resonancias y estados ligados

Como señalamos en el capítulo 1, es útil identificar las singularidades de las amplitudes en el plano p complejo por su relación con estados ligados o resonancias. En este caso S_1 no tendrá ninguna singularidad, mientras que S_0 tendrá un polo doble espúreo e independiente del valor del potencial en $p = i$, una raíz doble de la misma índole en $p = -i$ y el resto de polos y ceros corresponderán a raíces de los polinomios $C(p, v)$ y $C^*(p^*, v^*)$ respectivamente. El polinomio $C(p, v)$ tendrá tres raíces que denotaremos como p_j , $j = 1, 2, 3$. De la relación entre los polinomios se encuentra que las raíces de $C^*(p^*, v^*)$ están en $-p_j$, que no es más que la manifestación de las propiedades de simetría de S_0 discutidas en el capítulo 1.

Las trayectorias de las raíces de $C(p, v)$ (polos de S_0) en función del parámetro del potencial en el caso unitario (v real) fueron descritas en [25]. Se pueden distinguir los siguientes casos:

- Si $v < (-11 - 5\sqrt{5})/4$, se tiene un polo en el eje imaginario positivo, que corresponde a un estado ligado (los potenciales separables en el caso unitario admiten un único estado ligado [30]), y dos en el eje imaginario negativo. Cuando $v = (-11 - 5\sqrt{5})/4$, los polos en el eje imaginario negativo coinciden en $p \approx -2.62i$.
- Si $(-11 - 5\sqrt{5})/4 < v < 0$, se mantiene el estado ligado, pero los otros polos se sitúan de forma simétrica en torno al eje imaginario negativo, uno en el tercer cuadrante y el otro en el cuarto.
- Si $v = 0$, los polos del semiplano imaginario negativo vuelven a coincidir en $p = -i$, mientras que el polo que correspondía al estado ligado se sitúa en $p = 0$.
- Si $0 < v < (-11 + 5\sqrt{5})$, los tres polos están en el eje imaginario negativo, y cuando $v = (-11 + 5\sqrt{5})$, dos de los polos coinciden en $p \approx -0.38i$.
- Si $v > (-11 + 5\sqrt{5})$ un polo permanece en el eje imaginario negativo mientras los otros se sitúan simétricamente en torno a él, en el tercer y cuarto cuadrante, y más próximos al eje de momentos reales cuanto mayor sea el potencial.

En general, la adición de una parte imaginaria al potencial (v complejo) desplazará los polos de su posición *unitaria*. Por simplicidad, nos centraremos en potenciales con parte imaginaria negativa (que corresponderán a absorbentes) y parte real $\text{Re}(v) > (-11 + 5\sqrt{5})$, el último de los casos unitarios descritos, y en principio el más interesante ya que corresponde al intervalo de v en el que aparecen resonancias. En este caso los polos con parte real de signo opuesto a ambos lados del eje imaginario negativo, que denotaremos por p_1 y p_2 respectivamente, serán

los polos *resonante* y *antirresonante* de S_0 . La tercera raíz, en el eje imaginario negativo, p_3 , estará asociada a un *estado virtual* que se aproxima a $-2i$ cuando $v \rightarrow \infty$.

En el caso unitario, el polo resonante da lugar a un pico en la probabilidad de reflexión para $v > 1/6$ [25], o, equivalentemente, un mínimo en la probabilidad de transmisión. En la figura 2.1 se ofrece un ejemplo de este comportamiento.

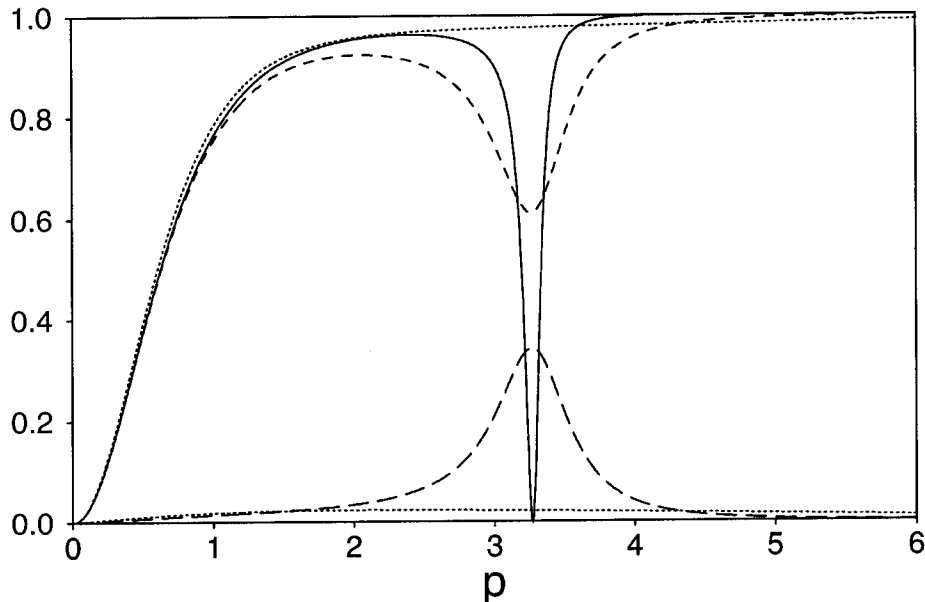


Figura 2.1: Probabilidades de transmisión (líneas superiores) y absorción (líneas inferiores) para $\text{Re}(v) = 5$: $\text{Im}(v) = 0$ (líneas continuas), $\text{Im}(v) = -0.8$ (líneas a trazos) e $\text{Im}(v) = -20$ (líneas punteadas).

Obsérvese también el mínimo en la probabilidad de transmisión a energía cero relacionado con el efecto combinado del polo virtual p_3 y el polo doble espúreo en $p = i$ [25]. El polo resonante, cuando está suficientemente próximo al eje real, produce una variación rápida del cambio de fase de aproximadamente π , como se muestra en la figura 2.2.

En una colisión arbitraria las variaciones rápidas de la fase dan lugar a un máximo o a un mínimo del coeficiente de reflexión, dependiendo de la fase de *fondo*, $(\delta_0 - \delta_1)_{bg}$. Nuestro potencial separable provee un máximo en el coeficiente de reflexión, mientras la barrera cuadrada es un ejemplo bien conocido de mínima reflexión en la resonancia.

Cuando v es real, para cada polo de S_0 en p_j hay un cero en p_j^* , que denotaremos por Z_j . La distancia desde cualquier p real a ambos puntos, (polo y cero) es igual, de forma que S_0 factoriza en contribuciones de módulo unidad para cada par cero-polo [25]. Sin embargo, la adición de una parte imaginaria a v rompe esta simetría. En particular, si se añade una parte imaginaria negativa, el cero Z_j estará más próximo al eje real que el polo p_j , y existirá absorción en la proximidad del par porque $|p - Z_j|/|p - p_j| < 1$.

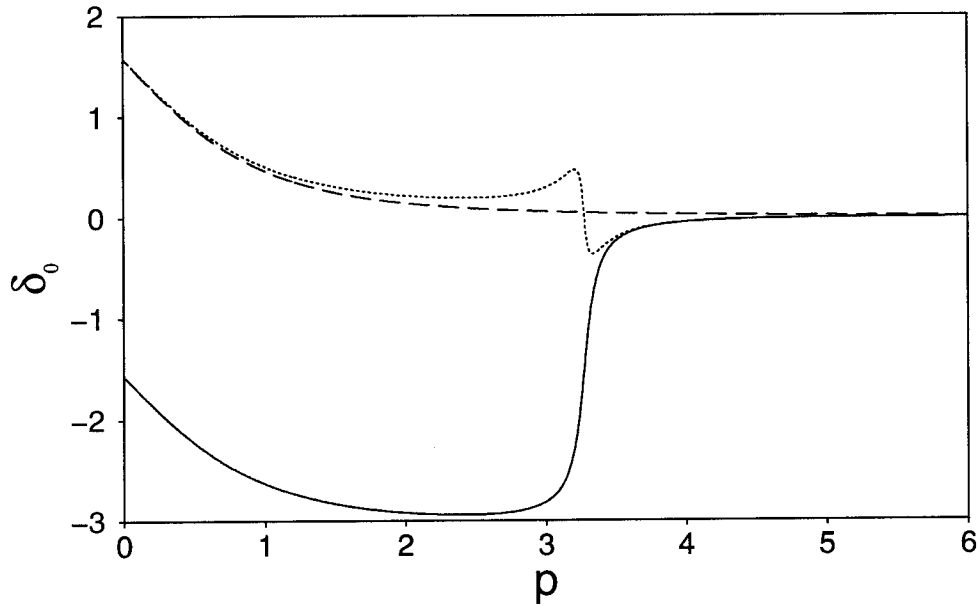


Figura 2.2: $\delta_0(p)$ frente a p para $\text{Re}(v) = 5$: $\text{Im}(v) = 0$ (línea continua), $\text{Im}(v) = -0.3$ (línea punteada) e $\text{Im}(v) = -20$ (línea a trazos).

La figura 2.3 muestra el movimiento de los ceros y polos de S_0 cuando $-\text{Im}(v)$ se incrementa. El par cero-polo resonante se mueve hacia la bisectriz del cuarto cuadrante, y el par cero-polo antirresonante hacia la bisectriz del segundo cuadrante.³ Cuando se alcanza el valor crítico $\text{Im}(v) = I_c$, el cero Z_1 asociado con el polo resonante cruza el eje real y S_0 (y por tanto η_0) se anula para el momento real del cero, lo que dará lugar a un valor máximo de la absorción (2.11). Simultáneamente, el polo antirresonante cruza el eje real negativo y se sitúa en el semiplano imaginario positivo, por lo que ahora debe interpretarse como asociado a un estado del espectro puntual cuya norma decrece con el tiempo. La aparición de este nuevo estado provoca un salto en el valor del desfase δ_0 para $p = 0$, como se muestra en la figura 2.2, que puede interpretarse con ayuda del teorema de Levinson presentado en el capítulo 1. Como el potencial es simétrico y la probabilidad de reflexión es uno en el umbral (figura 2.1), el comportamiento de los desfases en el origen debe ser: $\delta_0(0) = (N_0 - 1/2)\pi$ y $\delta_1(0) = N_1\pi$, donde N_0 y N_1 es el número de estados del espectro puntual en cada caso (simétrico y antisimétrico). N_1 es siempre cero, por lo que $\delta_1(0) = 0$, como se argumentó previamente para cualquier valor de p . Para $\text{Im}(v) < I_c$, $N_0 = 0$, por lo que $\delta(0) = -\pi/2$, mientras que para $\text{Im}(v) > I_c$ $N_0 = 1$ debido al nuevo estado localizado, y por tanto $\delta(0) = \pi/2$, como se muestra en la figura 2.2. En ese caso particular $I_c = -0.223$.

³En el caso de que la parte imaginaria fuera positiva, el cero-polo resonante se moverían hacia la bisectriz del primer cuadrante, mientras que el par antirresonante lo haría hacia la bisectriz del tercer cuadrante. En este caso $|p - Z_j|/|p - p_j| > 1$ y por lo tanto el potencial crearía norma.

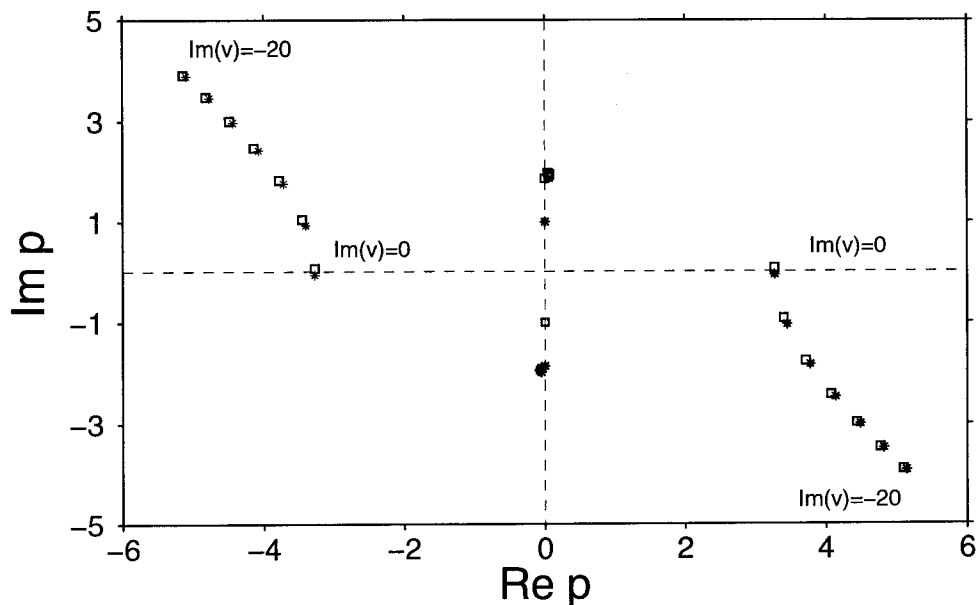


Figura 2.3: Movimiento de los ceros (cuadrados) y polos (estrellas) de S_0 en el plano complejo p para $\text{Re}(v) = 5$ e $\text{Im}(v)$ entre 0 y -20 .

Si disminuimos aún más $\text{Im}(v)$ hacia valores más negativos, el par cero-polo se mueve alejándose del eje real y la resonancia se ensancha hasta que el pico en la reflectancia finalmente desaparece, como se muestra en la figura 2.1. Para $\text{Re}(v)$ fijo, el comportamiento asintótico cuando $\text{Im}(v) \rightarrow -\infty$ de las raíces de $C(p, v)$ es $p_1 \sim [-\text{Im}(v)]^{1/2}(1-i)$, $p_2 \sim [-\text{Im}(v)]^{1/2}(i-1)$, y $p_3 \sim -2i$. Por tanto el polo p_1 y su cero asociado Z_1 convergen, y la *absorción desaparece*.

2.2.2 Tiempos de retardo

El salto del desfase en $p = 0$ no es el único efecto del movimiento de los polos. Para valores de $\text{Im}(v)$ ligeramente más negativos que I_c , la pendiente de δ_0 es negativa en torno a la resonancia, lo que físicamente implica un tiempo de retardo (1.152) negativo ($\tau_0 < 0$), que debe interpretarse como un tiempo de avance. Constituye un hecho singular de las colisiones no unitarias, ya que en el caso hermítico los tiempos de retardo asociados a resonancias son siempre positivos.⁴

La figura 2.4 ofrece una visión complementaria de la discusión anterior. Se representa la parte imaginaria de S_0 frente a la parte real (diagramas de Argand) desde un valor grande de p hasta $p = 0$ y para cuatro valores de $\text{Im}(v)$. Para interpretar éstas figuras es conveniente pensar en las curvas como *trayectorias* dependientes del momento. Los casos representados corresponden

⁴En el caso unitario se encuentran tiempos de avance cuando el sistema tiene un estado ligado a energía cero para potenciales reales atractivos [31].

a: $\text{Im}(v)=0$ (caso unitario), $\text{Im}(v) = I_c$, $\text{Im}(v) < I_c$ y $\text{Im}(v) \ll I_c$.

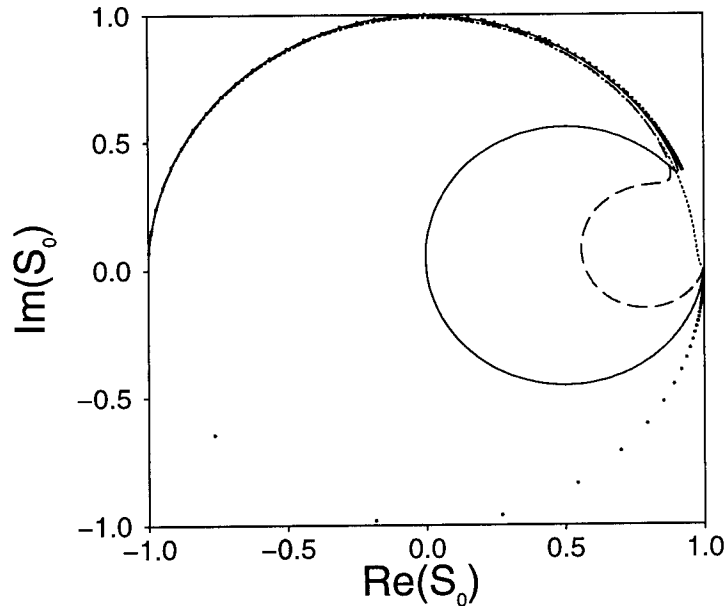


Figura 2.4: $\text{Im}(S_0)$ frente a $\text{Re}(S_0)$ para $\text{Re}(v) = 5$: $\text{Im}(v) = 0$ (círculos para valores igualmente espaciados de p), $\text{Im}(v) = -0.223$ (línea continua), $\text{Im}(v) = -0.8$ (línea a trazos) e $\text{Im}(v) = -20$ (línea punteada).

Para v real, S_0 está en un círculo de radio unidad con centro en el origen. Para valores grandes del momento, el efecto de la colisión es mínimo y $S_0 = 1$. Cuando el valor de p decrece, la trayectoria de Argand se mueve en sentido horario, pasando por el cuarto, tercer, segundo y primer cuadrante consecutivamente, lo que corresponde a valores negativos del desfase entre 0 y $\approx -\pi$. Este movimiento se hace “más rápido” en las inmediaciones del momento resonante. $\delta_0 \approx -\pi$ constituye un punto de retroceso de la trayectoria, a partir del cual se mueve en sentido antihorario hasta llegar de nuevo a $S_0 = -1$ para $p = 0$. En toda la trayectoria los valores de δ_0 son negativos (figura 2.2). Debido al retroceso, el efecto de la resonancia queda enmascarado en el semiplano imaginario positivo de la figura 2.4, pero se hace especialmente evidente en el semiplano negativo, donde a valores igualmente espaciados del momento le corresponden puntos cada vez más separados, como consecuencia de la rápida variación de δ_0 . Para valores de $\text{Im}(v) < 0$, la amplitud S_0 deja de tener módulo unidad, y la trayectoria de Argand se contrae, de forma especialmente notoria en el tramo que evoluciona en sentido horario. Si $\text{Im}(v) > I_c$, el comportamiento del desfase es similar al caso unitario. Para $\text{Im}(v) = I_c$, la trayectoria cruzará por el cero del diagrama, que corresponde a $S_0 = 0$ (máxima absorción). Si $\text{Im}(v) < I_c$, la trayectoria cruzará del cuarto al primer cuadrante pero sin pasar por el tercer y segundo cuadrante. Luego δ_0 tomará valores positivos lo que provoca un cambio en el signo de

la pendiente de $\delta(p)$, y por tanto en el tiempo de retardo asociado. Para valores decrecientes del potencial, el cruce se produce en puntos cada vez más alejados del origen, por lo que la pendiente se suaviza hasta finalmente desaparecer si $\text{Im}(v) \ll I_c$ (En este caso la trayectoria transcurre totalmente por el primer y segundo cuadrante.)

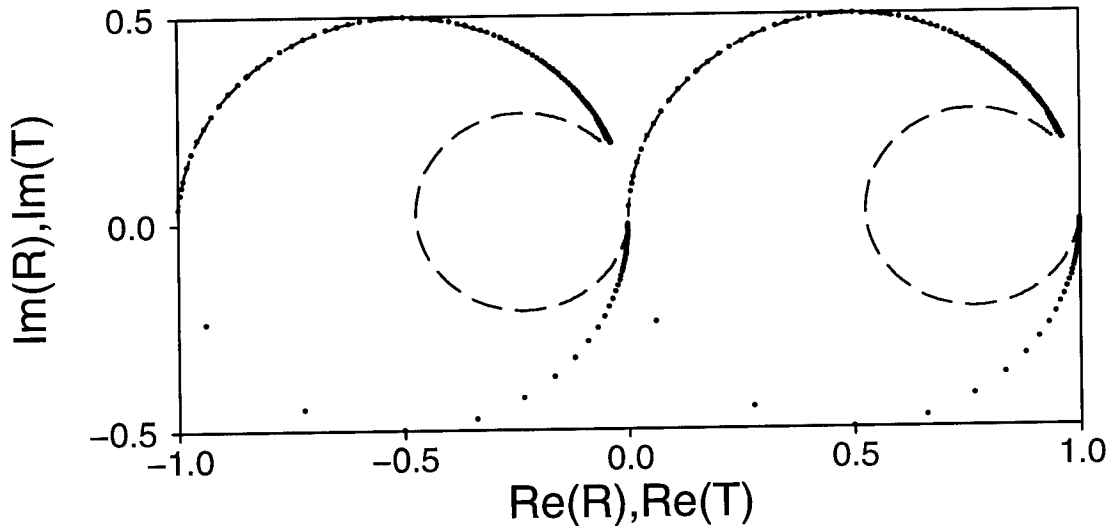


Figura 2.5: $\text{Im}(R)$ frente a $\text{Re}(R)$ (curvas de la izquierda) e $\text{Im}(T)$ frente a $\text{Re}(T)$ (curvas de la derecha). $\text{Re}(v) = 5$: $\text{Im}(v) = 0.00001$ (círculos para valores igualmente espaciados de p) e $\text{Im}(v) = -0.25$ (línea a trazos).

En colisiones en una dimensión, las condiciones de contorno habituales corresponden a una onda *incidente* desde un lado, y no a la combinación discutida hasta el momento. Se deben considerar entonces los tiempos de retardo asociados a las amplitudes de reflexión, τ_R , y transmisión, τ_T , (1.153). Para v real, como consecuencia de la unitariedad de la matriz S (1.38), las fases de T y R solo difieren en un múltiplo impar⁵ de $\pi/2$, de forma que los retardos asociados a cada amplitud son iguales, $\tau_R = \tau_T$. Esta propiedad deja de ser válida cuando se le añade una parte imaginaria al potencial. T tiene un cero para el momento (real) de la resonancia en el caso unitario, que para valores de $\text{Im}(v)$ negativos se mueve fuera del eje real y por tanto la derivada de ϕ_T cambia de signo en torno a la resonancia. Este efecto es similar al discutido previamente para δ_0 , pero con el valor crítico de $\text{Im}(v)$ igual a 0 en vez de a I_c . El análisis es también similar, aunque ahora los diagramas de Argand de R y T (figura 2.5) no están centrados en el origen, ya que para este potencial, $R = S_0/2 - 1/2$ y $T = S_0/2 + 1/2$, de forma que $\text{Re}(R) \leq 0$ y $\text{Re}(T) \geq 0$. La adición de una parte imaginaria contrae de nuevo las trayectorias. Mientras que la fase de R , ϕ_R , no sufre ningún cambio dramático, la de T , ϕ_T , pasa a tomar valores positivos, como se

⁵La relación se obtiene de los elementos no diagonales de la ecuación matricial $SS^\dagger = 1$ para potenciales simétricos.

muestra en la figura 2.6, dando lugar a una asimetría de los tiempos de retardo asociados a cada una de las amplitudes. La adición de una parte imaginaria provoca la aparición de un tiempo de retardo negativo asociado a la amplitud de transmisión.

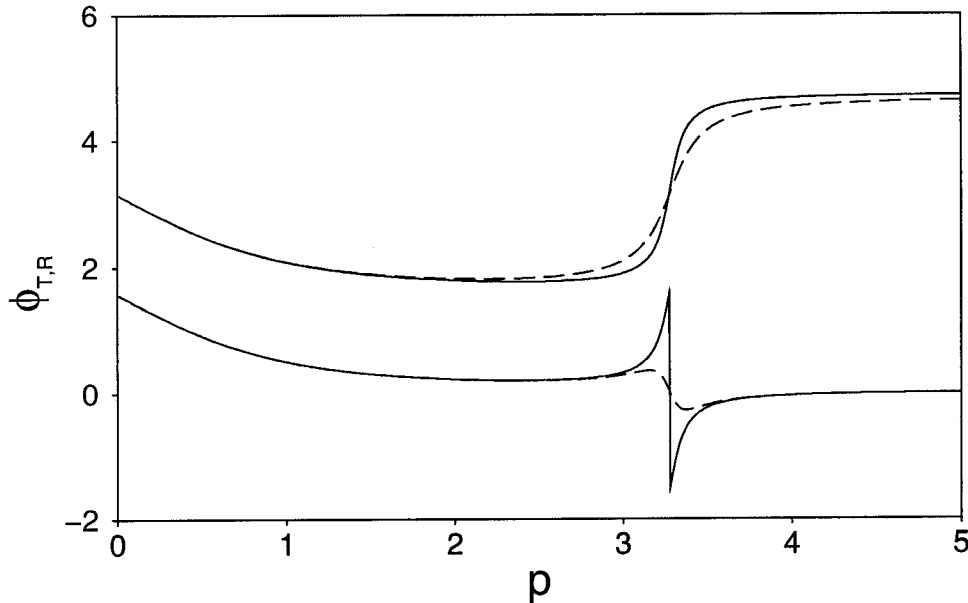


Figura 2.6: $\phi_T(p)$ (líneas inferiores) y $\phi_R(p)$ (líneas superiores) para $\text{Re}(v) = 5$: $\text{Im}(v) = -0.00001$ (línea continua) e $\text{Im}(v) = -0.25$ (línea a trazos).

2.3 Régimen dependiente del tiempo

Existen pocos modelos que permitan un análisis analítico de las colisiones cuánticas dependientes del tiempo. Por ejemplo, W. Elberfeld y M. Kleber [32], describen la colisión de un estado particular con un potencial delta de Dirac. Este modelo se ha empleado en algunas aplicaciones [33]; sin embargo, su utilidad es limitada, ya que no admite resonancias. El potencial separable supera esa carencia, y en esta sección describiremos cómo es posible obtener expresiones explícitas de la evolución temporal de un estado similar al utilizado en [32]. La representación de momentos de ese estado viene dada inicialmente por una función lorentziana

$$\langle p|\mathcal{L}\rangle = e^{-ix_c p} \left(\frac{2b^3}{\pi} \right)^{1/2} \frac{1}{b^2 + (p - p_c)^2}, \quad (2.11)$$

donde b está relacionado con la anchura de la distribución de momentos, $|\langle p|\mathcal{L}\rangle|^2$. ($[2^{1/2} - 1]^{1/2} b \approx 0.64b$ es la anchura a mitad de altura). Consideraremos en todo el desarrollo posterior que el valor esperado inicial de la posición es menor que cero ($x_c < 0$), lo que corresponde a preparar el estado a la izquierda del potencial.

La función de onda en un instante arbitrario de tiempo $t > 0$ y posición x puede obtenerse usando una representación integral del operador evolución $U(t)$ (1.21) en el plano q de momentos complejos en términos de la resolvente (1.41),

$$\langle x|U(t)|\mathcal{L}\rangle = \frac{i}{2\pi} \int_{\Gamma} dq q \langle x|e^{-izt}G(z)|\mathcal{L}\rangle. \quad (2.12)$$

(Recordemos que $z = q^2/2$ es la energía compleja). La integral de contorno Γ va desde $-\infty$ hasta $+\infty$ en el plano q de momentos complejos pasando por encima de todas las singularidades de la resolvente en el semiplano q superior (primera hoja de energías). Para v real esas singularidades corresponden al discreto de estados ligados del hamiltoniano en el semieje q imaginario positivo y el espectro continuo en el eje real. Para un potencial con parte imaginaria negativa, podría haber también un polo antirresonante en el segundo cuadrante.

La resolvente $G(z)$ puede separarse en dos sumandos utilizando las relaciones de Lippmann-Schwinger (1.42) e introduciendo el operador de transición parametrizado, $T_{op}(z)$ (2.4),

$$G(z) = G^0(z) + G^0(z)T_{op}(z)G^0(z). \quad (2.13)$$

La descomposición de la resolvente da lugar a una descomposición paralela del operador evolución en una parte correspondiente al movimiento libre, $U_0 = e^{-iH_0t}$, y una parte de colisión, $U_s = e^{-iHt} - e^{-iH_0t}$. Utilizando (2.12), (2.13) y la forma explícita del operador de transición para el potencial separable (2.6), se encuentra que la parte libre y de colisión de la función de onda son

$$\langle x|\psi_{0,s}(t)\rangle = \langle x|U_{0,s}|\mathcal{L}\rangle = \frac{i}{2\pi} \int dq e^{-izt} I_{0,s}(q), \quad (2.14)$$

donde

$$I_0(q) = \langle x|\frac{q}{z-H_0}|\mathcal{L}\rangle, \quad (2.15)$$

$$I_s(q) = \langle x|\frac{q}{z-H_0}|\chi\rangle \frac{vq(q+i)^2}{C(q)} \langle \chi|\frac{1}{z-H_0}|\mathcal{L}\rangle. \quad (2.16)$$

Los elementos de matriz involucrados pueden obtenerse desarrollando el hamiltoniano libre en funciones propias del momento y utilizando técnicas de integración de contorno. Insertando el resultado en las integrales (2.14), la parte de colisión se puede descomponer en seis términos ψ_n , $n = 1, \dots, 6$, y la parte libre da lugar a un término adicional ψ_0 . Estos términos tienen la forma general

$$\psi_n = K_n \int_{\Gamma} dq R_n(q) e^{-izt} e^{-iqY_n}, \quad n = 0, \dots, 6. \quad (2.17)$$

K_n y Y_n son factores independientes de q , y $R_n(q)$ es una fracción racional con L_n polos en $q_{l,n}$, $l = 1, \dots, L_n$. Todos los polos son de primer orden, exceptuando posiblemente un polo de segundo

orden en $q = i$. Los coeficientes de (2.17) serán

$$K_0 = \frac{b^{3/2}}{\pi}, \quad K_1 = \frac{4v}{i\pi} b^{3/2}, \quad K_2 = -K_1 \frac{e^{-|x|} e^{-ix_c(p_c+ib)}}{b[1+(p_c+ib)^2]} \quad (2.18)$$

$$K_3 = -K_1 \frac{e^{-(|x|-x_c)}}{[b^2+(i-p_c)^2]}, \quad K_4 = iK_1 e^{-|x|} \quad (2.19)$$

$$K_5 = -K_1 \frac{e^{-ix_c(p_c+ib)}}{ib[1+(p_c+ib)^2]}, \quad K_6 = -K_1 \frac{e^{x_c}}{i[b^2+(i-p_c)^2]} \quad (2.20)$$

$$R_0 = \frac{1}{(q-p_c)^2+b^2}, \quad R_1 = \frac{1}{(q-i)^2 C(q)[b^2+(q-p_c)^2]} \quad (2.21)$$

$$R_2 = \frac{q^2(q+i)}{(q-i)C(q)[q^2-(p_c+ib)^2]}, \quad R_3 = \frac{q^2}{(q-i)^2 C(q)} \quad (2.22)$$

$$R_4 = qR_1, \quad R_5 = R_2/q, \quad R_6 = R_3/q \quad (2.23)$$

$$Y_0 = x_c - x, \quad Y_1 = x_c - |x|, \quad Y_2 = Y_3 = 0, \quad Y_4 = x_c, \quad Y_5 = Y_6 = -|x| \quad (2.24)$$

Las posibles posiciones de los polos en los siete términos son, además de las raíces de la ecuación cúbica $C(q) = 0$, $p = \pm(p_c + ib)$, $p = p_c - ib$, y $p = i$.

La integral en (2.17) puede calcularse completando en primer lugar el cuadrado del exponente,

$$-izt - iqY_n = -u_n^2 + iY_n^2/2t. \quad (2.25)$$

donde hemos introducido u_n y f ,

$$u_n = (q + Y_n/t)/f, \quad (2.26)$$

$$f = (1-i)\sqrt{1/t}. \quad (2.27)$$

Los términos $R_n(q)$ se pueden desarrollar en fracciones parciales,

$$R_n(q) = \sum_{l=1}^{L_n} \frac{A_{l,n}}{q - q_{l,n}} + \frac{B_n}{(q-i)^2}. \quad (2.28)$$

donde $A_{l,n}$ es el residuo de $R_n(q)$ en $q_{l,n}$ y $B_n = \lim_{q \rightarrow i} (q-i)^2 R_n(q)$ es un término adicional para los casos en que aparezca el polo doble⁶ ($n=1,3,4,6$). La descomposición (2.28) permite obtener expresiones explícitas para todos los coeficientes de (2.21-2.23). Una vez descompuesta la integral original para $\psi_n(x)$ en una suma de integrales para cada una de las fracciones parciales, el contorno original se deforma en cada caso a lo largo de una línea recta en el punto de silla

⁶En estos casos hay que tener la precaución de incluir los dos términos del polo doble ($A_{l,n}$ y B_n) para que la descomposición anterior sea correcta.

de la exponencial ($u_n = 0$) rotada $\pi/4$ con respecto al eje real. El momento correspondiente al punto de silla será

$$p_n^s = -Y_n/t. \tag{2.29}$$

El contorno D_n es el camino de máxima pendiente del factor exponencial $e^{-u_n^2}$. A lo largo de este camino, la variable u_n es real.

Exceptuando el caso $n = 0$ para $x_c - x > 0$, todos los Y_n son negativos o nulos, de forma que el momento del punto de silla es real, positivo o cero. Para los casos en que $Y_n \neq 0$, la posición del polo dependerá del instante t , situándose en valores asintóticamente grandes del momento para t muy pequeños y tendiendo a cero para t grandes. En cada caso es necesario examinar con detenimiento los posibles polos que se crucen en el proceso de deformación desde el contorno original Γ hasta $D_n(t)$. En los casos en que para $t = 0$ el punto de silla $p^s = \infty$, se cruzan los polos situados en $p = p_c + ib$ y $p = i$, por lo que sus residuos deben sumarse a la integral a lo largo de D_n . Un ejemplo se muestra en la figura 2.7 para el término $n = 1$.

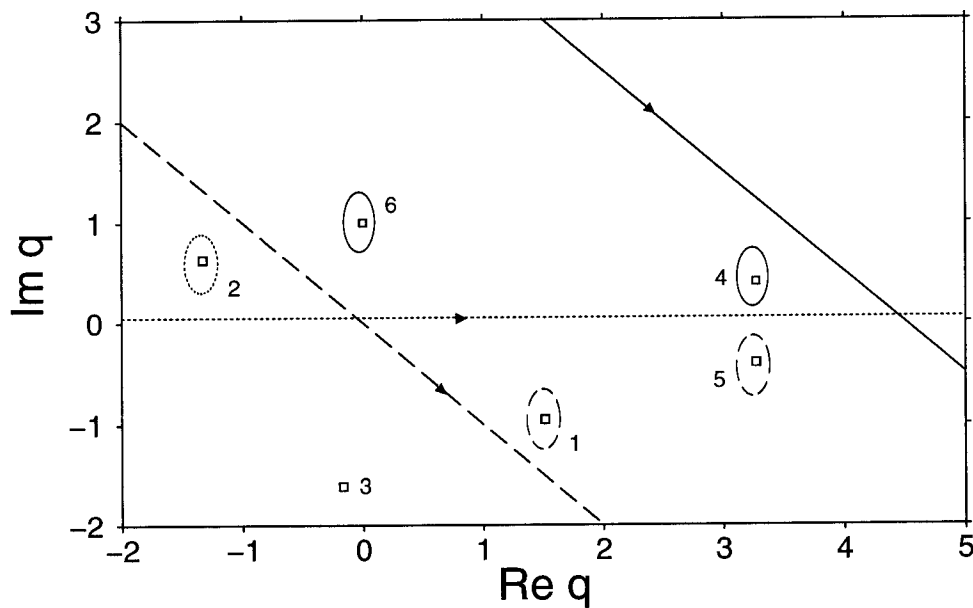


Figura 2.7: Una configuración particular de los polos (cuadrados) para ψ_1 en el plano de momentos complejos. Se muestra también el contorno de integración original (línea punteada) y el contorno deformado para tiempos cortos (línea continua) y tiempos grandes (línea a trazos). Los parámetros utilizados son: $v = 0.5 - i$, $p_c = 3.269$ y $b = 0.4$.

El cruce no ocurre para el polo antirresonante cuando está en el segundo cuadrante, ya que el contorno original Γ tiene un *bucle* en torno a él que desaparece en la deformación al contorno $D_n(0)$. La contribución del residuo (proporcional a una exponencial, véase (2.35) y (2.36) a continuación), y la de la integral por el contorno D_n (una función w) pueden expresarse como

una función w usando la definición y propiedades de simetría de la misma [34] (véase por ejemplo el apéndice A de la ref. [35]). Conforme t aumenta, D_n se mueve hacia la izquierda, y esos dos polos se cruzan de nuevo para ciertos tiempos críticos. Pero la función w después del cruce es formalmente idéntica a la función previa al mismo. Consideraciones similares se pueden realizar para el polo resonante y para $p_c - ib$, ambos en el cuarto cuadrante, de forma que ψ_n se escribe finalmente como

$$\psi_n(x) = K_n e^{iY_n^2/2t} \left\{ \left[i\pi \sum_l^{L_n} A_{l,n} s_{l,n} w(s_{l,n} u_{l,n}) \right] - 2i\pi B_n [y_n w(y_n) - i/\pi^{1/2}]/f \right\}, \quad (2.30)$$

donde

$$s_{l,n} = \begin{cases} -1, & \text{polo antirresonante} \\ \text{sign} [\text{Im}(q_{l,n})], & \text{en cualquier otro caso} \end{cases} \quad (2.31)$$

$$u_{l,n} = (q_{l,n} + Y_n/t)/f \quad (2.32)$$

$$y_n = (i + Y_n/t)/f. \quad (2.33)$$

(El punto de silla para ψ_0 cuando $x_c - x > 0$ se mueve hacia la derecha desde $p = -\infty$ hasta $t = 0$, pero (2.30) sigue siendo válida.)

Algunos de los términos de ψ_n pueden despreciarse en circunstancias especiales debido a su dependencia exponencial. Los términos $n = 2, 3, 5, 6$ son importantes solamente para valores pequeños de $|x_c|$. En problemas de colisión, $|x_c|$ es normalmente lo suficientemente grande para que no sea necesario considerar esos términos. Sin embargo, serán importantes en problemas de "decaimiento", donde el estado se localiza inicialmente en la región del potencial. Si no se está interesado en la región ocupada por el potencial, próxima al origen $x = 0$, el término $n = 4$ también puede despreciarse. En consecuencia, para un análisis asintótico (valores de $|x|$ grandes) del paquete preparado inicialmente lejos del centro del potencial, $\psi(t) \approx \psi_0 + \psi_1$ es una excelente aproximación. De hecho, para el paquete reflejado después de la colisión ψ_1 es el único término importante. En la figura 2.7 se muestra una configuración particular de los seis polos en R_1 . Denotaremos esos polos de la siguiente manera: $p_{1,2,3}$ son, como en la sección previa, las raíces de C , mientras que $p_4 = p_c + ib$, $p_5 = p_c - ib$, y $p_6 = i$. La configuración corresponde a $b < \text{Im}(p_1)$ y $p_c > \text{Re}(p_1)$. Obsérvese que los polos *estructurales* de la función de onda inicial, p_4 y p_5 , son también polos para la fracción racional R_0 correspondiente al movimiento libre.

En determinadas circunstancias las integrales (2.17) para los términos $n = 0, 1$ pueden aproximarse por la aportación del punto de silla y/o los polos correspondientes. Además, estas aportaciones permiten analizar de forma sencilla algunos de los mecanismos básicos de la propagación. Así, para tiempos muy cortos, el punto de silla del camino de máxima pendiente de

descenso está lejos de cualquiera de los polos en el eje real positivo, de forma que la contribución principal a la integral a lo largo de D_n viene del momento grande del propio punto de silla. Ésta puede calcularse aproximando $R_n(u) \approx R_n(u=0)$ e integrando,

$$\psi_n^s = K_n e^{iY_n^2/(2t)} \sqrt{\pi} \left[\frac{B_n}{f y_n^2} - \sum_l \frac{A_{l,n}}{u_{l,n}} \right]. \quad (2.34)$$

En el proceso de deformación del contorno Γ al contorno $D_n(t=0)$ ($n=0,1$) se cruzaron los polos p_4 (para $n=0,1$) y p_6 (para $n=1$) en el plano superior p , por lo que hemos de sumar la contribución de los residuos en cada caso. La contribución general del residuo de un polo simple en las integrales (2.17) será de la forma

$$K_n e^{iY_n^2/(2t)} e^{-u_{i,n}^2} 2i\pi A_{l,n}, \quad (2.35)$$

y para el polo de segundo orden p_6 ,

$$\frac{-4i\pi}{f} y_n K_n B_n e^{iY_n^2/(2t)} e^{-y_n^2}. \quad (2.36)$$

El residuo del polo p_4 es particularmente importante porque crece exponencialmente con el tiempo cuando el punto de silla de D_1 se mueve hacia la izquierda. En el instante

$$t_4 = -\frac{Y_n}{b+p_c}, \quad (2.37)$$

D_1 cruza p_4 y la contribución del residuo se anula. Por supuesto, el efecto final del polo en la función de onda total no es discontinuo y se tiene en cuenta completamente en la función w de la expresión exacta (2.30), pero la aproximación burda dada por la exponencial proporciona una descripción aproximada muy simple. Poco después de t_4 se cruza el polo $p_5 = p_c - ib$ en el cuarto cuadrante. El instante del cruce vendrá dado por

$$t_5 = \frac{Y_n}{b-p_c}, \quad (2.38)$$

de forma que se debe considerar un nuevo residuo.⁷ Al contrario del residuo de p_4 , esta contribución decrece exponencialmente con el tiempo porque el polo está situado en el semiplano superior. La contribución formal es la misma que en la ecuación (2.35) pero con un signo menos, ya que el bucle en torno a p_5 tiene el sentido horario. Por tanto, *el responsable del mecanismo básico del crecimiento y posterior decaimiento en el tiempo del paquete libre y de colisión es el efecto sucesivo de los residuos de p_4 y p_5* . Para $n=1$ también se cruzaría el polo resonante, y la contribución del residuo correspondiente debe considerarse en general, pero para la configuración particular de la figura 2.7, $|\text{Im}(p_1)| > b$, decae más rápido que las otras aportaciones, y por tanto se puede despreciar.

⁷Salvo que $b > p_c$, en cuyo caso el polo p_5 nunca sería cruzado.

2.4 Aplicaciones

En esta sección estudiaremos algunos aspectos de las colisiones dependientes del tiempo con la ayuda de los resultados anteriores. En primer lugar analizaremos los tiempos de retardo. Después ilustraremos diferentes aspectos de las colisiones unitarias para los que el modelo desarrollado permite un análisis completo. Ejemplos adicionales de colisiones de paquetes de ondas y procesos de decaimiento para este potencial separable pueden encontrarse en las referencias [23,28,29]. Nuestro modelo tiene una resonancia simple, pero sistemas con múltiples resonancias, como la doble barrera delta [36], pueden tratarse con las mismas técnicas utilizadas aquí. Por ejemplo, la barrera cuadrada ya ha sido estudiada de esta forma [35].

2.4.1 Tiempos de retardo en paquetes de ondas

Analizaremos las características de la propagación unitaria de dos paquetes cuya anchura inicial en momentos es menor que la anchura de la resonancia $b < |\text{Im}(p_1)|$. En cada caso tomaremos el momento central p_c de forma que el paquete esté o bien fuera o bien dentro de la región de la resonancia.

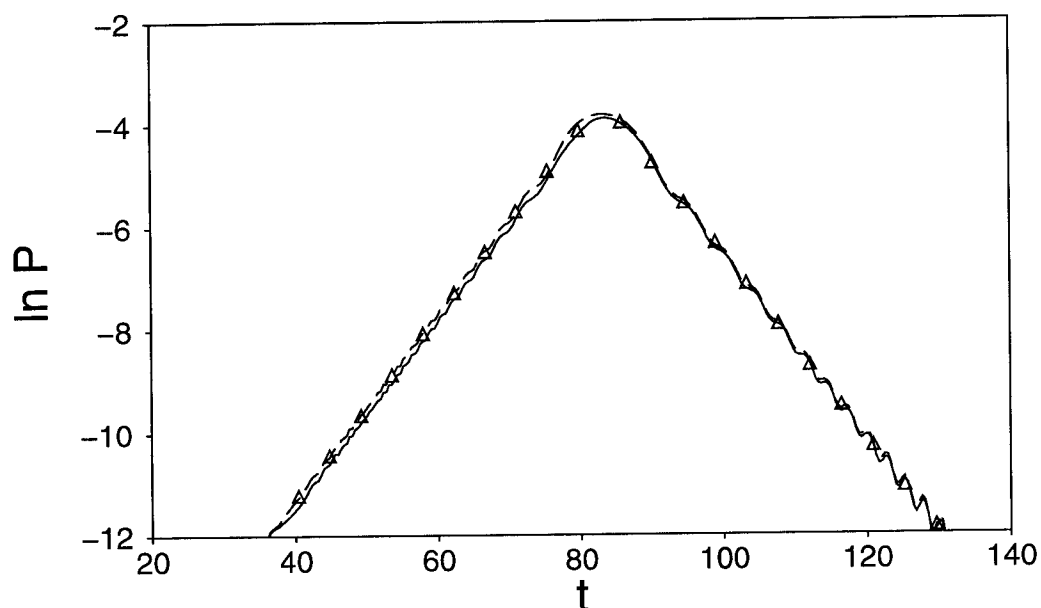


Figura 2.8: $\ln P$ frente a t ($P = |\Psi(x = 100, t)|^2$) para $v = 5$, $p_c = 3$, $b = 0.03$, $x_c = -150$. $\Psi = \psi$ (línea continua), $\Psi = \psi_0$ (línea a trazos) y $\Psi =$ contribución de los residuos de p_4 y p_5 a ψ_0 (triángulos).

La figura 2.8 muestra la densidad de probabilidad transmitida en $x = 100$ en función del tiempo para $p_c = 3$, que corresponde esencialmente a una región de transmisión completa (véase la figura 2.1). La densidad total coincide básicamente en este caso con la densidad

correspondiente a la evolución libre, que está bien descrita por la contribución de los residuos de los polos p_4 y p_5 a ψ_0 . Recuérdese que estos polos son los responsables del crecimiento y decaimiento de la función de ondas.

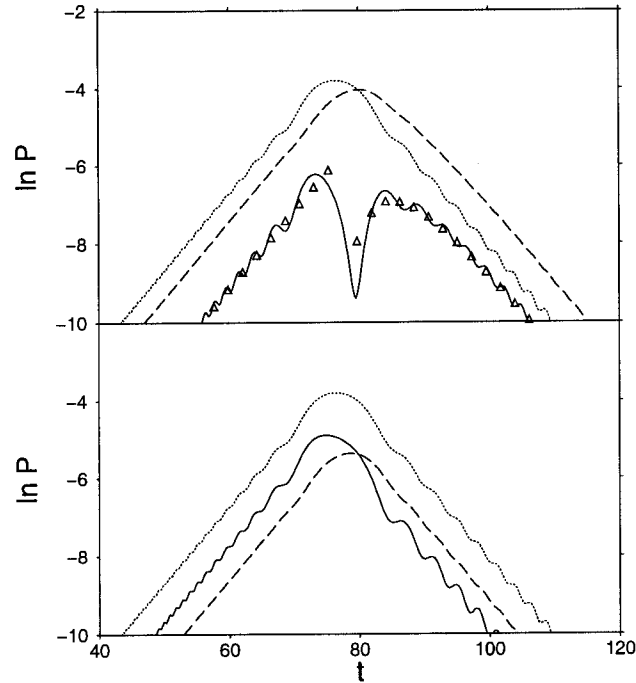


Figura 2.9: $\ln P$ frente al tiempo t ($P = |\Psi(x, t)|^2$) para $\text{Re}(v) = 5$, $p_c = 3.269$, $b = 0.03$ y $x_c = -150$. Figura superior: $\text{Im}(v) = 0$; $\Psi = \psi(x = 100)$ (línea continua), $\Psi = \psi_0(x = 100)$ (línea punteada), $\Psi = \psi_1(x = 100) \approx \psi_1(x = -100)$ (línea a trazos) y $\Psi =$ contribución de los residuos de p_1 , p_4 y p_5 a $\psi_0(x = 100) + \psi_1(x = 100)$ (triángulos). Figura inferior: $\text{Im}(v) = -0.25$; $\Psi = \psi(x = 100)$ (línea continua), $\Psi = \psi_1(x = 100) \approx \psi_1(x = -100)$ (línea a trazos). Se incluye de nuevo la curva $\Psi = \psi_0(x = 100)$ (línea punteada).

Como contraste, en la figura 2.9 p_c corresponde a la parte real del polo resonante. Se representan también las componentes $|\psi_0|^2$ y $|\psi_1|^2$ de la densidad de probabilidad en $x = 100$. En estas condiciones ψ_s puede aproximarse adecuadamente por ψ_1 . Ninguna de las contribuciones, ψ_0 ó ψ_1 , domina. Es más, es la interferencia entre ambas la que determina la forma de la onda total. Una aproximación razonable se obtiene sumando los residuos de los polos p_1 , p_4 y p_5 . Se puede identificar claramente un mínimo en la onda transmitida, que corresponde a la reflexión causada por la resonancia. Para x negativos, no hay interferencias significativas entre la componente libre y $|\psi(x = -100)|^2 \approx |\psi_1(x = -100)|^2 = |\psi_1(x = 100)|^2$. En la figura se pueden destacar dos hechos importantes: aparece un retardo de la parte reflejada y transmitida respecto al caso libre,⁸ y ese retardo es similar en ambos casos. Esto último es consecuencia

⁸Recuérdese que el paquete reflejado se comparaba con la imagen especular del paquete libre respecto al centro de simetría del potencial (en este caso el origen), o de forma equivalente, como se hace en la figura 2.9, es la

de la igualdad entre los retardos estacionarios asociados a reflexión y transmisión discutidos anteriormente. Bajo las condiciones de la figura 2.9 no se observa decaimiento exponencial asociado al polo resonante porque, como se discutió en una sección previa, el efecto de p_1 , con parte imaginaria grande, decae mucho más rápido que el de $p_5 = p_c - ib$.

Consideremos ahora el caso no unitario, en particular, cuando se le añade una parte imaginaria negativa a la constante v del potencial y p_c es el momento real de la resonancia. Si la parte imaginaria es grande en módulo, no hay absorción apreciable y el único efecto importante es la desaparición del pico resonante, como se discutió en la sección dedicada a las colisiones estacionarias (figura 2.1). Sin embargo, si la parte negativa es pequeña aparecen dos efectos significativos: parte del paquete es absorbido y se crea una asimetría entre los retardos de los paquetes reflejados y transmitidos, el primero ligeramente más retrasado que el paquete libre (a semejanza del caso unitario), y el segundo ligeramente adelantado. Este efecto se muestra en la figura 2.9, y no es más que la consecuencia de la asimetría discutida en el caso estacionario.

2.4.2 Decaimiento exponencial en colisiones resonantes

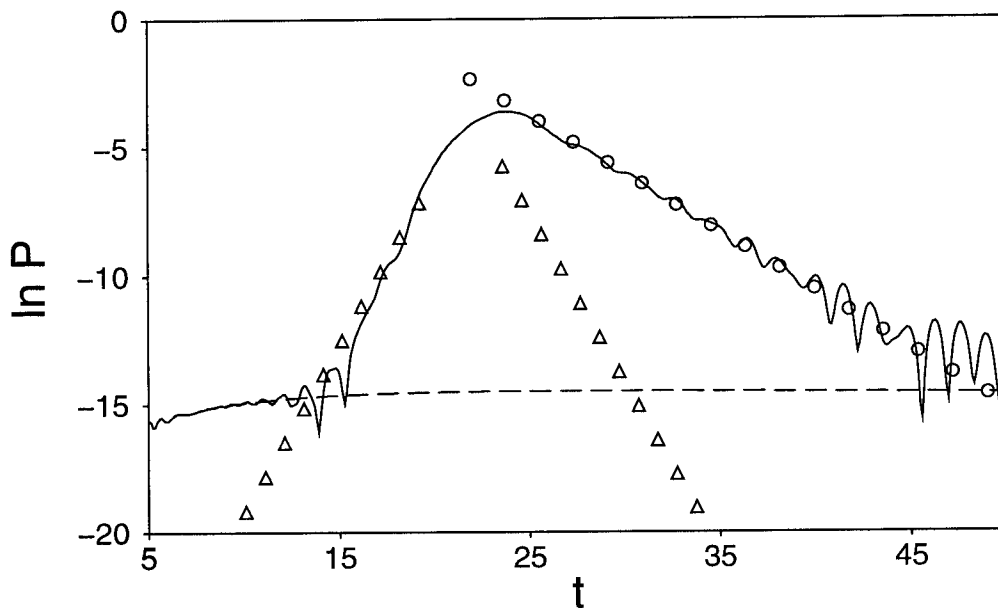


Figura 2.10: $\ln P$ frente a t ($P = |\Psi(x = -50, t)|^2$) para $v = 5$, $p_c = 3.269$, $b = 0.2$ y $x_c = -20$: $\Psi = \psi$ (línea continua), $\Psi = \psi_0$ (línea a trazos), $\Psi =$ contribución de los residuos de p_4 y p_5 a $\psi_0 + \psi_1$ (triángulos) y $\Psi =$ contribución del residuo de p_1 a $\psi_0 + \psi_1$ (círculos).

El decaimiento exponencial es uno de los temas más estudiados en colisiones unitarias (véase por ejemplo [37]). En nuestro modelo, el decaimiento exponencial asociado a la resonancia

imagen especular del paquete reflejado el que se compara con el caso libre.

se observa mejor cuando $b > |\text{Im}(p_1)|$ y para el paquete reflejado, ya que en ese caso ψ_0 es muy pequeña y su interferencia con ψ_s es mínima. Un ejemplo de este tipo se muestra en la figura 2.10.

Obsérvese que el crecimiento de la densidad de probabilidad está dominado por las características del paquete de ondas, esto es, por el polo estructural p_4 , mientras que el decaimiento depende de p_1 . Esta asimetría es de interés, por ejemplo, para determinar los diferentes tiempos que se necesitan para *cargar* o *descargar* estructuras mesoscópicas, tales como el pozo en un diodo resonante compuesto por una doble barrera. [38,39].

2.4.3 Efectos de la resonancia en paquetes arbitrarios

En paquetes con un momento medio arbitrario, pero que solapen con el momento (real) de la resonancia p_{res} , aparece un mínimo en la densidad de probabilidad del paquete transmitido, aspecto que ya fue discutido en relación a la figura 2.9. La posición de ese mínimo variará al evolucionar el paquete, y la denotaremos por $x_{res}(t)$. El efecto se muestra en la figura 2.11.

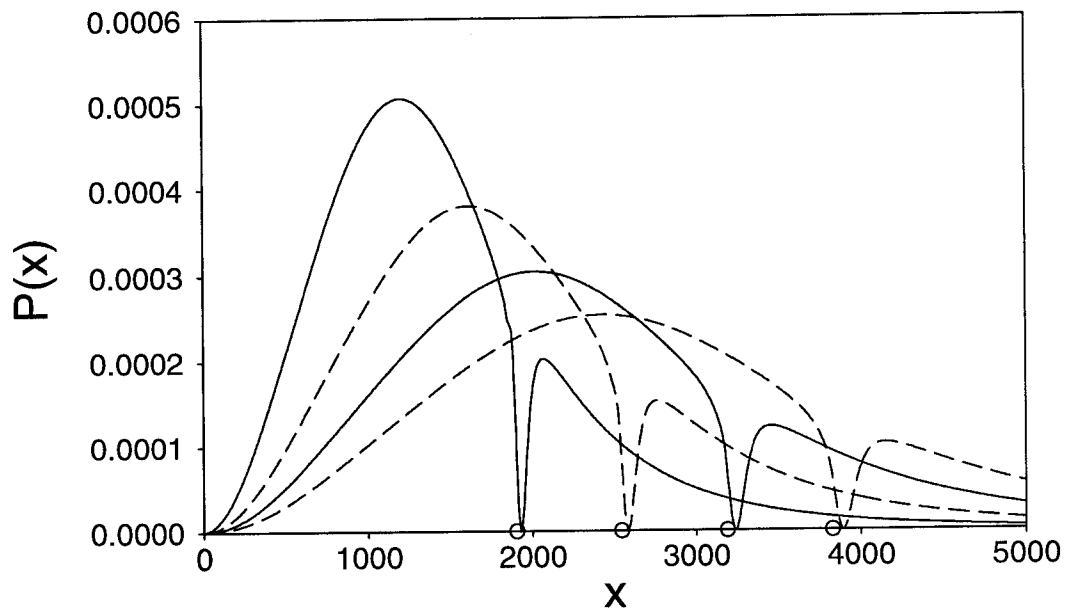


Figura 2.11: $P(x) = |\psi(x,t)|^2$ frente a x para $t = 600, 800, 1000, 1200$ (líneas continuas y a trazos alternativamente). Las posiciones donde el contorno D_1 cruza el polo p_1 se indican con círculos. Los parámetros son $v = 5$, $p_c = 2$, $b = 2$ y $x_c = -20$.

M. H. Bramhall y B. H. Casper [40], y A. Edgar [41] describieron este fenómeno para paquetes reflejados en colisiones con potenciales con un máximo de transmisión en la resonancia, pero no discutieron el movimiento del mínimo. Se puede comprobar que la velocidad de ese movimiento

es diferente a la velocidad media del paquete transmitido.⁹ En consecuencia, se trata de una característica dependiente del potencial (y no del estado), asociada con el polo resonante. Como se muestra en la figura 2.11, la posición crítica donde el camino de máxima pendiente de descenso cruza el polo resonante p_1 es una buena aproximación de x_{res} .

$$x_{res}(t) \approx x_c + [\text{Re}(p_1) + \text{Im}(p_1)]t. \quad (2.39)$$

2.4.4 Colisiones de baja energía

El potencial separable refleja las componentes de momentos bajos debido al pico de energía cero en la reflectancia, o lo que es equivalente, al mínimo en la transmitancia (figura 2.1). El punto de silla del camino de máxima pendiente de descenso se mueve desde momentos altos (donde no hay reflexión) a tiempos pequeños hacia momentos bajos (para los que se incrementa la reflexión) a tiempos grandes. Como consecuencia de esta reflexión selectiva, se produce un avance del paquete transmitido con respecto al movimiento libre. Un ejemplo se muestra en la figura 2.12.

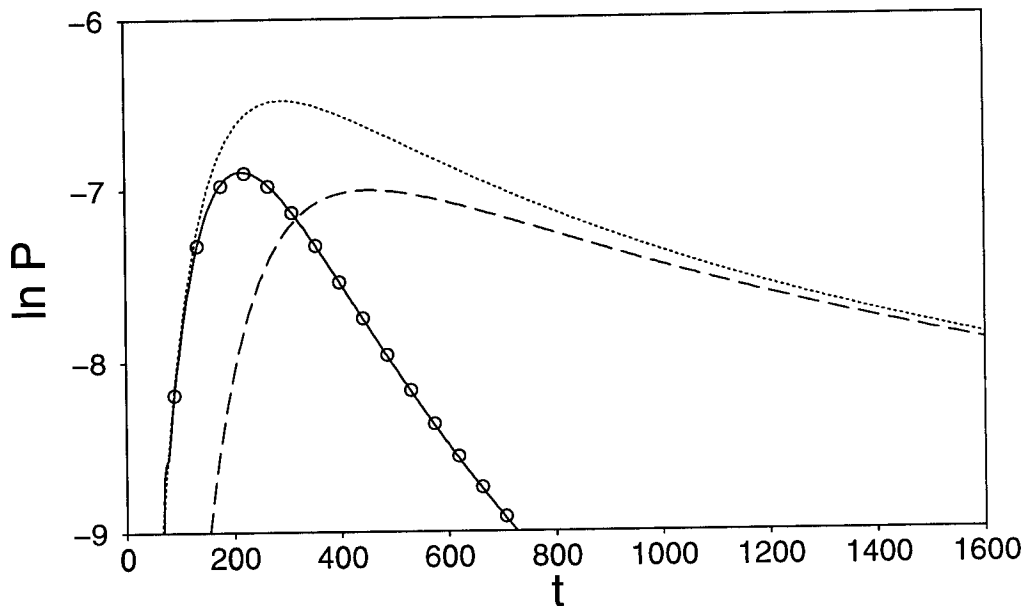


Figura 2.12: $\ln P$ frente a t ($P = |\Psi(x = 100, t)|^2$) para $v = 5$, $p_c = 0.25$, $b = 1$ y $x_c = -100$. $\Psi = \psi$ (línea continua), $\Psi = \psi_0$ (línea punteada) y $\Psi = \psi_1$ (línea a trazos) y $\Psi = \psi_0^{saddle} + \psi_1^{saddle}$ (círculos).

En este caso particular b es bastante grande y el solapamiento del paquete inicial con la región de la resonancia es despreciable, de forma que el residuo de los polos tiene una influencia mínima en el resultado final, que se vuelve indistinguible, en la escala de la figura, del resultado

⁹Variando los parámetros del paquete de ondas, p_c y b , $x_{res}(t)$ permanece esencialmente inalterado.

de aproximar $\psi_0 + \psi_1$ por la aportación de los puntos de silla, $\psi_0^s + \psi_1^s$. Aunque los residuos de los polos no contribuyen de forma apreciable, el efecto de las diferentes singularidades pueden separarse de acuerdo con su contribución a $\psi_0^s + \psi_1^s$ (2.34). En la figura 2.12, se requiere el efecto combinado de las contribuciones de p_1, p_3, p_4 y p_6 para conseguir un buen acuerdo con el resultado exacto.

2.4.5 Comportamiento asintótico a tiempos muy grandes

A tiempos grandes el punto de silla del camino de integración de máxima pendiente de descenso D_n está muy próximo al origen $q = 0$, y las exponenciales $e^{-u_n^2}$ se vuelven funciones gaussianas muy estrechas en el plano de momentos complejos. Se puede obtener una fórmula asintótica para el comportamiento a tiempos grandes desarrollando en torno al origen los factores I_0 y I_s (2.15, 2.16) que multiplican esas exponenciales en las integrales de ψ_0 y ψ_s , y reteniendo los primeros términos,

$$\langle x|\psi \rangle \sim \frac{(1-i)}{4\pi^{1/2}} \left(\frac{1}{t}\right)^{3/2} \frac{d^2}{dp^2} (I_0 + I_s)|_{p=0}. \quad (2.40)$$

En consecuencia, la densidad de probabilidad decae asintóticamente de la forma t^{-3} , como se muestra en la figura 2.13.

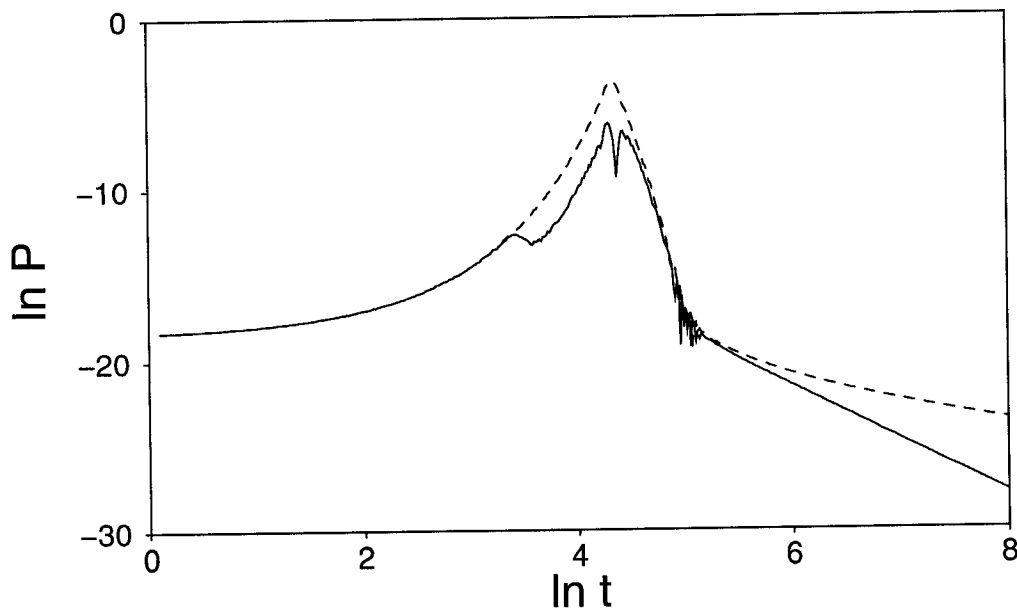


Figura 2.13: $\ln P$ frente a $\ln t$ ($P = |\Psi(x = 100, t)|^2$) para $v = 5$, $p_c = 3.269$, $b = 0.03$ y $x_c = -150$. $\Psi = \psi$ (línea continua) y $\Psi = \psi_0$ (línea a trazos).

En cambio, para el movimiento libre la dependencia asintótica es t^{-1} , ya que no hay ninguna contribución de los términos de colisión que cancele la del término de orden cero. El límite

Capítulo 3

Potenciales absorbentes

asintótico (2.40) y la integración sobre x conmutan porque las series asintóticas son uniformes y pueden integrarse término a término [42]. Eso implica que la probabilidad de permanecer en cierta región del espacio tiene también la dependencia asintótica t^{-3} cuando $t \rightarrow \infty$ [27,43]. Este modelo proporciona por tanto un claro contraejemplo del comportamiento asintótico predicho por G. García Calderón y colaboradores [44]. De hecho, existen argumentos generales que predicen el comportamiento ilustrado por el modelo [27].

2.4.6 Comportamiento asintótico a tiempos muy cortos

Por último examinaremos la densidad de probabilidad cuando el cociente x/t es grande. En este caso los términos importantes serán $n = 0, 1$, y todos los polos estarán lejos del camino de máxima pendiente de descenso D_n . Luego es posible aproximar la integral por la contribución del punto de silla (2.34). Sin embargo, como p_1^s es muy grande, los residuos $A_{l,1}$ serán pequeños y la contribución de ψ_1^s puede despreciarse con respecto a la contribución de ψ_0^s . Como consecuencia, la cola delantera del paquete de ondas es la misma con y sin el potencial de interacción. Esto es razonable puesto que las componentes de momento muy alto, que son las que determinan el comportamiento del paquete en estas condiciones, se ven muy poco afectadas por el potencial. En resumen, la expresión asintótica de $\psi(x)$ a t pequeños se obtiene teniendo en cuenta que $\psi \sim \psi_0 \sim \psi_0^s$,

$$|\psi(x)|^2 \sim \frac{2b^3}{\pi t} \frac{1}{\{[p_c + (x_c - x)/t]^2 + b^2\}^2} \sim \frac{2b^3 t^3}{\pi (x_c - x)^4}. \quad (2.41)$$

Capítulo 3

Potenciales absorbentes

En el capítulo 1 se introdujo el concepto general de potencial absorbente. En este capítulo nos centraremos en aspectos prácticos del uso y construcción de potenciales absorbentes como herramientas auxiliares en cálculos numéricos de colisiones moleculares. En la sección 3.1 repasaremos los principales métodos en los que intervienen, lo que nos permitirá justificar algunas exigencias adicionales sobre los potenciales; luego discutiremos, en la sección 3.2, cómo se construyen y/u optimizan las distintas formas funcionales; en la sección 3.3 compararemos sistemáticamente su rendimiento; en la sección 3.4 resumiremos los principales resultados y por último ilustraremos la bondad de uno de los potenciales propuestos con el sistema colineal $H + H_2$ en la sección 3.5. Nos basaremos en las referencias [45,46,47].

3.1 Potenciales complejos en colisiones moleculares

3.1.1 Absorbentes en la “zona asintótica lejana”

Los métodos de propagación de paquetes de ondas (o “métodos dependientes del tiempo”) ofrecen una serie de ventajas respecto a los “métodos estacionarios”. A la hora de obtener secciones eficaces, probabilidades de reacción o de transición estado a estado, son relativamente sencillos de concebir y programar. Además, una única propagación proporciona una columna completa de la matriz S para un intervalo amplio de energías, y sus resultados se interpretan en términos sencillos e intuitivos: al seguir la dinámica del sistema permiten visualizar los mecanismos de reacción. Proporcionan también la descripción adecuada de los experimentos recientes en los que la dependencia temporal de los procesos estudiados (debido al uso de láseres pulsados en la preparación o en la detección) es un ingrediente fundamental.

Sin embargo, su uso práctico ha sido más tardío que el de los métodos estacionarios, puesto que hubo que esperar al descubrimiento de algoritmos de propagación eficientes [48,49] para que comenzaran a ser viables computacionalmente. Los potenciales absorbentes son unas herramien-

tas auxiliares que han contribuido considerablemente al desarrollo de estos métodos [49].

El estudio numérico de la propagación de paquetes de ondas requiere discretizar las coordenadas continuas mediante una red finita de puntos. En sistemas no acotados espacialmente, y en particular en las colisiones, esta red no puede reproducir la dinámica exacta indefinidamente, ya que en algún momento se alcanzan sus fronteras, y se producen efectos de contorno espúreos [50]. Cuando el paquete de ondas alcanza uno de los extremos es, o bien reflejado, o bien transmitido al extremo opuesto, dependiendo de las condiciones de contorno utilizadas. En ambos casos el paquete de ondas interferirá consigo mismo, deteriorando la calidad del cálculo. Una solución sencilla consiste en ampliar la red de forma que no se alcancen las fronteras durante el tiempo que dure el cálculo, pero esto lo ralentiza considerablemente, y el estudio puede volverse inviable en muchos casos.

Una opción más eficaz es introducir potenciales complejos que absorban el paquete de ondas en los bordes de la red. Se utilizaron de forma pionera en el estudio de la fotodisociación molecular [51], aunque es en las colisiones reactivas donde han alcanzado un papel más relevante.

Como ejemplo de colisión reactiva tomemos la colineal átomo-molécula diatómica, $A + BC \rightarrow AB + C$. En el caso más estudiado A , B y C representan átomos de hidrógeno. Para él se dispone de superficies de potencial fiables, por lo que constituye la referencia central a la hora de comprobar nuevos métodos. Las colisiones colineales pueden proporcionar buenas aproximaciones de las probabilidades de reacción en tres dimensiones espaciales (3D) en algunos casos; esto ocurre en particular en la reacción $H + H_2$ debido a que el "cono de aceptación" del átomo favorece la configuración colineal.

El objetivo de los métodos dependientes del tiempo es resolver la ecuación de Schrödinger para el sistema reactivo $A + BC$,

$$i\hbar \frac{d\Psi(t)}{dt} = H\Psi(t), \quad (3.1)$$

con la condición inicial a t_0 , $\Psi(t_0)$. El problema, tras las suposiciones habituales sobre la separación de grados de libertad electrónicos y nucleares (aproximación de Born-Oppenheimer), se reduce al estudio del movimiento nuclear sobre un potencial efectivo (la *superficie de energía potencial*). Es necesario escoger un conjunto adecuado de coordenadas para los grados de libertad nucleares. Generalmente se utilizan *las coordenadas escaladas de Jacobi* [52], Q_α y q_α . Se trata de dos pares de coordenadas ($\alpha = 1, 2$), cada uno de los cuales hace referencia de forma natural a los diferentes canales asintóticos, $A + BC$ ($\alpha = 1$) y $AB + C$ ($\alpha = 2$). Estas coordenadas se relacionan con las coordenadas (no escaladas) de Jacobi R_α , que es la distancia entre el átomo aislado y el centro de masa de la molécula diatómica en cada caso, y r_α , que es la distancia

intramolecular en la diatómica correspondiente,

$$\begin{aligned} Q_\alpha &= F_\alpha R_\alpha, \\ q_\alpha &= r_\alpha / F_\alpha, \end{aligned} \quad (3.2)$$

donde

$$\begin{aligned} F_1 &= \left(\frac{m_A(m_B + m_C)^2}{(m_A + m_B + m_C)m_B m_C} \right)^{1/4}, \\ F_2 &= \left(\frac{m_C(m_A + m_B)^2}{(m_A + m_B + m_C)m_A m_B} \right)^{1/4}, \end{aligned} \quad (3.3)$$

y m_A , m_B y m_C son las masas de los átomos A , B y C respectivamente.

En cualquier par de coordenadas escaladas el hamiltoniano del sistema será

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial Q_\alpha^2} + \frac{\partial^2}{\partial q_\alpha^2} + V(Q_\alpha, q_\alpha), \quad (3.4)$$

donde $\mu = (m_A m_B m_C / (m_A + m_B + m_C))^{1/2}$ es la masa efectiva y $V(Q_\alpha, q_\alpha)$ es el potencial efectivo, que puede separarse en dos contribuciones,

$$V(Q_\alpha, q_\alpha) = V^{int}(Q_\alpha, q_\alpha) + V^{vib}(q_\alpha). \quad (3.5)$$

$V^{vib}(q_\alpha)$ es el potencial vibracional de la molécula aislada en el canal α y V^{int} es el potencial de interacción, que se anulará cuando la distancia átomo-molécula Q_α sea lo suficientemente grande, pero también cuando lo sea q_α , es decir, en las "regiones asintóticas".

La forma habitual de estudiar colisiones reactivas consiste en preparar un paquete de ondas en una de las regiones asintóticas, por ejemplo Q_1 grandes, como el producto de un estado vibracional determinado de la molécula BC por una gaussiana en la variable *traslacional* Q_1 , con momentos dirigidos hacia la zona de interacción, y propagarlo mediante algún algoritmo como el basado en los *polinomios de Chebychev* [53] o el de *partición del operador de evolución* (POE) [54]. Estos algoritmos numéricos requieren representar el sistema en una red de puntos, en este caso bidimensional, por ejemplo (Q_1, q_1) , que generalmente se extiende hasta regiones donde el potencial de interacción V^{int} es nulo, es decir, que los sistemas átomo y molécula diatómica puedan considerarse independientes en cada una de las disposiciones α . La región de Q_1 grandes y q_1 moderados corresponderá por tanto al canal de los reactivos y la de q_1 grandes y Q_1 moderados a la de los productos. Junto a la propagación es necesario extraer las amplitudes de colisión, o las probabilidades de transición estado-estado, probabilidades de transición inelástica, etc. Como se comentó anteriormente, el problema surge cuando se requiere que la propagación se extienda hasta tiempos grandes, por ejemplo por la existencia de resonancias que conllevan

la permanencia de parte del paquete de ondas en la región de interacción por un periodo largo de tiempo. En este caso, el paquete de ondas puede alcanzar los extremos de la red (en el problema colineal los valores máximos de Q_1 o q_1). En un problema de colisiones colineales, una posible solución consiste en incluir dos potenciales absorbentes,¹ uno en cada una de las regiones asintóticas, correspondientes a Q_1 y q_1 grandes, para absorber la función de onda y evitar que alcance los extremos. Los potenciales dependerán en cada caso de la coordenada traslacional correspondiente y le son exigibles determinadas propiedades, como que sean buenos absorbentes para las energías traslacionales presentes en el paquete de ondas, y que ocupen pocos puntos de red. En las primeras aplicaciones el potencial se colocaba en la región asintótica lejana, para facilitar el análisis de los productos; se obtiene así información sobre las transiciones del estado vibracional inicial a los estados vibracionales finales en el canal de los productos.

El procedimiento descrito ha sido utilizado, por ejemplo, para las reacciones colineales $H + H_2 \rightarrow H_2 + H$ [52], $C + NO \rightarrow CN + O$ [55] y $Li + HF \rightarrow LiF + H$ [56]. A pesar de que en principio podría utilizarse para problemas con cualquier número de grados de libertad (por ejemplo una reacción átomo-molécula diatómica general tiene tres grados de libertad), el esfuerzo numérico exigido lo hace inviable. En la siguiente subsección discutiremos métodos alternativos para abordar sistemas con un número mayor de dimensiones.

3.1.2 Otros métodos dependientes del tiempo

En los métodos dependientes del tiempo que describiremos a continuación los potenciales absorbentes constituyen un elemento central, y no meramente auxiliar como en el apartado anterior. Estos métodos están propuestos o inspirados en los trabajos de D. Neuhauser, M. Baer y colaboradores. La idea básica consiste en usar los potenciales complejos en la zona asintótica cercana a la de interacción (o incluso poco después de la zona del "estado de transición") para bloquear los canales de los productos y convertir así el problema reactivo en uno esencialmente inelástico [57]. Por ejemplo, en la reacción colineal el potencial absorbente se incluiría en la región de q_1 moderados. Esto, unido al uso de operadores de proyección asociados con los estados vibracionales del canal de los reactivos, permite trabajar en la región asintótica del canal reactivo con un sistema de ecuaciones acopladas en una dimensión para cada estado vibracional (en vez de con una red bidimensional), y en dos dimensiones sólo en la zona de interacción. En una reacción átomo-molécula diatómica general los posibles canales serían $A + BC$, $AB + C$ y $AC + B$, una de las cuales correspondería al canal de los reactivos y el resto a los productos. Este método fue utilizado, por ejemplo, para el estudio de la reacción $H + H_2$ colineal [57] y

¹Existen otros medios de evitar que el paquete alcance los extremos de la red, pero el método basado en potenciales absorbentes es el más utilizado en la práctica.

en 3D [58]. Con su forma inicial [57], no es posible obtener las probabilidades estado a estado, pero sí las probabilidades totales de reacción para cada canal mediante el flujo absorbido.

En principio, para calcular las amplitudes de colisión estado a estado podríamos recurrir al esquema discutido en la subsección anterior, en el que la red bidimensional abarca todas las zonas asintóticas, pero ya hemos señalado las limitaciones que eso conlleva. Como alternativa, se han desarrollado una serie de métodos basados en el uso de potenciales absorbentes en la proximidad de la zona de interacción, pero que consideran más de un canal explícitamente [59,60]. Así se ha estudiado la reacción $H + H_2$ en 3D, o reacciones como $F + H_2 \rightarrow HF + H$, $D + H_2 \rightarrow HD + H$ [61], y $H_2(\nu = 0, 1, j = 0) + OH(\nu = 0, 1, j = 0) \rightarrow H + H_2O$ [62]. Entre estos métodos, el más prometedor es el propuesto por T. Peng, Z. H. Zhang y colaboradores [63], denominado *desacoplamiento de reactivos y productos*, que emplea potenciales complejos, tanto absorbentes como creadores. La idea consiste en absorber la función de onda entrante en el canal reactivo, para posteriormente propagarla en cada canal por separado. Para ello la función de onda se separa como suma de componentes correspondientes a reactivos (r) y productos (p), $\Psi = \Psi_r + \sum_p \Psi_p$. La presencia del potencial absorbente en la entrada de cada canal permite escribir la ecuación (3.1) como

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d\Psi_r(t)}{dt} &= H\Psi_r(t) + \sum_p V_p \Psi_r(t), \\ i\hbar \frac{d\Psi_p(t)}{dt} &= H\Psi_p(t) - \sum_p V_p \Psi_r(t), \end{aligned} \quad (3.6)$$

donde V_p es un potencial absorbente utilizado con el fin de desacoplar la ecuación para reactivos y productos. La primera de las dos ecuaciones es la misma que la utilizada en los métodos anteriores [57], y da la evolución de la función de ondas en el canal de los reactivos y en la región de interacción. Esta ecuación está desacoplada de las siguientes (una para cada p). Sin embargo, cada una de estas últimas tiene un término ($-\sum_p V_p \Psi_r(t)$) que se interpreta como un término fuente que *inyecta* la parte de la función absorbida en cada canal ($-V_p$ será el potencial *creador* asociado al potencial absorbente V_p). Este método tiene la ventaja de que la función de onda en cada canal reactivo puede propagarse representada en las coordenadas de Jacobi correspondientes a su disposición, evitando el cálculo de las amplitudes de colisión en las coordenadas de Jacobi de los reactivos, muy poco eficiente computacionalmente. Por otra parte permite propagar solamente en aquellos canales de productos que interesen. El único esfuerzo adicional consiste en el cambio del término $V_p \Psi_r(t)$ a las coordenadas utilizadas en la propagación en cada uno de los canales reactivos, pero esto debe efectuarse sólo en la región donde V_p es no nulo. Por ejemplo, en el sistema colineal se propagaría la función de ondas en el canal reactivo y en la zona de interacción en las coordenadas Q_1 y q_1 . La segunda ecuación, correspondiente en este

caso al canal de los productos, podría ser o no propagada (o incluso podrían almacenarse los valores de $V_p\Psi_r(t)$ para uso posterior). En el primer caso, se transformaría el término $V_p\Psi_r(t)$ a las coordenadas Q_2 y q_2 y se resolvería la segunda ecuación en estas coordenadas. El uso de V_p no evita los problemas en los extremos de la red, y de nuevo podría ser conveniente introducir potenciales absorbentes para evitar efectos de contorno espúreos [64]. Este método se ha utilizado para el estudio de la reacción $H + H_2$ en 3D [63], y constituye una de las técnicas más prometedoras en el estudio de reacciones que involucren cuatro o más átomos (seis o más grados de libertad), que se empiezan a abordar estos últimos años [65].

3.1.3 Métodos estacionarios

El desarrollo de los métodos dependientes del tiempo ha inspirado nuevos métodos estacionarios paralelos. Por ejemplo, D. Neuhauser y M. Baer han propuesto una versión estacionaria del método descrito anteriormente utilizando de nuevo operadores de proyección y potenciales absorbentes cercanos a la zona de interacción [66]. En este caso los potenciales absorbentes permiten pasar de un problema de colisiones a un problema de estados ligados al simular condiciones de contorno de onda saliente en las fronteras. Además, permiten optimizar el tamaño de la red utilizada, con la precaución de evitar que los absorbentes se superpongan con el potencial físico. Este método ha dado lugar a otros más sofisticados basados en potenciales absorbentes de soporte muy pequeño [67], en el desacoplamiento de los reactivos y los productos [64], o en técnicas estacionarias más tradicionales [68].

El cálculo de constantes de velocidad (térmicas) es otro campo de la química-física donde el desarrollo de métodos con potenciales absorbentes ha adquirido importancia. El objetivo de estos métodos es obtener la constante de velocidad directamente, evitando el cálculo de las amplitudes de colisión, utilizando, por ejemplo, la función de correlación flujo-flujo o la probabilidad acumulativa de reacción. T. Seideman y W. H. Miller propusieron un método para obtener la probabilidad acumulativa de reacción mediante el cálculo de los operadores de Green con potenciales absorbentes [69]. Su papel consiste en imponer condiciones de contorno adecuadas. Este método ha sido utilizado por ejemplo para calcular la constante de velocidad de la reacción $H + O_2 \rightarrow OH + O$ [70]. También se han utilizado los potenciales absorbentes para obtener el operador flujo, a partir del cual se deduce la función de correlación y finalmente la constante de velocidad [50]. Existe cierta controversia acerca de la validez de este método. Se han realizado estudios cuidadosos que muestran que es posible obtener resultados comparables con los de otros métodos sin influencia aparente del potencial absorbente [70]. Sin embargo, algunos autores argumentan que al añadir el potencial absorbente al potencial físico se modifica el espectro del hamiltoniano lo que puede introducir efectos espúreos incontrolados [71,72].

Por último, los potenciales absorbentes, aunque de forma más esporádica, se han utilizado también en métodos para el cálculo de probabilidades de transición en campos dependientes del tiempo [73], ecuaciones de ondas acústica en una y dos dimensiones [74], y en la modelización de detectores. Este último punto lo desarrollaremos más profundamente en el siguiente capítulo de esta Tesis.

3.2 Formas funcionales

3.2.1 Propiedades generales

La elección de un absorbente adecuado es fundamental para obtener resultados fiables con los métodos descritos en la sección anterior (véase por ejemplo [63,70]). Por ello se han dedicado diversos trabajos tanto al análisis de propiedades generales de los potenciales absorbentes como al estudio del comportamiento de formas funcionales específicas [52,69,74-82]. Siguiendo esta línea de trabajo, en este capítulo se describen y comparan diversas formas funcionales. Además, se propondrán nuevos potenciales que aprovechan las interferencias cuánticas para mejorar la absorción.

En todas las aplicaciones citadas el uso del potencial tiene el fin de absorber la parte traslacional de la función de ondas en una zona asintótica, o imponer condiciones de contorno adecuadas para valores grandes de una coordenada. En definitiva, el proceso de absorción es esencialmente unidimensional, y nos limitaremos a estudiar este caso. Por otra parte, es exigible que el soporte del potencial sea lo menor posible para evitar tener que utilizar muchos puntos de la red representándolo, lo que ralentizaría el cálculo. Por ello, nos limitaremos al estudio de potenciales absorbentes con soporte finito, restringiéndonos además al caso de potenciales locales, que son los únicos empleados en la práctica hasta el momento. La naturaleza de las aplicaciones a la que están orientados impone algunas características adicionales, como que sean “robustos” ante discretizaciones espaciales.² En algunos métodos numéricos de propagación es necesario además exigir que el potencial sólo tenga parte imaginaria negativa para evitar inestabilidades.

El comportamiento de un potencial puede cuantificarse mediante sus amplitudes de reflexión y transmisión en función del momento incidente, como se señaló en la sección 1.9 del capítulo 1. Hemos de resolver por tanto la ecuación estacionaria de Schödinger

$$\mathcal{H}(y)\Psi(y) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dy^2} \Psi(y) + \mathcal{V}(y)\Psi(y) = \mathcal{E}\Psi(y), \quad (3.7)$$

²Un potencial es “robusto” si su versión discreta reproduce con un número pequeño de puntos de la red las características esenciales del potencial original, cosa que no sería posible, por ejemplo, cuando éste tenga muchas oscilaciones.

donde $\Psi(y)$ es un estado de energía $\mathcal{E} = p^2/(2m)$. En el contexto de las colisiones colineales reactivas, y sería una de las coordenadas de Jacobi y m sería la masa reducida μ del sistema. \mathcal{V} representa a un potencial absorbente genérico de soporte $[0, L]$ en la coordenada y .

Para analizar y comparar las características del potencial es conveniente introducir unidades adimensionales. Dividiendo (3.7) por $\lambda L^{-1/2}$, donde $\lambda = \frac{\hbar^2}{2mL^2}$, y definiendo el potencial y energía adimensionales como $V = \mathcal{V}/\lambda$ y $E = \mathcal{E}/\lambda$ respectivamente, obtenemos la ecuación adimensional

$$-\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + V(x)\psi(x) = k^2\psi(x), \quad (3.8)$$

donde $x = y/L$, $\psi(x) = L^{1/2}\Psi(y)$ y $k = E^{1/2} = pL/\hbar$ son la coordenada, la función de onda y el número de onda adimensional respectivamente. Nos referiremos al último frecuentemente como "momento". El soporte del potencial absorbente en la coordenada adimensional x es $[0, 1]$.

Por convenio estudiaremos el caso de incidencia desde la izquierda. El objeto central de nuestro estudio será la *probabilidad de supervivencia*,

$$P_s(k) = |R^l(k)|^2 + |T^l(k)|^2, \quad (3.9)$$

introducida en el capítulo 1. Prestaremos especial atención a la región de valores de k pequeños, muy importante en la práctica porque un buen absorbente en esta zona ocuparía un intervalo dimensional $[0, L]$ pequeño, minimizando así el esfuerzo computacional. Además, el entorno de $k = 0$ es importante para describir en las colisiones reactivas el umbral correspondiente a la apertura de un canal.

Distinguiremos en nuestro estudio dos tipos de potenciales:

(a) **Potenciales "tipo I"**, que serán aquellos que incluyan una barrera infinita,

$$V_I(x) = \begin{cases} 0, & \text{si } x < 0 \\ W_I(x), & \text{si } 0 \leq x \leq 1 \\ \infty, & \text{si } 1 < x, \end{cases} \quad (3.10)$$

Debido a la barrera infinita, no existe transmisión en este caso. Los potenciales de tipo I se adaptan naturalmente a condiciones de contorno de Dirichlet homogéneas, en las que se impone la nulidad de la función de onda en los extremos de la caja. Este tipo de condiciones son las naturales en algunos métodos de propagación basados en diferencias finitas [83]. El potencial absorbente se coloca justo antes del borde ($x = 1$) de la red, y la condición sobre la función de onda simula el efecto de la pared infinita sin necesidad de modelarla.

(b) **Potenciales "tipo P"**. No incluyen la pared infinita, luego son adecuados para condiciones de contorno periódicas.

$$V_P(x) = \begin{cases} 0, & \text{si } x < 0 \\ W_P(x), & \text{si } 0 \leq x \leq 1 \\ 0, & \text{si } 1 < x, \end{cases} \quad (3.11)$$

En este caso la parte del paquete de ondas que desaparece por un extremo de la red aparece en el extremo opuesto. El potencial situado en el borde de la red produce tanto reflexión como transmisión (hacia el otro extremo).

Obsérvese que la misma función $W(x)$ puede dar lugar a diferentes valores de la probabilidad de supervivencia $P_s(k)$ en cada uno de los tipos (I y P) de potencial.

3.2.2 Potenciales factorizables: monomios

La mayoría de los potenciales utilizados en la práctica tienen una forma funcional puramente imaginaria, cuyos parámetros pueden variarse con el fin de conseguir la máxima absorción para, o en torno a, un valor del momento k_0 . Muchas de las propuestas de potenciales tienen la forma factorizada

$$W(x; k_0) = -i\eta(k_0)F(x). \quad (3.12)$$

Una vez fijada la función $F(x)$, $\eta(k_0)$ se escoge mediante un proceso de optimización para minimizar la probabilidad de supervivencia en el momento o entorno seleccionado. Se han propuesto diversas formas funcionales para $F(x)$, muchas de las cuales tienen en común ser funciones monótonamente crecientes con la coordenada x en el intervalo $[0, 1]$ correspondiente al soporte adimensional del potencial. Entre éstas se encuentran dependencias como la de tipo monomio [69,75], exponencial [77], seno [52] o producto de potencias por exponenciales [64]. De todas ellas la más estudiada y utilizada en la práctica es la dependencia en monomios de la forma

$$W(x; k_0) = -i\eta(k_0)x^n, \quad (3.13)$$

donde n se toma como un número entero. Estos potenciales para condiciones tipo P han sido estudiados extensamente en diversos trabajos [75,69]. U. V. Riss y H. D. Meyer han realizado un estudio comparativo para los diferentes valores de n [81]: las potencias superiores ($n > 2$) mejoran las absorciones de los potenciales lineales o cuadráticos solo para k_0 grandes, pero las diferencias no son significativas. El error debido a la discretización del potencial puede ser en general mayor que el cambio en la absorción debido al incremento de n . De forma más general D. Macías y colaboradores han estudiado los potenciales monómicos tipo I [79], permitiendo prefactores complejos y exponente n arbitrario. Estos autores concluyen que la inclusión del prefactor complejo mejora la absorción con respecto al caso imaginario. Nosotros hemos comprobado que esto es cierto también para los potenciales del tipo P . Además, encontramos que el comportamiento de los diferentes monomios y otras formas funcionales factorizables monótonamente crecientes es cualitativamente muy similar, en acuerdo con trabajos previos [77]. Luego en nuestro estudio nos limitaremos a los casos $n = 1$ (potencial lineal) y $n = 2$ (potencial

cuadrático) como representativos de los potenciales factorizables. Consideraremos prefactores reales o complejos, η_{LR} o η_{LC} para el caso lineal, y η_{QR} o η_{QC} para el cuadrático,

$$W_{LR}(x; k_0) = -i\eta_{LR}(k_0)x, \quad (3.14)$$

$$W_{LC}(x; k_0) = -i\eta_{LC}(k_0)x, \quad (3.15)$$

$$W_{QR}(x; k_0) = -i\eta_{QR}(k_0)x^2, \quad (3.16)$$

$$W_{QC}(x; k_0) = -i\eta_{QC}(k_0)x^2. \quad (3.17)$$

Si fuera necesario, un subíndice adicional, I o P , especificará el tipo de potencial. En cualquier otro caso debe entenderse que se hace referencia a los dos tipos. Aunque V_{QR} y V_{LR} son casos particulares de V_{QC} y V_{LC} , hemos optimizado las dos formas separadamente para las comparaciones numéricas, ya que el caso η real es el más usado con fines prácticos y servirá como referencia de la bondad de las diferentes propuestas.

Para optimizar el potencial con respecto a un momento k_0 o en un entorno de k_0 se pueden seguir diferentes criterios entre los que se encuentran optimizar la absorción en la propagación de un paquete de ondas [52] o utilizar expresiones semiclásicas [81]. En nuestro caso utilizaremos una técnica basada en la resolución numérica de la ecuación de Schrödinger para determinar las amplitudes complejas de reflexión y transmisión $T^l(k_0)$ y $R^l(k_0)$. A partir de ellas se obtiene la probabilidad de supervivencia $P_s(k_0)$ para el parámetro $\eta(k_0)$, que optimizamos utilizando un método cuasi-Newtoniano estándar.

Se ha argumentado que el potencial lineal presenta una ventaja sobre el resto: "el proceso de optimización del prefactor η , al menos para el caso de prefactores reales, podría evitarse usando una relación propuesta por D. Neuhauser y M. Baer [75] que acota su valor". En cantidades adimensionales, la relación es

$$\frac{k_0}{2} \ll \eta(k_0) \ll 2k_0^3. \quad (3.18)$$

En la figura 3.1 se muestra el valor de η optimizado para los dos tipos de potencial (I y P) frente a las cotas inferior (k_0) y superior ($2k_0^3$) de la desigualdad. Se observa que para la región de $k_0 < 2$ la desigualdad no es válida, mientras que para el resto, a pesar de verificarse, da una idea poco precisa del valor óptimo de η . Por ejemplo, para $k_0 = 10$, (3.18) sólo informa que el valor de η está comprendido entre 5 y 2000, lo que sin duda es una orientación poco útil. De hecho, si tomamos η como el valor medio de los límites de la desigualdad, el valor de la probabilidad de supervivencia es dos ordenes de magnitud superior al valor óptimo. Debido a la dependencia de los límites (k_0 y k_0^3) la indeterminación crece con el valor de k_0 , por lo que, en resumen, las desigualdades anteriores sólo pueden utilizarse como un criterio orientativo, y no evitan el proceso de optimización.

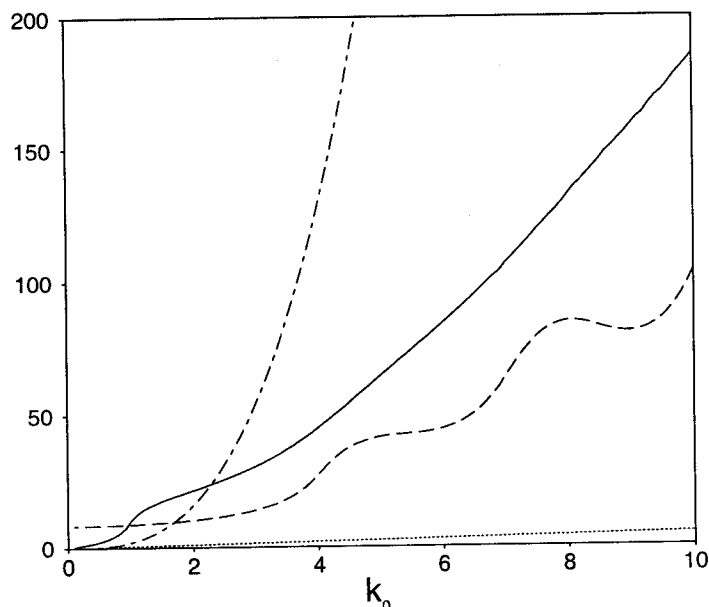


Figura 3.1: η optimizado para k_0 : potenciales lineales tipo P (línea continua) y tipo I (línea a trazos). También se presentan los límites de la desigualdad (3.18): $k_0/2$ (línea punteada) y $2k_0^3$ (línea a trazos y puntos).

M. S. Child [76] por su parte analiza más detenidamente el potencial lineal y propone la siguiente desigualdad,

$$10k_0 \ll \eta(k_0) \ll \frac{k_0^3}{5}. \quad (3.19)$$

En este caso no sería válida para $k_0 < \sqrt{50}$, donde el límite superior de la desigualdad es menor que el inferior (esto ocurre porque se busca una longitud dimensional mínima, o lo que es lo mismo, un momento adimensional mínimo para que el potencial tenga una absorción aceptable; como veremos en la siguiente sección el potencial lineal y los monomios en general con prefactor real son deficientes absorbentes en la región de momentos pequeños, incluso para un sólo valor k_0). Para valores altos de k_0 la dependencia de las cotas con k_0 es similar al caso anterior (3.18), y adolece de los mismos problemas.

3.2.3 Potenciales propuestos por S. Brouard y colaboradores

S. Brouard, D. Macías y J. G. Muga propusieron en las referencias [78,79] una estrategia diferente para construir potenciales absorbentes. Se basa en un método de inversión simple que parte de imponer una dependencia arbitraria a la función de ondas estacionaria para k_0 en la región del potencial, pero dejando algunos parámetros libres para imponerle determinadas condiciones de contorno, en particular la que corresponde a absorción total. Con esta función de ondas e invirtiendo la ecuación de Schrödinger se obtiene un potencial cuyo estado estacionario

correspondiente a k_0 verifica las condiciones de contorno. Además, si se incluyen más parámetros que condiciones de contorno, se pueden exigir condiciones adicionales sobre las amplitudes de reflexión y transmisión en un entorno del momento seleccionado. De esta forma se generara una familia de potenciales $V_{BMM}^{(\nu)}$ que incrementan de forma sistemática el intervalo de absorción. A continuación expondremos las ideas básicas de esta propuesta para condiciones del tipo I [78] y la generalizaremos para condiciones del tipo P .

La dependencia funcional más simple para la función de ondas estacionaria $\psi(x)$ es la polinómica [78],

$$\psi(x) = \sum_{j=0}^J a_j(k_0)x^j, \quad (3.20)$$

donde los coeficientes complejos a_j se obtienen imponiendo $J + 1$ condiciones en las fronteras $x = 0$ y $x = 1$. El caso más simple (que denominaremos orden cero) consiste en tomar sólo tres coeficientes libres ($J = 2$) e imponer la continuidad de la función de ondas y su derivada en $x = 0$ con la condición $R(k_0) = 0$ (esto determina la función de ondas en la región asintótica $x < 0$ y por continuidad en $x = 0$, evitando la existencia de reflexión para k_0). Se supone además una barrera infinita en $x = 1$ para evitar la transmisión. Las tres condiciones toman la forma,

$$\begin{aligned} \psi(x=0) &= 1, \\ \frac{d}{dx}\psi(x=0) &= ik_0, \\ \psi(x=1) &= 0. \end{aligned} \quad (3.21)$$

Substituyendo (3.20) en (3.21) se obtiene un sistema de ecuaciones para los coeficientes a_j . Con estos coeficientes, $W(x)$ puede despejarse de la ecuación de Schrödinger,

$$W_{BMM,I}^{(0)}(x) = k_0^2 + \frac{\psi''(x)}{\psi(x)} = k_0^2 + 2(x-1)^{-1} \left(x + \frac{1}{1+ik_0} \right)^{-1}. \quad (3.22)$$

El potencial resultante es complejo con parte imaginaria negativa, tiene una discontinuidad en $x = 0$ y una divergencia en $x = 1$. Podría pensarse que esto último fuera un grave inconveniente en los métodos discretos, pero como veremos en la siguiente sección resulta ser bastante robusto. La principal ventaja de este método para $J = 2$ es que proporciona un potencial explícito (se evita la tarea de la optimización), que garantiza la absorción completa en cualquier momento seleccionado y con una longitud L arbitraria. Esto es suficiente para algunas aplicaciones. Es también un claro contraejemplo de la creencia bastante extendida de que no existe un potencial perfectamente absorbente de soporte arbitrario, incluso para un solo momento incidente [84,85]. El potencial (3.22) permite además aclarar otros aspectos de los absorbentes que con frecuencia se han ignorado o enunciado incorrectamente en la bibliografía. En primer lugar, el potencial

no tiene que ser necesariamente imaginario, y la adición de una parte real puede mejorar la absorción. Además, como para un momento dimensional p la longitud dimensional L es en principio arbitraria (con tal de que se tome el potencial para el $k_0 = pL/\hbar$ correspondiente), se demuestra que no es necesario que el soporte del potencial sea mayor que una o varias longitudes de onda asociadas a p . (En [82] se interpreta este fenómeno con argumentos semiclásicos). Por último, muestra que las discontinuidades no dan lugar necesariamente a reflexión y no son un obstáculo para alcanzar absorción completa.

Los miembros de orden superior de esta familia de potenciales pueden construirse permitiendo un mayor número de coeficientes ($J > 2$), e imponiendo que las derivadas sucesivas de $R^l(k)$ sean cero para $k = k_0$. Para los potenciales de tipo I , si se impone que ν derivadas sean cero, se necesitará un número de coeficientes $J = 2 + \nu$. Excepto en el caso $\nu = 0$, los coeficientes a_j deben obtenerse numéricamente y, en la práctica, ir más allá de $\nu = 2$ es bastante complicado. Los potenciales resultantes, además, tienen parte imaginaria de signo arbitrario y presentan variaciones rápidas con la coordenada x , por lo que, como veremos en la siguiente sección, no son tan robustos como los de orden cero.

El mismo método puede adaptarse a potenciales de tipo P . En este caso se impone la continuidad de la función de onda y la derivada en $x = 0$ y $x = 1$, con la condición $R^l(k_0) = T^l(k_0) = 0$. En términos de $\psi(x)$ la condición adicional será

$$\frac{d}{dx}\psi(x=1) = 0. \quad (3.23)$$

Si suponemos una dependencia polinómica como en el caso anterior, el primer miembro de la familia tendrá cuatro coeficientes ($J = 4$), y con las condiciones (3.21,3.23) la forma explícita del orden cero para el potencial absorbente tipo P en k_0 será,

$$W_{BMM,P}^{(0)}(x) = k_0^2 + 6 \left[x - \frac{3 + 2ik_0}{3(2 + ik_0)} \right] \left[x + \frac{1}{2 + ik_0} \right]^{-1} [x - 1]^{-2}. \quad (3.24)$$

Este potencial es complejo, con parte imaginaria negativa, discontinuo en $x = 0$, divergente en $x = 1$, y robusto frente a discretizaciones. A diferencia de (3.22) permite la transmisión para momentos diferentes a k_0 , propiedad que como veremos es muy útil a la hora de aprovechar los efectos de interferencia en potenciales formados sumando sucesivamente varias unidades.

Para ampliar la anchura efectiva de absorción, se impone la nulidad de derivadas sucesivas de T^l y R^l para $k = k_0$, de forma que por cada orden adicional son necesarios dos coeficientes más (para potenciales tipo P , $J = 3 + 2\nu$). Los coeficientes adicionales deben calcularse numéricamente, y como en este caso hay mayor número por cada orden, el proceso de construcción es aún más difícil que en el caso anterior.

3.2.4 Potenciales compuestos

A continuación proponemos dos métodos que hacen uso de las interferencias entre caminos asociadas con las *colisiones múltiples* en barreras compuestas, para construir potenciales complejos que absorban en un conjunto seleccionado de momentos incidentes o para un intervalo ancho de momentos. El primer método consiste en la adición de una unidad de potencial apropiada por cada momento absorbido, de forma que se consigue absorción perfecta para los momentos seleccionados. En el segundo no se alcanza absorción perfecta, pero es mucho más robusto numéricamente que el primero, y permite una buena absorción en un intervalo amplio de momentos.

Método 1: Absorción perfecta para un conjunto de momentos

Supongamos dos unidades de potencial complejas, V_1 y V_2 , de soporte finito contiguo, d_1 y d_2 , sea V_1 el primero por la izquierda, y V_2 el segundo (figura 3.2).

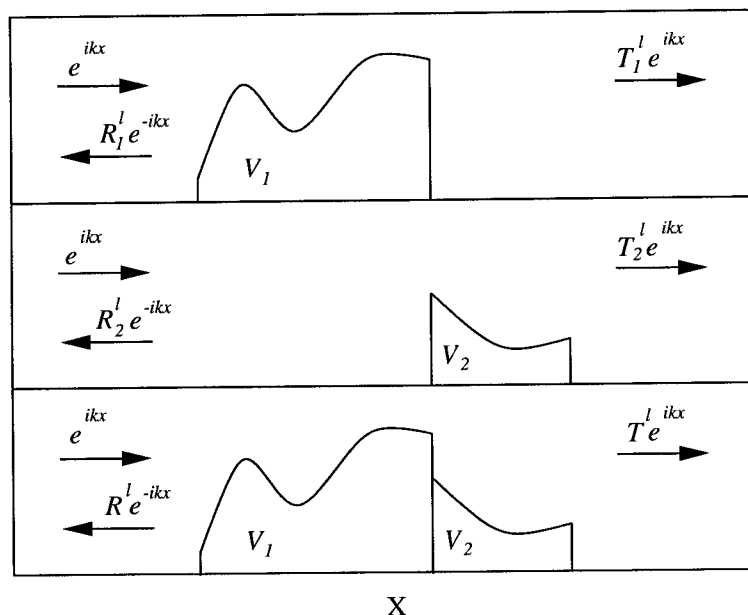


Figura 3.2: Dos unidades de potencial contiguas arbitrarias, V_1 y V_2 , y la barrera compuesta $V_1 + V_2$, con las amplitudes de reflexión y transmisión correspondientes para incidencia desde la izquierda.

En todo lo referente a este método las unidades dimensionales estarán referidas al soporte dimensional del primer potencial, d_1 . Denominemos $T_i^{r,l}$ y $R_i^{r,l}$, $i = 1, 2$, las amplitudes complejas de transmisión y reflexión de la barrera i -ésima aislada, correspondientes a incidencia desde la izquierda (l) y desde la derecha (r). Sean $T^{r,l}$ y $R^{r,l}$ (sin subíndice), las amplitudes de la barrera compuesta, $V = V_1 + V_2$. Estas últimas cantidades pueden obtenerse a partir de las primeras mediante la técnica de *colisiones múltiples* [86], esto es, considerando la suma de las amplitudes

de todos los posibles caminos que finalmente dan lugar a transmisión o reflexión,

$$\begin{aligned} T^l &= T_1^l \left[\sum_{n=0}^{\infty} (R_2^l R_1^r)^n \right] T_2^l = T_1^l \frac{1}{1 - R_2^l R_1^r} T_2^l \\ R^l &= R_1^l + T_1^l R_2^l \left[\sum_{n=0}^{\infty} (R_2^l R_1^r)^n \right] T_1^r = R_1^l + T_1^l R_2^l \frac{1}{1 - R_2^l R_1^r} T_1^r. \end{aligned} \quad (3.25)$$

Supongamos que el potencial V_1 es tal que

$$T_1^l(k_1) = R_1^l(k_1) = 0, \quad (3.26)$$

donde $k_1 > 0$ es un momento adimensional arbitrario ($k_1 = d_1 p / \hbar$). Insertando (3.26) en (3.25) se obtiene que las amplitudes para k_1 del potencial total son $T^l(k_1) = R^l(k_1) = 0$. En otras palabras, si V_1 es un absorbente perfecto en k_1 el potencial total V también lo será. El objetivo de añadir V_2 es absorber para un momento adicional $k_2 \neq k_1$. Si V_2 se construye de forma que

$$T_2^l(k_2) = 0 \quad (3.27)$$

$$R_2^l(k_2) = \frac{R_1^l(k_2)}{R_1^l(k_2) R_1^r(k_2) - T_1^l(k_2) T_1^r(k_2)}, \quad (3.28)$$

se consigue absorción total para k_2 , $T^l(k_2) = R^l(k_2) = 0$. La ecuación (3.28) se obtiene imponiendo $R^l(k_2) = 0$ y despejando R_2^l en (3.25), que quedará en función de cantidades que dependen únicamente de V_1 .

Aunque las dos barreras por separado tienen amplitudes no nulas para k_2 , cuando se colocan juntas las interferencias cancelan exactamente la reflexión global. El potencial así construido absorberá perfectamente dos momentos (k_1 y k_2) y nada impide asociarle una tercera unidad V_3 que absorba en un nuevo momento k_3 . El procedimiento será igual al descrito, donde el papel de V_1 lo representará el potencial compuesto $V_1 + V_2$. Este procedimiento se puede continuar iterativamente al construir un potencial que absorba perfectamente n momentos mediante la asociación de n barreras. Mientras que los trabajos de S. Brouard y colaboradores [78] permitieron mostrar que existía un potencial de soporte finito que absorbía perfectamente para un momento k_0 , el procedimiento anterior permite construir potenciales de soporte finito que absorben perfectamente un número n arbitrario de momentos, siempre que se cuente con las unidades V_i adecuadas. En principio, la única condición sobre los V_i es que las amplitudes para un momento k_i tengan un valor determinado. Para V_1 esto se consigue con el método de inversión descrito en la sección anterior para construir los potenciales BMM de orden cero. El potencial V_2 (y los sucesivos) requiere ligeras modificaciones del método para que la probabilidad de reflexión R_2^l verifique (3.28). Para construir el potencial V_2 entre 1 y $1 + L_2$, ($L_2 = d_2/d_1$), o unidades de potencial adicionales V_j con soporte entre dos puntos $x = z$ y $x = z + L$, es conveniente definir

una nueva variable $y = (x - z)/L$, de forma que las unidades de potencial vayan de $y = 0$ a $y = 1$. Un nuevo número de onda se define como $\hat{k} = Lk$ (recuérdese que L es aquí adimensional). La amplitud de reflexión $r^l(\hat{k})$ para las nuevas variables (\hat{k}, y) está relacionada con las variables originales (k, x) mediante $r^l(\hat{k}) = R^l(k)e^{-2ikz}$ [87]. Es mucho más fácil manipular las restricciones (3.27) y (3.28) utilizando el nuevo conjunto de variables. En particular, para obtener V_2 se supone primero que la onda plana incidente por la izquierda, $\Psi_2(y)$, con número de onda $\hat{k}_2 = L_2k_2$, obedece las siguientes cuatro condiciones

$$\begin{aligned}\Psi_2(y=0) &= 1 + r_2^l, \\ \Psi_2'(y=0) &= i\hat{k}_2(1 - r_2^l), \\ \Psi_2(y=1) &= \Psi_2'(y=1) = 0,\end{aligned}\tag{3.29}$$

con $r_2^l(\hat{k}_2) = R_2^l(k_2)e^{-2ik_2z}$ y $R_2^l(k_2)$ dadas por (3.28). Suponiendo, como anteriormente, una dependencia polinómica, $\Psi_2(y) = \sum_{j=0,3} b_j y^j$, y sustituyendo en (3.29), se encuentra que los coeficientes son

$$b_0 = 1 + r_2^l, \quad b_1 = i\hat{k}_2(1 - r_2^l),\tag{3.30}$$

$$b_2 = -(3 + 2i\hat{k}_2) - r_2^l(3 - 2i\hat{k}_2), \quad b_3 = (2 + i\hat{k}_2) + r_2^l(2 - i\hat{k}_2).\tag{3.31}$$

Despejando en la ecuación de Schrödinger el potencial correspondiente, y reescribiendo el resultado para las variables originales, $\psi_2(x) = \Psi_2(y)$, encontramos que V_2 entre $x = 1$ y $x = 1 + L_2$ tiene la forma

$$V_2(x) = k_2^2 + \frac{\psi_2''}{\psi_2} L_2^2.\tag{3.32}$$

El potencial $V_1 + V_2$ construido de esta manera es perfectamente absorbente para k_1 y k_2 , y la adición de una tercera unidad V_3 no cambiará esta propiedad, como hemos discutido anteriormente. Con ligeros cambios, este método es aplicable cuando se coloca una barrera infinita en el borde derecho de la última barrera. La única diferencia es que no es necesario imponer la condición $\psi'(x = \sum L_j) = 0$, y para la última barrera sería suficiente un polinomio cuadrático.

Obsérvese que los polinomios y el conjunto mínimo de condiciones discutidas aquí tienen la ventaja de proporcionar expresiones explícitas muy simples, pero en principio podrían usarse otras formas funcionales para la función de onda y condiciones adicionales.

La figura 3.3 muestra la probabilidad de supervivencia, $P_s(k)$, para potenciales construidos con dos unidades de la forma descrita (línea continua gruesa y línea punteada). La anchura efectiva de absorción en torno a k_2 se incrementa cuando se reduce L_2 , un efecto reminiscente del ensanchamiento de las resonancias de transmisión cuando las paredes de una barrera doble se estrechan.

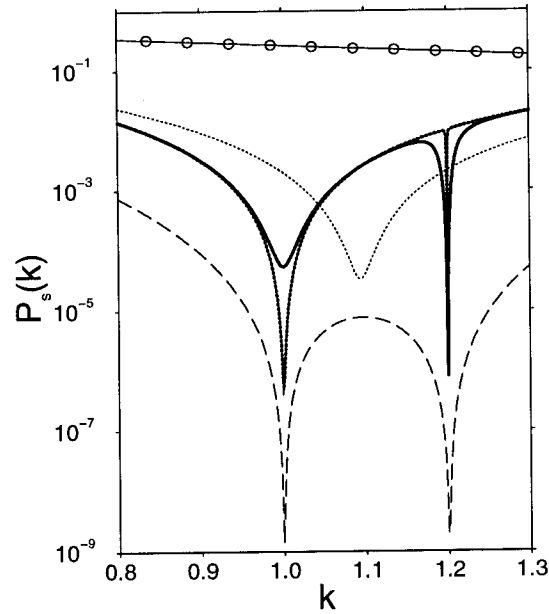


Figura 3.3: Probabilidad de supervivencia, $P_s(k)$ frente a k . Las líneas continua gruesa y punteada gruesa corresponden a potenciales compuestos perfectamente absorbentes con $L_2 = 0.5$ y $L_2 = 1.6$ respectivamente ($L_1 = 1$ en ambos casos), que absorbe en $k_1 = 1$ y $k_2 = 1.2$. Por razones de estabilidad numérica el potencial V_1 teórico se trunca para valores de la parte real o imaginaria mayores de 10^3 . Las líneas punteadas y a trazos corresponden a potenciales compuestos de barreras cuadradas ($V_{SB,P}$) con $N = 2$ y $N = 3$, respectivamente, con la misma longitud total que el potencial de línea gruesa y optimizados para los mismos valores de k ($s = 2$). La línea continua con círculos corresponde al potencial $-i\eta x^2$, donde η minimiza la suma de la probabilidad de supervivencia en los dos momentos seleccionados.

En la figura 3.4 se utilizan tres unidades de potencial para absorber tres números de onda diferentes. El precio que hemos de pagar por requerir absorción perfecta es que, al menos para las unidades de potencial que hemos empleado, aparecen inestabilidades numéricas. A pesar de que el potencial es explícito, la absorción para un momento arbitrario debe calcularse numéricamente. La probabilidad de supervivencia calculada en el entorno de k_2 se vuelve muy sensible a pequeños errores en la discretización de los potenciales si $T_1(k_2)$ es muy pequeña (para una barrera de potencial aislada, las amplitudes de transmisión desde la derecha y desde la izquierda son iguales cuando los niveles del potencial –asintóticos– son iguales a ambos lados y el potencial es local). Aparece como un denominador en la estimación del error de P_s causado por errores de $R_1^{l,r}$ o T_1 . Una vía para evitar este problema en la práctica consiste en truncar los potenciales de forma que $P_s(k_1)$ no sea exactamente cero, aunque sí suficientemente próximo, digamos $P_s(k_1) = 10^{-5}$. Esto incrementa el valor de $T_1(k_2)$ y hace que P_s sea mucho más estable respecto a pequeños errores numéricos debidos a la representación discreta del potencial. Sin embargo, las dificultades se incrementan cuando se añaden más puntos de absorción k_i .

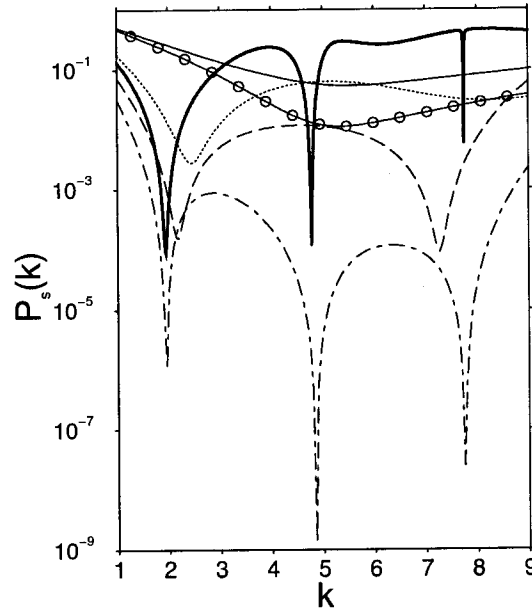


Figura 3.4: Probabilidad de supervivencia $P_s(k)$ frente a k . La línea continua corresponde a un potencial compuesto perfectamente absorbente construido con tres unidades para absorber en $k_1 = 1.94$, $k_2 = 4.84$ y $k_3 = 7.75$, $L_1 = 1$, $L_2 = 0.008$ y $L_3 = 0.024$. Como en la figura 3.3 el potencial se trunca para evitar inestabilidades numéricas. También se muestra la probabilidad de supervivencia para el potencial $V_{SB,P}$ optimizado para los mismos puntos ($s = 3$) y con la misma longitud total: línea continua $N = 1$, línea punteada $N = 2$, línea a trazos $N = 3$, línea a puntos y trazos $N = 4$. La línea continua con círculos corresponde al potencial $-i\eta x^2$, donde η minimiza la suma de la probabilidad de supervivencia para los tres momentos seleccionados.

Método 2: Potenciales compuestos por barreras cuadradas

Describiremos a continuación un procedimiento simple para construir potenciales absorbentes que usa de nuevo las interferencias entre unidades consecutivas pero evita los problemas numéricos del caso anterior. Estos potenciales no serán absorbentes perfectos para ningún momento k , pero sus prestaciones son más que aceptables para la mayoría de las aplicaciones prácticas, superando a cualquier otra propuesta conocida en la región de momentos pequeños. La idea básica es muy simple: la forma funcional es explícita, una serie de N barreras cuadradas complejas de longitud $\epsilon = 1/N$ (de forma que la longitud dimensional del potencial total es de nuevo 1) y energías complejas $\{V_j\}$, $j = 1, 2, \dots, N$ (figura 3.5).

Para una serie determinada de barreras, las amplitudes de transmisión y reflexión globales se obtienen exactamente mediante la multiplicación de matrices 2×2 . Además, el gradiente con respecto a los cambios del potencial en cada barrera se puede también obtener exactamente mediante un producto de matrices. Estas evaluaciones son muy rápidas, de forma que el tiempo necesario para una optimización será mucho menor que para cualquier otro potencial usando el mismo número de parámetros libres. La ventaja que ofrecen los potenciales compuestos por

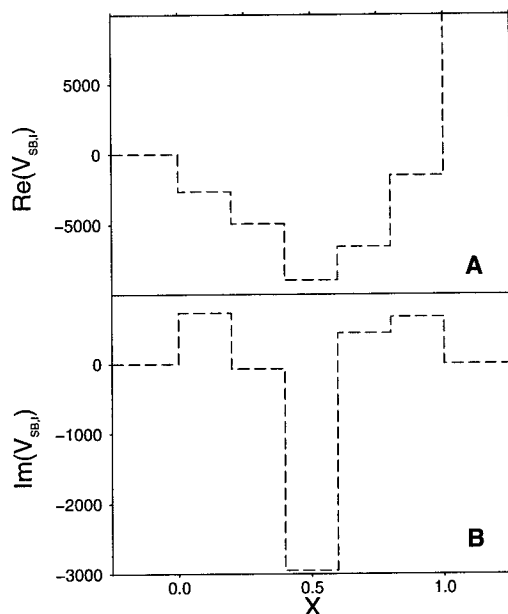


Figura 3.5: Partes real e imaginaria de un potencial compuesto por barreras particular $V_{SB,I}$, $N = 5$. Los parámetros se dan en el apéndice B.

barreras cuadradas es que podemos optimizar un mayor número de parámetros, dos por cada barrera, lo que permite obtener una mayor flexibilidad.

La elección de barreras cuadradas está motivada por la simplicidad ganada. En principio los resultados podrían mejorarse, por ejemplo, mediante barreras lineales como unidades básicas. La dificultad en este caso se debe a que las matrices de transferencia vienen dadas en términos de funciones de Airy de argumento complejo, cuyo tratamiento numérico es delicado [79]. En cambio, las matrices de transferencia para las barreras cuadradas involucran sólo exponenciales.

En la sección dedicada a los potenciales BMM discutimos que las discontinuidades del potencial no dan lugar a reflexión necesariamente (lo que acaba con el prejuicio de no utilizar barreras cuadradas como absorbentes), y que la inclusión de una parte real favorece la absorción. En consecuencia, permitiremos que las barreras tengan parte real e imaginaria. Otra propiedad de las barreras cuadradas es que, en principio, cualquier forma potencial puede aproximarse con precisión arbitraria usando un número suficiente de ellas. Esto permitiría, al menos teóricamente, encontrar una forma funcional óptima para un objetivo dado. Por supuesto, en aplicaciones típicas, el número de barreras estará limitado por el tamaño y densidad de la red, y por el tiempo dedicado a su optimización, por lo que los potenciales obtenidos serán sólo aproximaciones discretas al potencial ideal.

Se han estudiado las propiedades de potenciales reales formados por la sucesión de barreras cuadradas con fines pedagógicos [88], y más recientemente en el campo de “super redes”

mesoscópicas semiconductoras. Usaremos en nuestro caso las matrices de transferencia de T. M. Kalotas y A. R. Lee [89], adaptadas para barreras complejas. Definamos en primer lugar la matriz auxiliar $M(k, x)$,

$$\begin{aligned} M_{1,1} &= e^{ikx}, & M_{1,2} &= e^{-ikx}, \\ M_{2,1} &= ke^{ikx}, & M_{2,2} &= -ke^{-ikx}, \end{aligned} \quad (3.33)$$

y la matriz $K(k_j, \epsilon)$ para la barrera j -ésima

$$\begin{aligned} K_{1,1} &= \frac{e^{k_j \epsilon} + e^{-k_j \epsilon}}{2}, \\ K_{1,2} &= \frac{-e^{k_j \epsilon} + e^{-k_j \epsilon}}{2k_j}, \\ K_{2,1} &= \frac{k_j(-e^{k_j \epsilon} + e^{-k_j \epsilon})}{2}, \\ K_{2,2} &= \frac{e^{k_j \epsilon} + e^{-k_j \epsilon}}{2}, \end{aligned} \quad (3.34)$$

donde $k_j = (V_j - E)^{1/2}$ (la elección de la rama en la raíz cuadrada carece de importancia). La matriz de transferencia W relaciona los coeficientes que multiplican las ondas planas a ambos lados de la barrera total

$$\begin{pmatrix} A_l \\ B_l \end{pmatrix} = W \begin{pmatrix} A_r \\ B_r \end{pmatrix}, \quad (3.35)$$

donde A y B son los coeficientes de e^{ikx} y e^{-ikx} , y los subíndices l y r se refieren a incidencia desde la izquierda y desde la derecha. W puede escribirse en términos de M y K [89],

$$W = M^{-1}(k, x = 0) \left[\prod_{j=1}^N K(k_j, \epsilon) \right] M(k, x = 1). \quad (3.36)$$

Esta matriz contiene toda la información asintótica de la colisión. En particular, las amplitudes de reflexión y transmisión para una onda plana incidente desde la izquierda con número de onda k (supondremos que el potencial complejo se encuentra en el borde derecho de la red), vienen dadas por

$$\begin{aligned} R^l(k) &= \frac{W_{2,1}}{W_{1,1}}, \\ T^l(k) &= \frac{1}{W_{1,1}}, \end{aligned} \quad (3.37)$$

de forma que la probabilidad de supervivencia para un número de onda determinado, puede evaluarse fácilmente a partir de W . La función que se ha de minimizar con respecto a los valores de V_j es el promedio de la probabilidad de supervivencia en s valores de k , $\{k_\alpha\}$,

$$f(V_1, \dots, V_N; k_1, \dots, k_s) = \sum_{\alpha=1}^s \omega_\alpha P_s(V_1, \dots, V_N; k_\alpha). \quad (3.38)$$

A diferencia del método anterior, en el que cada nueva unidad daba cuenta de la absorción para un nuevo momento, el número de barreras N no tiene que ser necesariamente igual al número de puntos optimizados α (aunque la experiencia muestra que en este caso una absorción *óptima* en α puntos requiere $N = \alpha + 1$ para potenciales tipo P y $N = \alpha$ para potenciales tipo I). En general tomaremos s puntos igualmente espaciados en un intervalo determinado. En las aplicaciones N se escoge de acuerdo con la densidad de puntos de la red espacial, de forma que corresponda un número entero de puntos para cada barrera. Los factores ω_α pueden escogerse proporcionales a la distribución de momentos de un paquete de ondas particular incidente o, como en este trabajo, de acuerdo con un criterio homogéneo, $\omega_\alpha = 1$, para absorber paquetes de onda arbitrarios dentro de una región de momentos seleccionada. f se minimiza utilizando un método cuasi-newtoniano. Las semillas de los valores de $\{V_j\}_0$ se eligen aleatoriamente y se selecciona el mejor valor de varias minimizaciones. Los métodos numéricos de optimización son más eficientes si se les proporciona una expresión del gradiente de la función a minimizar. Para evaluar el gradiente de f con respecto a las variables $\{V_j\}$, se necesitan las derivadas $\frac{\partial W}{\partial V_j}$, $j = 1, \dots, N$, que están dadas por un producto similar a (3.36), sustituyendo la matriz $K(k_j)$ por $\frac{\partial K}{\partial V_j}$. A continuación mostramos algunos ejemplos de las posibilidades de estos potenciales.

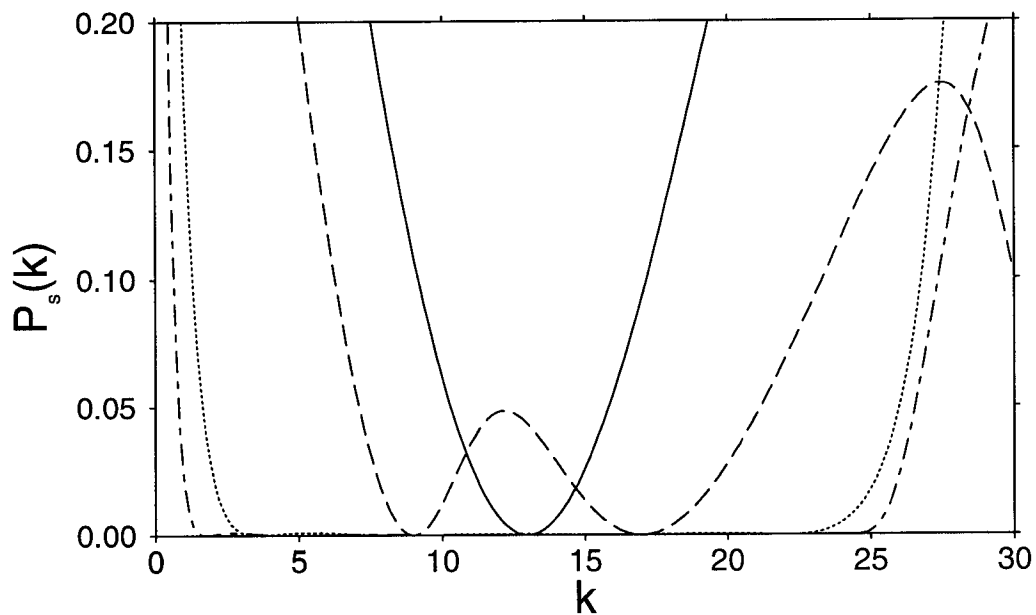


Figura 3.6: Probabilidad de supervivencia $P_s(k)$ para potenciales con $N = 7$. Los s puntos se escogen igualmente espaciados entre $k = 1$ y $k = 25$. $s = 1$, línea continua; $s = 2$, línea a trazos; $s = 10$, línea punteada; $s = 95$, línea a trazos y puntos.

En la figura 3.6, se muestra la probabilidad de supervivencia $P_s(k)$ para diferentes valores de s utilizando potenciales con $N = 7$. Los s puntos se toman igualmente espaciados en el

intervalo entre $k = 1$ y $k = 25$ excluyendo los extremos. Cuando s se incrementa, la anchura de absorción mejora y los saltos entre los puntos k_α tienden a desaparecer. En particular la anchura $\Delta(k_0 = 1)$ para el potencial con valores más altos de s es aproximadamente diez veces mayor que la anchura del mejor de los potenciales conocidos previamente, incluyendo los potenciales BMM de segundo orden [79]. La absorción también mejora al aumentar el número de barreras para un número fijo de puntos, pero el aumento de s es menos costoso (en tiempo de computación) que incrementar N en el proceso de optimización.

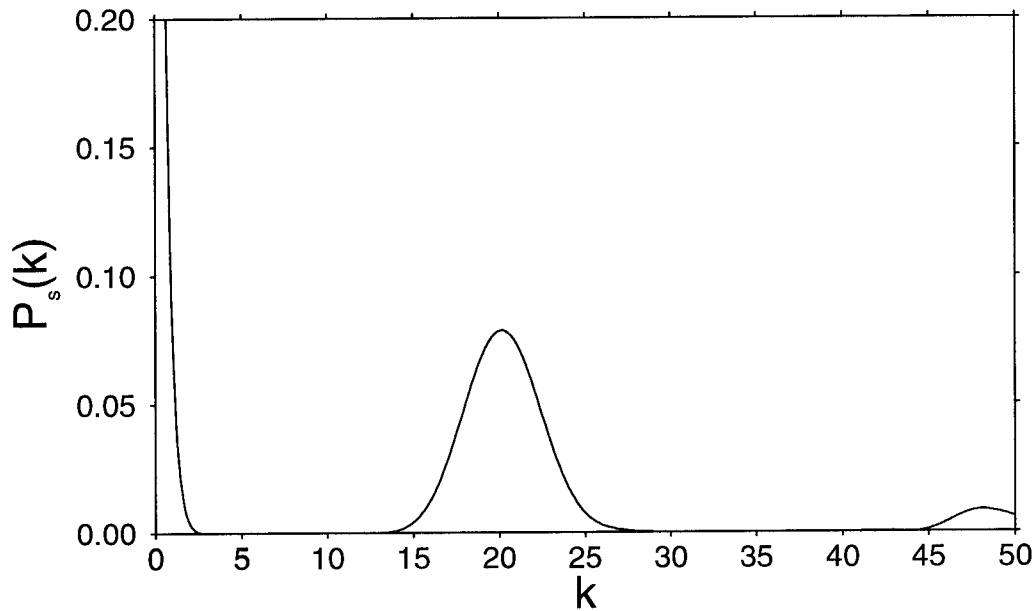


Figura 3.7: Probabilidad de supervivencia $P_s(k)$ para un potencial que se obtiene minimizando $f = \sum_{\alpha=1}^9 P_s(2 + \alpha) + \sum_{\beta=1}^9 P_s(30 + \beta)$ en dos regiones diferentes de momentos en torno a $k = 7$ y $k = 35$. $N = 8$.

La flexibilidad de estos potenciales permite en particular absorber en diferentes regiones del espectro de momentos. Por ejemplo, la figura 3.7 muestra la probabilidad de supervivencia para un potencial $N = 8$ y $s = 18$ puntos en el entorno de $k = 7$ y $k = 35$. Este comportamiento podría ser útil para cálculos con subpaquetes que se mueven a velocidad traslacional diferente debido a sus diferentes energías internas.

3.3 Comparación

En esta sección compararemos las características de los diferentes potenciales descritos en secciones previas. Los aspectos estudiados son: probabilidad de supervivencia optimizada para un k_0 fijo, anchuras de absorción, y robustez frente a discretizaciones.

Para facilitar la interpretación de las figuras se han utilizado los siguientes símbolos: las líneas

discontinuas (con símbolos blancos) corresponden a potenciales tipo P , y las líneas continuas (con símbolos negros) corresponden a potenciales tipo I . La correspondencia entre potenciales y símbolos es la siguiente: triángulos con un vértice hacia arriba corresponden a potenciales $V_{BMM}^{(2)}$, triángulos con un vértice hacia abajo corresponden a $V_{BMM}^{(0)}$; cuadrados a V_{QR} (cuadrático con η real); círculos a V_{QC} (cuadrático con η complejo); triángulos con un vértice hacia la derecha a V_{LR} (lineal con η real) y diamantes a V_{SB} (potencial compuesto por barreras cuadradas complejas).

3.3.1 Absorción estacionaria

En la figura 3.8 comparamos la probabilidad de supervivencia, $P_s(k_0)$, para potenciales optimizados para un valor de k_0 . (Cada punto k_0 en la figura corresponde a diferentes parámetros optimizados de cada forma funcional).

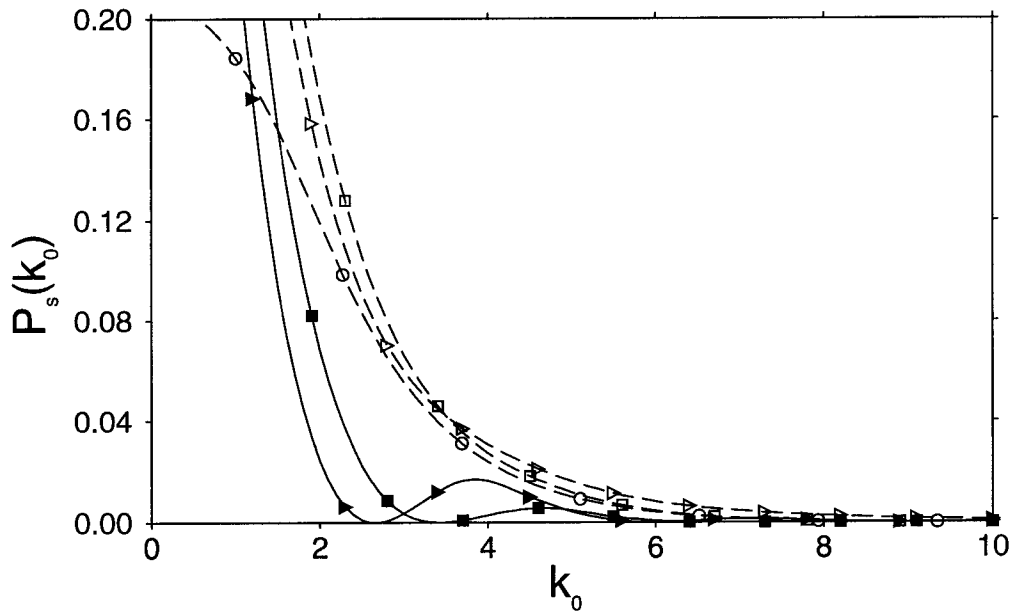


Figura 3.8: Probabilidad de supervivencia para potenciales optimizados $P_s(k_0)$ frente a k_0 . Las líneas a trazos y símbolos blancos corresponden a potenciales tipo P , mientras que las líneas sólidas y símbolos negros corresponden a potenciales tipo I en todas las figuras. Cuadrados V_{QR} ; círculos V_{QC} , triángulos hacia la derecha V_{LR} . Para el resto de potenciales discutidos en el texto $P_s(k_0)$ es indistinguible con el eje de ordenadas en la escala de la figura.

Un buen número de potenciales optimizados da lugar a absorciones excelentes para un momento determinado, y sus probabilidades de supervivencia son indistinguibles del eje k_0 en la escala de la figura. Los potenciales V_{BMM} pueden siempre adaptarse para garantizar absorción completa en cualquier momento incidente, por lo que el resultado de $P_s(k_0)$ sería cero en todos los casos y no se muestra en la figura. Tampoco se muestran los resultados de $V_{LC,I}$, $V_{QC,I}$,

V_{BMM} , $V_{SB,P}(N=2)$, y $V_{SB,I}(N=1)$ ya que dan lugar también a valores indistinguibles con el eje de abscisas de la figura, valores que serán lo suficientemente buenos para cualquier propósito en el límite monocromático de absorción. Merece destacarse que una simple barrera cuadrada compleja permite, con condiciones de tipo I , obtener probabilidades de absorción por debajo de 10^{-7} en el intervalo estudiado.

Los potenciales monómicos no se comportan de forma tan eficiente como el grupo anterior en la región de k_0 pequeños. El potencial lineal mejora en cierta medida el comportamiento del cuadrático, pero no lo suficiente para ser una opción práctica. La absorción de los monomios mejora de forma substancial para las condiciones de tipo I considerando un prefactor complejo como se discute en [79], y más recientemente en [82]. Sin embargo, esta mejora significativa no se consigue con potenciales del tipo P . La curva para $V_{LC,P}$ no se incluye porque es similar a la de $V_{LR,P}$ (excepto para $k_0 \leq 3$ donde es sólo ligeramente mejor).

3.3.2 Anchuras de absorción

La anchura de absorción efectiva³ $\Delta(k_0; \varepsilon)$ está definida como el intervalo en torno a k_0 donde $P_s(k) \leq \varepsilon$.

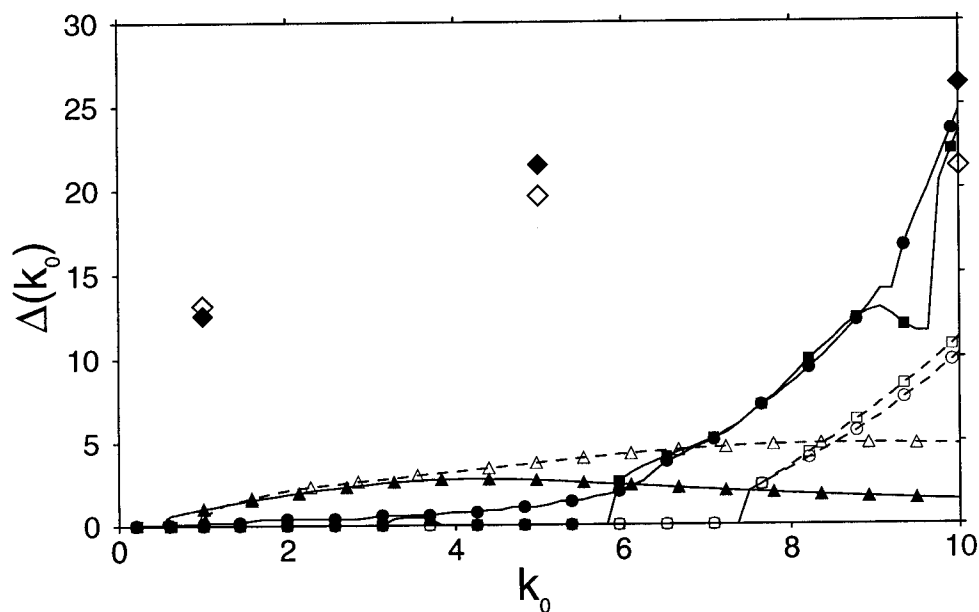


Figura 3.9: Anchuras de absorción $\Delta(k_0; 0.001)$ frente a k_0 . Diamantes, V_{SB} (5 barreras cuadradas); triángulos hacia arriba, $V_{BMM}^{(2)}$; cuadrados, V_{QR} ; círculos, V_{QC} .

La figura 3.9 muestra esta anchura para $\varepsilon = 0.001$. Para V_{QR} y V_{QC} usamos el mismo poten-

³Esta es la magnitud importante cuando lo que se quiere absorber es un paquete cuya distribución de momentos tenga cierta anchura.

cial optimizado de la figura 3.8. De nuevo, V_{QR} (cuadrados) es inservible para momentos bajos, pero su anchura efectiva crece rápidamente a partir de cierto umbral. De acuerdo con la figura 3.8, V_{QC} (círculos) absorbe con una anchura no nula para momentos bajos sólo para potenciales del tipo I , pero esta anchura es muy pequeña en cualquier caso. Los potenciales optimizados $V_{BMM}^{(2)}$ (triángulos hacia arriba) ofrecen buenas absorciones en la región de momentos bajos en comparación con los cuadráticos, aunque su comportamiento a k_0 más altos no es tan bueno. Se observa una mejora utilizando condiciones de tipo I (con una barrera infinita en $x = 1$) en lugar de condiciones tipo P . Las mejores anchuras se alcanzan con los potenciales compuestos V_{SB} . Hemos usado cinco barreras, $N = 5$, en los cálculos de la figura 3.9, (diamantes), pero los resultados podrían mejorarse aumentando el número de barreras.

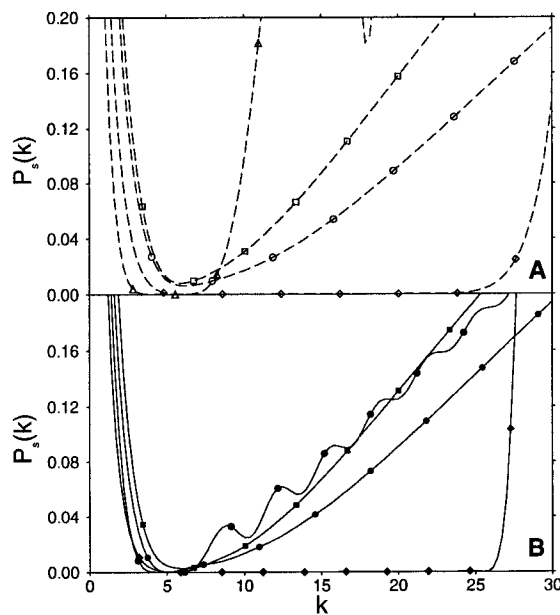


Figura 3.10: Probabilidad de supervivencia $P_s(k)$ para el mismo potencial de la figura 3.9 optimizado para $k_0 = 5$.

La figura 3.9 se complementa con la figura 3.10, donde se representan las curvas de probabilidad de supervivencia $P_s(k)$ para los potenciales optimizados en torno a $k_0 = 5$. En esta figura es evidente la ventaja de los V_{SB} frente a los otros potenciales estudiados. Los coeficientes para cada uno de los potenciales de la figura 3.11 se dan en el apéndice B. Además, la figura 3.5 representa la parte real e imaginaria del potencial $V_{SB,I}(N = 5)$ utilizado.

3.3.3 Robustez

Otra característica necesaria para un buen absorbente es su robustez frente a discretizaciones. Para cuantificar la robustez de un potencial dado, de la forma más independiente posible del

paquete de ondas incidente y del método de cálculo utilizado, definiremos la siguiente cantidad,

$$E_a(k_0) = P_s(k_0) - P_{sN}(k_0), \quad (3.39)$$

donde $P_s(k_0)$ es la probabilidad de supervivencia para un determinado potencial, y $P_{sN}(k_0)$ es la probabilidad de supervivencia para una aproximación discreta del potencial original construida mediante N barreras cuadradas de igual anchura, δ , $N\delta = 1$. Las barreras de la versión discreta se eligen de la siguiente manera

$$V_j = V(x_j), \quad j = 1, \dots, N, \quad (3.40)$$

donde $x_j = (j - \frac{1}{2})\delta$. La figura 3.11 representa la parte imaginaria de un potencial arbitrario y su versión discreta cuando $N = 5$.

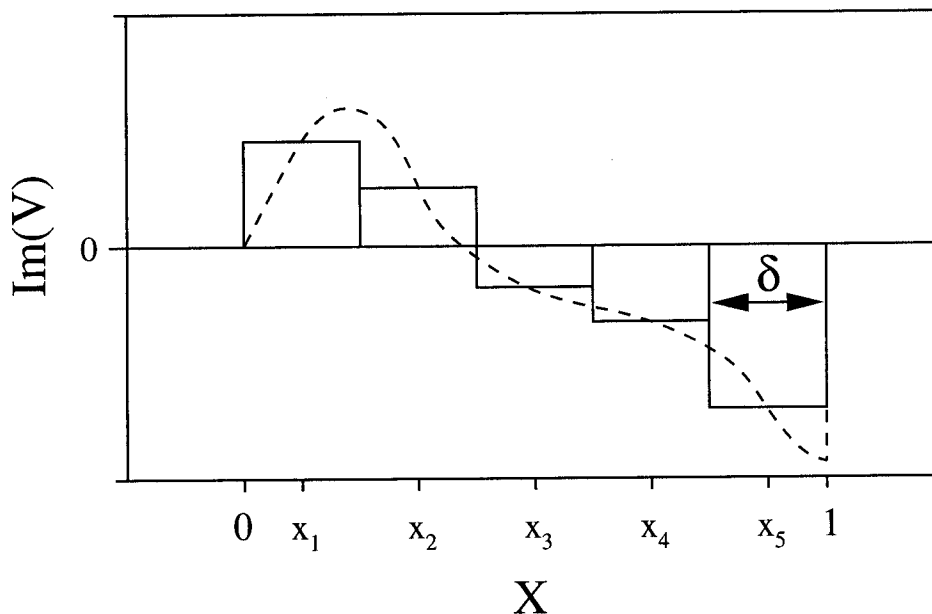


Figura 3.11: Parte imaginaria de un potencial arbitrario y su aproximación discreta para $N = 5$.

Las amplitudes de reflexión y transmisión para la aproximación discreta pueden calcularse utilizando la técnica de matrices de transferencia discutida para los potenciales V_{SB} .

La figura 3.12 muestra el valor absoluto E_a frente a N para $k_0 = 1$. Los tres potenciales examinados en esta figura, V_{QR} , V_{QC} y $V_{BMM}^{(0)}$, se representan adecuadamente con discretizaciones de siete o más barreras. Un resultado curioso es que la representación discreta del potencial V_{QR} absorbe mejor que el propio potencial, aunque en esta región de momentos este potencial no es muy útil, como se mostró en la figura 3.6. $V_{BMM,I}^{(0)}$ es bastante robusto, y sus aproximaciones con una o dos barreras corresponden al error más pequeño entre los potenciales comparados en

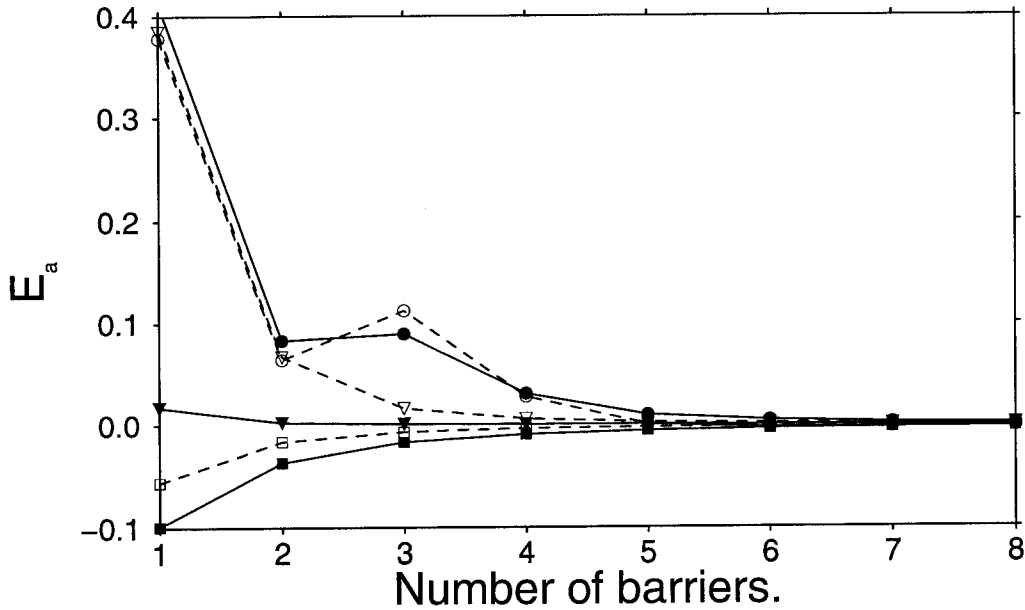


Figura 3.12: Error absoluto de la probabilidad de supervivencia, E_a , frente al número de barreras de la discretización para $k_0 = 1$. Las líneas se incluyen como ayuda visual, ya que sólo los valores enteros tienen sentido. Triángulos hacia abajo, $V_{BMM}^{(0)}$; el resto de símbolos como la figura 3.9.

la figura 3.12. Por el contrario, los potenciales $V_{BMM}^{(2)}$ oscilan demasiado, y no son robustos (su E_a es demasiado grande para la escala de la figura). Con este criterio de robustez, los potenciales V_{SB} , formados por N_0 barreras cuadradas, son perfectamente robustos cuando se utiliza un múltiplo de N_0 en la discretización, $N = nN_0, n = 1, 2, 3, \dots$, pero para otros valores E_a puede ser apreciable. En la práctica esto significa que, cuando se discretiza un potencial V_{SB} en una red, se debe siempre elegir un número entero de puntos (típicamente 1, 2, ó 3) para cada una de las barreras cuadradas y obtener así un buen acuerdo con la absorción teórica.

Para examinar la robustez en función del momento incidente, hemos definido $N_c(k_0)$ como el número de barreras que se necesitan para que $E_a \leq 0.001$ en un potencial optimizado en k_0 . Como regla general, N_c aumenta con k_0 exceptuando quizás la región de momentos bajos. Como se indicaba anteriormente, $V_{BMM}^{(2)}$ no es en absoluto robusto, véase la figura 3.13.

3.4 Resumen y conclusiones de la comparación

Hemos estudiado las características de varias formas de potenciales absorbentes, en particular su robustez numérica frente a la discretización y su absorción efectiva cuando se imponen condiciones de contorno periódicas o de pared infinita (ambas condiciones se encuentran en las aplicaciones prácticas). Ningún potencial es útil para todos los propósitos, pero nuestro estudio permite seleccionar el más adecuado para cada aplicación. Además de la anchura de absorción

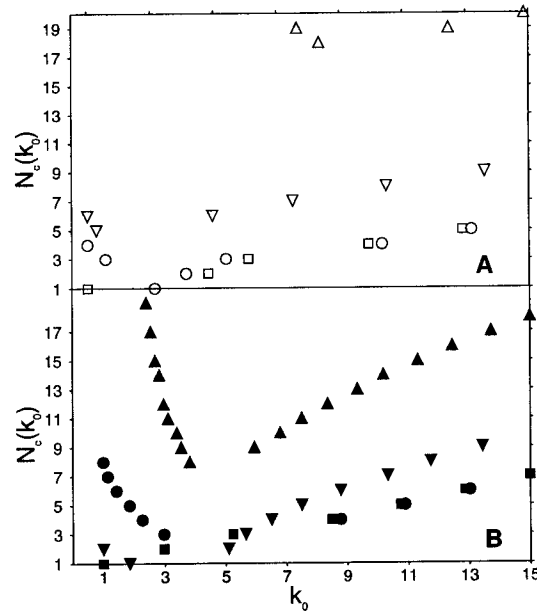


Figura 3.13: Número de barreras requerido para que $E_a \leq 0.001$ para potenciales optimizados en k_0 tipo P (A) y tipo I (B). Triángulos hacia abajo, $V_{BMM}^{(0)}$; el resto de símbolos como en la figura 3.9.

y la robustez, la estabilidad de algunos de los métodos numéricos requiere que el potencial satisfaga propiedades adicionales. En particular, algunos de los algoritmos de propagación temporal son inestables cuando la parte imaginaria del potencial complejo toma un valor positivo grande (hemos comprobado esta inestabilidad usando la transformada de Caley [83] o el método POE [54]; en este último caso el problema aparece sólo en la evaluación de exponenciales de argumento positivo muy grande). Para estos métodos inestables, la mejor elección estará entre uno de los siguientes potenciales: monomios, $V_{BMM}^{(0)}$, o V_{SB} con la restricción $\text{Im}(V_j) < 0$. Dependiendo del intervalo de absorción, podemos distinguir los siguientes casos:

a) Absorción monocromática: En este caso la mejor elección es $V_{BMM}^{(0)}$. Se trata de un potencial que es a la vez explícito (no requiere optimización) y robusto (a pesar de las singularidades), con parte imaginaria puramente negativa, y que absorberá cualquier k_0 seleccionado, de forma que, en unidades dimensionales, la longitud del potencial L puede ser arbitraria (en la práctica, sujeta sólo a las restricciones impuestas por la robustez). La dependencia para condiciones de tipo I era conocida, y en este trabajo hemos dado la forma explícita para condiciones tipo P . También pueden usarse monomios pero tienen ciertas desventajas. Es necesario optimizar los parámetros y, en la región de momentos pequeños, sólo absorben para condiciones de tipo I y prefactor complejo η .

b) Absorción de un intervalo de momentos $[k_i, k_f]$ con $k_i > 10$: En este caso cualquier monomio podría utilizarse de forma eficiente. Sea p_i el valor mínimo del momento dimensional que

debemos absorber en una aplicación particular; el valor correspondiente de k_i puede incrementarse siempre más allá del valor $k \approx 10$ aumentando L , ya que $k = pL/\hbar$. Sin embargo, esto podría llevar a grandes anchuras dimensionales del potencial y, consecuentemente, dificultar el cálculo numérico. Cálculos precisos en umbrales, o para colisiones de baja energía, requerirían valores de L muy grandes e imprácticos. Una fuente adicional de dificultades es el decrecimiento de la robustez de los monomios con el incremento de k_0 .

c) Absorción para intervalos de momentos que incluyan la región $k < 10$: Este es el caso importante en los umbrales, para colisiones de baja energía o para evitar valores de L demasiado grandes. La mejor elección entre las formas funcionales conocidas es el “potencial compuesto” formado por barreras cuadradas complejas, V_{SB} . Estos potenciales son robustos si cada barrera se representa mediante un número entero de puntos en la discretización. La optimización de las “alturas” (energías) de las barreras puede restringirse de forma que sólo se permita una parte imaginaria negativa, lo que evita los problemas de estabilidad numérica. En los casos donde los algoritmos sean estables para potenciales con parte imaginaria positiva no es necesario imponer esta restricción, y se obtienen mejores absorciones.

Por último, nuestro estudio clarifica un número de concepciones erróneas sobre los potenciales complejos, que han podido dificultar búsquedas más exhaustivas de formas funcionales: en particular, los potenciales no tienen que ser puramente imaginarios (una parte real añade flexibilidad y mejora la absorción [79], [82]), la anchura del potencial puede ser menor que la longitud de onda del momento incidente, y las discontinuidades del potencial no provocan necesariamente reflexión y pueden ser numéricamente robustas.

3.5 Ejemplo de aplicación: colisión colineal $H + H_2$

Para finalizar este capítulo dedicado a los potenciales absorbentes comprobaremos las ventajas de los potenciales compuestos V_{SB} en un problema realista. Ilustraremos cómo estos potenciales permiten reducir el área de la red dedicada a la absorción, y al mismo tiempo aumentar el intervalo de absorción incluyendo energías menores.

Los valores de los parámetros corresponden a un cálculo para la colisión colineal $H + H_2$ realizado por M. Monnerville, P. Halvick y J. C. Rayez [52]. Estos autores utilizaron técnicas basadas en paquetes de onda en una red bidimensional (Q, q) (3.2), donde Q y q son las coordenadas escaladas de Jacobi proporcionales a la distancia del centro de masa de la diatómica H_2 al átomo H , y a la separación internuclear de H_2 . En estas coordenadas la energía cinética total es “diagonal”, y corresponde al movimiento efectivo de una sola partícula de masa $m = m_p/3^{1/2}$, donde m_p es la masa del protón. Después de comparar varios potenciales complejos absorbentes

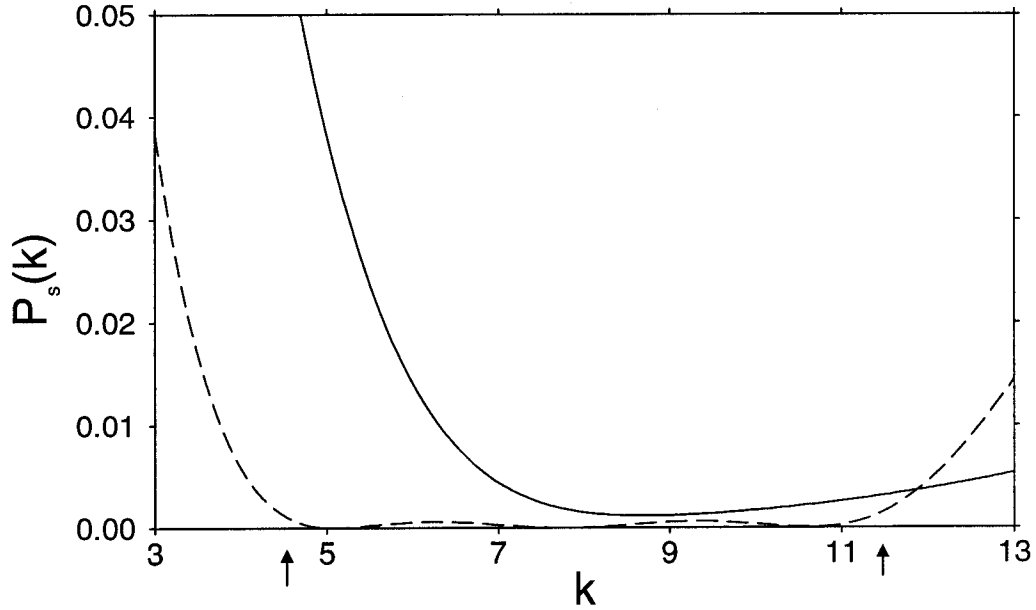


Figura 3.14: Probabilidad de supervivencia $P_s(k)$ para el potencial (3.41) optimizado para $k = 7.9$ ($\eta = 0.92$ eV), línea continua, y para un potencial V_{SB} con $N = 4$ optimizado para $s = 19$. Las flechas en el eje de abscisas señalan la región $[4.5, 11.4]$ que correspondería al rango estudiado en [52] si $L = L_Q/4$.

y otros métodos alternativos usaron finalmente la función

$$V(y) = -i\frac{\eta}{2} \left\{ 1 + \sin \left[\pi \left(-\frac{1}{2} + \frac{y - y_a}{y_{max} - y_a} \right) \right] \right\}, \quad (3.41)$$

con soporte en el intervalo $[y_a, y_{max}]$, para absorber el paquete de ondas en la región de Q o q grandes (en cada caso $y = Q$ o $y = q$). Seleccionaremos el valle de Q grandes para comparar con el potencial V_{SB} , y como cálculo de referencia el correspondiente a energías totales entre $E_i = 0.4$ eV y $E_f = 1.1$ eV, y soporte del potencial complejo igual a $L_Q = 3\text{Å}$, [52]. En ese cálculo se utilizó una densidad de 10 puntos de red por Armstrong (30 puntos en total para el potencial complejo). Nuestro criterio para fijar el número de barreras N es poner una barrera cuadrada cada dos puntos de red del cálculo original de M. Monnerville y colaboradores; de esta forma podemos asegurar que la absorción de la versión discretizada será próxima a la *teórica* del potencial compuesto por las barreras (obtenida mediante las matrices de transferencia).

Obtuvimos las energías traslacionales sustrayendo la energía del estado fundamental de la diatómica, 0.27 eV. Transformando todas las cantidades a unidades adimensionales, el intervalo de números de onda traslacionales a absorber es $[18.1, 45.7]$. La probabilidad de supervivencia para el potencial usado en [52] ($\eta = 0.35$ eV) está por debajo de 0.001 para ese intervalo de momentos. Nuestro primer objetivo es alcanzar unas características similares con nuestro potencial con longitudes dedicadas a la absorción menores. Usando una cuarta parte de la longitud inicial, $L_Q/4$, el rango de número de ondas adimensionales será $[4.5, 11.4]$.

En este caso un potencial optimizado de la forma [52] es incapaz de absorber de forma apropiada, mientras que cuatro barreras cuadradas complejas dan lugar a una absorción en ese intervalo por encima del 99.9%, véase la figura 3.14. Este resultado implica una reducción significativa de la zona dedicada a la absorción, que en el cálculo original era próxima a la mitad de la red utilizada [52].

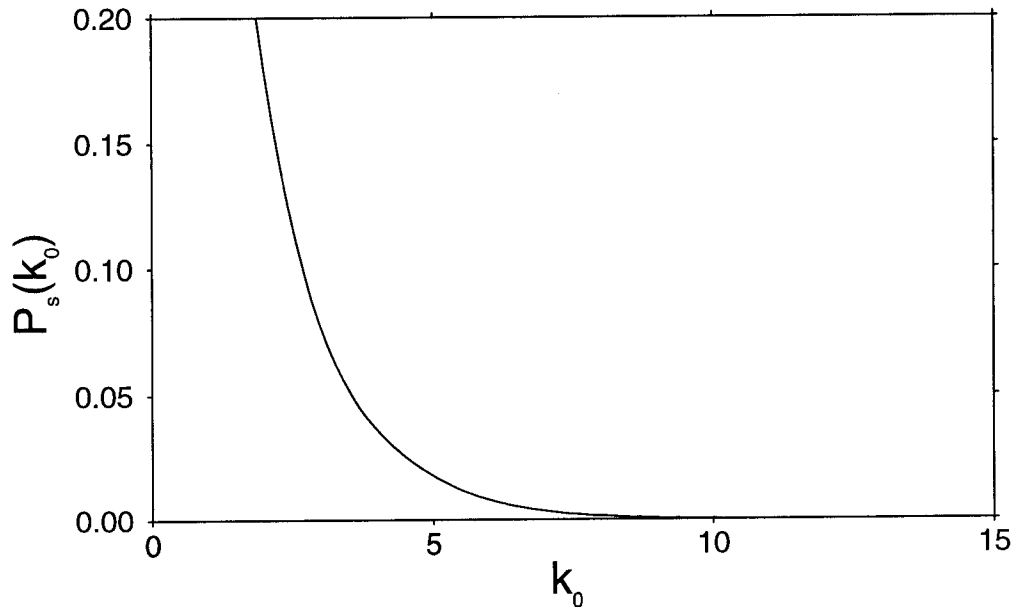


Figura 3.15: $P_s(k_0)$ para el potencial (3.41) optimizado para cada k_0 .

M. Monnerville y colaboradores no podían estudiar energías totales por debajo de 0.4 eV. La naturaleza de este problema se pone de manifiesto en la figura 3.15. En ella se muestra la probabilidad de supervivencia $P_s(k_0)$ para potenciales optimizados de la forma (3.41). Claramente, esta forma funcional es inútil para $k < 10$, de forma que energías bajas pueden tratarse únicamente con un valor de L muy grande. Esto motiva nuestro próximo objetivo, absorber a energías menores con la mitad de la longitud del cálculo original, $L_Q/2$. El intervalo de números de onda adimensionales es, bajo estas condiciones, [9.0, 22.8].

La figura 3.16 muestra la probabilidad de supervivencia calculada mediante la multiplicación de las matrices de transferencia, para tres potenciales diferentes con $N = 7$. Para comparar, se muestran también las curvas correspondientes al potencial (3.41) optimizado a $k = 15$ y $k = 10$. La mejor figura de absorción se obtiene si la parte imaginaria de las barreras cuadradas se optimiza sin ninguna restricción. Sin embargo, la parte imaginaria optimizada de alguna de las barreras toma valores positivos lo que, como comentamos, puede introducir inestabilidades numéricas en ciertos métodos de propagación de paquetes de onda. De cualquier forma, pueden

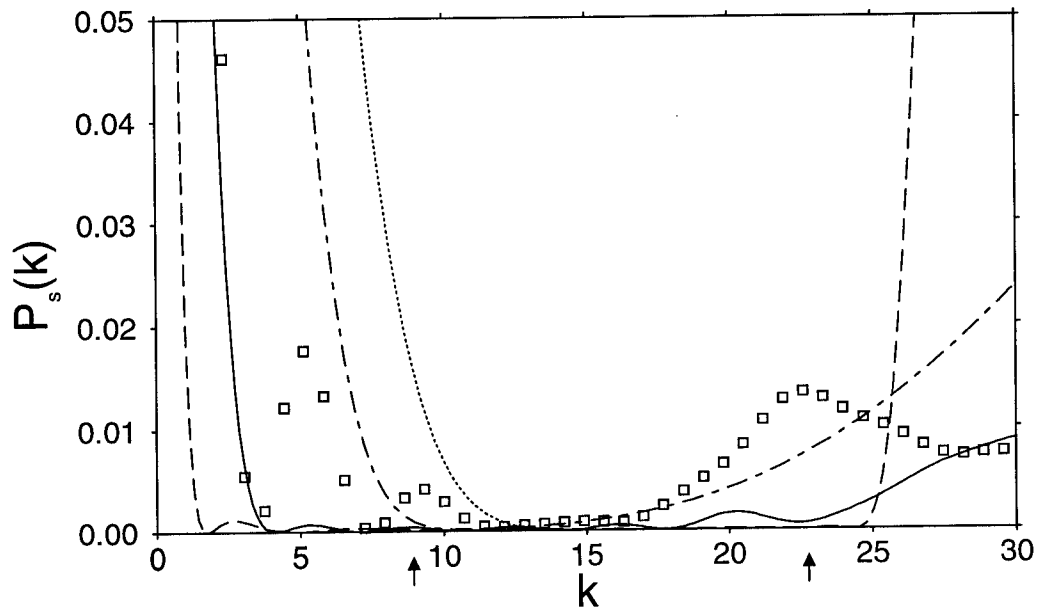


Figura 3.16: $P_s(k)$ para tres potenciales diferentes con $N = 7$: sin restricciones (línea a trazos), con la restricción $\text{Im}V_j \leq 0$ (línea continua), y con la restricción $\text{Re}V_j = 0$ (cuadrados). Para comparar se incluyen dos potenciales de la forma (3.41) optimizados para $k = 10$ y $k = 15$ (línea punteada y a trazos y puntos respectivamente). Las flechas en el eje de abscisas indican la región $[9.0, 22.8]$ que correspondería al rango estudiado en [52] si $L = L_Q/2$.

evitarse imponiendo la restricción $\text{Im}V_j < 0$ en la optimización. Al restringir el espacio de los parámetros permitidos, la absorción es menor, pero a cambio el potencial es robusto para los métodos de propagación mencionados. (Hemos comprobado que los cálculos con el método POE usando la misma densidad de puntos de red que en [52] dan lugar a probabilidades de supervivencia en buen acuerdo con la absorción calculada con la matrices de transferencia.) En la figura 3.16 también se muestra la probabilidad de supervivencia para una optimización donde las barreras son puramente imaginarias. Esta restricción, al contrario que la anterior, deteriora severamente la calidad de la curva de probabilidad de supervivencia.

Capítulo 4

Tiempos de llegada y tránsito

Capítulo 4

Tiempos de llegada y tránsito

4.1 Introducción

A pesar de que las colisiones son procesos temporales, las monografías sobre teoría de colisiones se dedican fundamentalmente a los aspectos “estacionarios”. Esto se debe en parte a que el experimento de colisión tradicional se realiza en un régimen cuasi estacionario, y también a que los estados estacionarios forman, como ya hemos visto en el capítulo 1, una base para analizar la colisión dependiente del tiempo.

Sin embargo, cada vez es más importante considerar explícitamente la dependencia temporal: los experimentos modernos con láseres pulsados permiten preparar y detectar estados no estacionarios, y seguir en algunos casos la evolución del paquete de ondas; además, los métodos numéricos de propagación de paquetes de ondas, cada vez más potentes, proporcionan una imagen de los mecanismos que subyacen a los cambios de estado o de estructura propiciados por la colisión. La teoría debe adaptarse a esta tendencia resumiendo en unas pocas cantidades características los principales aspectos de la evolución: tiempos de tránsito, tiempos de llegada, tiempos de retardo, o tiempos de vida de especies inestables. A pesar de que muchas de estas cantidades son, en un sentido experimental, “observables”, la teoría cuántica, que tanto énfasis ha puesto precisamente en este concepto, encuentra serias dificultades para formalizarlas. Este campo de investigación involucra ingredientes tan diversos como la interpretación del formalismo mecánico-cuántico y de la dualidad onda partícula, las ambigüedades de la cuantización de una cantidad clásica, la relación entre mecánica clásica y mecánica cuántica, la interpretación y el uso de operadores no autoadjuntos, o el problema de la medida en mecánica cuántica. Ninguno de ellos está completamente entendido en la actualidad por lo que no es de extrañar que la definición de cantidades intrínsecas con dimensiones de tiempo sea una cuestión esencialmente abierta y a menudo controvertida. Por “intrínseca” entendemos “que no depende explícitamente del aparato o método de medida”. Contrapuestas a estas cantidades están las

“operacionales”, que se obtienen mediante modelos teóricos de procedimientos experimentales concretos. Es importante disponer de teorías operacionales, tanto para guiar la definición de cantidades intrínsecas interesantes, como para interpretar los experimentos. Conviene en cualquier caso observar que diferentes modelos operacionales, inspirados en diferentes procedimientos experimentales, pueden dar distintos resultados.

En este capítulo estudiaremos algunos modelos operacionales para el tiempo de llegada y para el tiempo de tránsito en los que el detector se representa fenomenológicamente mediante un potencial absorbente. Exploraremos también algunos aspectos de la definición intrínseca del tiempo de llegada para compararla posteriormente con los resultados operacionales. Nos basaremos en las referencias [90-93].

En general la detección de una partícula microscópica es un proceso muy complejo cuya descripción completa desde principios fundamentales puede ser una tarea muy ardua. Por ello se impone en general un tratamiento fenomenológico. La detección (al menos dentro del contexto de los procedimientos que inspiran las definiciones operacionales de este capítulo) puede describirse como una colisión multicanal de un sistema cuyo estado asintótico de entrada corresponde a la partícula en el estado incidente más el detector en el estado de *no detección*. Si la colisión provoca el cambio del estado del detector, la partícula es detectada. En nuestro caso, el canal de interés corresponde a la partícula incidente con el detector en su estado de *no detección*. Supongamos que el detector se sitúa entre 0 y L y la partícula incide desde la izquierda. Para $x < 0$ la dependencia temporal de la amplitud del canal incidente puede describirse¹ mediante la expresión (1.150) deducida en el capítulo 1,

$$\langle x|\psi(t)\rangle = \int_0^\infty dp [e^{-ixp/\hbar} + R^l(p)e^{ixp/\hbar}]e^{-iE_p t/\hbar} \langle p|\psi(0)\rangle. \quad (4.1)$$

La expresión (1.149) permite obtener una relación similar para la descripción a la derecha de L en términos de la amplitud de transmisión $T^l(p)$. Si encontramos un potencial complejo $V(x)$ que reproduzca las funciones $R^l(p)$ y $T^l(p)$, podremos reproducir exactamente la dinámica del canal incidente fuera del detector. Como veremos en la sección 4.2.2, esto es ya suficiente para extraer una serie de conclusiones generales, y en gran medida inesperadas, sobre el proceso de detección cuántico. La forma concreta de $V(x)$ determinará además el ritmo de absorción, es decir, la velocidad con la que desaparece la norma del canal incidente, que corresponderá también a la distribución operacional de detección y llegada. En este procedimiento fenomenológico, $V(x)$ se obtiene de los datos experimentales y no de primeros principios, pero recientemente J. J. Halliwell [94] ha deducido, para una familia de modelos sencillos microscópicos e irreversibles del detector, el potencial complejo correspondiente a la evolución efectiva del canal incidente.

¹Suponemos por simplicidad que la contribución de momentos negativos es despreciable.

Se han utilizado previamente diferentes modelos operacionales basados en potenciales absorbentes para estudiar el tiempo de llegada. Por ejemplo, G. R. Allcock [84], usando un escalón imaginario, concluye que no puede definirse operacionalmente este concepto. Sin embargo, se ha mostrado que sus resultados dependen del tipo de potencial estudiado. Así, J. G. Muga, S. Brouard y D. Macías [19] o Ph. Blanchard y A. Jadczyk [95] han definido y estudiado distribuciones operacionales de tiempo de llegada con la ayuda de potenciales absorbentes.

Por simplicidad, supondremos que la partícula se mueve en una dimensión espacial (x), y en los ejemplos numéricos se usarán unidades atómicas ($\hbar = 1$) y $m = 1$.

4.2 Tiempo de llegada

La extensión del concepto clásico de “tiempo de llegada” a la mecánica cuántica es problemático a causa de la ausencia de trayectorias en la interpretación estándar del formalismo cuántico. Se ha intentado resolver el problema desde diversos marcos teóricos, entre otros, mediante trayectorias en el espacio de fases o trayectorias “causales” de la teoría de D. Bohm; modelos operacionales, como los basados en potenciales complejos o en descripciones simples de la medida; ecuaciones de renovación; o reglas de cuantización en el espacio de fases y los *operadores tiempo* asociados. En un trabajo reciente (ref. [90]) se repasan y discuten las principales características de los resultados obtenidos y cuestiones que permanecen abiertas.

En esta sección nos centraremos en dos de las posibles vías. Por un lado analizaremos diversos aspectos relacionados con el operador tiempo introducido por Aharonov y Bohm, T_{AB} , y con su distribución asociada. Por otro, estudiaremos una definición operacional de la distribución de tiempos de llegada. En todos los casos supondremos que la partícula evoluciona libremente (exceptuando la influencia del potencial absorbente en los modelos operacionales) y, salvo que se especifique lo contrario, el punto de llegada (X) será el origen ($X = 0$).

4.2.1 Operadores tiempo de llegada

El camino habitual para especificar una variable dinámica en mecánica cuántica es definir el operador correspondiente. Este procedimiento presenta un problema, señalado originalmente por W. Pauli, cuando la variable dinámica es el tiempo: no es posible construir un operador autoadjunto que sea conjugado del hamiltoniano, H , si el espectro de H está acotado por debajo [84,96,97,98].

Existen varios caminos para evitar la objeción de W. Pauli y cuantizar el tiempo clásico de llegada, al menos para casos sencillos como el movimiento libre. Por ejemplo, Y. Aharonov y D.

Bohm introdujeron el operador T_{AB} [99],

$$T_{AB} = -m \left(Q_{op} \frac{1}{P_{op}} - \frac{\hbar}{2i} \frac{1}{P_{op}^2} \right) = -\frac{m}{2} \left(Q_{op} \frac{1}{P_{op}} + \frac{1}{P_{op}} Q_{op} \right), \quad (4.2)$$

simetrizando la expresión clásica para el tiempo de llegada a $X = 0$ para una partícula con posición q y momento p en el instante $t = 0$. Q_{op} y P_{op} representan los operadores posición y momento respectivamente. El mismo resultado se obtiene usando las reglas de cuantización de Weyl, Rivier o Born-Jordan [100]. En principio esta coincidencia no justifica el operador (4.2), ya que, a priori, ninguna regla de cuantización es más fundamental que cualquier otra; simplemente proporcionan generalizaciones cuánticas de la cantidad clásica; una (o varias) de esas generalizaciones pueden seleccionarse con diferentes criterios, por ejemplo, de acuerdo con algún procedimiento experimental determinado, o exigiendo ciertas condiciones deseables, por ejemplo que se verifiquen propiedades de su equivalente clásico. Es por lo tanto esencial examinar cuidadosamente el comportamiento de un operador determinado y sus autofunciones para determinar su contenido físico.

Las propiedades matemáticas de T_{AB} como operador lineal en el espacio de Hilbert han sido examinadas entre otros por V.H. Paul [97,101,102,103]. En un primer apartado revisaremos algunas de esas propiedades.

Propiedades de T_{AB}

T_{AB} es un operador *simétrico maximal* [103,104,105], lo que significa que es hermitico (o simétrico en el lenguaje más común de los matemáticos) pero no admite una extensión autoadjunta (dicho coloquialmente, *simétrico maximal* es lo más cercano posible a "autoadjunto"). Así, el primer camino para evitar los argumentos de W. Pauli es relajar el requisito estándar y admitir que ciertos operadores no autoadjuntos pueden representar propiedades físicas.

Si se impone la hermiticidad y la integrabilidad de los estados de su rango, el dominio del operador T_{AB} , $D(T_{AB})$, vendrá dado por el conjunto de estados cuya representación en momentos verifique la siguiente propiedad [101],

$$\lim_{p \rightarrow 0} \frac{\phi(p)}{p^{3/2}} \rightarrow 0. \quad (4.3)$$

Los autoestados de T_{AB} se pueden obtener a partir de la ecuación de autovalores en representación de momentos, $\langle p|T_{AB}|\psi\rangle = T\langle p|\psi\rangle$,

$$-mi\hbar \left(\frac{1}{p} \frac{d}{dp} - \frac{1}{2p^2} \right) \langle p|\psi\rangle = T\langle p|\psi\rangle, \quad (4.4)$$

cuya solución para $p \neq 0$, denotada como $|T, \alpha\rangle$, vendrá dada por,

$$\langle p|T, \alpha\rangle = (|p|/m\hbar)^{1/2} e^{ip^2 T/(2m\hbar)} \Theta(\alpha p), \quad (4.5)$$

donde $\alpha = \pm 1$ y Θ es la función escalón de Heaviside. $|T, \alpha\rangle$ son autoestados *débiles* [97], que satisfacen la condición $\langle T, \alpha | (T_{AB} - T) | \phi \rangle = 0$ para todo $\phi \in D(T_{AB})$. Además (4.5) no son funciones de cuadrado integrable por lo que no definen vectores del espacio de Hilbert $\mathcal{H} = L^2$ realizables físicamente.

Los autoestados (4.5) transforman correctamente ante desplazamientos temporales. Así, un estado con tiempo nominal de llegada T que evoluciona un tiempo t , se transformará en un estado con llegada nominal a tiempo $T - t$,

$$e^{-iHt/\hbar} |T, \alpha\rangle = |T - t, \alpha\rangle. \quad (4.6)$$

Además, constituyen una resolución de la identidad que, con la elección de la constante de proporcionalidad realizada en (4.5), toma la forma

$$1_{\text{op}} = \sum_{\alpha} \int_{-\infty}^{\infty} dT |T, \alpha\rangle \langle T, \alpha|. \quad (4.7)$$

En la interpretación física de esta expresión se supone que tarde o temprano todas las partículas llegan a la posición $X = 0$. Nótese la inclusión de tiempos negativos. En un contexto experimental, todos los tiempos de llegada medibles son positivos si el estado de la partícula de interés, $\psi(t)$, se prepara en el instante $t = 0$. Sin embargo, como discutieron con gran detalle N. Grot, C. Rovelli y R. S. Tate [106], el análisis teórico es mucho más simple si se considera un problema diferente donde el sistema se prepara a $t = -\infty$ en un estado que, en ausencia de interacción, evoluciona hasta el estado realmente preparado $\psi(t = 0)$, y la distribución de tiempos de llegada incluye tanto tiempos (de llegada) negativos como positivos. Esto resulta muy útil desde el punto de vista matemático, como se mostrará posteriormente en las ecuaciones (4.17) y (4.23).

Las autofunciones $|T, \alpha\rangle$ son completas (forman una base del espacio de los estados), pero no son ortogonales entre sí,

$$\langle T', \alpha' | T, \alpha \rangle = \frac{\delta_{\alpha, \alpha'}}{2} \left[\delta(T - T') + \frac{i}{\pi} \mathcal{P} \left(\frac{1}{T - T'} \right) \right]. \quad (4.8)$$

La no ortogonalidad de los autoestados se ha asociado con el carácter intrínsecamente *impreciso* de T_{AB} por los proponentes de la *teoría operacional de la mecánica cuántica* [104]. Esos autores, y en particular R. Gianitrappani [97] muestran que los estados $|T, \alpha\rangle$ permiten construir una resolución espectral generalizada (POVM) del tiempo de llegada. Esto significa que para un intervalo de tiempo $[T_1, T_2]$, se puede construir la siguiente familia de operadores acotados positivos,

$$B(T_2, T_1) = \sum_{\alpha} \int_{T_1}^{T_2} |T, \alpha\rangle dT \langle T, \alpha|. \quad (4.9)$$

Estos operadores no son proyectores, pero no se requieren necesariamente proyectores para definir probabilidades en mecánica cuántica [104,107]. Si se toma la traza de (4.9) con el operador densidad físico normalizado, ρ , se obtiene una función,

$$P(T_2, T_1) = \text{tr}[B(T_2, T_1)\rho], \quad (4.10)$$

que cumple en principio las condiciones de una probabilidad para llegadas entre T_1 y T_2 : es positiva, aditiva para conjuntos disjuntos, y, como se muestra utilizando la relación (4.7), tiende a 1 cuando $T_1 \rightarrow -\infty$ y $T_2 \rightarrow \infty$. Si particularizamos para un estado puro ψ en el instante t se obtendría la siguiente distribución de tiempos de llegada,

$$\Pi_K(T; \psi(t)) = \sum_{\alpha} |\langle T, \alpha | \psi(t) \rangle|^2. \quad (4.11)$$

(El subíndice K se incluye para diferenciarla de otras distribuciones de tiempos de llegada obtenidas con diferentes argumentos).

Se pueden comprobar fácilmente algunas propiedades de la POVM (4.9) y de la distribución Π_K . Utilizando la expresión de transformación temporal de los estados $|T, \alpha\rangle$ (4.6), se obtiene

$$e^{-iHt/\hbar} B(T_2, T_1) e^{iHt/\hbar} = B(T_2 - t, T_1 - t). \quad (4.12)$$

lo que significa que las probabilidades de la POVM satisfacen la condición de covarianza, que particularizada para la distribución (4.11) toma la forma

$$\Pi_K(T; \psi(0)) = \Pi_K(T - t; \psi(t)). \quad (4.13)$$

Es decir, la densidad de probabilidad de llegada en el instante T es igual a la densidad de probabilidad de llegada en el instante $T - t$ cuando el estado original ha evolucionado un tiempo t . Este es un requerimiento inspirado en las propiedades de la distribución clásica de tiempos de llegada, y es natural exigirlo a cualquier candidata al equivalente cuántico.

Se puede comprobar también que el operador tiempo de llegada, T_{AB} , es el *primer momento* de la medida POV

$$\langle \phi | B^{(1)} | \psi \rangle \equiv \int T \langle \phi | B(dT) | \psi \rangle = \langle \phi | T_{AB} | \psi \rangle = \sum_{\alpha} \int_{-\infty}^{\infty} dT \langle \phi | T, \alpha \rangle T \langle T, \alpha | \psi \rangle. \quad (4.14)$$

En principio, existen otras medidas POV compatibles con (4.12) y (4.14), pero (4.9) es la única que verifica que el operador del segundo momento asociado obedece, para estados en $D(T_{AB})$, la relación [103]

$$\Delta(\psi) \equiv \int T^2 \langle \psi | B(dT) | \psi \rangle - \langle T_{AB} \psi | T_{AB} \psi \rangle = 0, \quad (4.15)$$

que no es obvia, ya que los autoestados de T_{AB} no son ortogonales.²

A partir de las propiedades de simetría de las funciones (4.5),

$$\langle p|T, \alpha \rangle^* = \langle p| -T, \alpha \rangle, \quad (4.16)$$

se puede mostrar la siguiente relación para la distribución de tiempos de llegada,

$$\Pi_K(T, \psi(0)) = \Pi_K(-T, \psi_1(0)), \quad (4.17)$$

donde $\langle p|\psi_1 \rangle = \langle p|\psi \rangle^*$. La ecuación (4.17) es de nuevo una relación motivada clásicamente que se verifica cuando el punto de llegada es $X = 0$ [103,108].

La distribución de tiempos de llegada, Π_K (4.11), fue obtenida por J. Kijowski para estados con momentos o bien positivos o bien negativos ($\alpha = 1$ o $\alpha = -1$) [108], y ha sido rederivada, estudiada o generalizada posteriormente por varios autores, [98,103,106,109,110,111]. R. Werner en particular [103], con las mismas restricciones impuestas por J. Kijowski, justificó la unicidad de (4.11) sujeta a las condiciones (4.13), (4.15), y (4.17).

Varios estudios relacionados con el tiempo de llegada se han dedicado a obtener variantes autoadjuntas del operador T_{AB} , para evitar los supuestos inconvenientes producidos por no cumplir ese requisito el operador de Aharonov-Bohm. N. Grot y colaboradores [106] introdujeron un operador autoadjunto regularizado y consideraron la expresión completa (4.11) para su posible aplicación a estados con momentos tanto positivos como negativos, pero que se anulen en las proximidades de $p = 0$. V. Delgado y J. G. Muga [98] llegan a la misma distribución utilizando un operador autoadjunto diferente, válido sólo para estados con momentos o bien positivos o bien negativos. A continuación describiremos esas propuestas.

Variantes autoadjuntas del operador T_{AB}

N. Grot, C. Rovelli y R. S. Tate [106] atribuyen la no ortogonalidad de las autofunciones a la singularidad en $p = 0$, y producen un operador tiempo *regularizado*, T_ε , con autoestados que difieren de (4.5) sólo en una región de momentos pequeña en torno a $p = 0$,

$$\langle p|T_\pm \rangle_\varepsilon = \Theta(\pm p)(\hbar m f_\varepsilon(p))^{-1/2} \exp\left(\frac{iT}{m\hbar} \int_{\pm\varepsilon}^p \frac{dp'}{f_\varepsilon(p')}\right). \quad (4.18)$$

ε es un número positivo pequeño, y

$$f_\varepsilon = \begin{cases} 1/p, & |p| > \varepsilon \\ \varepsilon^{-2}p, & |p| < \varepsilon, \end{cases} \quad (4.19)$$

²La ecuación (4.15) se satisface de forma trivial para operadores autoadjuntos porque los momentos de la distribución del observable se obtienen como valores esperados de las potencias del operador.

La integral en (4.18), que representa el papel de la energía cuando se divide por m , será

$$\int_{\pm\varepsilon}^p \frac{dp'}{f_\varepsilon(p')} = \begin{cases} (p^2 - \varepsilon^2)/2, & |p| > \varepsilon \\ \varepsilon^2 \ln(|p|/\varepsilon), & |p| < \varepsilon. \end{cases} \quad (4.20)$$

La regularización produce un cambio en el espectro de energías en la región en torno a $p = 0$, ya que introduce energías negativas. De esta forma se evita la objeción de W. Pauli. Mientras que N. Grot, C. Rovelli y R. S. Tate modifican los autoestados (y como consecuencia, el operador tiempo) en la proximidad de $p = 0$, V. H. Paul discute una idea similar [101], modificando infinitesimalmente la función de ondas asociadas al estado físico en torno a ese punto, de forma que T_{AB} pueda ser aplicado al mismo. Sin embargo, V. H. Paul concluyó que esas modificaciones no tenían sentido físico ya que los cambios infinitesimales pueden dar lugar, por ejemplo, a valores arbitrarios del valor esperado del cuadrado de T_{AB} , $\langle T_{AB}^2 \rangle$. Téngase en cuenta que la región de p pequeños es la responsable del comportamiento asintótico de la distribución de tiempos de llegada a tiempos grandes (véase el apéndice C) y por tanto, cualquier cambio infinitesimal afectará drásticamente a cantidades tales como $\langle T_{AB}^n \rangle$, aunque afecte de forma despreciable otros valores esperados, por ejemplo, $\langle Q_{op}^n \rangle$, o $\langle P_{op}^n \rangle$, con $n = 1, 2, 3, \dots$ [101]. Aunque la observación de V.H. Paul es correcta, argumentaremos más adelante que las consecuencias no son tan negativas como él supuso.

Una segunda propuesta, debida originalmente a J. Kijowski (en la sección 8 de [108]) y desarrollada posteriormente por V. Delgado y J. G. Muga [98], consiste en descomponer T_{AB} en dos partes,

$$T_{AB} = T_{AB}\Theta(P_{op}) + T_{AB}\Theta(-P_{op}), \quad (4.21)$$

la primera actúa en el subespacio de momentos positivos y la segunda en el subespacio de momentos negativos. Si las combinamos con un signo negativo,

$$T_- = T_{AB}\Theta(P_{op}) - T_{AB}\Theta(-P_{op}). \quad (4.22)$$

se obtiene un operador autoadjunto. Los vectores propios de T_- , $|T\rangle$, se relacionan con los autoestados de T_{AB} (4.5) mediante

$$|T\rangle \equiv |T+\rangle + |-T-\rangle. \quad (4.23)$$

El operador tiempo T_- evita la objeción de W. Pauli de forma diferente a la propuesta de N. Grot y colaboradores. No es conjugado de H , sino de un operador $(\text{sgn}(P_{op})H)$ relacionado con H mediante el cambio del signo para momentos negativos. Técnicamente, como T_{AB} es un operador simétrico maximal, T_- no puede ser su extensión autoadjunta, y sólo da el mismo resultado que T_{AB} cuando actúa en el subespacio de momentos positivos (en el subespacio de momentos negativos se produce un cambio de signo).

Estas dos propuestas muestran que, en principio, pueden construirse diferentes variantes autoadjuntas de T_{AB} . Sin embargo, es esencial determinar su significado y, en particular, qué información adicional puede obtenerse a partir de ellas. Desafortunadamente, ni los estados $|T_{\pm}\rangle_{\varepsilon}$, ni los estados $|T\rangle$ transforman de acuerdo con la ecuación (4.6). De forma equivalente, ni los operadores autoadjuntos discutidos ni las distribuciones asociadas satisfacen la condición de covarianza. Para evitar ese problema, es necesario restringir el dominio de aplicabilidad física de las variantes autoadjuntas descritas con respecto a sus dominios matemáticos. Para la propuesta de N. Grot y colaboradores, el dominio debe restringirse a estados cuyo soporte de momentos quede fuera de la región de regularización en torno a $p = 0$, $(-\varepsilon, \varepsilon)$. Con esta restricción la distribución que se obtiene es de nuevo (4.11). De forma similar, la propuesta asociada con T_- tiene sólo significado físico para estados con momentos o bien positivos, o bien negativos, y la distribución correspondiente estará por tanto contenida en (4.11). En resumen, la ventaja aparente de las propuestas anteriores es engañosa, ya que en la práctica sólo son aplicables cuando sus resultados son equivalentes al resultado que ofrece la POVM relacionada con el operador de Aharonov-Bohm. De hecho, las limitaciones en el dominio de aplicabilidad de las dos propuestas son bastante severas. En un contexto experimental, las llegadas de partículas a una pantalla o cualquier otro dispositivo detector ocurrirán para todos los estados en \mathcal{H} y no sólo para un conjunto especial.

Para considerar que una teoría es completa debe ofrecer la distribución de tiempos de llegada en todos los casos, y no sólo a un conjunto especial de éstos. Al contrario que las dos propuestas discutidas, la distribución asociada con la POVM se aplica a todos los estados en \mathcal{H} , independientemente de su comportamiento en $p = 0$, y en este sentido se puede considerar como un método más completo. Además, esto es perfectamente compatible con $D(T_{AB}) \neq \mathcal{H}$ ya que el operador tiempo es únicamente uno de los momentos de la POVM. Recordemos que una distribución de probabilidad existe independientemente de sus momentos. De hecho, en mecánica clásica, para colectivos con probabilidad no nula en $p = 0$, el tiempo medio de llegada no es finito pero la distribución está bien definida en cualquier caso. En este sentido sólo la propuesta basada en la POVM da un límite clásico correcto.

En resumen, la distribución $\Pi_K(T)$ es satisfactoria desde varios puntos de vista. Sin embargo, para completar el marco ofrecido por la POVM faltaría analizar el comportamiento de las autofunciones (4.5), y en particular, determinar en qué medida representan estados de llegada en un instante y posición determinados. Para ello es necesario estudiar la dependencia espacial y temporal de los estados $|T, \alpha\rangle$, estudio que abordaremos a continuación.

Antes de hacerlo conviene señalar que, debido a la simetría (4.16), las representaciones en

coordenadas de estados que han evolucionado temporalmente,

$$|T_t \pm\rangle \equiv \exp(-iHt/\hbar)|T \pm\rangle, \quad (4.24)$$

para diferentes valores de α están relacionadas por

$$\langle x|T_t -\rangle = \langle -x|T_t +\rangle, \quad (4.25)$$

de forma que será suficiente estudiar uno de los casos. Otra simplificación viene del hecho de que, como consecuencia de (4.6), estudiar la dependencia temporal de uno de los estados, digamos $|T'_t +\rangle$, desde $t = 0$ hasta el tiempo de llegada nominal $t = T'$, es equivalente a considerar la secuencia de autofunciones $|T +\rangle$ desde $T = T'$ a $T = 0$.

El análisis espacial que se realiza en el próximo apartado debe tomarse con muchas precauciones debido a que los estados no son de cuadrado integrable. Como ocurre con los estados de colisión del continuo, su interpretación física requerirá la construcción de paquetes normalizados centrados en uno de ellos.

Dependencia espacial de los autoestados de T_{AB}

La representación en coordenadas de la función de ondas (4.5) viene dada por la integral,

$$\langle x|T +\rangle = \int_0^\infty \langle x|p\rangle \left(\frac{p}{m\hbar}\right)^{1/2} e^{ip^2T/(2m\hbar)} dp, \quad (4.26)$$

Supongamos por el momento que $T > 0$, por lo que (4.26) corresponde a la función de un autoestado en un instante previo a la llegada (la función para el estado *llegando* corresponderá a $T = 0$). La integral anterior puede expresarse exactamente en términos de funciones cilíndricas parabólicas, mediante el cambio de variable

$$s = \alpha p, \quad (4.27)$$

donde

$$\alpha = -\left[\frac{T}{m\hbar}\right]^{1/2} e^{-i\pi/4}. \quad (4.28)$$

Con este cambio (4.26) toma la forma

$$\frac{1}{hm^{1/2}(\alpha^{1/2})^3} \int_C ds s^{1/2} e^{-s^2/2+zs}, \quad (4.29)$$

donde todas las raíces cuadradas se calculan con un corte de rama en el eje real negativo, y

$$z = xe^{-i\pi/4} \left(\frac{m}{\hbar T}\right)^{1/2}. \quad (4.30)$$

El camino de integración C en (4.29) va desde 0 hasta ∞ por la bisectriz del segundo cuadrante del plano complejo s . z será un punto de silla de la exponencial $\exp(-s^2/2 + sz)$, que estará en la bisectriz del segundo/cuarto cuadrante para valores negativos/positivos de x .

El camino de máxima pendiente de descenso desde el punto de silla es paralelo al eje real, y C recorre la frontera entre una *colina* y un *valle*.³ El contorno puede deformarse en una línea por encima del corte de rama, ya que la contribución del arco que la une con el contorno original es nula en el infinito. Como el integrando a lo largo del corte de rama simplemente cambia de signo, (4.29) es la mitad de la integral por un camino que rodea el corte, con sentido desde el infinito al origen por el tercer cuadrante y rodeando el cero y desde el origen al infinito por el segundo. Con este procedimiento puede reconocerse una de las formas integrales de la función cilíndrica parabólica $D_{-3/2}(z)$ [34],

$$\langle x|T+\rangle = -\frac{i\Gamma(3/2)}{hm^{1/2}(\alpha^{1/2})^3} e^{z^2/4} D_{-3/2}(z). \quad (4.31)$$

Este resultado permite analizar de forma sencilla el comportamiento de la solución a partir de las formas asintóticas de $D_{-3/2}$ [34,112]. Para valores grandes de x y pequeños de T , que corresponde a valores del argumento de $D_{-3/2}$ de módulo grande en el cuarto cuadrante, se obtiene el término dominante

$$\langle x|T+\rangle \sim \frac{h^{1/2} e^{3i\pi/4}}{x^{3/2} \pi^{5/2} m^{1/2}}, \quad x \rightarrow \infty. \quad (4.32)$$

Luego la función (4.31) decrecerá como $x^{3/2}$ y su comportamiento asintótico será independiente de T .

Para el caso de x negativos y grandes en valor absoluto, que corresponde a valores del argumento de $D_{-3/2}$ de módulo grande en el segundo cuadrante, se obtiene el término dominante

$$\langle x|T+\rangle \sim \frac{(m|x|/h)^{1/2}}{T} e^{i\pi/4} e^{-\frac{ix^2 m}{2hT}}, \quad x \rightarrow -\infty, \quad (4.33)$$

que en este caso crece como $|x|^{1/2}$ (esta es la razón de la no integrabilidad de las funciones $\langle x|T, \alpha \rangle$).

El entorno de $x = 0$ puede describirse desarrollando la función cilíndrica parabólica en serie de potencias y manteniendo los primeros términos,

$$D_{-3/2}(z) = -\frac{\Gamma(-1/4)}{\pi^{1/2} 2^{5/4}} - \frac{\Gamma(1/4)}{\pi^{1/2} 2^{3/4}} z + \mathcal{O}(z^2). \quad (4.34)$$

Combinando (4.34) y (4.31) se obtienen expresiones explícitas para las funciones en el origen,

³Que corresponde a una solución de la ecuación $\text{Re}(-s^2/2 + sz) = 0$.

$\langle x = 0|T+\rangle$, la *densidad de probabilidad* y el *flujo* asociado a ellas, $J(x = 0)$.⁴ En particular, el “flujo” será

$$J(x = 0) = \left[\frac{\Gamma(3/2)}{2\pi T} \right]^2. \quad (4.35)$$

Al contrario de lo que se esperaría de forma intuitiva, ni la *densidad de probabilidad* ni el *flujo* son nulos en $x = 0$ para $T > 0$, sino que crecen monótonamente cuando $T \rightarrow 0$.

Los resultados del caso $T < 0$ se obtienen utilizando la simetría

$$\langle x|T+\rangle^* = \langle -x|-T+\rangle. \quad (4.36)$$

Por tanto, el comportamiento asintótico para x negativos y positivos (crecientes y decrecientes respectivamente) cambia abruptamente para $T = 0$. Como $|T+\rangle$ no representa un estado físico, la discontinuidad en $T = 0$ no es problemática, pero indica de nuevo que no se puede realizar una interpretación física literal del significado de los autoestados. Se mostrará más adelante que paquetes de ondas normalizados en torno a uno ellos no presentan ninguna singularidad.

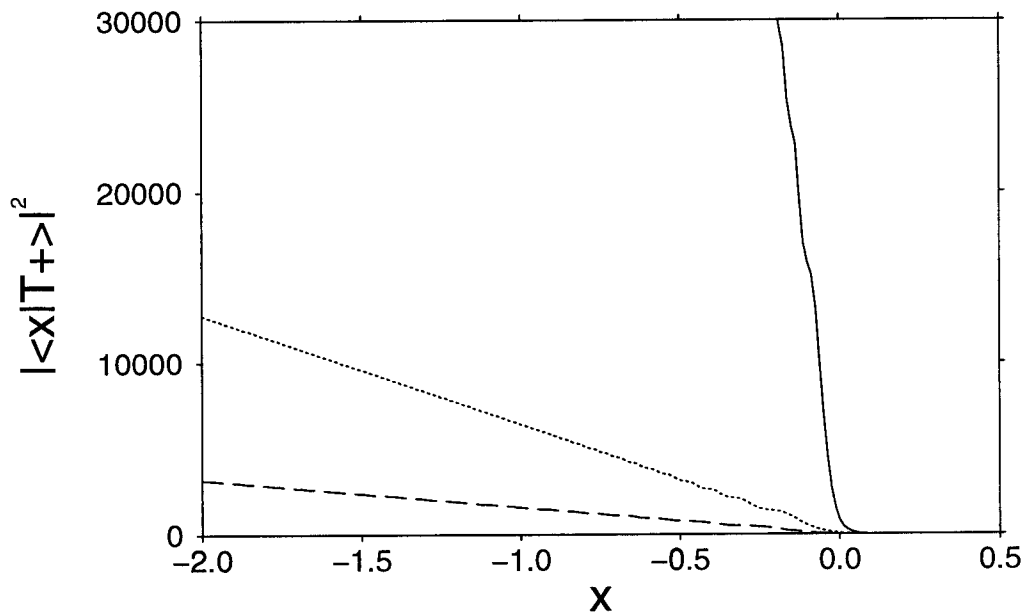


Figura 4.1: $|\langle x|T+\rangle|^2$ frente a x para $T = 0.01$ (línea a trazos), 0.005 (línea punteada) y 0.001 (línea continua), y $m = 1$. Todas las magnitudes en unidades atómicas.

La inexistencia de algoritmos eficientes que permitan evaluar la función $D_{-3/2}$ hace que la expresión (4.31) sea poco útil para determinar $\langle x|T, +\rangle$ en un valor arbitrario de x . Tampoco la

⁴Aunque la *densidad de probabilidad* y el *flujo* se obtienen con las expresiones habituales ($|\psi|^2$ y $\hbar/m\text{Im}\{\psi^*\psi'\}$ respectivamente), los resultados que se obtienen no tienen la dimensionalidad adecuada. Esto se debe a la normalización *del continuo* utilizada para las autofunciones (4.5). Las dimensiones apropiadas se obtienen integrando esos objetos durante un periodo de tiempo para formar paquetes de onda.

integración numérica por el contorno original (4.26) es una buena alternativa debido a las rápidas oscilaciones de las exponenciales. El camino más sencillo para calcular la integral consiste en deformar el contorno en el plano p complejo a lo largo del eje imaginario, desde el origen hasta la intersección con el camino de máxima pendiente de descenso definido por la curva

$$p_I = mx/T + p_R, \quad (4.37)$$

(Por p_R y p_I denotamos la parte real e imaginaria de p), y continuar entonces por el camino de máxima pendiente de descenso hacia el infinito en el primer cuadrante. El punto de silla será real y estará en $p_R = -mx/T$. Este camino de integración permite realizar un análisis simple de las expresiones asintóticas de la función descritas anteriormente. Para $x \gg 0$ el contorno de integración no cruza el punto de silla y el origen es el único punto crítico relevante. La integral original puede aproximarse en este caso por la integral en el intervalo $[0, p_I]$ del semieje imaginario positivo, que puede obtenerse utilizando el lema de Watson [42]. El resultado está de acuerdo con la expresión (4.32). Puede hacerse un análisis similar para $x \ll 0$. En este caso el punto crítico dominante es el punto de silla y la integral puede aproximarse por su aportación. El resultado que se obtiene está de acuerdo con la expresión asintótica (4.33).

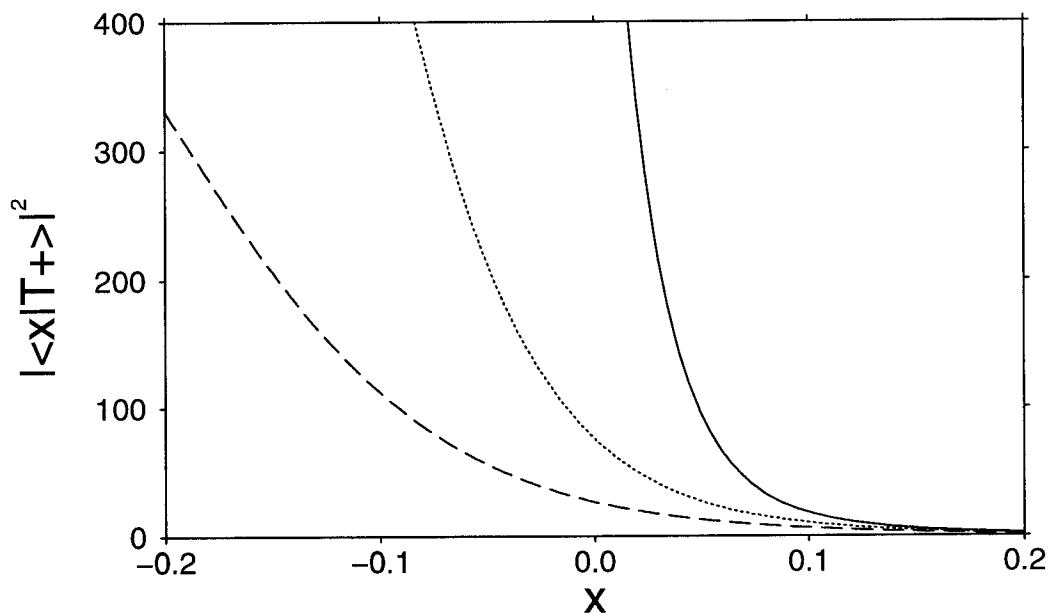


Figura 4.2: Igual que la figura 4.1 para un intervalo de x menor.

En las figuras 4.1 y 4.2 se muestra $|\langle x|T+\rangle|^2$, calculada mediante la integración por el contorno descrito, para una serie de tiempos decrecientes $T > 0$ como función de x en dos escalas diferentes: entre $x = -2$ y $x = 0.2$ (figura 4.1), y entre $x = -0.2$ y $x = 0.2$ (figura 4.2). En la escala más grosera, la *densidad* de las autofunciones es esencialmente una línea recta, que pivota

en $x = 0$ y se aproxima a la vertical para $T \rightarrow 0$. La escala más detallada muestra sin embargo que la llegada no está definida de forma precisa. Aunque, en un sentido vago, la mayoría de la onda $\langle x|T+\rangle$ pasa de $x < 0$ a $x > 0$ en el instante $T = 0$, hay una cola en $x > 0$ presente en cualquier instante T arbitrario. Pero como los estados no están normalizados a uno, no es posible cuantificar la fracción de partículas que se encuentran a la derecha de $x = 0$ antes de $T = 0$.

Se podría esperar que las autofunciones de los operadores autoadjuntos, que son ortogonales, evitaran esa *imprecisión*.⁵ Sin embargo, no lo hacen. Para valores arbitrarios de ϵ , hemos comprobado (véase el apéndice D) que no hay una densidad $|\langle x|T+\rangle_\epsilon|^2$ nula para $x > 0$ y T fijo. De forma similar, los estados $\langle x|T\rangle$ tampoco son nulos a la derecha de $x = 0$. Usando su definición (4.23), además de (4.25) y (4.36), se encuentra que

$$\langle x|T\rangle = 2\text{Re}\langle x|T+\rangle. \quad (4.38)$$

(Para el estado que ha evolucionado con el tiempo no se mantendría esa dependencia, sino $\langle x|T_t\rangle \equiv \langle x|e^{-iHt/\hbar}|T\rangle = \langle x|(T-t)+\rangle + \langle x|(T+t)+\rangle^*$.)

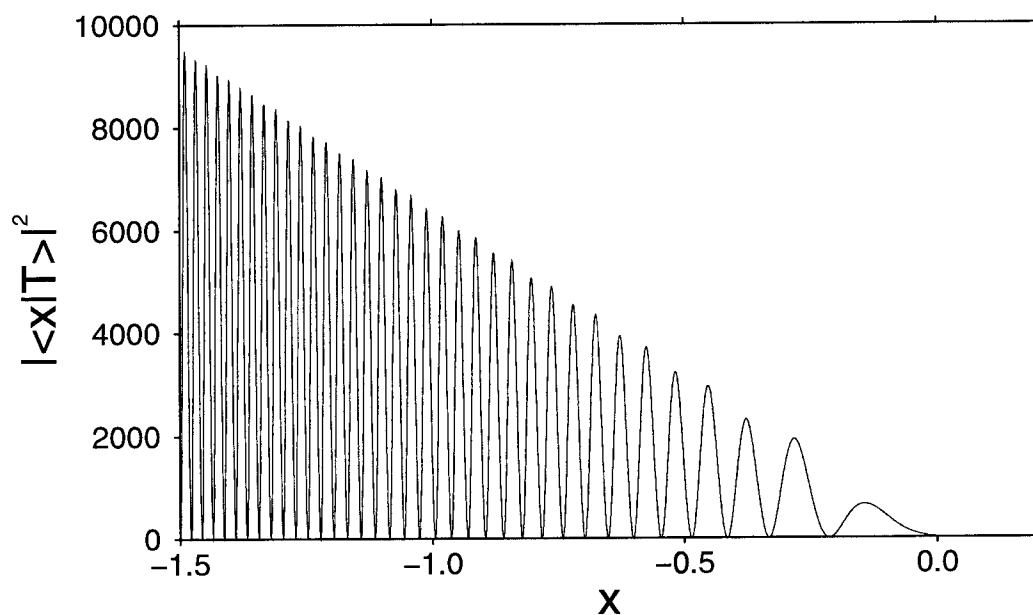


Figura 4.3: $|\langle x|T\rangle|^2$ frente a x para $T = 0.01$ y $m = 1$.

La figura 4.3 representa el cuadrado de esa cantidad para intervalos espaciales relativamente grandes (el valor no nulo de la densidad para $x > 0$ no se aprecia en esta escala). La figura

⁵De acuerdo con la terminología de [104], cualquier operador autoadjunto es *preciso*. Sin embargo, al referirnos a las autofunciones de operadores tiempo autoadjuntos, utilizamos las palabras “preciso” e “impreciso” de forma más próxima a su uso común. Una llegada precisa será una llegada instantánea.

correspondiente a la parte imaginaria es similar. Se aprecian oscilaciones cada vez más rápidas cuando $x \rightarrow -\infty$. Estas oscilaciones se cancelan para combinaciones lineales de estados $\langle x|T\rangle$ o $\langle x|T+\rangle$ sobre un intervalo no nulo de tiempo, dando lugar a la localización en una región próxima al origen. Un ejemplo se muestra en la figura 4.4, que se comenta ampliamente en el próximo apartado. Una asociación clásica ayuda a interpretar el patrón oscilatorio de la figura 4.3: las partículas con velocidades altas (que corresponden a oscilaciones rápidas) deben comenzar a distancias mayores mientras que las partículas con velocidades pequeñas (oscilaciones lentas) lo deben hacer a distancias más próximas para llegar a $X = 0$ simultáneamente.

Dependencia espacial y temporal de cuasi-autoestados de T_{AB} normalizados

En este punto estudiaremos paquetes normalizados construidos utilizando una distribución gaussiana de estados $\langle x|T'_t+\rangle$, centrada en torno a $T' = T$,

$$|\Psi(t; T, \Delta T)\rangle = N \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{(T-T')^2}{2(\Delta T)^2}} |T'_t+\rangle dT', \quad (4.39)$$

donde N será una constante de normalización y ΔT la anchura a mitad de altura de la gaussiana. V. H. Paul estudió también paquetes en torno a uno de los autoestados con una función cuadrada en lugar de una gaussiana. Sin embargo los desechó por no pertenecer a $D(T_{AB})$.

La representación de momentos de (4.39) se obtiene fácilmente utilizando la expresión (4.5) y realizando la integral gaussiana en T' . Para obtener la representación de posiciones es necesario introducir una relación de cierre en momentos adicional. El resultado permite evaluar la norma del paquete, $\int_{-\infty}^{\infty} dx |\langle x|\Psi(t; T, \Delta T)\rangle|^2$. Si se normaliza a la unidad, las representación de momentos será⁶

$$\langle p|\Psi(t; T, \Delta T)\rangle = \frac{2\pi^{1/4}(\Delta T)^{1/2}}{(hm)^{1/2}} p^{1/2} e^{i(T-t)p^2/(2m\hbar)} e^{-(\Delta T)^2 p^4/(8m^2\hbar^2)} \Theta(p), \quad (4.40)$$

mientras que la representación en posiciones del paquete será

$$\langle x|\Psi(t; T, \Delta T)\rangle = \frac{2\pi^{1/4}(\Delta T)^{1/2}}{hm^{1/2}} \int_0^{\infty} p^{1/2} e^{ipx/\hbar} e^{i(T-t)p^2/2m\hbar} e^{-(\Delta T)^2 p^4/8m^2\hbar^2} dp. \quad (4.41)$$

Esta integral puede evaluarse numéricamente con facilidad debido a la dependencia exponencial en $-p^4$. En la figura 4.4 se muestra la función (4.41) para diferentes instantes de tiempo. Obsérvese cómo el paquete se concentra en torno al punto de llegada ($X = 0$) en el instante $t = T$.

⁶Esto estados no verifican la condición (4.3), por lo que tampoco pertenecerán al dominio de T_{AB} .

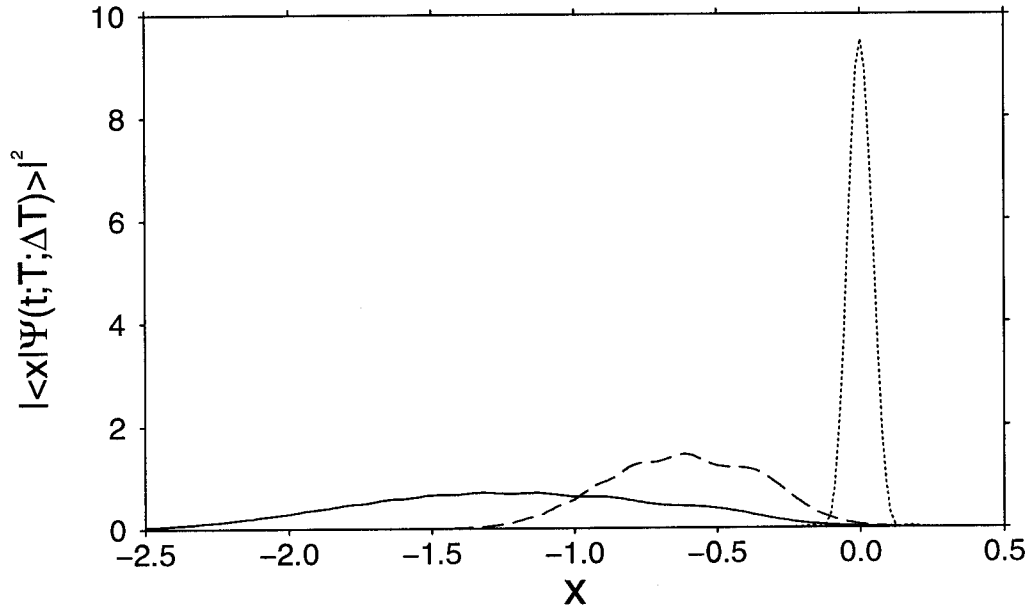


Figura 4.4: Densidad de probabilidad de los estados propios normalizados (véase la ecuación (4.39)) para $T = 0.04$, $m = 1$, $\Delta T = 0.001$; $t = 0$ (línea continua), $t = 0.02$ (línea a trazos) y $t = 0.04$ (línea punteada).

Se puede mostrar que cuando $\Delta T \rightarrow 0$, los estados (4.39) son ortogonales entre sí y satisfacen la ecuación de autovalores ($T_{AB}|\psi\rangle = T|\psi\rangle$) con el grado de precisión deseado,

$$\langle \Psi(t; T', \Delta T) | \Psi(t; T, \Delta T) \rangle = w\left(\frac{T - T'}{2\Delta T}\right) = \begin{cases} 1 & \text{if } T = T' \\ \sim \mathcal{O}\left(\frac{\Delta T}{T - T'}\right) & \text{as } \frac{\Delta T}{T - T'} \rightarrow 0 \end{cases} \quad (4.42)$$

$$\langle p | T_{AB} | \Psi(0; T, \Delta T) \rangle = T \langle p | \Psi(0; T, \Delta T) \rangle + \mathcal{O}(\Delta T)^{5/2}, \quad (4.43)$$

En la relación de ortogonalidad (que se obtiene mediante una relación de cierre en momentos y realizando la integral) se ha introducido la función $w(z)$ [34].

También es posible obtener los momentos estadísticos de la distribución de momentos, $\langle P_{op}^n \rangle$, introduciendo de nuevo una relación de cierre y evaluando las integrales resultantes [112],

$$\langle P_{op}^n \rangle = \Gamma\left(\frac{n+2}{4}\right) \pi^{-\frac{1+n}{2}} \left(\frac{\Delta T}{hm}\right)^{-n/2}. \quad (4.44)$$

De forma similar, de (4.41) se deduce que el primer momento de la posición es

$$\langle Q_{op} \rangle = -\frac{\Gamma(3/4)}{\pi} \left(\frac{h}{m\Delta T}\right)^{1/2} (T - t), \quad (4.45)$$

mientras que los momentos superiores divergen. Sin embargo, es siempre posible definir una anchura finita como la anchura a mitad de altura. La velocidad promedio, $\langle P_{op}/m \rangle$, que es también la velocidad del centroide $\langle Q_{op} \rangle$ vendrá dada por $\Gamma(3/4)[h/(\Delta T m \pi^2)]^{1/2}$.

Estas propiedades muestran que el comportamiento de los estados (4.39) es arbitrariamente próximo al que se desearía para un autoestado del tiempo de llegada ideal: están normalizados y no hay ninguna discontinuidad en $t = T$; para un valor fijo de ΔT , obedecen una ley de transformación de la forma (4.6); la onda viaja hacia el origen con una velocidad constante; y la posición promedio cruza el origen en el instante $t = T$, que corresponde al instante en el que la anchura espacial de paquete alcanza su valor mínimo. Por supuesto, permanece cierta *imprecisión*. A partir de la expresión (4.41) se encuentra que

$$\langle -x | \Psi(2T - t; T, \Delta T) \rangle = \langle \Psi(t; T, \Delta T) | x \rangle, \quad (4.46)$$

lo que implica que la densidad de probabilidad tiene simetría de inversión en (x, t) con respecto al punto espacio temporal $(0, T)$. En particular, para $t = T$, la mitad de la norma está a la derecha de $x = 0$, independientemente del valor de ΔT . El problema de la existencia de estados cuánticos donde la partícula permanece estrictamente a un lado de X antes del instante T y al otro lado después de T se trata en el apéndice E.

Sin embargo, cuando $\Delta T \rightarrow 0$ la densidad del paquete de ondas y el flujo están cada vez más centrados en torno al punto espacio temporal $(x = 0, t = T)$, por lo que el paso de izquierda a derecha es tan *preciso* como se desee,⁷

$$|\langle x = 0 | \Psi(t = T; T, \Delta T) \rangle|^2 = \left(\frac{m}{\hbar \Delta T} \right)^{1/2} \frac{\Gamma(3/8)^2}{\pi 2^{5/4}}, \quad (4.47)$$

$$J(x = 0, t = T) = \frac{\Gamma(3/8)\Gamma(5/8)}{\Delta T \pi^{3/2} 2^{3/4}}. \quad (4.48)$$

4.2.2 Distribuciones operacionales de tiempos de llegada

Procederemos ahora a generalizar un procedimiento clásico que utiliza condiciones de contorno *perfectamente absorbentes* para obtener la distribución de tiempos de *primera* llegada. Encontraremos que condiciones compatibles en el caso clásico dejan de serlo en el caso cuántico.

Caso clásico

Si todas las partículas de un colectivo clásico que evoluciona libremente tienen momento p positivo, la distribución de tiempos de llegada $t(X)$ a una posición $x = X$ (como antes supondremos que $X = 0$ a menos que se indique lo contrario), que denotaremos por $\Pi[t(X)]$, es igual al flujo en ese punto, $J[x = X, t = t(X)]$ (en los sucesivos denotaremos $t(X)$ simplemente como t). No es sorprendente por tanto que en muchas investigaciones las distribuciones de

⁷Los paquetes de ondas normalizados construidos con los autoestados (4.18) se examinaron en [113], donde se llega a la conclusión de que en este caso no se encuentra la precisión arbitraria que se muestra para los estados (4.39).

tiempos de llegada propuestas para las partículas cuánticas estén relacionadas con la corriente de probabilidad $J(0, t)$ [19,98,106,114]. Es tentador extender el resultado clásico e interpretar $J(0, t)$ como una distribución cuántica de tiempos de llegada. Pero esto no es posible ya que en mecánica cuántica $J(0, t)$ puede ser negativo, incluso para un colectivo de partículas sin componentes de momentos negativos que evolucionan libremente. A este flujo sin equivalente clásico lo denominaremos flujo anómalo. A. J. Bracken y G. F. Melloy [115] analizaron este fenómeno, mostrando que el intervalo temporal en el que $J(0, t) < 0$ es finito aunque arbitrariamente grande. Además estimaron una cota superior para la integral temporal de $|J(0, t)|$ sobre el intervalo de $J(0, t) < 0$, con un resultado de 0.04, un valor suficientemente grande para hacer posible la observación experimental del flujo anómalo.

Sin embargo, ni siquiera en mecánica clásica $J(X, t)$ es la distribución de tiempos de llegada para el caso general en el que se mezclen momentos positivos y negativos (debido, por ejemplo, a la presencia de un potencial de interacción, o simplemente a las condiciones iniciales del colectivo.) Aún en ese caso existe una expresión *exacta* para la distribución de tiempos de primera llegada que evita el uso de trayectorias. Se basa en el uso de condiciones de frontera perfectamente absorbentes que eliminan cualquier partícula que alcance X , y tiene la forma

$$\Pi(t) = -dN(t)/dt. \quad (4.49)$$

(Debe ser normalizada adecuadamente para tener en cuenta cualquier partícula incidente que no alcance el detector.) La probabilidad total $N(t)$ decrece con el tiempo debido a la presencia de la frontera absorbente y $(-dN(t)/dt)dt$ se interpreta como la fracción de partículas absorbidas entre t y $t + dt$. El ritmo de absorción $-dN(t)/dt$ es igual a $\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} [J(X - \epsilon, t) - J(X + \epsilon, t)]$, pero la segunda cantidad diferirá en general del resultado que se obtiene evaluando el flujo en el mismo punto *sin* la condición de frontera absorbente, exceptuando el caso simple de la dinámica de movimiento libre para un colectivo de partículas con sólo momentos positivos o negativos.

Para simplificar el problema consideraremos en lo sucesivo que el estado inicial del sistema se encuentra inicialmente en el semieje x negativo, por lo que la condición de frontera absorbente perfecta evitaría el paso de partículas al semieje positivo. Además, esto nos permitirá que la absorción se produzca en un intervalo con extremo izquierdo en el origen, relajando así la condición de absorción perfecta en un *punto* que, como veremos, no tiene equivalente cuántico.

Caso cuántico

Un procedimiento operacional para definir una cantidad mecanocuántica, utilizada ampliamente en contextos experimentales, consiste en adoptar una prescripción que sea válida en el caso clásico. Esto es perfectamente legítimo, pero, como ya hemos indicado, es importante tener

en cuenta que, en general, procedimientos que son equivalentes clásicamente pueden diferir en el caso cuántico. Con esta idea, una distribución cuántica de tiempos de llegada se define por la ecuación (4.49), donde ahora

$$N(t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx |\langle x|\psi(t)\rangle|^2. \quad (4.50)$$

Es una definición sensata, ya que parte de la expresión clásica más general posible para la distribución de tiempos de primera llegada (4.49), sin hacer uso explícito del concepto de trayectoria. Consideraremos que la frontera absorbente en el caso cuántico es fruto de algún dispositivo detector y será descrita por tanto por una ecuación efectiva de Schrödinger con un potencial absorbente. Durante la evolución de la partícula que describe esta ecuación, la norma N del estado inicial decrece con el tiempo de acuerdo con el ritmo de detección. Claramente, $-dN/dt$ dependerá del aparato pero, desde un punto de vista fundamental, es necesario identificar el conjunto de condiciones de una medida *ideal*, las consecuencias de tal definición operacional, y las propiedades generales de la distribución operacional que permanece independiente del mecanismo particular de detección. Con ese objetivo analizaremos el comportamiento de un absorbente ideal⁸ durante el régimen de flujo anómalo, que al tratarse un caso genuinamente cuántico pondrá de manifiesto las diferencias con el caso clásico. Parte de este análisis, la descripción de la amplitud del primer canal fuera del detector ideal, es independiente de los detalles del mecanismo final de la detección. Sin embargo, para determinar la distribución operacional, es necesario emplear algún modelo específico y en este caso se usará un modelo fenomenológico sencillo.

Suponemos que el experimento se repite con partículas simples muchas veces, con las mismas condiciones iniciales, y que el número final de detecciones para un dt dado es proporcional a la cantidad de norma del canal inicial que desaparece durante ese intervalo de tiempo, $-dt(dN(t)/dt)$, donde $\langle x|\psi(t)\rangle$ representa la amplitud del canal inicial. Consideraremos que el detector se sitúa entre 0 y L , dos puntos donde la interacción entre la partícula y el detector sea despreciable. Como se discutió en la introducción de este capítulo, el efecto externo del aparato en la amplitud del canal inicial vendrá descrita por las funciones $R^l(p)$ y $T^l(p)$, independientemente del mecanismo de detección.

En ausencia de flujo anómalo en $x = 0$, $J(0, t)$ en el extremo frontal del detector y $-dN(t)/dt$ serán similares una a la otra, con la segunda ligeramente retrasada respecto a la primera debido al tiempo que emplea el detector en absorber (esto es, pasar del canal incidente a los canales finales) la parte de la onda que se encuentra en la región de detección. La diferencia de los

⁸Con este término definimos un potencial que absorba para todos los momentos incidentes, sin ninguna suposición adicional sobre su extensión espacial o ritmo de absorción.

promedios temporales evaluados con $J(0, t)$ y $-dN(t)/dt$ será el tiempo de permanencia medio en el detector, τ_D [19].

Un buen detector absorberá completamente un amplio rango de momentos incidentes, Δ_p ,

$$R^l(p) = T^l(p) = 0, \quad (p \text{ en } \Delta_p). \quad (4.51)$$

En lo sucesivo denominaremos absorbente perfecto en el intervalo Δ_p al potencial que cumpla este requisito. Para partículas libres que evolucionan clásicamente con momentos iniciales positivos, las condiciones de frontera perfectamente absorbentes en $x = X$ implican un flujo positivo, $J(X - \epsilon, t) \geq 0$, ya que una vez que la partícula alcance la frontera no podrá volver al semiplano $x < X$. Sin embargo el comportamiento en mecánica cuántica puede ser diferente.

Consideremos por ejemplo una función de ondas en el instante inicial $t = 0$ que no tiene componentes de momentos negativos y con un solapamiento despreciable con la región del detector⁹ $[0, L]$. En ausencia del mismo, la función de ondas para el canal incidente evolucionará libremente y, utilizando la base de ondas planas, puede escribirse como

$$\langle x | \phi_{ent}(t) \rangle = \int_0^\infty dp \langle x | p \rangle e^{-ip^2 t / (2m\hbar)} \langle p | \phi_{ent}(0) \rangle, \quad (4.52)$$

mientras que si el detector está presente, el canal incidente de la función de ondas viene dado por

$$\langle x | \psi(t) \rangle = \int_0^\infty dp \langle x | p+ \rangle e^{-ip^2 t / (2m\hbar)} \langle p | \phi_{ent}(0) \rangle, \quad (4.53)$$

Los elementos necesarios para obtener las expresiones anteriores fueron descritos en la sección 1.7.

El comportamiento asintótico del estado de colisión, descrito en el capítulo 1, es

$$\langle x | p+ \rangle \sim e^{ipx} + R^l(p) e^{-ipx}, \quad x \rightarrow -\infty, \quad (4.54)$$

$$\langle x | p+ \rangle \sim T^l(p) e^{ipx}, \quad x \rightarrow \infty. \quad (4.55)$$

Las amplitudes de reflexión $R^l(p)$ de un absorbente perfecto son cero para todos aquellos momentos en que $\langle p | \phi_{ent}(0) \rangle$ tenga un valor no despreciable. Como consecuencia, si $x \leq 0$ se verifica que $\langle x | p \rangle = \langle x | p+ \rangle$. Luego, $\langle x | \psi(t) \rangle = \langle x | \phi_{ent}(t) \rangle$ para $x \leq 0$, es decir, la función de ondas a la izquierda del detector no se altera por la presencia de éste, y los flujos para ϕ y ψ (sin y con detector) serán también iguales en $x = 0$,

$$J_\psi(x, t) = J_\phi(x, t), \quad x \leq 0. \quad (4.56)$$

⁹Un paquete sin momentos negativos siempre tiene soporte espacial en todo el eje real, pero la norma a la derecha N^+ puede hacerse arbitrariamente pequeña.

Esto es cierto independientemente del signo de J , y en particular, la igualdad se mantiene cuando $J_\phi(x=0, t) < 0$ durante algún intervalo de tiempo finito δ_t . Como el detector absorbente perfecto reproduce esta región de flujo anómalo exactamente, debe *devolver* parte de la probabilidad que entró en $[0, L]$ antes de δ_t , pero que no ha sido aún absorbida, y en consecuencia

$$dN^-(t)/dt = -J_\psi(x=0, t) = -J_\phi(x=0, t) > 0, \quad \text{para } t \text{ en } \delta_t, \quad (4.57)$$

donde

$$N^-(t) = \int_{-\infty}^0 |\langle x|\psi(t)\rangle|^2 dx. \quad (4.58)$$

Este resultado es cuando menos sorprendente y merece algunos comentarios:

- La ecuación (4.57) no depende del mecanismo particular de la detección. Es un resultado general que se deduce de la suposición de que el detector se comporta como un absorbente perfecto, como se especifica en la ecuación (4.51).
- El flujo de probabilidad hacia la izquierda fuera del espacio ocupado por el detector es sólo temporal y no implica ninguna reflexión permanente de una fracción de partículas ya que la norma para tiempos asintóticamente grandes verifica

$$N = \int_0^\infty (|R(p)|^2 + |T(p)|^2) |\langle p|\phi(0)\rangle|^2 dp = 0, \quad (4.59)$$

es decir, todas serán finalmente absorbidas.

- Si el flujo en el frente de un detector real es siempre positivo, el detector no puede ser un absorbente perfecto en el sentido preciso de la ecuación (4.51). Esta incompatibilidad está en clara contradicción con el concepto de absorbente en mecánica clásica.
- La ecuación (4.57) no depende del mecanismo propio del detector. Luego esta ecuación no especifica la distribución operacional de tiempos de llegada, $-dN/dt$, que debe obtenerse incorporando alguna o toda la complejidad de los detectores reales con diferentes grados de sofisticación [94]. El modelo más simple trata de forma implícita los grados de libertad de la partícula, salvo al traslacional del centro de masa a lo largo del eje x , mediante un potencial complejo que reproduce las funciones características del detector $R^l(p)$ y $T^l(p)$. En este punto, incluso el estudio del modelo más simple es interesante, ya que a priori no es obvio que un modelo fenomenológico que utilice un hamiltoniano no hermítico pueda reproducir el comportamiento descrito por (4.57).
- Mientras en mecánica clásica la absorción es instantánea y la frontera perfectamente absorbente se reduce a un punto, para el absorbente que satisface (4.51) en mecánica cuántica ni

la absorción puede ser instantánea, ni la longitud de absorción L puede ser estrictamente cero porque se debe acumular una cantidad finita de norma entre 0 y L sin ser absorbida para satisfacer (4.56) en el régimen de flujo anómalo.

A continuación mostraremos que el comportamiento predicho en (4.57) se observa con un modelo fenomenológico de la detección, y que una distribución operacional $-dN(t)/dt$ positiva (el signo se asegura utilizando un potencial absorbente con parte imaginaria negativa) es compatible con que $-dN^-(t)/dt$ sea negativa para un rango finito δ_t de t en el régimen de flujo anómalo.

Distribución operacional de tiempos de llegada

Para construir la distribución operacional de tiempos de llegada (4.49) utilizaremos el potencial compuesto por barreras cuadradas¹⁰ descrito en el capítulo 2. En esta aplicación restringiremos la parte imaginaria de las barreras a valores negativos, evitando así cualquier posible efecto de *creación* de norma por parte del absorbente. Los estados de colisión estacionarios de estos potenciales se pueden determinar exactamente, lo que permite calcular fácilmente los ritmos de absorción $-dN/dt$ (y también cantidades tales como la absorción total, o los tiempos de permanencia) para un paquete de ondas dado mediante integración numérica.

Las relaciones necesarias para obtener la evolución del paquete de ondas fueron descritas en el capítulo 1. El potencial construido permite una absorción eficiente para momentos medios y altos (superior al 99.9%) pero no para momentos demasiados bajos. El paquete de ondas se seleccionó para que evitara esa región, y como consecuencia la cantidad de flujo anómalo será mucho menor que la cota de la ref. [115], pero será suficiente para mostrar el efecto y para ilustrar las predicciones teóricas de la ecuación (4.56). Para ello consideremos primero un estado incidente $|\psi\rangle$ que da lugar a expresiones analíticas para $\langle x|\psi(t)\rangle$ y $J(x, t)$,

$$\langle p|\psi(0)\rangle = C(1 - e^{-\alpha p^2/\hbar^2})e^{-\delta^2(p-p_0)^2/\hbar^2 - ipx_0/\hbar}\Theta(p), \quad (4.60)$$

con $\delta^2 + \alpha > 0$, $x_0 \ll -\delta$, y donde C es la constante de normalización. $\Theta(p)$ es la función escalón y asegura la ausencia de momentos negativos en la distribución inicial. Esta función para determinados valores de los parámetros presenta flujo anómalo. La representación en posiciones del estado será

$$\langle x|\psi(t)\rangle = \frac{Ch^{1/2}}{4\pi^{1/2}e^{k_0^2\delta^2}} \left\{ \frac{w(-ig/2A^{1/2})}{A^{1/2}} - \frac{w[-ig/2(A+\alpha)^{1/2}]}{(A+\alpha)^{1/2}} \right\}. \quad (4.61)$$

¹⁰Se eligió este potencial porque presentaba el mejor comportamiento para la región de momentos *adimensionales* bajos, indispensable para tratar casos de flujo anómalo.

Aquí $w(z) = e^{-z^2} \operatorname{erfc}(-iz)$, $k_0 = p_0/\hbar$, $A = \delta^2 + i\hbar t/(2m)$, y $g = i(x - x_0) + 2k_0\delta^2$. La derivada con respecto a x , y por tanto el flujo son también analíticos ya que $dw(z)/dz = -2zw(z) + 2i/\pi^{1/2}$.

La distribución de momentos de (4.60) está demasiado próxima al origen ($p = 0$) para ser absorbida eficientemente por cualquier potencial conocido, por lo que en vez de ese estado se usó uno nuevo que se obtiene de (4.60) mediante una traslación en momentos en el instante $t = 0$,

$$\langle p|\psi'(0)\rangle = \langle p - b|\psi(0)\rangle. \quad (4.62)$$

El flujo para el nuevo estado puede relacionarse con el flujo y densidad de probabilidad del original mediante la relación

$$J_{\psi'}(0, t) = J_{\psi}(-bt/m, t) + (b/m)|\langle x = -bt/m|\psi(t)\rangle|^2. \quad (4.63)$$

El último término puede entenderse como la contribución al flujo debido al desplazamiento de un observador con velocidad $-b/m$. Como $b > 0$, este término será siempre positivo y si la traslación se realiza hacia momentos altos la región de flujo anómalo en la función original (4.60) desaparecerá.

4.2.3 Resultados

En esta sección compararemos las distribuciones de tiempos de llegada Π_K (4.11) y $-dN/dt$ (4.49) para el estado¹¹ (4.62). También calcularemos la distribución que se obtiene en la teoría causal de Bohm [116], $\Pi_B = |J(0, t)|$.

Las figuras 4.5 y 4.6 muestran el flujo en $x = 0$ y $-dN(t)/dt$. Los dos flujos, con y sin potencial complejo, son indistinguibles en la escala de las figuras; durante el periodo de flujo anómalo, que se detalla en la figura 4.6, la región ocupada por el potencial *devuelve* norma al semiplano izquierdo $[-\infty, 0]$ con el ritmo exacto requerido para mantener el mismo flujo anómalo que el estado que evoluciona libremente. La figura 4.5 muestra un acuerdo global en la forma entre el flujo y el ritmo de absorción $-dN(t)/dt$, estando el segundo ligeramente retrasado.

En el régimen de flujo anómalo, la distribución operacional $-dN(t)/dt$ desplazada y $\Pi_K(t)$ muestran un acuerdo cualitativo, mientras que $\Pi_B(t)$ tiene un comportamiento diferente, con dos *cúspides* separadas por un máximo local. Estas distribuciones pueden interpretarse teniendo en cuenta que

- Π_B tiene en cuenta llegadas desde cualquier dirección.

¹¹ Se utilizó un valor de b lo suficientemente pequeño para que el efecto permanezca y lo suficientemente grande para que se alcance esencialmente absorción total (99.97%). El potencial absorbente se escogió con $L = 0.01$, 4 barreras cuadradas, y un rango de absorción optimizado entre $p_1 = 260$ y $p_2 = 740$.

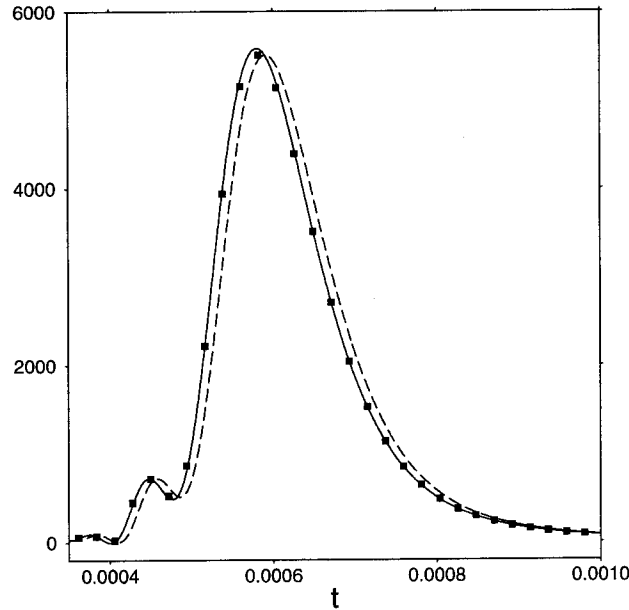


Figura 4.5: Línea continua: $J(0, t)$ para el movimiento libre, $J(0, t)$ con el absorbente, $\Pi_B(t)$ y $\Pi_K(t)$ (las cuatro curvas son indistinguibles en esta escala). Línea a trazos: $-dN/dt$ para el paquete de ondas ψ' en (4.62), véase también (4.61), con los siguiente parámetros (todos en unidades atómicas): $\alpha = 1.4$, $p_0 = 1$, $x_0 = -0.22$, $\delta = 0.007$, $b = 300$. Cuadrados: $-dN(t')/t'|_{t+\tau_D}$, $\tau_D = 1.0515 \times 10^{-5}$ au.

- Se puede argumentar que Π_K es sólo sensible a llegadas desde la izquierda, e ignora completamente las de la derecha (este aspecto se discutirá en la siguiente sección).
- De forma similar, el flujo hacia la izquierda resta norma que podría ser absorbida por el detector, luego su contribución a $-dN/dt$ consiste en un decrecimiento.

Como consecuencia, la comparación significativa de $-dN(t)/dt$ desplazada es con $\Pi_K(t)$ y en este caso el acuerdo es alentador. En la figura 4.6 hemos considerado dos desplazamientos diferentes: en un caso $-dN/dt$ está desplazado $-\tau_D$, pero $-\tau_D$ es sólo un retardo de absorción promedio y el retardo real podría fluctuar en torno a ese valor; para el otro caso, que corresponde a situar el mínimo de $-dN/dt$ en la misma posición que el de Π_K , existe un gran acuerdo entre las dos curvas. Aún así, el mínimo de la distribución operacional desplazada es menos pronunciado. La razón de este comportamiento puede ser el promedio implícito debido a la absorción en el detector en posiciones diferentes y con diferentes retardos de absorción, un resultado de la extensión finita e inhomogeneidad del absorbente.

4.2.4 Discusión

A lo largo de esta sección se ha investigado la posibilidad de la definición de una distribución de tiempo de llegada, tanto de la forma usual de la mecánica cuántica, basada en operadores,

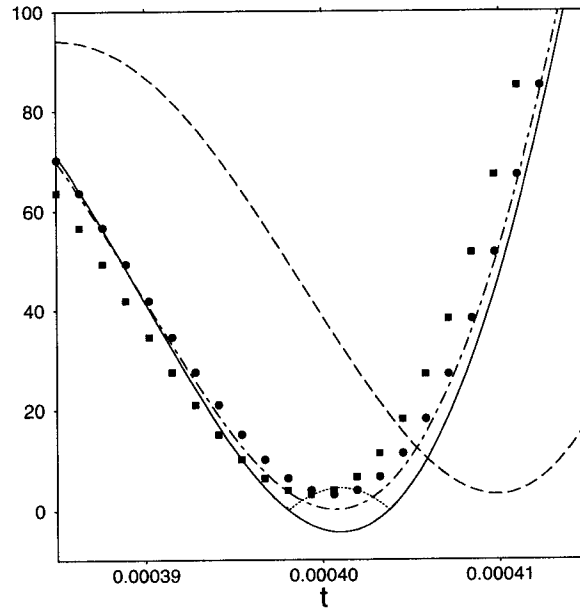


Figura 4.6: Línea sólida: $J(0,t)$ para el movimiento libre y $J(0,t)$ con el absorbente (las dos curvas son indistinguibles en esta escala). Línea punteada: $\Pi_B(t)$. Línea a trazos y puntos: $\Pi_K(t)$. Línea a trazos: $-dN/dt$. Cuadrados: $-dN(t')/t'|_{t+\tau_D}$. Círculos $-dN(t')/t'|_{t+\tau}$, $\tau = 9.200 \times 10^{-6}$ au. Se utilizan los mismos parámetros que en la figura 4.5.

como de forma operacional. Para el primer caso se mostró que la POVM y la distribución correspondiente $\Pi_K(T)$ asociada con el operador tiempo T_{AB} ofrece una respuesta bastante satisfactoria desde el punto de vista de las propiedades que cumple: covarianza con respecto a traslaciones temporales, varianza mínima, simetrías apropiadas, correcto dominio físico de aplicabilidad y un comportamiento espacio temporal *preciso* de las autofunciones normalizadas (4.39). El uso de la teoría de las POVM permite además superar la objeción de V. H. Paul sobre el dominio restrictivo¹² del operador T_{AB} (u otros operadores tiempo), que no incluye, por ejemplo, estados tales como una gaussiana de mínima incertidumbre. El punto importante es considerar la POVM¹³ o la distribución de tiempos de llegada, más que el operador en sí mismo, como los objetos importantes. De esta forma, el dominio de aplicabilidad de la teoría es \mathcal{H} , y el límite clásico es correcto. Además, bajo este punto de vista, el otro problema indicado por V. H. Paul, la sensibilidad extrema de los valores esperados de las potencial de T_{AB} a pequeñas perturbaciones, es sólo de importancia relativa. Es un hecho que algunas cantidades son extremadamente sensibles a determinadas perturbaciones pequeñas, y en este caso tratamos con una de estas cantidades. Además, los momentos en el caso clásico también sufren tal sensibilidad y no sería de esperar que esto no sucediera en el caso cuántico. La moraleja es que

¹²Este problema aparece también en las teorías basadas en operadores autoadjuntos.

¹³O de forma equivalente, la resolución de la identidad generalizada.

no se debe prestar demasiada atención a los momentos de la distribución de tiempos de llegada (muy inestables con respecto a pequeñas perturbaciones o cambios en la resolución del aparato, y posiblemente divergentes), sino a las características generales de la distribución, tales como picos, forma global o anchura a mitad de altura entre otras. Como consecuencia, el principio de incertidumbre en términos de $\langle T_{AB}^2 \rangle$ no es muy útil, ya que esta cantidad en general divergerá o, si no lo hace, sería muy inestable ante pequeñas perturbaciones. Es mejor expresar el principio de incertidumbre en términos de otras medidas de la anchura, tales como la anchura a mitad de altura.

Además de las características positivas de $\Pi_K(T)$, se deben señalar varios puntos que aún están poco claros y preguntas que permanecen sin respuesta. Por ejemplo, un análisis riguroso de la conexión entre $\Pi_K(T)$ y la medida experimental, especialmente en casos no clásicos, está aún pendiente [117].

Sin embargo se pueden adelantar algunas características importantes de una medida hipotética de $\Pi_K(T)$: La resolución de la unidad (4.7) implica la siguiente estructura para la distribución de tiempos de llegada:

$$\Pi(T) = |\langle T + |\psi_+\rangle|^2 + |\langle T - |\psi_-\rangle|^2, \quad (4.64)$$

donde $|\psi_{\pm}\rangle = \Theta(\pm P_{op})|\psi\rangle$. Esto implica que los términos de interferencia $|\psi_-\rangle\langle\psi_+|$ y $|\psi_+\rangle\langle\psi_-|$ son ignorados, y en un procedimiento operacional hipotético para medir $\Pi_K(T)$ sólo contribuirían los términos diagonales del operador densidad,

$$\rho \rightarrow |\psi_+\rangle\langle\psi_+| + |\psi_-\rangle\langle\psi_-| \quad (4.65)$$

Aparte de que la diagonalización puede ser problemática en la práctica, obviar las interferencias no es un hecho en principio deseable, ya que muchos estados cuánticos diferentes darían entonces la misma distribución.

Otro aspecto problemático está asociado con la interpretación de $|\langle T + |\psi_+\rangle|^2$ como la contribución a $\Pi_K(T)$ de partículas que llegan desde la izquierda y de $|\langle T - |\psi_-\rangle|^2$ como la contribución de partículas que llegan desde la derecha. Esto es particularmente evidente cuando existe flujo anómalo,

$$J \leq 0 \quad \text{para} \quad |\psi\rangle = |\psi_+\rangle, \quad (4.66)$$

$$J \geq 0 \quad \text{para} \quad |\psi\rangle = |\psi_-\rangle, \quad (4.67)$$

ya que $\Pi_K(T)$ le asigna probabilidad cero a las llegadas desde el lado *anómalo*, por ejemplo, desde la derecha cuando $|\psi\rangle = |\psi_+\rangle$, como en el caso estudiado en la sección anterior. Si $|\psi\rangle = |\psi_+\rangle$ o $|\psi\rangle = |\psi_-\rangle$, esto puede implicar una de las siguientes posibilidades:

- Las partículas o bien llegan por la izquierda o bien por la derecha, incluso durante el intervalo de tiempo cuando J tiene signo *incorrecto* (desde el punto de vista clásico).
- La teoría sería apropiada para los casos en que el detector fuera sensible a llegadas desde uno de los lados sólomente, e ignorara llegadas del lado (clásicamente) *anómalo*.

Si consideramos el caso general $|\psi\rangle = |\psi+\rangle + |\psi-\rangle$, una posibilidad indicaría que los términos de interferencia no contribuyen de hecho a la distribución *intrínseca* de tiempos de llegada mientras que en el otro caso la distribución (4.64) sería apropiada únicamente cuando el aparato mide el signo del momento de cada partícula incidente, colapsando la función de ondas de la partícula o bien a $|\psi+\rangle$ o bien a $|\psi-\rangle$, y activando entonces el *lado* apropiado de la detección.

Para el caso de la distribución operacional, se mostró que esta puede definirse clásicamente mediante el ritmo de absorción (4.49) del canal inicial debido al instrumento de detección. Examinando las consecuencias de tal procedimiento bajo condiciones ideales se mostró que diferentes propiedades clásicas de la *absorción perfecta* son incompatibles en mecánica cuántica. En el primer caso, una condición de frontera perfectamente absorbente para todas las partículas inicialmente a la izquierda de X implica:

- Reflexión nula para todos los momentos incidentes.
- Si la absorción es instantánea, el ritmo de absorción y el flujo se relacionan por

$$-dN(t)/dt = J(X, t) \geq 0. \quad (4.68)$$

Sin embargo, en mecánica cuántica la igualdad entre el ritmo de absorción, $-dN(t)/dt$, y el flujo, $J(X, t)$, no puede establecerse en general: si se impone (a), durante el régimen de flujo anómalo las dos cantidades toman signo diferente, ya que el detector debe *devolver* parte de la norma temporalmente si es perfecto en el sentido de (finalmente) absorber todas las partículas incidentes; si se impone (4.68) en el caso cuántico (sin componentes de momentos negativos), entonces el detector debería ser necesariamente imperfecto porque algunas de las partículas no serían detectadas.

4.3 Tiempos de tránsito

El concepto de tiempo de tránsito de una partícula de un punto a otro por una región del espacio, que podría estar ocupada por una barrera de potencial, es un problema que, como el tiempo de llegada, se ha abordado desde diferentes puntos de vista. Responder la pregunta ¿cuánto tarda la partícula en cruzar una región del espacio?, es decir, definir un tiempo de tránsito, ha sido y es un problema controvertido. Ya en los comienzos de la teoría cuántica L.

A. McColl [118] abordó el problema de la caracterización temporal de las *trazas* de partículas en condiciones en las que el efecto túnel es importante. Más recientemente, un artículo de M. Büttiker y R. Landauer [119] y el interés en el tema desde diversos campos, tan variados como física nuclear y molecular, cosmología y física de semiconductores, han disparado un debate sobre el concepto de tiempo de tránsito de una barrera en condiciones de efecto túnel [120].

El debate en el tiempo de tránsito es consecuencia esencialmente de que distintos autores imponen diferentes condicionantes y criterios que se añaden a la simple cuestión original, y que privilegian una cantidad cuántica respecto a las otras. Pero siempre que los condicionantes adicionales sean explícitos, para que pueda identificarse a qué versión de la pregunta original responden los tiempos definidos, no hay ningún conflicto fundamental entre las diferentes propuestas aparentemente irreconciliables. Así, parte del trabajo teórico en este campo se ha dedicado a desarrollar formalismos comprensivos que permitan clarificar y relacionar muchas de las posibles cantidades características [18,121]. Sin embargo, estos formalismos, aunque estructuralmente compactos, no siempre ofrecen una imagen sencilla del proceso de medida asociado con cada uno de los tiempos de tránsito intrínsecos que definen. Por ello, como complemento a una serie de estudios teóricos previos [18,19,35,122-124], examinaremos en esta sección una definición operacional del tiempo de tránsito. El dispositivo experimental en el que se basará la definición operacional se inspira en una receta clásica: para medir el tiempo de tránsito a través de una región espacial, se mide el tiempo de primera entrada t_1 y el de primera salida t_2 y se evalúa la diferencia $\tau = t_2 - t_1$ para cada partícula. En nuestro caso, la región espacial incluirá una barrera de potencial y sólo se considerarán las partículas que se detecten antes y después de la barrera. Si el experimento (ideal) se repite muchas veces, τ puede promediarse y se pueden estudiar sus propiedades estadísticas.

En una publicación previa, J. G. Muga, S. Brouard y R. Sala [122] propusieron un método con características similares: para la evolución de una partícula en una dimensión, definieron un instante de entrada promedio $\langle t \rangle_a^{\text{ent}}$ en a y un instante de salida promedio $\langle t \rangle_b^{\text{sal}}$ en b (a y b son puntos situados antes y después de la barrera respectivamente) en términos de las corrientes de densidad entrantes y salientes,

$$\langle t \rangle_a^{\text{ent}} = \frac{\int_0^{t_c} J(a) t dt}{\int_0^{t_c} J(a) dt}, \quad (4.69)$$

$$\langle t \rangle_b^{\text{sal}} = \frac{\int_0^{\infty} J(b) t dt}{\int_0^{\infty} J(b) dt}, \quad (4.70)$$

y un tiempo de tránsito, $\tau_T \equiv \langle t \rangle_b^{\text{sal}} - \langle t \rangle_a^{\text{ent}}$, dado por la diferencia entre los dos promedios. En estas expresiones J es la densidad de corriente, y se supone que a está lo suficientemente lejos de la barrera para que *todo* el paquete pase a la derecha de a antes de t_c , que es un instante

previo al paso por a del paquete reflejado. Aunque τ_T es, en principio, medible, tiene un claro inconveniente ya que no es el promedio de los tiempos de tránsito para partículas individuales, sino la diferencia entre dos promedios de diferente naturaleza. En términos clásicos, el instante de entrada promedio $\langle t \rangle^{\text{ent}}$ estará definido operacionalmente por el colectivo de partículas que llegan al primer detector, mientras que el tiempo de salida estará sólo definido para un pequeño subconjunto de éste, aquellas partículas que pasan la barrera y llegan al segundo detector. Esta definición puede proporcionar de hecho valores negativos de τ_T , tanto en el caso clásico como en el cuántico [123,125,126]. Por ejemplo, en el caso clásico, el promedio de tiempos de entrada podría ser dominado por trayectorias que son finalmente reflejadas, de forma que $\langle t \rangle^{\text{ent}}$ puede ser muy diferente de los tiempos de entrada típicos de las trayectorias que finalmente pasan la barrera. En este trabajo, esa inconsistencia con el límite clásico se supera restringiendo el promedio a aquellas partículas que son detectadas **antes y después** de la barrera.

En el modelo operacional que proponemos aparece un elemento adicional: el primer detector perturbará en mayor o menor medida el estado de la partícula incidente, pero no la aniquila. Aceptamos esta perturbación como un hecho inherente a la dinámica cuántica, y describiremos el efecto de diferentes detectores, prestando especial atención a aquellos que minimizan la perturbación de forma que se preserve la distribución de momentos del paquete incidente. El resultado obtenido con nuestro modelo no puede asignarse directamente a ninguna de las definiciones del tiempo *intrínseco* de tránsito. Sin embargo, es interesante comprobar en qué condiciones las características de las magnitudes intrínsecas se mantienen y en qué medida lo hacen.

A continuación describiremos un modelo matemático fenomenológico del experimento descrito anteriormente. Este modelo no especifica las características particulares de la detección, pero se inspira en las trazas de partículas que se producen en una cámara de burbujas o en placas fotográficas. Estas trazas o rastros están formados por un conjunto discreto de puntos macroscópicos (dos en nuestro caso), originados en el instante en el que el detector se dispara, y que consideraremos como eventos clásicos que resultan del paso o llegada de la partícula cuántica. El efecto del primer detector asociado a uno de esos puntos sobre la partícula detectada se simula de acuerdo con el modelo de formación de rastros propuesto por A. Jadczyk y Ph. Blanchard [127].

4.3.1 Descripción del modelo

En el modelo del experimento descrito analizaremos el tiempo de tránsito de una partícula con un grado de libertad traslacional (x) en una región del espacio ocupada en parte por una barrera cuadrada de potencial. El estado inicial de la partícula, de masa $m = 1$, vendrá dado por una función de ondas ψ , asociada a algún procedimiento de preparación. En particular,

utilizaremos como estado inicial a $t = 0$ un paquete gaussiano de mínima incertidumbre centrado en la posición $x = 20$, momento $p = 8$ y varianza espacial $9/4$. La barrera tiene una altura $V_0 = 50$, y se sitúa entre $x = 80$ y $x = 80 + d$. El paquete inicial evolucionará (de izquierda a derecha) hacia la región ocupada por la barrera de potencial. En términos operacionales, describe a un colectivo de partículas no interactuantes, representado simbólicamente por $\{E_0\}$, que se envía hacia la barrera de una en una con especificaciones idénticas.

Para completar el dispositivo experimental, se colocan dos detectores de partículas, A y B , a ambos lados de la barrera de potencial, en $x = a$ y $x = b$. El primero es un detector de paso que, aunque perturba el estado de la partícula, no la destruye. El segundo es un detector de llegada. El grado de libertad traslacional de la partícula es el único representado explícitamente. Utilizaremos como hipótesis simplificadora que sólo uno de los dos detectores funcione en un instante dado: cuando la partícula se envía hacia la barrera solo A está activo. La detección de la partícula en A desconecta este detector y activa el segundo, B .

Probabilidad de detección en A

Supondremos que la interacción entre la partícula y el primer detector puede describirse por una ecuación efectiva de Schrödinger

$$H\psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t) + [V(x) + \Lambda(x)]\psi(x, t), \quad (4.71)$$

donde $V(x)$ representa la barrera de potencial y $\Lambda(x)$ es un potencial complejo que simula el efecto del detector (por extensión, nos referiremos al potencial Λ como el *detector*),

$$\Lambda(x) = -\frac{i}{2} g^2(x; a), \quad (4.72)$$

con

$$g(x, a) = s e^{-(x-a)^2/2\sigma^2}. \quad (4.73)$$

Con esta definición $\Lambda(x)$ será un potencial imaginario negativo y por tanto absorbente. La *intensidad*, s , y *anchura*, σ , del detector son parámetros ajustables que corresponden a la altura en energías y al soporte espacial del potencial.

La norma del canal incidente,

$$N(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t)\psi(x, t) dx, \quad (4.74)$$

decrece desde un valor inicial $N(0) = 1$, debido a la presencia del detector. La absorción total $1 - N(\infty)$ será la *eficiencia* del mismo. La eficiencia no es necesariamente igual a uno, de forma que el colectivo de partículas detectadas en A , $\{E_a\}$, es generalmente más pequeño

que el colectivo de partículas incidentes, $\{E_0\}$. La densidad de probabilidad normalizada para disparar el detector a un tiempo t_a será proporcional a la variación en la absorción $-dN/dt|_{t_a}$. Si se normaliza con respecto al colectivo $\{E_a\}$, vendrá dada por

$$P(t_a|E_a) = \frac{dN(t_a)/dt_a}{\int_0^\infty dt dN(t)/dt} \quad (4.75)$$

Efecto de la detección en la función de ondas

El efecto de un detector real sobre la partícula debe determinarse mediante un análisis detallado de la interacción entre ambos. Sin embargo, en el espíritu del modelo fenomenológico simple, supondremos que después de cada detección por A , el estado de la partícula se puede representar de forma efectiva por una nueva función de ondas motivada físicamente. El colectivo de partículas detectadas puede entonces describirse con una mezcla estadística de tales estados. Esto recuerda al postulado de proyección de Von Neumann. Sin embargo, una característica importante en la detección de trazas, por ejemplo en una cámara de burbujas, es que el camino seguido por las partículas no parece aleatorio, sino más bien determinado por el momento incidente dominante. Este fenómeno no puede explicarse utilizando únicamente el postulado de proyección habitual en mecánica cuántica, ya que en ese caso la posición de las partículas después de la detección quedaría completamente determinada y el estado correspondiente sería uno de los estados propios de la posición. Estos tienen igual probabilidad de expandirse en cualquier dirección, borrando por tanto la memoria sobre el estado previo a la medida. En el caso de la cámara de burbujas, esto significaría que no habría tendencia a ionizar átomos en la dirección del momento dominante [128], al contrario de lo que realmente se observa. A. Jadczyk y Ph. Blanchard [127], desde premisas fenomenológicas, proponen un postulado de proyección modificado que permite describir la formación de trazas. En su propuesta la función de ondas inmediatamente después de una detección en el instante t_a , y consistente con la formación de trazas, guarda memoria del estado previo y además refleja las propiedades del detector. Para el potencial de interacción (4.72), una expresión simple que satisface esas dos condiciones es [127]

$$\psi_{t_a}(x) = \frac{g(x)\psi(x, t_a)}{[\int_{-\infty}^{\infty} g^2(x)|\psi(x, t_a)|^2 dx]^{1/2}}, \quad (4.76)$$

donde $\psi(x, t_a)$ es la función de ondas que evoluciona con la ecuación de Schrödinger (4.71).

El efecto del detector sobre la función de ondas incidentes se puede determinar comparando el promedio del momento y la varianza para los colectivos $\{E_0\}$ y $\{E_a\}$. Promediar sobre $\{E_a\}$ exige tener cierto cuidado ya que implica un doble promedio: el primero, representado como Q , es un promedio mecanocuántico usando cada paquete de ondas ψ_{t_a} ; el segundo (D) es un

promedio sobre los tiempos de detección t_a “pesados” por $P(t_a|E_a)$,

$$\langle p \rangle_{E_a} = DQp \equiv \int P(t_a|E_a) \langle \psi_{t_a} | P_{op} | \psi_{t_a} \rangle dt_a. \quad (4.77)$$

Debido al doble promedio son posibles diferentes *varianzas* [129]. Para el colectivo $\{E_a\}$ la varianza importante es $\Delta_{DQ}^2 \equiv DQ[p^2 - (DQp)^2]$, que es una varianza calculada sobre las partículas detectadas sin importar el instante de la detección [129]. Se puede comprobar que el momento promedio se conserva bien, especialmente para detectores *débiles* (s pequeños), exceptuando el caso de detectores muy estrechos. Para todos los detectores utilizados en este trabajo $DQp \approx \langle p \rangle_{E_0}$ (la diferencia es menor que el 0.2%). Sin embargo, la anchura en momentos, Δ_{DQ} , definida como la raíz cuadrada de la varianza, puede cambiar drásticamente respecto a la anchura en momentos Δ_p del paquete original. La figura 4.7 muestra que detectores anchos tienden a mantener la varianza del estado original mientras que detectores estrechos dan lugar a varianzas muy grandes.

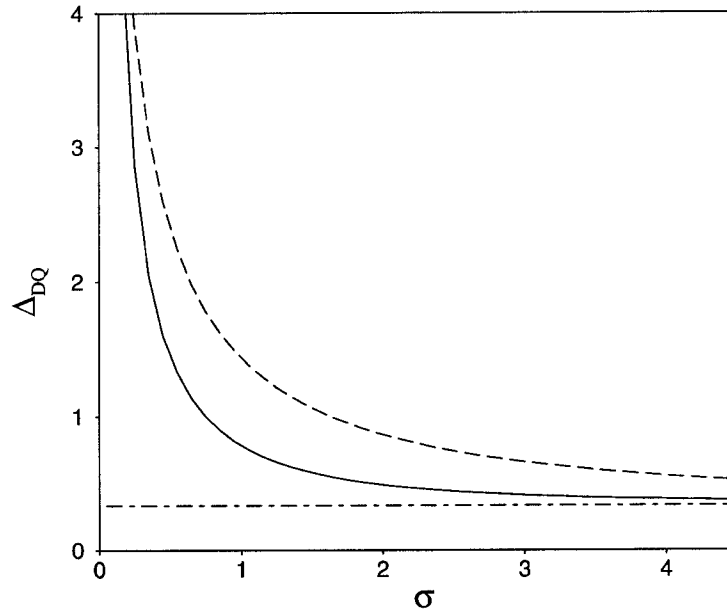


Figura 4.7: Raíz cuadrada de la varianza en momentos después de la detección, Δ_{DQ} , para $s = 1$ (línea continua) y $s = 10$ (línea a trazos). La línea a trazos y puntos es el valor de referencia de la varianza en momentos del colectivo original E_0 .

Además los detectores débiles (s pequeño) conservan mejor la varianza que los detectores fuertes (s grande). En resumen, en el modelo, detectores débiles y anchos son los que mejor conservan la distribución de momentos del paquete original. En cambio, son poco eficientes: para $s = 1$ la norma absorbida va desde 0.05 a 0.6 en el intervalo de σ de la figura 4.7. En comparación, prácticamente toda la norma es absorbida para $s = 10$.

Descripción del segundo detector

Supondremos que el segundo detector es un *detector perfecto* del tipo descrito en [19], de forma que todas las partículas transmitidas sean finalmente detectadas. Este detector lo situaremos en el extremo derecho de la barrera ($x = 80 + d$). Si $\{E_b\}$ es el colectivo de partículas que se detectan por A y B en los instantes t_a y t_b , y $P(E_b|t_a)$ es la transmitancia de ψ_{t_a} , (es decir, la fracción de la norma de ψ_{t_a} que será transmitida y, por tanto, detectada en B [16]), la probabilidad de que la partícula sea detectada en B condicionada a haber sido detectada en A será

$$P(E_b|E_a) = \int P(E_b|t_a)P(t_a|E_a) dt_a. \quad (4.78)$$

En vez de usar una expresión similar a (4.75), la distribución de tiempos de llegada t_b para un absorbente perfecto puede aproximarse por el flujo (normalizado) *sin* absorbente¹⁴ [19]. Para un paquete $\psi_{t_a}(x; t_a)$, la densidad de probabilidad de detección en B a tiempo t_b , condicionada a la detección previa en A a t_a , restringida al colectivo $\{E_b\}$, viene dada por

$$P(t_b|E_b, t_a) = \frac{J_{t_a}(b, t_b)}{\int J_{t_a}(b, t_b) dt_b}, \quad (4.79)$$

donde J_{t_a} es el flujo para el estado ψ_{t_a} . Utilizando la regla de Bayes, la densidad de probabilidad conjunta para la detección en A a t_a y en B a t_b restringida al colectivo $\{E_b\}$ será

$$P(t_b, t_a|E_b) = \frac{P(t_b|E_b, t_a)P(E_b|t_a)P(t_a|E_a)}{\int P(E_b|t_a)P(t_a|E_a) dt_a}. \quad (4.80)$$

Finalmente, la distribución de probabilidad de $\tau \equiv t_b - t_a$ se calcula, para el colectivo $\{E_b\}$, integrando sobre t_b y t_a con la función delta de Dirac $\delta(t_b - t_a - \tau)$,

$$P(\tau|E_b) = \frac{\int P(t_a + \tau|E_b, t_a)P(E_b|t_a)P(t_a|E_a) dt_a}{\int P(E_b|t_a)P(t_a|E_a) dt_a}. \quad (4.81)$$

4.3.2 Resultados

Para ilustrar el modelo descrito, calculamos tiempos de tránsito promedio

$$\tau_j \equiv \langle \tau \rangle_{E_b} \equiv \int P(\tau|E_b)\tau d\tau, \quad (4.82)$$

para diferentes anchuras d de la barrera y para dos detectores débiles ($s = 1$) diferentes, A_j ($j = 1, 2$), situados en $x = a$: A_1 , que es un detector ancho que conserva bien la distribución de momentos de $\{E_0\}$ y A_2 , que es un detector estrecho, y por tanto produce una varianza

¹⁴Se está considerando que en la región asintótica de la derecha de la barrera no se produce ningún efecto como el del flujo anómalo, o que en su caso, éste sería lo suficientemente pequeño para no perturbar apreciablemente la distribución de tiempos de llegada.

en momentos que es aproximadamente diez veces mayor que la inicial. El cálculo se realizó mediante la propagación numérica del paquete de ondas inicial con el potencial absorbente y la barrera, y la propagación de las funciones detectadas (4.76) en ausencia de potencial absorbente, lo que permite construir la distribución¹⁵ (4.81) y calcular finalmente τ_j . El detector previo a la barrera se situó en los cálculos lejos de ésta ($a = 50$) para poder comparar con el resultado que se obtiene mediante el método de la referencia [122], τ_T , descrito anteriormente. Con esta elección, el paquete inicial pasará por a antes de interactuar significativamente con la barrera. El segundo detector, B , se sitúa en el borde derecho de la barrera. Denominaremos τ_1 y τ_2 los promedios correspondientes al uso de los dos detectores iniciales, A_1 y A_2 . En la figura 4.8 se muestran los resultados para el tiempo de tránsito correspondiente a condiciones en las que, sin la perturbación del primer detector, dominaría el efecto túnel.

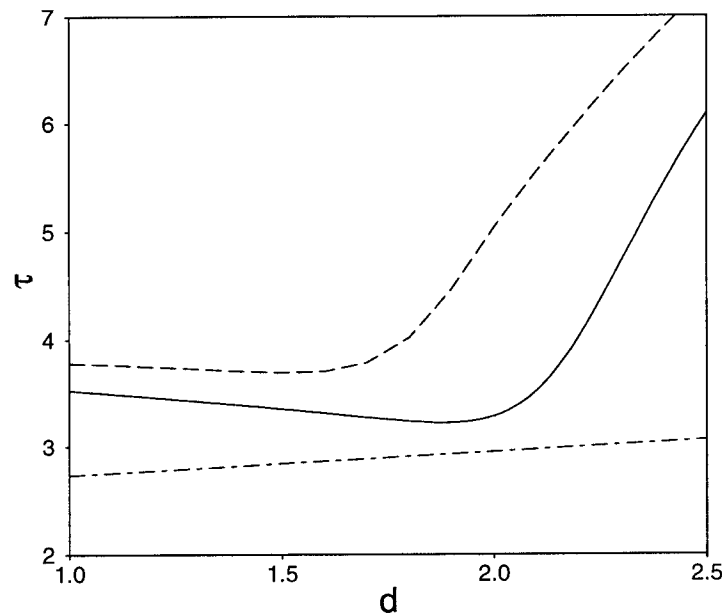


Figura 4.8: Tiempos promedio de tránsito frente a la anchura d evaluados para $s = 1$ y $\sigma = 4.5$ (línea a trazos); $s = 1$ y $\sigma = 0.2$ (línea a trazos y puntos). También se representa el tiempo promedio τ_T (línea sólida).

En particular se observa que el efecto Hartman, es decir, el hecho que el tiempo de tránsito promedio no aumente con d (realmente decrece suavemente) [123] se mantiene cuando se usa el detector A_1 hasta un valor crítico de la anchura de la barrera, d_c , a partir del cual domina el tránsito clásico debido a momentos por encima de la barrera [18,124]. Cuando se usa el detector estrecho, A_2 , la varianza en momentos es tan grande que la transmisión es siempre dominada

¹⁵El procedimiento es equivalente al que se derivaría de la teoría fenomenológica EEQT [127] para el estudio de este sistema. Sin embargo conviene señalar que no hay nada *no convencional* en el método que hemos descrito, salvo el efecto del detector sobre la partícula.

por los momentos rápidos por encima de la barrera. El dominio de los momentos por encima de la barrera hace que el comportamiento que se encuentra sea el esperado clásicamente, es decir, un crecimiento lineal de τ_2 con d . La figura 4.8 también muestra τ_T , que es cualitativamente similar a τ_1 . La relación $\tau_T < \tau_1$ se debe a las dos formas diferentes de promediar realizadas en el primer detector y puede entenderse con argumentos clásicos: el frente derecho del paquete incidente está dominado por los momentos más rápidos y contribuye con más partículas al colectivo transmitido. Mientras, en el cálculo de τ_T , no se hace ninguna distinción en a entre las partículas que son o no transmitidas. En ese caso el efecto crece con d hasta que se satura cuando la transmisión se debe sólo a momentos por encima de la barrera. También es importante señalar que aunque en determinados casos τ_T podría ser negativo, los tiempos definidos en este trabajo, por construcción, son siempre estrictamente positivos. Por último, el desplazamiento de la curva de τ_1 con respecto a la de τ_T , que se observa por ejemplo en el valor de la anchura crítica d_c , se debe a la pequeña perturbación del detector A_1 que modifica ligeramente la varianza de momentos.

Discusión y conclusiones

En esta Tesis hemos investigado diversos aspectos de los potenciales complejos en colisiones cuánticas unidimensionales. Resumiremos las principales contribuciones:

- Hemos construido una teoría formal de colisiones para potenciales complejos en una dimensión. No existía un estudio unificado tan extenso, y sistemático como el presentado aquí. Se han demostrado relaciones novedosas, tales como expresiones compactas para la dependencia temporal de paquetes de onda, o el teorema de Levinson.
- Se ha elaborado el único modelo analítico conocido capaz de describir colisiones resonantes dependientes del tiempo con potencial complejo o real. Se han puesto de manifiesto varios efectos interesantes debidos a la interacción compleja: la asimetría de los tiempos de retardo de transmisión y reflexión, y la posibilidad de encontrar tiempos de retardo negativos.
- Se han propuesto nuevas formas funcionales de potenciales complejos y métodos de optimización que han permitido mejorar sustancialmente los intervalos y capacidad de absorción con respecto a los potenciales usados habitualmente en aplicaciones numéricas. Mientras que los tratamientos tradicionales usaban argumentos semiclásicos la idea central de nuestras propuestas es el uso de las interferencias cuánticas debidas a “colisiones múltiples” en barreras de potencial compuestas por varias unidades. Se ha efectuado un estudio comparativo exhaustivo de la efectividad de absorción y de la robustez ante la discretización numérica de los potenciales existentes que permite seleccionar la forma funcional idónea para cada aplicación.
- Por último, hemos elaborado modelos operacionales para el tiempo de llegada y el tiempo de tránsito mediante un tratamiento fenomenológico de los detectores con potenciales complejos. Hemos demostrado que las condiciones de frontera absorbentes en mecánica cuántica son sustancialmente diferentes a las clásicas (la frontera absorbente cuántica devuelve norma en condiciones de “flujo anómalo”); también se ha clarificado en qué

condiciones una medida con dos detectores, antes y después de una barrera de potencial, es compatible con el efecto Hartman, que predice tiempos de tránsito extremadamente cortos independientemente de la anchura de la barrera. Se han estudiado además las propiedades del operador para el tiempo de llegada (intrínseco) de Aharonov-Bohm, de su resolución espectral generalizada y de sus cuasi-estados propios, lo que nos ha permitido establecer la superioridad de esta teoría con respecto a otras propuestas. La distribución intrínseca de tiempos de llegada se ha comparado con la operacional, encontrándose un acuerdo esencial entre ambas.

Quedan por supuesto muchas cuestiones abiertas. Señalaremos algunas en las que pretendemos seguir trabajando

- La teoría formal de colisiones complejas debe completarse con estudios que establezcan con rigor matemático propiedades tales como la completitud asintótica. Se sabe muy poco, también desde un punto de vista matemático, del “problema inverso” en el caso de potenciales complejos, es decir de la obtención sistemática de potenciales que reproduzcan determinadas amplitudes de colisión. Los avances en este terreno tendrían importantes repercusiones prácticas.
- Los potenciales absorbentes del capítulo 3 han de aplicarse y/o adaptarse a reacciones concretas y a diversos métodos numéricos.
- Debe continuarse la investigación sobre la incorporación del tiempo al formalismo cuántico. En este terreno, y en particular en conexión con los modelos de detectores, queda mucho por hacer. Los modelos existentes son, o bien fenomenológicos, o bien caricaturas burdas de procesos reales de detección. Los modelos más complejos existentes, que incorporan la irreversibilidad del proceso mediante ecuaciones cuánticas maestras, son todavía demasiado simples para conectar con medidas concretas. Sería interesante construir modelos más elaborados y poder analizar experimentos reales de detección.

Apéndice

Apéndice A

Producto de las autofunciones de colisión

La relación (1.122) es válida sólo para potenciales locales. Para potenciales no locales aparece un término adicional, $A(x)$,

$$u_{j+}(x)\hat{u}_{j+}^*(x) = \frac{\hbar^2}{2p} \frac{\partial}{\partial x} f_j(x) - A(x), \quad (\text{A.1})$$

donde $f_j(x)$ es de nuevo (1.123) y

$$\begin{aligned} A(x) &= A_1(x) + A_2(x), \\ A_1(x) &= \frac{\partial^2}{\partial x^2} \hat{u}_{j+}^*(x) \frac{\partial}{\partial p} u_{j+}(x), \\ A_2(x) &= \hat{u}_{j+}^*(x) \left(\frac{-2m}{\hbar^2} \frac{\partial}{\partial p} \langle x|V|u_{j+} \rangle + \frac{p^2}{\hbar^2} \frac{\partial}{\partial p} u_{j+}(x) \right). \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Se puede mostrar que si el potencial verifica la condición (1.111) la integral en x entre dos puntos ($-r$ y r) del término $A(x)$ es nula. Para ello basta comprobar que la integral de $A_2(x)$ es menos la integral de $A_1(x)$. Utilizando una relación de cierre en posiciones,

$$\int_{-r}^r dx A_2(x) = \int_{-r}^r dx \int_{-\infty}^{\infty} dx' \langle \hat{u}_{j+}|x \rangle \left(\frac{-2m}{\hbar^2} \frac{\partial}{\partial p} \langle x|V|x' \rangle \langle x'|u_{j+} \rangle + \frac{p^2}{\hbar^2} \frac{\partial}{\partial p} \langle x|u_{j+} \rangle \right). \quad (\text{A.3})$$

Las propiedades del potencial (1.111) permiten intercambiar los límites de integración entre x y x' , y realizar la integración en x del primer sumando del integrando. Mediante el cambio de variable $x' = x$, se obtiene el resultado

$$\int_{-r}^r dx A_2(x) = \int_{-r}^r dx \left(\frac{-2m}{\hbar^2} \langle \hat{u}_{j+}|V|x \rangle + \frac{p^2}{\hbar^2} \langle \hat{u}_{j+}|x' \rangle \right) \frac{\partial}{\partial p} \langle x|u_{j+} \rangle. \quad (\text{A.4})$$

El término entre paréntesis del integrando es simplemente $-\frac{\partial^2}{\partial x^2} \hat{u}_{j+}^*(x)$, de donde se sigue inmediatamente que

$$\int_{-r}^r dx A_2(x) = - \int_{-r}^r dx A_1(x). \quad (\text{A.5})$$

Apéndice B

Potencial compuesto optimizado

Los parámetros de los potenciales optimizados de la figura 3.10 son los siguientes:

$V_{QR,I}$	$\eta_{QR} = (0.61419 \times 10^2, 0)$
$V_{QR,P}$	$\eta_{QR} = (0.11182 \times 10^3, 0)$
$V_{QC,I}$	$\eta_{QC} = (0.74360 \times 10^2, -0.52910 \times 10^2)$
$V_{QC,P}$	$\eta_{QC} = (0.15113 \times 10^3, -0.75050 \times 10^2)$
$V_{BMM,I}^{(2)}$	$a_0 = (1, 0)$ $a_1 = (0, 5)$ $a_2 = -a_0 - a_1 - a_3 - a_4$ $a_3 = (0.29166 \times 10^2, -0.10395 \times 10^2)$ $a_4 = (-0.12891 \times 10^2, 0.10522 \times 10^2)$
$V_{BMM,P}^{(2)}$	$a_0 = (1, 0)$ $a_1 = (0, 5)$ $a_2 = -3a_0 - 2a_1 + a_4 + 2a_5 + 3a_6 + 4a_7$ $a_3 = 2a_0 + a_1 - 2a_4 - 3a_5 - 4a_6 - 5a_7$ $a_4 = (0.23264 \times 10^4, 0.24091 \times 10^4)$ $a_5 = (-0.40929 \times 10^4, -0.37388 \times 10^4)$ $a_6 = (0.32269 \times 10^4, 0.27900 \times 10^4)$ $a_7 = (-0.94918 \times 10^3, -0.80405 \times 10^3)$
$V_{SB,I}(N = 5)$	$V_1 = (-0.26953 \times 10^4, 0.73126 \times 10^3)$ $V_2 = (-0.49506 \times 10^4, -0.66007 \times 10^2)$ $V_3 = (-0.89834 \times 10^4, -0.24970 \times 10^4)$ $V_4 = (-0.65683 \times 10^4, 0.43720 \times 10^3)$ $V_5 = (-0.15653 \times 10^4, 0.67373 \times 10^3)$
$V_{SB,P}(N = 5)$	$V_1 = (-0.32005 \times 10^5, 0.19649 \times 10^4)$ $V_2 = (-0.10844 \times 10^6, -0.18877 \times 10^4)$ $V_3 = (-0.32519 \times 10^4, -0.33460 \times 10^3)$ $V_4 = (-0.37319 \times 10^4, -0.29552 \times 10^4)$ $V_5 = (-0.48302 \times 10^3, -0.28221 \times 10^4)$

Apéndice C

Comportamiento asintótico de $\Pi(T)$.

Consideremos el comportamiento de $\langle T + |\psi\rangle$,

$$\langle T + |\psi\rangle = \frac{1}{(m\hbar)^{1/2}} \int_0^\infty p^{1/2} e^{-ip^2 T/(2m\hbar)} \langle p|\psi\rangle dp, \quad (\text{C.1})$$

para valores grandes de T . Suponiendo que $\langle p|\psi\rangle$ puede continuarse analíticamente en el cuarto cuadrante del plano complejo p , deformaremos la integral de contorno a lo largo del rayo $p = \gamma e^{-i\pi/4}$, ($0 \leq \gamma < \infty$). Con el cambio $g = \gamma^2/(2m\hbar)$ la integral toma la forma

$$\langle T + |\psi\rangle = \frac{(m\hbar)^{1/4}}{2\pi^{3/4}} e^{-i\pi 3/8} \int_0^\infty dg e^{-gt} \psi(g) g^{1/4}, \quad (\text{C.2})$$

donde el origen aparece como el único punto crítico. Si, cuando $g \rightarrow 0$, $\psi(g) \sim cg^u$ (donde u es no necesariamente un entero), el lema de Watson [42] proporciona el término dominante,

$$\langle T + |\psi\rangle \sim e^{-i\pi 3/8} \frac{c(m\hbar)^{1/4}}{2\pi^{3/4}} \frac{\Gamma(u + 5/4)}{T^{u+5/4}}. \quad (\text{C.3})$$

Apéndice D

Representación de los estados GRT

La integral sobre p para la representación de coordenadas $\langle x|T+\rangle_\varepsilon$ puede separarse en dos partes, desde 0 hasta ε , I_1 , y desde ε hasta ∞ , I_2 . La segunda se puede obtener numéricamente deformando el contorno y utilizando el camino de máxima pendiente de descenso desde el punto de silla. I_1 puede expresarse como

$$I_1 = \frac{\varepsilon^{1-iT\varepsilon^2/(m\hbar)}}{hm^{1/2}} \int_0^\varepsilon e^{ixp/\hbar} p^{\left(\frac{iT\varepsilon^2}{m\hbar} - \frac{1}{2}\right)} dp. \quad (\text{D.1})$$

con el cambio de variable $u = -ixp/\hbar$ se reconoce la función *gamma incompleta*,

$$I_1 = \frac{\varepsilon^{3/2}}{hm^{1/2}} \left(\frac{x\varepsilon}{i\hbar}\right)^{-A} \gamma(A, -ix\varepsilon/\hbar) \quad (\text{D.2})$$

$$= \frac{\varepsilon^{3/2}}{hm^{1/2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(ix\varepsilon/\hbar)^n}{n!(A+n)}, \quad (\text{D.3})$$

donde $A = iT\varepsilon^2/(m\hbar) + 1/2$.

Apéndice E

Estados del tiempo de llegada “precisos”

En este apéndice discutiremos sobre la existencia de estados cuánticos en los que la partícula esté estrictamente a un lado de X antes del instante T y en el otro después de ese instante. En el capítulo 4 se muestra que ninguna de las representaciones de coordenadas de las autofunciones de los diferentes operadores tiempo estudiados ($|T+\rangle, |T_\epsilon\rangle, |T\rangle$) cumple estrictamente esa exigencia. Argumentaremos a continuación que no hay ningún estado cuántico, ni puro ni mezclado, que satisfaga completamente esa condición. Para ese fin usaremos el formalismo del espacio de fases de Weyl-Wigner (equivalente a la mecánica cuántica ordinaria). Su ventaja consiste en que el núcleo de evolución y la ecuación dinámica de movimiento son iguales en mecánica clásica y cuántica para el movimiento libre [130]. Además, es posible aplicar un teorema de Liouville, de forma que cada punto del espacio de fases tiene su propio *peso probabilístico* (que puede ser negativo en el caso cuántico), de forma que en cálculos intermedios se puede pensar y operar clásicamente. (Las diferencias se establecen en el dominio de estados permitidos en cada una de las mecánicas y en la interpretación del formalismo [130,131].) La distribución de Wigner $f(q,p)$ en el espacio de fases posición-momento representa un estado mecano-cuántico correcto si el operador densidad asociado ρ es positivo, véase por ejemplo [132,133]. Dos condiciones necesarias para que esto ocurra son [134]

$$|f(q,p)| \leq (2/h), \quad (\text{E.1})$$

$$h \int f(q,p) dq dp \leq 1. \quad (\text{E.2})$$

La pregunta que se plantea ahora es qué colectivo clásico describe partículas con posiciones negativas en el instante $t = 0$ que llegan a $X = 0$ en el instante T . Como el momento se conserva, es necesario un movimiento coordinado en el que las partículas más rápidas comiencen

a moverse más lejos, y las más lentas partan de puntos más próximos a $X = 0$, de forma que todas lleguen al mismo tiempo. La densidad del espacio de fases que cumple esos requisitos será

$$f_T(x_0, p; t = 0) = g(x_0)\Theta(-x_0)\delta(x_0 + pT/m), \quad (\text{E.3})$$

con $g(x_0) \geq 0$. Pero esta distribución es demasiado singular para satisfacer las condiciones (E.1) o (E.2).

Publicaciones

- J. G. Muga, S. Brouard, V. Delgado y J. P. Palao, "Characteristic times in scattering theory", *Proceedings of the Conference "Tunnelling and its Implications"*, Trieste, Agosto de 1996 (World Scientific, New York, 1997).
- J. P. Palao, J. G. Muga, S. Brouard y A. Jadczyk, "Barrier traversal times using a phenomenological track formation model", *Phys. Lett. A* **233**, 227 (1997).
- R. Sala, J. P. Palao y J. G. Muga, "Phase space formalisms of quantum mechanics with singular Kernel", *Phys. Lett. A* **231**, 304 (1997).
- J. G. Muga, J. P. Palao y R. Sala, "Average local values and local variances in quantum mechanics", *Phys. Lett. A* **238**, 90 (1998).
- J. G. Muga, J. P. Palao, R. Sala y S. Brouard, "The time of arrival concept in quantum mechanics", *Superlattices and Microstructures* **23**, 833 (1998).
- J. P. Palao, J. G. Muga y R. Sala, "Composite absorbing potentials", *Phys. Rev. Lett.* **80**, 5469 (1998).
- J. P. Palao y J. G. Muga, "A simple construction procedure of absorbing potentials", *Chem. Phys. Lett.* **292**, 1 (1998).
- J. P. Palao y J. G. Muga, "Comparison of complex potentials: absorption width and robustness", *J. Phys. Chem.* **102**, 9464 (1998).
- J. G. Muga y J. P. Palao, "Solvable model for quantum wave packet scattering", *J. Phys. A: Math. Gen.* **31**, 9519 (1998).
- J. G. Muga, C. R. Leavens y J. P. Palao, "Space-time properties of free motion time-of-arrival eigenstates", *Phys. Rev. A* **58**, 4336 (1998).
- J. G. Muga y J. P. Palao, "Negative time delays in one dimensional absorptive collision", *Ann. Phys. (Leipzig)* **7**, 671 (1998).

- J. G. Muga, J. P. Palao y C. R. Leavens, "Arrival time distributions and perfect absorption in classical and quantum mechanics", *Phys. Lett. A* **253**, 21 (1999).

Bibliografía

Referencias

1. H. Feshbach, *Ann. Phys. (NY)* **5**, 357 (1958); *Ann. Phys. (NY)* **19**, 287 (1962).
2. H. Feshbach, *Ann. Phys. (NY)* **164**, 398 (1985).
3. P. Exner, "Open quantum systems and Feynman Integrals", (D. Reidel Publishing Company, Dordrecht, Holland, 1985).
4. J. R. Taylor, "Scattering Theory", (Wiley, New York 1972).
5. J. G. Muga, *Rev. Acad. Canar. Cienc.* **VIII**, 9 (1996).
6. L. Fonda, G. C. Ghirardi, T. Weber, y A. Rimini, *J. Math. Phys.* **7**, 1643 (1966).
7. J. Wong, *J. Math. Phys.* **8**, 2039 (1967).
8. A. N. Kamal, *Am. J. Phys.* **21**, 493 (1984).
9. S. Joffly, *Nucl. Phys. A* **215**, 301 (1973).
10. L. P. Kok y H. van Haeringen, *Ann. Phys. (NY)* **131**, 426 (1981).
11. W. Cassing, M. Stingl y A. Weiguny, *Phys. Rev. C* **26**, 22 (1982).
12. R. G. Newton, *J. Math. Phys.* **21**, 493 (1980).
13. T. Aktosun, M. Klaus y C. van der Mee, *J. Math. Phys.* **39**, 1957 (1998).
14. M. Sassoli de Bianchi, *J. Math. Phys.* **35**, 2719 (1994).
15. S. H. Dong, Z. Q. Ma y M. Klaus, [quant-ph/ 9903016](#).
16. J. G. Muga, S. Brouard y R. F. Snider, *Phys. Rev. A* **46**, 6075 (1992).
17. F. T. Smith, *Phys. Rev.* **118**, 349 (1960).
18. S. Brouard, R. Sala y J. G. Muga, *Phys. Rev. A* **49**, 4312 (1994).

19. J. G. Muga, S. Brouard y D. Macías, *Ann. Phys. (N.Y.)* **240**, 351 (1995).
20. J. G. Muga y J. P. Palao, *J. Phys. A: Math. Gen.* **31**, 9519 (1998).
21. J. G. Muga y J. P. Palao, *Ann. Phys. (Leipzig)* **7**, 671 (1998).
22. R. F. Snider, *J. Chem. Phys.* **88**, 6438 (1988).
23. A. D. Hammerich, J. G. Muga y R. Kosloff, *Isr. J. Chem.* **29**, 461 (1989).
24. J. G. Muga y R. F. Snider, *Can. J. Phys.* **68**, 394 (1990).
25. J. G. Muga y R. F. Snider, *Can. J. Phys.* **68**, 403 (1990).
26. R. F. Snider y J. G. Muga, *Can. J. Phys.* **72**, 152 (1993).
27. J. G. Muga, V. Delgado y R. F. Snider, *Phys. Rev. B* **52**, 16381 (1995).
28. J. G. Muga, G. W. Wei y R. F. Snider, *Europhys. Lett.* **35**, 247 (1996).
29. J. G. Muga, G. W. Wei y R. F. Snider, *Ann. Phys. (NY)* **252**, 336 (1996).
30. G. C. Ghirardi y A. Rimini, *J. Math. Phys.* **5**, 722 (1964).
31. W. van Dijk y K. A. Kiers, *Am. J. Phys.* **60**, 520 (1991).
32. W. Elberfeld y M. Kleber, *Am. J. Phys.* **56**, 154 (1988).
33. J. G. Muga y S. Brouard, *Phys. Rev. A* **46**, 6075 (1992).
34. M. Abramowitz y I. A. Stegun, "Handbook of Mathematical Functions", (Dover, New York, 1972).
35. S. Brouard y J. G. Muga, *Phys. Rev. A* **54**, 3055 (1996).
36. C. L. Hammer, T. A. Weber y V. S. Zidell, *Am. J. Phys.* **45**, 933 (1977).
37. L. Fonda y G. C. Ghirardi, *Nuovo Cimento A* **67**, 257 (1970); L. Fonda, G. C. Ghirardi y A. Rimini, *Rep. Prog. Phys.* **41** 587 (1978); B. Misra y E. C. G. Sudarshan, *J. Math. Phys.* **18**, 756 (1977).
38. J. A. Stovneng y E. H. Hauge, *Phys. Rev. B* **44**, 13582 (1991).
39. D. B. Walker, E. N. Glytsis y T. K. Gaylord, *J. Appl. Phys.* **75**, 5415 (1994).
40. M. H. Bramhall y B. M. Casper, *Am. J. Phys.* **38**, 1136 (1970).

41. A. Edgar, *Am. J. Phys.* **63**, 136 (1995).
42. N. Bleistein y R. A. Handelsman, "Asymptotic Expansions of Integrals", (Dover, New York, 1986).
43. R. M. Cavalcanti, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 4353 (1998).
44. G. García Calderón, J. L. Mateos y M. Moshinsky, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 337 (1995); *Ann. Phys.* **249**, 430 (1996); *Phys. Rev. Lett.* **80** 4354 (1998).
45. J. P. Palao y J. G. Muga, *Chem. Phys. Lett.* **292**, 1 (1998).
46. J. P. Palao, J. G. Muga y R. Sala, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 5469 (1998).
47. J. P. Palao y J.G. Muga, *J. Phys. Chem. A* **102**, 9464 (1998).
48. R. Kosloff, *J. Phys. Chem.* **92**, 2087 (1988).
49. N. Balakrishnan, C. Kalyanaraman y N. Sathyamurthy, *Phys. Rep.* **280**, 79 (1997).
50. D. Brown y J. C. Light, *J. Chem. Phys.* **97**, 5465 (1992).
51. A. Goldberg y B. Shore, *J. Phys. B* **11**, 3339 (1978); C. Leforestier y R. Wyatt, *J. Chem. Phys.* **78**, 2334 (1983).
52. M. Monnerville, P. Halvick y J. C. Rayez, *Chem. Phys.* **159**, 227 (1992).
53. H. Tal-Ezer y R. Kosloff, *J. Chem. Phys.* **81**, 3967 (1984).
54. M. D. Fleit, J. Fleck y A. Steiger, *J. Comput. Phys.* **47**, 412 (1982).
55. M. Monnerville, P. Halvick y J. C. Rayez, *J. Chem. Soc. Faraday Trans.* **89**, 1573 (1993).
56. G. G. Balint-Kurti, F. Gögtas, S. P. Mort, A. R. Offer, A. Lagana, y O. Gervasi, *J. Chem. Phys.* **99**, 9567 (1993).
57. D. Neuhauser y M. Baer, *J. Phys. Chem.* **93**, 2872 (1983); *J. Chem. Phys.* **91** 4651 (1989).
58. D. Neuhauser, M. Baer, R. S. Judson y D. J. Kouri, *J. Chem. Phys.* **90**, 5882 (1989).
59. R. S. Judson, D. J. Kouri, D. Neuhauser y M. Baer, *Phys. Rev. A* **42**, 351 (1989).
60. D. Neuhauser, *J. Chem. Phys.* **93**, 2611 (1990); *J. Chem. Phys.* **93**, 7836 (1990); *J. Chem. Phys.* **95**, 4927 (1991).

61. D. Neuhauser, R. S. Judson, R. L. Jaffe, M. Baer y D. J. Kuori, *Chem. Phys. Lett.* **176**, 546 (1991); D. Neuhauser, R. S. Judson, D. J. Kuori, D. E. Adelman, N. E. Shafer, D. A. V. Kliner y R. N. Zare, *Science* **257**, 522 (1992).
62. D. Neuhauser, *J. Chem. Phys.* **100**, 9272 (1994).
63. T. Peng y J. Z. H. Zhang, *J. Chem. Phys.* **105**, 6072 (1996); W. Zhu, T. Peng y J. Z. H. Zhang, *J. Chem. Phys.* **106**, 1742 (1997).
64. S. C. Althorpe y D. J. Kouri, *J. Chem. Phys.* **106**, 7629 (1997).
65. J. Z. H. Zhang, J. Dai, W. Zhu, *J. Phys. Chem. A* **101**, 2746 (1997).
66. D. Neuhauser y M. Baer, *J. Chem. Phys.* **92**, 3419 (1990).
67. D. Neuhauser, *J. Chem. Phys.* **103**, 8513 (1995).
68. F. Huarte-Larrañaga, X. Giménez y A. Aguilar, *J. Chem. Phys.* **109**, 5761 (1998).
69. T. Seideman y W. H. Miller, *J. Chem. Phys.* **96**, 4412 (1992); *J. Chem. Phys.* **97**, 2499 (1992).
70. A. Viel, C. Leforestier y W. H. Miller, *J. Chem. Phys.* **108**, 3489 (1998).
71. U. V. Riss y H. D. Meyer, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **26**, 4503 (1993).
72. O. I. Tolstikhin, V. N. Ostrovsky y H. Nakamura, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 41 (1998); H. O. Karlsson, *J. Chem. Phys.* **108**, 3849 (1998).
73. U. Peskin y W. H. Miller, *J. Chem. Phys.* **102**, 4084 (1995).
74. R. Kosloff y D. Kosloff, *J. Comput. Phys.* **63**, 363 (1986).
75. D. Neuhauser y M. Baer, *J. Chem. Phys.* **90**, 4351 (1989).
76. M. S. Child, *Molecular Physics* **72**, 89 (1991).
77. A. Vibók y B.B. Balint-Kurti, *J. Chem. Phys.* **96**, 7615 (1992); *J. Phys. Chem.* **96**, 4412 (1992).
78. S. Brouard, D. Macías y J. G. Muga, *J. Phys. A* **27**, L439 (1994).
79. D. Macías, S. Brouard y J. G. Muga, *Chem. Phys. Lett.* **228**, 672 (1994).
80. U. V. Riss y H. D. Meyer, *J. Phys. B* **28**, 1475 (1995).

81. U.V. Riss y H. D. Meyer, *J. Chem. Phys.* **105**, 1409 (1996).
82. J. Y. Ge y J. Z. H. Zhang, *J. Chem. Phys.* **108**, 1429 (1998).
83. A. Goldberg, H. M. Schey y J. L. Schwartz, *Am. J. Phys.* **35**, 177 (1967); S. E. Koonin, "Computational Physics", (Benjamin, Menlo Park, 1985).
84. G. R. Allcock, *Ann. Phys. (N.Y.)* **53**, 253 (1969); *Ann. Phys. (N.Y.)* **53**, 286 (1969); *Ann. Phys. (N.Y.)* **53**, 311 (1969).
85. A. Rubio y N. Kumar, *Phys. Rev. B* **47**, 2420 (1993).
86. J. E. Beam, *Am. J. Phys.* **38**, 1395 (1970).
87. M.G. Rozman, P. Reineker, y R. Tehver, *Phys. Rev. A* **49**, 3310(1994).
88. E. Merzbacher, "Quantum Mechanics", (Wiley, New York, 1970).
89. T. M. Kalotas y A. R. Lee, *Am. J. Phys.* **59**, 49 (1991).
90. J. G. Muga, R. Sala y J. P. Palao, *Superlattices and Microstructures* **23**, 833 (1998).
91. J. G. Muga, C. R. Leavens y J. P. Palao, *Phys. Rev. A* **58**, 4336 (1998).
92. J. G. Muga, J. P. Palao y C. R. Leavens, *Phys. Lett. A* **253**, 21 (1999).
93. J. P. Palao, J. G. Muga, S. Brouard y A. Jadczyk, *Phys. Lett. A* **233**, 227 (1997).
94. J. Halliwell, [quant-ph/9805057](https://arxiv.org/abs/quant-ph/9805057).
95. Ph. Blanchard y A. Jadczyk, *Helv. Phys. Acta* **69**, 613 (1996).
96. W. Pauli, en "Encyclopedia of Physics", (ed. por S. Flugge, Vol. 5/1, pag. 60, Springer, Berlin, 1958).
97. R. Giannitrapani, *Int. J. Theor. Phys.* **36**, 1575 (1997).
98. V. Delgado y J. G. Muga, *Phys. Rev. A* **56**, 3425 (1997).
99. Y. Aharonov y D. Bohm, *Phys. Rev.* **122**, 1649 (1961).
100. R. Sala, J. G. Muga y J. P. Palao, *Phys. Lett. A* **233**, 227 (1997); y referencias incluidas.
101. V. H. Paul, *Ann. Phys. (Leipzig)* **9**, 252 (1962).
102. M. Razavi, *Can. J. Phys.* **49**, 3075 (1971).

103. R. Werner, *J. Math. Phys.* **27**, 793 (1986).
104. P. Busch, M. Grabowski y P. J. Lahti, "Operational quantum mechanics", (Springer, Berlin, 1995).
105. N. I. Akhiezer y I. M. Glazman, "Theory of linear operators in Hilbert space", (Dover, New York, 1963).
106. N. Grot, C. Rovelli y R. S. Tate, *Phys. Rev. A* **54**, 4676 (1996).
107. M. Toller, quant-ph/9805030.
108. J. Kijowski, *Rep. Math. Phys.* **6**, 362 (1974).
109. P. Busch, M. Grabowski y P. J. Lahti, *Phys. Lett. A* **191**, 357 (1994).
110. J. León, *J. Phys. A* **30**, 4791 (1997).
111. V. Delgado, *Phys. Rev. A* **57**, 762 (1998).
112. I. S. Gradshteyn y M. Ryzhik, "Table of Integrals, Series, and Products", (Academic Press, San Diego, 1994).
113. J. Oppenheim, B. Reznik y W. G. Unruh, quant-ph/9807043.
114. W. R. McKinnon y C. R. Leavens, *Phys. Rev. A* **51**, 2748 (1995).
115. A. J. Bracken y G. F. Melloy, *J. Phys. A: Math. Gen.* **27**, 2197 (1994).
116. C. R. Leavens, *Phys. Rev. A* **58**, 840 (1998).
117. Y. Aharonov, J. Oppenheim, S. Popescu, B. Reznik, W.G. Unruh, *Phys. Rev. A* **57**, 4130 (1998).
118. L. A. McColl, *Phys. Rev.* **40**, 621 (1932).
119. M. Buttiker y R. Landauer, *Phys. Lett.* **49**, 1739 (1982).
120. E. H. Hauge y J. A. Stovneng, *Rev. Mod. Phys.* **61**, 917 (1989); M. Büttiker, en: "Electronic Properties of Multilayers and Low-Dimensional Semiconductor Structures", (ed. por J.M. Chamberlain et al., Plenum Press, New York, 1990); C. R. Leavens y G. C. Aers, en: "Scanning Tunneling Microscopy and Related Techniques", (ed. por R. J. Behm et al., Kluwer, Dordrecht, 1990); V. S. Olkhovsky y E. Recami, *Phys. Rep.*, 214 (1992); R. Landauer y T. Martin, *Rev. Mod. Phys.* **66**, 217 (1994); J. T. Cushing, "Quantum Mechanics", (The University of Chicago Press, Chicago 1994).

121. D. Sokolovski y J. N. L. Connor, *Phys. Rev. A* **44**, 1500 (1992).
122. J. G. Muga, S. Brouard y R. Sala, *Phys. Lett. A* **167**, 24 (1992).
123. V. Delgado, S. Brouard y J. G. Muga, *Solid State Commun.* **94**, 979 (1995).
124. V. Delgado y J. G. Muga, *Ann. Phys. (NY)* **248**, 122 (1996).
125. C. R. Leavens, *Solid State Commun.* **85**, 115 (1993).
126. C. R. Leavens, *Solid State Commun.* **89**, 37 (1993).
127. A. Jadczyk, *Prog. Theor. Phys.* **93**, 631 (1995); Ph. Blanchard y A. Jadczyk, *Ann. Phys. (Leipzig)* **4**, 583 (1995); Ph. Blanchard y A. Jadczyk, quant-ph/9812081.
128. L. E. Ballentine, *Found. Phys.* **11**, 1329 (1990); L. E. Ballentine, *Phys. Rev. A* **43**, 9 (1991).
129. J. G. Muga y R. D. Levine, *Mol. Phys.* **67**, 1209 (1989); J. G. Muga y R. D. Levine, *Mol. Phys.* **67**, 1225 (1989).
130. J. G. Muga, R. Sala y R. F. Snider, *Physica Scripta* **47**, 732 (1993).
131. R. Sala, S. Brouard y J. G. Muga, *J. Chem. Phys.* **99**, 2708 (1993).
132. J. G. Muga y R. F. Snider, *Eur. Phys. Lett.* **19**, 569 (1992).
133. R. Sala, J. P. Palao y J. G. Muga, *Phys. Lett. A* **231**, 304 (1997).
134. T. Takabayasi, *Prog. Theor. Phys.* **11**, 341 (1954).